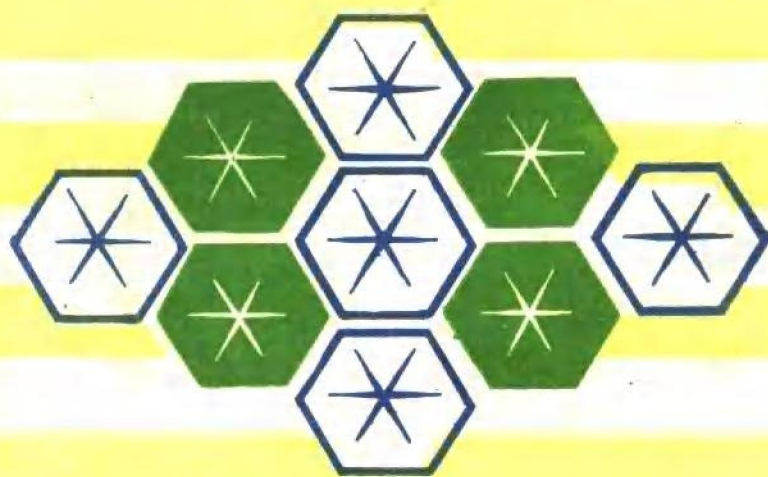


群论及其在物理 和化学中的应用

方 可

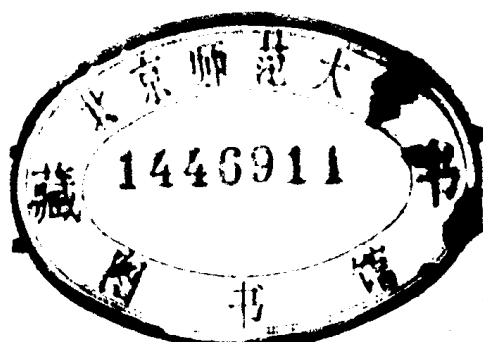


重庆大学出版社

群论及其在物理 和化学中的应用

方可

JU/159/62



重庆大学出版社

内 容 提 要

本书讲述了群论的基本知识,包括抽象群理论、矢量空间、算符和线性变换、群表示理论以及连续群;并对群论在量子力学、分子结构、分子振动及在固体物理学中的应用作了简明的叙述。

本书作为大学物理、化学的研究生和本科生的参考教材,也可供其他物理、化学工作者阅读。

群论及其在物理和化学中的应用

方 可

责任编辑 胡述楠 黄开植

重庆大学出版社 出版发行

新华书店 经销

重庆建筑专科学校印刷厂印刷

开本: 787×1092 1/16 印张: 21.25 字数: 530 千

1987年7月第1版 1987年7月第1次印刷

印数: 1—5,200

标准书号: ISBN 7-5624-0015-6 统一书号: 13408·1

O·3

定 价: 3.50元

序

由于微观客体和宏观客体都存在某种对称性，这就使得描写对称性的数学工具——群论在物理学中的地位越来越重要，以致在物理系本科和研究生课程中，不得不列入这门课程。国外关于“群论及其在物理和化学中的应用”的著作比较多且各有其特点。但中国学生有中国学生的特点，他们希望有较多的例题和习题，以便自学和消化。有鉴于此，四川师大固体物理研究所方可副教授，在多年讲授本课程的基础上编写了这本书。其特点是：内容丰富，密切联系实际，例题和习题较多，便于自学。本书油印本曾在四川师范大学理论物理助教进修班上试用，反映良好。

祝愿本书对从事物理、化学教学的师生及其他物理、化学工作者有所助益。

赵 敏 光

1986年于四川师范大学

目 录

第一章 抽象群理论

§1.1 群的定义和性质	(1)
§1.2 对称变换群	(4)
§1.3 置换群	(8)
§1.4 子群和陪集	(15)
§1.5 共轭类和正规子群	(17)
§1.6 商群 同态和同构	(21)
§1.7 如何确定一个群	(25)
习 题	

第二章 矢量空间 算符和线性变换

§2.1 矢量空间	(31)
§2.2 函数空间与 Hilbert 空间	(37)
§2.3 矢量空间中的线性算符和线性变换	(40)
§2.4 本征值问题	(44)
§2.5 Unitary 算符和 Unitary 变换	(46)
§2.6 Hermite 算符	(51)
§2.7 函数的诱导变换	(56)
*§2.8 Dirac 符号	(59)
习 题	

第三章 群表示理论

§3.1 群的矩阵表示	(64)
§3.2 可约表示与不可约表示	(69)
§3.3 大正交定理	(78)
§3.4 特征标	(81)
§3.5 群元空间和正规表示	(89)
§3.6 特征标表的构造	(93)
*§3.7 投影算符 对称化匹配基函数	(98)
*§3.8 直积群的表示 实表示和复表示	(104)
§3.9 一个群的不同表示的直积	(112)
§3.10 连续旋转群及其表示	(117)
*§3.11 双值点群	(128)
习 题	

第四章 群论在量子力学和分子结构及分子振动问题中的应用

§4.1 Hamilton 算符的对称性	(139)
----------------------------	---------

- 读者可以根据需要选学,但不影响后面的学习。

§4.2	空间对称性与交换对称性	(150)
•§4.3	时间对称性	(160)
•§4.4	与时间有关的微扰跃迁选择定则	(168)
•§4.5	群论在分子和晶体的振动问题中的应用	(176)
•§4.6	群论在分子轨道 (MO) 理论中的应用简介	(189)
习 题		
•第五章 群论在固体物理学中的应用		
§5.1	晶体结构的对称性 32个晶体点群	(195)
§5.2	晶体的32个点群表和子群链	(202)
•§5.3	广义空间群和晶体空间群	(224)
•§5.4	晶体中的电子	(233)
•§5.5	简单空间群表示	(247)
•§5.6	磁性群 (颜色群)	(255)
习 题		
•第六章 连续群		
§6.1	连续群和 Lie 群	(262)
§6.2	$SO(3)$ 群的无限小算符和不可约表示	(272)
§6.3	$U(n)$ 群和 $SU(n)$ 群的进一步讨论	(280)
§6.4	Euclid 群 E_3 和 Lorentz 群 L	(291)
习 题		
附录 1	单值点群的不可约表示特征标表	(309)
附录 2	一些双值点群的特征标表	(322)
附录 3	群表示约化相关表	(324)
参考文献		(328)
后记		(330)

第一章 抽象群理论

抽象群的数学理论是近世代数学和有关对称性一般规律的研究结果。为方便起见，本章先从基本定义出发，再推演有关性质和结果并示例加以说明。以后各章再分别介绍群的表示空间、表示理论及群论的应用，反过来又证明关于群的一些基本定义或假设的正确性。

§1.1 群的定义和性质

一、定义

一些不同数学对象（简称元素）构成的集合 $G = \{E, A, B, C, \dots\}$ 中，各元素间能按某一确定的法则（简称“群乘法”）相结合，即满足下面四个条件，则此集合形成一个群。

1. 封闭性 集合中任意两元素的“乘积”（包括一个元素自乘），仍得到集合中的另一个元素，用符号表示为

$$AB = C \quad (1.1-1)$$

2. 乘法满足结合律

$$A(BC) = (AB)C \quad (1.1-2)$$

一般地， $(AB)(CD)(EF)\dots = A(BC)(DE)F\dots = (ABC)D(EF)\dots$

3. 集合中存在一个单位元（或称恒等元，常用 E 表示）。对集合中任一元素 A 有

$$EA = AE = A \quad (1.1-3)$$

4. 集合中任一元素都有一逆元存在，如 $B = A^{-1}$

则
$$AB = E = BA \quad (1.1-4)$$

群中各元素代表的数学对象可以是一组符号、一组数字、一组对称变换操作或一组矩阵等等。群中元素的个数叫群的阶。若群中元素个数有限叫有限群；若元素个数无限而可数叫分立无限群；若无限而不可数叫无限连续群。

二、群的一些简单性质

1. 对群中任一元 A ，若有

$$[A]_{\alpha}^n = \overbrace{[AAA\dots]}^n = E \quad (1.1-5)$$

则整数 n 叫元素 A 的阶，这里 α 标记给定的群乘法。例如 $C_3C_3C_3 = C_3^3 = E$ ，则元素 C_3 的阶是3。

2. 任一元素 A 的逆元的逆元仍是 A

$$(A^{-1})^{-1} = (A^{-1})^{-1}E = [(A^{-1})^{-1}(A^{-1})]A = EA \quad (1.1-6)$$

3. 群中任两元素 A, B 的积的逆元

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \quad (1.1-7)$$

证明如下：令 $AB = C \longrightarrow (AB)^{-1} = C^{-1}$

故 $ABB^{-1}A^{-1} = CB^{-1}A^{-1} \longrightarrow E = CB^{-1}A^{-1} = CC^{-1}$

$\therefore (AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$

一般地有

$$(ABCD \cdots XY)^{-1} = Y^{-1}X^{-1} \cdots D^{-1}C^{-1}B^{-1}A^{-1}$$

4. 单位元 E 的逆元仍是 E 按单位元的定义知: $EA = AE = A$, 取 $A = E^{-1}$, 则 $E^{-1} = E$.

5. **Abel 群** 群中任两元素的积一般不可交换。即

$$AB \neq BA$$

若 $AB = BA$, 则此群叫 **Abel 群**。

6. **循环群** 若群 $G = \{E = A^n \cdot A \cdot A^2 \cdots A^{n-1}\}$, 则它是一个 n 阶循环群, 因为群中任意元素有如下形式: $A^k \cdot A^l \cdots$ 和 $A^k A^l = A^l A^k$, $kl \leq n$, 所以循环群是 **Abel 群**。但逆命题不一定成立。

三、群的例子

1. **普通加法群** 所有有理数的集合 $G = \{0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm n, \cdots, \pm n/m, \cdots\}$ 形成无限加法 **Abel 群**, 单位元是 0, $\pm n$ 的逆元是 $\mp n$, $\pm n/m$ 的逆元是 $\mp n/m$ 。加法显然满足封闭性和结合律。

所有整数 (包括零) 的集合, $G = \{0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm n, \cdots\}$ 形成无限分立加法 **Abel 群**; 所有实数 (包括 0) 则形成比有理数加法群阶数更高的加法群等等。

2. **矢量加法群** 基矢为 $\underline{a}$ 的所有平移矢量的集合 (包括零) $G = \{0, \pm \underline{a}, \pm 2\underline{a}, \cdots, \pm m\underline{a}, \cdots\}$ 形成无限分立平移矢量加法 **Abel 群**。

3. **普通乘法群** 除零之外, 所有有理数的集合 $G = \{\pm 1, \pm 2, \cdots, \pm n, \cdots, \pm n/m, \cdots\}$ 形成一个无限乘法 **Abel 群**。此群单位元是 1。 $\pm n$ 的逆元是 $\pm 1/n$, $\pm n/m$ 的逆元是 $\pm m/n$ 。所有正负实数的集合 (除零以外) 形成比前者更大的乘法群; 所有正实数的集合 (除零以外) 也形成乘法群; 但所有正负整数的集合不形成乘法群, 因 $\pm 1/n$ 不在集合中。

4. **矩阵乘法群** 所有 n 阶非奇异方阵 A ($\det A \neq 0$) 的集合在矩阵乘法下成群。单位元是单位方阵。 A 的逆元是

$$A^{-1} = \frac{A^*}{\det A} \quad (1.1-8)$$

A^* 是矩阵 A 的伴随矩阵, 即矩阵 A 的代数余子式构成的矩阵。显然, 对于矩阵乘法群封闭性与结合律成立。

此外, 行列式值为 $\det A = \pm 1$ 的所有 n 阶方阵在矩阵乘法下也构成一个较小的子群。行列式值为 $\det A = 1$ 的所有 n 阶方阵也形成更小的子群。因为

$$\det(AB) = \det A \cdot \det B = \pm 1$$

但所有行列式为 $\det A = -1$ 的方阵不形成群。因为

$$\det(AB) = \det A \cdot \det B = (-1)(-1) = 1$$

不满足封闭性, 且没有单位元。

具有 $\det A = \pm 1$ 的如下六个 3 阶方阵形成一个六阶矩阵乘法群。我们称它为 d_3 群。

$$e = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = e^{-1} \quad a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = a^{-1}$$

$$b = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = b^{-1} \quad c = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = c^{-1}$$

$$d = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = f^{-1} \quad f = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = d^{-1}$$

四、群表和重排定理

1. 群乘法表 从前述六阶矩阵乘法群的例子可以看出，各元素间的乘法关系可以排成如表 1.1-1，并称表 1.1-1 为群表。

表 1.1-1

d_3	e	a	b	c	d	f
	(右因子或第二因子)					
e (左因子或第一因子)	e	a	b	c	d	f
a	a	c	d	f	b	e
b	b	f	e	d	c	a
c	c	d	f	e	a	b
d	d	e	a	b	f	c
f	f	b	c	d	e	a

例如左因子 a 与右因子 b 的矩阵乘积得矩阵 d 以及 $ac=f$ 等等。

一般地所有有限群都可以列出群表，反之群表一经列出，也就完全确定了一个群，并从群表可以看出群元间的基本关系，例如

$$d'_3 = \left\{ \begin{aligned} e &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & a &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & b &= \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ c &= \begin{pmatrix} 1 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} & d &= \begin{pmatrix} -1 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} & f &= \begin{pmatrix} -1 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\}$$

也有与 d_3 群相同的群表。

此外，立正 ($\uparrow$)、向后转 ($\downarrow$)、向右转 ($\rightarrow$)、向左转 ($\leftarrow$) 四个动作也形成群 (群表见表 1.1-2)。1, -1, i , $-i$ 四个数字也形成四阶群 (群表见表 1.1-3)：

表 1.1-2

	$\uparrow$	$\downarrow$	$\leftarrow$	$\rightarrow$
$\uparrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\leftarrow$	$\rightarrow$
$\downarrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\rightarrow$	$\leftarrow$
$\leftarrow$	$\leftarrow$	$\rightarrow$	$\downarrow$	$\uparrow$
$\rightarrow$	$\rightarrow$	$\leftarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$

表 1.1-3

	1	-1	i	$-i$
1	1	-1	i	$-i$
-1	-1	1	$-i$	i
i	i	$-i$	-1	1
$-i$	$-i$	i	1	-1

从此群表还可以看出, $\{1-1\}$ 和 $\{\uparrow\downarrow\}$ 各自形成子群。表 1.1-2 和表 1.1-3 所示的两个群是 Abel 群。群元在表中相对于主对角线是对称的。

2. 群表定理 (重排定理) 一个群的所有元素, 在群表的每一行 (或一列) 都要出现, 而且只出现一次, 只是次序不同。

证明: 首先证明每个元素出现在每一行 (或列) 不多于一次。设与元素 A 有关的元素 D 存在两次, 则表明有两个元素比如说 B 和 C 使得 $BA=D$, $CA=D$, 以 A^{-1} 右乘上两式得 $B=DA^{-1}$, $C=DA^{-1}$, 则 $B=C$, 这与群元是不相同的假设相反, 即一个群元在一行内出现次数不能多于 1; 同理在一列内群元出现的次数也不能多于 1。

其次每一行 (或列) 能放置的群元数等于群的阶。故每个元在每一行 (或列) 必出现一次且仅一次。

由群表定理得出的一个重要结果是: 若 f 是群元的任一函数, 则有

$$\sum_{A \in G} f(A) = \sum_{A \in G} f(AB) \quad (1.1-9)$$

A, B 是群 G 中任意两元素, 求和遍及群中所有元。

不同体系所属的群, 若它们有完全相同的群表, 则称它们互相同构或叫同构群。即各体系的性质可以不同, 但从群的观点来看, 有相同的数学性质。例如表 1.1-2 和表 1.1-3 所示的两个群同构。

§1.2 对称变换群

一个体系的某些性质常可由其所具的对称性来判断, 而对称度的高低, 决定于群元的多少, 即独立对称操作数的多少。鉴于对称变换群的重要性, 我们作稍详细的讨论。

一、对称操作

1. 定义 一个体系的性质 (或由其图形、函数作代表) 若能相对于某一点、线或面作某种变换而能复原, 就象没进行操作变换前的情况一样, 则这种变换叫对称操作。今后的讨论中, 一般采用主动型变换, 即固定坐标轴而只变位矢 (或坐标)。

一个体系的所有对称操作构成一个对称变换群。

2. 基本对称操作: 设体系中任一点 M 的位矢为 $\vec{X}$, T 表示一个空间转动变换, 它使点 M 变换到点 M' , 则有

$$TM(\vec{X}) = M'(\vec{X}') \quad (1.2-1)$$

或简写为 $T(\vec{X}) = \vec{X}'$

写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} X'_1 \\ X'_2 \\ X'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} \quad (1.2-2)$$

$$\text{或} \quad X'_j = \sum T_{jk} X_k \quad j, k = 1, 2, 3 \quad (1.2-3)$$

$$\therefore X'^2_1 + X'^2_2 + X'^2_3 = X^2_1 + X^2_2 + X^2_3 \quad (1.2-4)$$

$$\tilde{X}'X' = (\tilde{TX})(TX) = \tilde{X} \tilde{T}TX = \tilde{X}X$$

$$\therefore \tilde{T}T = E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.2-5)$$

$$\tilde{T} = T^{-1} \quad |T| = \pm 1 \quad (1.2-6)$$

所以空间一点位矢的变换是正交线性变换(平移除外)。

(1)转动变换 $T = C_n$: 如图 1.2-1 所示, 设绕 X_1 轴转动 θ 角, 点 $M \rightarrow M'$, 我们有

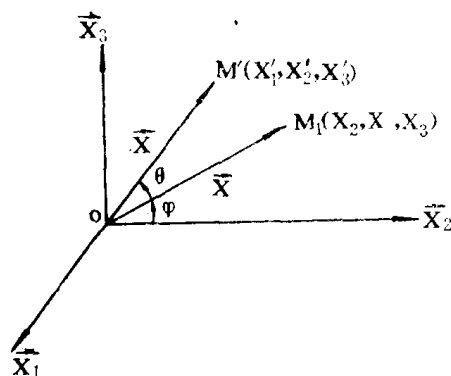


图 1.2-1

$$X'_2 = X \cos(\theta + \varphi) = X(\cos\theta \cos\varphi - \sin\theta \sin\varphi) = X_2 \cos\theta - X_3 \sin\theta$$

$$X'_3 = X \sin(\theta + \varphi) = X \sin\theta \cos\varphi + X \sin\varphi \cos\theta = X_2 \sin\theta + X_3 \cos\theta$$

$$X'_1 = x_1$$

写成矩阵形式为:

$$\begin{pmatrix} X'_1 \\ X'_2 \\ X'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} \quad (1.2-7)$$

对于晶体, 由于结构周期性的限制, 只有转动 360° , 180° , 120° , 90° , 60° , 相应于 $n = 1, 2, 3, 4, 6$ 等几个基本转动操作, 即只有 C_1, C_2, C_3, C_4, C_6 。对于分子对称性, 则可能有 C_5, C_7 等。

(2)中心反演和平面反映(镜象): 对中心反演(1.2-2)化为

$$\begin{pmatrix} X'_1 \\ X'_2 \\ X'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} \quad (1.2-8)$$

或

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

对 (X_2, X_3) 平面反映, (1.2-2)化为

$$\begin{pmatrix} X'_1 \\ X'_2 \\ X'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} \quad \text{或} \quad \sigma_h = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.2-9)$$

这是通过原点且垂直于转轴的水平面镜象操作。其他还有 σ_v 是包含主轴在面内的镜反映； σ_d 是通过主轴，且平分垂直于该主轴的两个二重轴的夹角平面镜反映。因为 $\sigma_h = IC_2 = C_2I$ ，故 $I = \sigma_h C_2$ ，所以中心反演和镜象只有一个基本的。

(3) 平移操作 $\vec{T}$ ：沿空间某个方向平移

$$\vec{T} = l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3 \quad (1.2-10)$$

式中 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 为基矢， l_1, l_2, l_3 为整数。

3. 组合对称操作 在某些体系中，存在着由两个基本操作相继进行而得到的独立操作，叫组合操作。形成组合操作的基本操作可同时独立存在。

前面两种基本操作及其组合操作中，系统内至少有一点不动，由这些操作形成的群，叫点群。平移、点操作及其组合形成的群叫空间群。

容易证明，一些重要的组合对称操作如下：

$$\begin{aligned} \overline{1} &= C_1 I = C_2 \sigma_h = S_2 \\ \overline{2} &= C_2 I = C_1 \sigma_h = S_1 \\ \overline{3} &= C_3 I = C_6^{-1} \sigma_h = S_6^5 \rightarrow S_n = \sigma_h C_n \\ \overline{4} &= C_4 I = C_4^{-1} \sigma_h = S_4^{-1} \\ \overline{6} &= C_6 I = C_3^{-1} \sigma_h = S_6^{-1} \end{aligned} \quad (1.2-11)$$

$\overline{1}, \overline{2}, \overline{3}, \overline{4}, \overline{6}$ 称为倒反操作， S_1, S_2, S_3, S_4, S_6 称为象转操作。

二、两个典型的对称变换群

1. 正三角形旋转群 D_3 图 1.2-2 中 E, A, B, C, D, F 六个操作是能复原的全部操作，取它们作为数学对象构成 D_3 对称变换群。两个相继操作（群乘）可由一个操作来完成。例如先操作 B （右因子），再操作 A （左因子）所达到的状态可由 D 操作一次完成。即 $AB=D$ ，若先操作 A 后操作 B ，则可由 F 一次操作完成。即 $BA=F$ ，可见 $BA \neq AB$ 。这是一个六阶分立非 Abel 群。它的群表见表 1.2-1：

表 1.2-1

D_3	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

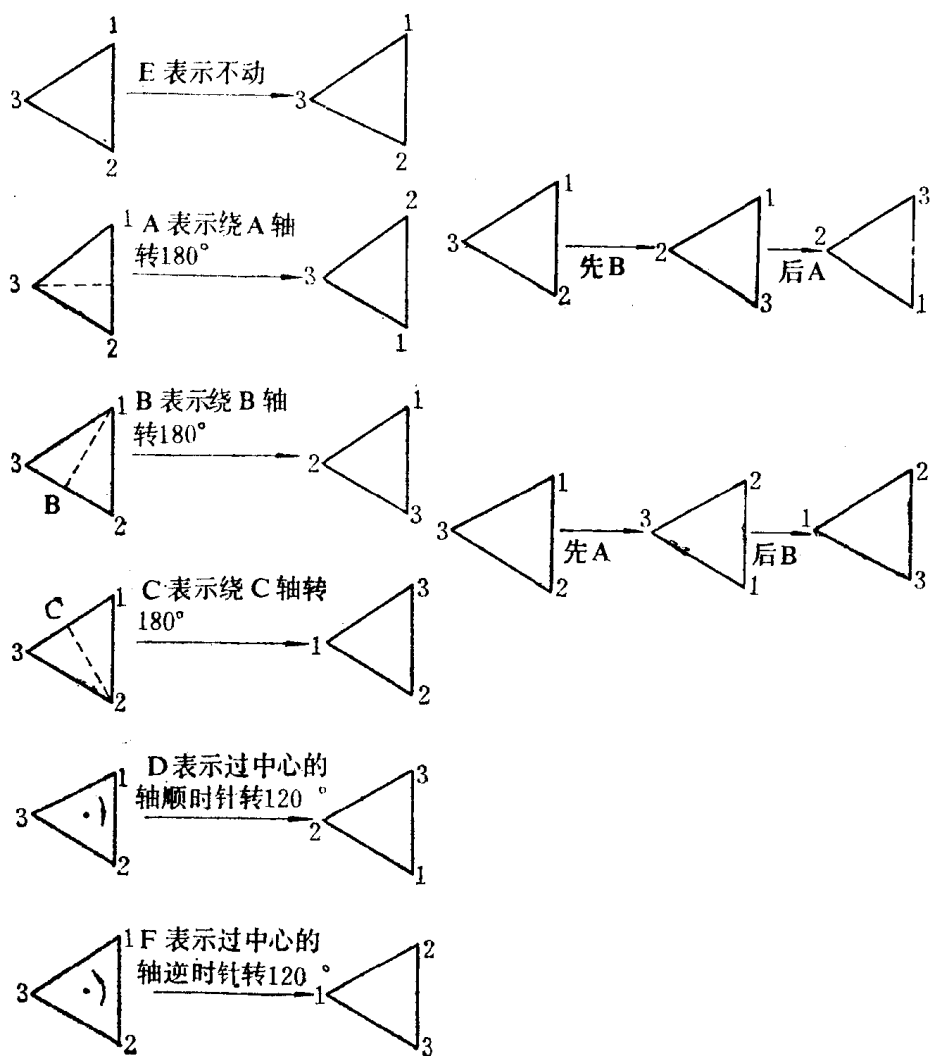


图 1.2-2

2. 正方形群 C_{4v} 如图 1.2-3 所示, 正方形的全部对称操作是通过 x 和 y 轴的反映操作 m_x 和 m_y , 两对角线的反映操作 σ_μ 和 σ_v , 绕 x 轴转 90° 的操作 C_4 , 转两个 90° 的操作 $C_4 \cdot C_4 = C_4^2 = C_2$, 连转三个 90° 的操作 $C_4 \cdot C_4 \cdot C_4 = C_4^3 = C_4^{-1}$ (相当于顺时针转 90°) 而实现的。所有对称操作间的乘积关系列入表 1.2-2。

从此表可见, 第一因子和第二因子的排列次序不同, 这可使得第一因子中的每个元恰是第二因子中相应元素的逆元, 主对角线上恰是单位元。这在以后的讨论中有明显的优点。一般讲, 第一、二因子的排列次序是无关紧要的。

这里我们列举正三角形群 D_3 和正方形群 C_{4v} 是为了简明起见。实际上许多晶体或分子也具有 D_3 和 C_{4v} 群对称性。

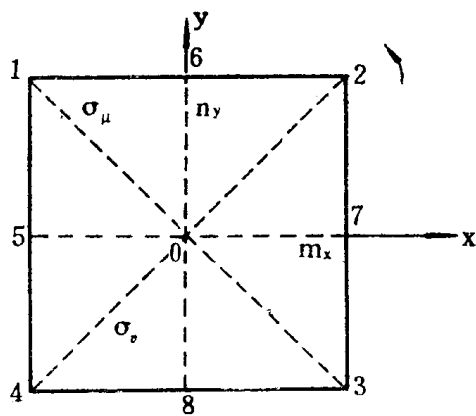


图 1.2-3

表 1.2-2

C_4	E	C_4^3	C_4^2	C_4	m_x	m_y	σ_μ	σ_v
E	E	C_4^3	C_4^2	C_4	m_x	m_y	σ_μ	σ_v
C_4	C_4	E	C_4^3	C_4^2	σ_v	σ_μ	m_x	m_y
C_4^2	C_4^2	C_4	E	C_4	m_y	m_x	σ_v	σ_μ
C_4^3	C_4^3	C_4^2	C_4	E	σ_μ	σ_v	m_y	m_x
m_x	m_x	σ_v	m_y	σ_μ	E	C_4^2	C_4	C_4^3
m_y	m_y	σ_μ	m_x	σ_v	C_4^2	E	C_4^3	C_4
σ_μ	σ_μ	m_x	σ_v	m_y	C_4^3	C_4	E	C_4^2
σ_v	σ_v	m_y	σ_μ	m_x	C_4	C_4^3	C_4^2	E

§1.3 置 换 群

在研究群的数学结构和全同粒子问题的应用中，置换群具有重要意义。

一、定义

设有一组 n 个全同物体的排列或构型，我们交换其中两个或多个，不会改变原来的构型。则体系所有可能的独立置换变换的集合构成置换群。因为 n 个物体有 $n!$ 种排列法，即有 $n!$ 个置换变换，所以群的阶为 $n!$ 。我们称 n 个物体的置换群为 n 级对称群。常用 S_n 表示。

数学上，一个置换操作可表示为

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & i & \cdots & n \\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_i & \cdots & p_n \end{pmatrix}$$

$1, 2, 3, \cdots, i, \cdots, n$ 代表 n 个位置， p_1 也代表位置，并有 n 种可能的选择， p_2 有 $(n-1)$ 种可能的选择， p_3 有 $(n-2)$ 种可能的选择等。这表示 1 位置的物体换到 p_1 ， i 位置的物体到 p_i 等。

用数字 $p_1, p_2, \cdots, p_i, \cdots, p_n$ 编号的构型是 n 个物体变换后的一种排列。

P 的逆元是 $P^{-1} = \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & \cdots & p_i & \cdots & p_n \\ 1 & 2 & \cdots & i & \cdots & n \end{pmatrix}$ ，单位元是 $E = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & i & \cdots & n \\ 1 & 2 & \cdots & i & \cdots & n \end{pmatrix}$ ，若

$$t = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & q_3 & \cdots & q_n \\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n \end{pmatrix}, \text{ 则 } Pt = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & q_3 & \cdots & q_n \\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_n \end{pmatrix}.$$

显然，置换的封闭性与结合律成立。

二、例： S_3 群

设有①，②，③三个物体，分别置于 1，2，3 三个位置。这有六种置换法是：

$$a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \quad c = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

$$d = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \quad f = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad e = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix},$$

例如

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{1} & \textcircled{2} & \textcircled{3} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{d} \begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{3} & \textcircled{1} & \textcircled{2} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \text{ 等等。或写作 } \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} (\textcircled{1} \textcircled{2} \textcircled{3}) = (\textcircled{3} \textcircled{1} \textcircled{2}),$$

并可以认为是体系所处的另一状态。两个相继操作的结果是

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{1} & \textcircled{3} & \textcircled{2} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \xrightarrow{\text{再作 } a} \begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{3} & \textcircled{1} & \textcircled{2} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \text{ 或写作: } \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} (\textcircled{1} \textcircled{2} \textcircled{3}) = (\textcircled{3} \textcircled{1} \textcircled{2}).$$

$$\text{又 } \begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{1} & \textcircled{2} & \textcircled{3} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \xrightarrow{d} \begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{3} & \textcircled{1} & \textcircled{2} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \xrightarrow{d} \begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{2} & \textcircled{3} & \textcircled{1} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{d} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \text{ 或写作: } \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} (\textcircled{1} \textcircled{2} \textcircled{3}) = (\textcircled{1} \textcircled{2} \textcircled{3}), \text{ 此外, } \begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{1} & \textcircled{2} & \textcircled{3} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \xrightarrow{f} \begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{3} & \textcircled{1} & \textcircled{2} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \textcircled{2} & \textcircled{3} & \textcircled{1} \\ \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \text{ 即 } \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} (\textcircled{1} \textcircled{2} \textcircled{3}) = (\textcircled{2} \textcircled{3} \textcircled{1}). \text{ 所以, 我们有 } ab=d, \text{ 即}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}. d d d = d (d d) = d f = e, d^{-1}=f, f^{-1}=d, \text{ 即}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = e$$

类似地, 我们有 $a^{-1}=a, c^{-1}=c, b^{-1}=b, e^{-1}=e, ff=d, ac=f, ad=b$ 等等, 即置换的封闭性与结合律都成立。按置换定义, 上式可写作

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = e$$

这样, 求几个置换操作的组合操作时, 可很快得出结果, 而不必象前面那样进行具体操作。

三、置换的循环表示和对换

$$\text{置换操作 } \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 5 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \text{ (简写) } \equiv (1 \ 3 \ 2 \ 5 \ 4) \equiv (3 \ 2 \ 5 \ 4 \ 1) \equiv \dots$$

它表示 1 位的物体到 3, 3 位的物体到 2, 2 位的物体到 5 等等, 即 $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 5 \rightarrow 4 \rightarrow 1$ 。这种简写法中每一数字后面的数字, 即原来表示法中该数字下面的数字。又如

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 2 & 5 & 4 \end{pmatrix} \equiv (1 \ 3 \ 2)(4 \ 5)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 1 & 3 & 4 & 5 & 2 \end{pmatrix} \equiv (1)(2 \ 3 \ 4 \ 5) \equiv (2 \ 3 \ 4 \ 5)$$

即单独一个数字的括号表示不置换，可以省去。

任何置换操作都可以分解成一些对换（即两物体对换）的积。例如

$$(1 \ 2 \ 3) = (2 \ 3)(1 \ 3) = (1 \ 2)(2 \ 3) = (1 \ 3)(1 \ 2)$$

$$(1 \ 3 \ 2) = (1 \ 2)(1 \ 3) = (2 \ 3)(1 \ 2) = (1 \ 3)(2 \ 3)$$

$$(1 \ 3 \ 2 \ 4) = (3 \ 1)(3 \ 4)(3 \ 2) = (1 \ 2)(1 \ 3)(2 \ 4)$$

$$= (3 \ 4)(1 \ 4)(2 \ 3) = (1 \ 3)(2 \ 4)(3 \ 4)$$

$$= (1 \ 4)(2 \ 3)(1 \ 2)$$

$$\text{一般地有 } (1 \ 2 \ 3 \cdots n) = (1 \ n)(1 \ n-1) \cdots (1 \ 3)(1 \ 2)$$

$$= (1 \ 2)(2 \ 3) \cdots (n-1 \ n) = \cdots$$

从这些例子可以看出，一个置换可以分解成的对换不是唯一的，但一个置换能分解成的对换的个数则是唯一的。若能分解成的对换个数是奇数个，则叫奇置换；若能分解成的对换个数是偶数叫偶置换。

下面列出用循环表示法给出的 S_3 群表

表 1.3-1

S_3	E	$(1 \ 2)$	$(2 \ 3)$	$(1 \ 3)$	$(1 \ 2 \ 3)$	$(1 \ 3 \ 2)$
E	E	$(1 \ 2)$	$(2 \ 3)$	$(1 \ 3)$	$(1 \ 2 \ 3)$	$(1 \ 3 \ 2)$
$(1 \ 2)$	$(1 \ 2)$	E	$(1 \ 2 \ 3)$	$(1 \ 3 \ 2)$	$(2 \ 3)$	$(1 \ 3)$
$(2 \ 3)$	$(2 \ 3)$	$(1 \ 3 \ 2)$	E	$(1 \ 2 \ 3)$	$(1 \ 3)$	$(1 \ 2)$
$(1 \ 3)$	$(1 \ 3)$	$(1 \ 2 \ 3)$	$(1 \ 3 \ 2)$	E	$(1 \ 2)$	$(2 \ 3)$
$(1 \ 2 \ 3)$	$(1 \ 2 \ 3)$	$(1 \ 3)$	$(1 \ 2)$	$(2 \ 3)$	$(1 \ 3 \ 2)$	E
$(1 \ 3 \ 2)$	$(1 \ 3 \ 2)$	$(2 \ 3)$	$(1 \ 3)$	$(1 \ 2)$	E	$(1 \ 2 \ 3)$

比较表(1.1-1)、(1.2-1)和(1.3-1)可知， d_3 群、 D_3 群和 S_3 群互相同构。可以看出改变正三角形的位置并与原图重合，相当于置换三个顶点的号码。

四、 S_n 群的全部偶置换形成群，全部奇置换不形成群

因为两个偶置换或两个奇置换的积仍是偶置换，而奇置换与偶置换的积是奇置换，故 S_n 群的所有偶置换(单位元看作偶置换)形成子群，叫 S_n 的交错群。 S_n 的所有奇置换不成群。

用 S_n 中某一奇置换乘其中所有偶置换，就得到互易的奇置换，故奇置换与偶置换的个数相等。因为 S_n 群的阶为 $n!$ ，故 S_n 的交错群 A_n 的阶是 $n!/2$ 。

例如 S_3 的交错群 $A_3 = \{(1), (1 \ 2 \ 3), (1 \ 3 \ 2)\}$ ，(其中(1)代表 E)。又例如 S_4 的交错群是 $A_4 = \{(1), (1 \ 2)(3 \ 4), (1 \ 3)(2 \ 4), (1 \ 4)(2 \ 3), (1 \ 2 \ 3 \ 4), (1 \ 3 \ 4 \ 2), (2 \ 3 \ 4 \ 1), (4 \ 2 \ 3 \ 1)\}$ ， S_4 的群表如表1.3-2(1)—表1.3-2(4)所示。

后面我们将看到，阶数较低的 S_n 群都是阶数较高的 S_n 群的子群，而且一般的 n 阶群都同 S_n 的某个子群同构。可见研究 S_n 群的性质在数学上和物理上都是重要的。

表 1.3-2(1)

S_4	E	(12)	(13)	(14)	(23)	(24)	(34)	(123)	(124)	(134)	(234)	(132)
E	E	(12)	(13)	(14)	(23)	(24)	(34)	(123)	(124)	(134)	(234)	(132)
(12)	(12)	E	(132)	(142)	(123)	(124)	(12)(34)	(23)	(24)	(1342)	(1234)	(13)
(13)	(123)	E	(143)	(143)	(132)	(13)(24)	(134)	(12)	(1243)	(34)	(1342)	(23)
(14)	(124)	(134)	E	(142)	(14)(23)	(142)	(143)	(1234)	(12)	(13)	(1423)	(1324)
(23)	(132)	(123)	(123)	(14)(23)	E	(243)	(234)	(13)	(1324)	(1234)	(34)	(12)
(24)	(142)	(13)(34)	(143)	(124)	(234)	E	(243)	(1423)	(14)	(1324)	(23)	(1342)
(34)	(12)(34)	(143)	(134)	(134)	(243)	(234)	E	(1243)	(1234)	(14)	(24)	(1432)
(123)	(123)	(13)	(23)	(1423)	(12)	(1243)	(1234)	(132)	(13)(24)	(234)	(12)(34)	E
(124)	(14)	(1324)	(24)	(24)	(1234)	(12)	(1243)	(14)(23)	(142)	(13)(24)	(123)	(134)
(134)	(1234)	(14)	(34)	(34)	(1324)	(1342)	(13)	(124)	(12)(34)	(142)	(13)(24)	(14)(23)
(234)	(1342)	(1423)	(1234)	(1234)	(24)	(34)	(23)	(13)(24)	(134)	(14)(23)	(243)	(142)
(132)	(132)	(23)	(12)	(1432)	(13)	(1324)	(1342)	E	(243)	(12)(34)	(134)	(123)