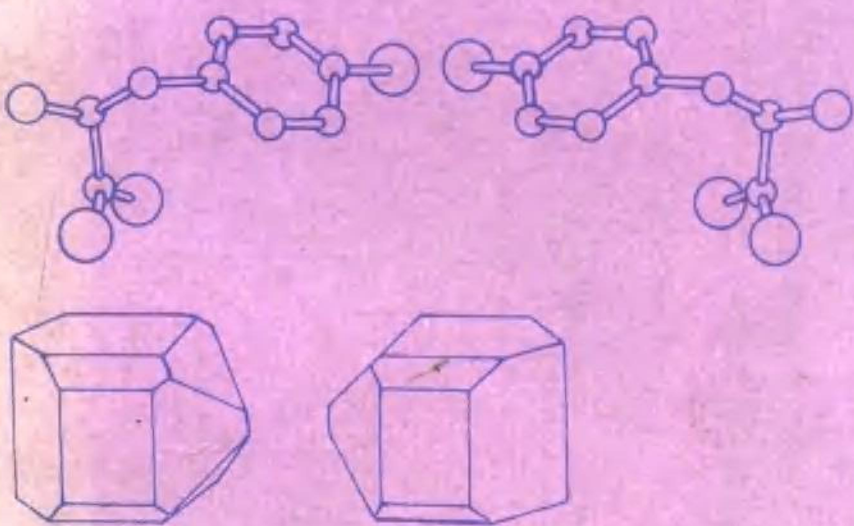
晶体和分子中的对称性
及其破缺

崔君达 编著



天津大学出版社

晶体和分子中的对称性及其破缺

崔君达　编著

天津大学出版社

内 容 提 要

本书在时空变换群背景下重新讨论了晶体和分子的对称性理论，特别是关于空间群和双群的理论。另一方面，从对体和分子对称群的系统讨论中引伸出扩展已有时空理论的必要性，并深入讨论了复合时空理论的基础，以及进一步应用的可能性。特别是用新时空理论讨论分子对称性破缺的方法，从而有可能使原有的晶体和分子对称性的理论得到突破性的扩展。

本书适于物理系、化学系、生物系和工科有关专业，以及基础医学专业的研究生和教师们阅读，也可供其他科研工作者参考。

晶体和分子中的对称性及其破缺

崔君达 编著

*

天津大学出版社出版

（天津大学内）

河北省邮电印刷厂印刷

新华书店天津发行所发行

*

开本：787×1092毫米1/16 印张：9 1/2 字数：237千字

1991年12月第一版 1991年12月第一次印刷

印数：1—2500

ISBN 7-5618-0273-0

TN·5

定价：7.00元

目　　录

导　言

人类对物质结构的认识，最早是从对天然晶体外形的观察开始。例如，对立方体形食盐晶体（最早见于中国东汉董仲舒《春秋繁露》一书中的记载），以及对六方柱形水晶体等的观察。这些观察在东方曾经启示人们产生过很多关于物质内部构造的玄思。这些玄思更早在中国的商、周时即已出现，例如：

①“道生一，一生二，二生三，三生万物”（《老子》）；

②“以土与金、木、水、火杂以成百物”（《国语·郑语》）；

③“太极生两仪，两仪生四象，四象生八卦，八卦交而生万物”（《易经》）；

④上述三种玄思的各种混合。

在西方，古代人们对晶体外形的观察还结合了几何学研究。例如，在柏拉图时代，人们从对天然晶体多面体外形的观察而想到可能世界万物是由一些具有确定的正多面体形状的“元素”〔elements〕构成的。认为火〔fire〕元素的形状是正四面体，空气〔air〕元素的形状是正八面体，以太〔ether〕元素的形状是正十二面体，土(earth)为正立方体，水〔Water〕元素是正二十面体，称为5个柏拉图体。而世界万物就是由这五种柏拉图体构成的。在柏拉图死后17年（纪元前330年），欧几里德降生了。他在应托勒密王邀请在亚历山大城当数学教师的前后写成了名著《几何原本》。在这部著作的最后一卷，欧几里德用演绎法严格推出了上述那五种柏拉图体。这促使人们对晶体形状的更细微的观察，以及对物质内部构造的更认真的几何学研究。例如，人们通过对晶体外形的观察而总结出了面角恒等定律（斯坦诺，N.Steno，1669）、整数定律（阿羽依，R.J.Hauy，1815）等。

从多面体外形对称性的观察得出晶体对称元素有对称中心、镜面和轴次为2、3、4、6的旋转轴和反轴，从而推出了晶体的32个点群(加多林，А.ГАДОЛИН，1869）。在此之前，布拉菲（Bravais）认为一切晶体是由原子构成的不同形状的小平行六面体堆积而成,从而推出14种布拉菲格子。由此,人们开始引用群的数学理论研究晶体的构造。1890年，费多罗夫〔ФЕДОРОВ〕进一步完成了230种晶体空间群的理论。

直到这时，人们对晶体内部结构的认识还只是由推理得到的，并没有真正的微观结构分析的实验验证。直到1912年劳厄才用X射线进行晶体衍射实验，以分析晶体内部的微观结构。以后的大量实验证明：加多林和费多罗夫的理论是完全正确的，从而使人类对晶体由外形观察转入内部微观结构更深入的研究。

二十世纪30年代以来，更由于晶体和分子对称群的理论可以与量子力学理论美妙地结合起来对物质结构和性质做更细致、深入地研究,同时由于实验分析手段进一步完善与多样化，于是就促成了现代固体和分子物理学各学科的发展，创造出很多有巨大实用价值的成果，如各种新型材料的合成及晶体管的发明等。而这些应用又反过来促进了固体和分子物理学的大发展。

人们在这些研究中发现,具有高度对称性的晶体和分子都是没有任何“生机”的无机物。而有生命的物质分子，即生物分子，则都是完全不对称的结构，或者说对称性完全破缺了。从十九世纪开始，人们开始用偏振光来研究晶体。十九世纪初，拜奥特（J.B.Biot）发现，

当平面偏振光通过某些晶体时，偏振面会发生扭转。即在一定平面内振动的光线在通过某些晶体后，偏振面“旋转”一定的角度。具有这种性质的物质被称为旋光性物质。他还发现，有的晶体使偏振光的偏振面向右旋转〔右旋〕，而同种物质的另一类晶体则使偏振光向左旋转，例如石英、樟脑和酒石酸。拜奥特还指出，光偏振面旋转的原因可能是因为被照射晶体的分子中原子排列的不对称性造成的。后来，这个有趣的现象深深地迷住了巴斯德（L. Pesteur）。他非常细心地研究了酒石酸和外消旋酒石酸。两者虽然有相同的化学组成，但酒石酸有旋光性，而外消旋酒石酸则无旋光性。他猜想可能酒石酸晶体是不对称的，而外消旋酒石酸则是对称的。他在显微镜下发现，两者的晶体小颗粒都是不对称结构，不过外消旋酒石酸有两类数目大致相同的不对称小晶体，其中一类的外形与酒石酸晶体完全一样，而另一类的晶体外形则正是前一类的镜像，巴斯德进一步把这两类小晶体分别制成溶液。然后使相同的偏振光通过这两种不同的溶液。这时他发现，偏振光的偏振面都发生了“旋转”，只不过一种溶液使其向右“旋转”，而另一种溶液却使其向左“旋转”，且两者的旋转角相同。于是他明白了，原来外消旋酒石酸之所以没有旋光性，是因为它含有两种不同的酒石酸分子，一种为右旋，一种为左旋。它们对偏振光的作用正好相反，所以看不到旋光性。后来又发现了很多这种“镜像化合物”〔对映体〕，如乳酸等。巴斯德当时就猜测，这种对映体的分子在结构上可能也是互为镜像的，并且认为，这种旋光性（或不对称性）是一切生命物质的基本特征。它们完全不同于具有高度对称性的无机晶体和分子。

1874年范霍夫（J.H.Van't Hoff）和雷贝尔（J.A.LeBel）分别提出了碳原子4价键的正四面体结构模型，从而解决了镜像分子的三维结构问题，并且指出，当与碳原子相连的四个原子或原子团都互不相同时，就可能形成两种不同的不对称结构，且二者互为镜像。

应该说，当费多罗夫提出230个空间群理论时，他一定是充分地考虑了上述发现的。他知道，按照群论的纯数学理论只能推出219个群，其中有11个群无镜面对称，但却可以有对映群，即其中一个若选左手空间坐标系，则其对映群应取其镜像，右手空间坐标系。这样即可使二者有完全相同的对称操作集合，但它们所代表的物质却是有明显区分的不同的两类物质。故费多罗夫就在219个空间群上再加上11个群，从而得到230个空间群。

对映体的结构差别只在于两者所取空间坐标系互为镜像。所以，在描写这两类物质结构时，使用的是不同的空间背景，其中一个为左手空间，另一个为右手空间。费多罗夫要概括全部230个空间群的结构，实际上是用了一种二重的不对称空间，或者说是一种二重的对称性破缺了的时空。而这种时空结构与已有的时空理论中所给出的时空结构不同。

照理说，研究晶体和分子的结构主要是研究各种原子、离子、原子团或分子在空间的排列及它们随时间的变化规律。因此，时间—空间的理论理应成为一切结构理论（包括晶体和分子中的电子结构）的基础。可是长期以来，研究结构的人不理会时空问题。这可能是受到了大量晶体和分子美妙的高度对称性的迷惑。在很多对称群的理论中，人们完全可以只用群论而不考虑时空，即可以解决所面临的物理问题。对于绝大部分（不是全部！）无机晶体和分子似乎又都可以这样做。另一方面搞时空理论的人又总是从宏观世界或宇观世界的事实出发，而很少去考虑物质的微观结构问题。这种情况虽然在基本粒子的研究中有了改变，但是至今，在有关晶体、分子的研究中却仍然很少考虑时空。这是很不适当的。实际上，人们在研究物质结构时早已知道不能完全摆脱时空背景。

爱因斯坦虽然在他的时空理论中很少考虑晶体和分子的微观结构问题，但晚年他也认识到“空间—时间未必能看成是可以脱离物质世界的真实客体而独立存在的东西”。他认为，

"并不是物体存在于空间中，而是这些物体具有空间广延性。这样看来，关于一无所有的空间的概念就失去了意义"

一个从事晶体和分子微观结构研究的人，当他考虑"物质世界的真实客体"与空间的关系时，就会很自然地想到，所谓物体的"广延性"可以看成是晶体格子或分子骨架结构的延伸。而一旦把时空与晶体格子或分子骨架的微观结构联系起来，就会产生完全新的想法，从而可能同时大大扩充已有的物质结构理论和时空理论，并且由此引出某些重大结果。

当考虑高度对称的无机晶体外延得到的空间时，当然可以有空间反射对称的和时间反演也对称的时间—空间。因为这时看不出选用左手空间与右手空间有什么区别。这种结构也可以看成是不随时间而变的，因此也可以认为它有时间反演的不变性，所以时间也是对称的，即所谓牛顿时间。

可是，当仔细考虑生命物质的结构时，情况就完全改变了！生命物质的分子往往都是一些巨大的复杂分子，它们的共同特征就是具有不对称结构，并且都有同分异构现象。在这里，已有的群论分析方法似乎很不好用了！人们一直苦于想不出什么好办法。在上面已经指出，描写这种对映体，或者说一对对映体的同时广延，将得到一种二重的空间背景。并且，人们也已认识到：生物学的时间也完全不同于无生命世界的牛顿时间。生物学时间是一种单向的、不可逆的柏格森时间。生并不恰恰是死的反演，同化（生命结构的生成）也不恰恰是异化（生命结构的破坏）的反演。柏格森早就指出了古典物理学（毋宁说是刚体力学）时间与生物学时间的不同。前者是可逆的，其中没有什么新事物出现；而后者的时间则是不可逆的，或者说时间反演是不对称的，其中总是发生着新奇的事物。

不仅如此，人们还发现了更加复杂的现象。例如，1-甲基-2-乙基丙烷就有4个性质和结构都不同的立体异构体。因此，它们的分子骨架的延伸理应得到一种四重的（二个左旋、二个右旋）三维不对称空间。最复杂的还是遗传密码DNA和RNA的巨型分子，它们都是由4种不同的基本单元组成。这四种基本单元在正常生物体内又都是左旋的，并且又都具有同分异构体（见第九章），所以，这八种不同的基本结构的延伸理应得到一种八重的（四个左旋，四个右旋）不对称时空。如果再考虑到时间也可以有两种不对称的、相反的时间矢量，则理所当然地得到16重时空。

作者早在1974年就发现：如果我们更加严谨地推导狭义相对论的时空变换群时，即从广义罗伦兹（Lorentz）变换群出发，可以得到这么一种16重的复合时空。如此看来，生命物质结构与非生命物质结构的基本区别恰恰就在于前者显现一种不对称的多重的复合时空结构，而后者的时间空间可以认为是简并为单一的、对称的。这一点可能具有重要意义，因为它不仅揭示了生命物质与非生命物质的基本区别，而且又使我们有了分析极端复杂、又不具对称性的巨型生物分子的方法。例如，作者已用这种理论对鲍令（Pauling）共振学说（连同波粒伴谬一起）做出新解释，指出那是一种不同时空之间的跃迁现象，并且是完全可以认识的；同时还对癌的本质给出了新解释，认为癌分子的时间轴与正常组织中分子的时间轴相反，且按照控制论意义讨论了哪些治癌的方法是可行的，哪些方法是不可行的。作者还认为，生物分子不同几何构型间的相互作用，除了考虑各基团间的电磁和交换作用外，可能还应认真考虑不同几何构型也即不同时空结构之间的一种新的相互作用。可能正是这种不同时空间的特异相互作用决定着生物分子间的相互识别、应答机能和物质转换、输送机能，从而决定生物结构的自组织、自繁殖功能。

在这种对时空全新的认识基础上本书重新分析了已有的关于分子和晶体对称性的理论，

重新分析了双群与时间反演对称引起的附加简并态及其消除等问题。

作者希望对不同时空结构间相互作用的研究可以帮助人们弄清生物大分子复杂的自组织和自复制过程。如果成功，那么我们对生命本质的认识就会更进一步。薛定格在《什么是生命？》一书中写道："生物体的活动尽管是以已有的物理定律为基础的，可是看来也遵循着迄今尚未被人们了解的物理规律，这些规律一旦被人们发现，就将成为生命科学中不可缺少的核心部分，就象前者是物理学的不可缺少的部分一样。"我们希望知道，复合时空论是不是薛定格所说的那个"生命科学中的不可缺少的核心部分。"？爱尔萨斯（Elsasser，1982）[1]曾指出："量子生物学是想用量子力学来作为分子生物学基础的，但事实表明不可能简单地将组成分子构成物体的办法来研究生物体…生命的一个特征是：具有形态信息稳定性，即有生命的东西将再现（繁殖）出以前曾经存在过的结构，而没有充足的中间因果关系。…科学家从物理科学走向生命科学时，他就进入了一个没有边际的、复杂性不可约的王国"。也就是说，生物学家已经感到，我们在生物学中必须扩大因果律的基础。阿克佳（И·АКОТЯН 1982）[2]写道："…在（已有的）物理学概念中，不对称是纯属否定的东西。如果你问物理学家：'什么是不对称？'他就会含糊其词地说：'不对称就是…失去对称的时候…'。每当在他面前出现明显的不对称时，他就会进行研究和考察，从而达到一个'新阶段'，在那里，消失了的对称又会重新出现。…生命向科学提出了一个新课题：建立一个新的和向组织性、不对称性发展倾向的规律，一个新的科学方法"。也许正是在这里可以找到物理学和生物学进一步发展的突破口。

参 考 文 献

[1] W，M，Elsasser.*J.Theor.Biol.*，1982；96(1)；67.

[2] И.АКОТЯН.ЗНаНИе сИЛа，1982；(6)И.АКОТЯН.

第一章　群论基础

§1.1　集合、关系与映射

集合是数学中最基本的概念之一，简单地说，所谓集合就是指作为整体的一堆东西。例如，研究一班学生的情况，可把该班学生的全体称为集合，而其中的每一个学生则是这个集合中的元素。若以C表示集合。以小写字母a、b、c、…表示C中的元素，则用$a\in C$来标记元素a属于集合C；还可用$a\overline{\in} B$表示元素a不属于集合B。

常用R标记全体实数组成的集合，称实数域；用C标记全体复数组成的集合，称复数域。一个元素也没有的集合称为空集，记作ϕ。

对于确定的集合，可用列举标记法，即把集合中全体元素全部列举写出，外面用一括号｛　｝括之，如

$$C=\{a,\ b,\ c\}$$

此外，若集合中元素个数太多，则可写出集合中元素应遵守的某个命题。例如

$$B=\{x,\ x\in X,\ P(x)\}$$

表示集合B是由属于X的元素x，且使命题$P(x)$成立的全部x所构成的集合。

若凡属于集合C的任何元素必须属于集合B，则称C是B的子集，记作$C\subseteq B$，这可写作

$$\forall a\in C\Rightarrow a\in B\quad 则\ C\subseteq B$$

其中$\forall a\in C$是指C中所有元素a。

若有$C\subseteq B$，$B\subseteq C$，则$C=B$，称集合B和C相等。

二个集合B与C的和集是指B中元素与C中元素的全体构成的集合，记作$C\cup B$；若C中有一部分元素同时也是B中的元素，则称这部分元素的全体为C与B的交集，记作$C\cap B$；若B中有一部分元素不属于C，则B中不属于C的元素的全体称为B与C的差集，记作B/C，或记作$B-C$。

定义：设X与Y为二非空集合，二者的元素可以相同，也可以很不相同。例如，一种可为数，另一种则为矩阵，或矢量等。若存在某种规则μ，使得X中的任一元素x在规则μ下变为Y中的某一元素y，则称此规则μ为映射。记作μ：$X\to Y$，或$X\xrightarrow{\mu}Y$，并称y为x的像。x为y的像原。这是函数与自变量关系的一种推广。

若有μ：$X\to Y$，ν：$Y\to Z$，则可定义映射的积$\mu\nu$：$X\to Z$。

§1.2　对　　称

对称的概念起源于人们对几何图形的研究。如一平面等腰三角形(图1.1)中，因为$AB=AB'$，则等腰三角形ABB'对于轴AO对称。当将图形绕AO轴旋转180°后，则B'点移至原B点的位置，而B点则将移至B'的位置。不仅如此，该图形的左右两半$\triangle ABO$和$\triangle AB'O$将互

换位置，移动后的图形与原来的图形完全重合，就好像没有进行过任何转动一样，于是说该平面等腰三角形有一对称轴AO，图形对于轴AO为对称。而上面所说的绕AO轴旋转180°的操作就叫做对称操作，对称轴AO称为该图形的对称元素。

上述几何图形还可以有其它的对称元素和对称操作。例如，设想一过AO轴并与平面三角形ABB'垂直的镜面，则对此镜面反映后，$\triangle ABO$也将与$\triangle AB'O$互换位置，与原图形重合。于是就称等腰三角形$\triangle ABB'$对于反映面AO为对称。这时的对称元素为反映面AO，而对称操作则为图形关于镜面AO的反映。在进行上述对称操作时，图形中任何两点间的距离并没有改变，所以这种对称操作就叫等距变换。

如果把上述等腰三角形想象成水分子。A点代表氧原子O，B，B′点分别代表一个氢原子H，于是可以看出除了上述几何对称性外，还可以将二氢原子相互置换。则该分子图形也不会改变，这也是一种对称性，叫做置换对称性，或代数对称性。这种代数对称性最早起源于对代数方程式根多项式研究。例如，二次方程式$ax^2+bx+c=0$有两个根

$$x_1=\frac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

和

$$x_2=\frac{-b-\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

这两个根有如下关系：

$$x_1+x_2=-\frac{b}{a}$$

$$x_1x_2=\frac{c}{a}$$

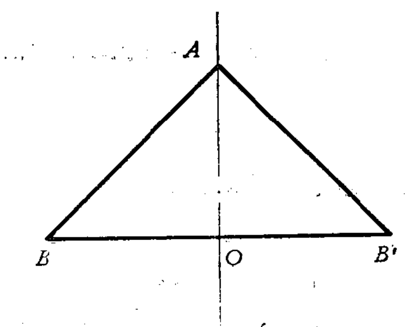


图 1.1 等腰三角形的对称

可以看出，(x_1+x_2)和(x_1x_2)都有如下性质：把x_2和x_1互相对换，结果不变。因为

$$x_1+x_2=x_2+x_1,\quad x_1x_2=x_2x_1$$

于是就叫(x_1+x_2)和(x_1x_2)为x_1和x_2的对称多项式。

在十九世纪初，伽罗华正是从对研究代数方程式根的多项式的对称性引入群概念的。

§1.3 抽象群

群是用来表示对称性直观观念的一种抽象数学工具。所谓对称性，其广义的含义就是规则性。特别是在分子与晶体结构的几何理论中，对称性一直与原子在空间的有序排列相对应。这种三维空间中几何图形的对称性与抽象群理论相结合，已经成为结构理论研究的有力工具。

定义：由元A、B、C、…组成的集合G，若元之间有以下关系，就称这集合构成一个群。这些关系是：

①在G中存在单位元e，它对G中任意元素$A\in G$，有

$$Ae=eA=A \tag{1.1}$$

②对任意元$A\in G$，有一逆元$A^{-1}\in G$，使得

$$AA^{-1}=A^{-1}A=e \tag{1.2}$$

③在G中元之间可定义一运算，例如，乘法。G中元对此运算具有封闭性，即若$A\in G$，

$B \in G$则有

$$AB = C \in G \tag{1.3}$$

④若$A \in G$，$B \in G$，$C \in G$则

$$A(BC) = (AB)C = ABC \tag{1.4}$$

为了构成一个群，必须使上述四个公设全部得到满足。群中元的个数称为群的阶数。若元为有限多个，则称为有限群；如为无限多个，且都是可数的，则称为无限离散群；若群中元素构成一连续统，则称为连续群。

例 1　+1与−1二元构成一个二元群。

例 2　设角θ在0与2π之间连续变动，则矩阵

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{1.5}$$

的无限集合构成一连续群。

例 3　所有整数…−1、0、1、+2、…，关于乘法不构成一个群。

例 4　所有非0实数构成一个无限群。

例 5　晶体的每一个空间群是无限离散群。

若已知有限群中全部元的名单，以及群元之间的全部乘积（若群的阶为g，则这些乘积共有g^2个），则这个群就完全地且唯一地被确定了。这是用一个乘法表表示出来的。该表由g行g列组成。其上方横排着群中的全部元，而左边一般也照相同的顺序从上到下地排写着群中的全部元。在每一行与每一列交叉处写着列元与行元的积，即

列元×行元

若列元为A，行元为B，则交叉处写上AB。

例如二元群{E，A}，其中E为单位元，则其乘法表如表1-1所示。

表 1-1

	E	A
E	E	A
A	A	E

关于乘法表有一重要定理，即重排定理。

定理1.1（重排定理）：在群的乘法表中，每一群元在每一行和每一列中必列入一次，且只被列入一次。所以，不可能有二行是全同的，也不可能有二列是全同的，故每一行和每一列都是群中元的一种重新排列。

证明：令群中g个元为$\{E, A_1, A_2, \cdots A_{g-1}\}$，则在其乘法表的第（$n+1$）行中的元必为

$$EA_n,\ A_1A_n,\ A_2A_n,\ \cdots A_{g-1}A_n$$

因为没有二个元A_i与A_j是相同的，所以乘积A_iA_n与A_jA_n也必不相同，并且A_iA_n与A_jA_n在群中g个元之中（根据群的封闭性），所以

$$EA_n,\ A_1A_n,\ \cdots A_{g-1}A_n$$

必为

$$\{E,\ A_1,\ A_2 \cdots A_{g-1}\}$$

诸元的一次重新排列。

此种论证也适用于列。

设有三阶群G_3，$G_3=\{E, A, B\}$，则其乘法表如表1-2所示。

表 1-2

	E	A	B
E	E	A	B
A	A		
B	B		

继续完成上表只有二可能：①$AA=E$，$BB=E$；②$AA=B$，$BB=E$。根据重排定理，若$AA=E$，令$AB=B$，这是不对的，故只有用第②种可能。于是完成乘法表如表1-3所示。

表 1-3

	E	A	B
E	E	A	B
A	A	B	E
B	B	E	A

从G_3的乘法表看出，因为$AA=B$，所以$AB=A(AA)=E$，$BB=(AAA)A=EA=A$，故这时G_3中三个元E、A、B可代之以$\{E, A, A^2\}$且$A^2 \cdot A=E$，这种群称为循环群。如果令A表示绕一轴L转$\frac{2\pi}{3}$的一个旋转，$C\left(I, \frac{2\pi}{3}\right)$；则$B$即为绕同一轴、向同一方向转$\frac{4\pi}{3}$的一个旋转，$C\left(I, \frac{4\pi}{3}\right)$。

$$\text{而} \quad AB=C\left(L, \frac{2\pi}{3}\right) \cdot C\left(L, \frac{4\pi}{3}\right)=C\left(L, 2\pi\right)=E$$

根据重排定理判断出四阶群可以有二种，其乘法表分别如表1-4、表1-5所示。

表 1-4

G_4	E	A	B	C
E	E	A	B	C
A	A	B	C	E
B	B	C	E	A
C	C	E	A	B

表 1-5

G_4	E	A	B	C
E	E	A	B	C
A	A	E	C	B
B	B	C	E	A
C	C	B	A	E

群G的一个子集H中的元，若对于G中乘法成群，则H称为G的子群。G和$\{e\}$称为非真子群。而所有其它子群则称为真子群。

定理1.2：群G的非空子集H成为子群的充要条件是

①若有$h\in H$，$k\in H$，则$hk\in H$；

②若有$h\in H$，则$h^{-1}\in H$。

证明：如果H是子群，则①、②显然成立。反过来，如果这些条件成立则有下列事实：由于结合律在G中成立，所以在H中成立。由②知，若有$h\in H$，则$h^{-1}\in H$。所以由①有$hh^{-1}=e\in H$，所以H中包含单位元。因此H成群。

群的单位元是唯一的，群中任一元的逆元也是唯一的。

§1.4 子群和陪集

设H是群G的一个子群，且$g\in G$，则集合

$$gH=\{gh:h\in H\} \tag{1.6}$$

称为元素g产生的H的一个左陪集。G中每一元素g都包含在H的某一左陪集中，特别是$g=g\cdot e\in gH$。此外，两个左陪集或是重合一致，或是没有共同的元素。

可将N阶群G展开为子群G'的n个左陪集

$$\begin{pmatrix} G'=e,\ x_1,\ \cdots,\ xN' \\ y_2G'=y_2e,\ y_2x_1,\ \cdots,\ y_2xN' \\ y_3G'=y_3e,\ y_3x_1,\ \cdots,\ y_3xN' \\ \cdots \\ y_nG'=y_ne,\ y_nx_1,\ \cdots,\ y_nxN' \end{pmatrix} \tag{1.7}$$

在这样的展开中，是令$y_2\in G$，但$y_2\overline{\in}G'$，而y_3则为G'和y_2G'以外的G中的元素，等等。于是，这些左陪集是彼此不相交的。如果发现有二左陪集y_iG'和y_jG'中有一个元素x_i是相同的，即

$$x_i=y_ig'=y_jg'' \tag{1.8}$$

因为 $g',\ g''\in G'$

所以 $y_i=y_jg'g''^{-1}\in y_jG'$，$y_iG'\subseteq y_jG'$ (1.9)

同样有

$$y_j=y_ig'g''^{-1}\in y_iG',\quad y_jG'\subseteq y_iG'$$

所以有 $y_iG'=y_jG'$ (1.10)

即y_iG'与y_jG'有相同的元素。所以，由子群G'展开的左陪集中，或是不相交，或是具有相同元素。而左陪集中所有元又都应属于群G。所以，群G按子群G'的陪集展开时，一定会得出整数个陪集。因此，群G的阶必是子群G'的阶的整数倍。

定理1.3（拉格朗日定理）：有限群G的子群的阶是群G阶的因数。

此定理严格限制了子群的可能阶数。例如阶为12的群只能有阶为2、3、4、6的真子群。

群元素之间往往还存在有共轭关系。如果存在$g\in G$、$h\in G$，使

$$k=ghg^{-1}\in G$$

则称h与k共轭，记作$h\sim k$。共轭变换类似于几何学中的等价变换。利用这种共轭变换可以将群中的元素分为少数几类。称共轭类，或简称类。在后面将看到，这种类的划分在实际应用中有重要意义。

G的子群H和子群K。如果对于$g\in G$有$K=gHg^{-1}$，作为集合相等，即

$$Kg=gHg^{-1}g=gH$$

那么称子群H与子群K共轭。

如对所有$g\in G$，都有$gMg^{-1}=M$，则称子群M为正规子群（不变子群，或自轭子群）。

如果M是一正规子群，就以M的陪集为元素构造一个新的群，称为商群，记为G/M。商群G/M的元素是陪集gM，含有G的相同元素的两个陪集gM、$g'M$定义了商群中的相同元素$gM=g'M$。因为M是正规的，所以作为集合相等有

$$(g_1M)(g_2M)=(g_1M)(Mg_2)=g_1Mg_2=g_1g_2M \tag{1.11}$$

作为集合相等有$MM=M$。因此可在G/M中由下式定义群的乘积：

$$(g_1M)(g_2M)=g_1g_2M \tag{1.12}$$

如果G是有限的，则G/M的阶就是M关于G的指数。

以6元群为例。有6元群

$$G_6=\{E,\ A,\ B,\ C,\ D,\ F\}$$

其乘法表如表1-6所示。

表1-3

G_6	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

由乘法表可以看出$H=\{E,\ D,\ F\}$是不变子群，则G关于H的商集为$\{H,\ HA\}$，以H和HA为元素，成群。因为$HH=H$，$HAHA=HHA^2=HE=H$，所以它是二阶群。应注意，在这里只有当H为不变子群时，商集才成群。否则商集即不成商群。

§1.5 同态、同构和自同构

定义：从G到G'的映射μ，如果能使任意两元乘积的象是这两元的象的乘积时，则称μ为同态（映射），因此，对每一g，有$\mu(g)\in G'$并且对于所有的$g\mu(g_1g_2)=\mu(g_1)\mu(g_2)$。现设$e$、$e'$分别为$G$、$G'$的单位元，则$\mu(e)=\mu(ee')=\mu(e)\cdot\mu(e')$。对该等式右边乘以$\mu(e)^{-1}\in G'$，则得$\mu(e)=e'$。因此，$\mu$把$G$的单位元映为$G'$的单位元。类似的证明给出，$\mu(g^{-1})=\mu(g)^{-1}$，即$\mu$把g的逆元$g^{-1}$映为g的象$\mu(g)$的逆元。

因为同态是保持群结构的一种映射。所以它是很重要的概念，类似线性变换。常用μ：$G\to G'$表示G到G'中的同态。

G是μ的定义域，μ的值域为$\mu(G)=\{\mu(g)\in G' : g\in G\}$，显然，$\mu(G)$是$G'$的子群。如果

$$\mu(G)=G' \tag{1.13}$$

则称μ为到(G')上的，如当$g_1\neq g_2$，有$\mu(g_1)\neq\mu(g_2)$，称μ是一一映射，一个到上的一一映射的同态称为同构（映射）。容易看出，如映射μ是同构的，则其逆映射μ^{-1}也是同构的。在两个群G、G'之间，如存在同构映射，则称这两个群G、G'为同构群。同构群有相同的乘法表。

群G到自身上的同构映射，称为自同构映射，群G的每一个自同构，由于它是一一映射，

所以也是集合G的变换。因此，两个自同构可以相乘，而且所得到的乘积也是群G的自同构。容易求出，恒等变换是自同构映射，自同构的逆变换也是自同构。因此，群G的所有自同构成群。

定义：若映射$\mu(g)=e'$，$g\in G$，则集合

$$K=\{g\in G:\mu(g)=e'\} \tag{1.14}$$

称为μ的核。

定理1.4：K是G的正规子群。

证明：如果k_1、$k_2\in K$，则$\mu(k_1k_2)=\mu(k_1)\mu(k_2)=e'e'=e'$。

所以，$k_1k_2\in K$。且如$k\in K$，则$\mu(k^{-1})=\mu(k)^{-1}=(e')^{-1}=e'$所以$k^{-1}\in K$。

故K是G的子群。为了证明K是正规的，只需证明对所有$k\in K$和$g\in G$，有$gkg^{-1}\in K$。因为$\mu(gkg^{-1})=\mu(g)\mu(k)$；$\mu(g^{-1})=\mu(g)e'\mu(g)^{-1}=e'$所以$gkg^{-1}\in K$（证毕）。

因为对所有的$k\in K$，$\mu(gk)=\mu(g)\mu(k)=\mu(g)$，所以左陪集$gK$中的元素都被映为$G'$中的$\mu(g)$。反之，被$\mu$映成相同象的二元素是位于同一左陪集中。因为$\mu(g_1)=\mu(g_2)$，则$\mu(g_1{}^{-1}g_2)=\mu(g_1{}^{-1})\mu(g_2)=\mu(g_1)^{-1}\mu(g_2)=e'$。所以$g_1{}^{-1}g_2\in K$，即$g_2\in g_1K$。因此有

①μ是一一的充要条件是核由单位元组成；

②K的左陪集中的各元，在μ下映成的象是一样的；

③因为K是正规的，所以可有商群G/K。

定理1.5：设K是同态映射μ的核，则$\mu(G)$同构于商群G/K（证明略）。

§1.6 变换群

上面关于群的讨论很少联系到对称性的研究。联系抽象群和对称概念的是变换群。

定义：非空集合X到自身上的一一映射称为置换。

因此，如果X的元素记为x、y、z、…，则从X到X的一个置换是这样一个映射。

①当且仅当$x=y$时，$\sigma|x|=\sigma|y|$。

②对于每一个$z\in X$，存在一个$x\in X$，而有$\sigma|x|=z$。对于所有的$z\in X$，如有$E(x)=z$。则称E为恒等变换。

X的所有置换S_X形成群，这个群叫做在X上的完全对称群S_G。

两个置换σ、$\tau\in S_X$的乘积$\sigma\tau$，是由对于所有的$x\in X$，按$\sigma\tau(x)=\sigma\{\tau(x)\}$定义的。显然，$\sigma\tau$也是$X$的一个置换，$S_X$的单位元是$I$，$\sigma$的逆元是$\sigma^{-1}$。它的定义是：当且仅当$\sigma(\eta)=x$时，有$\sigma^{-1}(x)=y$。$S_X$的元素可以看成是对$X$的元素的作用或运算。

如果X是有限的，元素数为n时，群S_X与一置换群S_n同构，n个物体构成的集合记作$X=\{1,2,\cdots,n\}$。X的置换指的是X到X上的一一映射。写为

$$S=\begin{pmatrix}1 & 2, & \cdots & n\\ p_1 & p_2, & \cdots & p_n\end{pmatrix} \tag{1.15}$$

的置换，是指把1映为P_1、2映为P_2、…、n映为P_n的映射。这里P_1、P_2、…、P_n是1、2、…n的另一种排列，并且P_i中没有两个是相同的。其逆置换定义为

$$S^{-1}=\begin{pmatrix}p_1 & p_2 & \cdots & p_n\\ 1 & 2 & \cdots & n\end{pmatrix} \tag{1.16}$$

如置换 t 为

$$t=\begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix} \tag{1.17}$$

则可定义 s 和 t 的乘积

$$st=\begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_n \end{pmatrix} \tag{1.18}$$

这里的乘法是从右向左进行的，置换中的单位元

$$e'=\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix} \tag{1.19}$$

根据定义可以证明n个物体的所有置换 s 、 t 、…成群。这群称为对称群S_n。S_n的阶为n

定义：S_X的子群称为在X上的变换群（置换群）。

如果G是X上的变换群，则G的元g定义了一个置换$g(X)$，用这些置换来分解X，使X成为不相交的子集。

定义：设x、$y\in X$。若存在着$g\in G$，使得$g(x)=y$，则称x是等价于y的，记作($x\sim y$)。由等价关系决定的等价类，称为G轨道。

因此，当且仅当存在某一$g\in G$，而有$y=gx$时，x和y才属于同一轨道，即群是可迁的。对X中每一对元x、y，存在$g\in G$，使得$y=g(x)$。

例 1　在欧几里德平面上引进直角坐标(x_1，x_2)，设G是所有绕原点的转动。G的元素g_φ由一连续参数φ确定。φ是从正向x轴顺时针的转动角，如$x\in X$的坐标是(x_1，x_2)，X为平面上所有点组成的集合，则$y=g(x)$的坐标为

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \tag{1.20}$$

注意$g_\varphi=g_{\varphi+2\pi}$。因为$g_\varphi g_\theta=g_{\varphi+\theta}$，所以$g_\varphi$成群。此时的$G$轨道即为以原点为圆心的圆。二维空间的转动群$G$同构于二维空间的实特殊正交变换群$SO(2,R)$，即

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \qquad 0\leqslant\varphi<2\pi \tag{1.21}$$

定义：若X有子集Y，又有$g\in G$，以$g(Y)$表示集合$\{g(Y):y\in Y\}$，若对所有的$g\in G$有$g(Y)=Y$，则称Y为G不变的或不变的。

特别是当且仅当对所有$g\in G$，有$g(x)=x$，即当含x轨道只由x组成时，X的子集$\{x\}$就是不变的。在上面的例子中，唯一G_φ不变的点就是原点，一般不变集合是以原点为圆心的同心圆的任意并集。

给定变换群G，能求出X的所有G不变子集Y群G就叫做Y的不变群或对称性群。

例 2　正方形的对称性

设X是欧几里德平面，G是使平面上一点P固定不动的所有转动和反射所组成的群$O(2)$，现考虑图1.2所示以P为中心的正方形$ABCD$。有一过P并垂直于平面的旋转轴作为对称元素，找出使正方形不变的所有转动和反射，共有8个置换：

恒等置换I；

逆时针转90°、180°、270°的转动r、r^2、r^3，对于过水平轴x的垂直平面m_x的反射；