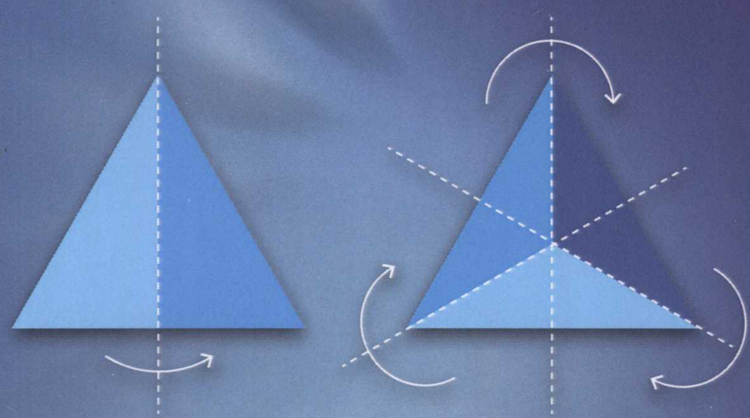
群论及其应用

朱正和 编著



科学出版社

群论及其应用

朱正和　编著

科学出版社
北　京

内 容 简 介

本书讨论包含外部(几何)对称性的点群与连续群和内部对称性的置换群.本书共五章,即点群,抽象群理论,群的表示理论,置换群以及连续群——李群和李代数,附有一定量的习题.

本书可供高等院校的物理、化学和材料等学科的本科生、研究生、教师及科技工作者参考.

图书在版编目(CIP)数据

群论及其应用/朱正和编著.—北京:科学出版社,2016.5
ISBN 978-7-03-048132-0

Ⅰ.①群… Ⅱ.①朱… Ⅲ.①群论-研究 Ⅳ.①O152

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 090149 号

责任编辑:窦京涛 陈曰德 / 责任校对:彭 涛
责任印制:徐晓晨 / 封面设计:谜底书装

科学出版社出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码:100717
http://www.sciencep.com
北京厚诚则铭印刷科技有限公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2016 年 5 月第 一 版 开本:720×1000 1/16
2016 年 9 月第二次印刷 印张:8 1/4
字数:158 000

定价:48.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前　　言

群的概念由伽罗瓦(Evariste Galois,1811～1832)提出,早期对群论做过贡献的有高斯,柯西,阿贝尔,哈密顿和伽罗瓦等.伽罗瓦也可以说是近世代数学的提出者.在量子力学出现之前，群论没有多少应用,现在却已广泛应用于物理和化学等领域.和其他科学一样,群论也是经过长期的实践、认识、再实践、再认识的辩证唯物论的发展过程,才发展到现在的状况.群是具有一种结合律的代数系统.熊全淹于 1953 年在武汉大学就大体按照瓦尔登(B. L. van der Waerden)的《代数学》讲授过"近世代数学".

自 1990 年以来,本书一直作为成都科技大学(后改为四川大学)原子与分子物理研究所硕士研究生的教材.作者于 2009 年在西华大学理化学院作过群论的讲座,学校还留下了视频资料.本书的部分内容曾给中国工程物理研究院的材料研究所、激光聚变研究中心和核物理与化学研究所以及西南交通大学高温高压物理研究所的青年同志讲述.

本书包含外部(几何)对称性的点群和连续群及内部对称性的置换群.本书内容共分为五章,第 1 章点群,第 2 章抽象群理论,第 3 章群的表示理论,第 4 章置换群,第 5 章连续群——李群和李代数.先讲点群,以便有一些感性知识,然后再讲抽象群理论.在讲述理论的同时,有的附有部分习题,习题或已即时给出解答,以便加深理解,或留给读者课后作业.本书注重物理意义的讲解,辅以部分数学推导;尽力与物理和化学的应用相结合.例如,基态电偶极矩和极化率与分子对称群的对称化基函数的关系,有助于对红外与拉曼光谱的选择规则的讲述.再如,当讲述如何由笛卡儿坐标得到对称坐标时,以 C_{2v} 的 H_2O 为例,在对称坐标中,A_1 为三维 $(\eta_1-\eta_3,\zeta_1+\zeta_3,\zeta_2)$,$A_2$ 为一维 $(\xi_1-\xi_3)$,B_1 为二维 $(\xi_1+\xi_3,\xi_2)$,B_2 为三维 $(\eta_1+\eta_3,\eta_2,\zeta_1-\zeta_3)$,则在 C_{2v} 的特征标表中,已知平动 $T_z\subset A_1$,则还有两个振动 $Q_1,Q_2\subset A_1$.而 A_2 的子空间是一维的,已有转动 $R_z\subset A_2$,所以无振动属于 A_2.同样,B_1 的子空间为二维,已有 $T_x,R_y\subset B_1$.B_2 的子空间为三维,已有 $T_y,R_x\subset B_2$,则还有一个振动 $Q_3\subset B_2$.故 C_{2v} 的三个正则振动为两个属于 A_1,一个属于 B_2.

群论可以对量子力学系统的波函数(状态)和算符(可观测量)进行对称分类,但不能作出数值计算;而不可约张量代数则可对其作出数值计算,不可约张量代数可视为群论的一个分支.因此,在学习群论时,配合学习不可约张量代数,是一种优选途径.

朱正和

2014 年 5 月于四川大学原子与分子物理研究所

目　　录

前言

第 1 章　点群 …… 1

1.1　引言 …… 1

1.2　共轭元素和类结构 …… 4

1.3　对称元素　对称动作及其一般关系 …… 5

1.4　点群的分类(1) …… 8

1.5　点群的分类(2) …… 12

第 2 章　抽象群理论 …… 16

2.1　子群 …… 16

2.2　陪集 …… 17

2.3　正规子群或不变子群 …… 19

2.4　因子群(商群) …… 20

2.5　加法群 …… 21

2.6　同构 …… 22

2.7　同态 …… 24

第 3 章　群的表示理论 …… 28

3.1　群的表示 …… 28

3.2　某些补充内容 …… 34

3.3　群的不可约表示 …… 36

3.4　舒尔引理 …… 40

3.5　广义正交定理 …… 40

3.6　表示的特征标 …… 42

3.7　表示矩阵含有更多信息,但特征标更有用 …… 46

3.8　交换群的表示 …… 47

3.9　规则表示 …… 49

3.10　对称化基函数 …… 50

3.11　投影算符(对于空间的轨道) …… 55

3.12　群表示的直积 …… 59

3.13　群表示在量子力学中的应用 …… 60

3.14　选择规则 …… 63

3.15　由笛卡儿坐标得到对称坐标 …… 66
3.16　群论的应用 …… 68
第 4 章　置换群 …… 71
4.1　置换 …… 71
4.2　置换群的应用举例 …… 74
4.3　置换群的类 …… 77
4.4　杨图 …… 79
4.5　电子自旋函数的对称群 …… 85
第 5 章　连续群——李群和李代数 …… 88
5.1　引言 …… 88
5.2　拓扑群 …… 90
5.3　李群 …… 92
5.4　轴转动群 SO(2) …… 95
5.5　群 $C_{\infty v}$ 和 $D_{\infty h}$ 的表示和特征标 …… 99
5.6　三维转动群 SO(3) …… 101
5.7　O(n)群 …… 108
5.8　洛伦兹群 …… 110
5.9　特殊酉群 SU(2) …… 111
5.10　李代数 …… 120
参考文献 …… 123
索引 …… 124

第1章　点　　群

1.1　引　　言

1. 对称性是最一般的规则

(1) 几何对称性. 很多事与物都具有某种几何对称性，例如，大到动物、植物、建筑物、晶体，小到原子、分子，甚至音乐、诗词，以至社会现象等.

(2) 置换对称性. 如对全同粒子系统的粒子进行置换，系统是不变的. 这也是一种对称性. 例如，交换原子的 2s 和 2p 电子，系统的哈密顿(Hamiltonian)算符是不变的.

(3) 简并对称性. 例如，氢原子的非相对论能级可表示为

$$E=-\frac{mz^2e^4}{2\hbar n^2}$$

例如，主量子数 $n=1,2,3,\cdots,n$，角量子数 $l=0,1,2,3,\cdots,n-1$，磁量子数 $m=0,\pm1,\cdots,\pm l$. 当 n 不同时，态的数目不同，例如：

$n=1, n^2=1$，一个能级，一个态，不存在简并；

$n=2, n^2=4$，一个能级，四个态，存在四重简并；

$n=3, n^2=9$，一个能级，九个态，存在九重简并；

……

具有简并对称性的群，又称为动力学群.

(4) 时间平移的对称性. “绝对时间”是不可观测的，因而，t 和 $t+\tau$ 不是可观测的(unobservable)，导致能量守恒，即集合$\{t,t+\tau\}\to\{\hat{P}_t(\tau)\}$是一连续群.

习题 1.1　证明$\sum_i \dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-L$是能量.

因为拉氏(Lagrangian)方程 $L=T-U=L\{q_i(t),\dot{q}_i(t)\}(i=1,2,\cdots,n)$不显含时间，即$\frac{\partial L}{\partial t}=0$，则有

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}=\sum_i\frac{\partial L}{\partial q_i}\dot{q}_i+\sum_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i+\left(\frac{\partial L}{\partial t}=0\right)\tag{1.1}$$

由拉氏方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-\frac{\partial L}{\partial q_i}=0,\quad i=1,2,\cdots,n$$

显然有

$$\frac{\partial L}{\partial q_i}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i},\quad i=1,2,\cdots,n$$

将其代入式(1.1)中,得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}&=\sum_i \dot{q}_i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}+\sum_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i\\&=\sum_i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_i\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i\right)\end{aligned}$$

上式可改写为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_i \dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-L\right)=0$$

这表示$\sum_i \dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-L$是运动常数. 以下要用 Euler 定理证明这个运动常数就是能量. Euler 定理指出,若函数$f(x_1x_2\cdots x_n)$的下式成立

$$\sum_i x_i\frac{\partial f(x_1x_2\cdots x_n)}{\partial x_i}=kf(x_1x_2\cdots x_n)$$

则$f(x_1x_2\cdots x_n)$就是$x_1x_2\cdots x_n$的k次齐次函数. 显然,动能T是速度$V_i(\dot{q}_i)$的二次齐次函数,即

$$\sum_i \dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=\sum_i \dot{q}_i\frac{\partial (T-U)}{\partial \dot{q}_i}=\sum_i \dot{q}_i\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}=2T$$

因而运动常数$\sum_i \dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-L=2T-L=2T-T+U=T+U=E$. 这个运动常数就是能量.

(5) 空间平移的对称性 .“绝对空间”是不可观测的,即集合$\{\ell,\ell+s\}$是一连续群 .

(6) 量子力学的哈密顿算符的对称性.

若势函数是坐标的偶函数,并动能又只包含二次导数,则哈密顿算符对反演是不变的,其他算符如旋转、反射和置换都与哈密顿算符对易,即对称变换$\hat{R}$与哈密顿算符$\hat{H}$有关系

$$[\hat{H},\hat{R}]=0$$

即$\hat{R}$与$\hat{H}$有相同的本征函数,即哈密顿算符的对称性 .

2. 群概念提出

群概念的提出已超过 160 年,但是,直到 1925 年都没有找到重要应用. 最早对群论作出贡献的有 Gauss,Cauchy,Abel,Hamilton 和 Galois 等.

对 Evariste Galois 曾有这样一段描写:“The night before the duel, Galois with foreboding of the death wrote out for posterity notes concerning his most important discoveries, which at that time had not published. His total work is less than sixty pages."

3. 某些定义

集——不同元素,如数、矩阵、算符、多项式等的集合.
代数系统——具有某种组合规则的集,如乘法或加法.
群——具有一种组合规则的代数系统,如乘法或加法.
环,域——同时具有乘法和加法的代数系统.

4. 群的公理——当下述公理成立且具有一种结合律的代数系称为群

(1) 封闭性. 对每个有序对 A 和 B,当 $A,B\in G$ 时,有 $AB=C\in G$.
(2) 结合律. 有$(AB)C=A(BC)$.
(3) 单位元 E. 若 $A\in G$,则 $EA=AE=A$.
(4) 逆元素 A^{-1}. 若 $A\in G$,则 $AA^{-1}=A^{-1}A=E$.

5. 交换群

若有 $AB=BA$,则 G 是交换(Abelian)群.

6. 加法群

(1) 封闭性. 当 $A,B\in G$ 时,有 $A+B=C\in G$.
(2) 结合律. 有 $(A+B)+C=A+(B+C)$.
(3) 单位元 0. 若 $A\in G$,则 $0+A=A+0=A$.
(4) 逆元素$-A$. 有 $A+(-A)=(-A)+A=0$.

7. 实例

(1) 正有理数集是群.
(2) 负有理数集不是群. 如封闭性不成立.
(3) 所有正负整数集不是群. 如 A^{-1}不是整数.
(4) 所有正负整数集是加法群.
(5) $U_2(1,-1)$和$U_4(1,-1,\mathrm{i},-\mathrm{i})$是群,i 是虚单位.

习题 1.2 证明酉矩阵的集是群.

证 设 G 是酉矩阵的集,若 $A,B\in G$,则$(AB)^+=B^+A^+=B^{-1}A^{-1}=(AB)^{-1}$,$(AB)^{-1}\in G$,封闭性成立;由于

$$[(AB)C]^+=C^+(AB)^+=C^+B^+A^+=C^{-1}B^{-1}A^{-1}=(BC)^{-1}A^{-1}=[A(BC)]^{-1}$$

即结合律成立;同时,$(A^{-1})^+=(A^+)^+=A=(A^{-1})^{-1}$,即逆元素存在;并且,

$(E^+)^+=(E^{-1})^+=(E^+)^{-1}$，单位元素存在.

8. 循环群

由单一元素或集产生的群，如$(A,A^2,A^3,\cdots,A^n=E)$.

(1) 封闭性. 有 $A^iB^j=A^{i+j}=\begin{cases}E, & i+j=n,\\ A^l, & (i+j)-n=l.\end{cases}$

(2) 结合律. 有$(A^iA^j)A^l=A^i(A^jA^l)$.

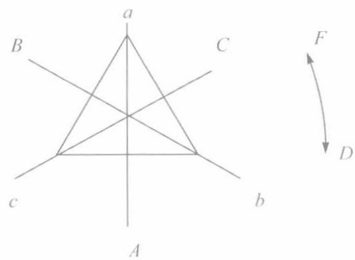


图 1.1

(3) 单位元. 有 $A^n=E$.

(4) 逆元素. 若$(i+j)=n$，则 $A^iA^j=E$.

这里称为 A 的 n 阶循环群 .

9. 群表

如图 1.1 所示，这里有六个对称动作，分别为 E 单位元素；A,B,C 转 π 角；D 顺时钟转 $2\pi/3$ 角；F 反时钟转 $2\pi/3$ 角. (E,A,B,C,D,F)是群，这个群可用表 1.1 来表示.

表 1.1

列/行	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
F	F	B	C	A	E	D
D	D	C	A	B	F	E

10. 重排定律

在群表中，每个元素在每行或每列只能出现一次.

1.2　共轭元素和类结构

1. 相似变换

若存在一元素 $V\in G$ 使得 $W=VUV^{-1}$，元素 W 和 U 在群中是共轭的，则称为 W 与 U 共轭或 $W\sim U$. 这称为 V 变换 U 到 W 的相似变换.

2. 等价关系

(1) 自反性，即 $U\sim U$. 因为 $U=EUE^{-1}$.

(2) 对称性,即若 $W \sim U$,则 $U \sim W$. 因为若 $W = VUV^{-1}$,则 $V^{-1}WV = V^{-1}VUV^{-1}V = U$.

(3) 传递性,即若 $W \sim U, U \sim Y$,则 $W \sim Y$. 因为 $W = VUV^{-1}, U = SYS^{-1}$,所以,$W = VSYS^{-1}V^{-1} = (VS)Y(VS)^{-1}$.

3. 类

与一个元素 U 共轭的所有元素称为共轭类或群的类,表示为(U).

例如,$EUE^{-1} = U, VUV^{-1} = W, SUS^{-1} = A, \cdots$,则 $(U, W, A, \cdots)$处于同类. 单位元素始终自成一类,因为任何 $A \in G$ 都有 $AEA^{-1} = E$. 对于交换群,每个元素自成一类,因为 $\chi A \chi^{-1} = A\chi\chi^{-1} = A, A \in G$.

习题 1.3 若矩阵是群元素,则在同类中全部元素的迹相同.

4. 关于类结构的物理解释

设 $U = V^{-1}WV$ 作用在某种对称物体上,首先用 V 使对称物体到某一位置,再用 V^{-1}作用,而用 V^{-1}复原到原位,因而 U 和 W 有同类的物理作用.

1.3 对称元素　对称动作及其一般关系

1. 对称动作是使物体不可区分的对称变换

例如,对于结构为平面等边三角形的 H_3^+,转动 120°或 240°是不可区分的. 其动作可分为主动观点(active viewpoint)和被动观点(passive viewpoint):主动观点——固定坐标,变换物体;被动观点——固定物体,变换坐标.

2. 五类对称动作——每类对称动作都相对于给定的对称元素,如点、线、平面

(1) 恒等操作 E,无任何变化.

(2) 转动操作 C_n,转动(绕轴顺时钟转动)$2\pi/n$ 角,n 为整数,如图 1.2 所示.

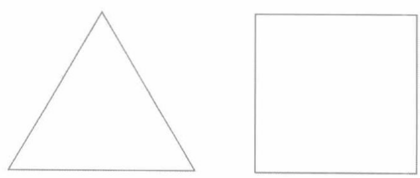


图 1.2

C_3,转动 $2\pi/3 = 120°$;
C_4,转动 $2\pi/4 = 90°$;
C_2,转动 $2\pi/2 = 180°$;

$C_n^k = C_n^1 C_n^2 \cdots C_n^k$，$k(2\pi/n)$，最大的 n 称为主轴.

(3) 反射动作.

σ_h 是水平对称平面，它垂直于主轴；σ_v 是含主轴的垂直对称平面，如图 1.3 所示.

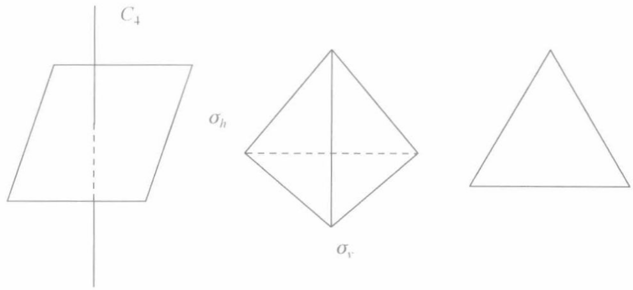


图 1.3

σ_d 是含主轴并平分两个垂直于主轴的 C_2 轴的夹角的对称平面，如图 1.4 所示.

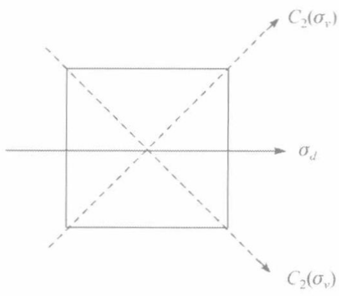


图 1.4

(4) 旋转-反射动作.

S_n 是 n 重交错轴，即先旋转 $2\pi/n$ 角，再对平面反射 σ_h，又称旋转-反射轴或反轴，或非真轴. 例如，S_4 交错轴的示意如图 1.5 所示.

在正六面体中，置入一个正四面体，其四个顶点编号为 1，2，3，4，连接线 12 和 34 的平分中点是一 S_4 轴，即先反时钟转 90°，即 C_4，得到第二个图形，四个顶点 1，2，3，4 则变为第二个图形所示；第二个图形作 σ_h 反射，则得到第三个图形，即回到与原图形不可区分.

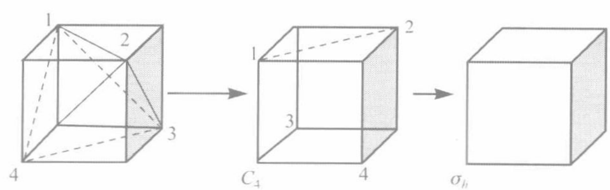


图 1.5

存在以下关系：

$$S_n^2 = (\sigma_h C_n)(\sigma_h C_n) = \sigma_h^2 C_n^2 = C_n^2$$

$$S_n^k=\begin{cases}\sigma_h C_n^k, & k\text{ 为奇数}\\ C_n^k, & k\text{ 为偶数}\end{cases}$$

(5) 反演动作 i.

对于以下的正八面体,如图 1.6 所示,存在对称中心,即有

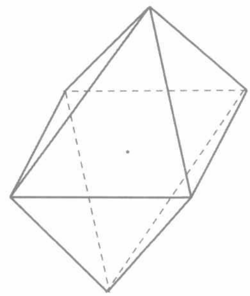


图 1.6

$$(x,y,z)\xrightarrow{i}(-x,-y,-z)$$

而且有

$$i^2=E \quad 和 \quad S_2=\sigma_h C_2=i$$

因为

$$\sigma_h C_2(x,y,z)=\sigma_h(-x,-y,z)=(-x,-y,-z)=i$$

对上述五类对称动作总述如下:

E	——	无变化
C_n	——	旋转 $2\pi/n$
$\sigma_h,\sigma_v,\sigma_d$	——	反射对称面
S_n	——	旋转-反射
i	——	反演

3. 对称动作间的相互关系

(1) 相对于有相同交点的两个轴的旋转的乘积是一个旋转,例如

$$C_2(y)C_2(x)=C_2(z)$$

因为

$$C_2(y)C_2(x)(x,y,z)=C_2(y)(x,-y,-z)=(-x,-y,z)=C_2(z)$$

(2) $\sigma_{vA}\sigma_{vB}=C(2\phi_{AB})$,如图 1.7 所示.

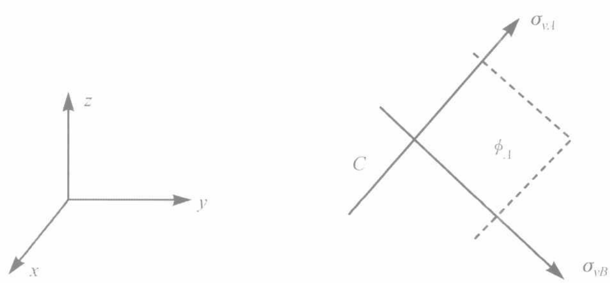


图 1.7

(3) 存在以下关系:

$$C_{2n}^n\sigma_h=\sigma_h C_{2n}^n=C_2\sigma_h=i$$

$$C_{2n}^n i=iC_{2n}^n=iC_2=C_2 i=\sigma_h$$

$iC_2=\sigma_h$ 的关系说明如下：

$$iC_2(x,y,z)=i(-x,-y,z)=(x,y,-z)=\sigma_h$$

4. 五种交换关系

(1) 绕同一轴的两个转动可以交换，如

$$C_3C_3^2=C_3^2C_3$$

同理有

$$C_4C_4^2=C_4^2C_4$$

(2) 水平垂直对称面的两个反射可以交换，例如

$$\sigma(xz)\sigma(yz)=\sigma(yz)\sigma(xz)$$

(3) $iC_n=C_ni$，$i\sigma=\sigma i$.

(4) $C_2(x)C_2(y)=C_2(y)C_2(x)$.

(5) $C_n^m\sigma_h=\sigma_hC_n^m$.

1.4 点群的分类(1)

点群的质心就所有对称的动作是固定的.

1. C_s 群(反映群，reflection group)

其群元素的个数称为阶 g. 而 C_s 群的阶$g=2$，即 $C_s(E,\sigma)$. 例如，非线性分子HClO(漂白粉)属于 C_s 群，$g=2$. 另一实例为喹啉(quinoline)$C_6H_4(CH)_3N$，它是 C_s 的平面分子，如图 1.8 所示.

2. C_i 群(反演群，inversion group)

其阶 g 亦为 2，即 $C_i(E,i)$. 如内消旋酒石酸(meso-tartaric acid)的顶视图，如图 1.9 所示. 其侧视图如图 1.10 所示.

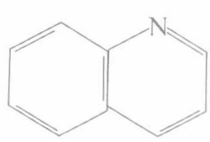


图 1.8

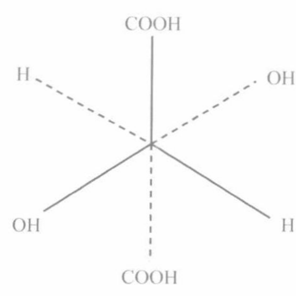


图 1.9

3. C_n 循环群

$n=2, C_2(E, C_2), g=2$，如双氧水 H_2O_2，图 1.11 所示.

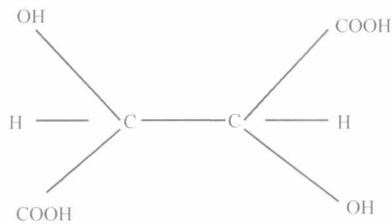


图 1.10

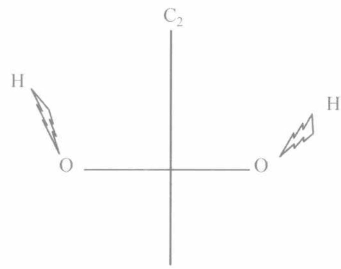


图 1.11

$n=3, C_3(E, C_3, C_3^2), g=3$，例如，$H_3C—CCl_3$（部分旋转，既不交错，也不重叠）.

$C_n(E, C_3, C_3^2, \cdots, C_3^{n-1}), g=n, N_{\text{classes}}=n$. 因为是循环，所以群的阶数 $g=n$ 与类数 $N_{\text{classes}}=n$ 相等.

4. $S_n, n=$ 偶数

$$S_n(E, S_n, S_n^2, \cdots, S_n^{n-1}), \quad g=\text{偶数}=N_{\text{classes}}$$
$$S_n^n=\sigma_h^n C_n^n=E$$
$$S_2(E, S_2)=S_2(E, i)=C_i, \quad S_2=\sigma_h C_2=i$$
$$S_4(E, S_4, S_4^2, S_4^3)=(E, S_4, C_2, S_4^3), \quad g=4$$

5. $S_n, n=$ 奇数

$$S_n(E, S_n, S_n^2, \cdots, S_n^{2n-1}), \quad g=2n$$

若 $g=$ 奇数，$S_n^n=\sigma_h^n C_n^n=\sigma_h C_n^n=\sigma_h\neq E$，则无单位元；但是 $g=2n$，则有 $S_n^{2n}=\sigma_h^{2n}C_n^{2n}=E$. 例如

$$S_3(E, S_3, S_3^2, S_3^3, S_3^4, S_3^5)=S_3(E, S_3, C_3^2, \sigma_h C_3, S_3^5), \quad g=2\times3=6$$
$$S_3^2=(\sigma_h^3 C_3)^2=C_3^2, \quad S_3^3=\sigma_h^3 C_3^3=\sigma_h, \quad S_3^4=\sigma_h^4 C_3^4=C_3$$

6. $C_{nh}=S_n, n=$ 奇数

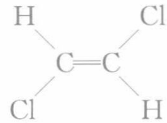
7. $C_{nh}, n=$ 偶数

$$C_{nh}(nC_n^n, nC_n^n\sigma_h)=(C_n, C_n^2, \cdots, C_n^n, C_n\sigma_h, C_n^2\sigma_h, \cdots, C_n^n\sigma_h), \quad g=2n$$

例如

$$C_{2h}(C_2, C_2^2, C_2\sigma_h, C_2^2\sigma_h)=(E, C_2, i, \sigma_h)$$

例如,反式 trans-$C_2H_2Cl_2$, 其中 C_2(z 轴)⊥平面,如下所示.



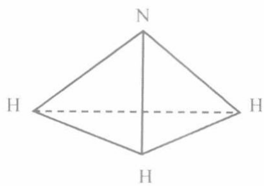
8. C_{nv}, n=奇数

$$C_{nv}=(C_n+n\sigma_v)=(E,C_n,C_n^2,\cdots,C_n^{n-1},\sigma_v,\sigma_v^2,\cdots,\sigma_v^n,),\quad g=2n$$

例如

$$C_{3v}=(E,C_3,C_3^2,\sigma_v,\sigma_v^2,\sigma_v^3),\quad g=6$$

例如,NH_3,如图 1.12 和图 1.13 所示.



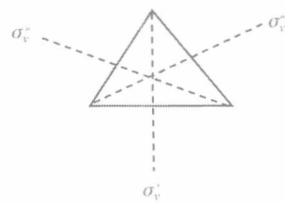


图 1.12　C_{3v}的 NH_3 图　　图 1.13　C_{3v}的 NH_3 图的投影

$$C_{5v}=(E,C_5,C_5^2,C_5^3,C_5^4,5\sigma_v),\quad g=2n=10$$

现讨论 C_{3v}群的类数.

单位元 E 总是自成一类.

$\sigma_v,\sigma_v^2,\sigma_v^3$ 这三个元素成为一类.

C_3,C_3^2 这两个元素成为一类.

为何 C_3,C_3^2 这两个元素成为一类? 原因如下:

$$\sigma_v'C_3\sigma_v'=C_3^2$$

总之,(C_3, $C_3^2=C_3^{-1}$) 是一类,(C_n^k,C_n^{-k})是一类.

若 n=奇数,则 $n=2p+1$,类的数目$=2p+2$. 例如,

$$n=3,\quad 3=2\times1+1,\quad N_C=1+2=3$$
$$n=5,\quad 5=2\times2+1,\quad N_C=2+2=4$$

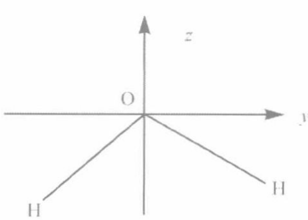


图 1.14

9. C_{nv}, n=偶数(2,4,6)

$$C_{nv}=\left(nC_n+\frac{n}{2}\sigma_v,\frac{n}{2}\sigma_d\right),\quad g=2n$$

$$C_{2v}=(E,C_2+\sigma_v(xz),\sigma_v(yz)),\quad g=4$$

例如,H_2O,如图 1.14 所示.

$$C_{4v}=(E,C_4,C_4^2=C_2,C_4^3,2\sigma_v,2\sigma_d),\quad g=8$$

如图 1.15和图 1.16 所示.

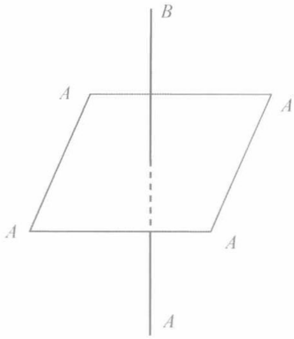


图 1.15

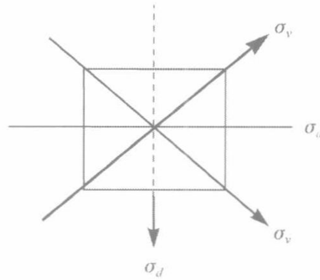


图 1.16

这里无 σ_h,故为 C_{4v},其主轴为 C_4.

若 n=偶数,则 $n=2p$,类的数目$=p+3=5$,C_4 的类数为以下五类:

单位元 E 总是自成一类;

C_4,C_4^3 这两个元素成为一类;

C_2 成为一类;

$2\sigma_v$ 成为一类;

$2\sigma_d$ 成为一类.

$C_{6v}=(E,C_6,C_6^2=C_3,C_6^3=C_2,C_6^4=C_3^2,C_6^5,3\sigma_V,3\sigma_d)$,$g=2\times6=12$,也无 σ_h,如图 1.17 所示.

因 n=偶数$=6$,则 $n=2p$,$p=3$,类的数目$=3+3=6$,C_6 的类数为如下六类:

单位元 E 是自成一类;

C_6,$C_6^{-1}=C_6^5$ 这两个元素成为一类;

C_3,$C_3^{-1}=C_3^2$ 成为一类;

C_2 成为一类;

$3\sigma_v$ 成为一类;

$3\sigma_d$ 成为一类.

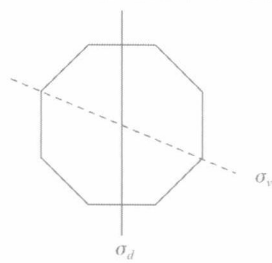


图 1.17

10. D_n,n=奇数

$$D_n(nC_n, nC_2\perp C_n),\quad g=2n$$

$n=3$,$D_3(E,C_3,C_3^2,3C_2(\perp C_3))$,$g=2\times3=6$.例如,部分旋转的乙烷 C_2H_6.

11. D_n,n=偶数

$D_2(E,C_2(z),C_2(y),C_2(x))$,$g=2\times2=4$,在图 1.18中,其中两个 H—C—H