群论及其在物理学中的应用导论

李新征

北京大学物理学院

前言

《群论》作为19世纪发展起来的一门近世代数的分支，在近代物理学研究中占据着举足轻重的位置。在我国物理学专业教学中，《群论》一般是物理学院部分专业研究生的一门必修课，对学有余力的本科生，也可选修。北京大学物理学院近年来一直使用两个学期完成来完成该方面教学，秋季学期开设《群论一》，春季开设《群论二》。《群论一》的任务是建立基本概念，重点讲解有限群，让学生理解群论在诸如凝聚态物理、光学等学科具体研究（如量子力学本征态标识、能带计算、光谱分析、全同粒子性质描述等）中的应用。《群论二》重点针对理论物理专业学生讲解李群与李代数。我的研究方向是凝聚态计算，在日常的科研中对群论这门数学工具（或者说是语言）的重要性具备一点了解。机缘巧合，从2012年进入北京大学物理学院工作起我又一直负责《群论一》的教学。教学过程中，我最深切地体会就是这门课程的**入门**以及在**讲授过程中建立起课程内容与学生以后从事研究的联系**对绝大部分同学是最关键的。只有入门后，深入理解才有可能，而此深入理解需要通过学习与科研工作相关的例子和科研本身来获得。

讲义整理过程中，我倾向于使用口语化的语言，与课堂讲解尽量一致。这样做主要有两个目的：对于上了课的学生，重复这个过程可加深课堂上的理解；对于错过几趟课的学生，也能提供一个补救的手段。除了这两个目的之外，自己从博士阶段开始，我作报告的习惯一直是报告前反复排练，避免讲解过程中由于语言组织的随意引起误解。对于不习惯此方式的同学，很抱歉(^v^)!

最后必须说明的是此讲义内容大量参考了田光善老师的手稿、韩其智与孙洪洲老师的教材以及王宏利老师的讲义，准确的说它是北京大学物理学院近些年

《群论一》课程教学讲义的一个整理。在前面六年的上课过程中，宿愿（人名）等同学就讲义给出过很多宝贵的修改意见，因为人数太多，无法一一列举。2016 年暑假，首都师范大学数学系的张俊老师花了很多时间阅读讲义并提出了诸多宝贵意见。在此一并感谢！

李新征

2018 年 9 月 7 日

课程导言

任何一门课开始的时候都会有一个课程导言，讲这门课的基本情况。这里不例外，我们按下面五句展开：

1）群论课程性质与特点；

2）教材情况与需要的基础知识；

3）教学内容；

4）什么是群论；

5）群论的历史以及在近代物理学、化学研究中的应用。

这部分是这门课最轻松的地方，因为有历史、不枯燥。但《群论》从**本质上是一门数学**，群、环、域这些概念本身就是近世代数里面的基本语言。随着代数的发展，群论本身更是在十九世纪末成为了近世代数的一个分支。二十世纪初，随着 Emmy Noether（诺特，女，1882-1935，德国犹太人）就一个物理系统的对称性与它的守恒量之间关系的认识（1915 年的工作，发表于 1918 年，原始文献[1]）、量子力学的发展、以及 Eugene Paul Wigner（魏格纳，1902-1995，匈牙利人，后期加入美国籍）和 Hermann Klaus Hugo Weyl（外尔，1885-1955，德国人）在建立量子力学数学基础的过程中对对称性原理的使用[2-4]，人们逐渐认识到群论作为一门数学在物理学研究中的作用。再后来物理学发展中人们所使用的规范场（gauge）的方法，是这些研究的进一步延伸（后面我们会稍微展开讨论）。因此，不夸张地说，群论学习是我们物理学专业学生在从事具体研究工作前所受基础教育中必不可少的环节。

在我们的兄弟学科化学上，在量子力学建立后，敏锐的理论化学家们，以 Linus Carl Pauling（鲍林）为代表，已经认识到化学分子的存在形式以及化学反

应的发生本质上是由量子力学与统计物理基本原理支配的。既然对称性在量子力学中具备上述重要性，与之相应，在描述由量子力学基本原理所决定的反应物、过渡态、生成物特性（比如电子能级、振动谱等）描述中，对称性原理的数学语言（即群论）必然也会发挥重要的作用。因此，在近代化学（特别是物理化学）的研究中，人们也认识到由对称性决定的内在规律对人们理解这些物性与过程的本质至关重要。换句话，要想真正地在分子设计的层面理解化学[1]，对称性的知识同样必不可少。

因为这些原因，**群论应该说是为数不多的这样一门课：在好一些的大学的数学系、物理系、化学系的课程设置中都有涉及**。当然，不同的系会有不同的侧重点。数学系会侧重这门课的数学属性，高一个层面，是我们在物理和化学中展开应用的基础。而物理和化学系的同学，如果想理解这些应用，必须首先理解这门课的数学基础部分（说白了就是掌握语言），再进行实例分析。物理系的同学，就专业不同，所需掌握内容也会不同。以凝聚态、光学专业的同学为例，需要掌握的内容绝大部分集中于有限群理论部分，当然也需要转动群与双群的知识，这些在《群论一》课程中均有涉及。如想进一步理解规范场理论（连续变换下的对称性与某守恒量的关系），李群也应适度学习。而对于理论物理专业的同学特别是粒子物理专业的同学，李群部分的内容掌握也是必需。化学学院中理论化学、物理化学专业同学所需掌握内容与物理学院中凝聚态物理、光学专业类似，以有限群部分内容为主。

[1] 化学的本质是分子设计，这个可以说是目前多数人对化学的理解。此理解最早的提出者应该也是 Linus Pauling 教授。北京大学化学学院的全称是化学与分子工程学院，其内在涵义也在这个地方。我想这个和唐有祺先生早期是 Linus Pauling 的博士应该有一定关系。此观点与化学学院的部分老师进行过交流，放在这里供大家参考。

不管哪个具体专业，要想理解群论在其关心的具体问题中的应用，**“掌握这些应用的数学基础”（具体而言就是“群基础理论”与“群表示理论”两部分内容）都是第一步**。因此，我们这门课的前 1/3 部分本质上就是数学性质的讲解。就课程特点来说这部分是比较枯燥的。如果没有学进去，到了后半部分我们讨论应用的时候，你就是在听一门没完全学过的外语。因此，必须说明：如果想学这门课的话，前面两章必须啃下，否则别学！

与此同时，在学习之前，笔者还需说明：既然我们把讲义叫《群论在物理学中的应用导论》，在后面的实例说明中，笔者一定会讲到一些我们现在物理学研究中用到的例子。理解这些例子，对于这门课的学习是和掌握理论基础同样重要的目标！因为没有这些例子，你不可能理解到学习这些东西有什么用？要掌握这部分内容，我们需要的课程储备是《量子力学》与《固体物理》，没有选过这两门课，也千万别看这本书和选这门课，**这个是由课程的特点决定的，需要尊重！**

关于教材，前三年我都是基于其他老师的教材手写自己的讲义，每年重复并更新。第四年把讲义的电子版整理出来，之后每年改进，但整体还比较肤浅。具体的、深入的讨论大家可以参考：

1. 韩其智、孙洪洲　《群论》　北京大学出版社

2. 王宏利　《群论讲义》　（未出版，网上可以找到）

3. 徐婉棠、喀兴林　《群论及其在固体物理中的应用》　高等教育出版社

4. M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio, 《Group Theory: Applications to the Physics of Condensed Matter》. Springer

5. Zhongqi Ma, 《Group Theory for Physicists》, World Scientific

这五本是课程主要参考如果想扩展阅读，也可参考：

6. 马中骐　　《物理学中的群论》　　科学出版社（上面那本书的中文版）

7. Anthony Zee, 《Group Theory in a Nutshell for Physicists》, Princeton University Press. （徐一鸿，科普读物中经常称为阿热，题目大意为：物理学家眼中的群论简言，in a nutshell 本意是：一言以蔽之，简约的）

8. Wu-Ki Tung (董无极) 《Group Theory in Physics》世图有影印版

9．F. Albert Cotton, 《Chemical Applications of Group Theory》, John Willey & Sons. Inc（化学家写的群论中的经典，对读者很友善）

10. 陶瑞宝　《物理学中的群论》　高等教育出版社（这本书很全，包含了很多群论在物理中的应用，理论性也很强）

11. 张端明、李小刚、何敏华　　《应用群论》　　科学出版社

12. 俞文海　　　《晶体结构的对称群》　　　科大出版社

其中阿热先生的书是在此讲义基本定型后才有幸研读，看完诸多体会。如果能早日看到，讲义本身质量应该会有很大提升。

前言的第三部分是课程的内容。主体是下面六章：1) 群的基础知识、2) 群表示理论、3) 点群和空间群、4) 群论与量子力学、5) 转动群、6) 置换群。其中前两章是基础，提供我们在进行后面的讨论的时候必须用到的“语言”，是我们的基本交流工具。在这两章学完之后，下面两个章节是 3) 点群与空间群，4) 群论与量子力学。其中点群、空间群是我们在分子、团簇、凝聚态体系中遇到的群，关于它们的性质自然是我们学习的重点。群论与量子力学这一章，在现行教课书中并没有一个统一的路子。但笔者认为**是我们这门课里最重要、最有用的部分**！大家学完这门课之后，有时间的话一定要不断地阅读和这部分相关的教科书（特别是 Dresselhaus 那本），这是加深我们对这门课理解的关键！此部分内容有点像

金庸小说中常提到的任督二脉，掌握好了，能在科研中合理运用群论，课程学习才成功，科研也会做得更好（Dresselhaus 本人就是一个最好的例子）。

剩下的两章，转动群不说大家也能感受到它的重要，早期的原子体系和很多现在还在用的中心力场理想体系都具备这样的对称性。此讲义主要关注的主体是有限群，转动群本质上是一个连续群，但它的一些最基本的属性我们在不学习《群论二》的情况下也能理解。如果你以后做和电子自旋相关的研究，背后的物理基本也在这部分内容中。置换群是一种有限群，也是在全同粒子体系普遍存在的一种对称群。我们的课程内容会覆盖到从置换群的基本特性、到其分类（杨图）、在到其不等价不可约表示分类（杨盘定理）、以及简单的如何求置换群的表示这些内容。对于不学理论物理的同学，一般我们用不上。对学理论并且要选《群论二》的同学，这些基本的理论储备应该也够，深入的讲解你们下个学期会接触。

上面说的课程内容都可以直接由章节的题目反映出来。大家如果看其它教材的话，其实还会注意到两个东西，我们目前还没有提及：一个叫**投影算符**、一个叫**幂等元**，这两者有些联系。在我们的讲义中，分别会在第四章和第六章用到之前作介绍，不单独把它们作为一章来讲。

导言的第四部分我们想说的是一个具体的问题：什么是群论？

要明白这个问题的话我们可以先想一下什么是“群论”中的“群”。这个对应的英语的词源是 group theory 中的 group，汉语的翻译很贴切，就是“群”这个字。汉字拆分，可以把它分为两个部分，一个“君”、一个“羊”，背后隐藏的一个逻辑就是一个君管理了一群羊。在这里羊是一个集合，而君不单指一个人，更代表一个管理者。他/她和羊在一起，大家可以理解为一个“具有一定结构特征的集合”，因为“君”这个管理者就是要给你这个集合建立一个结构特征，并且

要利用这个结构特征去实施管理的。而群论呢？很自然的就是：研究这个集合的结构特征及其生成的规律的一门学科。

根据这个理解，我们回到前面提到的课程内容，很自然，我们就可以简单理解一下刚才讲到的各章都是干什么的？

1. 群的基础知识：集合总体的结构特征及其规律；
2. 群表示理论：对这些规律进行数学描述要用到的数学语言（基础是线性代数）；
3. 点群、空间群：人们面对分子、晶体系统的时候，系统具有的对称性操作的集合。它们是我们在掌握前两章（群论的理论基础）后面对的第一类具体的群；
4. 群论和量子力学：群论在近代的物理、化学等学科研究中的应用；
5. 转动群：是中心力场系统的对称群（物理体系中的一类对称群）；
6. 置换群：是全同粒子系统的对称群（物理体系中的一类对称群）。

根据这个理解，我们同时还很容易明白群论从本质上而言是研究数的结构及其生成规律的，是数学，不是物理。我们物理研究的是物质运动的内在规律，一般先强调"物"，针对"物"来理解"理"。而群论这门学科发展的初期，是人们对一些"理"的认识，这些"理"是"数理"，不是"物理"。人们基于对这些"数理"的认识，建立起了一套理论。后来人们又逐渐意识到它在物理、化学上有很大的用途，才开始要求物理、化学这些专业背景的人来学习，以期对本学科中的问题有更深入的认识。

就教学而言，物理上教《群论》的老师分两拨。一拨是做得比较理论的老师。相应教材的特点是严格、抽象、深入。另一拨是做物质科学相关研究的，相应教

材比较直观、便于理解，但内容不包括《群论二》的部分。笔者的背景是后者，此讲义只希望将《群论一》讲清楚。

至此，《群论》是什么样的一门课大家应该有些概念了。但在学之前，出于好奇，可能我们还是想知道一下作为一门学科《群论》是如何发展起来的？它现在处在一个什么样的位置？这个就把我引到了我在引言中想解释的第五句话：**群论的历史以及在物理和化学中的应用。**

前面提到，群论是近世代数的一个重要的分支，它是在 19 世纪发展起来的。在发展的初期，数学上的另外三个分支是基础。这三个分支分别是：

1) 几何学，从 19 世纪开始，有个德国数学家，叫 August Ferdinand Möbius（莫比乌斯，1790-1865，德国人）。他在研究一些非欧几何的问题的时候，就开始使用了一些对称操作的概念。和莫比乌斯相关的另外一个我们现在用的比较多的概念是莫比乌斯环，就是把一个纸条连成环的过程中翻一下，这样的一个环和正常的环比起来就不再有 A、B 面了。这个概念在拓扑上比较有用；

2) 数论，这个是在 18 世纪下半叶，欧拉在研究数论中的模算术的时候，用到过一些群论中尚处在雏形阶段的概念；

3) 第三个基础是代数方程理论。应该说是它直接导致了群论作为一门学科的诞生。更准确地说就是人们在求解一元高次方程根式解的时候，引入了置换群的概念，进而建立起了群论这个理论体系。

现在，人们会认为由这三个方面研究所诱发出来的群论是近世代数（抽象代数）中很重要的部分，并把它作为十九世纪最伟大的数学成就来看待。

而关于这个学科诞生的细节很数学。想真正理解的话，需要对抽象代数这门课有深刻的认识（笔者自己曾经尝试着去看了一些，花了很大精力，但最后发现

这个确实超出能力范围)。这里跟大家分享的，只是一些 hand-waving(没有坚实的理论基础，试图显得有效，但并没有触及实质内容)的认识。

刚才提到，最直接的导致群论诞生的诱因是代数方程理论的发展。代数方程，大家都知道，一元一次的是 $ax+b=0$，一元二次的是 $ax^2+bx+c=0$。它们的解析根式解我们在中学的时候就学过。

一元三次方程和一元四次方程有没有和它们类似的根式解?

答案：有。

对一元三次和四次方程，早期人们是可以利用配方和换元的方法把它们变成低次方程来求解的。

比方说 $ax^3+bx^2+cx+d=0$ 这样一个式子，$a\neq0$。人们怎么做呢?

先换元，取$y=x+\frac{b}{3a}$，把它代入上式，企图把x的一般的一元三次方程变成y的一元三次方程。而这个y的一元三次方程，不再是一个一般的一元三次方程，而是具有特殊形式的一元三次方程。过程如下:

$$a\left(y-\frac{b}{3a}\right)^3+b\left(y-\frac{b}{3a}\right)^2+c\left(y-\frac{b}{3a}\right)+d=0$$

$$a\left(y^3-\frac{b}{a}y^2+\frac{b^2}{3a^2}y-\frac{b^3}{27a^3}\right)+b\left(y^2-\frac{2b}{3a}y+\frac{b^2}{9a^2}\right)+c\left(y-\frac{b}{3a}\right)+d=0$$

$$ay^3+\left(c-\frac{b^2}{3a}\right)y+\left(d+\frac{2b^2}{27a^2}-\frac{bc}{3a}\right)=0$$

二次项不见了，一元三次方程变成了 $y^3+py+q=0$，这里 p、q 都是由 a、b、c、d 确定的常数。而这样的一个特殊形式的一元三次方程，是有根式解的。这个里面有个故事，时间是 16 世纪，地点是意大利。当时在欧洲的数学界，去寻求一元三次方程的解是一个时尚，就像我们现在物理学界对高温超导机制的研究一

样[2]。因为当时的历史背景是文艺复兴（Renaissance），所以在学术上最活跃的地区很自然的就是意大利（大家可以去想，哥白尼、布鲁诺、伽利略这三个现代科学的鼻祖里，两个意大利人，一个哥白尼是波兰人，但基本在意大利生活）。代表人物有两个，Niccolo Fontana（冯塔纳，1499-1557）和 Girolamo Cardano（卡尔达诺，也叫卡丹，1501-1576）。传说第一个想出这个特殊方程根式解是冯塔纳，但此君比较喜欢通过故弄玄虚来显示自己的聪明，不把话说明，所以虽然当时有很多人相信他会解这个方程，但没有任何文献记录（当时的出版业并没有现在这么发达，不然一个 arXiv 就解决问题了）。而卡丹呢，比较低调务实，传说中他跟冯塔纳讨教过，这个冯塔纳用很隐晦的语言进行了提示，但他认为以卡丹的悟性根本理解不了。但结果是人家愣把它想明白了，并且在他的著作《大术》（Ars Magna，1545）中给了一些详细的解释。因为这个，现在我们在讨论一元三次方程的根式解的时候，想到的第一个人物往往是卡丹，只是在很少的文献中才会对当时冯塔纳的工作有所提及。上面那个特殊一元三次方程的解，人们也习惯于叫卡丹公式：

$$y_1 = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}}$$

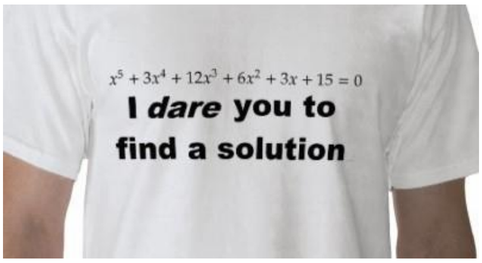
$$y_2 = \omega \cdot \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} + \omega^2 \cdot \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}}$$

$$y_3 = \omega^2 \cdot \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} + \omega \cdot \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}}$$

这个里面$\omega = -1 + \sqrt{3}i$。

[2]当时人们经常针对类似问题进行数学比武。

这个是关于一元三次方程根式解的故事。过程其实已经很麻烦了，不然不会让冯塔纳犯那个错误。对一元四次，之后人们又用相似方法做了努力，由卡丹的学生 Lodovico Ferrari（费拉里，1522-1565，意大利人）给出了根式解，这个结果也是在卡丹的那本 1545 年的《Ars Magna》里面发表的。那么五次、六次及其以上又是什么情况呢？同样，在 1545 年以后也继续成为欧洲数学界的时尚。但两百年过去了，却始终没有任何进展。



（这里强调的是解析解，不是数值解）

当这个问题有下一步进展的时候，也就到了我们《群论》作为一门学科出现的时候了。这个前后发展的时间有一百多年，从 1770 年代开始，到 19 世纪末结束。其中的代表人物包括 Joseph-Louis Lagrange（拉格朗日，1736-1813，意大利人，绝大部分时间工作在德国与法国）、Paolo Ruffini（鲁菲尼，1765-1822，意大利人）、Évariste Galois（迦罗瓦，1811-1832，法国人）、Niels Henrik Abel（阿贝尔，1802-1829，挪威人）、Arthur Cayley（凯莱，1821-1895，英国人）、Ferdinand Georg Fröbenius（费罗贝尼乌斯，1849-1917，德国人）、William Burnside（勃恩赛德，1852-1927，英国人）、Friedrich Heinrich Schur（舒尔，1856-1932，德国人）、Marius Sophus Lie（李，1842-1899，挪威人）这些数学家。其中前面这些人（到阿贝尔），他们工作的初衷是求一元五次方程的解，但结果是建立了群论。而后面这些人，从凯莱开始，他们的主要工作，就是完善这个由前人提出的理论了。这些名字以及与他们相关的定理，在后面的教学中我们会慢慢接触到。

怎么把解一元五次方程和《群论》这门学科联系起来，背后的道理其实很简单。前面我们提到了，在费拉里之后，两百多年，欧洲各位顶级的数学家都尝试着利用配方、换元这些数学手段去求四次以上方程的根式解，但都没成功。这种情况下，按科学规律而言，一般传统思维肯定就不行了。这个就像我们把自己关在一个屋子里，你的前辈科学家，各个聪明绝顶，他们把这个屋子的每个角落都进行了仔细的搜寻，都没有找到。这个时候你应该去意识到是不是这个屋子有另外一个维度你并不知道？你需要打破传统思维去找到这个维度？物理史上我们都知道的一个例子就是人们黑体辐射，在 19 世纪末 20 世纪初，传统经典的思想是怎么都不可能在长波和短波区域同时给出合理解释的。这个时候，人们就需要去拓展自己的思维了，而把思维扩展开来的这些人，就是我们眼中的天才了，比如普朗克（当然普朗克常数的产生更多的是数学上的处理，而不是思想深处的理解或信念)、比如爱因斯坦（大家一定不要受一些科普读物的误导，他实际上是量子力学发展最大的一个推动者之一，从思想层面。光电效应是他解释的，德布罗意的波粒二象性也是他最早支持的，这些都是突破思维定式的典型例子。只是在后期，他从一个数学物理学家的视角，不喜欢哥本哈根学派对量子力学的一些实用性解释。除了量子力学，狭义与广义相对论也是更典型的例子)。

在五次及其以上一元方程根式解的问题上，认识到这一点的最早的人物是拉格朗日。从拉格朗日，到鲁菲尼，到迦罗瓦与阿贝尔，他们做的事情是开始从数的结构，也就是常说的数论的角度去考虑这些问题了。具体而言，其中拉格朗日干的事情是利用置换的概念，去理解了三次和四次方程为什么有解；鲁菲尼干的事情是利用同样地思想去说明了五次方程不可代数求解。之后就是迦罗瓦和阿贝尔了，他们干的事情是彻底地在代数方程的可解性与其对应的置换群之间建立了

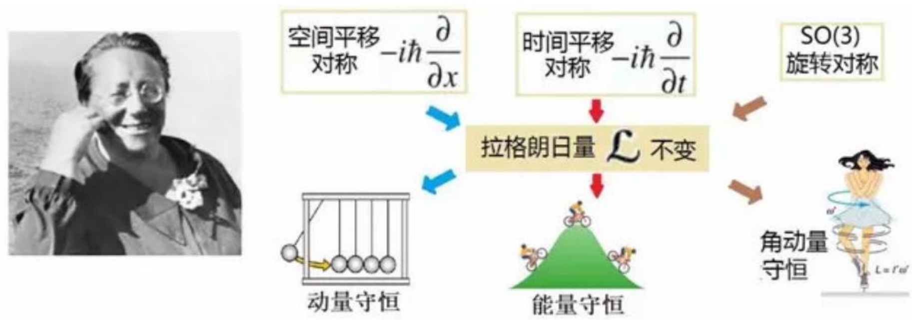
联系，指出了 n 次方程有解的充要条件，以及一般的五次方程没有根式解。在他们四个里面，前面两个是奠定基础的，迦罗瓦与阿贝尔是真正利用群这个概念去解决这个问题的。我们现在会把后面两个当作是《群论》这门学科的奠基人[3]。

在数学家建立了《群论》的概念体系之后，我们物理学家做了什么呢？我想比较有代表性的是下面三个方面的工作：

1. 几何晶体学的发展，晶体点阵、点群、空间群这些概念的诞生以及他们在晶体学中的应用。这个的主要发展时间是 19 世纪末、20 世纪初，代表人物是 Arthur Moritz Schöneflies（熊夫利，1853-1928，德国犹太人）、Carl Hermann（赫尔曼，1998-1961，德国人）、Charles Victor Mauguin（毛古因，1878-1958，法国人）。后面讲点群空间群的时候我们会讲到他们。
2. 对称性与守恒量之间的关系，这个代表人物是诺特，她是个典型的数学物理学家。她没得诺奖，不过这个不影响她本身的伟大。物以类聚，套用现在的语言就是如果用微信的话她朋友圈是爱因斯坦、希尔伯特这种

[3]建议到 wikipedia 去看一下这两个少年天才的生平。笔者在课上尽量介绍每个科学家的生平，就是希望我们在学习科学的同时，不要脱离科学家本身所处的时代背景。科学上重大进步的产生，都是以由科学家本身的时代背景、学科背景综合起来诱发的。学生时代应尽量了解这些，这样你才会对你的学科发展的规律产生一定的理解。只有理解了每个发现背后那些让人热血沸腾的故事与逻辑，你才能真正理解教科书上那些冷冰冰的文字背后的内涵。迦罗瓦被认为是浪漫主义天才的代表。传说他投稿三次，第一次的审稿人是柯西，第二次的审稿人是傅立叶，两次都没有发表，柯西让他把论文写的好懂一些，他没有听，傅立叶接到稿件没几天自己都挂了，第三次投稿的时候，迦罗瓦本人已经因为决斗牺牲了，他的朋友帮他投的，这次的审稿人是雅可比和高斯，但这些大佬其实没有时间仔细看。后来这个稿件又沉睡多年，在得到了刘维尔的肯定后最终发表。从这些审稿人，我们应该可以感受到 19 世纪法国数学的强大。阿贝尔生平最大的标签，除了天才，就是贫穷。他是挪威人，挪威在当时欧洲科学的版图中可以说是彻底的边缘。他自己本身很优秀，但找教职一直不顺。27 岁死于贫困与疾病，死后收到了柏林大学的聘书，令人唏嘘。）

人，她也被这些人称为数学史上最伟大的女性。诺特定理的基本内容是“any differentiable symmetry of the action of a physical system has a corresponding conservation law”，也可以说是任何一个保持拉格朗日量不变的微分算符，都对应一个守恒的物理量。下面这张图是我从《赛先生》上面 2015 年 6 月 20 号发的一篇文章上摘下来的（作者是 UT Austin 的张天蓉博士)，很形象得描述了这个规律：



比如空间平移对称性对应动量守恒、时间平移对称性对应能量守恒、旋转对称性对应角动量守恒，等等。这些规律我们现在其实是都把它们当常识了。它们究竟怎么来的？我们一会儿会用平移不变性对应动量守恒作为一个例子（经典力学范畴内的一个问题)，来个推导。

同时需要说明：我们目前都知道的 Gauge Theory（规范场论），应该说是沿着这条路继续的、更加深入的发展。它的基本思想是系统的 Lagrangian（拉格朗日量）在一个连续的局域变换（规范变换）下保持不变。规范这个词本意是 scale（伸缩因子)，但后来人们发现它的真实物理对应其实是相位。现代物理研究中，它通指拉格朗日量多余的自由度。不同规范间的变换(也就是我们常说的规范变换)，形成了一个可以解析表达的、具有微分流形性质的连续群，就是李群。在《群论二》，我们会学到每个李群都有自己的群生成元。而每个群生成元，会产生一个矢量场。这个

矢量场，就是规范场。这些对经典理论和量子理论都是成立的。在量子理论中，这个规范场的量子被称为规范玻色子。以我们最熟悉的电磁场为例，量子电动力学理论就是个阿贝尔的规范理论，它的阿贝尔的对称群是U(1)群，它的规范场就是由电势ϕ与磁势$\vec{A}$形成的四分量矢量场$\left(\phi, \vec{A}\right)$，它的规范玻色子就是光子。近年来应该说用规范场的理论去统一很多模型，比如量子力学、电动力学、量子色动力学，是物理学最大的挑战。群论在中间发挥着重要的作用。

3. 对称性在量子力学中的应用，这个代表人物是维格纳[2-3]。他也因为这方面的研究得了 1963 年的诺贝尔物理奖（1/2，另外两个人分那 1/2），他获奖原因，原话是“for his contributions to the theory of the atomic nucleus and the elementary particles, particularly through the discovery and application of fundamental symmetry principles”。

例 1．平移不变性与动量守恒

考虑一个封闭的力学系统，无外力，那么这个系统的运动方程是由其作用量（Action）决定的。这个 Action 是

$$\mathrm{I} = \int_{\mathrm{t}_1}^{\mathrm{t}_2} \mathrm{L}[\mathrm{q}(\mathrm{t}), \dot{\mathrm{q}}(\mathrm{t})]\, \mathrm{dt}$$

设 $Q(t)$这个函数是粒子的实际轨道，而 $\delta q(t)$是对这个实际轨道的偏移，那么，由最小作用量原理，我们知道对实际轨道有：

$$\frac{\delta I}{\delta q(t)} = \int_{t_1}^{t_2} \left\{\frac{\partial L}{\partial q(t)} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}(t)}\right\}\Big|_{q(t)=Q(t)} \mathrm{d}t = 0$$

对任意 t_1、t_2 成立。

既然它对任意 t_1、t_2 成立，自然就会有：

$$\left\{\frac{\partial L}{\partial q(t)}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}(t)}\right\}\Bigg|_{q(t)=Q(t)}=0$$

这样一个式子。这个式子就是牛顿方程（我们理解这个问题的第一步）。

现在引入平移不变性（第二步），对任意平移a，有

$$I[Q(t_2)+a,Q(t_1)+a]=I[Q(t_2),Q(t_1)]$$

这个式子左边为:

$$I[Q(t_2)+a,Q(t_1)+a]=\int_{t_1}^{t_2}L\big[Q(t)+a,\dot{Q}(t)\big]\mathrm{d}t$$

（平移不改变微分项），继续等于:

$$\int_{t_1}^{t_2}L\big[Q(t),\dot{Q}(t)\big]\mathrm{d}t+\int_{t_1}^{t_2}\frac{\partial L}{\partial Q(t)}\ a\ \ \mathrm{d}t+\Delta(\mathrm{a}^2)$$

而右边为:

$$I[Q(t_2),Q(t_1)]=\int_{t_1}^{t_2}L\big[Q(t),\dot{Q}(t)\big]\mathrm{d}t$$

等式对任意a、任意t_1、t_2都成立，所以有:

$$\frac{\partial L}{\partial Q(t)}=0$$

这个式子，代入运动方程，就有:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}(t)}=0$$

$\partial L/\partial\dot{Q}(t)$= 0，而$\partial L/\partial\dot{Q}(t)$对应动量，故由平移不变性可推出动量守恒。

现在数学说完了、物理说完了，前面我们提到，《群论》这门课是在一个正常的大学里面数学、物理、化学三个系都会开的。**化学家在我们这门学科的发展过程中起了什么样的作用呢**？应该说和我们物理学家同等重要。具体而言就是他们在将这个理论应用到具体物性研究中扮演了重要的角色。最具代表性的领域是理论化学，很关键的一个人物是鲍林（Linus Pauling）。这个人非常了不起，如果说他是最具影响力的几个化学家之一与最具影响力的理论化学家（没有之一），

应该不为过。他是第一个将量子力学基本原理、分子轨道、分子设计这些概念引入到化学研究中的人。也是我们现在公认的量子化学、分子生物学的开创人。

这里为什么要这样推崇鲍林呢？原因很简单，我们科学，往广义的说，就是用理性的观点去认知客观世界，这个理性的基本工具是数学。在我们认知的过程中，由于侧重点的不同，科学会分化出很多学科，比如物理、比如化学、比如生物。我们物理关注的是物质的存在形式与运动规律，化学关注的是不同物质放在一起的反应，而生物关注的是生命的行为。我们相互之间是不应该排斥的。以物理和化学为例，笔者在早期受教育的时候，始终认为它们是两个东西。直到做科研，才意识到现在的凝聚态物理的研究中其实是非常需要化学知识的；而同时量子化学，说白了，就是将量子力学基本原理应用到具体分子与凝聚态体系的行为描述中去。应该说是物理和化学两个大的学科的交融，才使得两者都发展到了目前的这个相当成熟的状态，而最早去推动这种交融的人，鲍林就是代表。这个人本身是个化学家，美国人，笔者认为对他科研影响最大的一段经历，应该是他在 1926-1927 年在欧洲游学的这个时候。在这里他接触到了 Arnold Sommerfeld（索末菲，1869-1951，德国人）、Niels Bohr（玻尔，1885-1962，丹麦人）、Erwin Schrödinger（薛定谔，1887-1961，奥地利人）等人。他在这里接受了量子力学的训练，之后他敏锐得意识到这个东西在化学中的应用，并且开始用这些原理去研究化学中的现象，比如分子轨道、分子振动谱，等等。这些都是我们目前的科学研究中运用群论的最为直接的例子，在后面我们会详细讲。在之前推荐的参考书中，Albert Cotton 的那本《Chemical applications of group theory》就是一个典型的化学家写的群论教材。相比于我们物理学家写的教材，会更实际、易读。

最后总结一下，我们这个学期要学习的群论，确实是人类文明在过去两百多

年间发展出来的一个精华，是我们认识我们所处在的这个世界本质的重要工具，在我们日常的科学研究中，起着非常重要的作用。此讲义内容为基础部分，说来简单，但要想学明白，也需要花费很大的功夫。因此，谨慎选课、认真对待!

目录

第一章 群的基本概念

1.1 群

定义 1.1（群）：设G是一些元素（操作）的集合，记为$\mathrm{G}=\left\{\cdots,\ \mathrm{g},\ \cdots\right\}$，在$\mathrm{G}$中定义了乘运算，如果$\mathrm{G}$中元素对这种运算满足下面四个条件：

1) 封闭性：$\forall$两个元素（操作）的乘积仍属于这类元素（操作）的集合；

2) 结合律：对$\forall$三个元素（操作）f、g、h，有$(\mathrm{fg})\mathrm{h}=\mathrm{f}(\mathrm{gh})$；

3) 有唯一单位元素 e，使得对$\forall\mathrm{f}\in\mathrm{G}$，有$\mathrm{ef}=\mathrm{fe}=\mathrm{f}$;

4) 对$\forall\mathrm{f}\in\mathrm{G}$，存在且唯一存在$\mathrm{f}^{-1}$属于 G，使$\mathrm{f}^{-1}\mathrm{f}=\mathrm{ff}^{-1}=\mathrm{e}$;

这时我们称G是一个群，e为其单位元素，f^{-1}为f的逆。

去理解这个定义，我们先看一些例子。

例1.1. 一个集合有两个操作E和I，E作用三维欧式空间中任一向量$\vec{\mathrm{r}}$上，得到$\vec{\mathrm{r}}$本身，I作用这个$\vec{\mathrm{r}}$上，得到$-\vec{\mathrm{r}}$。问$\left\{\mathrm{E},\ \mathrm{I}\right\}$是否形成一个群？

考虑这种问题的时候，就去想群的定义。两个元素，操作组合有 4 种，$\mathrm{E}\cdot\mathrm{E}$、$\mathrm{E}\cdot\mathrm{I}$、$\mathrm{I}\cdot\mathrm{E}$、$\mathrm{I}\cdot\mathrm{I}$，其中任何一个作用到$\vec{\mathrm{r}}$上，结果不是$\vec{\mathrm{r}}$就是$-\vec{\mathrm{r}}$，所以效果与$\mathrm{E}$或者$\mathrm{I}$作用到$\vec{\mathrm{r}}$上一致，封闭性满足。

结合律，类似$(\mathrm{E}\cdot\mathrm{I})\cdot\mathrm{E}\ =\mathrm{E}\cdot(\mathrm{I}\cdot\mathrm{E})$的关系对于这三个位置怎么填都成立。

唯一单位元素E。

逆元素，E的逆是E，I的逆是I。

所以$\left\{\mathrm{E},\ \mathrm{I}\right\}$形成一个群，称为空间反演群。

例2. 这样一系列操作的集合，它们中每一个操作，都把 1、2、……、n 这 n 个数，一对一的对应到 1、2、……、n 这 n 个数上。比如

$$P=\begin{pmatrix}1 & 2 & \dots\dots & \mathrm{n}\\ \mathrm{m}_1 & \mathrm{m}_2 & \dots\dots & \mathrm{m}_\mathrm{n}\end{pmatrix} \qquad (2.1)$$

就是把 1、2、……、n 对应到m_1、m_2、……、m_n上，其中m_1、m_2、……、m_n是 1、2、……、n 的任意排列。

注意，在这个标记中$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots\cdots & n \\ m_1 & m_2 & \cdots\cdots & m_n \end{pmatrix}$与$\begin{pmatrix} 2 & 1 & \cdots\cdots & n \\ m_2 & m_1 & \cdots\cdots & m_n \end{pmatrix}$是一样的，因为它们的效果都是把 1 变为$m_1$、2 变为$m_2$、⋯（以此类推）

现在我们来看这样的操作的集合是否形成群?

1．封闭性：不管怎么变，1、2、……、n 这 n 个数都是变到这 n 个数上，封闭性满足;

2．结合律：设 P_1 是把 1 变为 2，P_2 是把 2 变为 3，P_3 是把 3 变为 4，那么

$$(P_1P_2)P_3=[(1\to2)(2\to3)](3\to4)=(1\to3)(3\to4)=(1\to4) \quad (2.2)$$

$$P_1(P_2P_3)=(1\to2)[(2\to3)(3\to4)]=(1\to2)(2\to4)=(1\to4) \quad (2.3)$$

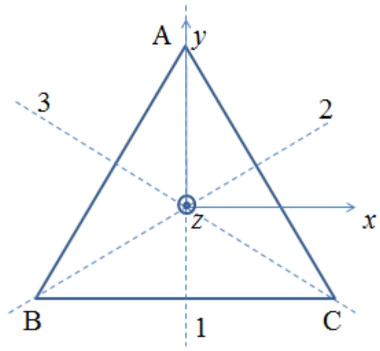
两者相等，结合律成立

3．单位元：有且唯一，什么都不变的那个操作

4．逆：存在且唯一，你变过去我再变回来

所以这些元素的集合也构成一个群，我们称为 n 阶置换群，它的群元的个数是 n!。在物理上，处理全同粒子体系的时候，会经常用到这一类群，我们后面会专门介绍。

例3. 是个几何图形的对称性，有三维欧式空间的一个正三角形，顶点是 A、B、C。



（图 1：D3 群示意图）

对于这样一个三角形，它有六个纯转动可以使自身回到自身的操作，分别是：

1. e：不动；
2. d：绕 z 轴转 2π/3；
3. f：绕 z 轴转 4π/3；
4. a：绕 1 轴转 π；
5. b：绕 2 轴转 π；
6. c：绕 3 轴转 π；

现在问：这六个操作是否形成群？

这个答案肯定还是按我们上面的思路来走，看它是否满足那四个条件？

但与此同时，我们还可以借用一下前面讲的置换群的概念，因为这些操作无非是将（A、B、C）对应到（A、B、C）上去，而这六个几何操作有恰恰和三阶置换群的六个变换一一对应。因此它们形成一个群。

既然形成一个群，现在我们看它们的乘法关系。d 操作干的事情是$\begin{pmatrix} A & B & C \\ B & C & A \end{pmatrix}$，而 a 操作干的事情是$\begin{pmatrix} A & B & C \\ A & C & B \end{pmatrix}$，因此：

$$d \cdot a = \begin{pmatrix} A & B & C \\ B & C & A \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A & B & C \\ A & C & B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B & C \\ A & C & B \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} A & C & B \\ B & A & C \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B & C \\ B & A & C \end{pmatrix} = c$$

(2.4)

重复类似运算，可得完整乘法表：

	e	**d**	**f**	**a**	**b**	**c**
e	e	d	f	a	b	c
d	d	f	e	c	a	b
f	f	e	d	b	c	a
a	a	b	c	e	d	f
b	b	c	a	f	e	d
c	c	a	b	d	f	e

（表 1：D3 群乘法表）

这样一个群叫 D_3 群，它是图形中的三角形的**纯转动群**，当我们除了转动还包含反射、反演这些操作的时候，群元就会再多一些，群也不是这个 D_3 群了。这里的 D_3 群只包含转动操作。

例4. 定义群的乘法为数的加法，则全体整数构成一个群，0 是其中的单位元素，n 与−n 互逆。

同理，全体实数也在这个乘法规则下构成一个群，全体复数也是。

但如果我们把乘法定义为数乘，那么它们就不再是群了，因为这种情况下单位元素只能是 1，而 0 是没有逆的。

现在我们知道群是定义了乘法且满足一定规律的元素的组合，下面我们看一下跟群相关的两个定义与一个定理。

定义 1.2 有限群与无限群：群内元素个数称为群的阶，当群阶有限时，称为有限群，当群阶无限时，称为无限群。（这个学期我们主要讲有限群）

定义 1.3 Abel 群：群的乘法一般不可交换（这个在群的定义里面没有体现，因此在一般的群中也不需要遵守，比如 D_3 中 ad 就不等于 da），当群中元素乘法可以

任意互换时，这个群称为 Abel 群。（由这个定义我们很容易想象 Abel 群的乘法表都应该是相对于对角线对称的）

定理 1.1 重排定理：设$G=\left\{\cdots, g_\alpha, \cdots\right\}$，对$\forall u\in G$，当$g_\alpha$取遍$G$中所有元素时，$ug_\alpha$给出且仅仅一次给出$G$中所有元素。

证明：

两个方面，1)任何G中元素都可以由ug_α给出，2)仅仅一次给出。

1. 给出。对任意g_β属于G，可取$u^{-1}g_\beta\in G$，使得：$u\left(u^{-1}g_\beta\right)=g_\beta$
2. 仅仅一次给出。

   反证：设有$g_\alpha\neq g_{\alpha'}$，使得$ug_\alpha=ug_{\alpha'}$，那么就会有：$u^{-1}ug_\alpha=u^{-1}ug_{\alpha'}$，进而$g_\alpha=g_{\alpha'}$，与假设矛盾。

至此，第一节结束。四个内容，三个定义（群，有限、无限群、Abel 群），一个定理（重排）。这些讲的都是群本身的性质，不牵扯其内部结构。既然要理解群这个元素集合的结构特性，对其内部结构的认识不可避免。下面的内容很自然与内部结构有关，子群与陪集。

1.2 子群与陪集

定义 1.4 子群：设 H 是群 G 的一个子集（部分元素的集合），若对群 G 相同的乘法运算，H 也构成一个群，则称 H 为 G 的子群。

这里需要注意的地方是和 G 相同的乘法。同时，上面我们定义群的时候，用了四个条件。原则上，定义子群也需要这四个条件 1) 封闭性、2) 结合律、3) 单位元、4) 每个元素唯一逆。但因为 H 属于 G，又是相同的乘法，所以结合律自然成立。同时，如果 4)满足，则有f属于 H 时，f^{-1}也属于 H，只要封闭性成立，e 自然属于 H。因此，在证明子集为子群时，只要 1)与 4)成立就可以了。

显然$\{e\}$与 G 本身都是 G 的子群，由于太明显，所以称为显然子群，或平庸子群。而群 G 的非平庸子群称为固有子群。一般我们找群 G 的子群的时候找的是它的固有子群（非平庸子群）。

例5. n 阶循环群，它的定义是$a^n = e$，由$\left\{a、a^2、\cdots、a^{n-1}、a^n = e\right\}$组成。这样的群是 Abel 群，乘法可易。以 6 阶循环群为例，$G = \left\{a、a^2、\cdots、a^5、a^6 = e\right\}$，其中$\{e\}$与$G$是显然子群。$\left\{a^2、a^4、e\right\}$与$\left\{a^3、e\right\}$为固有子群。

例6. 在定义群的乘法为数的加法的时候，整数全体形成的群是实数全体形成的群的子群。

例7. 绕固定轴$\vec{k}$转动的元素形成的群$\{C_{\vec{k}}(\Psi)\}$，是绕轴上某一点转动（过这点可以有无数个轴）的群 SO(3)群的子群。

定义 1.5 群元的阶：对任意一个有限群G，从中取一个元素a，从a出发作幂操作，总是可以构成G的一个循环子群Z_k的，这个Z_k等于$\left\{a、a^2、\cdots、a^{k-1}、a^k = e\right\}$，这时称$k$（满足这个性质的最小的$k$）为群元$a$的阶。

这个概念很好理解，但有个地方需要说明一下，就是你凭什么说“从a出发，总能构成G的一个循环子群的”？这是因为如果$a = e$，则Z_k等于$\{e\}$，问题解决。如果，$a \neq e$，则$a^2 \neq a$（不然$a = e$），这时，如果$a^2 = e$，则问题又解决了。如$a^2 \neq e$，则它必为e与a之外的另一个元素，我把a^2、a放到我的子集中，继续做a^3，同样$a^3 \neq a^2$（不然$a = e$）、也不等于a（不然$a^2 = e$），如果$a^3 = e$，问题解决，如$a^3 \neq e$，再把a^3放到那个子集中。依次类推，因为G是有限群（阶为n），所以必然存在一个k小于等于n，使得$a^k = e$，来结束这个过程。这时，$\left\{a、a^2、\cdots、a^{k-1}、a^k = e\right\}$这个集合自然就形成了$k$阶循环子群了。

例8. 群元的阶的例子，对 D_3 群，六个元素e、d、f、a、b、c。对d，从它出发，

$d^2 = f$，$d^3 = e$，所以由d形成的循环子群是$\{e、d、f\}$，d的阶是3。

对f，$f^2 = d$，$f^3 = e$，所以由f形成的循环子群也是$\{e、d、f\}$，f的阶也是3。类似，a，$a^2 = e$，由a出发形成的循环子群是$\{e、a\}$，a的阶是 2；b，$b^2 = e$，由b出发形成的循环子群是$\{e、b\}$，b的阶是2； c与a、b一样。

说完了子群与群元的阶，下一个概念是陪集。

定义 1.6 陪集：设H是群G的子群，$H = \{h_\alpha\}$，由固定的$g \in G$，可生成子群H的左陪集：$gH = \{gh_\alpha | h_\alpha \in H\}$，也可生成子群H的右陪集：$Hg = \{h_\alpha g | h_\alpha \in H\}$。

这个定义做两点说明。一是当H是有限子群时，陪集元素个数等于H的阶。因为不可能存在$h_\alpha \neq h_{\alpha'}$但$gh_\alpha = gh_{\alpha'}$或$h_\alpha g = h_{\alpha'} g$的情况。也就是说子群中元素与陪集中元素一一对应。二是根据这个定义，陪集可以为子群本身。如果上面取的$g \in H$，就是。如果不属于，就不是。关于子群和陪集，除了这两点，还有一个很重要的性质，就是陪集定理。

定理 1.2 陪集定理：设群H是群G的子群，则H的两个左（或右）陪集或者完全相同，或者没有任何公共元素。

换句话说，对于一个群G，如果它按照其子群H来进行分割：$G = \{g_0H、g_1H、g_2H、\cdots\}$，$g_0 = e$，其中任意两个陪集$g_iH$与$g_jH$的关系是它们要么完全相同，要么根本没有任何公共元素。

证明：（以左陪集为例）

设uH、vH是不同陪集。

再假设uH与vH中间有一个公共元素$uh_\alpha = vh_\beta$，则有$v^{-1}uh_\alpha = h_\beta$，进而$v^{-1}u = h_\beta h_\alpha^{-1}$，$v^{-1}u \in H$。

这个时候，由于H本身是个群，所以由重排定理知道$v^{-1}uH = H$，那么$v(v^{-1}uH)$自然等于vH。而同时$v(v^{-1}uH) = uH$。也就是说uH=vH，与假设矛盾。

（证毕，右陪集证明类似）

有了这个性质，我们在面对一个群的时候，按照它的一个子群和这个子群的陪集去进行分割，我们会得到什么？

群是G，子群是H，它本身就是一个陪集。除了H，我们可以再取$u_1 \in G$，但$\notin H$，建一个H的陪集u_1H，这个u_1H与H是没有任何公共元素的，因为如果$u_1h_\alpha = h_\beta$，则$u_1 = h_\beta h_\alpha^{-1}$，与$u_1 \notin H$矛盾。这时可以将G写为H、$u_1H$、以及它们以外的元素的集合。这个时候在继续取$u_2$属于G，但它不属于H，也不属于$u_1H$。做陪集$u_2H$，$u_2H$中的$u_2$不在eH中，也不在$u_1H$中，所以$u_2H$与eH、$u_1H$完全不同。

依次类推，设G的阶是n，H的阶是m。则每个陪集给出的都是全新的m个群G中的元素。重复这个过程，直到把G中元素穷尽。那么这个H的陪集的个数就应该是n/m。这个n/m必须是个整数，这也就意味着子群H的阶m必为群G的阶n的因子。这个性质就是我们的第三个定理。

定理1.3 拉格朗日（Lagrange）定理：有限群子群的阶，必为群阶的因子。

由这个定理，我们再去分析D3群的子群，我们说过它的子群有{e}、G、{e、d、f}、{e、a}、{e、b}、{e、c}，这些子群的阶分别是1、6、3、2、2、2，都是6的因子。用{e、d、f}来分割群的话，G={{e、d、f}、a{e、d、f}}，其中a{e、d、f}对照前面的乘法表，给出的恰恰是{a、b、c}。

至此，前两节结束。讲了六个定义：1) 群，2) 群的阶、有限群、无限群，3) Abel群，4) 子群，5) 循环子群与群元的阶，6) 陪集。三个定理：1) 重排定理，2) 陪集定理，3) 拉格朗日定理。在导言里面我们提到群是一个有结构的元素的

集合，这三个定理是最基本的结构性质，以后很多定理的证明都会用到。第二节讲的子群和陪集是群中元素结构关系的一个方面，下面一节要讲的类与不变子群是其另一个方面。

1.3 类与不变子群

此节中，类与不变子群是我们要重点阐明的概念。理解它们需要一个基础，这个基础是共轭。

定义 1.7 共轭：所谓共轭，指的是群G中两个元素f、h，如果在G中存在一个g，使得f、h可以通过$gfg^{-1}=h$联系起来，则称f、h共轭，记为$f\sim h$。

由此定义，我们首先知道共轭是相互的。因为如果$gfg^{-1}=h$，则$g^{-1}hg=f$，也就是$g^{-1}h(g^{-1})^{-1}=f$，其中$g^{-1}\in G$。其次，我们知道共轭有传递性，也就是说$f_1\sim f_2$，$f_2\sim f_3$，则$f_1\sim f_3$，为什么？因为由$f_1\sim f_2$，我们知道，一定存在$g\in G$，使得$gf_1g^{-1}=f_2$。而由$f_2\sim f_3$，我们又知道一定存在$h\in G$，使得$hf_2h^{-1}=f_3$。把第一个式子代入第二个，就会有$hgf_1g^{-1}h^{-1}=f_3$，进而$hgf_1(hg)^{-1}=f_3$。而hg是属于 G 的，所以$f_1\sim f_3$。

由此传递性，我们可以去定义类。

定义 1.8 类：群 G 中所有相互共轭的元素形成的集合，称为群 G 的一个类。

由于共轭关系的传递性，我们知道一个类是可以被其中任何一个元素所确定的。这个有些像现实生活中的犯罪团伙，逮着一个，其他的也就差不多了。此比喻不一定准确，但有相似的地方。

而就由类中任何一个元素确定这个类的操作步骤而言，很简单，对一个类中元素f，取任意g属于 G，做操作gfg^{-1}。当g走遍 G 中所有元素的时候，那么 f 的所有同类元素，没跑，就一个个全出现了。（地毯式搜捕）

由这个共轭关系和类的定义，我们还可以得出：

1) 一个群中的单位元素自成一类，因为对任意 f 属于 G，$fef^{-1}=e$；

2) Abel 群的所有元素都自成一类，因为对任意 f 属于 G，取任意 h 属于 G，做 $hfh^{-1}=hh^{-1}f=f$；

3) 设群元素 f 的阶为 m，即$f^m=e$，则与它同类的元素的阶也为 m。这是因为它的同类元素可以写为gfg^{-1}，对于这个元素，$(gfg^{-1})^k=gf^kg^{-1}$。当 k<m 时，f^k不等于 e，所以gf^kg^{-1}也不可能为 e，因为如果它为 e，就有$f^k=e$，与已知矛盾。而 k=m 时，$gf^kg^{-1}=geg^{-1}=e$，所以gfg^{-1}的阶为 m。

最后要说明的，是按类分割群和按陪集分割群是分割群的两种方法。按陪集分割时，群元会被等分为若干部分，但按类就不一定了。同时在用gfg^{-1}找f的同类元素时，g 取不同值，gfg^{-1}可不止一次给出同一元素，比如找单位元的同类元素时，g 不管取什么，gfg^{-1}给出的都是 e。

跟类相关的第一个定理是关于类中元素个数的，跟 Lagrange 定理有像的地方，内容如下。

定理 1.4 有限群的每个类中元素的个数都是群阶的因子。

（定理很简单，证明稍微有些麻烦）

证明：（分三步）

我们要找的是由 g 这个任意元素确认的类中元素的个数。

第一步，先证明所有与 g 互易的元素 h 形成一个 G 的子群，记为H_g，这个根据子群的定义，只需证明封闭和有逆就可以了。

封闭：如$h_1g=gh_1$，$h_2g=gh_2$，则$h_1h_2g=h_1gh_2=gh_1h_2$，也就是说h_1h_2属于也这个集合。

有逆：如$hg = gh$，则$h^{-1}hg = g = h^{-1}gh$，进而$gh^{-1} = h^{-1}g$，h^{-1}也属于这个集合。

两个结合，所有与 g 互易的元素形成群 G 的一个子群，记为H_g。

第二步，根据拉格朗日定理，我们可以把群 G 按照H_g的陪集，分割为$\{g_0H_g$、g_1H_g、g_2H_g、……$\}$。这里取g_0为 G 中单位元素。

现在我们要证明的是每个陪集中元素g_ih_α，在h_α取遍H_g中所有元素，也就是g_ih_α取遍这个陪集中所有元素的时候，$g_ih_\alpha g(g_ih_\alpha)^{-1}$给出同一个 g 类中元素$g_igg_i^{-1}$，且不同陪集给出的类中元素不同。

这个证明是两个方面:

1) 同一陪集同一元素，对陪集中任意元素g_ih_α，做$g_ih_\alpha g(g_ih_\alpha)^{-1}$，由于$h_\alpha$于 g 互易，结果都是$g_igg_i^{-1}$。

2) 不同陪集不同元素，g_iH_g与g_jH_g两个陪集，给出元素为$g_igg_i^{-1}$与$g_jgg_j^{-1}$。如$g_igg_i^{-1} = g_jgg_j^{-1}$，则有$g_j^{-1}g_igg_i^{-1} = gg_j^{-1}$，进而$g_j^{-1}g_ig = gg_j^{-1}g_i$，这也就是说$g_j^{-1}g_i$属于$H_g$。这样，由重排定理知道$H_g$=$g_j^{-1}g_iH_g$，进而$g_iH_g = g_jH_g$，与已知它们为两个不同陪集矛盾。因此，不同陪集做共轭操作给出不同类中元素。

第三步，G 中有 n 个元素，H_g阶为 m，我们按H_g做陪集分解会有 n/m 个子群与陪集。每个陪集给出一个 g 的同类元素，一共是 n/m 个。这也就是说 g 的类中元素个数为 n/m。n/m 显然是 n 的因子。

现在我们再来回味一下之前说的两句话，1) 一个群的单位元素自成一类，2) Abel 群中每个元素自成一类。对于这两种情况，上面证明中用到的H_g就是群 G 本身，所以 m=n，n/m=1。这个类中只有一个元素。

上面说的共轭、类的概念的对象都是元素。在《子群和陪集》那一节，我们

知道群中我们研究的对象除了元素，还有子群。因此，做个类比，上面提到的群元素共轭的概念原则上也可以推广到子群之间。

定义 1.9 共轭子群：设 H 和 K 是群 G 的两个子群，若存在 g 属于 G，使得$K=gHg^{-1}=\{ghg^{-1}|h\in H\}$。这时，称 H 和 K 是共轭子群。

由这个定义，我们知道：1) 两个共轭的子群里面必有同类的元素；2) 与元素共轭的传递性类似，子群共轭也有传递性。同时，与群元可以按类进行划分一样，{{e}、{g_1、g_2}、{g_3、g_4、g_5}、…..}，群的子群也可以按共轭子群类来进行划分。比如，上例中，{e}自成一个共轭子群类，{e、g_1}、{e，g_2}是一个共轭子群类，等等。这些概念比较繁琐，有些教材中会提到，但后面用到的地方不多，我们这里稍微提一下。在类和子群的概念的结合中并不繁琐，同时我们以后也非常多用到的一个概念是不变子群，我们重点讲解。

定义 1.10 设 H 是 G 的子群，如果 H 中所有元素的同类元素都属于 H，则称 H 是 G 的不变子群（数学上一般称为正规子群）。

不变子群是一种特殊的子群，它有一个非常重要的性质。

定理 1.5 设 H 是 G 的不变子群，那么对任意固定的 f 属于 G，当h_α取遍 H 中所有元素的时候，$fh_\alpha f^{-1}$给出且仅仅一次给出 H 中所有元素。

（这里对 f 的要求是 f 是任意一个属于 G 的**固定**元素即可，没要求它一定不属于 H。f 定了，$fh_\alpha f^{-1}$就一对一得给出 H 中所有元素。）

证明：（两步）

第一步，对任意h_β属于 H，都可以由$fh_\alpha f^{-1}$给出。这个很简单，因为 H 是不变子群，所以取$h_\alpha=f^{-1}h_\beta f$，则$fh_\alpha f^{-1}$就给出h_β，而这个$h_\alpha=f^{-1}h_\beta f$，属于 H 的。

第二步，属于 H 的不同的h_α、h_β，$fh_\alpha f^{-1}$与$fh_\beta f^{-1}$不同。这个很显眼，因为如果

$fh_\alpha f^{-1}$与$fh_\beta f^{-1}$相同，则h_α、h_β相同，与假设矛盾。

（证毕）

说了半天道理，现在看几个例子。

例9. 以加法为群的乘法，之前说过，有整数群，有实数群。我们也说过整数群是实数群的子群，现在看它是不是实数群的不变子群。

标准只有一个，就是看子群的同类元素是否属于这个子群。n，它的共轭元素是 a+n-a=n 本身，属于整数群，所以是不变子群。

实际上，所有 Abel 群的子群都是其不变子群。因为每个元素自成一类，其同类元素自然在这个子群中。

关于不变子群，还有一个很重要的性质。

定理 1.6 不变子群的左陪集与右陪集是重合的。

证明：

利用定理 1.5，说的是 $fHf^{-1}=H$，那么 fH=Hf（证毕）。

这样的话对于不变子群，我们在说陪集的时候，就不用说左陪集或右陪集，直接说陪集就可以了。除了上面那个性质，不变子群的陪集还有另外一个更加重要的性质，就是两个（非子群的）不同陪集中元素的乘积，必为第三个陪集中的元素。

这个说的是什么呢？就是 H 是 G 的不变子群，由 H，可将 G 分解为 G={g_0H、g_1H、g_2H、…}。这样的话在这一系列的陪集中，取g_iH与g_jH这两个陪集中的元素g_ih_α与g_jh_β相乘，结果是这样的：当g_iH与g_jH都不是g_0H时，必属于g_iH与g_jH外的另一个陪集；当g_iH、g_jH其中一个是g_0H时，必属于g_iH与g_jH中的另一个；g_iH与g_jH都是g_0H时，必属于g_0H。

这里后两种情况很明显，第一种情况需要证一下。

证明：（反证法）

$g_i h_\alpha g_j h_\beta = g_i g_j g_j^{-1} h_\alpha g_j h_\beta = g_i g_j h_{\alpha'} h_\beta$，我们把$g_i g_j H$这个陪集记作$g_k H$。

现在设$g_k H = g_i H$，这个会导致$g_i g_j h_{\alpha'} h_\beta = g_i h_\gamma$，进而$g_j = h_\gamma h_\beta^{-1} h_{\alpha'}^{-1}$。再由 H 是子群，得$g_j$属于 H，这样就与已知$g_j$不属于 H 矛盾了。

同理，如果$g_k H = g_j H$，就会有$g_i g_j h_{\alpha'} h_\beta = g_i h_\alpha g_j h_\beta = g_j h_\gamma$。这样的话，就有$g_i h_\alpha g_j h_\beta g_j^{-1} g_j = g_j h_\gamma$，进而$g_i h_\alpha h_{\beta'} g_j = g_j h_\gamma$，进而$g_i h_\alpha h_{\beta'} = g_j h_\gamma g_j^{-1} = h_{\gamma'}$，进而$g_i$属于 H 了，同样与已知矛盾。

（证毕）

这样的话，根据上面提到的三种情况的性质，我们可以定义一个基于不变子群的商群。

定义 1.11 商群：设群 G 有不变子群 H，由 H 将 G 分为{g_0H、g_1H、g_2H、⋯、g_iH、⋯}，把其中每个陪集看成一个新的元素，并由两个陪集中元素相乘得到另一陪集中的元素，定义新的元素乘法，即：

陪集串 →	新元素
$g_0 H$	f_0
$g_1 H$	f_1
$g_2 H$	f_2
⋮	⋮
$g_i H$	f_i
⋮..	⋮

乘法规则对应关系：

$$g_i h_\alpha g_j h_\beta = g_k h_\gamma \qquad\qquad f_i f_j = f_k$$

这样得到的群{f_0、f_1、…、f_i、…}称为 G 对其不变子群 H 的商群，记为 G/H。

说白了，就是把每个陪集当成一个新的元素，形成的新的结构。在导言的时候，我们说过群论研究的是集合的结构特征及其生成规律，这里的不变子群与其商群，就是群结构特征的一个典型的例子。我们可以把商群当成是群本身，以不变子群及其陪集为基本单元的一种超结构。

关于这些概念，我们还是通过一个例子来作具体的理解。

例10. D3 群，它的元素是{e、d、f、a、b、c}，乘法表见前面的表 1，借助乘法表，先看它的分类情况。任何群，{e}自成一类。$a^{-1}=a$、$b^{-1}=b$、$c^{-1}=c$、$d^{-1}=f$、$f^{-1}=d$。

对 a，其同类元素有：$d^{-1}ad=fad=fb=c$、$f^{-1}af=daf=dc=b$、$a^{-1}aa=a$、$b^{-1}ab=bab=bd=c$、$c^{-1}ac=cac=cf=b$。因此，a 的同类元素有 b、c。它们的阶都是 2，也形成一个类。

同理，d 的同类元素是 f，它们阶都是 3，形成一个类。D3 群有三个类。

之前我们讲过，它的子群有{e}、G、{e、a}、{e、b}、{e、c}、{e、d、f}。

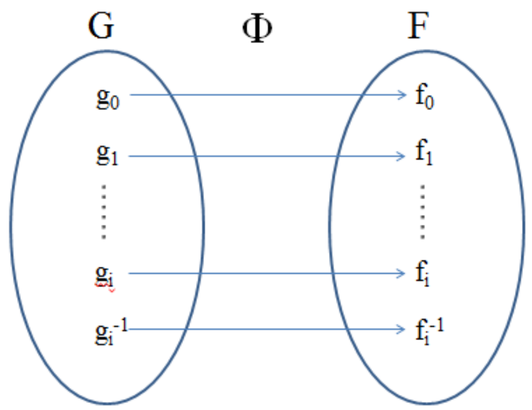
其中，不变子群有{e}、G、{e、d、f}，只有最后一个非平庸，记为 H。再由 H，可把 G 分解为{H、aH}，作对应 H 对 f_0，aH 对 f_1，商群 G/H，就是一个由{f_0、f_1}组成的二阶循环群。

1.4 同构与同态

到目前为止，我们讲的都是群自身的结构。群与群之间，也有结构关系。这节要讲的同构与同态，说的就是这个。

定义 1.12 若从群 G 到群 F 上，存在一一对应的满映射Φ，且这个映射本身保持群的乘法运算规律不变，也就是说 G 中两个元素乘积的映射，等于群 G 中两个元素映射的乘积，则称群 G 与群 F 同构，记作 G≅F。映射Φ称为同构映射，它

的作用是：



（图 2：同构示意图）

把单位元素映射到单位元素，把互逆元素映射到互逆元素，不然，结构就破坏了，一一对应关系也会不成立。从数学角度，两个同构的群有完全相同的结构，没有本质的区别。

例11. 空间反演群{E、I}与二阶循环群{e、a}完全同构。

例12. 三阶置换群与 D3 群完全同构。

例13. 群 G 的两个互为共轭的子群H与K，由定义，是存在一个固定的 g 属于 G，使得对任意的$h_\alpha \in H$，都有$k_\alpha = gh_\alpha g^{-1} \in K$与之对应。这个对应关系是一对一的，同时单位元素对应单位元素，互逆元素对应互逆元素。所以同一个群的两个共轭子群同构。

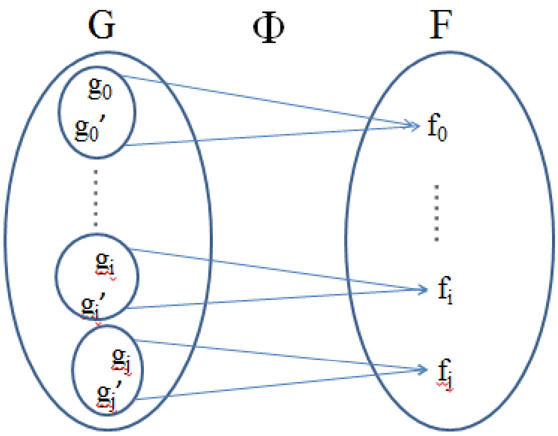
比如 D3 群，有三个子群{e、a}、{e、b}、{e、c}，它们相互共轭，{e、c}=f{e、a}f^{-1}，它们也相互同构。

同构的群有完全相同的数学结构，但是具体可指代不同内容。比如 2+3=5，在小孩眼里是糖，大人眼里是钱，科研工作者眼中是文章、引用、或者是真正看得懂你的文章的同行的赞。

这个理解也告诉我们同构是两个群之间结构关系的最强的相似性，除了这种

完全的一对一且保持乘法规则，还可以把一对一这个限制弱化一下，这个就是我们下面要讲的同态。

定义 1.13 同态：设存在从群 G 到群 F 的满映射[4]（注意，没有一对一了）Φ，且这个映射本身保持群的乘法运算规律不变，也就是说 G 中两个元素乘积的映射，等于群 G 中两个元素映射的乘积，则称群 G 与群 F 同态，记作 G~F。映射Φ称为同态映射，它的作用是：



（图 3：同态示意图）

由于一一对应改成了多一对应，所以同态关系不可逆。

这样一个定义看起来好像结构特征并不强，就是随随便便的说了一句保持乘法关系，但实际上，这一句话里面的信息已经非常大了。最为典型的一个表现就是同态核定理。在引入这个定理之前，前说一下什么是同态核。

定义 1.14 同态核：设 G 与 F 同态，那么 G 中与 F 的单位元素对应的所有元素的集合称为同态核。

对照上图，就是第一个小圈圈。

[4]数学上，关于同态的严格定义是没有满映射这个要求的，他们唯一的要求是保持乘法规则。在我们的应用中，我们关注的是群的表示。在群表示的讨论中，满映射这个要求存在。为保持本讲义讨论的一致性，我们从开头就做这样一个要求。

定理 1.7 （同态核定理）设 G 与 F 同态，则有：

1) 同态核 H 是 G 的不变子群；

2) 商群 G/H 与 F 同构。

（这个定理其实是把同态定义所蕴藏的极强的结构特征给说明了，因为我们如果单从同态的定义出发去直观地理解，我们可能会觉得上面图中会出现这样的情况 1）与f_0、f_1、f_2对应的 G 中小圈圈内 g 元素的个数不一定相同，因为你没说；2) 每个小圈圈内的元素形成一个子集，它到底具有什么样的结构，比如说可以是子群、可以是陪集，我都不知道，因为你也没说。）

（同态核定理告诉我们的信息是：1) 每个小圈圈内元素个数相同；2) 与 F 中单位元素对应的小圈圈内的 g 元素的集合构成 G 的一个子群；3) 这个子群不光是子群，还是不变子群；4) 其它圈圈对应的是它的陪集；5) 如果把这些圈圈当成新的元素，那么这些元素的结合形成的群与 F 群完全同构。你说这个结构关系强不强？）

证明：（分三步）

第一步，先证同态核是子群。分两点 1)封闭、2)有逆。

封闭，对h_α、h_β属于同态核，我们知道它们对应的 F 中元素都是f_0，由于乘法规则不变，那么$\Phi(h_\alpha h_\beta)=\Phi(h_\alpha)\Phi(h_\beta)=f_0 f_0=f_0$，$h_\alpha h_\beta$也属于同态核。

有逆，h_α属于同态核，要证h_α^{-1}也属于同态核。反证，设h_α^{-1}不属于同态核，它对应的元素为f_i，那么就会一方面有$\Phi(h_\alpha h_\alpha^{-1})=\Phi(g_0)=f_0$，另一方面$\Phi(h_\alpha h_\alpha^{-1})=\Phi(h_\alpha)\Phi(h_\alpha^{-1})=f_0 f_i=f_i$。也就是说$f_i$等于$f_0$。这与$h_\alpha^{-1}$不属于 H，对应的$f_i$不等于$f_0$矛盾。因此假设不成立，$h_\alpha$属于同态核的话，$h_\alpha^{-1}$也属于同态核。

第二步，再证 H 是不变子群。对$\forall h_\alpha \in H$，要证$g h_\alpha g^{-1} \in H$ 对$\forall g \in G$ 成立。

由映射定义，知道在Φ作用下，$gh_\alpha g^{-1}$对应：$\Phi(g)\Phi(h_\alpha)\Phi(g^{-1}) = \Phi(g)f_0\Phi(g^{-1}) = \Phi(g)\Phi(g^{-1}) = \Phi(g_0) = f_0$，所以$gh_\alpha g^{-1}$依然属于 H，H 为不变子群。

第三步，G/H 与 F 同构。

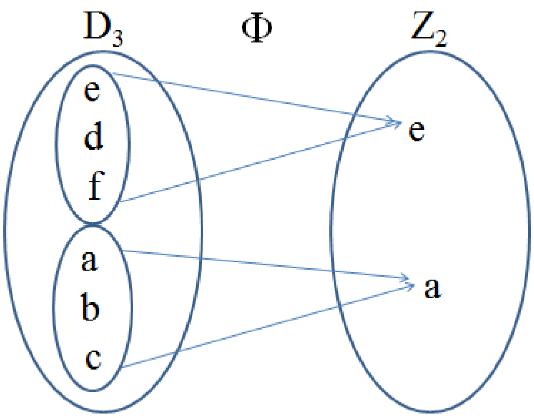
在这里，商群是我们把 H 以及它的陪集g_1H、g_2H、⋯分别都当成新的元素形成的群。要证明它与 F 同构，需证明：1) H 与陪集串中每个集合对应 F 中一个元素，2)不同集合对应不同元素，这样一对一的关系成立。由于 G 与 F 本身同态，乘法关系是保持的，所以这个一对一的关系如果成立，G/H 就与 F 同构。

这两点里面第一点很好证，H 中元素都对应f_0，这个是因为同态核的定义。同时g_iH中元素都对应$\Phi(g_i)$，记为f_i。第二点，不同集合对应不同 F 中元素，用反证法。设g_iH不等于g_jH，是两个不同陪集，而它们对应的$f_i = f_j$。这样的话就会有$g_i^{-1}g_jh_\alpha$对应$f_i^{-1}f_jf_0 = f_0$，这也就是说$g_i^{-1}g_jh_\alpha$属于 H，进而$g_i^{-1}g_j \in H$。这样的话由重排定理，就知道g_iH等于$g_ig_i^{-1}g_jH$，等于g_jH。与已知矛盾。

（证毕）

总结起来，就是通过上面三步，我们说明了同态核是不变子群，且 G 对同态核的商群与 F 同构。下面看几个例子。

例14. D3 群与二阶循环群 Z2 同态。为什么说这个成立呢？因为我们可以按照下图建立一个满映射关系，这种关系能保持乘法规律不变。



（图 4：D3 群与二阶循环群同态示意图）

在这里，很显然{e、d、f}是同态核。如果大家翻到 D3 群乘法表的那一页的话，很容易看到一种超结构，就是 6 x 6 的部分可以化成以 3 x 3 为基本单元的 2 x 2 的结构。这个就是二阶循环群的超结构了。

上面是由同态关系来说明商群与 F 同构。反过来，如果知道了商群与 F 同构，能否得到 G 与 F 同态呢？这个答案也是肯定的，因为前面商群的定义说的就是存在映射、且保持乘法规律不变的事情。

这个时候大家可以想一下前面讲这些概念的时候的路子，基本都是由一个看似不经意的定义出发，然后挖掘出这个定义内部包含的所有意思。对于定义这句话，如果只看表面的意思，可能你会觉得没有什么。但正是这几句话，认真挖掘的话，你会深刻地体会到里面包含的元素间，或者是群的结构间缜密的结构关系。正是因为这个原因，我们讲的路子基本都是：定义、定理、定义、定理、. . . ，从而在你的脑子里建立起一个数学的概念体系。利用这个体系，我们后面再去看物理中的问题。同态这个地方最典型，所以我在这儿提一句，供大家体会。[5]

[5] 2018 年春季，在这本讲义最终定型过程中，有幸看到阿热先生的那本经典教材，其中有这样一句话来描述群论：Starting from a few innocuous sounding axioms defining what a group is, an elegant mathematical structure emerges, with many unexpected theorems，大致说的正是笔者在这里描述的这种感觉。同时，在阿热先生那本经典教材的开头，他引了 18 世纪一个法国

同态和同构说的是两个群的结构特征之间的关系，用来建立这种关系的一个关键的概念是映射。关于这个映射本身，我们目前还没有说什么。下面要讲的几个概念是关于这个的。

定义 1.15 自同构映射：群 G 到自身的同构映射，记为 ν，做的事情是对$\forall g_\alpha \in G$，有 $\nu(g_\alpha) \in G$ 与之对应，且保持乘法规律不变，即 $\nu(g_\alpha g_\beta)=\nu(g_\alpha)\,\nu(g_\beta)$。

由于这个定义，我们知道自同构映射把 G 中单位元素映到单位元素，互逆的元素映到互逆的元素。我们还知道自同构映射是一个操作，也可以当成一个元素。如果把所有群 G 的自同构映射放在一起，也可以形成一个群。

定义 1.16 群 G 的自同构群：如果我们把群 G 的所有自同构映射放在一起，定义两个自同构映射 ν_1 与 ν_2 的乘积 $\nu_1\nu_2$ 为先进行自同构映射 ν_2，再进行自同构映射 ν_1，那么所有的自同构映射是形成一个群的，这个群称为群 G 的自同构群，记为 A(G)。

同时，我们还可以说群 G 的自同构群 A(G)的子群称为群 G 的一个自同构群。注意，这个 A(G)是包含了群 G 的所有自同构映射，而‘一个自同构群’是它的子群，用‘一个’来加了个限制。在自同构群 A(G)的子群中，存在这样的子群，它的自同构映射的定义比较特殊。

定义 1.17 内自同构映射：在群 G 中取一个元素 u，用它对群 G 中任意一个元素 g 进行ugu^{-1}的操作。因为$u(g_i g_j)u^{-1} = ug_iu^{-1}ug_ju^{-1}$，所以它是一个自同构映射，称为内自同构映射。把类似映射放在一起形成的群，称为内自同构群，记为 I(G)。

著名的 Polymath（对他而言含数学、力学、物理）Jean-Baptiste le Rond d'Alembert（让 · 勒朗 · 达朗贝尔）的一句名言：Algebra is generous; she often gives more than is asked of her。说的也是这个感受。在阿热先生的一个课程录像上，他提到了 Geometry 不是，他是这个感觉，他不知道为什么。笔者在讲义补充到这里的时候，也有同样的感觉，也不知道为什么。读者如有答案，欢迎告知。

在这里，对内自同构映射，需要说一句，就是取不同 u，可能对应的映射是同一个。比如，群是 Abel 群，取不同 u 对应的映射都是恒等映射。关于内自同构映射群，有个性质，它是 A(G)的不变子群，这个怎么理解?

先证明它是子群，分两个方面。

1) 封闭性，有内自同构映射f、h，它们定义的映射为fgf^{-1}、hgh^{-1}，记为 ν_1、ν_2。它们的乘积为：$fhgh^{-1}f^{-1} = fhg(fh)^{-1}$，还是内自同构映射。

2) 有逆，f对应的内自同构映射为fgf^{-1}，它与f^{-1}定义的内自同构映射乘积是$f^{-1}fgf^{-1}f = g$，恒等映射。

再证明它是不变子群，这个稍微复杂些，就是要证当 μ 是一个内自同构映射（∈ I(G)），ν 是一个自同构映射（∈ A(G)）时，$\nu\mu\nu^{-1}$ 是一个内自同构映射。也就是说当它作用到群 G 中任意一个元素g_α时，会得到 $u_1g_\alpha u_1^{-1}$，这里 u_1 是群 G 中的一个元素。

（沿着这个思路往下走），ν 是一个自同构映射，ν^{-1} 是它的逆，也是一个自同构映射。设 ν^{-1} 作用到g_α上得到g_β，那么 ν 作用到g_β就会得到g_α。g_α是群 G 中任意一个元素。

现在看 $\nu\mu\nu^{-1}$ 作用到g_α上面什么效果（$\nu\mu\nu^{-1}(g_\alpha)$），先是最右边的作用，得到$\nu\mu\nu^{-1}(g_\alpha) = \nu\mu(g_\beta)$。然后是 μ 作用，因为它是一个内自同构映射，所以效果为 $\mu(g_\beta)=ug_\beta u^{-1}$，其中这个 u 是属于 G 的一个固定元素。$\nu\mu(g_\beta)$继续等于 $\nu(ug_\beta u^{-1})$。最后看 ν 作用上去的效果，因为乘积的投影等于投影的乘积，所以 $\nu(ug_\beta u^{-1})$等于 $\nu(u)\nu(g_\beta)\,\nu(u^{-1})$，前面说过，u 为 G 中固定元素，所以对一个特定的 ν，ν(u)为群 G 中另一固定元素，且 $\nu(u^{-1})=\nu(u)^{-1}$，所以最前面和最后面分别是群 G 中一个固定元素 ν(u)对应的 ν(u)与 $\nu(u)^{-1}$。中间 $\nu(g_\beta)=g_\alpha$，那么 $\nu\mu\nu^{-1}$ 作用到g_α上的效果就

是 $v(u)g_\alpha v(u)^{-1}$，其中 $v(u)$为群中一个固定元素，这个映射为内自同构映射。

（证毕）

例15. 三阶循环群 $Z_3=\{e、a、a^2\}$的自同构群是什么样子，它的元素有哪些?

单位元素对应单位元素，逆元对应逆元，所以只能有两个自同构映射。为恒等映射，与 e 到 e、a 到 a^2、a^2 到 a 这个映射。自同构群包含两个元素，与二阶循环群同构。

而内自同构映射，因为 Z_3 是 Abel 群，只包含恒等映射。内自同构群是自同构群的不变子群。

1.5 变换群

变换群是以变换为群元形成的群，对它的讨论分变换对象以及变换操作。之所以把变换群单独拎出来讲，是因为它是我们物理问题研究中最常用到的一种群，包括我们后面要讲的点群、空间群，SO(3)群，它们都是些变换操作的集合，变换的对象是我们感兴趣的物理系统。在这些章节的讨论中，我们会用到变换群的一些概念。先看几个定义。

定义 1.18 变换、完全对称群、变换群：设 X 是一个非空集合，X={x、y、z、…..}，f 是将 X 映入其自身的一一满映射，$f(x)=y\in X$，那么我们将 f 称为 X 上的变换或置换。

在置换基础上，如果继续定义 X 上的两个置换 f、g 的乘积为 fg 为先对 X 进行置换 g，再对 X 进行置换 f，即对$\forall x\in X$，有 $fg(x)=f(g(x))$，那么 X 的全体置换在此乘法规则下形成一个群，称为 X 上的完全对称群，记为 S_X。恒等置换 e 是 S_X 的单位元素，置换元素 f 与其逆置换为互逆元素。完全对称群的子群称为 X 上的变换群或对称群。若 X 为 n 个元素的集合，则称其上的完全对称群为 X 上的

n 阶置换群，记为 S_n。对群 G，当我们把群元当成变换对象时，它也有完全对称群，记为 S_G。关于 S_G，有个凯莱定理。

定理 1.8 凯莱（Cayley）定理：群 G 同构与 S_G 的一个子群。

证明：（就是找到一个 S_G 的子群，再证明它与 G 同构）

定义这样一个变换，取 G 中任意一个元素 g，它对 G 进行的变换就是 gG，根据重排定理，它给出且仅仅一次给出 G 中所有元素，所以这是 G 上的一个变换。把 G 中的每个元素都抽出来当这个 g，当抽出的是单位元素的时候，对应恒等变换。而 g 所对应的变换的逆变换为 g^{-1} 所对应的变换，因为 $g^{-1}gG=G$。这样是可以形成一个 S_G 的子群的。很显然这个 S_G 的子群与 G 同构。

（证毕）

上面说的是跟变换群相关的性质，关注的是变换操作的集合，还没有关注变换对象。跟变换对象相关的最重要的一个概念是变换对象中元素的等价性，以及与之相关的轨道。

定义 1.19 等价性：设 G 为 X 上的变换群，若对 x、y∈ X，∃g∈ G，使得 g(x)=y，则称 x 与 y 等价，记为 x~y。

由这个定义出发，我们可以想象和群元的共轭比较类似，这里变换对象中元素的等价也有传递和对称性。这里所谓的对称，指的是当 x 与 y 等价时，y 也与 x 等价。因为既然存在 g 属于 G，使得 g(x)=y，而 G 是一个群，那么肯定存在一个 g 的逆，使得 $g^{-1}(y)=x$。

而传递，指的是由 x~y、y~z 得到 x~z。这个还是类似道理，因为 x~y，必有 g 属于 G，使得 g(x)=y；因为 y~z，必有 f 属于 G，使得 f(y)=z。由变换群的乘法定义，可知 fg(x)=f(g(x))=f(y)=z。而因为 G 是一个变换群，所以 fg 属于 G，这个

G 中的元素可以让 x 与 z 等价。

基于等价，我们还可以定义一个 G 轨道的概念。

定义 1.20 x 的 G 轨道：设 G 为 X 上的变换群，x 为 X 中元素，由 X 中所有与 x 等价的元素的集合，称为 x 的 G 轨道。

这个和之前将的群元中类的概念有相似的地方，等价对应共轭。

关于变换对象还有另外一个概念，不变子集。这个不变子集，说白了就是一个集合，这个集合的特征是任意 G 中元素作用到这个集合中元素上，得到的还是这个集合中的元素。说的严格些，就是：

定义 1.21 设 G 为 X 上的变换群，若有 X 上的子集 Y，对应 G 中任意元素 g，它得到的结果还属于 Y，则称 Y 为群 G 在 X 上的不变子集。

由这个定义，我们可以看出：

1. X 中每个 G 轨道都是 G 不变的，所以这些 G 轨道及其并集都是 G 在 X 上的不变子集。
2. X 中的任意子集 Y，总能找到 G 的一个子群 H，使得 Y 是 H 不变的，因为大不了只包含恒等变换。

看个例子。

例16. 设 X 是二维平面，G 是绕 z 轴转动的二维转动群，G=$\{C_{\vec{k}}(\Psi)\}$，X=$\{\vec{r} = x\hat{\imath} + y\hat{\jmath}\}$，前者为变换操作，后者为变换对象。对于 X 中任意一点 $\vec{r} = x\hat{\imath} + y\hat{\jmath}$，G 中元素 $C_{\vec{k}}(\Psi)$ 作用到它上面的效果是：$\vec{r}' = (x\cos\Psi - y\sin\Psi)\hat{\imath} + (x\sin\Psi + y\cos\Psi)\hat{\jmath}$。

按照我们前面介绍的定义，$\vec{r}$与$\vec{r}'$是等价的，以原点 O 为圆心，过$\vec{r}$的圆周上的所有点，都与其等价，它们的集合构成$\vec{r}$的 G 轨道。

这些同心圆及其并集，是 X 的子集，也是 G 不变的，所以是 X 的 G 不变子集。

如取一个圆上等间距的四个点作为 X 的子集 Y，这个 Y 作对应的不变的变换群就是 G 中的子群 H, H 包含的操作就是转动 π/2 以及它的整数倍的操作。

上面说了，X 的任意子集 Y 都有一个 G 的子群 H，使得 Y 对 H 不变。当 Y 只包含 X 中的一个点 x 时，这种不变关系还可以用来定义一个新的概念，就是迷向子群。

定义 1.22 设 G 是 X 上的变换群，x 是 X 中一点，G 的子群 G^x 保持 x 不变，也就是 $G^x=\{h|h\in G$ 且 $hx=x\}$，则称 G^x 是 G 对 x 的迷向子群。

迷向这个词在这里用得特别好，你可以把它当成一种感觉，就像段誉遇到了王语嫣。这个迷向子群在我们讲点群的时候非常有用。关于它有个定理。

定理 1.9. 设 G^x 是 G 对 x 的迷向子群，则 G^x 的每个左陪集把 x 映为 G 中一个特定的点 y，且不同陪集把它映为不同的点。也就是说含 x 的 G 轨道上的点，与 G^x 的左陪集一一对应。

证明:（老套路，两点，一是说每个 x 的 G 轨道上的点都对应一个陪集，且这个陪集中所有元素都把 x 变为这一点，二是说不同陪集对应不同点。）

先看第一点，对轨道上的任意一点 y，由 gx=y 得到，所以 g 肯定不属于 G^x。由此，我们可以定义一个陪集 gG^x，里面的任意一个元素 gh，作用到 x 上，都等于 ghx=gx=y。

再看第二点，要证不同陪集对应不同点，反证，设不同陪集g_1G^x、g_2G^x对应同一 y，这样的话就会有$g_1h_1x=g_2h_2x=y$，其中h_1为迷向子群元素。

这样我们可以进一步得到$g_2^{-1}g_1h_1x = h_2x = x$，也就是说$g_2^{-1}g_1h_1$是迷向子群的元素，这样$g_2^{-1}g_1$自然也是迷向子群中的元素。这时，由重排定理知$G^x = g_2^{-1}g_1G^x$，那么$g_2G^x$就自然等于$g_1G^x$，与已知矛盾。

（证毕）

由这个定理我们也知道当群 G 的阶为 n，其迷向子群G^x阶为 m 时，含 x 的 G 轨道上点的个数就是 n/m。（点群那章中会用到）

（举个与这几个概念相关的例子）

例17. 设 A、B、C 是平面正三角形的三个顶点，只考虑转动，D3 是其对称群。

A 是 X 中一点，其迷向子群是什么？（答案：{e、a}）

这个迷向子群的左陪集 b{e、a}={b、f}将 A 映为 C。左陪集 c{e、a}={c、d}将 A 映为 B。含 A 的 G 轨道上点的个数是 6/2=3。

1.6 直积与半直积

这里要讲的直积与半直积，是利用同态的概念，相对与子群与陪集、类与不变子群这两节内容对群结构的进一步的剖析。其中最强的结构是基于直积概念的，但它的适用范围比较小。结构弱一些，适用性更强的一个关系是半直积。因为这个原因，这节学习中的重点是半直积。

讨论从直积开始，它说的是由两个已知的群 G_1 与 G_2，来构造一个新群 G，而这个新群的元素，是由 G_1 群中的元素，比如$g_{1\alpha}$，与 G_2 群中的元素上得到$g_{2\beta}$，形成的有序对$g_{\alpha,\beta} = (g_{1\alpha}g_{2\beta})$。在两个由此定义的元素$g_{\alpha,\beta} = (g_{1\alpha}g_{2\beta})$与$g_{\alpha',\beta'} = (g_{1\alpha'}g_{2\beta'})$进行乘法时，符合的规律是：$g_{\alpha,\beta}g_{\alpha',\beta'} = (g_{1\alpha}g_{2\beta})(g_{1\alpha'}g_{2\beta'}) = (g_{1\alpha}g_{1\alpha'}g_{2\beta}g_{2\beta'})$。两个有序对中，属于 G_1 的两个元素相乘，得到一个 G_1 元素，属于 G_2 的两个元素相乘，得到一个 G_2 元素，再由这个 G_1 与这个 G_2 元素形成的

有序对。

针对这样一个有序对以及乘法定义，我们是可以定义一个群的，因为严格意义上我们有集合了，我们也有乘法规则了。我们只需要证明这个集合满足群的四个条件，它们就会形成一个群。下面我会一步步证明这四个条件成立，这个有序对形成一个群，我们把这样的一个群叫做 G_1 与 G_2 的直积群。证明按四点进行：

1. 封闭性，这个其实由乘法定义已经给出，$g_{\alpha,\beta}$与$g_{\alpha',\beta'}$相乘的结果仍然是 G_1 与 G_2 中元素组成的有序对，仍然属于这个群。

2. 结合律，这个要证$g_{\alpha\beta}(g_{\alpha'\beta'}g_{\alpha''\beta''}) = (g_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta'})\,g_{\alpha''\beta''}$，由乘法定义知，

   $$g_{\alpha\beta}(g_{\alpha'\beta'}g_{\alpha''\beta''}) = (g_{1\alpha}g_{2\beta})(g_{1\alpha'}g_{1\alpha''}g_{2\beta'}g_{2\beta''}) = (g_{1\alpha}g_{1\alpha'}g_{1\alpha''}g_{2\beta}g_{2\beta'}g_{2\beta''})$$

   $$(g_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta'})g_{\alpha''\beta''} = (g_{1\alpha}g_{1\alpha'}g_{2\beta}g_{2\beta'})(g_{1\alpha''}g_{2\beta''}) = (g_{1\alpha}g_{1\alpha'}g_{1\alpha''}g_{2\beta}g_{2\beta'}g_{2\beta''})$$

   两者相等。

3. 单位元素，$(g_{10}g_{20})$存在且唯一。

4. 逆元，对$(g_{1\alpha}g_{2\beta})$，逆元为$(g_{1\alpha}^{-1}g_{2\beta}^{-1})$，存在且唯一。

基于这个证明，直积群的概念应该说也就清楚了，总结如下。

定义 1.23 直积群：两个群 G_1 与 G_2，各贡献一个群元，$g_{1\alpha}$与$g_{2\beta}$，形成一个有序对$g_{\alpha\beta} = (g_{1\alpha}g_{2\beta})$。这些有序对形成一个集合，如我们进一步定义这个集合中两个元素$g_{\alpha\beta} = (g_{1\alpha}g_{2\beta})$与$g_{\alpha'\beta'} = (g_{1\alpha'}g_{2\beta'})$在进行乘法时，满足的规则是$g_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta'} = (g_{1\alpha}g_{2\beta})(g_{1\alpha'}g_{2\beta'}) = (g_{1\alpha}g_{1\alpha'}g_{2\beta}g_{2\beta'})$，那么这个集合形成一个群。这个群我们称为 G_1 与 G_2 的直积群 G，记为 $G_1 \otimes G_2$。

前面我们说用直积概念是为了剖析群的结构，但目前我们不光没剖析群结构，还利用 G_1 与 G_2 产生了直积群 G。这个看似和我们的目的无关，但其实把我们从

G_1与G_2产生G这个过程反过来看，把G分解为G_1与G_2，也对应剖析G的结构了。这个反过来的概念叫直积分解，具体如下。

定义1.24 直积因子：一个群G，有两个子群G_1与G_2，如果G中的任何一个元素都可以唯一地表示为$g_{\alpha\beta} = g_{1\alpha}g_{2\beta}$，其中$g_{1\alpha}$属于$G_1$、$g_{2\beta}$属于$G_2$，且$g_{1\alpha}g_{2\beta} = g_{2\beta}g_{1\alpha}$，则G是$G_1$与$G_2$的直积，$G_1$与$G_2$称为G的直积因子。

做个说明，前面我们在引入直积群的概念时，利用了G_1与G_2元素形成的有序对。这个有序对的乘法满足G_1中元素与G_2中元素分别相乘，然后再放在一起形成有序对这样一个原则。要让这个关系成立,G_1与G_2中的元素要么没有乘法，要么它们有乘法，但可以互易。当没有乘法的时候，直积群中的元素就是一个有序对，$g_{1\alpha}$与$g_{2\beta}$是不能通过乘法合到一起的，我们只是通过G_1与G_2建立了一个新的直积群G。此操作没有任何实际意义。

直积群这个概念有实际意义的情况是G_1与G_2中的元素有乘法，且互易，也就是从G可以找到其直积因子G_1与G_2的情况。

同时需要说明的是这个G_1与G_2本身不要求是Abel群，定义只要求它们之间乘法互易。同时，G_1、G_2与G之间存在两个结构关系，1) 它们只有一个公共元素e，2) 它们都是G的不变子群。这个怎么理解?

先看第一点，子群之间必有单位元素e这个公共元素，现在要证它们只有这一个公共元素，就用反证法。设除了e还有一个a是它们的公共元素。如果这样的话，那么G中的元素a，就可以写成G_1出e、G_2出a，相乘的结果；或者G_1出a、G_2出e，相乘的结果，两种情况。与直积因子定义的时候第一条，唯一地表示为$g_{\alpha\beta} = g_{1\alpha}g_{2\beta}$，其中$g_{1\alpha}$属于$G_1$、$g_{2\beta}$属于$G_2$，矛盾。

再看第二点，G_1 与 G_2 是 G 的不变子群。这个证明很简单，以 G_1 为例，其中任意元素$g_{1\alpha}$，其同类元素为：$\left(g_{1\alpha'}g_{2\beta'}\right)g_{1\alpha}\left(g_{1\alpha'}g_{2\beta'}\right)^{-1}=g_{1\alpha'}g_{1\alpha}(g_{1\alpha'})^{-1}$，仍然属于 G_1。

看几个直积群的例子。

例18. 定义 xy 平面上的向量为群元素，其乘法为向量加法，则 xy 平面上所有向量的集合构成一个群，记为 G_1。定义 z 轴上所有向量按同样乘法规则构成群 G_2。

则它们作直积，形成三维空间所有向量的集合。同理，三维空间所有向量的集合，按照向量加法为群元乘法，可分解为 xy 平面形成的群 G_1 与 z 轴形成的群 G_2 的直积，G_1 与 G_2 为直积因子。

这里，分解方法不唯一（任何一个平面与一个不属于它的直线都可以）。但任意一种方法分解完了以后，G_1 与 G_2 都满足它们只有一个公共元素，且它们都是 G 的不变子群这两个性质。

例19. 6 阶循环群 Z_6={a、a^2、a^3、a^4、a^5、e}，取其两个子群 G_1={e、a^3}，G_2={e、a^2、a^4}，则 Z_6 中任意一个元素都可以唯一写成 G_1 中元素与 G_2 种元素的乘积，且 G_1 与 G_2 乘法互易。这个时候，G_1 与 G_2 就是六阶循环群的直积因子，也是它的不变子群。

这两个都是直积的例子，结构关系很强。前面我们提到过，D_3 群的结构关系也很强，在这里它有直积因子吗?

例20. D_3 群，取 G_1={e、d、f}，G_2={e、a}，这时 D_3 群中任何一个元素也可以唯一的表达为 G_1 中元素$g_{1\alpha}$与 G_2 中元素$g_{2\beta}$的乘积$g_{1\alpha}g_{2\beta}$，这个没有问题。

但是，G_1 与 G_2 的乘法不互易，与之相应$g_{1\alpha}g_{2\beta}\neq g_{2\beta}g_{1\alpha}$，这时，D3 就不

再是 G_1 与 G_2 的直积，G_1 与 G_2 也不都为 D_3 的不变子群（G_1 是，G_2 不是）。

不过这个时候，我们还是知道 D_3 是可以由 G_1 与 G_2 按某种关系来构成的。这个时候，我们不能用直积这个概念，我们退而求其次，把这个结构关系进行一定程度的弱化，就会形成另外一个概念，叫半直积。

半直积这个概念有一点点复杂，但是还可以（后面不缺更复杂的）。

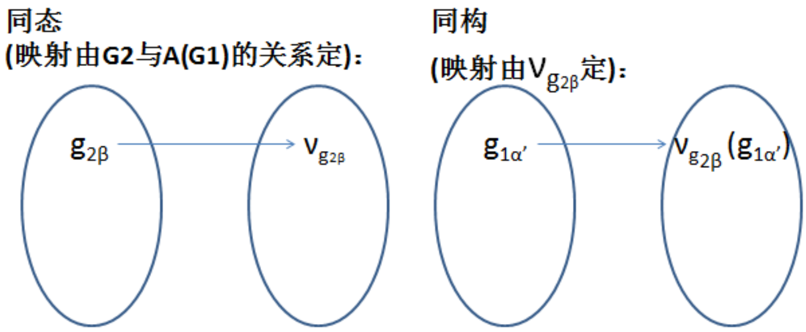
定义 1.25 半直积：设群 $G_1=\{g_{1\alpha}\}$，$G_2=\{g_{2\beta}\}$。对 G_1，如存在自同构映射群 $A(G_1)$，使得 G_2 与之同态，也就是说对 G_2 中任意$g_{2\beta}$，我们总可以通过这个同态映射，找到一个 G_1 群的自同构映射$\nu_{g_{2\beta}}$，利用这个自同构映射，我们可以定义一个 G_1 群与 G_2 群元素形成的有序对$g_{\alpha,\beta}=\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle$的集合，并且规定这个集合中元素乘法满足：$g_{\alpha,\beta}g_{\alpha',\beta'}=\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle\langle g_{1\alpha'}g_{2\beta'}\rangle=\langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})g_{2\beta}g_{2\beta'}\rangle$，下面我们会证明这样的一个集合按照这样的一个乘法构成群，这个群我们称为 G_1 与 G_2 的半直积群，记为 $G_1\otimes_s G_2$。

我们现在来细细体会这个概念。半直积，很显然，没有直积那么强的结构型，所以我们在定义这个有序对乘法的时候不能简单规定两个因子群的群元简单相乘。但是，我们也说过，它还是有很强的结构性的，那么这个结构性就体现在 G_2 必与 G_1 的某个自同构映射群同态上。

这句话比较绕，它最本质的功能，就是要建立一个规则，让 G_1 与 G_2 的有序对能够相乘，得到新的有序对。就是在有序对相乘的时候，直积群是 G_2 中元素$g_{2\beta}$不做任何限制地让 G_1 中的元素$g_{1\alpha'}$跑到它前面跟 G_1 中的元素$g_{1\alpha}$相乘。很无私，背后是强烈的自信，因为我们这个有序对的集合的结构性太强的，它允许我这么让步。对半直积群，我 G_2 中元素$g_{2\beta}$不是不让你过去，但你不能无视我，你要过去，必须按照我制定的规则，变成 G_1 中的另外一个元素$\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})$。

这个规则是怎么制定出来的呢？我 G_2 不是和你 G_1 的自同构群同态嘛，我们前面说过，同态存在的话由 G_2 中的元素 $g_{2\beta}$ 就可以确定 G_1 的一个自同构映射 $\nu_{g_{2\beta}}$。我这个自同构映射干的是什么事情呢？就是你给我一个 G_1 中元素 $g_{1\alpha'}$，我让你变成 G_1 中另外一个元素 $\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})$。然后，在有序对乘法的时候，$g_{1\alpha'}$ 通过这个规则变成 $\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})$，与 $g_{1\alpha}$ 相乘，形成有序对中 G_1 群的元素 $g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})$。而 $g_{2\beta}$ 呢？严于律人、宽以待己，再对别人进行完一系列的要求后，自己恬不知耻的不做任何改变，跑到后面和 $g_{2\beta'}$ 相乘，变成了有序对里 G_2 群的元素。

用图表示的话这个过程中重要的就是一个同态关系和一个同构关系，如下：



（图 5：半直积示意图）

上面是按照我们这门课的习惯，用简单的几句话定了规则，下面我们看这些规则产生的规律，这个规律就是它们形成一个群，我们按群的四要素来讨论。在这个讨论中，我们用到的最为基本的两个性质是：

1. $\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha}g_{1\alpha'}) = \nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha})\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})$，$\nu_{g_{2\beta}}$ 是 G_1 的自同构映射，乘积的映射等于映射的乘积。（这个对应的是我们上图右面那个构映射关系）

2. $\nu_{g_{2\beta}g_{2\beta'}}(g_{1\alpha'}) = \nu_{g_{2\beta}}(\nu_{g_{2\beta'}}(g_{1\alpha'}))$，$g_{2\beta}g_{2\beta'}$ 是 G_2 群中的两个元素的乘积，对应 G_1 群的自同构映射 $\nu_{g_{2\beta}g_{2\beta'}}$。这个自同构映射作用到 $g_{1\alpha'}$ 得到 G_1 中的一个元素，是等式左边的值。等式右边，$g_{2\beta'}$ 是 G_2 中的一个元素，由于与 G_1 的自同构群 $A(G_1)$ 同态，也对应一个 G_1 的自同构映射，$\nu_{g_{2\beta'}}$，这个自同构映射作用

到$g_{1\alpha'}$上，得到 G_1 中元素$\nu_{g_{2\beta'}}(g_{1\alpha'})$。于此同时$g_{2\beta}$也对应一个 G_1 的自同构映射$\nu_{g_{2\beta}}$，这个自同构映射作用到$\nu_{g_{2\beta'}}(g_{1\alpha'})$得到的结果与等式左边相等。这个相等的基础是因为 G_2 与 G_1 的自同构群 $A(G_1)$同态，在这个同态关系中，乘积的映射等于映射的乘积，所以$\nu_{g_{2\beta}g_{2\beta'}}$等于$\nu_{g_{2\beta}}$乘以$\nu_{g_{2\beta'}}$。（这个对应的是我们上图左边那个同态映射关系）

证明:

现在我们看群的四要素:

1. 结合律，也就是:

$$\left(\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle\langle g_{1\alpha'}g_{2\beta'}\rangle\right)\langle g_{1\alpha''}g_{2\beta''}\rangle = \langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle\left(\langle g_{1\alpha'}g_{2\beta'}\rangle\langle g_{1\alpha''}g_{2\beta''}\rangle\right)$$

左边等于

$$\langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})g_{2\beta}g_{2\beta'}\rangle\langle g_{1\alpha''}g_{2\beta''}\rangle = \langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})\nu_{g_{2\beta}g_{2\beta'}}(g_{1\alpha''})g_{2\beta}g_{2\beta'}g_{2\beta''}\rangle$$

右边等于

$$\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle\langle g_{1\alpha'}\nu_{g_{2\beta'}}(g_{1\alpha''})g_{2\beta'}g_{2\beta''}\rangle = \langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}\left(g_{1\alpha'}\nu_{g_{2\beta'}}(g_{1\alpha''})\right)g_{2\beta}g_{2\beta'}g_{2\beta''}\rangle$$

$$=\langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})\nu_{g_{2\beta}}(\nu_{g_{2\beta'}}(g_{1\alpha''}))g_{2\beta}g_{2\beta'}g_{2\beta''}\rangle$$

由上面性质的第二点我们知道等式成立。

2. 封闭性，G 中元素为 G_1 与 G_2 中元素形成的有序对，两个元素相乘按照乘法规则还是这样的有序对，所以封闭性自然成立。

3. 单位元素：g_{10}、g_{20} 分别是 G_1 与 G_2 中的单位元素，G_2 中单位元素对应的映射为恒等映射。同时任意一个 G_1 的自同构映射作用到 g_{10} 上都得到 g_{10}。所以：

$$\langle g_{10}g_{20}\rangle\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle=\langle g_{10}\nu_{g_{20}}(g_{1\alpha})g_{20}g_{2\beta}\rangle=\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle$$

$$\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle\langle g_{10}g_{20}\rangle=\langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{10})g_{20}g_{2\beta}\rangle=\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle$$

4. 逆元：$\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle$的逆元为$\langle \nu_{g_{2\beta}^{-1}}(g_{1\alpha}^{-1})g_{2\beta}^{-1}\rangle$。这个形式怎么定出来的？

先看 G_2 的部分，它很简单，就是$g_{2\beta}^{-1}$，因为在有序对乘法过程中，它不做任何改变。

再看 G_1 的部分，它比较复杂。我们先设逆元中 G_1 部分为$g_{1\alpha'}$。它要满足：

$$\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle\langle g_{1\alpha'}g_{2\beta}^{-1}\rangle=\langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})g_{20}\rangle=\langle g_{10}g_{20}\rangle$$

也就是$\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})=g_{1\alpha}^{-1}$对任意$g_{1\alpha}$成立。将$\nu_{g_{2\beta}^{-1}}$作用到这个式子两段，就有$g_{1\alpha'}=\nu_{g_{2\beta}^{-1}}(g_{1\alpha}^{-1})$。

结合这四点，$\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle$的集合形成一个群，称为半直积群。

（证毕）

关于半直积群，有个比较重要的性质就是 G_1 是它的不变子群。因为：

$$\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle\langle g_{1\alpha'}g_{20}\rangle\langle \nu_{g_{2\beta}^{-1}}(g_{1\alpha}^{-1})g_{2\beta}^{-1}\rangle\ldots(g_{20}\text{ 对应恒等映射})$$

$$=\langle g_{1\alpha}g_{2\beta}\rangle\langle g_{1\alpha'}\nu_{g_{2\beta}^{-1}}(g_{1\alpha}^{-1})g_{20}g_{2\beta}^{-1}\rangle$$

$$=\langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'}\nu_{g_{2\beta}^{-1}}(g_{1\alpha}^{-1}))g_{2\beta}g_{2\beta}^{-1}\rangle$$

$$=\langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})\nu_{g_{2\beta}}(\nu_{g_{2\beta}^{-1}}(g_{1\alpha}^{-1}))g_{20}\rangle$$

$$=\langle g_{1\alpha}\nu_{g_{2\beta}}(g_{1\alpha'})g_{1\alpha}^{-1}g_{20}\rangle$$

还是 G_1 中元素。但 G_2 没有这个特性，当 G_2 也是 G 的不变子群时，半直积就变成了直积。

例21. D_3 群，取 G_1={e、d、f}，G_2={e、a}。G_1 的自同构映射群有两个元素，ν_e 是恒等映射，ν_a把 e 映为 e、f 映为 d、d 映为 f，所以 G_2 与 G_1 的这个自同构群同态。这个时候，我们可以定义半直积群元素：{⟨ee⟩、⟨ea⟩、⟨de⟩、⟨da⟩、⟨fe⟩、⟨fa⟩}。根据 D_3 群乘法，我们可以知道它们分别对应：{e、a、d、c、f、b}。G_1 与 G_2 的乘法不互易，但是由于 G_2 与 G_1 的自同构群的同态映射关系，我们有：$\langle da\rangle\langle fa\rangle=\langle d\nu_a(f)aa\rangle=\langle ddaa\rangle=\langle fe\rangle$，对应到 D_3 群的乘法表中，就是 cb=f。

同样：$\langle fa\rangle\langle da\rangle=\langle f\nu_a(d)aa\rangle=\langle ffaa\rangle=\langle de\rangle$，对应 D_3 群乘法表中的 bc=d。

因此，D_3 群具备以 G_1={e、d、f}，G_2={e、a}为因子形成的半直积结构，是它们的半直积群。其中 G_1 是 D_3 的不变子群。

1.7 习题与思考

1. 证明：只有一个三阶群。

2. 证明：两个子群的交集为子群。

3. 证明：有两个四阶群，且都是 Abel 群。

4.对群$G=\{1、i、-1、-i\}$，有没有非平庸的不变子群。如有，G对它的商群是什么？

5. 生成矩阵群，它的两个元素为$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$和$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$，此群的阶是多少？共有多少个共轭类？

6. 说出 D_3 群的子群与不变子群。

7. 证明：不是子群本身的陪集不包含子群的元，且不是群。

8. 一个群可不可以有几个不同的不变子群。

9. 证明：除恒元外其它所有元都是二阶的群是 Abel 群。

10. 试问下列三个矩阵，按矩阵乘法规则，是否形成一个群？

$$\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix}$$

至少需要添加几个矩阵才能构成一个群？求出这些要添加的矩阵，以及群的共轭类。

11. 考虑下面六个函数的集合：

$\mathrm{f}_1(x)=x$；$\mathrm{f}_2(x)=1-x$；$\mathrm{f}_3(x)=x/(x-1)$；

$\mathrm{f}_4(x)=1/x$；$\mathrm{f}_5(x)=1/(1-x)$；$\mathrm{f}_6(x)=(x-1)/x$。

定义两个函数的乘积是以后面函数的输出作为前面函数的输入得到的整体函数依赖关系，如$(\mathrm{f}_1\mathrm{f}_3)(x)=\mathrm{f}_1\big(\mathrm{f}_3(x)\big)$。证明该集合在此运算法则下形成一个群，且该群与 D_3 群同构。

12. 设C_i为群中的一个类，C_i^*为C_i中元素的逆的集合。证明：C_i^*也是一个类。

13. 写出下列置换的逆：

$\mathrm{p}_1=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7&8\\3&5&7&1&2&8&4&6\end{pmatrix}$、$\mathrm{p}_2=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7&8\\2&5&6&8&1&7&4&3\end{pmatrix}$

并验证$(\mathrm{p}_1\mathrm{p}_2)^{-1}=\mathrm{p}_2^{-1}\mathrm{p}_1^{-1}$。

14. 找出三阶对称群 S_3 的所有子群，并指出哪个子群是不变子群，哪个子群是含元素$\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}$的循环群？

15. 求六阶循环群的所有不变子群，以及其对应的商群。

16. 用两个元素A与B生成一个群，使得它仅仅遵从关系式：$\mathrm{A}^2=\mathrm{B}^{\mathrm{k}}=(\mathrm{AB})^2=\mathrm{E}$，式中k是大于 1 的有限整数。

17. 求 D_3 群的自同构群，它是内自同构群吗?

18. 设群只有一个阶为 2 的元素h，证明：对$\forall g \in G$，有$gh = hg$。

19. 在D_4群中，取子群$G_1 = \left\{e、r、r^2、r^3\right\}$，$G_2 = \left\{e、a\right\}$，证明：$D_4 = G_1 \otimes_s G_2$。

20. 若$G = H \otimes_s K$，证明：1)商群G/H与K同构；2) G 与 H 和 K同态。

21. 一个群与其子群是否总是同态，为什么?

第二章 群表示理论

2.1 群表示

上一章讲了群的基本结构，这一章讲如何用数学的语言去描述群。这个对应的理论叫群表示论，要用到的知识是线性代数，其中最基本的概念是群表示。

如果用一句话来传达群表示这个概念的核心意思的话，我们可以说它是群 G 到线性空间 V 上的线性变换群 L(V, C)的同态映射关系。也就是说表示是同态映射关系，它存在于一个我们要研究的抽象群和一个线性空间的线性变换群之间。这里的线性变换群，大家也可以直接地理解为一个矩阵群。我们先把这句话说出来，下面再来做详细解释，从线性空间说起、到线性变换、再到线性变换群。

定义 2.1 线性空间：线性空间又叫向量空间，它是定义在数域 K（可以是实数域 R，也可以是复数域 C）上的向量集合 V={x、y、z、…..}，在 V 中可以定义加法和数乘两种运算，设 x、y、z 属于 V，a、b、c 属于 K，向量加法和数乘具有封闭性，且对加法满足：

1. $x+y=y+x$
2. $(x+y)+z=x+(y+z)$
3. 有唯一 0 元素，对任意 x 属于 V，$0+x=x+0$
4. 对任意 x 属于 V，有唯一$(-x)$，使得 $x+(-x)=0$，

对数乘满足：

1. $1\,x = x$
2. $(ab)x = a\,(bx)$
3. $a(x+y)=ax+ay$
4. $(a+b)x=ax+bx$。

这些条件满足的话，V 这个向量集合就构成一个线性空间。

线性空间最为直接的一个例子就是我们所处的三维实空间，这个 a、b、c 是实数，V 中元素是三维空间中向量。线性空间中，我们知道最重要的一个概念是线性相关与线性无关。

定义 2.2 线性空间 V 中，任意 n 个向量$\vec{X}_1$、$\vec{X}_2$、……、$\vec{X}_\mathrm{n}$的线性组合$a_1\vec{X}_1 + a_2\vec{X}_2 + \cdots\cdots + a_\mathrm{n}\vec{X}_\mathrm{n} = 0$当且仅当$a_1 = a_2 = \cdots\cdots = a_\mathrm{n} = 0$时成立，其中这些系数都是线性空间数域 K 上的数，这时，称$\vec{X}_1$、$\vec{X}_2$、……、$\vec{X}_\mathrm{n}$这些向量线性无关。否则，它们线性相关。

基于线性无关的一个概念是线性空间的维数。

定义 2.3 线性空间中线性无关的向量的最大个数 m，称为线性空间的维数，记为 dim V=m。

有了线性空间、维数，下一步我们就可以定义基矢了。

定义 2.4 设 V 是 n 维线性空间，则 V 中任意一组 n 个线性无关的向量，都可以构成 V 的基矢，记为$\left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \cdots\cdots, \vec{e}_\mathrm{n}\right)$。空间中任意矢量都可以表示成为这 n 个基矢的线性组合，$\vec{X} = \sum_{i=1}^{\mathrm{n}} x_i \vec{e}_i$，矩阵形式为：

$$\vec{X} = \left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \cdots\cdots, \vec{e}_\mathrm{n}\right)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_\mathrm{n} \end{pmatrix}$$

其中，我们用$[\vec{X}]$代表向量在这组基矢上的坐标，表示为：$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_\mathrm{n} \end{pmatrix}$。由此定义，显然：$[\vec{e}_1]=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$，$[\vec{e}_2]=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$，……，$[\vec{e}_\mathrm{n}]=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$。

线性空间上的变换是线性变换，定义如下：

定义 2.5 线性变换：线性变换 A 是将线性空间 V 映入 V 的映射，满足$\forall\vec{\mathrm{x}}$，$\vec{\mathrm{y}} \in \mathrm{V}$，$\mathrm{a}\in\mathrm{K}$，A：V→V，$\mathrm{A}(\vec{\mathrm{x}}) \in\mathrm{V}$，$\mathrm{A}(\mathrm{a}\vec{\mathrm{x}}+\vec{\mathrm{y}}) = a\mathrm{A}(\vec{\mathrm{x}}) + \mathrm{A}(\vec{\mathrm{y}})$，也就是说这个变换作用到向量的线性组合上，等于这个变换作用到向量上的线性组合。这样的变换称为线性变换。

关于线性变换，我们知道它可以在线性代数里面写成一个矩阵，这个矩阵的样子是什么呢？我们这样看，A 作用到$\vec{\mathrm{x}}$上，得到$\vec{\mathrm{y}}$，我们记为：$\vec{\mathrm{y}} = \mathrm{A}(\vec{\mathrm{x}})$，其中$\vec{\mathrm{y}} = \sum_{i=1}^{\mathrm{n}} y_i\vec{e}_i$，$\vec{\mathrm{x}} = \sum_{i=1}^{\mathrm{n}} x_i\vec{e}_i$。根据$\mathrm{A}(\mathrm{a}\vec{\mathrm{x}}+\vec{\mathrm{y}}) = a\mathrm{A}(\vec{\mathrm{x}}) + \mathrm{A}(\vec{\mathrm{y}})$，我们知道：

$$\mathrm{A}(\vec{\mathrm{x}}) = \sum_{j=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{A}(\vec{e}_j)x_j \tag{2.1}$$

对任意一个基矢$\vec{e}_j$，我们做线性变换$\mathrm{A}(\vec{e}_j)$，都会得到另外一个向量$\vec{e}_j{}'$，这个向量用基矢组展开，可以写为：

$$\vec{e}_j{}' = \left(\vec{e}_1，\vec{e}_2，\cdots\cdots，\vec{e}_{\mathrm{n}}\right)\begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ \vdots \\ a_{\mathrm{n}j} \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

把式 2.2 代入式 2.1，我们可以得到：

$$\mathrm{A}(\vec{\mathrm{x}}) = \sum_{j=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{A}(\vec{e}_j)x_j = \sum_{j=1}^{\mathrm{n}} \vec{e}_j{}'x_j = \sum_{j=1}^{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{\mathrm{n}} \vec{e}_i a_{ij} x_j$$

$$= \left(\vec{e}_1，\vec{e}_2，\cdots\cdots，\vec{e}_{\mathrm{n}}\right)\begin{pmatrix} a_{11} a_{12}\cdots\cdots a_{1\mathrm{n}} \\ a_{21} a_{22}\cdots\cdots a_{2\mathrm{n}} \\ \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ a_{\mathrm{n}1} a_{\mathrm{n}2}\cdots\cdots a_{\mathrm{nn}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{\mathrm{n}} \end{pmatrix}$$

而另一方面：

$$\vec{\mathrm{y}} = \left(\vec{e}_1，\vec{e}_2，\cdots\cdots，\vec{e}_{\mathrm{n}}\right)\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{\mathrm{n}} \end{pmatrix}$$

而$\vec{y}=A(\vec{x})$。两个向量相等，它们的所有分量都相等，所以线性变换 A 写成矩阵的形式标记为$[A][\vec{x}]=[\vec{y}]$。具体矩阵表达形式为：

$$\begin{pmatrix} a_{11} a_{12} \cdots\cdots a_{1n} \\ a_{21} a_{22} \cdots\cdots a_{2n} \\ \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ a_{n1} a_{n2} \cdots\cdots a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

矩阵元满足：

$$\left(\vec{e}_1{}',\ \vec{e}_2{}',\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_n{}'\right) = \left(\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_n\right) \begin{pmatrix} a_{11} a_{12} \cdots\cdots a_{1n} \\ a_{21} a_{22} \cdots\cdots a_{2n} \\ \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ a_{n1} a_{n2} \cdots\cdots a_{nn} \end{pmatrix}。$$

也就是说这个线性变换如果用矩阵表示的话，它的第 j 列，就是这个线性变换作用到这个线性空间中我们已选定的基足的第 j 个基矢上得到的向量在这组基矢下的展开系数。这样如果知道变换作用到基上会产生什么样的结果，就知道群元的矩阵表示了。

知道这个矩阵表示，我们就进而知道了它作用到线性空间中的任意一个向量$\sum_{i=1}^{n} x_i \vec{e}_i$上，得到的新向量的坐标：

$$\begin{pmatrix} a_{11} a_{12} \cdots\cdots a_{1n} \\ a_{21} a_{22} \cdots\cdots a_{2n} \\ \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ a_{n1} a_{n2} \cdots\cdots a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}。$$

现在线性空间、线性变换的定义都有了，我们还知道了在线性空间的一组基下，线性变换的矩阵表示。下一步，如果我们进一步定义线性变换的乘法，那么我们就可以把线性变换的集合往群的方向去描述了。这个群叫线性变换群。

定义 2.6 线性变换群：定义两个线性变换的乘法为两个线性变换相继作用，则 n 维复线性空间 V 上的全部非奇异线性变换在此乘法下构成一个群，称为 n 维复一般线性群 GL(V, C)，其子群 L(V, C)称为 V 上的线性变换群。

在这里需要对“非奇异”这个要求做个说明。为什么要非奇异，因为我们这个线性变换群或矩阵群是一个群，如果奇异了（矩阵的行列式为零），这个集合不能形成群。这个就像在实数乘法作为群元乘法的时候，所有实数不能形成一个群，因为零没有逆元，但所有非零实数就可以形成一个群，是一个道理。

由这个定义我们也知道 GL(V, C)，复一般线性群（注意‘一般’两个字），是包含 V 上的所有非奇异变换的。正常情况下，它是无穷多个，V 定了，它就定了，但我们一般不关心它。

线性变换群,是其中一些非奇异线性变换的集合(GL(V,C)的子集,形成群)，我们关心的是这个。因为群表示指的是我们感兴趣的抽象群 G，到这个线性变换群的同态映射关系。

定义 2.7 群表示：设有群 G，如存在一个从 G 到 n 维线性空间 V 上的线性变换群 L(V,C)的同态映射 A，则称 A 是群 G 的一个线性表示，V 为表示空间，n 是表示的维数。记为：

$$A\colon G\rightarrow L$$

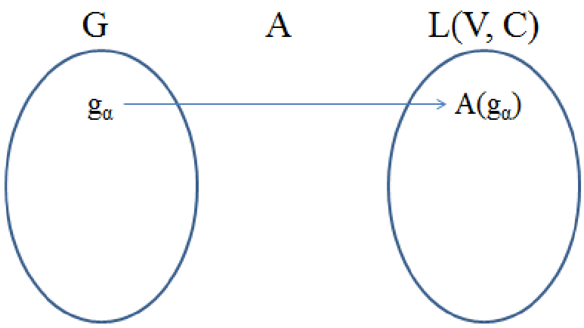
$$\forall g_\alpha \in G，有\ A(g_\alpha) \in L$$

$$\forall g_\alpha, g_\beta \in G，有\ A\left(g_\alpha g_\beta\right) = A(g_\alpha)A\left(g_\beta\right)$$

显然，G 的单位元素，由同态的定义，对应的是 V 上的恒等变换，互逆元素对应的是互逆的变换。

对于线性空间 V，如果选定一组特定的基矢，那么每个线性变换可以由一个矩阵表示，而线性变换群也会对应一个矩阵群。这时，抽象群 G 与线性变换群的同态映射关系也可以理解为抽象群 G 与矩阵群的同态映射关系。画成图的话就是这样的，左边是抽象群，右边是线性变换群，它在一个特定的基矢下表现为一

个矩阵群。表示指的是从左边到右边的同态映射关系。



（图 1：群表示示意图）

因为是同态，我们第一章讲了，严格意义上是多对一，保持乘法规则满映射。如果这个同态进一步严格，变为一对一的同构，那么相应的表示就变成了**忠实表示**。

同时，对于两个同构的群G与G'，如果 A 是G的表示，那么因为G与G'的同构（一对一）关系，A 也是G'的表示。（课上画图讲解）

由上面讲的概念，我们看几个例子。

例1. 任何群 G，恒与{1}（一阶单位矩阵）同态，这个表示称为一维恒等表示，或显然表示、平凡表示（trivial representation）。

推广一下，它和$\left\{\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right\}$也自然同态。一个群原则上说怎么都有无穷多个表示，我们后面会介绍可约、等价这些概念把它们联系起来，而我们真正关心的，是有个性那几个，我们称之为不等价不可约表示（后面会讲）。

例2. 任何矩阵群，都是自身的表示，且为忠实表示。

例3. 三个二阶群，1. {E, $\sigma_{\hat{k}}$}（三维空间对 xy 平面的反射），2. {E, $C_{\vec{k}}(\pi)$}（绕 z 轴转π角，3. {E, I}（空间反演操作）。表示空间为三维实空间，取基矢为$\{\hat{\imath},\hat{\jmath},\hat{k}\}$，它们的表示分别是什么？

很简单，步骤是按照我们之前说的线性变换对应的线性矩阵的定义。对 E 这个线性变换，因为恒等，所以把$\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$变为$\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$，对应的新向量在

旧基矢组下的展开系数分别为(1、0、0)，(0、1、0)、(0、0、1)，所以矩阵为三阶单位矩阵。实际上单位元对应的都是单位矩阵。

对非单位元，第一种情况，$\sigma_{\vec{k}}$把$\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$变为$\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、-$\hat{k}$。所以展开系数为(1、0、0)、(0、1、0)、(0、0、-1)，对应的表示矩阵为：$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$。

第二种情况，$C_{\vec{k}}(\pi)$把$\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$变为-$\hat{\imath}$、-$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$，矩阵为：$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$。

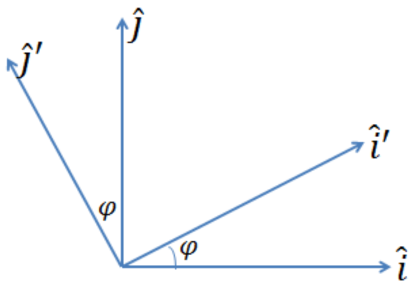
第三种情况，I 把$\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$变为-$\hat{\imath}$、-$\hat{\jmath}$、$-\hat{k}$，矩阵为：$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$。

结合一下，三个表示矩阵群分别是：$\left\{\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\right\}$，$\left\{\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\right\}$，$\left\{\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\right\}$。

同时，既然表示可以理解为抽象群到矩阵群的同态映射关系，上面的三个抽象群相互同构，那么这三个矩阵群也可以相互为那三个抽象群的表示。

例4. 绕 z 轴的转动群$\{C_{\vec{k}}(\varphi)\}$，表示空间为三维实空间，取基矢为$\{\hat{\imath},\hat{\jmath},\hat{k}\}$。

同样，还是将变换作用到基矢上，看效果。



（图 2：欧式空间转动示意）

$$C_{\vec{k}}(\varphi)\hat{\imath} = \cos\varphi\,\hat{\imath} + \sin\varphi\,\hat{\jmath}$$
$$C_{\vec{k}}(\varphi)\hat{\jmath} = -\sin\varphi\,\hat{\imath} + \cos\varphi\,\hat{\jmath}$$

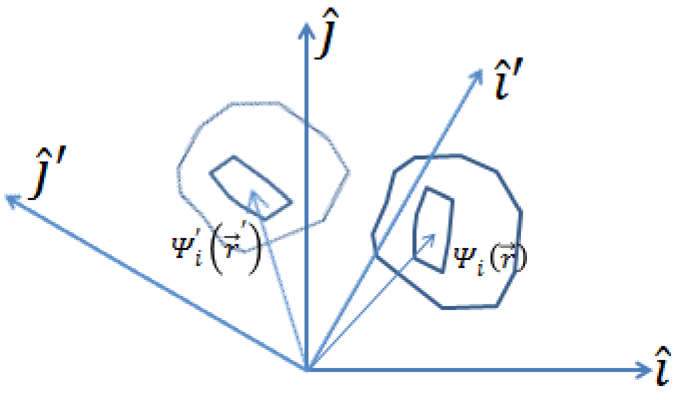
$$C_{\vec{k}}(\varphi)\hat{k} = \hat{k}$$

表示矩阵为：$\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

上面例子中取的基矢当群元作用到它们上面的时候效果都很直接，好理解。在下面我们讲具体表示的时候，还会遇到一类线性空间的基矢，是一些函数。在这个线性空间中，线性变换作用到它们身上效果不像上面一样好理解，我们也介绍一下。比如基组是$\{\Psi_1(\vec{r})$、$\Psi_2(\vec{r})$、……、$\Psi_n(\vec{r})\}$（大家以后比较经常遇到的会有平面波、高斯、球谐函数等等）。

g_α是我们抽象群的群元，它通过表示 A 所对应的线性空间的线性变换为$A(g_\alpha)$。我们要想知道它的矩阵表示形式，根据上面的介绍，就要知道 $A(g_\alpha)$作用到每个基函数上得到的新的函数按$\{\Psi_1(\vec{r})$、$\Psi_2(\vec{r})$、……、$\Psi_n(\vec{r})\}$这组基展开的展开系数。在这些函数中，$\vec{r}$是它们的变量（好好理解一下）。

现在我们以$\Psi_i(\vec{r})$为例，看 $A(g_\alpha)$作用到$\Psi_i(\vec{r})$上会得到什么样的效果？我们记$A(g_\alpha)\Psi_i(\vec{r})$为$\Psi_i'(\vec{r})$，我们知道$\Psi_i'(\vec{r})$为一个新的函数。如果这个抽象群群元$g_\alpha$的意义是它作用到三维实空间的一个向量$\vec{r}$上，得到一个新的向量$\vec{r}' = g_\alpha\vec{r}$。



（图二 函数变换示意图）

那么$\Psi_i(\vec{r})$这个函数本身的变化，由上图，我们可以想象满足$\Psi_i'(\vec{r}') = \Psi_i(\vec{r})$，其中$\vec{r}' = g_\alpha\vec{r}$，这也就意味着$\Psi_i'(\vec{r}) = \Psi_i(g_\alpha^{-1}\vec{r})$。再由于我们上面是把$A(g_\alpha)$作用到$\Psi_i(\vec{r})$上得到的函数$A(g_\alpha)\Psi_i(\vec{r})$记为$\Psi_i'(\vec{r})$的，其中满足：$\Psi_i'(\vec{r}) = \Psi_i(g_\alpha^{-1}\vec{r})$，这

也就意味着$\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)$这个线性变换，作用到$\Psi_i(\vec{r})$这个基函数上，得到的函数是$\Psi_i(\mathrm{g}_\alpha^{-1}\vec{r})$。我们要做的就是把$\Psi_i(\mathrm{g}_\alpha^{-1}\vec{r})$按$\{\Psi_1(\vec{r})$、$\Psi_2(\vec{r})$、……、$\Psi_\mathrm{n}(\vec{r})\}$展开就可以了。

一种数学上更为规范的语言去总结上面的分析，我们可以说: g_α是我们关心的抽象群的群元; 在一个由函数组成的线性空间, 它表现为一个线性变换$\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)$; 这个$\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)$的作用对象是函数, 也就是说$\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)$作用到函数$\Psi_i$上, 结果是$\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)\Psi_i$。这个新的函数，我们记为$\Psi_i'$；我们对它的要求是$\Psi_i'(\vec{r}')=\Psi_i(\vec{r})$，也就是说变换后的函数形式以变换后的坐标作为输入的话，输出的数值不变；根据这个要求，我们可以得到前面推出的$\Psi_i'(\vec{r})=\Psi_i(\mathrm{g}_\alpha^{-1}\vec{r})$。

这些讨论同样适用于其它群 G 的意义是作用到表示空间的基函数的变量的其它情况。换句话说，只要抽象群的群元是用作在基函数的变量上的，上面的讨论都适用。比如，我们后面会将一个东西叫群函数，我们也会用这个方法。现在为了方面理解，你们可以先按我上面说的把函数变量当成三维欧式空间的向量，抽象群群元是作用在这个向量上的变换。

举个具体例子。

例5. 线性空间为由下面六个函数组成的函数空间：$\{\Psi_1(\vec{r})=x^2$、$\Psi_2(\vec{r})=y^2$、$\Psi_3(\vec{r})=z^2$、$\Psi_4(\vec{r})=xy$、$\Psi_5(\vec{r})=yz$、$\Psi_6(\vec{r})=xz\}$。我们求 D3 群在它上面的表示。这里的基础是 D3 群的群元作用到三维实空间向量$\vec{r}$上的效果。以 d 为例，根据前面的讨论，我们知道效果是:

$$d\vec{r}=(\hat{\imath}\quad \hat{\jmath}\quad \hat{k})\begin{pmatrix}-1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}=(\hat{\imath}\quad \hat{\jmath}\quad \hat{k})\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}x-\frac{\sqrt{3}}{2}y\\ \frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{1}{2}y\\ z\end{pmatrix}。$$

这样我们知道对 f 这个 D3 群的群元，它作用到一个函数上，

$A(f)\Psi_1(\vec{r})=\Psi_1(f^{-1}\vec{r})=\Psi_1(d\vec{r})=(-\frac{1}{2}x-\frac{\sqrt{3}}{2}y)^2=\frac{1}{4}x^2+\frac{3}{4}y^2+\frac{\sqrt{3}}{2}xy$。展开系数为$\frac{1}{4}$、$\frac{3}{4}$、0、$\frac{\sqrt{3}}{2}$、0、0。

同样的方法作用到$\Psi_2(\vec{r})$到$\Psi_6(\vec{r})$上，我们就可以得到 f 的表示矩阵。其它群元表示矩阵也由相同的方法得到。

到这儿，这一节内容我讲完了，总结一下，三句话：

1. 群表示指的是抽象群 G 与线性变换群的同态映射关系。
2. 在求群表示矩阵的时候，我们要做的就是把每个基矢进行变换，然后按旧基展开，展开系数为表示矩阵的列。
3. 当表示空间的基为函数，而抽象群群元为其变量的变换时，函数变换满足的规律是：$A(g_\alpha)\Psi_i(\vec{r})=\Psi_i(g_\alpha^{-1}\vec{r})$。

2.2 等价表示、不可约表示、酉表示

上一节我们在举群表示的例子的时候，开始我们就提到了一个群的表示严格意义上是无穷多个，比如所有维数的单位矩阵都是这个群的表示。同时我们又提到了研究类似重复提高这些维数得到的这些表示在我们这门课程里其实没有意义，我们真正感兴趣的表示是不等价、不可约表示。要想理解什么是不等价不可约表示，那么首先我们就要理解什么是等价、可约。

先说等价表示，它在这一节的地位有点就像‘共轭’在‘类与不变子群’那节一样。下面的定义是从韩老师那本书上摘下来的，非常好！但有一个地方要说明（给完定义后进行）。

定义 2.8 等价表示：设群 G={g_α}在表示空间 V 上的一个表示 A 是{$A(g_\alpha)$}。也就是说对每个g_α有个非奇异变换与之对应，在一组基$(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \cdots\cdots, \vec{e}_n)$下，$A(g_\alpha)$为$g_\alpha$对应的非奇异矩阵。设 P 是 V 上的一个非奇异矩阵，det(P)不为零，则相似

矩阵集合$\{P^{-1}A(g_\alpha)P\}$也给出群 G 的一个表示，因为每个g_α也唯一对应一个 $P^{-1}A(g_\alpha)P$，且：$P^{-1}A(g_\alpha g_\beta)P=P^{-1}A(g_\alpha)A(g_\beta)P=P^{-1}A(g_\alpha)PP^{-1}A(g_\beta)P$，保持乘法规律不变。这个表示$\{P^{-1}A(g_\alpha)P\}$称为$\{A(g_\alpha)\}$的等价表示。

这个定义给我们的一个直观的感觉就是两个可以由相似变换联系起来的表示就是等价表示。这个感觉是对的，这也是我的理解。但它同时可能造成一个略显狭义的理解，就是你会觉得等价表示必须对应一个线性空间，因为它只提到了线性空间 V。实际上，当两个表示对应的表示空间不一样，但他们对应的表示矩阵群可以通过一个不依赖于g_α的非奇异矩阵 P，由 $P^{-1}\{A(g_\alpha)\}P$ 通过联系起来的时候，它们也等价。这种情况应该是广泛存在的，因为一个有限群的表示空间可以有很多，但最后它的不等价不可约表示就那么几个。这个我们后面会做详细解释。我建议大家先做最简单的理解：两个可以由相似变换联系起来的表示就是等价表示。但同时记住，等价表示的表示空间可以不一样。

针对这个理解，有三点需要进一步说明：

1. 既然两个等价表示是由相似变换联系起来的，那么两个等价表示的表示空间维数必须相同。
2. 判断两个表示是否等价，原则上，我们是要找到不依赖于g_α的非奇异矩阵 P，这很难。实际上，我们后面会引入一个叫特征标的东西，有了它就很方便了。
3. 表示$\{A(g_\alpha)\}$与$\{P^{-1}A(g_\alpha)P\}$的基函数具体什么关系？

   V 是一个线性空间，$\left(\vec{e}_1，\vec{e}_2，\cdots\cdots，\vec{e}_n\right)$是它的一组基，我们标记为 B。群 G 在 B 这组基下对应的表示矩阵群为$\{A(g_\alpha)\}$。对于一个线性变换 $A(g_\alpha)\vec{x}=\vec{y}$，其矩阵形式为：$[A(g_\alpha)]_B[\vec{x}]_B=[\vec{y}]_B$。这里$[A(g_\alpha)]_B$的第 j 列，是$\left(\vec{e}_1，\vec{e}_2，\cdots\cdots，\vec{e}_n\right)$里的第 j 个基在$A(g_\alpha)$这个线性变换下得到的新矢量在这组基下的

展开系数。

同样，对于另一组基$\left(\vec{e}_1{}', \vec{e}_2{}', \cdots\cdots, \vec{e}_{\mathrm{n}}{}'\right)$（记为$\mathrm{B}'$），$\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)$这组线性变换也有一个矩阵表达式，它们作用到向量$\vec{\mathrm{x}}$上，矩阵形式为：$[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}'}[\vec{x}]_{\mathrm{B}'} = [\vec{\mathrm{y}}]_{\mathrm{B}'}$。

当B'这组基与 B 这组基存在：

$$\left(\vec{e}_1{}', \vec{e}_2{}', \cdots\cdots, \vec{e}_{\mathrm{n}}{}'\right) = \left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \cdots\cdots, \vec{e}_{\mathrm{n}}\right)(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}$$

的关系时，我们看$[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}}$与$[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}'}$存在什么样的联系？

$\vec{\mathrm{y}}$这个向量，在 B 下，是：

$$\vec{\mathrm{y}} = \left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \cdots\cdots, \vec{e}_{\mathrm{n}}\right)\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{\mathrm{n}} \end{pmatrix} = \left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \cdots\cdots, \vec{e}_{\mathrm{n}}\right)[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{\mathrm{n}} \end{pmatrix}$$

在B'下，就是：

$$\vec{\mathrm{y}} = \left(\vec{e}_1{}', \vec{e}_2{}', \cdots\cdots, \vec{e}_{\mathrm{n}}{}'\right)\begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{\mathrm{n}}' \end{pmatrix}$$

$$= \left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \cdots\cdots, \vec{e}_{\mathrm{n}}\right)(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}'}\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{\mathrm{n}}' \end{pmatrix}$$

不管坐标系是哪个，向量是同样的向量，所以：

$$\left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \cdots\cdots, \vec{e}_{\mathrm{n}}\right)[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{\mathrm{n}} \end{pmatrix}$$

$$= \left(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \cdots\cdots, \vec{e}_{\mathrm{n}}\right)(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}'}\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{\mathrm{n}}' \end{pmatrix}$$

进而：

$$[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_\mathrm{B}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\\vdots\\x_\mathrm{n}\end{pmatrix}=(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}'}\begin{pmatrix}x_1'\\x_2'\\\vdots\\\vdots\\x_\mathrm{n}'\end{pmatrix}\qquad(2.3)$$

对向量$\vec{\mathrm{x}}$，根据同样分析，有：

$$\vec{\mathrm{x}}=\left(\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_\mathrm{n}\right)\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\\vdots\\x_\mathrm{n}\end{pmatrix}=\left(\vec{e}_1{}',\ \vec{e}_2{}',\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_\mathrm{n}{}'\right)\begin{pmatrix}x_1'\\x_2'\\\vdots\\\vdots\\x_\mathrm{n}'\end{pmatrix}$$

$$=\left(\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_\mathrm{n}\right)(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}\begin{pmatrix}x_1'\\x_2'\\\vdots\\\vdots\\x_\mathrm{n}'\end{pmatrix}$$

进而

$$\begin{pmatrix}x_1'\\x_2'\\\vdots\\\vdots\\x_\mathrm{n}'\end{pmatrix}=[(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}]^{-1}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\\vdots\\x_\mathrm{n}\end{pmatrix}$$

将这个式子代入式 2.3，我们有：

$$[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_\mathrm{B}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\\vdots\\x_\mathrm{n}\end{pmatrix}=(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}'}[(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}]^{-1}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\\vdots\\x_\mathrm{n}\end{pmatrix}$$

对任意$\vec{\mathrm{x}}$成立，所以，$[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_{\mathrm{B}'}=[(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}]^{-1}[\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)]_\mathrm{B}(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}$。

也就是说$\{\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)\}$是群 G 在 V 上取基矢组$\left(\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_\mathrm{n}\right)$的表示时，$\{\mathrm{P}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)\mathrm{P}\}$就是群 G 在 V 上取基矢组$\left(\vec{e}_1{}',\ \vec{e}_2{}',\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_\mathrm{n}{}'\right)$的表示。其中，$\left(\vec{e}_1{}',\ \vec{e}_2{}',\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_\mathrm{n}{}'\right)$与$\left(\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_\mathrm{n}\right)$的关系是：

$$\left(\vec{e}_1{}',\ \vec{e}_2{}',\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_\mathrm{n}{}'\right)=\left(\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_\mathrm{n}\right)(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}$$

换句话，在表示空间不变的情况下，你可以说等价表示就是把基换一下，得到的矩阵群。

在表示空间改变的情况，我们可以理解为$\{P^{-1}A(g_\alpha)P\}$的基，与$\{A(g_\alpha)\}$的基做线性变换后得到的基矢组

$$\left(\vec{e}_1{}',\ \vec{e}_2{}',\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_{\mathrm{n}}{}'\right)=\left(\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \cdots\cdots,\ \vec{e}_{\mathrm{n}}\right)(P)_{\mathrm{n}\times\mathrm{n}}$$

一一对应。

现在说完了等价表示。一句话，它们是由相似变换联系起来的。相似变换，大家在学线性代数的时候应该有印象，我们一般是用来做矩阵对角化的。也就是说我们通过相似变换，找到一组新的基，使得矩阵在这组新基下具有对角化的形式。类似的操作我们称为约化矩阵。下面我们要讲的概念，和约化矩阵有关，这个概念是可约表示。

定义 2.9 可约表示：设 A 是群 G 在表示空间 V 上的一个表示，如果 V 存在一个 G 不变的真子空间 W（‘真’指的是这个空间不能为 V 本身或只包含零向量），则称 A 是可约表示。这里 G 不变的真子空间 W，是指对其中$\forall\vec{\mathrm{y}}$，对$\forall \mathrm{g}_\alpha\in \mathrm{G}$，做$\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)\vec{\mathrm{y}}$，得到的矢量仍然属于 W，也就是说$\forall\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)$都不会把 W 中向量变到 W 外面去。

由这个定义，我们知道当 V 存在 G 不变的真子空间 W 的时候，总可以在 V 中取一组基$\left(\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \cdots,\ \vec{e}_{\mathrm{m}},\ \vec{e}_{\mathrm{m+1}},\ \cdots,\ \vec{e}_{\mathrm{n}}\right)$，其中$\vec{e}_1,\ \vec{e}_2,\ \cdots,\ \vec{e}_{\mathrm{m}}$是 W 中的向量，W 的维数是 m。如果我们做线性变换表示矩阵的话，那么我们矩阵群中的每个矩阵都具备这样的性质：

$$\mathrm{A}(\mathrm{g}_\alpha)=\begin{pmatrix}\mathrm{C}_\alpha & \mathrm{N}_\alpha\\ 0 & \mathrm{B}_\alpha\end{pmatrix}$$

这个里面C_α为$\mathrm{m}\times\mathrm{m}$矩阵，$\mathrm{N}_\alpha$为$\mathrm{m}\times(\mathrm{n}-\mathrm{m})$矩阵，$\mathrm{B}_\alpha$为$(\mathrm{n}-\mathrm{m})\times(\mathrm{n}-\mathrm{m})$矩阵，左下角的 0，代表$(\mathrm{n}-\mathrm{m})\times\mathrm{m}$的零矩阵。

这时，W 空间中向量的表示形式为：$\vec{y}=\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$，显然$A(g_\alpha)\vec{y}\in W$。

由这个定义，我们还可以去想，当一个群的表示矩阵群具有如上豆腐块形式的话，这个表示可约吗？（答案：可约）

反过来，当一个群的表示不具备如上豆腐块的形式，这个表示就不可约吗？（不一定，可能基没有选对，比如我群是饶 z 轴的转动群，在三维空间，它肯定可约，因为我的子空间 xy 平面对它不变。但是如果我选的基里面，前两个不属于 xy 平面，那么我的表示矩阵就不会具备上面的样子）。

换句话，判断一个群的表示是否可约，不是看它是否已经具备豆腐块的形式，而是要看它是否具备成为豆腐块的潜质。这个潜质体现在它的表示空间上。表示矩阵是外在的东西，表示空间是内在的东西，关键看内在。

现在讲完了可约，说的是有个 G 的表示空间 V，存在真子空间 W，对$\forall\vec{y}$，对$\forall g_\alpha\in G$，做$A(g_\alpha)\vec{y}$，得到的矢量仍然属于 W。下面讲的两个概念与它的正交补空间以及这个正交补空间在线性变换下的变换性质有关。这两个概念是线性空间的直和与完全可约。

定义 2.10 直和：对于群 G 的表示空间 V，W 与W'是它的子空间，如对$\forall\vec{x}\in V$，都能找到$\vec{y}\in W$，$\vec{z}\in W'$，使得$\vec{x}$可唯一地分解为：$\vec{x}=\vec{y}+\vec{z}$，则称 V 是 W 与W'的直和。记为：$V=W\oplus W'$。唯一分解这个条件要求$W\cap W'=\{0\}$。

再根据直和可以定义完全可约。

定义 2.11 完全可约：我们把 G 的表示空间 V 分解为 W 与W'的直和，如 W 与W'都是 G 不变的，则称 V 这个表示空间完全可约。

显然完全可约是一种特殊的可约，我们在以后学习的过程中，会遇到很多的

定理，说的都是“某某表示可约则完全可约”。在这本书的范畴内，基本我们讲的都是完全可约[6]。

由可约表示的定义，我们还可以通过其逆否命题得到：如果群 G 表示 A 的表示空间 V 不存在 G 不变的真子空间，则称 A 是 G 的不可约表示。

同时，由上面的讨论，我们还知道如果群 G 的表示不可约，它一定不能写成豆腐块$\begin{pmatrix} C_\alpha & N_\alpha \\ 0 & B_\alpha \end{pmatrix}$的形式。

如 G 的表示完全可约，这个豆腐块的形式还可以进一步变换为：$\begin{pmatrix} C_\alpha & 0 \\ 0 & B_\alpha \end{pmatrix}$。

这时，W 中向量表示为：$\vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$，W′中向量表示为：$\vec{z} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ z_1 \\ \vdots \\ z_m \end{pmatrix}$。

这时我们称 A 可以约化为 C 与 B 的直和，记为$A(g_\alpha) = C(g_\alpha) \oplus B(g_\alpha)$。同样，对 B、C 的表示空间，我们可进一步寻求约化，如每个可约都是完全可约，则任何表示最终都可以约化为不可约表示的直和，记作：$A(g_\alpha) = \sum_p \oplus\, m_p A^p(g_\alpha)$，其中$m_p$代表不可约表示$A^p$出现的次数，称为重复度。

有了这些概念，大家现在就可以理解“对任何群，求其全部不等价不可约表示是我们群表示论的主要课题（注意是主要，比重要还重要)”这句话了。

前面我们提到的“某某表示可约则完全可约”这句话，为了让大家先有个体会，我们讲个定理。

定理 2.1 对于有限群，表示可约则完全可约（有限群涵盖我们这学期主要内容)。

证明：

设可约表示可写成上三角形式：

[6]这里先交个底，下面慢慢体会。

$$A(g_\alpha)=\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha) & R(g_\alpha)\\ 0 & G_2(g_\alpha)\end{pmatrix}$$

前面说过了，面$G_1(g_\alpha)$为$m\times m$矩阵，$R(g_\alpha)$为$m\times(n-m)$矩阵，$G_2(g_\alpha)$为$(n-m)\times(n-m)$矩阵，左下角的 0，代表$(n-m)\times m$的零矩阵。

如果我们可以证明，存在一个矩阵 P，使得 $P^{-1}AP$ 后，得到：

$$P^{-1}A(g_\alpha)P=G_0(g_\alpha)=\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha) & 0\\ 0 & G_2(g_\alpha)\end{pmatrix}$$

那我们就成功了。（沿着这个路子往下去找）

这个 P 的形式可以设为：

$$P=\begin{pmatrix}I_m & C\\ 0 & I_{n-m}\end{pmatrix}$$

其中 I 为单位矩阵，关键是要确定 C 这个$m\times(n-m)$矩阵。

由$P^{-1}A(g_\alpha)P=G_0(g_\alpha)$知$A(g_\alpha)P=PG_0(g_\alpha)$，把它们的具体形式分别带入得：

$$\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha) & R(g_\alpha)\\ 0 & G_2(g_\alpha)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}I_m & C\\ 0 & I_{n-m}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}I_m & C\\ 0 & I_{n-m}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha) & 0\\ 0 & G_2(g_\alpha)\end{pmatrix}$$

也就是：

$$\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha) & G_1(g_\alpha)C+R(g_\alpha)\\ 0 & G_2(g_\alpha)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha) & CG_2(g_\alpha)\\ 0 & G_2(g_\alpha)\end{pmatrix}。$$

这样要证的就简化为了：

$$G_1(g_\alpha)C+R(g_\alpha)=CG_2(g_\alpha), \tag{2.4}$$

也就是说存在 C，使它成立。

我们先把这个式子放一下，去找些对证明有利的条件，把它变个形。这个条件是由“A 是群表示”提供的，也就是：

$$A(g_\alpha)=\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha) & R(g_\alpha)\\ 0 & G_2(g_\alpha)\end{pmatrix},\ A(g_\alpha^{-1})=\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha^{-1}) & R(g_\alpha^{-1})\\ 0 & G_2(g_\alpha^{-1})\end{pmatrix}$$

同时$A(g_\alpha)A(g_\alpha^{-1})=I_n$，因此：

$$G_1(g_\alpha)G_1(g_\alpha^{-1})=I_m，G_2(g_\alpha)G_2(g_\alpha^{-1})=I_{n-m} \tag{2.5}$$

现在由式 2.5 对式 2.4 进行变形，后者两边右乘$G_2(g_\alpha^{-1})$，得：

$$G_1(g_\alpha)CG_2(g_\alpha^{-1})+R(g_\alpha)G_2(g_\alpha^{-1})=CG_2(g_\alpha)G_2(g_\alpha^{-1})=C$$

等同于：

$$G_1(g_\alpha)CG_2(g_\alpha^{-1})=C-R(g_\alpha)G_2(g_\alpha^{-1}) \tag{2.6}$$

也就是说只要找到一个 C，使得式 2.6 成立。

这个 C 存不存在呢？我们可以试：

$$C=\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}R(g)G_2(g^{-1})$$

把这个表达式代入 2.6，左边等于：

$$\begin{aligned}G_1(g_\alpha)CG_2(g_\alpha^{-1})&=G_1(g_\alpha)\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}R(g)G_2(g^{-1})\,G_2(g_\alpha^{-1})\\&=G_1(g_\alpha)\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}R(g)\,G_2(g^{-1}g_\alpha^{-1})\\&=\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}G_1(g_\alpha)R(g)\,G_2((g_\alpha g)^{-1})\end{aligned} \tag{2.7}$$

到这里还是做不下去，需要更多条件，跟上面一样，继续利用条件“A 是一个表示”，知：

$$\begin{aligned}A(g_\alpha)A(g)&=\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha)&R(g_\alpha)\\0&G_2(g_\alpha)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}G_1(g)&R(g)\\0&G_2(g)\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha)G_1(g)&G_1(g_\alpha)R(g)+R(g_\alpha)G_2(g)\\0&G_2(g_\alpha)G_2(g)\end{pmatrix}\\&=A(g_\alpha g)=\begin{pmatrix}G_1(g_\alpha g)&R(g_\alpha g)\\0&G_2(g_\alpha g)\end{pmatrix}\end{aligned}$$

类似 $G_1(g_\alpha)G_1(g)=G_1(g_\alpha g)$ 这些条件我们前面用过了，这里用 $G_1(g_\alpha)R(g)+R(g_\alpha)G_2(g)=R(g_\alpha g)$，它等同于 $G_1(g_\alpha)R(g)=R(g_\alpha g)-R(g_\alpha)G_2(g)$，代入 2.7 式，得：

$$\begin{aligned}G_1(g_\alpha)CG_2(g_\alpha^{-1})&=\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}\big(R(g_\alpha g)-R(g_\alpha)G_2(g)\big)\,G_2((g_\alpha g)^{-1})\\&=\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}\big(R(g_\alpha g)\big)\,G_2((g_\alpha g)^{-1})-\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}R(g_\alpha)G_2(g)\,G_2((g_\alpha g)^{-1})\\&=\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}\big(R(g_\alpha g)\big)\,G_2((g_\alpha g)^{-1})-\frac{1}{n_G}\sum_{g\in G}R(g_\alpha)G_2({g_\alpha}^{-1})\end{aligned}$$

上式第一部分由重排定理等于 C，第二部分由于加和与 g_α 无关，等于

$R(g_\alpha)G_2(g_\alpha{}^{-1})$，所以上式继续等于:

$$G_1(g_\alpha)CG_2(g_\alpha^{-1}) = C - R(g_\alpha)G_2(g_\alpha{}^{-1})$$

这个就是我们要证的式 2.6 了。

（证毕）

总结一下，有限群可约则完全可约。证明中用到了对 g 的加和，所以这个证明只对有限群成立。

讲完了可约表示，下一个我们想说明的概念是酉（unitary, 也叫幺正）表示。这个概念的基础是酉变换（unitary transformation，幺正变换）。这个大家在线性代数中应该学过，简单地说，酉变换就是一个保内积变换，当线性空间取的基是正交归一基的时候，它表现为酉矩阵。

也就是说酉变换的特点是: $\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{I}$, 这里它们都是算符。取正交归一基时，其矩阵满足$U^{+}U = I$，这里它们都是矩阵，$\widetilde{U}^{*}$是$U$的转置共轭，$\widetilde{U}^{*}$等于$U^{-1}$。后面的讨论为了方便，我们都取正交归一基，这样酉变换的矩阵就是酉矩阵。

定义 2.12 酉表示：由酉变换群或酉矩阵群进行的表示是酉表示。

根据上面的介绍，它的特征是：$A(g_\alpha)^{+} = A(g_\alpha)^{-1} = A(g_\alpha{}^{-1})$。写成矩阵元的形式就是：$[A(g_\alpha)]_{j,i}^{*} = [A(g_\alpha)^{-1}]_{i,j}$=$[A(g_\alpha{}^{-1})]_{i,j}$。

关于酉表示，有个定理，也属于“某某表示可约则完全可约”的情况。

定理 2.2 酉表示可约则完全可约。

证明:

酉表示是定义在内积空间 V 的，A 可约，则 V 中有 G 不变的真子空间 W。

将 V 就 W 与其正交补空间 $W^{\perp}$作直和，$V = W \oplus W^{\perp}$。

那么这样的话，对$\forall\vec{y} \in W$，$\forall\vec{z} \in W^{\perp}$，有$(\vec{y}|\vec{z}) = 0$。我们目前已知 W 是 G 不变的，下面只需证明$W^{\perp}$也是 G 不变的即可。

因 W 是 G 不变的，所以对$\forall g_{\alpha} \in G$，$\forall \vec{y} \in W$，有$A(g_{\alpha})\vec{y} \in W, A(g_{\alpha}{}^{-1})\vec{y} \in W$，$A(g_{\alpha})^{-1}\vec{y} \in W$。

这样的话对$\forall g_{\alpha} \in G$，$\forall \vec{z} \in W^{\perp}$，也有：

$$(A(g_{\alpha})\vec{z}|\vec{y}) = (\vec{z}|A(g_{\alpha})^{+}\vec{y}) = (\vec{z}|A(g_{\alpha})^{-1}\vec{y}) = (\vec{z}|A(g_{\alpha}{}^{-1})\vec{y}) = (\vec{z}|\vec{y}')$$

其中，由于$\vec{y}' \in W$，所以$(\vec{z}|\vec{y}') = 0$，这也就是说对$\forall g_{\alpha} \in G$，$\forall \vec{z} \in W^{\perp}$，有$(A(g_{\alpha})\vec{z}|\vec{y}) = 0$。$W^{\perp}$也是 G 不变的。A 完全可约。

（证毕）

由这个性质，我们也可以得到：有限维酉表示总可分解为不可约表示的直和。

2.3 群代数与正则表示

现在我们讲完了群表示论这章的前两节，这一章一共是六节，我们在开始第三节之前先说一下这六节分别是做什么么的，方便有个整体的理解。

第一节、 群表示

第二节、 等价表示、不可约表示、酉表示

第三节、 群代数与正则表示

第四节、 有限群表示理论

第五节、 特征标理论

第六节、 新表示的构成

这六节里面，前两节是基础，第一节告诉了我们什么是群表示，第二节讲了等价表示、不可约表示、和酉表示。它们的目的是为了把我们的研究重点引到一个群的不等价、不可约表示上来。

在这个目的明确后，按理说，我们就应该讲有限群表示理论、特征标理论了。前面我提过前两章是我们群论这门课的理论基础，从概念体系的角度来讲是重点。

现在，我要再进一步说明一下，其中第二章的第四、第五节，也就是有限群表示理论与特征标理论，是重中之重。

我们前两章花了那么大力气去解释的所有概念，说白了，都是为了让大家能够理解这两节的内容。但在知道了群表示、等价、不可约、酉表示是什么之后，在进入这两节之前，我们还需要进行最后一个铺垫。这个最后的铺垫就是《群代数与正则表示》。这一节有两个重要的概念，群代数、正则表示。后面推有限群表示理论基本定理的时候，必须要用到这两个概念。

我们从群代数开始。在了解群代数之前，我们先看一下什么是代数？（很明显，群代数是一种代数）

定义 2.13 设 R 是数域 K 上的线性空间，在 R 上可定义乘法，如该乘法对$\forall\vec{x}$，$\vec{y}$，$\vec{z}\in R$，$\forall a\in K$，有：

1. $\vec{x}\vec{y}\in R$（两个向量的乘积仍然是这个线性空间的向量）
2. $\vec{x}(\vec{y}+\vec{z})=\vec{x}\vec{y}+\vec{x}\vec{z}$、$(\vec{x}+\vec{y})\vec{z}=\vec{x}\vec{z}+\vec{y}\vec{z}$（乘法分配律）
3. $a(\vec{x}\vec{y})=(a\vec{x})\vec{y}=\vec{x}(a\vec{y})$（数乘可结合交换）

则称 R 是线性代数，或代数。

由这个定义我们知道代数是定义了向量乘法，且该乘法满足如上三个条件的线性空间。

这三个性质中不包含向量乘法的结合律，也就是$(\vec{x}\vec{y})\vec{z}=\vec{x}(\vec{y}\vec{z})$，当这个结合律进一步成立的时候，对应的代数为结合代数。

看个例子。

例6.　全部$n\times n$复矩阵，它们的线性组合还是$n\times n$复矩阵，且满足线性空间的那些要求，这些$n\times n$复矩阵的集合是构成线性空间。这个线性空间我们

可以取：

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}0&1&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}0&0&1&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\\0&0&0&\cdots&0\end{pmatrix}\cdots\cdots$$

共$\mathrm{n}\times\mathrm{n}$个。

在这个线性空间的基础上，我们可以进一步定义向量乘法为矩阵乘法，这时很明显，这个乘法是满足：$\vec{\mathrm{x}}\vec{\mathrm{y}}\in\mathrm{R}$；$\vec{\mathrm{x}}(\vec{\mathrm{y}}+\vec{\mathrm{z}})=\vec{\mathrm{x}}\vec{\mathrm{y}}+\vec{\mathrm{x}}\vec{\mathrm{z}}$、$(\vec{\mathrm{x}}+\vec{\mathrm{y}})\vec{\mathrm{z}}=\vec{\mathrm{x}}\vec{\mathrm{z}}+\vec{\mathrm{y}}\vec{\mathrm{z}}$（乘法分配律）；$a(\vec{\mathrm{x}}\vec{\mathrm{y}})=(a\vec{\mathrm{x}})\vec{\mathrm{y}}=\vec{\mathrm{x}}(a\vec{\mathrm{y}})$（数乘可结合交换）的。所以这个线性空间同时也形成一个线性代数。

另一个关于代数的例子与我们要研究的群有关，是群代数。对它进行定义的基本思路是先以群元为基，它们的线性组合为向量，定义一个线性空间，叫群空间。然后，再在这个群空间的基础上，定义一个向量乘法，之后去验证这个线性空间中的向量在这个乘法下是否满足代数的定义，验证的结果是满足的，这样就定义了一个群代数。

我们先看群空间。

定义 2.14 群空间：设 C 是复数域，G=$\{\mathrm{g}_\alpha\}$是一个群，群 G 原来只有其中元素的乘法。我们以这些元素的线性组合为向量，对它们定义加法与数乘，使得对：$\forall\vec{\mathrm{x}}=\sum_\alpha x_\alpha \mathrm{g}_\alpha$，$\forall\vec{\mathrm{y}}=\sum_\alpha y_\alpha \mathrm{g}_\alpha$，$x_\alpha$、$y_\alpha$、$a\in$ C，有：$\vec{\mathrm{x}}+\vec{\mathrm{y}}=\sum_\alpha(x_\alpha+y_\alpha)\mathrm{g}_\alpha$、$a\vec{\mathrm{x}}=\sum_\alpha(ax_\alpha)\mathrm{g}_\alpha$，那么我们称这个向量的组合形成一个线性空间。这个线性空间称为群空间，记为 V_G。

定义 2.15 群代数：在上面定义的线性空间的基础上，进一步定义乘法规则。下面的标记中，我们规定 G 中元素g_α、g_β、g_γ的关系为$\mathrm{g}_\alpha\mathrm{g}_\beta=\mathrm{g}_\gamma$。这时，对$\forall\vec{\mathrm{x}}=\sum_\alpha x_\alpha \mathrm{g}_\alpha$，$\forall\vec{\mathrm{y}}=\sum_\beta y_\beta \mathrm{g}_\beta$，有：

$\vec{x}\vec{y} = (\sum_\alpha x_\alpha g_\alpha)(\sum_\beta y_\beta g_\beta) = \sum_{\alpha,\beta} x_\alpha y_\beta (g_\alpha g_\beta)$

（这里有两个循环，分别作用到$\vec{x}$的向量分量指标以及$\vec{y}$的向量分量指标上）

如果你觉得它不好看，也可以把它写为：

$\vec{x}\vec{y} = \sum_\gamma (\vec{x}\vec{y})_\gamma g_\gamma$，其中$(\vec{x}\vec{y})_\gamma = \sum_\alpha x_\alpha y_{\alpha^{-1}\gamma}$，$y_{\alpha^{-1}\gamma}$代表向量$\vec{y}$在$g_\alpha^{-1}g_\gamma$上的分量。这样定义的向量乘法是满足结合代数（比一般代数还更严格）的条件的，我们把这个群空间基于上述定义的向量乘法形成的代数称为群代数，记为 R_G。

需要说明的是，在上面两个加和的式子中，加和的方式是不同的。第一种加和很好理解，就是向量$\vec{x}$有个分量的循环，向量$\vec{y}$有个分量的循环，我们别做这两个循环，看最终的效果。

第二个式子的样子看起来好看些，因为$\sum_\gamma (\vec{x}\vec{y})_\gamma g_\gamma$直接代表了一个群元的线性组合，$(\vec{x}\vec{y})_\gamma$代表了它在$g_\gamma$上的分量。但这种好看的背后隐藏的，是你在计算$(\vec{x}\vec{y})_\gamma$的时候的辛苦。它不是凭空来的，要想知道这一组数，我们需要进行类似$\sum_\alpha x_\alpha y_{\alpha^{-1}\gamma}$的加和。也就是选定一个γ指标，我们在求向量乘积结果的向量在这个指标上的分量的时候，在对$\vec{x}$与$\vec{y}$的分量进行乘积加和的时候，加和指标是在$\vec{x}$的分量指标上，在g_α走遍群 G 中所有元素的时候，与它相乘的$\vec{y}$向量只取$g_\alpha^{-1}g_\gamma$这个分量上的系数进行相乘，**以保证乘完的结果是g_γ这个群元。**

这样说可能还是不太直接。为了在课上给个更直观的例子，我们还是取 C_3 群，看这个概念在这里是什么样的？

例7. C_3 群，元素为{e、d、f}，取群空间两个向量$\vec{x} = e + 2d + 3f$、$\vec{y} = 2e + 3d + f$，利用上面的向量乘法定义，看$\vec{x}\vec{y}$等于什么？

1. $\vec{x}\vec{y} = \sum_{\alpha,\beta} x_\alpha y_\beta (g_\alpha g_\beta) = (e + 2d + 3f)(2e + 3d + f) = 2e + 3d + f + 4d + 6f + 2e + 6f + 9e + 3d = 13e + 10d + 13f$
2. $\vec{x}\vec{y} = \sum_\gamma (\vec{x}\vec{y})_\gamma g_\gamma$

$g_\gamma = e$时，加和在$\vec{x}$指标上，但这个加和对$\vec{y}$中向量有要求。$\vec{x}$中的 e 只能对应$\vec{y}$中的 e，两个系数相乘贡献 2；$\vec{x}$中的 d 只能对应$\vec{y}$中的 f，两个系数相乘贡献 2；$\vec{x}$中的 f 只能对应$\vec{y}$中的 d，两个系数相乘贡献 9。加在一起 13。

$g_\gamma = d$时，$\vec{x}$中的 e 只能对应$\vec{y}$中的 d，两个系数相乘贡献 3；$\vec{x}$中的 d 只能对应$\vec{y}$中的 e，两个系数相乘贡献 4；$\vec{x}$中的 f 只能对应$\vec{y}$中的 f，两个系数相乘贡献 3。加在一起 10。

$g_\gamma = f$时，$\vec{x}$中的 e 只能对应$\vec{y}$中的 f，两个系数相乘贡献 1；$\vec{x}$中的 d 只能对应$\vec{y}$中的 d，两个系数相乘贡献 6；$\vec{x}$中的 f 只能对应$\vec{y}$中的 e，两个系数相乘贡献 6。加在一起 13。

加在一起还是$13e + 10d + 13f$。

这样定义的乘法，显然满足结合代数的条件：

1．$\vec{x}\vec{y} \in R_G$

2．$\vec{x}(\vec{y} + \vec{z}) = \vec{x}\vec{y} + \vec{x}\vec{z}$、$(\vec{x} + \vec{y})\vec{z} = \vec{x}\vec{z} + \vec{y}\vec{z}$

3．$a(\vec{x}\vec{y}) = (a\vec{x})\vec{y} = \vec{x}(a\vec{y})$

4．$(\vec{x}\vec{y})\vec{z} = \vec{x}(\vec{y}\vec{z})$

因此形成一个代数。

现在有了群空间 V_G 的定义、群代数 R_G 的定义，那么对群中任意群元g_i，我们都可以通过群代数 R_G 的定义，把它映射为一个群空间 V_G 上的线性变换。因为对 V_G 上任意向量$\vec{x} = \sum_j x_j g_j$，g_i作用到它上面等于$L(g_i)\vec{x} = \sum_j x_j g_i g_j$，还是群空间向量。这样定义的每个群元$g_i$对应的群空间中的线性变换，我们记为$L(g_i)$。

我们把每个群元对应的群空间 V_G 上的线性变换都放在一起，是一个线性变换的集合。对于这个线性变换的集合，如果我们进一步定义两个线性变换$L(g_i)$与

$L(g_j)$的乘积$L(g_i)L(g_j)$为先让$L(g_j)$作用，再让$L(g_i)$作用，那么根据上面定义的线性变换规则，我们很容易证明这个线性变换的集合是满足群的四个条件的。这样的话我们就可以建立一个群 G，到它的群空间 V_G 上的线性变换群$\{L(g_i)\}$的映射。同时这样的映射保持群 G 的乘法关系不变。

定义 2.16 左正则表示：由如上所述的抽象群 G 与线性变换群$\{L(g_i)\}$的同态映射关系，形成群 G 的一个表示，因为线性变换$L(g_i)$从左边作用到群空间的向量上的，我们称之为左正则表示。

这样一个表示，对$g_i \neq g_j$，所对应的线性变换肯定是不同的，因为假设它们相同，那么它们作用到g_k上一样，就会得到$g_i g_k = g_j g_k$，进而$g_i = g_j$，与假设矛盾。所以这样同态映射还是一个同构映射。左正则表示是群表示的忠实表示[7]。

与左正则表示对应，在定义线性变换的时候，我们也可以定义群元g_i所对应的线性变换,在作用到群空间 V_G的任意向量$\vec{x} = \sum_j x_j g_j$上时,效果为$\sum_j x_j g_j g_i^{-1}$。这个结果对应群空间中的一个向量，所以它也是群空间上的一个线性变换，记为$R(g_i)$。如果进一步定义这个线性变换所对应的线性变换的集合$\{R(g_i)\}$中两个元素$R(g_i)$与$R(g_j)$相乘$R(g_i)R(g_j)$为先让$R(g_j)$作用，再让$R(g_i)$作用，那么这个线性变换的集合也是形成一个线性变换群的。并且群 G 也和这个线性变换群同构。也就是说$\{R(g_i)\}$也形成群 G=$\{g_i\}$的一个表示，这个表示称为右正则表示。

左正则与右正则表示统称正则表示。有时也叫正规表示。因为它的表示空间是 n 维的，所以它是一个 n 维表示。

对于上面定义的$L(g_i)\vec{x} = \sum_j x_j g_i g_j$（左正则），或者$R(g_i)\vec{x} = \sum_j x_j g_j g_i^{-1}$（右

[7]这个同构很重要，因为它意味着做正则表示矩阵与抽象群群元存在一一对应关系。基于这个关系，在后面有限群表示理论那一节，我们会利用正则表示来剖析群的结构。这句话可在学完第四节后回头体会。

正则）这种变换，我们写的这个表达方式稍微有些复杂。其实对它们来说，如果在线性空间（也就是群空间）中取一组基，我们把这些线性变换作用到这组基上的结果写出来之后，这些线性变换作用到这个线性空间的任何一个向量上的效果也就自然清楚了。

基于这样一个原因，大家看其它书的话，经常有用这些方式来定义左正则变换和右正则变换的：

$\mathrm{L}(\mathrm{g}_i)\mathrm{g}_j = \mathrm{g}_i\mathrm{g}_j$，$\mathrm{L}(\mathrm{g}_i)\mathrm{L}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_k = \mathrm{g}_i\mathrm{g}_j\mathrm{g}_k$；

$\mathrm{R}(\mathrm{g}_i)\mathrm{g}_j = \mathrm{g}_j\mathrm{g}_i^{-1}$，$\mathrm{R}(\mathrm{g}_i)\mathrm{R}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_k = \mathrm{g}_k\mathrm{g}_j^{-1}\mathrm{g}_i^{-1}$

这个定义和我们上面的定义，效果是一样的。用这个定义的话线性变换群是抽象群的表示这样个关系还更好说明，因为：

$$\mathrm{L}(\mathrm{g}_i)\mathrm{L}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_k = \mathrm{g}_i\mathrm{g}_j\mathrm{g}_k = \mathrm{L}(\mathrm{g}_i\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_k$$

$$\mathrm{R}(\mathrm{g}_i)\mathrm{R}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_k = \mathrm{g}_k\mathrm{g}_j^{-1}\mathrm{g}_i^{-1} = \mathrm{g}_k(\mathrm{g}_i\mathrm{g}_j)^{-1} = \mathrm{R}(\mathrm{g}_i\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_k$$

这里，我是把两个说法都说一下，供大家参考。

在这个正则表示的定义中，我们已经用到了群代数的概念，为什么？

（因为已经牵扯到了群空间向量的乘法，不管是左正则表示还是右正则表示，他们背后的群空间与群代数的概念是完全一样的。不一样的是定义变化的时候把变换对应到了不同的乘法形式上，对左正则，定义的变换对应的乘法是$\mathrm{L}(\mathrm{g}_i)\mathrm{g}_j = \mathrm{g}_i\mathrm{g}_j$，对右正则，定义的变换对应的乘法是$\mathrm{R}(\mathrm{g}_i)\mathrm{g}_j = \mathrm{g}_j\mathrm{g}_i^{-1}$，向量乘法本身的规则相同）

现在看几个正则表示的表示矩阵，以左正则表示为例。

例8. 二阶循环群 Z_2={e、a}，群空间中的基为$|e\rangle$、$|a\rangle$。$L(e)|e\rangle$=ee=$1|e\rangle+0|a\rangle$，$L(e)|a\rangle$=ea=$0|e\rangle+1|a\rangle$，$L(a)|e\rangle$=ae=$0|e\rangle+1|a\rangle$，$L(a)|a\rangle$=aa=$1|e\rangle+0|a\rangle$。

所以线性变换所对应的矩阵群为：$\left\{\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\right\}$。

Z_2 是个二阶群，这个线性变换群也是一个二阶群，表示为忠实表示。

前面我们说过表示可约与不可约这样一个概念，我们说了可约表示可以写成豆腐块的形式。豆腐块的表示一定可约，但不是豆腐块的表示不一定不可约，因为它可以通过相似变换变为豆腐块的形式。

对于上面的二阶矩阵群，就是这样一个例子。它表面上没有豆腐块的形式，但是如果我们取$X=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix}$，那么$X^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix}$，用相似变换就会得到$X\left\{\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\right\}X^{-1}=\left\{\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\right\}$。这个矩阵群就有豆腐块的形式了。

实际上，对有限群，后面我们会说到（Burnside 定理），除了一阶群，正则表示都可约。

例9. D_3 群，六个元素，乘法表为：

	e	**d**	**f**	**a**	**b**	**c**
e	e	d	f	a	b	c
d	d	f	e	c	a	b
f	f	e	d	b	c	a
a	a	b	c	e	d	f
b	b	c	a	f	e	d
c	c	a	b	d	f	e

我问左正则表示中，a 对应的表示矩阵是什么？

看乘法表中 a 对应那一行，说明 L(a)作用到六个群元基矢上，展开系数分别为：（0、0、0、1、0、0）、（0、0、0、0、1、0）、（0、0、0、0、0、1）、（1、0、0、0、0、0）、（0、1、0、0、0、0）、（0、0、1、0、0、0）。所以

表示矩阵是：$\begin{pmatrix}0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1\\1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\end{pmatrix}$。

到这儿，我们相当于是把为了介绍有限群表示理论、特征标理论这两节所需要的概念都介绍完了。下面我们就开始这门课在这个学期最重要的两节。

2.4 有限群表示理论

这一节的主体是五个定理：舒尔引理（Schur's Lemma）一、舒尔引理二、有限群内积空间的每个表示都有等价的酉表示、正交性定理、完备性定理。

在这五个定理里面，正交性定理、完备性定理又是核心。也就是说，这门课的理论基础是前两章，前两章讲了一堆概念，但最重要的东西在第二章的第四、第五两节，而这两节里面，最核心的内容又是第四节的正交性、完备性两个定理。为了引出这两个定理，我们会花比较大的力气去详细地解释前三个都是什么。在这个过程中，大家脑子里记住我说的这句话，不至于迷失。

定理 2.3 舒尔引理一：设群 G 在有限维向量空间 V_A 与 V_B 有不可约表示 A 与 B，若对$\forall g_\alpha \in G$，有将 V_A 映入 V_B 的线性变换 M，满足：$B(g_\alpha)M = MA(g_\alpha)$，则：

1. 当表示 A 与 B 不等价时，M≡0（为零矩阵）；
2. 当 M 不为零时，A 与 B 必等价。

在开始证明之前我们说明两点：

1. M 是什么？它是一个线性变换，你给它一个 V_A 中的向量$\vec{x}$，M 作用后的结果 $M\vec{x}$是一个 V_B 中的向量。
2. ‘则’后面这两句话的关系，是逆否命题，所以证明一个就可以了。

证明：（我们证明第一句，用反证法）

设 A 与 B 不等价时，有 M 不为零矩阵的情况。（我们分三步来说明这个不可能）

第一步：做 V_A 的子空间 N，N 的定义是 V_A 中向量的集合，这些向量的特点是当 M 作用到它上面的时候，得到的是 V_B 中的零向量，也就是 $M\vec{x}=0$。

由这个定义，我们可以知道这个 N 是 G 不变的，因为对$\forall g_\alpha \in G$，$\forall \vec{x} \in N$，由已知$B(g_\alpha)M = MA(g_\alpha)$可以得到：$MA(g_\alpha)\vec{x} = B(g_\alpha)M\vec{x} = B(g_\alpha)0 = 0$。

也就是说$\forall g_\alpha \in G$，$\forall \vec{x} \in N$，$A(g_\alpha)\vec{x} \in N$。（N 是 V_A 中 G 不变的子空间）

我们的已知条件里面说了，A 是不可约表示，表示空间是 V_A。这里这个 N 是 G 不变的，那么它要么等于 V_A，要么只包含零元素。

第二步：当 N=V_A 时，这就意味着当 M 作用到 V_A 中所有向量的时候，得到的都是 V_B 中的零向量。这个结果用矩阵表示的话就是：

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \cdots & M_{1n} \\ M_{21} & M_{22} & \cdots & M_{2n} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ M_{n1} & M_{n2} & \cdots & M_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = 0$$

对任意的 x_1、x_2、…、x_n 成立，这样的话 M 必为零矩阵。

第三步：上面两步告诉我们的事情是在本定理已知条件下，如果想让 M 不为零矩阵，N 只能只包含 V_A 中的零向量。我们下面要说明的是如果这个情况存在，则 A 与 B 等价。也就是说这种情况不能存在。

我们现在看 N 只包含 V_A 中的零向量会带来什么样的后果？一共是两个：

1. V_A 中任意两个不同向量$\vec{x}_1$与$\vec{x}_2$必对应 V_B 中的两个不同元素。因为如果这个不成立，它们对应同一个元素的话，就会有 $M\vec{x}_1$=$M\vec{x}_2$，进而 $M(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = 0$。$\vec{x}_1$与$\vec{x}_2$为 V_A 中两个不同向量，所以$\vec{x}_1 - \vec{x}_2$不为零，与 N 只能只包含 V_A 中的零向量矛盾。

2. 当$\vec{x}$走遍 V_A 中所有元素的时候，$M\vec{x}$走遍 V_B 中所有元素。

设 R 为 M 作用到 V_A 中所有元素时形成的 V_B 中向量的集合，记 R= $\{\vec{y} \in V_B | \vec{y} = M\vec{x},\ \vec{x} \in V_A\}$。R 肯定是 V_B 的子空间。

同时，因为对$\forall\vec{y} \in$R，$\forall g_\alpha \in G$，有：$B(g_\alpha)\vec{y} = B(g_\alpha)M\vec{x} = MA(g_\alpha)\vec{x} = M\vec{x}' \in$R。所以 R 还是 V_B 的 G 不变子空间。B 也是不可约表示，所以 R 要么为 V_B，要么只包含 V_B 中的零向量。

由于我们设了 M 不为零矩阵，所以 R 显然不能只包含零向量，那么 R 为 V_B。也就是说对任意 V_B 中的元素,都可以由 V_A 中的元素通过 M 进行线性变换得到。

把上面的 1、2 两点结合起来，我们知道的是 M 是一个 V_A 与 V_B 间的一一满映射。这样的一个映射是存在逆的，也就是说由$MA(g_\alpha) = B(g_\alpha)M$，我们是可以得到：$A(g_\alpha) = M^{-1}B(g_\alpha)M$，也就是说 A 与 B 等价。这个和已知 A 与 B 为不等价不可约表示矛盾。所以我们第三步开始说的 N 只包含 V_B 中的零向量这个情况还是不成立的。

所以最终的情况只能是：N=V_A（M 作用后得到 V_B 中零向量的 V_A 中向量的集合为 V_A 本身），$M \equiv 0$。

（证毕）

这个定理说的更直接些，就是两个不等价不可约表示，不可能通过一个非零的线性变换 M，由$MA(g_\alpha) = B(g_\alpha)M$联系起来。说完了舒尔引理一，下来是二。

定理 2.4 舒尔引理二：设 A 是群 G 在有限维复空间 V 上的不可约表示，若 V 上的线性变换 M 满足$MA(g_\alpha) = A(g_\alpha)M$对任意 G 中元素成立，则 M=λE。λ为数域上的数，E 为单位变换。

也就是说与不可约表示任意一个表示矩阵互易的矩阵必为常数矩阵。

证明：

我们从有限维复空间变换 M 的一个性质出发来证明，这个性质是：复空间线性变换 M 至少有一个非零本征矢。即总存在$\vec{y} \neq 0$，使得 $M\vec{y} = \lambda\vec{y}$。

这句话可能并不是对所有人都很直接，包括我自己，需要稍微解释一下。M 是一个线性变换，我们可以通过求解$|M - \lambda E| = 0$这样一个λ的 n 次多项式，得到至少一个λ_0（本征值可以有重复度,但再怎么重复,会有这样一个λ_0）,使得$|M - \lambda_0 E| = 0$。与之相应的 M 的本征矢是：$M\vec{y} = \lambda_0\vec{y}$。

这个$\vec{y} \neq 0$。为什么这么说呢？因为 $M\vec{y} = \lambda_0\vec{y}$等同于$(M-\lambda_0)\vec{y} = 0$，$M-\lambda_0$是个奇异矩阵,也就是说如果把他的每一列当作一个向量的话,这些向量是线性相关的。因为它们线性相关，所以必然存在一组不为零的系数，和它们作线性组合的时候得到的向量为零。而这组不为零的系数，对应的恰恰是向量$\vec{y}$在我们事先选定的基下的展开系数。既然这组系数不为零，那么这个向量$\vec{y}$自然也不为零。

因此 M 至少存在一个不为零本征矢，本征值为λ_0。

现在，我定义一个 V 中向量的集合，这个集合的特点是 M 作用到其中任何一个向量上,结果为这个向量乘上λ_0,我们把这个集合记为 R,R=$\{\vec{y} \in V | M\vec{y} = \lambda_0\vec{y}\}$。

这样对于 R 中任意一个向量$\vec{y}$，由$MA(g_\alpha) = A(g_\alpha)M$就会有：$MA(g_\alpha)\vec{y} = A(g_\alpha)M\vec{y} = \lambda_0 A(g_\alpha)\vec{y}$，也就是说$A(g_\alpha)\vec{y}$还是属于这个集合，R 是 G 不变的。

A 是不可约表示。R 要么为 V，要么只包含其中零元素。前面已经说了 R 非空，那么 R 就等于 V。

这也就是说对任意 V 中元素$\vec{x}$，都有 $M\vec{x}=\lambda_0\vec{x}$。这样 M 只能是单位变换乘上$\lambda_0$。在线性变换的矩阵表达式中，M 就是一个常数矩阵。

（证毕）

定理 2.5 有限群在内积空间的每一个表示都有等价的酉表示。

证明：

设 A 是有限群 G 在内积空间 V 上的一个表示，即对$\forall \mathrm{g}_i$、$\mathrm{g_j} \in \mathrm{G}$，有$\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)$、$\mathrm{A}(\mathrm{g}_j)$与之对应，且保持乘法规律不变$\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{A}(\mathrm{g}_j) = \mathrm{A}(\mathrm{g}_i\mathrm{g}_j)$。

取$\forall\vec{\mathrm{x}}$，$\vec{\mathrm{y}}$ ∈V，当 A 不是酉表示的时候，内积$(\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{y}}) \neq (\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})$。

现在的任务，说白了，就是找一个 A 的等价表示，记为$\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}$，使得$(\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}}) = (\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})$对$\forall\vec{\mathrm{x}}$ ∈V、$\forall\mathrm{g}_i$ ∈G 成立。

如何去找这个 X 呢？我们可以去想，内积的取法其实是可以很多种的。在$(\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})$内积定义的基础上，如果我们定义一个新的内积取法为：

$$\langle\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}}\rangle = \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{j=1}^{\mathrm{n}}\left(\mathrm{A}(\mathrm{g}_j)\vec{\mathrm{x}}\middle|\mathrm{A}(\mathrm{g}_j)\vec{\mathrm{y}}\right)$$

也就是说对每个$\mathrm{A}(\mathrm{g}_j)$，利用旧内积的定义，做$\left(\mathrm{A}(\mathrm{g}_j)\vec{\mathrm{x}}\middle|\mathrm{A}(\mathrm{g}_j)\vec{\mathrm{y}}\right)$，然后再对 G 中元素进行加和求平均。使得任意两个向量在进行类似操作后，还得到一个数。

在这个新的内积的定义下，我们可以得到对$\forall\mathrm{g}_i$ ∈G，有：

$$\langle\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{y}}\rangle = \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{j=1}^{\mathrm{n}}\left(\mathrm{A}(\mathrm{g}_j)\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{x}}\middle|\mathrm{A}(\mathrm{g}_j)\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{y}}\right)$$

$$= \tfrac{1}{\mathrm{n}}\textstyle\sum_{j=1}^{\mathrm{n}}\left(\mathrm{A}(\mathrm{g}_j\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{x}}\middle|\mathrm{A}(\mathrm{g}_j\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{y}}\right) = \tfrac{1}{\mathrm{n}}\textstyle\sum_{k=1}^{\mathrm{n}}(\mathrm{A}(\mathrm{g}_k)\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{A}(\mathrm{g}_k)\vec{\mathrm{y}})=\langle\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}}\rangle$$

（这里用到了重排定理）。也就是说$\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)$在这个新内积的定义下是个酉变换。

现在我们取两组基，$(\vec{\mathrm{e}}_1$，$\vec{\mathrm{e}}_2$，⋯，$\vec{\mathrm{e}}_\mathrm{m})$与$(\vec{\mathrm{f}}_1$，$\vec{\mathrm{f}}_2$，⋯，$\vec{\mathrm{f}}_\mathrm{m})$，在 m 维线性空间 V 中，分别对就内积定义(|)与新内积定义⟨ | ⟩正交归一。

这两组基可以通过一个非奇异线性变换 X 联系起来，$\left(\vec{\mathrm{f}}_1，\vec{\mathrm{f}}_2，\cdots，\vec{\mathrm{f}}_\mathrm{m}\right) = \left(\vec{\mathrm{e}}_1，\vec{\mathrm{e}}_2，\cdots，\vec{\mathrm{e}}_\mathrm{m}\right)(\mathrm{X})$

任意一个 V 中向量$\vec{\mathrm{x}}$，在这两组基下，坐标分别为：$\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_\mathrm{m} \end{pmatrix}$与$\begin{pmatrix} x'_1 \\ \vdots \\ x'_\mathrm{m} \end{pmatrix}$。它们的关系是：$\begin{pmatrix} x'_1 \\ \vdots \\ x'_\mathrm{m} \end{pmatrix} = (\mathrm{X}^{-1})\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_\mathrm{m} \end{pmatrix}$，因为：

$$\vec{\mathrm{x}}=\left(\vec{\mathrm{e}}_1,\ \vec{\mathrm{e}}_2,\ \cdots,\ \vec{\mathrm{e}}_{\mathrm{m}}\right)\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_{\mathrm{m}}\end{pmatrix}=\left(\vec{\mathrm{f}}_1,\ \vec{\mathrm{f}}_2,\ \cdots,\ \vec{\mathrm{f}}_{\mathrm{m}}\right)\begin{pmatrix}x'_1\\ \vdots\\ x'_{\mathrm{m}}\end{pmatrix}$$

$$=\left(\vec{\mathrm{e}}_1,\ \vec{\mathrm{e}}_2,\ \cdots,\ \vec{\mathrm{e}}_{\mathrm{m}}\right)(\mathrm{X})\begin{pmatrix}x'_1\\ \vdots\\ x'_{\mathrm{m}}\end{pmatrix}$$

两个向量相等它们的各个分量都要相等。

因为$(\vec{\mathrm{e}}_1,\vec{\mathrm{e}}_2,\ \cdots,\vec{\mathrm{e}}_{\mathrm{m}})$在$(\quad|\quad)$下正交归一，有：$(\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})=(x_1^*\quad\cdots\quad x_{\mathrm{m}}^*)\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_{\mathrm{m}}\end{pmatrix}$。

另一组基$(\vec{\mathrm{f}}_1,\vec{\mathrm{f}}_2,\ \cdots,\vec{\mathrm{f}}_{\mathrm{m}})$在$\langle\quad|\quad\rangle$下正交归一，有$\langle\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}}\rangle=(x_1'^*\quad\cdots\quad x_{\mathrm{m}}'^*)\begin{pmatrix}x'_1\\ \vdots\\ x'_{\mathrm{m}}\end{pmatrix}$。

由于$\begin{pmatrix}x'_1\\ \vdots\\ x'_{\mathrm{m}}\end{pmatrix}=(\mathrm{X}^{-1})\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_{\mathrm{m}}\end{pmatrix}$，后者可以进一步写成：

$$\langle\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}}\rangle=(x_1^*\quad\cdots\quad x_{\mathrm{m}}^*)(\mathrm{X}^{-1})^+(\mathrm{X}^{-1})\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_{\mathrm{m}}\end{pmatrix}。$$

而前面说过：

$$(\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})=(x_1^*\quad\cdots\quad x_{\mathrm{m}}^*)\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_{\mathrm{m}}\end{pmatrix}$$

从$\langle\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}}\rangle$、$(\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})$的形式，我们可以看出这两个向量在两个内积定义下一般不等，但是$\langle\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}}\rangle$等于$(\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})$。

有了这个关系，我们继续看：$(\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}})$，它首先等于：$\langle\mathrm{X}\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}}\rangle=\langle\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}}\rangle$。再由于$\langle\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\vec{\mathrm{y}}\rangle=\langle\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}}\rangle$，我们继续有：$(\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)X\vec{\mathrm{y}})=\langle\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}}\rangle=\langle\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}}\rangle$。

最后，再由$\langle\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}}\rangle$等于$(\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})$，我们继续得到：$(\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}})=\langle\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}}\rangle=(\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})$。

也就是说在原先内积的定义下，$(\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{x}}|\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}\vec{\mathrm{y}})=(\vec{\mathrm{x}}|\vec{\mathrm{y}})$，表示$\mathrm{X}^{-1}\mathrm{A}(\mathrm{g}_i)\mathrm{X}$为酉表示。

（证毕）

在这里，引入$\langle \ | \ \rangle$内积的定义，只不过是为了找到一组基，使原来的线性变换群在这组基下的等价线性变换群$X^{-1}A(g_i)X$是一个酉群。

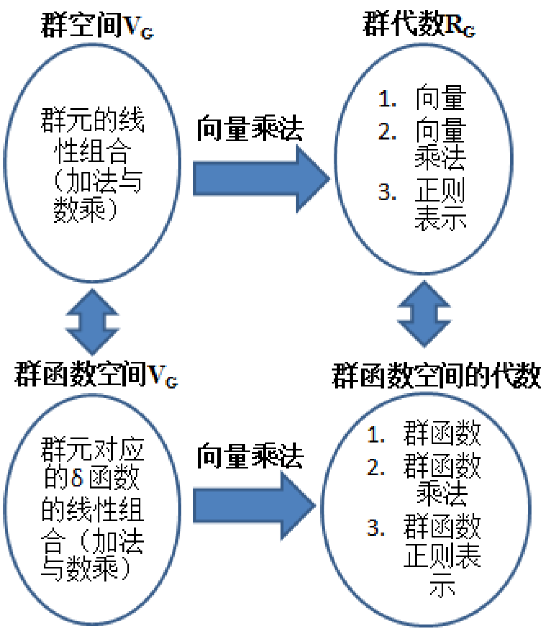
在这个证明中三个关键的地方是：1.$\langle \ | \ \rangle$定义，2.由此定义以及重排定理得到的$\langle A(g_i)\vec{x}|A(g_i)\vec{y}\rangle = \langle\vec{x}|\vec{y}\rangle$这个性质，以及 3. $\langle X\vec{x}|X\vec{y}\rangle=(\vec{x}|\vec{y})$。这三个结合起来推出的$(X^{-1}A(g_i)X\vec{x}|X^{-1}A(g_i)X\vec{y}) = (\vec{x}|\vec{y})$。

前面说过有限群可约则完全可约。这样对任何内积空间中的有限群的表示，我们先可以把它化为不可约表示的直和。然后利用这些不可约表示都有等价的酉表示，把它们划为相互之间不等价的不可约的酉表示。这样的话我们最终面对的，就都是不等价不可约的酉表示。

下面的正交性与完备性定理，针对的就是这样的不等价不可约酉表示。讲之前我们再进行最后一个铺垫，群函数这个概念。我们从它和我们之前讲的群代数的关系出发，先把这个关系讲出来，然后详细解释：

1. 群函数是一个函数，你给我一个群元，我给你一个数。它可以组成一个线性的函数空间，该空间与群空间对应，其中向量（也就是群函数）也与群空间中向量对应。
2. 群空间中定义向量乘法形成群代数，同样，群函数空间中定义函数向量的乘法，也形成群函数空间的代数。基于群代数有正则表示吗。在群函数空间，因为前面的一对一关系，也有正则表示。这些规律都是一样的。

用图的方式来说明的话，就是这个关系：



现在我们详细解释。

1．为什么说群函数和群空间中的向量（也就是群代数中的向量）一一对应？

群函数$f(g_i)$是这样一个函数，你给我一个群元，我给你一个数。

而群空间（群代数）中的向量$\vec{f}=\sum_{i=1}^{n} f(g_i)\, g_i$，也具备这样的特征，你给我一个群元，就等于告诉我了你关心的基，然后我就可以告诉你我这个向量在这个基上的分量。

每个群函数，你都可以通过$\vec{f}=\sum_{i=1}^{n} f(g_i)\, g_i$构造一个向量。同样每个向量，你也都可以由这个式子对应一个群函数，所以群函数与群空间中的向量一一对应。

2．我们在讲群空间的时候说了向量的加法与数乘，在讲群代数的时候，说了向量的乘法。那么在群函数空间我们也可以进一步定义群函数作为向量的加法与数乘以及向量之间的乘法，进而定义群函数空间以及群函数空间的代数，方式是将群函数的乘法与群代数中的向量乘法进行一个对应。

具体实施过程就是针对两个群函数空间中的函数，我们定义其乘法与加法满

足：

1). $(a\mathrm{x})(\mathrm{g}_i)=a\mathrm{x}(\mathrm{g}_i)$

2). $(\mathrm{x}+\mathrm{y})(\mathrm{g}_i)=\mathrm{x}(\mathrm{g}_i)+\mathrm{y}(\mathrm{g}_i)$

3). $\mathrm{xy}(\mathrm{g}_i)=\sum_{j=1}^{\mathrm{n}}\mathrm{x}(\mathrm{g}_j)\mathrm{y}(\mathrm{g}_j^{-1}\mathrm{g}_i)$

其中前两点是对应群空间性质的，第三点是对应群代数性质。很显然这个和我们群空间中向量，群代数中向量乘法的定义都是一一对应的。

这样定义的一个结果就是群函数空间中不光群函数与群代数中的向量一一对应，它们之间的加法、数乘、向量（函数）乘法也是一致的。因此我们就可以最直接的把群函数与群代数中的向量一一对应起来。

在这种对应关系中，群代数中的向量对应的群函数空间中的函数是什么样子的呢？由$\vec{\mathrm{f}}=\sum_{i=1}^{\mathrm{n}}\mathrm{f}(\mathrm{g}_i)\,\mathrm{g}_i$大家想一下。是不是：$\mathrm{g}_1(\mathrm{g}_i)=\delta_{1,i}$，$\mathrm{g}_2(\mathrm{g}_i)=\delta_{2,i}$，……，$\mathrm{g}_\mathrm{n}(\mathrm{g}_i)=\delta_{\mathrm{n},i}$？

由于群空间是 n 维的，那么很自然，群函数空间也是 n 维的。在这个 n 维的函数空间中，与群空间向量内积对应，如果我们定义两个函数 x、y 的内积为：

$$(\mathrm{x}|\mathrm{y})=\frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{\mathrm{n}}\mathrm{x}^*(\mathrm{g}_i)\mathrm{y}(\mathrm{g}_i)$$

那么这个群函数空间就构成了一个内积空间。

这些定义，说白了，和群代数中向量、向量内积的定义都是一一对应。用群元所对应的群函数作基，它们之间的内积是什么样子的？

$$(\mathrm{g}_i|\mathrm{g}_j)=\frac{1}{\mathrm{n}}\delta_{ij}$$

正交，但不归一。

对于我们前面讲过的正则表示，在这样一个内积定义下，具备什么样的性质？答案是酉表示。因为：

$$(L(g_k)\vec{x}|L(g_k)\vec{y}) = \left(L(g_k)\sum_{i=1}^{n} x(g_i)g_i \,\middle|\, L(g_k)\sum_{j=1}^{n} y(g_j)g_j\right)$$

$$= \left(\sum_{i=1}^{n} x(g_i)L(g_k)g_i \,\middle|\, \sum_{j=1}^{n} y(g_j)L(g_k)g_j\right)$$

$$= \left(\sum_{i=1}^{n} x(g_i)g_k g_i \,\middle|\, \sum_{j=1}^{n} y(g_j)g_k g_j\right) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x^*(g_i)y(g_i) = (x|y)$$

在这里大家可以注意到我们关于内积、正则表示的处理，在定义了函数乘法的群函数空间的代数和群代数之间是随意互换的。大家好好体会一下。

上面这些理解我们可以总结为三句话。之后我们对有限群不等价、不可约酉表示的正交性定理以及完备性定理的理解会从这三句话来展开进行。

1. 对一个群 G 的 s 维表示 A，它的矩阵元$A(g_i)$是不是一个群函数？因为这个表示有 s^2 个矩阵元，这个表示是否可以给出 s^2 个群函数？
2. 群函数空间的群函数，因为与群空间中的向量一一对应，自由度为群的阶数 n。
3. 我们要讲的不等价、不可约酉表示的正交性与完备性定理，说的就是有限群不等价、不可约酉表示的矩阵元作为群函数在群函数空间的正交性与完备性。

（先看正交性定理）

定理 2.6 设有限群$G = \{g_\alpha\}$有不等价不可约酉表示 A^1、A^2、⋯、A^p、⋯、A^r、⋯，其维数分别为：S_1、S_2、⋯、S_p、⋯、S_r、⋯。这些不等价不可约酉表示矩阵元，作为群函数，在群函数空间这个内积空间，有这个性质：

$$\left(A^{p}_{\mu\nu}\,\middle|\,A^{r}_{\mu'\nu'}\right) = \frac{1}{S_p}\delta_{pr}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}$$

写成加和的形式就是：

$$\sum_{i=1}^{n}\left(A^{p}_{\mu\nu}\right)^* A^{r}_{\mu'\nu'} = \frac{n}{S_p}\delta_{pr}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}$$

这里，正交性存在于三个 index 上，分别是不等价不可约酉表示的指标 p(r)，矩

阵行的指标$\mu(\mu')$，矩阵列的指标$\nu(\nu')$。其中$A_{\mu\nu}^{p}$这个群函数与其自身，内积为$\frac{1}{S_p}$。

证明：

作 S_p 维矩阵 C，基于另一个任意的 S_p 维矩阵 D，C 与 D 的关系为：

$$C = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^p(g_i) D\, A^p(g_i^{-1})$$

由这个 C 的定义，对$\forall\, g_i \in G$，利用重排定理，有：

$$A^p\left(g_j\right)C = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^p\left(g_j\right)A^p(g_i) D\, A^p(g_i^{-1}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^p\left(g_j g_i\right) D\, A^p(g_i^{-1})$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^p\left(g_j g_i\right) D\, A^p\left(\left(g_j g_i\right)^{-1}\right) A^p\left(g_j\right) = CA^p\left(g_j\right)$$

由舒尔引理二，A 是不可约表示，所以$C = \lambda(D) E_{S_p \times S_p}$。

这个性质是对任意形式的 D 都成立的。这个时候我们取一个特殊的 D 的形式，就是它是这样一个矩阵，除了第ν'行、第ν列矩阵元为 1，其它矩阵元均为零。将这个取法代入 C 的定义式，就有 C 的矩阵元等于：

$$C_{\mu'\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}\sum_{\mu_1\mu_2} A_{\mu'\mu_1}^{p}(g_i) D_{\mu_1\mu_2} A_{\mu_2\mu}^{p}(g_i^{-1})$$

其中$D_{\mu_1\mu_2}$只有在$\mu_1 = \nu'$、$\mu_2 = \nu$时才为 1，其它都为 0，所以：

$$C_{\mu'\mu} = \tfrac{1}{n}\textstyle\sum_{i=1}^{n} A_{\mu'\nu'}^{p}(g_i)\, A_{\nu\mu}^{p}(g_i^{-1}) \qquad (2.8)$$

同时由于 A^p 是酉表示，所以$A^p(g_i^{-1}) = A^p(g_i)^{-1} = A^p(g_i)^{+}$，具体到矩阵元，就是：

$$A_{\nu\mu}^{p}(g_i^{-1}) = [A^p(g_i^{-1})]_{\nu\mu} = [A^p(g_i)^{+}]_{\nu\mu} = [A^p(g_i)]_{\mu\nu}^{*} = \left(A_{\mu\nu}^{p}(g_i)\right)^{*}$$

这样的话，由 C 的矩阵元的对角性质，就有：

$$C_{\mu'\mu} = \tfrac{1}{n}\textstyle\sum_{i=1}^{n} A_{\mu'\nu'}^{p}(g_i)\left(A_{\mu\nu}^{p}(g_i)\right)^{*} = \lambda(D)\delta_{\mu'\mu} \qquad (2.9)$$

第一个正交关系就出来了。

之后我们来看λ(D)等于什么？对式 2.8，我们取$\mu' = \mu$，并对μ加和。这样的话一方面我们有：

$$\sum_{\mu=1}^{\mathrm{S_p}} \mathrm{C}_{\mu\mu} = \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{A}^{\mathrm{p}}_{\mu\nu'}(\mathrm{g}_i)\,\mathrm{A}^{\mathrm{p}}_{\nu\mu}(\mathrm{g}_i^{-1}) = \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{A}^{\mathrm{p}}_{\nu\mu}(\mathrm{g}_i^{-1})\mathrm{A}^{\mathrm{p}}_{\mu\nu'}(\mathrm{g}_i) = \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{\mathrm{n}} [\mathrm{A}^{\mathrm{p}}(\mathrm{g}_i^{-1}\mathrm{g}_i)]_{\nu\nu'}$$
$$= \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{\mathrm{n}} \delta_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'}$$

另一方面，由式 2.9 它又等于

$$\sum_{\mu=1}^{\mathrm{S_p}} \mathrm{C}_{\mu\mu} = \sum_{\mu=1}^{\mathrm{S_p}} \lambda(\mathrm{D})\delta_{\mu'\mu} = \lambda(\mathrm{D})\mathrm{S_p}$$

也就是说：$\delta_{\nu\nu'} = \lambda(\mathrm{D})\mathrm{S_p}$，这样式 2.9 进一步变为：

$$\frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{A}^{\mathrm{p}}_{\mu'\nu'}(\mathrm{g}_i)\left(\mathrm{A}^{\mathrm{p}}_{\mu\nu}(\mathrm{g}_i)\right)^* = \frac{\delta_{\nu\nu'}}{\mathrm{S_p}}\delta_{\mu'\mu}$$

到这个地方，我们在定理中提到的三个正交关系我们已经证明了两个。分别是不等价、不可约酉表示矩阵元群函数的行与列。在确定这个关系的过程中，我们用到的一个关键的性质是舒尔引理二。之前讲两个舒尔引理的时候我们说过它们在证明不等价不可约酉表示的正交性、完备性定理的时候会起到很大的作用。在证行指标、列指标的正交性的时候我们用到的是舒尔引理二，它说的是当一个矩阵与一个不可约表示的矩阵群中所有矩阵都对易的时候，这个矩阵必为常数对角矩阵。常数对角矩阵本身会产生行、列指标的正交性。这个其实是对应的。

下面要证明的不等价不可约酉表示矩阵元作为群函数对不等价不可约表示的指标还有一个正交性。对两个不等价不可约 A、B，如 AM=MB，前面我们的舒尔引理一说 M 比为零矩阵。这个零矩阵本身也蕴藏着一个正交性，这个正交恰恰是在不等价不可约表示的指标上的。因此，我们下一个正交关系的证明很自然要用到的就是舒尔引理一。

这里我们设两个不等价不可约酉表示是 A^r 与 A^p，它们的维度分别是 S_r 与 S_p。现在构造一个$S_r \times S_p$维的矩阵C'，形式为：

$$C' = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^r(g_i)D' A^p(g_i^{-1})$$

其中D'为任意的一个$S_r \times S_p$维的矩阵。对这样定义的一个C'，它满足：

$$\begin{aligned} C'A^p(g_j) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^r(g_i)D'A^p(g_i^{-1})A^p(g_j) \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^r(g_j)A^r(g_j^{-1})A^r(g_i)D'A^p(g_i^{-1})A^p(g_j) \\ &= A^r(g_j)\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^r(g_j^{-1}g_i)D'A^p\left((g_j^{-1}g_i)^{-1}\right) = A^r(g_j)C' \end{aligned}$$

这时，由舒尔引理一，当 r 与 p 为不等价不可约表示的时候，$C' \equiv 0$。

而另一方面，由C'矩阵的定义，它的矩阵元是：

$$C'_{\mu'\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{\mu_1\mu_2} A^r_{\mu'\mu_1}(g_i)D'_{\mu_1\mu_2} A^p_{\mu_2\mu}(g_i^{-1})$$

取 D'矩阵为只有在$\mu_1 = \nu'$、$\mu_2 = \nu$时才为 1，其它都为 0，那么上式继续等于：

$$C'_{\mu'\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^r_{\mu'\nu'}(g_i)\, A^p_{\nu\mu}(g_i^{-1})$$

前面说过对酉表示有$A^p_{\nu\mu}(g_i^{-1}) = \left(A^p_{\mu\nu}(g_i)\right)^*$，因此继续：

$$C'_{\mu'\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^r_{\mu'\nu'}(g_i)\left(A^p_{\mu\nu}(g_i)\right)^*$$

而 r 与 p 不同时，$C' \equiv 0$，因此：

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^r_{\mu'\nu'}(g_i)\left(A^p_{\mu\nu}(g_i)\right)^* = 0$$

在 r 与 p 相同的时候，是我们证明的前一部分：

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A^{p}_{\mu'\nu'}(g_i)\left(A^{p}_{\mu\nu}(g_i)\right)^{*}=\frac{\delta_{\nu\nu'}}{S_p}\delta_{\mu'\mu}$$

的情况。因此，三个正交关系一结合，就是：

$$\sum_{i=1}^{n}\left(A^{p}_{\mu\nu}\right)^{*}A^{r}_{\mu'\nu'}=\frac{n}{S_p}\delta_{pr}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}$$

或：

$$\left(A^{p}_{\mu\nu}\middle|A^{r}_{\mu'\nu'}\right)=\frac{1}{S_p}\delta_{pr}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}。$$

（证毕）

第一次学的时候有个容易混淆的地方再说明一下，r、p 是不等价不可约酉表示的 index，S_r 与 S_p 是它们的维度。r 与 S_r、p 与 S_p 没有要求相等。

比如一个 n 阶群，有两个一维不等价不可约酉表示、三个二维不等价不可约酉表示、两个三维不等价不可约酉表示。那么它的不等价不可约酉表示的个数是 2+3+2=7 个。不等价不可约酉表示的 index 是：1、2、3、4、5、6、7。它们的维度分别是：$S_1=1$、$S_2=1$、$S_3=2$、$S_4=2$、$S_5=2$、$S_6=3$、$S_7=3$。

这些不等价不可约酉表示的矩阵元，因为正交，提供的群函数空间的维度是：$1^2+1^2+2^2+2^2+2^2+3^2+3^2=32$。

前面正交性定理说的是这 32 个群函数在群函数空间正交，很高大上的。下面的完备性定理同样牛，说是这 32 个群函数在群函数空间完备。

定理 2.7 完备性定理：设 A^p (p=1、2、…、q)是有限群$G=\{g_\alpha\}$的所有不等价不可约酉表示，则 A^p 生成的群函数$A^{p}_{\mu\nu}(g_i)$在 p 走遍所有不等价不可约酉表示的 index，μ、ν走遍所有行和列的 index 时，在群函数空间是完备的。

证明：

用到的性质很简单，我们有一个群空间，当我们按群代数中定义的向量乘法来作

线性变换的时候，这个群空间是右正则表示$R(g_j)$的表示空间，这个表示空间是n维的。它的基你可以说是群空间中的向量g_1、g_2、…、g_n，也可以说是群函数空间中的函数$g_1(g_i)=\delta_{1i}$、$g_2(g_i)=\delta_{2i}$、…、$g_n(g_i)=\delta_{ni}$，这个群函数空间是n维的。

现在我们从这n维的、完整的群函数空间找子函数空间，这个等同于从n维的群空间找子向量空间。我们会注意到存在这样的子空间：对第p个不等价不可约酉表示，它的第μ行矩阵元，一共S_p个，$\left(\sum_{i=1}^{n}A_{\mu1}^{p}(g_i)\,g_i\right)$、$\left(\sum_{i=1}^{n}A_{\mu2}^{p}(g_i)\,g_i\right)$、…、$\left(\sum_{i=1}^{n}A_{\mu S_p}^{p}(g_i)\,g_i\right)$，由于正交性，形成一个$S_p$维的子空间。

取其中任意一个向量，比如第ν个，$\left(\sum_{i=1}^{n}A_{\mu\nu}^{p}(g_i)\,g_i\right)$，作线性变换：

$$R(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n}A_{\mu\nu}^{p}(g_i)\,g_i\right)=\sum_{i=1}^{n}A_{\mu\nu}^{p}(g_i)\,g_ig_j^{-1}$$

记$g_ig_j^{-1}=g_k$，它继续等于：

$$R(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n}A_{\mu\nu}^{p}(g_i)\,g_i\right)=\sum_{k=1}^{n}A_{\mu\nu}^{p}(g_kg_j)\,g_k=\sum_{k=1}^{n}\sum_{\lambda=1}^{S_p}A_{\mu\lambda}^{p}(g_k)A_{\lambda\nu}^{p}(g_j)\,g_k$$
$$=\sum_{\lambda=1}^{S_p}A_{\lambda\nu}^{p}(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n}A_{\mu\lambda}^{p}(g_k)\,g_k\right)$$

这里$\left(\sum_{i=1}^{n}A_{\mu\lambda}^{p}(g_k)\,g_k\right)$还是那$S_p$个基，$A_{\lambda\nu}^{p}(g_j)$是展开系数，在这里$\nu$是一个固定的数，代表的是我不等价不可约酉表示矩阵元第μ行这S_p个群函数形成的基中的第ν个。当$R(g_j)$作用到它上面之后，它还变成这S_p个群函数的线性组合，展开系数是对应我表示矩阵的第ν列，在这里恰恰是$A_{\lambda\nu}^{p}(g_j)$。这个相互关系意味着两个事情：

1. 不等价不可约酉表示矩阵元对应的群函数，以每一行的群函数为基组形成的线性空间，都成右正则表示的G不变的子空间（因为对这行的每一个函数进行变换，结果还是这行群函数的线性组合）。

2．这组基所对应$R(g_j)$的表示矩阵，恰恰是A^p这个矩阵本身。

这个时候，对于我们已知的 q 个不等价不可约酉表示，它们的矩阵元群函数，个数将是$S_1^2+S_2^2+\cdots+S_q^2$。由于它们之间的正交性，我们可以用它们的线性组合来构成一个线性空间，由上面说的性质，这个线性空间是 G 不变的，我们记为V。完备性定理要说的是这个 V 就等于 R_G。

为了证明这一点，我们构造 V 对 R_G 的正交补空间，记为$V^{\perp}$。我们证明它只包含零元素。

我们用到的性质是$R(g_j)$是酉表示，它可约则完全可约。当我们把 R_G 分为 V 与$V^{\perp}$的时候，由于 V 是 G 不变的，$V^{\perp}$与它正交互补，所以$V^{\perp}$也是 G 不变的。

这时我们在$V^{\perp}$中取基矢组X_1、X_2、⋯、X_{S_r}。这里我们取最简单的情况，就是这个 G 不变的子空间只包含 r 这个不可约表示，当然它还可以作为几个不可约表示的直和。然后我们证明即使这种情况，也是不可能的。

为了证明这个，我们把$R(g_j)$作用到X_1、X_2、⋯、X_{S_r}中第α个向量上，效果为：

$$R(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n} X_\alpha(g_i)g_i\right)=\left(\sum_{i=1}^{n} X_\alpha(g_i)g_i g_j^{-1}\right)$$

取$g_i g_j^{-1}=g_k$，上式继续等于：

$$R(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n} X_\alpha(g_i)g_i\right)=\left(\sum_{k=1}^{n} X_\alpha(g_k g_j)g_k\right)$$

另一方面，前面说过，由于X_1、X_2、⋯、X_{S_r}承载了群 G 的第 r 个不等价不可约酉表示，$R(g_j)$作用到$(\sum_{i=1}^{n} X_\alpha(g_i)g_i)$上，同时还可写为：

$$R(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n} X_\alpha(g_i)g_i\right)=\sum_{\beta} A_{\beta\alpha}^{r}(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n} X_\beta(g_i)g_i\right)$$

这样的话就会有：

$$\left(\sum_{k=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{X}_{\alpha}(\mathrm{g}_k \mathrm{g}_j)\mathrm{g}_k\right) = \sum_{\beta} \mathrm{A}^{\mathrm{r}}_{\beta\alpha}(\mathrm{g}_j)\left(\sum_{i=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{X}_{\beta}(\mathrm{g}_i)\mathrm{g}_i\right)$$

这个等式意味着群空间的两个向量相等（或者说两个群函数相同）。群空间中两个向量相等的话它们的每个分量都应该相同，我们关注单位元素g_0上的分量，左边是：$\mathrm{X}_{\alpha}(\mathrm{g}_j)$，右边是：$\sum_{\beta} \mathrm{A}^{\mathrm{r}}_{\beta\alpha}(\mathrm{g}_j)\mathrm{X}_{\beta}(\mathrm{g}_0)$，并且这个相等对$\forall \mathrm{g}_j \in \mathrm{G}$都要成立。这样的我们就可以构造两个向量：$\sum_{j=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{X}_{\alpha}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_j$与$\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{\beta} \mathrm{A}^{\mathrm{r}}_{\beta\alpha}(\mathrm{g}_j)\mathrm{X}_{\beta}(\mathrm{g}_0)\right)\mathrm{g}_j$，它们是相等的。对后面这个向量，我们可以进一步把它变换为：

$$\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{\beta} \mathrm{A}^{\mathrm{r}}_{\beta\alpha}(\mathrm{g}_j)\mathrm{X}_{\beta}(\mathrm{g}_0)\right)\mathrm{g}_j = \sum_{\beta}\left(\sum_{j=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{A}^{\mathrm{r}}_{\beta\alpha}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_j\right)\mathrm{X}_{\beta}(\mathrm{g}_0)$$

这也就意味着：

$$\sum_{j=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{X}_{\alpha}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_j = \sum_{\beta}\left(\sum_{j=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{A}^{\mathrm{r}}_{\beta\alpha}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_j\right)\mathrm{X}_{\beta}(\mathrm{g}_0)$$

这个等式大家想一下会意味着什么样的矛盾?

左边是$\mathrm{V}^{\perp}$中的向量，右边$\sum_{j=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{A}^{\mathrm{r}}_{\beta\alpha}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_j$是 V 中的基，$\sum_{\beta}\left(\sum_{j=1}^{\mathrm{n}} \mathrm{A}^{\mathrm{r}}_{\beta\alpha}(\mathrm{g}_j)\mathrm{g}_j\right)\mathrm{X}_{\beta}(\mathrm{g}_0)$是它们的线性组合，所以是 V 中的向量。而我们说过，V 与$\mathrm{V}^{\perp}$是正交补空间，它们不能有非零的公共元素。这样的话假设自然就不成立了，V 就等于 $\mathrm{R_G}$。这样就意味着对于一个有限群，它的所有不等价不可约酉表示的矩阵元形成的群函数空间，对于群代数，是完备的！

（证毕）

这个时候，再结合正交性定理：

$$\left(\mathrm{A}^{\mathrm{p}}_{\mu\nu}\middle|\mathrm{A}^{\mathrm{r}}_{\mu'\nu'}\right) = \frac{1}{\mathrm{S_p}}\delta_{\mathrm{pr}}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}$$

我们知道$\sqrt{\mathrm{S_p}}\left(\mathrm{A}^{\mathrm{p}}_{\mu\nu}(\mathrm{g}_i)\mathrm{g}_i\right)$更是构成了群函数空间中正交归一的完备基，所有的群函数，都可以按这个基组来进行展开。

再进一步，由这个定理，我们还可以得出两个重要的推论：

1. Burnside 定理。

群 G 的群空间是 n 维的，它的群函数空间也是 n 维的。而另一方面，由$\sqrt{S_p}\left(A^{p}_{\mu\nu}(g_i)g_i\right)$构成的群函数空间是$S_1^2+S_2^2+\cdots+S_q^2$维的。因为这些群函数在群函数空间是完备的，所以：$S_1^2+S_2^2+\cdots+S_q^2=n$。这个关系，基本限定了一个有限群不等价不可约表示的维数情况。这个后面我们在讲完一个类与不等价不可约表示个数的关系以后，会详细举例说明。

2. 前面我们说过，对第 p 个不等价不可约表示第μ行矩阵元群函数形成的线性空间，右正则变换$R(g_j)$作用到它的ν列矩阵元群函数上面的话，有：

$$R(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n}A^{p}_{\mu\nu}(g_i)\,g_i\right)=\sum_{\lambda=1}^{S_p}A^{p}_{\lambda\nu}(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n}A^{p}_{\mu\lambda}(g_k)\,g_k\right)$$

这意味着我群 G 的第 p 个不等价不可约表示第μ行矩阵元群函数形成的线性空间，承载着我这个不等价不可约表示。因为我有S_p行，所以我可以承载S_p次，每次的基，和我$R(g_j)$本身对应的那 n 个维度中的基，差的就是一个相似变换。如果把$R(g_j)$化为群 G 的不等价不可约表示的直和的话，形式是：$\sum_{p=1}^{q}\oplus\, S_pA^p(g_j)$。

对左正则变换，相似的，$L(g_j)$也可以写成$\sum_{p=1}^{q}\oplus\, S_pA^p(g_j)$，只不过在这个里面，承载每个$A^p(g_j)$的不再是不等价不可约酉表示矩阵的某行对应的群函数了，而是某列的共轭，因为：

$$L(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n}A^{p*}_{\mu\nu}(g_i)\,g_i\right)=\sum_{i=1}^{n}A^{p*}_{\mu\nu}(g_i)\,g_jg_i$$

(取$g_jg_i=g_k$)

$$=\sum_{k=1}^{n} A_{\mu\nu}^{p*}(g_j^{-1}g_k)\,g_k=\sum_{i=1}^{n} A_{\mu\nu}^{p*}(g_j^{-1}g_i)\,g_i=\sum_{i=1}^{n}\sum_{\lambda=1}^{S_p} A_{\mu\lambda}^{p*}(g_j^{-1})A_{\lambda\nu}^{p*}(g_i)\,g_i$$

$$=\sum_{\lambda=1}^{S_p} A_{\mu\lambda}^{p*}(g_j^{-1})\left(\sum_{i=1}^{n} A_{\lambda\nu}^{p*}(g_i)\,g_i\right)=\sum_{\lambda=1}^{S_p} A_{\lambda\mu}^{p}(g_j)\left(\sum_{i=1}^{n} A_{\lambda\nu}^{p*}(g_i)\,g_i\right)$$

到这里，我们有限群表示理论这一节就讲完了。前面我们提到过我们这门课的理论基础部分最重要的两节是有限群表示理论与特征标理论。在有限群表示理论这一节，我们讨论的是一个有限群的不等价不可约酉表示矩阵元应该满足的性质。前面我们也提高过，一个群的表示可以有很多，但不等价不可约表示就那么几个。如果我们知道两个同维的酉表示都不可约，那么根据这一节讲的内容，每个表示内的矩阵元群函数是正交的，这两个表示间的矩阵元群函数是否正交，就关键取决于它们是否等价了。

等价我们之前介绍过，最本质的定义就是要找到一个不依赖于群元的矩阵 X，通过$B(g_i)=X^{-1}A(g_i)X$，将两个矩阵群联系起来。但找这个 X 其实是很麻烦的。下面一节要介绍的特征标理论，就为我们在进行类似等价的分析时提供了一个非常方便的手段。

2.5 特征标理论

定义 2.15 特征标：设 A={$A(g_\alpha)$}是群$G=\{g_\alpha\}$的一个表示，这个表示的特征标定义为{$\chi(g_\alpha)$}，其中

$$\chi(g_\alpha)=\mathrm{tr}A(g_\alpha)=\sum_{\mu} A_{\mu\mu}(g_\alpha)$$

由这个定义，我们很容易知道：

1. 等价表示的特征标相同，原因是相似变换不改变矩阵的特征根，当让也不改变它的迹；

2. 在一个表示中，共轭元素的特征标相同，因为

$$A(f) = A(hgh^{-1}) = A(h)A(g)A(h^{-1})$$

同时，把这个性质进行一个推广，我们也很容易知道：

1. 设K_α是群G中含元素g_α的一个类，那么K_α中所有元素的特征标相同。换句话来说，χ是类的函数。不同类元素，可以有不同的特征标，这个没有限制，但同一个类中的元素，必须有相同的特征标。
2. G中单位元素自成一类，由于它与单位矩阵对应，所以特征标等于维度。

上面的这些性质对所有群都成立，不要求G是有限群。当G是一个有限群，有q个不等价不可约表示时，它的特征标是个群函数，也是个类函数（好好体会一下这句话）。这个特征标函数具有一个很重要的正交特征。

定理2.8 特征标第一正交定理：有限群不可约表示的特征标满足

$$(\chi^p|\chi^r) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \chi^{p*}(g_i)\chi^r(g_i) = \delta_{pr}$$

证明：

注意，酉表示这个要求没有了，原因是既然有限群的任何一个不可约表示都有等价的酉表示，而等价表示特征标相同，所以这个酉表示的要求，自然就可以放宽了。而证明的时候，我们只需要证明对酉表示特征标函数$(\chi'^p|\chi'^r)$正交，那么对与它相似的表示，这个特征标正交条件$(\chi^p|\chi^r)$自然成立。

对不等价、不可约酉表示，它有

$$\sum_{i=1}^{n}\left(A'^p_{\mu\nu}\right)^* A'^r_{\mu'\nu'} = \frac{n}{S_p}\delta_{pr}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}$$

与之相应的

$$(\chi'^{\mathrm{p}}|\chi'^{\mathrm{r}}) = \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{\mathrm{n}}\left[\left(\sum_{\mu=1}^{\mathrm{S_p}} \mathrm{A}'^{\mathrm{p}}_{\mu\mu}(\mathrm{g}_i)\right)^{*}\left(\sum_{\mu'=1}^{\mathrm{S_r}} \mathrm{A}'^{\mathrm{r}}_{\mu'\mu'}(\mathrm{g}_i)\right)\right]$$

$$= \sum_{\mu=1}^{\mathrm{S_p}}\sum_{\mu'=1}^{\mathrm{S_r}}\left(\frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{n} \mathrm{A}'^{\mathrm{p}*}_{\mu\mu}(\mathrm{g}_i)\,\mathrm{A}'^{\mathrm{r}}_{\mu'\mu'}(\mathrm{g}_i)\right) = \sum_{\mu=1}^{\mathrm{S_p}}\sum_{\mu'=1}^{\mathrm{S_r}}\frac{1}{\mathrm{S_p}}\delta_{\mathrm{pr}}\delta_{\mu\mu'} = \delta_{\mathrm{pr}}$$

（证毕）

由于特征标是类函数，这个加和还可以写成：

$$(\chi^{\mathrm{p}}|\chi^{\mathrm{r}}) = \frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{i=1}^{\mathrm{q}'}\mathrm{n}_i\chi^{\mathrm{p}*}(\mathrm{K}_i)\chi^{\mathrm{r}}(\mathrm{K}_i) = \delta_{\mathrm{pr}}$$

其中q'为群 G 中类的个数，而n_i是第 i 个类中元素的个数。

由这个定理，我们知道：

1. 一个不可约表示与其自身，作特征标内积的话，结果是 1；
2. 对一个可约表示，它总可约化为一系列不等价不可约表示的直和：$\mathrm{B} = \sum_{\mathrm{p}=1}^{\mathrm{q}}\oplus \mathrm{m_p}\mathrm{A}^{\mathrm{p}}$。其中每个不等价不可约表示，都有等价的酉表示。这个时候由特征标正交定理，我们有：

$$\left(\chi^{\mathrm{A}^p}\middle|\chi^{\mathrm{B}}\right) = \left(\chi^{\mathrm{A}^p}\middle|\sum_{\mathrm{p}'=1}^{\mathrm{q}}\oplus\, \mathrm{m_{p'}}\chi^{\mathrm{A}^{p'}}\right) = \mathrm{m_p}$$

   这也就是说一个可约表示中某个不可约表示的重复度，可由这个可约表示与这个不可约表示的内积给出；
3. 基于 2，我们还可以知道对可约表示 B，有：

$$(\chi^{\mathrm{B}}|\chi^{\mathrm{B}}) = \left(\sum_{\mathrm{p}=1}^{\mathrm{q}}\oplus\, \mathrm{m_p}\chi^{\mathrm{A}^p}\middle|\sum_{\mathrm{p}'=1}^{\mathrm{q}}\oplus\, \mathrm{m_{p'}}\chi^{\mathrm{A}^{p'}}\right) = \sum_{\mathrm{p}=1}^{\mathrm{q}}\mathrm{m_p^2} > 1$$

   也就是说可约表示的特征表内积总是大于 1 的。

同时关于群函数与这里讲的类函数，还有一个关系以及由它引起的性质必须说一下。这个性质跟我们前面说的 Burnside 定理有类似的地方，是一个从维度引出的群表示的性质。

这个性质解释的话最好还是从群函数和类函数的关系说起。群函数我们都是到，就是你给我一个群元，我给你一个数。群函数空间和群空间同维，都是 n。而类函数，我们之前说过，就是你给我一个类，我给你一个数。按照这个对应关系，类函数空间的维度是多少?

答案：类函数空间的维度就是这个群中类的个数。

由于类函数要求群中同类的群元给出的数相同，这个可以说是对群函数加了一个额外的限制，因此，我们也可以说类函数是一种特殊的群函数。

现在群函数和类函数的关系明确了，我们想说的下一个性质与有限群不等价不可约表示的特征标有关，内容是:

定理 2.9 有限群的所有不等价不可约表示的特征标在类函数空间是完备的。

证明:

设群 G 是我们关心的有限群，A^p是它的所有不等价不可约表示，其中$p = 1$，…，q，q 是这个群的不等价不可约表示的个数。对有限群，由于每个表示都有等价的酉表示，所以A^p这个系列有另外一个和它们等价的不等价不可约酉表示，记为：A'^{p}。

由之前讲的有限群不等价不可约酉表示矩阵元在群函数空间完备这个性质，我们知道对任意的一个群函数$f(g_i)$，它都可以写成:

$$f(g_i) = \sum_{p,\mu,\nu} a^{p}_{\mu,\nu} A'^{p}_{\mu,\nu}(g_i) \qquad 式 2.10$$

而类函数，由于$f(g_i) = f(g_j^{-1} g_i g_j)$，可以写为:

$$f(g_i) = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} f(g_j^{-1} g_i g_j)$$

这样由式 2.10 可知这个类函数可以进一步写成:

$$
\begin{aligned}
f(g_i) &= \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{p,\mu,\nu} a_{\mu,\nu}^{p}\, A'^{p}_{\mu,\nu}(g_j^{-1}g_i g_j) \\
&= \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{p,\mu,\nu}\sum_{\lambda,\sigma} a_{\mu,\nu}^{p} A'^{p}_{\mu,\lambda}(g_j^{-1}) A'^{p}_{\lambda,\sigma}(g_i) A'^{p}_{\sigma,\nu}(g_j) \\
&= \sum_{p,\mu,\nu}\sum_{\lambda,\sigma} a_{\mu,\nu}^{p} A'^{p}_{\lambda,\sigma}(g_i)\left(\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} A'^{p}_{\mu,\lambda}(g_j^{-1}) A'^{p}_{\sigma,\nu}(g_j)\right) \\
&= \sum_{p,\mu,\nu}\sum_{\lambda,\sigma} a_{\mu,\nu}^{p} A'^{p}_{\lambda,\sigma}(g_i)\left(\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} A'^{p*}_{\lambda,\mu}(g_j) A'^{p}_{\sigma,\nu}(g_j)\right) \\
&= \sum_{p,\mu,\nu}\sum_{\lambda,\sigma} a_{\mu,\nu}^{p} A'^{p}_{\lambda,\sigma}(g_i)\left(\frac{1}{S_p}\delta_{\lambda,\sigma}\delta_{\mu,\nu}\right) = \sum_{p,\mu}\sum_{\lambda}\frac{1}{S_p} a_{\mu,\mu}^{p} A'^{p}_{\lambda,\lambda}(g_i) \\
&= \sum_{p}\left(\frac{1}{S_p}\sum_{\mu} a_{\mu,\mu}^{p}\right)\left(\sum_{\lambda} A'^{p}_{\lambda,\lambda}(g_i)\right) = \sum_{p} a^{p}\chi'^{p}(g_i) = \sum_{p} a^{p}\chi^{p}(g_i)
\end{aligned}
$$

这也就是说任何一个类函数,都可以用我这个有限群的不等价不可约表示的特征标函数来展开。换句话说，类函数的空间维度，就应该等于我不等价不可约表示的个数。

（证毕）

这个时候我们再结合上面分析类函数空间性质的时候得到的一个群群元可以分多少个类，它的类函数空间但就是多少维，很自然，我们就可以得到“**一个群的不等价不可约表示的个数就等于这个群中类的个数**”这样一个性质了。

这个由特征标函数的完备性推出的性质,和由不等价不可约酉表示表示矩阵函数的完备性推出的 Burnside 定理，合在一起，就是我们对一个有限群的不等价不可约表示情况分析时的最为有力的工具了。

我们现在知道了特征标作为群函数的正交性、完备性。按照上一节，有限群不等价不可约酉表示性质描述那一部分的路子,大家可能会觉得我们要讲的应该都结束了。但实际情况是这一节我们还有两个关键的内容。这两个内容都和上面

那个性质“有限群不等价不可约表示数等于群中类的个数”有关。

在我们之前讲的正交定理中，我们的加和号是走遍群元，或者说走遍类的，具体形式是:

$$(\chi^{p}|\chi^{r}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\chi^{p*}(g_i)\chi^{r}(g_i) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{q'} n_i\chi^{p*}(K_i)\chi^{r}(K_i) = \delta_{pr}$$

在讲这个定理的时候，我们还不知道有限群的不等价不可约表示数 q 等于它类的个数q'。现在我们知道了$q' = q$，那么这个加和号会出现另外一种情况：加和到不等价不可约表示这个指标上，这种情况下，会不会出现正交指标存在于类这个 index 上面的情况呢？也就是:

$$\frac{1}{n}\sum_{p=1}^{q} n_i\chi^{p*}(K_i)\chi^{p}(K_j) = \delta_{ij}$$

这个答案是对，而这种正交关系我们称为特征标第二正交定理。

定理 2.10

$$\frac{1}{n}\sum_{p=1}^{q} n_i\chi^{p*}(K_i)\chi^{p}(K_j) = \delta_{ij}$$

证明:

我们可以设计一个矩阵 F，$q \times q$的，行指标走遍不等价不可约表示，列指标走遍类。F 的形式为（第 r 行，第 i 列）:

$$F_{ri} = \sqrt{\frac{n_i}{n}}\chi^{r}(K_i)$$

这样一个矩阵的矩阵元很明显具备这样的性质:

$$F_{pi}^{*} = \sqrt{\frac{n_i}{n}}\chi^{p*}(K_i) = (F^{+})_{ip}$$

之前我们讲过的特征标第一正交定理，

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{q} n_i\chi^{p*}(K_i)\chi^{r}(K_i) = \delta_{pr}$$

按照这个矩阵形式，可表述为：

$$\sum_{i=1}^{q} \mathrm{F}_{\mathrm{ri}}(\mathrm{F}^{+})_{\mathrm{ip}} = (\mathrm{FF}^{+})_{rp} = \delta_{\mathrm{pr}}$$

这也就意味着$\mathrm{FF}^{+} = \mathrm{E}$，$\mathrm{F}^{+} = \mathrm{F}^{-}$，进而：$\mathrm{F}^{+}\mathrm{F} = \mathrm{E}$。这个式子，写成矩阵元的形式，就是：

$$(\mathrm{F}^{+}F)_{\mathrm{ij}} = \sum_{r=1}^{q} (\mathrm{F}^{+})_{\mathrm{ir}}\mathrm{F}_{\mathrm{rj}} = \sum_{r=1}^{q}\left[\sqrt{\frac{\mathrm{n}_i}{\mathrm{n}}}\chi^{\mathrm{r}*}(\mathrm{K}_i)\sqrt{\frac{\mathrm{n}_j}{\mathrm{n}}}\chi^{\mathrm{r}*}(\mathrm{K}_j)\right] = \delta_{\mathrm{ij}}$$

由于 i，j 不等时两边都为零，所以也可以写为：

$$\frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{\mathrm{r}=1}^{q} \mathrm{n}_i\chi^{\mathrm{r}*}(\mathrm{K}_i)\chi^{\mathrm{r}}(\mathrm{K}_\mathrm{j}) = \delta_{\mathrm{ij}}$$

（证毕）

由特征标的两个正交关系，我们可以引入的一个很重要的东西就是有限群表示的特征标表。它的具体定义我们可以这样理解：既然特征标是类函数，它又对不同不等价不可约表示可以不同，那么原则上，在分析一个有限群的特征标时，我们可以按两个轴来展开。第一个轴是有限群的类，第二个轴是群的不等价不可约表示指标。因为类数等于不等价不可约表示数，所以由这两个轴做出的表的行数和列数是相同的，都等于有限群的类的个数。在这个表的每一列，我们记为$\mathrm{n}_i\{\mathrm{K}_i\}$，其中$\{\mathrm{K}_i\}$是类，$\mathrm{n}_i$是其中元素个数。而每一行，我们记为$\mathrm{A}^{p}$，是不等价不可约表示的 index。这个表的具体形式是：

	$\mathrm{n}_1\{\mathrm{K}_1\}$	$\mathrm{n}_2\{\mathrm{K}_2\}$	$\cdots$	$\mathrm{n}_q\{\mathrm{K}_q\}$
A^1	$\chi^1(\mathrm{K}_1)$	$\chi^1(\mathrm{K}_2)$	$\cdots$	$\chi^1(\mathrm{K}_\mathrm{q})$
A^2	$\chi^2(\mathrm{K}_1)$	$\chi^2(\mathrm{K}_2)$	$\cdots$	$\chi^2(\mathrm{K}_\mathrm{q})$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
A^q	$\chi^\mathrm{q}(\mathrm{K}_1)$	$\chi^q(\mathrm{K}_2)$	$\cdots$	$\chi^\mathrm{q}(\mathrm{K}_\mathrm{q})$

在这里，行列之间都有正交，对应的就是特征标的两个正交定理。

例10. n 阶循环群$\left\{a, a^2, \cdots, a^n = e\right\}$，它是 Abel 群，有 n 个类，所以每个不等价不可约表示都是一维的。A(a)是 a 的表示，它是一个数，它要满足的特性是：$\left(A(a)\right)^n = 1$，所以，A(a)可以是：$\exp[2\pi i * (p-1)/n]$，其中 i 是虚部因子，p 是不等价不可约表示的指标，从 1 到 n。

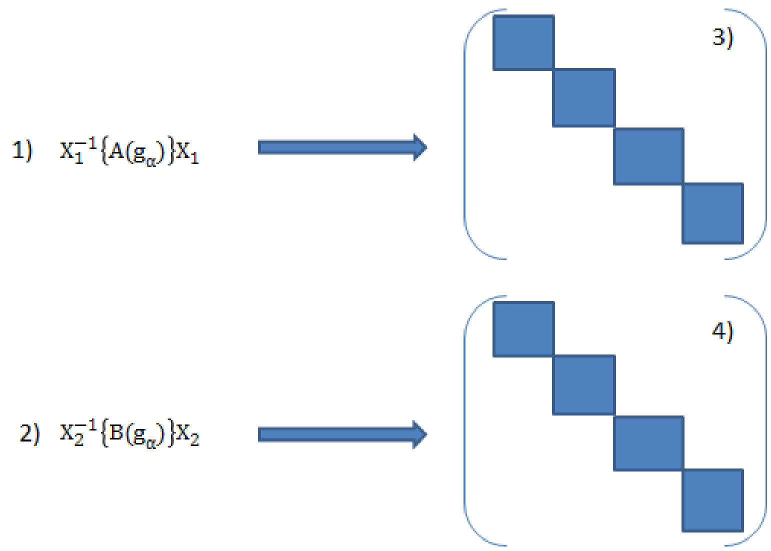
它所对应的特征标表就是：

	$1\{e\}$	$1\{a\}$	$1\{a^2\}$	$1\{a^3\}$
A^1	1	1	1	1
A^2	1	i	-1	$-i$
A^3	1	-1	1	-1
A^4	1	$-i$	-1	I

这里行列的正交性大家都可以检验一下。

到这儿，跟特征标函数相关的概念和定理我们都说完了。在这一节开始的时候，我们提过要确定两个表示等价，最笨的方法是找相似变换矩阵。因为这个太麻烦了，我们才会引入特征标这个概念。现在我们把特征标的所有性质讲完了，回到这个问题，也就是这节课最后一句话：两个表示等价的充要条件是它们的特征标相等。

必要性不用解释了，等价特征标必相同，因为相似变换不改变特征标。充分性怎么理解？这个要从类函数空间中不等价不可约表示特征标函数的正交性与完备性出发。两个表示的特征标相同，说明它们对应的类函数相同。同一个类函数，在类函数空间，是可以分解为相同的不等价不可约表示特征标函数的线性组合的。也就是说表示是 A 与 B，它们都可能可约，但如果它们的特征标相同，那就意味着当我把它们分解为不等价不可约表示的直和的时候，$\bigoplus m_p A^p$的形式是完全一样的。这也就意味着下面关系：



1 与 2 通过相似变换称为具有相同结构的豆腐块 3 与 4，而 3 与 4 之间每个豆腐块相互又是等价的，所以表示的特征标相同与表示等价互为充要条件。

到这个地方，我们这门课理论部分最重要的两节就结束了。还是那句话，这是个坎儿，迈过了后面内容很自然你就能理解了。

这一章的最后一节是新表示的构成。它说的是一个什么事情呢？在前面的学习中，我们应该有这样一个感觉，对一个群对称性的分析，最重要的地方就是要知道它的特征标表。在求这个特征标表的时候，我们说了，Burnside 定理和群元的分类是最重要的。当群比较小，它的分类比较简单的时候，我们很容易结合 Burnside 定理、群元的分类、以及特征标的两个正交定理把特征标表求出来。但是当群比较大的时候，这样就不太容易了。这个时候，我们要做的，就是从这些比较复杂的群的因子，也就是比较简单的群出发，去构造这些比较复杂的群的表示。那么新表示的构成这一节，讲的基本就是这样一个事情。

它由四个部分构成：群表示的直积、直积群的表示、诱导表示、群表示在其子群上的缩小。其中第四个概念最简单，第三个最复杂。第二、第三个最有用。

2.6 新表示的构成

先看群表示的直积，这个概念比较直接，但在讲它之前，我们还是先看一下矩阵直积。

我们知道一个$n\times n$的矩阵 A=(a_{ik})，一个$m\times m$的矩阵 B=$\left(b_{jl}\right)$，这两个矩阵的直积为$C=A\otimes B$，它的群元为$c_{ij,kl}=\left(a_{ik}b_{jl}\right)$。这是一个$(n\times m)\times(n\times m)$的矩阵，行指标为 ij，列指标为 kl。用这个行列指标时，为方便起见，我们规定格式为：

$$C=\begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}B & a_{n2}B & \dots & a_{nn}B \end{pmatrix}$$

这样规定的格式和其它方式规定的格式，差的是一个相似变换。

由这种方式定义的直积矩阵显然具备如下四个性质：

1. 两个单位矩阵的直积是单位矩阵；
2. 两个对角矩阵的直积是对角矩阵；
3. 两个酉矩阵的直积仍为酉矩阵；
4. 若$A^{(1)}$与$A^{(2)}$是阶相同的矩阵，$B^{(1)}$与$B^{(2)}$是阶相同的矩阵，则$\left(A^{(1)}\otimes B^{(1)}\right)\left(A^{(2)}\otimes B^{(2)}\right)=\left(A^{(1)}A^{(2)}\right)\otimes\left(B^{(1)}B^{(2)}\right)$。

这四个性质里面 1、2 很好理解。3、4 需要解释一下。先解释 4，3 利用 4 就很好理解了。对 4 中的式子，左边$A^{(1)}$的行列指标为$\left(i, k\right)$，$B^{(1)}$的行列指标为$\left(j, l\right)$，$A^{(1)}\otimes B^{(1)}$的指标为$\left(ij, kl\right)$。同样$A^{(2)}$的行列指标为$\left(i', k'\right)$，$B^{(2)}$的行列指标为$\left(j', l'\right)$，$A^{(2)}\otimes B^{(2)}$的指标为$\left(i'j', k'l'\right)$。当$A^{(1)}\otimes B^{(1)}$与$A^{(2)}\otimes B^{(2)}$作乘法时，指标加和的要求是$k=i'$、$l=j'$。产生的矩阵指标为$\left(ij, k'l'\right)$。

而式子右边，$A^{(1)}A^{(2)}$的指标为$\left(i, k'\right)$，加和要求是$k=i'$；$B^{(1)}B^{(2)}$的指标为

$\left(\mathrm{j},\ \mathrm{l'}\right)$，加和要求为$l = j'$。在$A^{(1)}A^{(2)}$与$B^{(1)}B^{(2)}$作直积时，没有加和的要求，只有指标的组合，组合后结果为$\left(\mathrm{ij},\ \mathrm{k'l'}\right)$。这样在进行右边的操作的时候，总结一下，就是加和要求为$k = i'$、$l = j'$，产生的矩阵指标为$\left(\mathrm{ij},\ \mathrm{k'l'}\right)$。和左边完全相同。这样的话$\left(A^{(1)} \otimes B^{(1)}\right)\left(A^{(2)} \otimes B^{(2)}\right) = \left(A^{(1)}A^{(2)}\right) \otimes \left(B^{(1)}B^{(2)}\right)$成立。

由这个式子成立，我们再去看第 3 点性质。这一点说的是 A 是一个酉矩阵，具备$A^+A = E_n$，B 是一个酉矩阵，也具备$B^+B = E_m$。要说明 A⊗B 也是酉矩阵，满足$(A \otimes B)^+A \otimes B = E_{n\times m}$。这个时候根据第 4 点，很容易有$(A \otimes B)^+A \otimes B = (A^+ \otimes B^+)A \otimes B = (A^+A) \otimes B^+B = E_n \otimes E_m = E_{n\times m}$。

（补充：如果上述理解不直接，也可以换个角度，因为 A 是酉矩阵，满足$A^+A = E_n$，这个关系按照矩阵元的性质表示，就是：

$$\begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & \cdots & a_{n1}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* & \cdots & a_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n}^* & a_{2n}^* & \cdots & a_{nn}^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = E_n$$

进而$\sum_{i=1}^{n} a_{ik}^* a_{ik'} = \delta_{kk'}$。同样，对 B 也有：$\sum_{j=1}^{m} b_{jl}^* b_{jl'} = \delta_{ll'}$。

当 A 与 B 作直积 C 时，矩阵元为$c_{ij,kl} = a_{ik}b_{jl}$，要看 C 是否为酉矩阵，就是要看C^+C是否为单位矩阵，体现在矩阵元上，就是$\sum_{ij} c_{ij,kl}^* c_{ij,k'l'}$是否等于$\delta_{kk'}\delta_{ll'}$？这个时候，把 C 的矩阵元代入，就有：

$$\sum_{ij} c_{ij,kl}^* c_{ij,k'l'} = \sum_{ij} \left(a_{ik}^* b_{jl}^*\right) a_{ik'} b_{jl'} = \left(\sum_{i=1}^{n} a_{ik}^* a_{ik'}\right)\left(\sum_{j=1}^{m} b_{jl}^* b_{jl'}\right) = \delta_{kk'}\delta_{ll'}$$

补充完毕）

现在有了矩阵直积的定义与性质，我们来看群表示的直积。

定义 2.16 群表示的直积：群 G 有两个表示 A 与 B，作表示矩阵的直积$C(g_\alpha) = A(g_\alpha) \otimes B(g_\alpha)$，这个直积矩阵群保持群的乘法规律不变，因为对$\forall g_\alpha$，$g_\beta \in G$，有：

$$
\begin{aligned}
C(g_\alpha)C(g_\beta) &= \left(A(g_\alpha)\otimes B(g_\alpha)\right)\left(A(g_\beta)\otimes B(g_\beta)\right) \\
&= \left(A(g_\alpha)A(g_\beta)\right)\otimes\left(B(g_\alpha)B(g_\beta)\right) = A(g_\alpha g_\beta)\otimes B(g_\alpha g_\beta) \\
&= C(g_\alpha g_\beta)
\end{aligned}
$$

这时，C 也是群 G 的一个表示。这个表示称为 A 表示与 B 表示的直积表示。

因为矩阵直积的迹等于其因子迹的乘积，所以直积表示的特征标等于其因子的特征标的乘积：

$$\chi^C(g_\alpha) = \chi^A(g_\alpha)\chi^B(g_\alpha)$$

如果A与B都是群G的不可约表示，那么$(\chi^A|\chi^A) = (\chi^B|\chi^B) = 1$，而$(\chi^A|\chi^B) = 0$。这个时候直积表示的特征标内积为：

$$(\chi^C|\chi^C) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\chi^{A*}(g_i)\chi^{B*}(g_i)\chi^A(g_i)\chi^B(g_i)$$

这个加和是没法做分解的，一般情况下结果大于 1，对应可约表示。这个也很好理解，群空间你没有变，但你把表示矩阵变胖了很多。我这个群空间允许的不可约表示都是那些由 Burnside 定理和群的分类情况确定的瘦矩阵，你来个胖子，肯定不属于我们这个瘦人集团。

我自己能想到两个不可约表示的直积仍为不可约表示的情况是：A 与 B 中间任何一个（比如 B）是一维表示，且满足$\chi^{B*}(g_i)\chi^B(g_i)$这个数，对任意$g_i$都等于 1。

看个例子。

例11. 我们最常见的 D3 群它的特征标表是：

	1{e}	2{d}	3{a}
A^1	1	1	1
A^2	1	1	-1

A^3	2	-1	0

由这个特征标表，我们知道下面几个直积群的特征标分别为：

$A^1 \otimes A^3$	2	-1	0

与A^3等价，不可约；

$A^2 \otimes A^3$	2	-1	0

与A^3等价，不可约；

$A^1 \otimes A^2$	1	1	-1

与A^2等价，不可约；

$A^3 \otimes A^3$	4	1	0

可约了。我们把它记为 C，由$\left(\chi^{C}\middle|\chi^{A^1}\right) = 1$，$\left(\chi^{C}\middle|\chi^{A^2}\right) = 1$，$\left(\chi^{C}\middle|\chi^{A^3}\right) = 1$我们知道它约化完的结果为$A^1 \oplus A^2 \oplus A^3$。

以上就是群表示的直积部分，下面我们看直积群的表示。这里，$G_1 = \{g_{1\alpha}\}$与$G_2 = \{g_{2\beta}\}$是两个我们已知的群，G 是它们的直积群。由上一章我们讲的，这个关系意味着任意一个 G 中元素，可唯一写成$g_{1\alpha}g_{2\beta}$的形式，$g_{1\alpha}g_{2\beta} = g_{2\beta}g_{1\alpha}$，且两个 G 中元素$g_{1\alpha}g_{2\beta}$与$g_{1\alpha'}g_{2\beta'}$的乘积，可由$g_{1\alpha}g_{1\alpha'}g_{2\beta}g_{2\beta'}$得到，$G_1$与$G_2$中元素乘法互易，它们都是 G 的不变子群。

这是一个非常强的关系。当这个关系成立的时候，如果 A 是G_1的表示，B 是G_2的表示，那么对任意 G 中元素$g_{1\alpha}g_{2\beta}$，都有一个矩阵$A(g_{1\alpha}) \otimes B(g_{2\beta})$与之对应。且这种对应关系会保持 G 中元素的乘法规律不变，因为$g_{1\alpha}g_{2\beta}$这个 G 中元素与$g_{1\alpha'}g_{2\beta'}$这个 G 中元素对应的矩阵乘法满足：

$$
\begin{aligned}
C\left(g_{1\alpha}g_{2\beta}\right)C\left(g_{1\alpha'}g_{2\beta'}\right) &= \left(A(g_{1\alpha})\otimes B\left(g_{2\beta}\right)\right)\left(A(g_{1\alpha'})\otimes B\left(g_{2\beta'}\right)\right)\\
&= \left(A(g_{1\alpha})A(g_{1\alpha'})\right)\otimes\left(B\left(g_{2\beta}\right)B\left(g_{2\beta'}\right)\right)\\
&= A(g_{1\alpha}g_{1\alpha'})\otimes B\left(g_{2\beta}g_{2\beta'}\right)\\
&= C\left(g_{1\alpha}g_{1\alpha'}g_{2\beta}g_{2\beta'}\right) = C\left(g_{1\alpha}g_{2\beta}g_{1\alpha'}g_{2\beta'}\right)
\end{aligned}
$$

左边是$g_{1\alpha}g_{2\beta}$对应的矩阵与$g_{1\alpha'}g_{2\beta'}$对应的矩阵的乘积，右边是$g_{1\alpha}g_{2\beta}$与$g_{1\alpha'}g_{2\beta'}$乘积对应的矩阵，形成表示。这样的表示我们称为直积群的表示。

这个直积群的表示和我们前面讲的群表示的直积有什么区别呢？最重要的一点点就是在群表示的直积那里，我已经知道了它的两个表示，我干的事情是用这两个表示矩阵做直积，来形成新的表示。而在直积群的表示这里，我们本来是不知道 G 的任何表示的，我们知道的是它的两个不变子群的表示，我们同时知道这个群可以写成这两个不变子群的直积。我们是基于这个关系构造的群 G 的表示。由于这个差别，在前面我们说群表示的直积形成的新的表示时，两个不可约表示形成的新的表示可能可约。而在这里，如果 A 与 B 是G_1与G_2的不可约表示，那么$A(g_{1\alpha})\otimes B\left(g_{2\beta}\right)$对应的 G 的表示也不可约。因为设$G_1$与$G_2$的阶为 n 和 m 时，有：

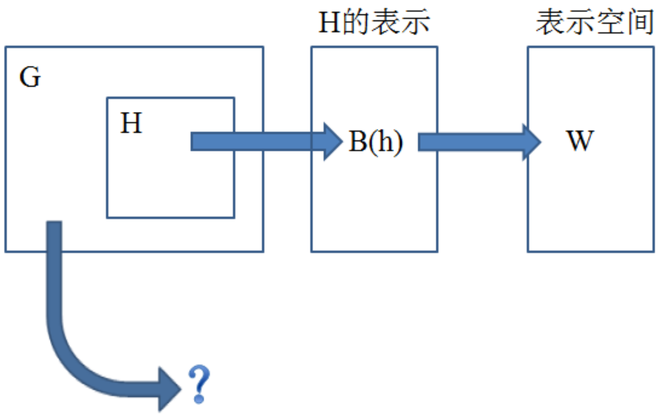
$$
\begin{aligned}
(\chi^C|\chi^C) &= \frac{1}{nm}\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{\beta=1}^{m}\chi^{A*}(g_{1\alpha})\chi^{B*}(g_{2\beta})\chi^{A}(g_{1\alpha})\chi^{B}(g_{2\beta})\\
&= \left(\frac{1}{n}\sum_{\alpha=1}^{n}\chi^{A*}(g_{1\alpha})\chi^{A}(g_{1\alpha})\right)\left(\frac{1}{m}\sum_{\beta=1}^{m}\chi^{B*}(g_{2\beta})\chi^{B}(g_{2\beta})\right)
\end{aligned}
$$

当 A 与 B 不可约时，1 乘上 1 还是 1。换句话说，对 G，如果它太复杂，我们可以利用直积群的表示这个概念，由它因子的不可约表示来构造它的不可约表示。

下面我们看诱导表示。这个概念的难度在我们这门课里面是数一数二的，当然，有用程度也很高。不然我们没必要自找麻烦。

它的主要作用是什么呢？前面我们讲过，新表示的构成这一节的一个中心思想是从已知表示构造新的表示。实际研究中，最经常面对的情况是群 G 比较复杂，它的子群比较简单，我们要从它子群的表示出发构造群 G 的表示。前面讲的直积群的表示处理的实际就是这样一个情况。**但是**我们必须要清楚，在直积群的表示那里，我们对群 G 结构特征的要求是非常高的。这个群本身必须可以分解为两个子群的直积，实际情况下这种条件很难成立。这里要讲的诱导表示，面对的就是这样的情况。对它而言，我只要求群 G 存在一个子群就行了，我们从这个子群的表示出发构造群 G 的表示，我们不要求这个子群是不变子群，我们更不要求这个群 G 可以直积分解。

用图画出来，这里的结构关系是这样的：



我们有群 G，它很复杂，我们不知道它有什么表示。我们知道的是它有一个子群 H，这个 H 简单很多，它有一个表示 B 我们知道，同时我们知道这个表示的表示空间是 W。我们想知道由这些信息，能否给出 G 的一个表示？

这里“诱导”也是这个意思了，就是有已知的 H 的信息，得出未知的 G 的信息。把这个目的明确后，我们就去看怎么诱导了？这个说白了，就是要去定义一个线性变换群，使得 G 与它同态。而定义这个线性变换群，说白了三步：

1. 定义一个线性空间，使得线性变换可以作用到这个线性空间的向量上；

2. 定义这个线性变换；

3. 把这些线性变换放在一起，看它们是否形成群，是否与 G 同态（也就是保持乘法规律不变）。

当这些都做完以后，我们就可以说我们从 H 诱导出了 G 的一个表示了。下面我们的讨论也会按这个思路来进行。

一. 把诱导表示记为 U，表示空间记为 V，这个 V 是什么？

这个 V 我们把它定义为一个函数空间，既然已知条件是 H、B、W，那么这个函数空间必然与这些已知条件有关。怎么个相关法？

我们可以定义 V 中向量是这样一个函数，这个函数的特点是你给我一个 G 中的群元，我给你一个 W 空间中的向量，我们把这个函数记为 f。

这个相当于是把 W 空间的信息利用起来了，把 G 这个群利用起来了，但是 H、B 还没有利用。为了把这个 B 是 H 的表示这个信息再利用起来，我们规定，对任意 h 属于 H，任意 g 属于 G，有：$f(hg) = B(h)f(g)$。

这是一个限制条件，也就是说 f 并不是所有你给我一个 G 中群元，我给你一个 W 空间中的向量，这样一个函数。我还要求$f(hg) = B(h)f(g)$对任意 h、g 成立。在这个等式中，左边是 W 空间中一个向量，右边$f(g)$也是 W 空间中一个向量，$B(h)$是 W 空间上的线性变换，作用到 W 空间的向量$f(g)$上，得到 W 空间的另一个向量$B(h)f(g)$。这个等式要求这个向量与 f 这个函数直接以 hg 为输入得到的 W 空间的向量相同。

二. 线性变换 $U(g)$是什么？

上面是对诱导表示的表示空间的定义，现在我们看表示的线性变换。我们对它的要求是它作用到 V 中向量 f 上，得到的 V 中向量$U(g)f$，满足：$[U(g)f](g'') =$

$f(g''g)$。

注意这里$[U(g)f]$是一个 V 中向量，换句话说也是一个函数，对这个函数你给它一个 G 中群元，它给你一个 W 空间向量。我们对这个 V 中向量的要求是如果你给它一个群元g''，那么它给你的 W 空间的向量，与函数 f 以$g''g$为输入得到的 W 空间中的向量相等。

这个是对线性变换$U(g)$的要求。在第一点中，我们说了 V 中的向量 f 要满足：$f(hg) = B(h)f(g)$。在这里，$U(g)$作用到 f 上，得到 V 中的另一个向量$[U(g)f]$，显然，$[U(g)f]$也是要满足要求：$[U(g)f](hg'') = B(h)[U(g)f](g'')$的。这个要求满不满足呢？答案是满足，因为对这个式子，有：

$$[U(g)f](hg'') = f(hg''g) = B(h)f(g''g)$$

再根据$[U(g)f](g'') = f(g''g)$，继续有：

$$[U(g)f](hg'') = B(h)f(g''g) = B(h)[U(g)f](g'')$$

这也就是说$U(g)$作用到 V 中的一个向量上，得到的确实是 V 中的另一个向量。

三. 这个线性变换群保持抽象群 G 的乘法规律不变。

现在我们是定义完了诱导表示的表示空间 V，它是一个函数空间，其中函数是 f，f 的特征是你给我一个群 G 中群元，我给你一个 H 表示 B 的表示空间 W 中的向量，且 f 满足：$f(hg) = B(h)f(g)$，对$\forall h \in H$、$\forall g \in G$成立。

同时我们定义完了线性变换$U(g)$，它满足：$[U(g)f](g'') = f(g''g)$对$\forall g$、$g'' \in G$，$\forall f \in V$成立。

现在我们看$\{U(g)\}$是否形成群？以及 G 与$\{U(g)\}$是否同态？同态要满足的关系是：

$$[U(g')U(g)f](g'') = [U(g'g)f](g'')$$

对$\forall g、g'、g''\in G$，$\forall f\in V$成立。我们先证这个关系成立，然后说明$\{U(g)\}$形成群。两者合在一起，G 与$\{U(g)\}$同态自然成立。

证明这个关系成立比较简单：

$[U(g')U(g)f](g'')=[U(g')f](g''g)$（先对后一半作用，同时记$f(g''g)$这个函数为$\varphi(g'')$，因为对这个式子而言，变量是$g''$，线性变换作用到的，是一个以$g''$为变量的函数）

因此，它可以继续写为：

$$[U(g')U(g)f](g'')=[U(g')f](g''g)=[U(g')\varphi](g'')=\varphi(g''g')$$

这里$U(g)f$这个函数φ依然属于 V，因此$U(g')$作用到$\varphi(g'')$上等于$\varphi(g''g')$。

这个时候把φ本来的样子代入，就有：$\varphi(g''g')=f(g''g'g)$。进而：

$$[U(g')U(g)f](g'')=\varphi(g''g')=f(g''g'g)$$

而$[U(g'g)f](g'')=f(g''g'g)$。因此：

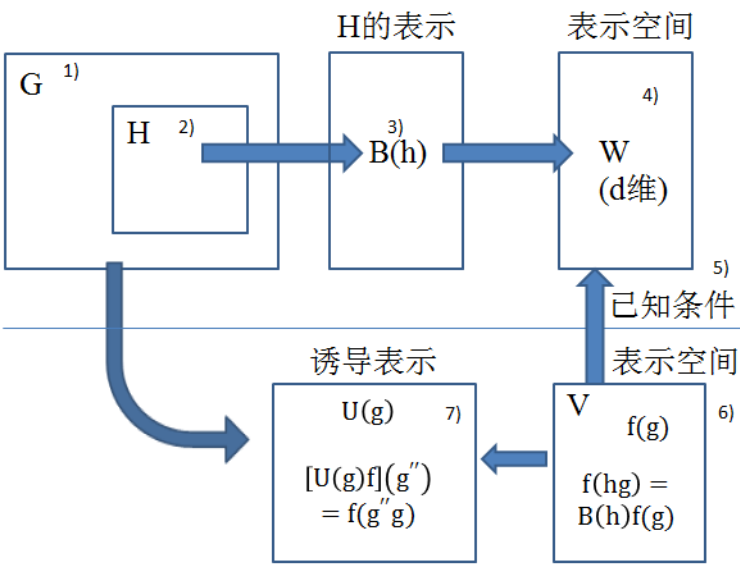
$$[U(g')U(g)f](g'')=[U(g'g)f](g'')$$

对$\forall g、g'、g''\in G$，$\forall f\in V$成立。

关系成立后，第二点：$\{U(g)\}$是否形成群呢？答案是肯定的。首先由于$[U(g_0)f](g'')=f(g'')$，$U(g_0)$是单位元素；其次$U(g^{-1})$与$U(g)$互逆；第三是上面说了$U(g')U(g)=U(g'g)$，乘法关系保持；最后$\big(U(g'')U(g')\big)U(g)=U(g''g')U(g)=U(g''g'g)=U(g'')U(g'g)=U(g'')\big(U(g')U(g)\big)$，结合律也成立。四点结合，$\{U(g)\}$形成群。

$\{U(g)\}$形成群与前面说的$U(g')U(g)=U(g'g)$这两点再一结合，$\{U(g)\}$就是 G 的一个表示。我们把这个表示称为诱导表示，记作：${}_{H}U_{G}^{B}$、${}_{H}U^{B}$、或U^{B}。

为了更清楚地把它的产生过程再说明一遍，我们把刚才那个图补完：



（从 1 到 7 依次讲下来，加上$f(hg) = B(h)f(g)$、$[U(g)f](g'') = f(g''g)$两个限制条件，我们就可以证明$\{U(g)\}$就是 G 的表示了）

上面是搞清楚了诱导表示的基本原理。实际应用中，除了这个基本原理，可能更重要的是我们要知道如何去产生诱导表示的矩阵?

要搞清楚这个问题，在前面求群表示的时候我们已经说过，标准程序是什?

答案：如下三布。

1. 搞清楚表示空间的维度，在这里就是 V 这个函数空间的维度;
2. 在这个函数空间中，取这个维度个线性无关的函数，作为基;
3. 将线性变换$\{U(g)\}$作用到这些基上，得到新函数，把每个新函数按旧基展开，展开系数对应表示矩阵的列。

先看第一步，这个函数空间有多少维?

1. 要确定一个函数空间的维度，说白了就是要看我们需要用几个数来确定一个函数。在群代数以及它对应的群函数那里，我们需要群的阶 n 个数来确定一个群函数，所以群函数空间的维度为 n。在类函数那里，我们需要类的个数个数来确定一个类函数，所以类函数的维度为类的个数。

在这里，我们的函数空间 V 具备这样的特质，你给我一个群元，我给你一个 W 空间中的向量。群元有 n 个选择（自由度为 n），这个 W 空间中的向量是 d 维的（自由度为 d），两方面加在一起，要确定这样一个函数，我们有$n \times d$个自由度，这个函数空间是$n \times d$维的。

但是在得出这个结论的时候，我们忽略了一个对 V 中函数 f 的限制，也就是$f(hg) = B(h)f(g)$，对$\forall h \in H$、$\forall g \in G$成立。这个限制有什么意义呢？这个限制其实以为着对 f，我们不需要知道所有 f(g)的值，只需要知道一部分，就可以把所有 f(g)的值通过$f(hg) = B(h)f(g)$得到。为什么呢？

因为我们可以把群 G，按其子群 H 进行陪集分解，$G = \left\{Hg_1、Hg_2、\cdots、Hg_l\right\}$，其中$g_1$是 G 中单位元，$l$=n/m，n 是 G 的阶，m 是 H 的阶。这样分割的话，你给我一个任意群元 g，我都可以把它定位在某一个陪集中，写成 hg_i，这样，它所对应的 W 空间中的向量，就可以通过$f(hg_i) = B(h)f(g_i)$得到。这里$B(h)$已知，也就是说我只需要知道在上面的陪集分解中每个g_i对应的$f(g_i)$，那么所有的$f(g)$就都知道了。这样 V 的维度就缩小为$\frac{n}{m}d$，以后记$l = \frac{n}{m}$。

2. 有了这样一个认识，我们就开始选基了。这个基应该有 $l\times$d 个，每个都是这样一个函数，这个函数干的事情是你给我一个上面陪集分解时的g_i，我给你一个 W 空间中的向量。

   我们用两个指标来标记这一组基，r 与 j，这组基的形式为：$e_{rj}(g_k) = \delta_{jk}\vec{e}_r$，其中 r 是 W 空间的维度指标，走遍 1 到 d，$\vec{e}_r$是 W 里面 d 个线性无关的向量（H 表示 B 的表示空间）。j 是从 1 到 l 中间的一个数，这样 rj 有 $l \times d$个组合。

   这里$e_{rj}(g_k)$起的作用呢？是你给我一个 G 中按 H 的陪集分解得到的，g_1、g_2、

到g_l中的一个元素，我给你一个 W 空间中的矢量。当我这个函数的输入不是g_1、g_2、到g_l中的一个元素，而是 G 中任意一个元素时，我这个函数会根据你这个元素在我G的陪集分解中的定位,把你写成hg_i的形式,然后我$e_{rj}(hg_i)$，就等于$B(h)e_{rj}(g_i)$。$B(h)$已知，$e_{rj}(g_i)$已知，$e_{rj}(hg_i)$自然就知道了。

也就是说，对确定这组基组，最终会落定在 r 与 j 分别取遍从 1 到 d、1 到 l 的值时，$e_{rj}(g_k)$分别对应什么样的函数?

我们先看 r=1，j=1 的情况，这个时候，对$e_{rj}(g_k)$这个函数，你给我g_1，我给你 W 中的$\vec{e}_1$，你给我g_2，我给你 W 空间中的零向量，你给我g_3到g_l，我都给你 W 空间中的零向量。

r=2，j=1 时，对$e_{rj}(g_k)$这个函数，你给我g_1，我给你 W 中的$\vec{e}_2$，你给我g_2，我给你 W 空间中的零向量，你给我g_3到g_l，我都给你 W 空间中的零向量。

r=3，j=1 等情况依次类推。

r=d，j=1 时，对$e_{rj}(g_k)$这个函数，你给我g_1，我给你 W 中的$\vec{e}_d$，你给我g_2，我给你 W 空间中的零向量，你给我g_3到g_l，我都给你 W 空间中的零向量。

r=1，j=2 时，对$e_{rj}(g_k)$这个函数，你给我g_1，我给你 W 中的零向量，你给我g_2，我给你 W 空间中的$\vec{e}_1$，你给我g_3到g_l，我都给你 W 空间中的零向量。

r=2，j=2 时，对$e_{rj}(g_k)$这个函数，你给我g_1，我给你 W 中的零向量，你给我g_2，我给你 W 空间中的$\vec{e}_2$，你给我g_3到g_l，我都给你 W 空间中的零向量。

r=3，j=2 等情况依次类推。

r=d，j=2 时，对$e_{rj}(g_k)$这个函数，你给我g_1，我给你 W 中的零向量，你给我g_2，我给你 W 空间中的$\vec{e}_d$，你给我g_3到g_l，我都给你 W 空间中的零向量。

j=3 到 l，对每个 j，r 等于 1 到 d 的情况依次类推。当 r、j 的组合走遍 d× l个

维度。V 中的$l\times d$个基就定了。

3. 定义完这样一个基以后，我们就要求诱导表示的表示矩阵了。这个说白了，就是要看$U(g)$作用到$e_{rj}(g_k)$上的效果，根据$U(g)$的定义，我们知道：

$$U(g)e_{rj}(g_k)=e_{rj}(g_kg)$$

这里，$e_{rj}(g_kg)$对应什么样的 W 空间中的向量，我们可以根据 G 按 H 进行陪集分解的具体形式，确定g_kg为hg_i，然后再根据$e_{rj}(hg_i)=B(h)e_{rj}(g_i)$来确定。这个没有问题。**但是**，当我会回到线性变换本身，要想把$e_{rj}(g_kg)$写成以g_k为变量的函数，并且把它用$e_{rj}(g_k)$来展开，就没那么容易了。

这个时候我们首先需要明确的是 g 是一个确定的群元，我们要求的是它的线性变换矩阵。这个$U(g)$作用到$e_{rj}(g_k)$上，得到的是$e_{rj}(g_kg)$。这个$e_{rj}(g_kg)$我们不知道是什么，我们需要通过 H 对 G 的陪集分解，把它确定为某个hg_i。g 定了，g_k定了，这个 h 与g_i也就定了。然后我们通过$e_{rj}(g_kg)=e_{rj}(hg_i)=B(h)e_{rj}(g_i)$可以得到：

$$U(g)e_{rj}(g_k)=B(h)e_{rj}(g_i)$$

$B(h)$是一个我们已知的变换矩阵。我们现在需要做的，是把$e_{rj}(g_i)$的变量变作g_k，这样的话我们就可以得出$U(g)$的矩阵表示了。

我们怎么做到这一点？我们用的性质是g_i是g_1、g_2、到g_l中的一个群元，g_k也是g_1、g_2、到g_l中的一个群元。当我g_1、g_2、到g_l排好位置以后，g_i与g_k差的是一个平移。假设 i+t 等于 k，那么$e_{rj}(g_i)=e_{rj+t}(g_k)$。把 j+t 记为 m，那么上面那个变换就变成了：

$$U(g)e_{rj}(g_k)=B(h)e_{rm}(g_k)$$

$e_{rm}(g_k)$是我们基矢组中的一个，展开系数就可以由右边确定了。

这个式子的右边要想不为零，由$e_{rm}(g_k)$的定义，要求 m=k。而这个式子的左边要想不为零，由$e_{rj}(g_i)$定义，也要求 i=j。与此同时由$g_k g = h g_i$，知 h=$g_k g g_i^{-1}$。结合 m=k、i=j，我们就知道：$g_m g g_j^{-1} = h \in H$。注意，这里 m、j 是基$e_{rm}(g_k)$、$e_{rj}(g_i)$的第二个指标，这也就是说只有这个基的第二个指标 m、j 所对应的g_m、g_j通过$g_m g g_j^{-1}$的方式作用到群元 g 上得到的群元$g_m g g_j^{-1} = h \in H$时，$U(g)e_{rj}(g_k)$的展开系数才不为零。这时展开系数由$B(h)$，即 $B(g_m g g_j^{-1})$决定。其它情况下，结果都是零。

基于这个理解，表示矩阵的具体形式就非常简单了。对$\forall g \in G$，$U(g)$等于：

$$U(g) = \begin{pmatrix} \dot{B}(g_1 g g_1^{-1}) & \dot{B}(g_1 g g_2^{-1}) & \dots & \dot{B}(g_1 g g_l^{-1}) \\ \dot{B}(g_2 g g_1^{-1}) & \dot{B}(g_2 g g_2^{-1}) & \dots & \dot{B}(g_2 g g_l^{-1}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dot{B}(g_l g g_1^{-1}) & \dot{B}(g_l g g_2^{-1}) & \dots & \dot{B}(g_l g g_l^{-1}) \end{pmatrix}$$

其中：

$$\dot{B}(g_m g g_j^{-1}) = \begin{cases} B(g_m g g_j^{-1}), & \text{if } g_m g g_j^{-1} \in H \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

在这个表述中，我们是把$\dot{B}(g_m g g_j^{-1})$这个$d \times d$的矩阵作为基本单元，把$U(g)$写成了$l \times l$块。在这$l \times l$中，对一个特定的 m，因为$g_m g$只能分解到一个 H 的陪集中，所以只有一个$\dot{B}(g_m g g_j^{-1})$非零。同样，不同$g_m g$与$g_{m'} g$，必对应不同陪集（因为不然由$g_m g = h_1 g_j$与$g_{m'} g = h_2 g_j$可得$g_m = h_1 h_2^{-1} g_{m'}$，进而$g_m \in Hg_{m'}$，与$Hg_m$、$Hg_{m'}$是不同陪集矛盾），这样$U(g)$这个矩阵以 B 这个$d \times d$的矩阵作为基本单元，写出来的样子就是：

$$U(g) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & B & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B & 0 & & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & B \\ 0 & 0 & & 0 \end{pmatrix}$$

这种类似于正则表示的样子了。

举个例子，还是用 D_3。

例12. 这个 G={e、d、f、a、b、c}，H={e、d、f}。H 是个三阶循环群，有表示 $B(e)=1$、$B(d)=\varepsilon=\exp\left[\frac{2\pi i}{3}\right]$、$B(f)=\varepsilon^2=\exp[4\pi i/3]$。求由它诱导出的 G 的表示？

这里需要的信息是 D3 群乘法表：

	e	**d**	**f**	**a**	**b**	**c**
e	e	d	f	a	b	c
d	d	f	e	c	a	b
f	f	e	d	b	c	a
a	a	b	c	e	d	f
b	b	c	a	f	e	d
c	c	a	b	d	f	e

G={Hg_1、Hg_2}，$g_1=e$、$g_2=a$。

由上面给出的诱导表示的式子，很直接：

$$U^B(e)=\begin{pmatrix}\dot{B}(eee^{-1}) & \dot{B}(eea^{-1})\\ \dot{B}(aee^{-1}) & \dot{B}(aea^{-1})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}B(e) & 0\\ 0 & B(e)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$U^B(d)=\begin{pmatrix}\dot{B}(ede^{-1}) & \dot{B}(eda^{-1})\\ \dot{B}(ade^{-1}) & \dot{B}(ada^{-1})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}B(d) & 0\\ 0 & B(f)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varepsilon & 0\\ 0 & \varepsilon^2\end{pmatrix}$$

$$U^B(f)=\begin{pmatrix}\dot{B}(efe^{-1}) & \dot{B}(efa^{-1})\\ \dot{B}(afe^{-1}) & \dot{B}(afa^{-1})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}B(f) & 0\\ 0 & B(d)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varepsilon^2 & 0\\ 0 & \varepsilon\end{pmatrix}$$

$$U^B(a)=\begin{pmatrix}\dot{B}(eae^{-1}) & \dot{B}(eaa^{-1})\\ \dot{B}(aae^{-1}) & \dot{B}(aaa^{-1})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & B(e)\\ B(e) & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

$$U^B(b)=\begin{pmatrix}\dot{B}(ebe^{-1}) & \dot{B}(eba^{-1})\\ \dot{B}(abe^{-1}) & \dot{B}(aba^{-1})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & B(f)\\ B(d) & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & \varepsilon^2\\ \varepsilon & 0\end{pmatrix}$$

$$U^B(c)=\begin{pmatrix}\dot{B}(ece^{-1}) & \dot{B}(eca^{-1})\\ \dot{B}(ace^{-1}) & \dot{B}(aca^{-1})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & B(d)\\ B(f) & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & \varepsilon\\ \varepsilon^2 & 0\end{pmatrix}$$

这个诱导表示特征标为 2、-1、0，是不可约表示。

由前面的式 2.11，我们还知道诱导表示的特征标整体可写为：

$$\chi^{\mathrm{U}}(\mathrm{g})=\sum_{\mathrm{j}=1}^{l}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{g_j g g_j^{-1}}) \qquad \text{（式 2.12）}$$

在这个加和的时候，j 走遍从 1 到 l=n/m。这里$\mathrm{g_j g g_j^{-1}}\in\mathrm{H}$时$\dot{\mathrm{B}}$是 B，否则是零矩阵。我们可以注意到这样一个性质，就是我们这个$\mathrm{g_1}$到g_l其实是在对 G，依据 H 进行陪集分解的时候用到的 H 外的那些群元，整个 G 可以写成$\mathrm{Hg_1}$到Hg_l的并集。对一个陪集，比如$\mathrm{Hg_j}$中的任何一个元素 $\mathrm{hg_j}$，把它作用到 g 上，都会有这样的性质：就是如果$\mathrm{g_j g g_j^{-1}}\in\mathrm{H}$，则$\mathrm{hg_j g g_j^{-1}h^{-1}}\in\mathrm{H}$，而如果$\mathrm{g_j g g_j^{-1}}\notin\mathrm{H}$，则$\mathrm{hg_j g g_j^{-1}h^{-1}}\notin\mathrm{H}$。因为如果不然，就会反推出$\mathrm{g_j g g_j^{-1}}\in\mathrm{H}$。同时$\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}\left(\mathrm{g_j g g_j^{-1}}\right)=\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}\left(\mathrm{hg_j g g_j^{-1}h}\right)$。这样的话，式 2.12 中那个对$\mathrm{g_j}$的加和，就可以扩展到 G 中所有元素上，唯一需要注意的是对 H 中元素遍历的时候，给了 m 遍（H 的阶）相同的结果，所以要把这个重复的部分扣除，最终有：

$$\chi^{\mathrm{U}}(\mathrm{g})=\frac{1}{\mathrm{m}}\sum_{t\in\mathrm{G}}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tgt^{-1}}) \qquad (2.12)$$

在诱导表示这个硬骨头啃下来之后，我们这一节就剩下两个简单很多的内容了：1、群表示在子群上的缩小，2、Frobenius 定理。这两个都可以几句话说清。

先说群表示到其子群的缩小。说的是这样一个事情，A 是群 G 的一个表示，对$\forall\mathrm{g}\in\mathrm{G}$，都有一个线性变换$\mathrm{A(g)}$与之对应，且有$\mathrm{A(g_1g_2)=A(g_1)A(g_2)}$。那么这个对应关系对 G 的子群 H 中的元素自然也成立，即对$\forall\mathrm{h}\in\mathrm{H}\subset\mathrm{G}$，都有一个线性变换$\mathrm{A(h)}$与之对应，且有$\mathrm{A(h_1h_2)=A(h_1)A(h_2)}$。也就是说线性变换群$\{\mathrm{A(h)}\}$形成了 G 的子群 H 的一个表示。我们把这样的一个表示称为 G 的表示 A，到其子群 H 的缩小，记为$\mathrm{A}|_{\mathrm{H}}$。

对于类似表示的缩小，如果 A 是 G 的不可约表示，那么$\mathrm{A}|_{\mathrm{H}}$是 H 的不可约表示吗?

答案是：不一定。比如对于 D3 群，有二维不可约表示：

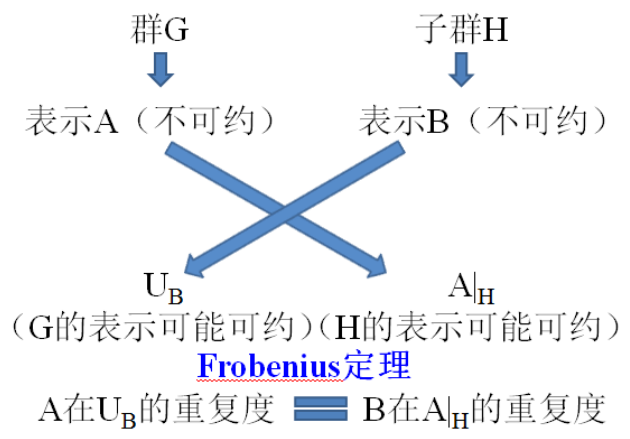
$A(e)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$、$A(d)=\begin{pmatrix}\varepsilon & 0\\ 0 & \varepsilon^2\end{pmatrix}$、$A(f)=\begin{pmatrix}\varepsilon^2 & 0\\ 0 & \varepsilon\end{pmatrix}$、

$A(a)=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$、$A(b)=\begin{pmatrix}0 & \varepsilon^2\\ \varepsilon & 0\end{pmatrix}$、$A(c)=\begin{pmatrix}0 & \varepsilon\\ \varepsilon^2 & 0\end{pmatrix}$

它在 D3 的子群 H={e、d、f}上的缩小，就不是这个三阶循环群的不可约表示。

这个就是群表示在子群上得缩小说的意思了。那么 Frobenius 定理呢？说的是群 G 有个子群 H，G 有不可约表示 A，H 有不可约表示 B，它们本来是两个道上的车，看起来没啥关系。但是由我们前面的讨论我们知道由 H 的不可约表示 B，可以诱导出 G 的一个表示 U，这个表示 U 对 G 来说可能是可约的。同时对 G 的不可约表示 A，它在 H 上有个缩小$A|_H$，这个缩小对 H 来说也可能是可约的。

Frobenius 定理说的是：由于诱导表示和群表示的缩小这两个定义本身蕴藏的结构关系，我们可以知道 G 的不可约表示 A 在由 H 的不可约表示 B 所诱导出来的 G 的表示 U 中的重复度，等于 H 的不可约表示 B 本身在 G 的不可约表示 A 对 H 的缩小（也就是 H 的表示$A|_H$）中的重复度。用图形的方式表达，就是：



用数学式子写出来，就是：

$$(\chi^A|\chi^U)=(\chi^B|\chi)$$

其中χ^A、χ^U是群 G 的不可约表示 A 与由 H 的不可约表示 B 所诱导出来的 G 的

诱导表示 U 的特征标；χ^{B}、χ是群 H 的不可约表示 B 与由 G 的表示 A 在 H 上的缩小构成的 H 的表示$A|_H$的特征标。

怎么证？我们可以这样看，式子的左边为：

$$(\chi^{A}|\chi^{U})=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{A*}(g)\chi^{U}(g)=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{A*}(g)\left\{\frac{1}{m}\sum_{t\in G}\mathrm{tr}\dot{B}(tgt^{-1})\right\}$$

$$=\frac{1}{nm}\sum_{t\in G}\sum_{g\in G}\chi^{A*}(g)\mathrm{tr}\dot{B}(tgt^{-1})$$

这里 t 与 g 的加和都走遍 G，记$s=tgt^{-1}$，则$g=t^{-1}st$，那么对 t 与 g 的加和，是可以换作对 s 与 t 的加和的，也就是上式可继续等于

$$=\frac{1}{nm}\sum_{t\in G}\sum_{s\in G}\chi^{A*}(t^{-1}st)\mathrm{tr}\dot{B}(s)$$

由$\dot{B}$定义，它继续等于

$$=\frac{1}{m}\sum_{s\in H}\left\{\frac{1}{n}\sum_{t\in G}\chi^{A*}(t^{-1}st)\right\}\chi^{B}(s)$$

因为对χ^{B}求和，要求 s 属于 H，所以加和范围自然缩小到 H。同时，又由于在 t 走遍 G 时，$\chi^{A*}(t^{-1}st)=\chi^{A*}(s)$都成立，所以，上式继续等于

$$=\frac{1}{m}\sum_{s\in H}\chi^{A*}(s)\,\chi^{B}(s)=(\chi|\chi^{B})$$

由于重复度为实数，它继续等于

$$=(\chi^{B}|\chi)$$

也就是

$$(\chi^{A}|\chi^{U})=(\chi^{B}|\chi)$$

Frobenius 定理成立。

再回到刚才 D_3 群的例子。

例13. 我们刚才从{e、d、f}的不可约表示$B(e)=1$、$B(d)=\varepsilon=\exp[2\pi i/3]$、$B(f)=$

$\varepsilon^2=\exp[4\pi i/3]$推出了 A 的诱导：

$A(e)=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$、$A(d)=\begin{pmatrix}\varepsilon & 0\\0 & \varepsilon^2\end{pmatrix}$、$A(f)=\begin{pmatrix}\varepsilon^2 & 0\\0 & \varepsilon\end{pmatrix}$、

$A(a)=\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$、$A(b)=\begin{pmatrix}0 & \varepsilon^2\\\varepsilon & 0\end{pmatrix}$、$A(c)=\begin{pmatrix}0 & \varepsilon\\\varepsilon^2 & 0\end{pmatrix}$

这个诱导表示我们不保证是 D_3 的不可约表示，但这里凑巧它就是，A^1、A^2、A^3 在它上面的重复度由特征标表：

	1{e}	2{d}	3{a}
A^1	1	1	1
A^2	1	1	-1
A^3	2	-1	0

可以得出分别为：0、0、1。

这个时候我们来验证 Frobenius 定理。如果我取 D_3 的不可约表示为 A^1 或 A^2，这个 A^1 或A^2在 H 上的缩小都是 A(e)=A(d)=A(f)=1，H 的不可约表示在它上面的重复度都是 0，这个 0 恰好与 A^1 或A^2本身在这个诱导表示上得重复度相同，这也就是 Frobenius 定理说的内容。

如果我们把 D_3 的不可约表示换为 A^3，A^3 在 B 的诱导表示上的重复度为 1。而同时，A^3 在 H 上的缩小为：

$A(e)=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$、$A(d)=\begin{pmatrix}\varepsilon & 0\\0 & \varepsilon^2\end{pmatrix}$、$A(f)=\begin{pmatrix}\varepsilon^2 & 0\\0 & \varepsilon\end{pmatrix}$

H 本身的不可约表示$B(e)=1$、$B(d)=\varepsilon=\exp[2\pi i/3]$、$B(f)=\varepsilon^2=\exp[4\pi i/3]$在$A|_H$上得重复度为：

$$(\chi^B|\chi)=\frac{1}{3}[2\times 1+(\varepsilon+\varepsilon^2)\times\varepsilon+(\varepsilon^2+\varepsilon)\times\varepsilon^2]$$
$$=\frac{1}{3}[2+(\varepsilon+\varepsilon^2)\times(\varepsilon^2+\varepsilon)]=1$$

Frobenius 依然成立。

2.7 习题与思考

1. 设$A(g)$是群$G=\{g\}$的一个表示，证明：复共轭矩阵$A^*(g)$也是G的一个表示。如$A(g)$是不可约的或者幺正的，则$A^*(g)$也是不可约的或者幺正的。

2. 设$A(g)$是群$G=\{g\}$的一个表示，证明：转置逆矩阵$[A^t(g)]^{-1}$、厄密共轭逆矩阵$[A^+(g)]^{-1}$也是G的一个表示。如$A(g)$是不可约的或者幺正的，则$[A^t(g)]^{-1}$、$[A^+(g)]^{-1}$也是不可约的或者幺正的。

3. 如$A(g)$是群$G=\{g\}$的一个表示，那$A^t(g)$、$A^+(g)$是吗？为什么？

4. 设$A(g)$是有限群G的一个不可约表示，C是G中一个共轭类，λ为常数，E是单位矩阵。证明：$\sum_{g\in G}A(g)=\lambda E$。体会此证明中有限群这个条件的使用。

5. 证明有限群G中属于同一类的各元的表示矩阵之和，必与群G的一切元的表示矩阵互易。

6. 求三阶群的所有不等价不可约表示。

7. 设$A(g)$是有限群G的一个不可约表示，$B(g)$是有限群G的一个一维非恒等表示，证明：$A(g)\otimes B(g)$也是群G的一个不可约表示。

8. 设$V=\{e、a、b、c\}$是满足如下乘法表的四阶群，求其所有不等价、不可约表示

	e	a	b	c
e	e	a	b	c
a	a	e	c	b
b	b	c	e	a
c	c	b	a	e

9．求出D_3群的所有不等价、不可约酉表示，并检验群表示的正交定理。

10. 求出D_3群在二次齐次函数空间的群表示，并写出其包含的不可约表示。

11. 写出四阶循环群的左正则与右正则表示。

12. 设$A^p(g)$与$A^r(g)$是群G的两个不等价、不可约表示，直积表示$A^p(g)\otimes A^{r*}(g)$包含其恒等表示吗？$A^p(g)\otimes A^{p*}(g)$呢？为什么？如包含，包含几次？

13. 取子群H的表示为左正则表示，由其诱导出的群G的表示是什么样子？为什么？

14. 有限群G的非恒等的不可约表示的特征标之和，$\sum_{g\in G}\chi^p(g)$，等于几？为什么？

15. 以$f_1(\vec{r})=x^2$、$f_2(\vec{r})=y^2$、$f_3(\vec{r})=xy$为基，写出D_3群的三维表示，并约化。

16. D_3群，基于其子群$\{e、a\}$的恒等表示，写出诱导表示，并约化。

17. 写出D_3群所有不可约表示相互之间的直积，并约化。

第三章 点群与空间群

3.1 点群基础

前面我们说过很多次，第一、第二章是这门课的理论基础，讲它们是为我们后面讲具体的群做准备的。第三章讲点群和空间群。历史上，物理学家（包括地质学家），特别是其中研究晶体的那部分人，就对称性的认识，在早期也集中于这个领域。现在，可以说点群与空间群的对称性描述是我们在讨论固体和分子的结构、电子结构、振动谱等物理性质时不可或缺的科学语言。不懂这个，物质科学类（Physical Sciences）杂志上的很多文章对我们会读起来很困难。

点群最基本的特征是我们在进行对称操作的时候，操作对象至少有一个点保持不动。这种对称性在晶体、分子、准晶材料中都会出现。而空间群，是基于点群概念的。它描述的是晶体的对称性。因为这个原因，我们这一章的基础是点群。在点群中，我们不要求系统具有平移对称性。在讲完点群之后，我们会说，如果我们再加一个限制，也就是我面对的系统需要有平移对称性，那么这个时候，就不是所有的点群都可以在晶体中存在了。能在晶体中存在的只是其中的一部分。比如在分子中是允许五次轴，也就是绕一个轴转 $2\pi/5$ 角的对称操作存在的，但是在晶体中就不允许。这也就引出了晶体点群，它是点群的一部分。和晶体点群的概念对应，我们还有晶体点阵的概念。

同时，我们可以注意一下，在晶体出现的时候，它对点群这个加的只是一个限制，效果是使得很多非周期性体系中的对称性在晶体中不能存在。但是任何事物都有两面性，晶体的平移周期性结构对点群的对称操作加了这样一个限制，作为补偿，在其它的对称群描述中，晶体周期性结构对其中群元的要求就会有所放松。这个在空间群这个概念中可以详细体现。具体而言，就是在晶体中进行一定

角度的旋转后，做个晶格长度分数倍的平移，系统还可以回到与之前不可分辨的状态。这种操作对应某空间群元素，其对称元素是我们常说的螺旋轴。在不做这个旋转前，晶格长度分数倍的平移是不被晶体中原子的周期性排布允许的。同时，晶体在对一个平面进行反射后再做一个晶格长度分数倍的平移，也可回到与之前不可分辨的状态。这个对称操作的对称元素是我们常说的滑移面。这些操作因为不保持一个固定的点不变了，所以它不是点群操作，但它能够保持晶体的不变。为了描述这种转动与平移对称性的集合，我们引入空间群这个概念。由这个介绍大家可以暂时理解它是基于点群，但又跟点群不同。具体的细节我们会在后面花几节课的时间仔细讲。这里，先给大家做一个整体的介绍。

同时，如果你不满足于此讲义的内容，去看不同教材的话，你也应该会注意到大体而言人们会通过两个途径来引入点群的概念：

一、从点群的母体，三维实正交群 O(3)出发。这个 O(3)群是由转动、反演、以及它们的组合构成的，是一个无限群。这个后面我们会细讲。点群呢，是这个 O(3)群的有限子群；

二、从具体的多面体或分子出发，去讨论它们的对称性，总结归纳出一些共同点，再引入点群的概念。

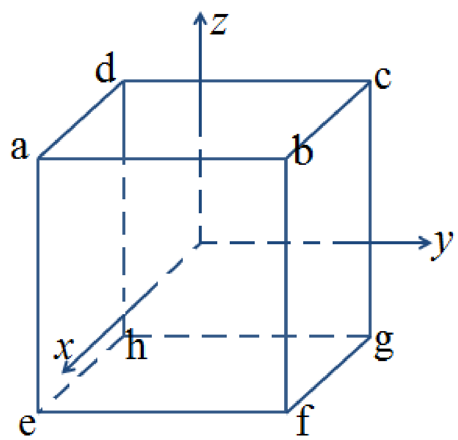
而比较有意思的是，如果你去看书的作者以及他/她们所采取的方式，你会发现作者的背景和他/她们采取的写作方式是存在一定关联的。一般来说，学物理出身的人倾向于使用前者，就是我把你的母体说明白了，再讲你，事情就很 trivial 了。韩老师与孙老师、马老师她/他们的教材采取的都是这个路子。而化学出身的，比如 Frank Albert Cotton，还有我们一些物理化学教材里面讲对称性的时候，就使用的是后者。当然，我只说有一定关联，也不排除例外。对我而言，

我觉得两个路子各有好处，前者严格、后者直观。这里我们倾向于使用一个折中，把三维实正交 O(3)群与点群合在一起，作为“点群基础”来讲。

这里点群是一种群，它对应的是一个实际系统在三维实空间中具有的对称性的集合，这些操作有个特征，就是进行操作的时候，三维空间中有一个点不动。这个实际系统可以有限大，比如分子、团簇，也可以无限大，比如晶体。

对点群的讨论可以从其中最重要的两个概念，对称操作（Symmetry Operation）与对称元素（Symmetry Element），开始。先看几个例子：

例1. 立方体，有八个顶点，a 到 h，中心是 O，x、y、z 轴分别过中心：



先看什么是对称操作？这里我们参考 Albert Cotton 书上 18 页给出的定义。

定义 3.1：A symmetry operation is a movement of a body such that, after the movement has been carried out, every point of the body is coincident with an equivalent point of the body in its original orientation. In other words, if we note the position and orientation of a body before and after a movement is carried out, that movement is a symmetry operation if these points and orientations are indistinguishable.

由这个定义，我们知道对称操作是一个 movement，是一个使物体到达与其原状态不可分辨的另一个状态的 movement。根据这个定义，我们看上面的立方体有多少个对称操作？

1. 沿立方体的四个对角线 ag、fd、hb、ce 进行 $2\pi/3$、$4\pi/3$ 转动的操作，这样的操作有 $4\times2=8$ 个;

2. 沿 x、y、z 轴转 $\pi/2$、π、$3\pi/2$ 的操作，这样的操作有 $3\times3=9$ 个;

3. 立方体有 12 个棱，两条相对的棱的中点连接起来，绕这个连线转动 π 角的操作，这样的操作有 $6\times1=6$ 个;

4. 再加上根本就不动这个操作，一共 $8+9+6+1=24$ 个纯转动操作。

在这里转动是对称操作，与每个转动相应，有个旋转轴，这个旋转轴，就是下面我们要讲得对称元素。同样，我们参考 Albert Cotton 书上的定义。

定义 3.2：A symmetry element is a geometrical entity such as a line, a plane, or a point, with respect to which one or more symmetry operations may be carried out.

由这个定义，我们知道对称元素是一个几何实体（geometrical entity），对称操作是相对于这个几何实体进行的，在上面的例子中，它就是旋转轴。当然，实际的对称元素不一定非得是旋转轴，也可以是反演中心、反射面、转动反演轴等等，这些我们以后会讲。它们的共同特点就是它们都是几何实体，对称操作都是相对它们进行的。

在上面讲的立方体的例子中，如果我们再加上反演操作 I，也就是把三维实空间中任意一个(x, y, z)的点变换到$(-x, -y, -z)$，这个反演操作对刚才的立方体实际上也是对称操作。这个 I 与刚才 24 个纯转动操作结合，就又可以给出 24 个新的对称操作。这样加在一起就有 48 个对称操作了。这 48 个对称操作的集合构成一个群，这个群就是这个立方体的对称群，我们记为 O_h，它是一个点群（因为对这 48 个操作，立方体中心那个点都不变）。

现在我们可以去想，如果我把这个立方体揉成一个球，那么这 48 个 O_h 群的

对称操作是否保持这个球不变？答案：保持，是吧？同时，我们需要指出的是对于这个球而言，它的对称操作远远不止这些。以后我们学到的所有点群的对称操作，对这个球都成立。换句话说，如果我们把所有保持这个球不变的对称操作放在一起，它们是形成一个群的。这个群是如此强大以至于任何的一个我们后面学到的点群，都是这个群的子群。在这里，我们把它称为点群的母体，它的名字叫三维实正交群，记为 O(3)。下面我们会花些时间来介绍一下这个 O(3)群。

但在讲这个 O(3)群之前，我们需要先介绍一下它里面的基本操作，就是三维实空间（R^3）中的正交变换。

这个三维实空间的一个性质是在定了一组正交归一基$\vec{i}$、$\vec{j}$、$\vec{k}$以后，其中的任意一个向量都可以写成下述列矩阵形式，比如：

$$\vec{r}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}、\vec{r}'=\begin{pmatrix}x_1'\\x_2'\\x_3'\end{pmatrix}$$

两个向量的内积为：

$$(\vec{r}\cdot\vec{r}')=\sum_{i=1}^{3}x_ix_i'$$

其中向量$\vec{r}$的长度为：

$$|\vec{r}|=(\vec{r}\cdot\vec{r})^{1/2}=\left(\sum_{i=1}^{3}x_ix_i\right)^{1/2}$$

而向量$\vec{r}$与$\vec{r}'$的夹角φ满足：

$$\cos\varphi=(\vec{r}\cdot\vec{r}')/(|\vec{r}||\vec{r}'|)$$

（这些都是 R^3 中向量的性质）

而 R^3 中的正交变换，是保持 R^3 中任意两个向量内积不变的变换，也就是说对$\forall\vec{r}$、$\vec{r}'\in R^3$，线性变换 O 要满足：

$$(O\vec{r}\cdot O\vec{r}')=(\vec{r}\cdot\vec{r}')$$

也就是：

$$O^tO = E$$

这里O^t是 O 的转置（实矩阵）。

这个时候，如果我们对比之前讲的酉变换，我们会发现酉变换的定义对应的是任意内积空间中的保内积变换。而这里，正交变换，则对应的是三维欧式空间这个实向量空间中的保内积变换，它是一种特殊的酉变换。

基于这样一个正交变换，我们可以引出三维实正交群 O(3)。

定义 3.3 由三维欧式空间中所有的正交变换构成的群，称为三维实正交群，记为 O(3)。

关于 O(3)群其中元素最重要的性质，我们可以由这个式子得到：

$$O^tO = E$$

由这个式子，我们知：

$$\det(O^tO) = \left(\det(O)\right)^2 = 1$$

从而$\det(O) = \pm 1$，也就是说正交变换为非奇异变换，其行列式为+1 或-1。

同时，由于

$$\det(O_1O_2) = \det(O_1)\det(O_2)$$

我们还知道 O(3)群中行列式为 1 的正交变换形成它的一个子群，因为 1 ×1=1。

并且由：

$$\det(O_2^{-1}O_1O_2) = \det(O_2^{-1})\det(O_1)\det(O_2) = \det(O_2^t)\det(O_1)\det(O_2) = \det(O_1)$$

可知 O(3)群的所有行列式为 1 的元素形成的子群还是一个不变子群。我们把它记为 SO(3)。具体定义如下。

定义 3.4 O(3)群的所有行列式为 1 的正交变换形成的不变子群称为 SO(3)群，记为：

$$SO(3) = \{O \in O(3) | \det(O) = 1\}$$

这个 SO(3)群的一个特征是其中任意的一个元素，作用到三维欧式空间的一组向量上，不光不改变它们之间的内积，还不改变这组向量的手性关系。比如我们的三维空间以$\vec{\mathrm{i}}$、$\vec{\mathrm{j}}$、$\vec{\mathrm{k}}$为基，在这组基下，我一个线性变换的矩阵形式是：

$$\mathrm{O}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

我现在说这个线性变换是一个 SO(3)群中的元素，那么有：det(O)=1。

我现在把它作用到三个向量$\vec{\mathrm{i}}$、$\vec{\mathrm{j}}$、$\vec{\mathrm{k}}$，它们相互关系是个右手系，有$\vec{\mathrm{i}}\cdot(\vec{\mathrm{j}}\times\vec{\mathrm{k}})=1$。现在把 O 作用到它们三个上面，有：

$$\mathrm{O}\vec{\mathrm{i}}\cdot(\mathrm{O}\vec{\mathrm{j}}\times\mathrm{O}\vec{\mathrm{k}})=\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{pmatrix}\cdot\left[\begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \end{pmatrix}\times\begin{pmatrix} a_{13} \\ a_{23} \\ a_{33} \end{pmatrix}\right]=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}=1$$

不改变手性关系。

同样，如果作用到$\vec{\mathrm{j}}$、$\vec{\mathrm{i}}$、$\vec{\mathrm{k}}$，它们的相互关系是左手系，有$\vec{\mathrm{j}}\cdot(\vec{\mathrm{i}}\times\vec{\mathrm{k}})=-1$。现在把 O 作用到它们上面，也有：

$$\mathrm{O}\vec{\mathrm{j}}\cdot(\mathrm{O}\vec{\mathrm{i}}\times\mathrm{O}\vec{\mathrm{k}})=\begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \end{pmatrix}\cdot\left[\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{pmatrix}\times\begin{pmatrix} a_{13} \\ a_{23} \\ a_{33} \end{pmatrix}\right]=\begin{vmatrix} a_{12} & a_{11} & a_{13} \\ a_{22} & a_{21} & a_{23} \\ a_{32} & a_{31} & a_{33} \end{vmatrix}=-1$$

同样不改变手性关系。

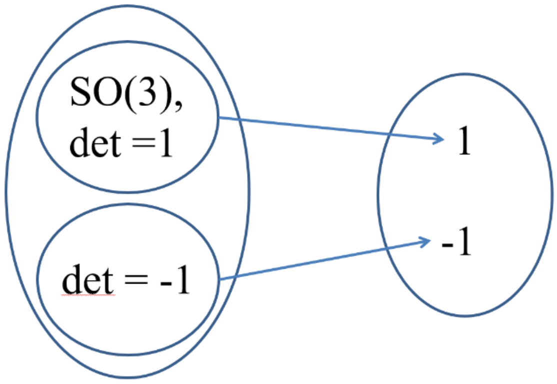
而在 O(3)群中，有一个空间反演操作，其矩阵形式为：

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

这个操作行列式等于-1，它也会改变三维实空间三个向量的手性关系。同时，这个反演操作与恒等操作 E 还可以构成一个空间反演群{E、I}，由于 E、I 都与 O(3)群中任意元素互易，它也是 O(3)群的不变子群。这个不变子群与二阶循环群$\left\{1、-1\right\}$同构。

这样的话，对 O(3)群而言，我们可以把其中行列式为1的部分取出来，就是

SO(3)群，作为一部分。而属于 O(3)，又不属于 SO(3)的元素作为另一部分，构成一个 O(3)群到二阶循环群的映射：



由于$\det(O_1O_2) = \det(O_1)\det(O_2)$，这个映射是个同态映射。

同时我们可以取 I 为行列式为-1元素的代表，把 O(3)群进行一个$SO(3) \cup I \cdot SO(3)$的分解。由于 E、I 与 O(3)群中任意元素互易，套用我们第一章讲的一个概念，这个 O(3)群就可以写成是$SO(3)$群与空间反演群{E、I}的直积。

到这个地方，O(3)群与 SO(3)群的定义我们就讲完了。简单的说，O(3)群是三维实空间中的保内积变换群，而 SO(3)群，是三维实空间的保内积、保手性变换群。下面我们介绍几个 SO(3)群的性质。

定理 3.1　对$\forall g \in SO(3)$，可在 R^3 中找到一个向量$\vec{k}$，使$g\vec{k} = \vec{k}$。

证明：

（说白了就是要证对$\forall g \in SO(3)$其对应的$(g-E)\vec{k} = 0$有非零解。因为这个东西有非零解，也就意味着存在向量$\vec{k}$，使$g\vec{k} = \vec{k}$。那么$(g-E)\vec{k} = 0$有非零解的充要条件是什么？答：$\det(g-E) = 0$。

这也就意味着现在要证的就是对$\forall g \in SO(3)$都有$\det(g-E) = 0$。怎么证呢？很简单，由 g 的定义（正交变换），有：

$$\det(g-E) = \det(g-E)^t = \det(g^t-E) = \det(g^{-1}-E)$$

（式 3.1）

而

$$g^{-1}-E=g^{-1}E(E-g)=g^{-1}(-E)(g-E)$$

代入式 3.1，会产生：

$$\det(g-E)=\det(g^{-1})\det(-E)\det(g-E)=1\cdot(-1)\cdot\det(g-E)$$

一个实数等于它的负，这个实数必为零。

（证毕）

由这个定理，我们还可以得到如下性质：

1. 在$g\vec{k}=\vec{k}$的解得到后，我们可以取它为$\vec{k}$，与之垂直的两个向量为$\vec{i}$、$\vec{j}$，在以这样的$\vec{i}$、$\vec{j}$、$\vec{k}$为基时，这个转动 g 表示为：

$$g(\Psi)=\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=C_{\vec{k}}(\Psi)$$

其中$\vec{k}$为转轴，Ψ为转角，取值范围是[0，π]，$\vec{k}$为向量，有个方位角θ、φ。θ是它与 z 轴的夹角，φ 是其 xy 平面投影与 x 轴的夹角（群表示部分的内容）。

2. 由于定理 3.1，SO(3)又称为转动群，它的所有变换的行列式都是 1，两个SO(3)群中元素g_1与g_2的乘积g_3由于行列式为1，也是一个纯转动，用$C_{\vec{k}}(\Psi)$的形式写出来就是：

$$C_{\vec{k}_1}(\Psi_1)C_{\vec{k}_2}(\Psi_2)=C_{\vec{k}_3}(\Psi_3)$$

$C_{\vec{k}_3}(\Psi_3)$也是绕某一轴（$\vec{k}_3$）的一个转动，$\vec{k}_3$、Ψ_3由$\vec{k}_1$、Ψ_1、$\vec{k}_2$、Ψ_2定，只不过关系不是看起来很直接罢了。

上面说到在一组基($\vec{i}$、$\vec{j}$、$\vec{k}$)下，转动$C_{\vec{k}}(\Psi)$的表示为$\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$这样一个简单的形式。在任意一组基($\vec{i}'$、$\vec{j}'$、$\vec{k}'$)下，$C_{\vec{k}}(\Psi)$的表示矩阵又会是什么样子？

换句话来说，如果在三维欧式空间中，我已经选择了一组基($\vec{i}'$、$\vec{j}'$、$\vec{k}'$)，你

现在在这个空间中任意找了一个轴$\vec{k}$，你绕它做了一个转动Ψ角的操作，然后你问我这个$C_{\vec{k}}(\Psi)$在$(\vec{i}'、\vec{j}'、\vec{k}')$下的表示矩阵是什么？这个问题的答案我们后面在关于点群的讨论中也会经常用到，现在花时间细说一下。

这里我们可以取$(\vec{i}'、\vec{j}'、\vec{k}')$为旧基，$(\vec{i}、\vec{j}、\vec{k})$为新基，旧基到新基的变换矩阵是 Q，$Q=\begin{pmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13}\\ a_{21} & a_{22} & a_{23}\\ a_{31} & a_{32} & a_{33}\end{pmatrix}$，那么这个变换形式就是：

$$\left(\vec{i}、\vec{j}、\vec{k}\right)=\left(\vec{i}'、\vec{j}'、\vec{k}'\right)\begin{pmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13}\\ a_{21} & a_{22} & a_{23}\\ a_{31} & a_{32} & a_{33}\end{pmatrix}$$

这里 Q 为实正交变换，$Q^{-1}=Q^{t}$。

空间有个矢量$\vec{r}$，它在$C_{\vec{k}}(\Psi)$作用下，变为$\vec{r}'$。在坐标系$(\vec{i}、\vec{j}、\vec{k})$下，这个变换表现为：

$$\left(\vec{i}、\vec{j}、\vec{k}\right)\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}$$

其中$\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}$为$\vec{r}$在$(\vec{i}、\vec{j}、\vec{k})$下的坐标。

在坐标系$\left(\vec{i}'、\vec{j}'、\vec{k}'\right)$下，这个变换表示为：

$$\left(\vec{i}'、\vec{j}'、\vec{k}'\right)A\begin{pmatrix}x_1'\\ x_2'\\ x_3'\end{pmatrix}$$

其中$\begin{pmatrix}x_1'\\ x_2'\\ x_3'\end{pmatrix}$是$\vec{r}$在$\left(\vec{i}'、\vec{j}'、\vec{k}'\right)$下的坐标，A 是我们想求的$C_{\vec{k}}(\Psi)$在$\left(\vec{i}'、\vec{j}'、\vec{k}'\right)$下的表示矩阵。

现在问题清楚了，就是要用已知条件，求 A 的形式？

这个时候，我们用的第一个条件就是$\vec{r}'$这个矢量不管是在$(\vec{i}、\vec{j}、\vec{k})$下，还是在$\left(\vec{i}'、\vec{j}'、\vec{k}'\right)$，它是同一个矢量，所以：

$$\left(\vec{\mathrm{i}}、\vec{\mathrm{j}}、\vec{\mathrm{k}}\right)\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\left(\vec{\mathrm{i}}'、\vec{\mathrm{j}}'、\vec{\mathrm{k}}'\right)A\begin{pmatrix}x_1'\\ x_2'\\ x_3'\end{pmatrix}$$

（式 3.2）

同理，$\vec{\mathrm{r}}$也是同一个矢量，所以：

$$\left(\vec{\mathrm{i}}、\vec{\mathrm{j}}、\vec{\mathrm{k}}\right)\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\left(\vec{\mathrm{i}}'、\vec{\mathrm{j}}'、\vec{\mathrm{k}}'\right)\begin{pmatrix}x_1'\\ x_2'\\ x_3'\end{pmatrix}$$

（式 3.3）

那么现在我们要做的事情就是从式 3.2 与 3.3 求 A。这个时候，由：

$$\left(\vec{\mathrm{i}}、\vec{\mathrm{j}}、\vec{\mathrm{k}}\right)=\left(\vec{\mathrm{i}}'、\vec{\mathrm{j}}'、\vec{\mathrm{k}}'\right)Q$$

代入 3.3 我们知道，得：

$$Q\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x_1'\\ x_2'\\ x_3'\end{pmatrix}$$

这个式子，代入 3.2，进一步有：

$$\left(\vec{\mathrm{i}}、\vec{\mathrm{j}}、\vec{\mathrm{k}}\right)\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\left(\vec{\mathrm{i}}'、\vec{\mathrm{j}}'、\vec{\mathrm{k}}'\right)AQ\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}$$

由于这个式子对任意$\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}$成立，所以有：

$$\left(\vec{\mathrm{i}}、\vec{\mathrm{j}}、\vec{\mathrm{k}}\right)\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\left(\vec{\mathrm{i}}'、\vec{\mathrm{j}}'、\vec{\mathrm{k}}'\right)AQ$$

再把$\left(\vec{\mathrm{i}}、\vec{\mathrm{j}}、\vec{\mathrm{k}}\right)=\left(\vec{\mathrm{i}}'、\vec{\mathrm{j}}'、\vec{\mathrm{k}}'\right)(Q)$继续代入，有：

$$\left(\vec{\mathrm{i}}'、\vec{\mathrm{j}}'、\vec{\mathrm{k}}'\right)Q\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\left(\vec{\mathrm{i}}'、\vec{\mathrm{j}}'、\vec{\mathrm{k}}'\right)AQ$$

两个向量相等，它们的所有分量都要相等，所以：

$$Q\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=AQ$$

进而：

$$A=Q\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}Q^{-1}$$

这个说明什么？这个说明在三维欧式空间中，如果你事先选定了一组基的话，那么绕空间任意一个轴转Ψ的操作，都可以写成：

$$Q\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}Q^{-1}$$

的形式。

这里，$\begin{pmatrix}\cos\Psi & -\sin\Psi & 0\\ \sin\Psi & \cos\Psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$是这个转动在以$\vec{k}$为 z 轴，以与它垂直的两个单位向量$\vec{i}$、$\vec{j}$为 x、y 轴的坐标系下的表示矩阵。Q 是这三个向量在原来选定的坐标系下的展开，即：$\left(\vec{i}、\vec{j}、\vec{k}\right)=\left(\vec{i}'、\vec{j}'、\vec{k}'\right)Q$。

由于相似变换并不改变矩阵的迹，所以$\mathrm{tr}\left(QC_{\vec{k}}(\Psi)Q^{-1}\right)=\mathrm{tr}\left(C_{\vec{k}}(\Psi)\right)=1+2\cos\Psi$。也就是说绕任何一个轴，转动Ψ角的转动，它的迹都是$1+2\cos\Psi$，转动轴的选取，只影响转动的矩阵表达形式，不影响它的迹。

除了转动的迹只与转角有关，下面两段话的分析对我们以后点群分类也特别重要：

1. 这里我们直接用$C_{\vec{k}}(\Psi)$代表绕$\vec{k}$轴的转动，因此，$C_{\vec{k}}(\Psi)$满足$C_{\vec{k}}(\Psi)\vec{k}=\vec{k}$。取 SO(3) 群中任意元素$g'$，作用到这个等式上，有$g'C_{\vec{k}}(\Psi)\vec{k}=g'\vec{k}$，进而$g'C_{\vec{k}}(\Psi)g'^{-1}g'\vec{k}=g'\vec{k}$，也就是说$g'C_{\vec{k}}(\Psi)g'^{-1}$代表的是在$\left(\vec{i}、\vec{j}、\vec{k}\right)$下绕$g'\vec{k}$轴转动Ψ角的操作。这里$g'$为 SO(3)群中任意元素，因此$g'\vec{k}$可以是空间任意指向，这也就是说 SO(3)群中绕空间任意轴转动相同转角的操作都同类。
2. 把这个性质展开：对点群而言，转动相同转角的操作是否同类？答案是不一定，因为上面的推导是针对 SO(3)群的，要求g'属于 SO(3)群。点群是 SO(3)群有限子群。其中可能会有两个转动转角相同，但我这个点群中没有任何一

个操作，可以把这两个转动的转轴联系起来，这样，就不能从$C_{\vec{k}}(\Psi)\vec{k}=\vec{k}$推到$g'C_{\vec{k}}(\Psi)g'^{-1}g'\vec{k}=g'\vec{k}$了。因为没有一个点群中元素$g'$，使得这两个轴一个为$\vec{k}$，一个为$g'\vec{k}$。

这些讨论总结一下就是：SO(3)群中所有转动相同转角的元素都同类，但点群中不一定，要看有没有一个点群中元素将他们的转动轴联系起来？

这些讨论同时还告诉我们 SO(3)群可以写成$\{C_{\vec{k}}(\Psi)\}$，其中$\vec{k}$取遍过原点 O 的所有轴，Ψ取遍$[0，\pi]$。前面我们还说过，O(3)可以写成 SO(3)⊗{E、I}。因此，O(3)也可以写成$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)、I\,C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$。

对其中任意一个元素$C_{\vec{k}}(\Psi)$，对其进行共轭操作，情况有两种：

1. $C_{\vec{k}'}(\Psi')C_{\vec{k}}(\Psi)C_{\vec{k}'}(\Psi')^{-1}$，
2. $IC_{\vec{k}'}(\Psi')C_{\vec{k}}(\Psi)\left(IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right)^{-1}=C_{\vec{k}'}(\Psi')C_{\vec{k}}(\Psi)C_{\vec{k}'}(\Psi')^{-1}$。

也就是不管怎么说，同类操作都是绕某一轴转动相同角度的纯转动操作。

而对其中任意一个转动反演操作 $IC_{\vec{k}}(\Psi)$，也具有同样地性质。因此，在 O(3)群中，所有转动相同转角的纯转动操作为一类，所有转动相同转角的转动反演操作为一类。

现在我们是讲完了点群的母体，O(3)群的所有性质。开始看点群，先看概念。

定义 3.5（点群）三点：

1. 点群是三维实正交群 O(3)群的有限子群；
2. 如果点群只包含转动元素，它是 SO(3)群的有限子群，称为第一类点群；
3. 如果点群还包含转动反演元素，称为第二类点群。

关于点群，有个重要的性质。

定理 3.2，设群 G 是绕固定轴$\vec{k}$转动生成的 n 阶群，则 G 由元素$C_{\vec{k}}(2\pi/n)$生成。

证明：

由群 G 是绕$\vec{k}$转动生成的 n 阶群，知 G 中只有 n 个元素，且都是绕$\vec{k}$轴转动，我们可以记为$C_{\vec{k}}(\theta_i)$，i 为从 0 到 n−1。

我们选$\theta_0 = 0$，对应单位元素，θ_1是非零转动中的最小转角。其它θ_i可以写成$\theta_i = m_i\theta_1 + \varphi_i$的形式。其中$0 \le \varphi_i < \theta_1$，$m_i$为正整数。

既然有这个关系，我们就知道：

$$\left[C_{\vec{k}}(\theta_1)\right]^{-m_i} C_{\vec{k}}(\theta_i) = C_{\vec{k}}(\varphi_i) \in G$$

前面说过，θ_1是非零转动中的最小转角，所以φ_i必都为零。也就是说所有转角都可以写成$m_i\theta_1$的样子了。在θ_0对应单位操作，之后依次取 n-1 个m_i，这样就有 n 个转动操作了。第 n+1 个与单位操作重复，所以就有$n\theta_1 = 2\pi$，进而$\theta_1 = 2\pi/n$，这个转动群由$C_{\vec{k}}(2\pi/n)$生成。

（证毕）

到这儿，我们知道了一个点群其中元素必可写为$\left\{C_{\vec{k}}(2\pi/n)、I\,C_{\vec{k}'}(2\pi/n')\right\}$的形式。其中$\vec{k}$、n、$\vec{k}'$、$n'$有多种选择。对于$C_{\vec{k}}(2\pi/n)$、$I\,C_{\vec{k}'}(2\pi/n')$这些操作，它们的对称元素有几种情况，后面关于点群讨论的时候经常用到，这里说一下：

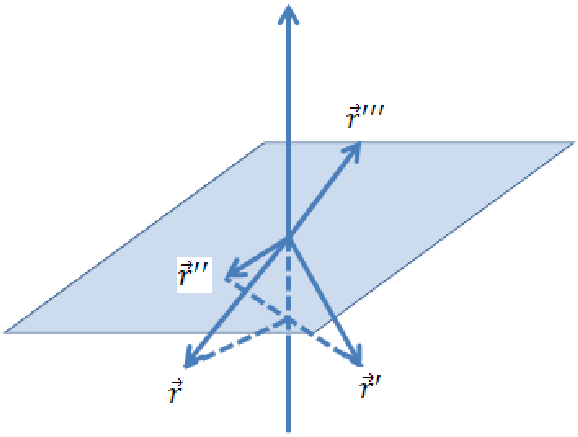
1. $IC_{\vec{k}}(2\pi/n)$中n取 1，这时对应的是 I，中心反演操作，对称元素为反演中心；
2. $IC_{\vec{k}}(2\pi/n)$中n取 2，对应操作为 $IC_{\vec{k}}(\pi)$。这个操作干的事情是绕$\vec{k}$轴转动π，再对原点作反演。以$\left(\vec{i}、\vec{j}、\vec{k}\right)$为坐标轴的话，这个操作干的事情就是先把$\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$变到$\begin{pmatrix}-x\\-y\\z\end{pmatrix}$，再把$\begin{pmatrix}-x\\-y\\z\end{pmatrix}$变到$\begin{pmatrix}x\\y\\-z\end{pmatrix}$，最终使$\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$与$\begin{pmatrix}x\\y\\-z\end{pmatrix}$等价。这里，我们可以说对称元素是过原点，与$\vec{k}$垂直的反射面；
3. $C_{\vec{k}}(2\pi/n)$普遍情况，对称元素就是转动轴；

4. $IC_{\vec{k}}(2\pi/n)$普遍情况，对称元素就是转动反演轴。

需要说明的是对于有些教材，他们可能不喜欢用转动反演轴来讲东西，而喜欢利用一个叫转动反射面的东西，记为$S_{\vec{k}}(2\pi/n)$，指的是绕$\vec{k}$轴作个转动$2\pi/n$，再对与$\vec{k}$轴垂直的镜面作反射，也就是$\sigma_{\vec{k}}C_{\vec{k}}(2\pi/n)$。它与转动反演的关系是：

$$\sigma_{\vec{k}}C_{\vec{k}}(2\pi/n) = IC_{\vec{k}}\left(\frac{2\pi}{n} + \pi\right)$$

（这个关系需要画图说明）



到这里，我们是把点群的一些最基本的特性给说清楚了。简单的说就是点群是一个由$\left\{C_{\vec{k}}(2\pi/n)、I\,C_{\vec{k}'}(2\pi/n')\right\}$形成的对称操作的集合，这里$\vec{k}$、n、$\vec{k}'$、$n'$有有限个取值。我们之前说过，群本身是有很强的结构特征的，当我们说一个集合形成群时，看似简单的几句话，其实都为它们之间的相互关系留下了伏笔。这个大家在第一章应该有体会。同态，看似简单，但蕴藏着同态核定理。在这里其实也是，我们说$\vec{k}$、n、$\vec{k}'$、n'取有限个取值的$\left\{C_{\vec{k}}(2\pi/n)、I\,C_{\vec{k}'}(2\pi/n')\right\}$这样的一个集合的时候，这个$\left\{C_{\vec{k}}(2\pi/n)、I\,C_{\vec{k}'}(2\pi/n')\right\}$本身是不是也要符合什么规律呢？

答案是肯定的。这个规律是我们这一章的定理 3.3。

定理 3.3 设 G 是点群，K 是 G 的纯转动部分，由于纯转动部分的乘积以及逆元必属于这个纯转动部分，所以 K 也是 G 的纯转动子群，也就是说 $K = G \cap SO(3)$。这个时候，关于 G 与 K 的关系，存在三种可能：

1. G = K，这个时候 G 是 SO(3)的有限子群，这样的点群称为第一类点群，它只包含纯转动操作；
2. 当 G 不只包含纯转动操作时，如果 G 中包含纯反演操作 I，那么 G 与 K 的关系必然是 $G = K \cup IK$;
3. 当 G 不只包含纯转动操作，且 G 中不包含纯反演操作 I 时，G 必与一个纯转动群G^{+}同构，这里$G^{+} = K \cup K^{+}$，而K^{+}的定义是：$K^{+} = \{Ig|g \in G，但\ g \notin K\}$。

这三个性质，说出了所有点群的情况！大家一定要好好理解。其中第一个性质不需要证明，很直白，就是有一类点群只包含纯转动操作。第二、第三个性质是需要我们证明的。

证明之前我先问一下大家我们知道这个定理有什么用？一句话：如果这个定理成立，那么我们了解了所有第一类点群，也就很自然地了解所有点群了。

证明：

G 不是纯转动元素集合时的情况，$G = \left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}，\left\{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\} = \{K，IK^{+}\}$。

这个时候，如果 I 属于 G，那么由于重排定理 IG 应该也等于 G，这样的话 G 这个集合就要写成$\{IK，K^{+}\}$，它要与$\{K，IK^{+}\}$相同，这就要求$K^{+} = K$。这也就是我们说的第二种情况。

当 I 不属于 G 时，由上面 $G = \left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}，\left\{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\}$的形式，我们是可以构造一个集合$G^{+} = \left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}，\left\{C_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\}$的。这个集合与 G 存在一一对应的关系是显然的。那么下面我们只需要证明G^{+}是一个群，且保持乘法规则不变，就可以了。

先看$G^{+} = \left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}，\left\{C_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\}$是不是一个群，由$G = \left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}，\left\{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\}$是一个群出发。

封闭性：由 $G = \left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}，\left\{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\}$是一个群，知两个$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$中元素相乘，结

果属于$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$；两个$\left\{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}$中元素相乘，结果属于$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$；而一个$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$中元素与一个$\left\{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}$中元素相乘，结果属于$\left\{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}$。

因此对应$G^+ = \left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}, \left\{C_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\}$中元素。两个$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$中元素相乘，结果属于$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$；两个$\left\{C_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}$中元素相乘，结果属于$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$；而一个$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$中元素与一个$\left\{C_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}$中元素相乘，结果属于$\left\{C_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}$。

故$\left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}, \left\{C_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\}$封闭。

单位元素，在$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$中。

逆元，由 G 是群知对任意$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$中元素其逆属于这个集合，任意$\left\{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}$中元素，其逆也属于这个集合。与此对应，$G^+$中，任意$\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}$中元素，其逆属于这个集合，任意$\left\{C_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}$中元素，其逆也属于这个集合。这条也成立。

结合律，由 G 是群且 I 与任意其中元素互易得到。

因此G^+是一个群且与 G 一一对应。

而乘法规则呢？我们可以对比$\left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}, \left\{C_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\}$与$\left\{\left\{C_{\vec{k}}(\Psi)\right\}, \left\{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\right\}\right\}$，由 I 与其中任意元素互易得到。

这个时候我们再提一句之前提到的讲这个定理的初衷，也就是说明当我知道了所有的第一类点群之后，我们很自然的可以通过这个定理的第二、第三条去构造所有的第二类点群。

（证毕）

到这儿，我们点群基础这一节就讲完了，我们讲地比较细，内容看似很多，不过总结起来，就是下面几句：

1. O(3)群是三维欧式空间中的实正交变换群，包含转动群 SO(3)与转动反演部分 I·SO(3)；

2. SO(3)群中，如果两个转轴可以由一个转动 g 联系起来，也就是说一个轴是$\vec{k}$，一个轴是$g\vec{k}$，则由$C_{\vec{k}}(\Psi)\vec{k} = \vec{k}$可知$gC_{\vec{k}}(\Psi)g^{-1}g\vec{k} = g\vec{k}$。也就是说$gC_{\vec{k}}(\Psi)g^{-1}$代表的是绕$g\vec{k}$轴转动$\Psi$角的操作。这也就意味着 SO(3)群中所有转动相同转角的操作，实际上是同类的；
3. 与之相似，I·SO(3)中具有相同转角的转动反演操作也彼此同类；
4. 点群是 O(3)群的有限子群，可以用$\left\{\{C_{\vec{k}}(\Psi)\}, \{IC_{\vec{k}'}(\Psi')\}\right\}$的方式来分析，其中$\vec{k}$、$\Psi$、$\vec{k}'$、$\Psi'$具有有限个取值；
5. $\vec{k}$、$\vec{k}'$为整数阶轴；
6. 点群中对称元素包括：转动轴、转动反演轴、反演中心、反射面，其中后两者是前两者的特殊情况；
7. 最后是定理 3.3，就是点群的三种情况。这三种情况意味着我们只要把第一类点群分析清楚，依据这个定理，就可以把所有点群分析清楚了。

3.2 第一类点群

这一节，说白了，就是利用我们第一节给出的点群的基本知识，结合第一章里面的群的基本理论，对第一类点群进行一个系统地研究。假设一个第一类点群是 G，它有转动轴C_{n_1}、C_{n_2}、…、C_{n_i}、…，其中n_i为大于等于 2 的整数，也就是说C_{n_i}代表的是不同轴，n_i是代表它几次。这个时候我们可以去想，对于C_{n_i}这个轴来讲，它会对我这个纯转动群贡献几个非恒等的转动操作？答案：$n_i - 1$。这个是我目前知道的关于群 G 与其转动轴的信息。现在我们要从这个信息里面去推出群 G 有多少个元素。怎么推?

这里一个很有用的工具就是球形图。它是以原点为中心，以任意一个正数 r 为半径的球面，记为S_r。点群 G 中元素的作用，就是把这个S_r，转到一个和它等

价的构型。对 G 中的n_i阶轴C_{n_i}来说，它与S_r有两个交点，我们把这两个交点记为$\vec{r_i}$与$-\vec{r_i}$。这两个矢量在C_{n_i}、$C_{n_i}^2$、…、$C_{n_i}^{n_i-1}$这些非恒等操作下，是不变的。称为这些操作的极点。

那么，对于$\vec{r}_i$与$-\vec{r}_i$，群{E、C_{n_i}、$C_{n_i}^2$、…、$C_{n_i}^{n_i-1}$}是不是群 G 对它们的迷向子群？（第一章中的概念，对于一个变换群 G，变换对象为 X，其中有一点 x，如果群 G 有个子群G^x作用到 x 上，还是得到 x，那么G^x是 G 对 x 的迷向子群）

除了迷向子群，第一章变换群那一节我们还有一个概念要用到，就是$\vec{r}_i$的 G 轨道。说的是取任意 g 属于 G，让 g 作用到$\vec{r}_i$上，当 g 走遍 G 中元素的时候，$\vec{r}_i$就会走遍所有与它等价的点，这些点的集合就是 G 对$\vec{r}_i$的 G 轨道。

迷向子群与 G 轨道这两个概念说了，它们之间有什么联系呢？我们在第一章，有个定理 1.9，说的是$\vec{r}_i$的 G 轨道上点的个数可以由群 G 的阶 n 与迷向子群的阶n_i通过 n/n_i求出。

那么在这里，这样一个信息能告诉我什么样的事情呢？那就是通过这个关系，我们知道对任意一个n_i阶轴C_{n_i}的极点$\vec{r}_i$而言，它会有 n/n_i个与它等价的n_i阶轴的极点。这些极点的集合我们称为一个极点的 G 轨道。这个轨道上每个点能贡献(n_i-1)个非恒等操作，一共有 n/n_i个点，那么这个轨道可以贡献的群 G 中非恒等变换的个数就是：

$$\frac{n}{n_i}(n_i-1)$$

这个要搞清楚。

然后呢，我们把球面上可以由对称变换联系起来的所有的极点都归纳为一个 G 轨道，不能由对称变换联系起来的极点归为不同 G 轨道，同一个 G 轨道上的极点所对应的轴的阶数是必须相等的（因为一个轴不可能即使 3 次轴，又是 4 次，

诸如此类)，这样就可以把极点按照 G 轨道分类了吧？我们假设一共有 l 条 G 轨道。

那么这些极点的集合，能够贡献的群 G 中非恒等变换的个数按照上面的逻辑是不是就是：$\sum_{i=1}^{l}\frac{n}{n_i}(n_i-1)$?

但在这个逻辑中，需要指出的是我们还有一个漏洞，就是$\vec{r}_i$与$-\vec{r}_i$给出的非恒等操作是重复的，对吧？这种重复可能以两种方式出现:

1. 我们在算 l 的时候，也就是极点的 G 轨道个数的时候，如果$\vec{r}_i$与$-\vec{r}_i$不在一个 G 轨道上的时候，那么在上面的加和式子中，i 从 1 到 l，就会有两个不同的 i，给出的非对称操作其实是一样的，这是不是以为着在上面的加和式子中，我们应该除个 2?
2. 第二种情况，当$\vec{r}_i$与$-\vec{r}_i$在同一个 G 轨道上的时候，意味着什么？意味着并不是所有这个 G 轨道上的极点，给出的都是不同的非恒等变换。比如$\vec{r}_i$与$-\vec{r}_i$都在这个 G 轨道上，它们给出的非恒等变换就是重复的。同样$g\vec{r}_i$与$-g\vec{r}_i$也是，它们给出的非恒等操作也重复了。这时，对于$\frac{n}{n_i}(n_i-1)$，我们是不是也应该除上一个 2?

两者综合一下，那就是对

$$\sum_{i=1}^{l}\frac{n}{n_i}(n_i-1)$$

这个 2 是必须除的。要么，是在 i 从 1 到 l 的时候算重了，要么是$\frac{n}{n_i}(n_i-1)$这部分本身就应该是$\frac{n}{2n_i}(n_i-1)$。综合起来，我们得到的是群 G 中非恒等操作的个数就是:

$$\sum_{i=1}^{l}\frac{n}{2n_i}(n_i-1)$$

这个是由上面对极点 G 轨道顶点的分析得到的 G 中非恒等操作的个数，与此同时，对这样一个纯转动群，它是 n 阶的，那么它里面非恒等操作的个数本身就应该是$(n-1)$。两者做一个结合，对这些有限次轴阶数n_i以及极点 G 轨道个数 l 的约束就可以通过下面这个式子反映出来了：

$$\sum_{i=1}^{l}\frac{n}{2n_i}(n_i-1)=n-1$$

这个式子等价于：

$$\sum_{i=1}^{l}(1-\frac{1}{n_i})=2(1-\frac{1}{n})$$

（式 3.4）

在这里，我们要注意的一个基本关系就是 n 要大于等于n_i，而n_i要大于等于 2。也就是$1/2 \geq 1/n_i \geq 1/n$。这个方程称为第一类点群的基本方程。它是我们这节课的重点，下面，我们会从它出发，去分析一共会有哪些第一类点群出现？

这里 l 是正整数，也就是 1、2、3 等等。但需要说明的是当 l 等于 1 的时候，上面这个式子能不能成立？答案是不能，因为左边是：$(1-\frac{1}{n_i})$，小于 1，右边是$2-\frac{2}{n}$，大于 1，两边不可能相等。

与此同时，当 l 大于等于 4 的时候，又会发生什么情况？这个时候，左边是大于等于$4-\sum_{i=1}^{4}\frac{1}{n_i}$的，而$\sum_{i=1}^{4}\frac{1}{n_i}$要小于等于 2，所以左边是大于等于 2。而右边，$2-\frac{2}{n}$肯定小于 2。一个大于等于 2 的数与一个小于 2 的数是肯定不可能相等的。所以 l 也不可能大于等于 4。

综合上面的讨论，l 只能是 2，或者 3。下面，我们会用穷举的方式把上面那个基本方程的所有解都求出来。

1. l=2，我们把n_i按从小到大的顺序排。这样的话上面那个基本方程就变成了：

$$\sum_{i=1}^{2}(1-\frac{1}{n_i})=2(1-\frac{1}{n})$$

也就是：

$$2-\frac{1}{n_1}-\frac{1}{n_2}=2-\frac{2}{n}$$

进而：

$$\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}=\frac{2}{n}$$

由于$n_1 \le n_2 \le n$，所以这种情况只能有一个解：$n_1 = n_2 = n$。

这时对应的实际情况，就是我有一个 n 阶轴，它把我的球面戳了两个大洞。

由于没有其它的对称操作把这两个洞给联系起来，所以它们表现为两个 G 轨道。实际上它们对应的是一个对称轴。

2. l=3，这样的话基本方程就变成了：

$$3-\frac{1}{n_1}-\frac{1}{n_2}-\frac{1}{n_3}=2-\frac{2}{n}$$

进而：

$$\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}+\frac{1}{n_3}=1+\frac{2}{n}$$

式 3.5

由于$n_1 \le n_2 \le n_3 \le n$，所以

$$\frac{1}{n_1}\ge\frac{1}{n_2}\ge\frac{1}{n_3}\ge\frac{1}{n}$$

当$n_1 \ge 3$时，式 3.5 的左边小于 1，右边大于 1，不成立。这也就是说n_1只能为 2。这时，式 3.5 可化为：

$$\frac{1}{2}+\frac{1}{n_2}+\frac{1}{n_3}=1+\frac{2}{n}$$

式 3.6

而n_2如果大于等于 4，那么上式左边小于 1，右边大于 1，又不成立。所以现在的情况是$l = 3$、$n_1 = 2$、n_2等于 2 或者 3。

当n_2等于 2 时，式 3.6 变为：

$$\frac{1}{n_3}=\frac{2}{n}$$

也就是说$n=2n_3$，这里 n 等于 4、6、8 等等都可以。这是第二个解。

3. $l=3$、$n_1=2$、$n_2=3$，这时基本方程变成了：

$$\frac{1}{2}+\frac{1}{3}+\frac{1}{n_3}=1+\frac{2}{n}$$

进而：

$$\frac{1}{n_3}=\frac{1}{6}+\frac{2}{n}$$

式 3.7

这时如果$n_3=3$，则 n=12。解为：$l=3$、$n_1=2$、$n_2=3$、$n_3=3$、n=12。

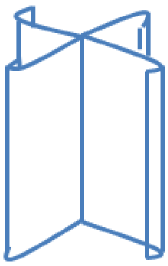
4. $l=3$、$n_1=2$、$n_2=3$、$n_3=4$，这时 n=24，第 4 个解。

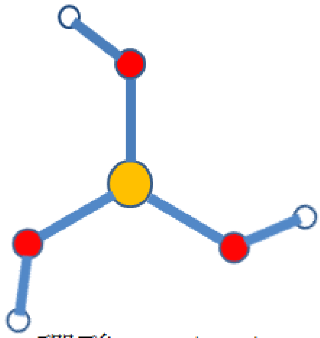
5. $l=3$、$n_1=2$、$n_2=3$、$n_3=5$，这时 n=60，第 5 个解。

之后如果$n_3\geq 6$，式 3.7 的左边小于等于 1/6，右边大于等于 1/6，又不相等了。所以只有以上五种解。上面我们是从点群基本方程出发，讨论了它存在的五种解的可能，下面我们仔细看一下它们分别对应什么实际情况。

1. $n_1=n_2=n$。这个上面说过，就是一个 n 阶轴，将球戳了两个洞。由于这两个洞没法通过其它对称操作联系起来，所以它们是两个极点的 G 轨道。这样的群称为 C_n 群。

例子：





硼酸：$B(OH)_3$

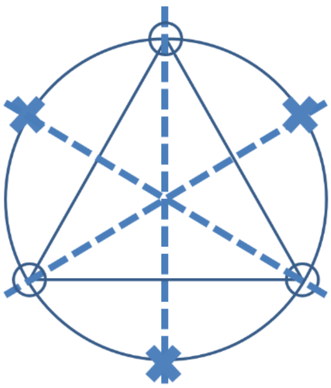
这样的群是 Abel 群，每个群元是一类，一共有 n 个类。

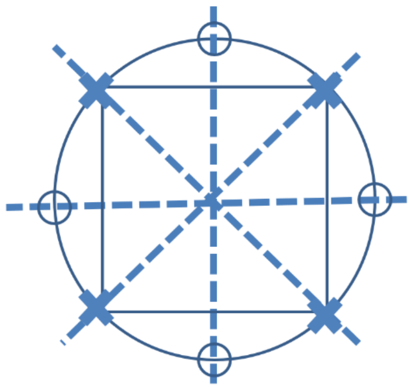
2. $l=3$、$n_1=2$、$n_2=2$、$n_3=m$、$n=2m$，$m=2$、3、4、…

全部极点分成三个轨道，第一个与第二个轨道上各有$\frac{2m}{2}=m$个极点。它们是 m 个二阶轴与球面的交点。第三个轨道上有$\frac{2m}{m}=2$个极点，它们是一个 m 阶轴与球面的两个交点，这两个交点在一个 G 轨道上。

由于这两个 m 阶轴的极点在同一个 G 轨道上，说明必有一个二阶轴与这个 m 阶轴垂直，而反过来，这个 m 阶轴又可以将这个二阶轴转到 m 个与之等价的位置。

这样的群我们称为二面体群，比如我们总用到的 D_3 群，还有 D_4 群：





这个其实是非常好的两个例子，来说明我们在引入第一类点群基本方程时，通过极点 G 轨道上点的个数求群中非恒等操作群元个数的时候，为什么在

$$\sum_{i=1}^{l}\frac{n}{2n_i}(n_i-1)$$

这个表示式中必须有 1/2 这个因子?

这里$n_1=2$、$n_2=2$，对 D_3 群来说，每个二阶轴与球面的两个交点不在一个 G 轨道上，所以在算极点 G 轨道个数也就是 l 的时候，是有 double counting 的。也就是说在这里n_1与n_2对应的操作，本身就是同样的操作，我在对 G 轨道进行加和的时候，把n_1与n_2都算了，所以理所当然的要在最后除上一个 2。

而对 D_4 群来说，我一个二阶轴与球面的两个交点$\vec{r}_i$与$-\vec{r}_i$在同一 G 轨道上，所以在对轨道个数进行加和的时候没有 double counting。但是，我在算一个轨道上的极点$\vec{r}_i$等价点的个数的时候，是不是把$-\vec{r}_i$也算进来了？这时，double counting 还是存在的，它发生在我算一个 G 轨道内等价极点的个数的时候。

两者结合起来，还是那两句话:

1. 当$\vec{r}_i$与$-\vec{r}_i$不在一个 G 轨道的时候，double counting 是发生在我们对 l 的统计中;
2. 当$\vec{r}_i$与$-\vec{r}_i$在一个 G 轨道的时候，double counting 是发生在计算$\vec{r}_i$的 G 轨道上的等价点对群本身非恒等操作的贡献上。

不管怎样，double counting 总是存在的。

现在我们知道了第一类点群基本方程的第二个解对应的是二面体群 D_n 的情况。下面我们来看它是怎么分类的。我们的基本思路还是：两个具有相同转角的转动，如果其转轴可以通过群中另外一个元素联系起来，则它们同类。由于这个原因，我们很容易知道对于上面 D_3 与 D_4，它们的分类情况就会不一样。

对于 D_3，是不是它的所有二阶轴都可以通过绕 3 次轴的转动联系起来，而对

于 D_4，它的二阶轴必须分为两类。与此同时，对于 D_3 这种奇数次的二面体群，它绕 n 阶轴的非恒等转动中，C_n^k与C_n^{n-k}同类，这里 k 的取值有$(n-1)/2$个。n=3 时为 1，n=5 时为 2。这样这种 D_n 群的总的类的个数就是 1+(n−1)/2+1=$(n+3)/2$个。这里第一个 1 是恒等变换，第二个$(n-1)/2$是绕 n 次轴的非恒等操作，最后一个 1 对应所有 2 次轴。

而对于 D_4 这种偶数次的二面体群，它绕 n 阶轴的非恒等转动中，C_n^k与C_n^{n-k}同类，这里 k 的取值有$(n-2)/2$个。同时恒等操作是一类，转π角的操作是一类。同时 2 次转动分为两类，所以总的类数是：$1+\frac{n-2}{2}+1+2=\frac{n}{2}+3$个。

除了 C_n 与 D_n，下面的三种情况是：

3. $l=3$（有三个极点轨道），n=12（群里有 12 个对称操作）

$n_1=2$、$n_2=3$、$n_3=3$

第一个极点轨道是二阶轴的，一共有 6 个点；

第二个极点轨道是三阶轴的，一共有 4 个点；

第三个极点轨道也是三阶轴的，一共也有 4 个点。

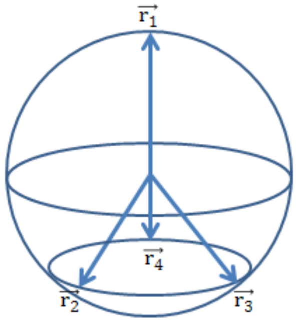
怎么去理解这个群呢？我们可以从其中最高阶轴的极点出发（后面的讨论也是同样的路子，因为高阶轴极点少，好在三维空间中构建图像）。

假设$\vec{r}_1$、$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$是第二个极点轨道上的四个极点，G 中的任意一个元素，作用到这四个极点上，得到的集合还是这四个极点。

取$\vec{r}_1$对应的三次转动C_3，它作用到$\vec{r}_1$上得到的还是$\vec{r}_1$。但它作用到其它三个极点上，得到的$C_3\vec{r}_2$、$C_3\vec{r}_3$、$C_3\vec{r}_4$是不是就要落到$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$这个集合上？一定不能产生新的点，不然这个 G 轨道上就不止四个点了。

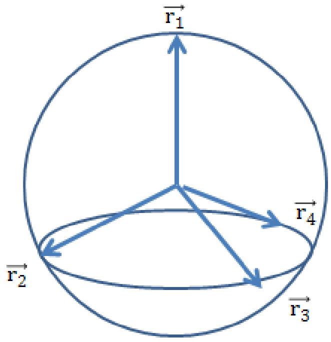
要想让这种情况成立的话，$\vec{r}_1$、$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$的位置必须满足什么样的情况？答

案是：当我以$\vec{r}_1$作为北极的话，$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$必须是在同一个纬度上，经度相差120 度的三个点。



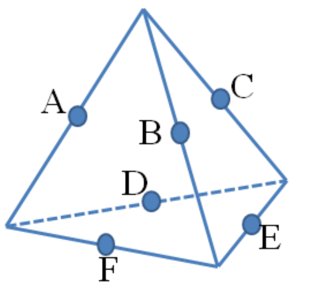
同样，对于$\vec{r}_2$，取一个绕它的三次转动，我们也可以得到$\vec{r}_1$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$必处在以它为极点的纬度线上等间距分布这样一个结论。

对$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$也可做类似处理。把这些结论和在一起，那么$\vec{r}_1$、$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$的分布就只能有一种情况：就是它们是球面上相互之间都等间距分布的四个点，构成一个正四面体。



对于这个正四面体，$\vec{r}_1$、$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$对应的$-\vec{r}_1$、$-\vec{r}_2$、$-\vec{r}_3$、$-\vec{r}_4$，也构成一个极点 G 轨道，这个就是我们的解中$n_3 = 3$对应的情况。

同时，二阶轴所对应的六个极点，也可以通过三次转动联系起来，比如：



这个图里面四面体中心到 A、...、F 这些点的连线与球面的交点，对应的都是二次轴极点，它们相互可由三次转动联系起来，所以只形成一个轨道，对应解中$n_1 = 2$的情况。

这样的一个正四面体群，我们称为 T 群。在有些教材中在讲到正四面体群的时候，会跟四阶置换群做一个类比。背后更大的背景是所有的有限群均同构与置换群的子群。这里我们先用点群与置换群及其子群做个类比。

T 群的每一个对称操作，说白了，就是对正四面体的四个顶点进行一个置换，比如：

$$C_3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 4 & 2 \end{pmatrix}$$

比如：

$$C_3^2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

对于一个四阶循环群来说，它的阶数是 4 的阶乘，也就是 24。而 T 群只有 12 个元素，为什么？

原因很简单，就是 T 群是个第一类点群，它包含的是纯转动操作，在变换过程中，1、2、3、4 四个点之间手性发生变化的变换是不包括的。因为这个原因，在有些教材上，会说到 T 群是 S_4 的偶置换子群。

在 T 群中，如果再加上这种不保手性的变换，也就是我的对象还是这个正四面体，但我允许它的顶点进行不保手性的变换，后面会说到这个群对应的是一个第二类点群 T_d，这样的一个群跟 S_4 就同构了。

再展开来说，在点群中，随着顶点数的增加，几何限制会使得点群与置换群的差别会越来越大。当只有三个顶点的时候，前面讲过 D_3 与 S_3 直接同构；当我有四个顶点的时候，T 与 S_4 只有在加入非纯转动操作的时候才同构；对

于五个以上顶点的情况，即使假如转动反演操作，也不行，因为顶点之间的任意置换是不可能被点群中的几何操作（转动或转动反演）所允许的。这些点群只能与相应置换群的子群同构，这个越往后你们会越能体会。

关于 T 群中群元的分类。

E 自成一类；二次转动C_2、C_2'、C_2''，由于转轴可通过三次转动联系起来，所以成为一类；转$2\pi/3$角的操作C_3、C_3'、C_3''、C_3'''，由于其转轴可以通过其它三次转动联系起来，所以也成为一类；而C_3与C_3^2之间，由于其转轴没法通过 T 中元素联系起来，所以不是一类，但C_3^2、$C_3'^2$、$C_3''^2$、$C_3'''^2$之间是可以通过 T 中元素联系起来的，所以C_3^2、$C_3'^2$、$C_3''^2$、$C_3'''^2$组成一个类。

综合起来，就是 T 中有四个类，分别是：{E}，{C_2、C_2'、C_2''}，{C_3、C_3'、C_3''、C_3'''}、{C_3^2、$C_3'^2$、$C_3''^2$、$C_3'''^2$}。

这个分类情况再结合 Burnside 定理，我们就会知道 T 群的不等价不可约表示维数情况是什么？

$S_1^2+S_2^2+S_3^2+S_4^2=12$，以为恒等表示$S_1=1$，其它维度只能是$S_2=1$、$S_3=1$、$S_4=3$。也就是说 T 群有三个一维不等价不可约表示，一个三维不等价不可约表示。

4. C_n、D_n、T 之后的第四种情况。

$l=3$，三个极点 G 轨道；

$n=24$，24 个对称操作；

$n_1=2$，第一个 G 轨道对应的是 2 次轴的极点，上面有 12 个点；

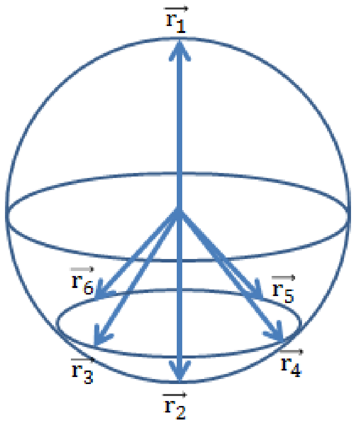
$n_2=3$，第二个 G 轨道对应的是 3 次轴的极点，上面有 8 个点；

$n_3=4$，第一个 G 轨道对应的是 4 次轴的极点，上面有 6 个点；

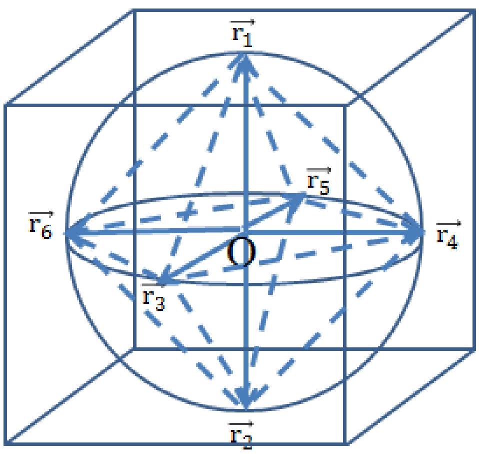
分析的话还是和上面一个例子一样，从最高阶轴的极点出发。有$\vec{r}_1$、$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$、$\vec{r}_5$、$\vec{r}_6$六个极点。这个群本身的转动都是 2、3、4 次转动。

我们把一个 4 次转动作用到$\vec{r}_1$、$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$、$\vec{r}_5$、$\vec{r}_6$上，得到的必是这六个点的集合自身。

设这个C_4本身对应的是$\vec{r}_1$轴，那么$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$、$\vec{r}_5$、$\vec{r}_6$这六个点怎么配置呢?只能是其中的是个放在同一纬度线上等间距分布，随后一个放到$\vec{r}_1$正对的那个极点，也就是这个样子:



与此同时，$\vec{r}_1$、$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$、$\vec{r}_5$、$\vec{r}_6$完全等价，现在上面那个图是只考虑了绕$\vec{r}_1$的四次转动，绕$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$、$\vec{r}_5$、$\vec{r}_6$，其实我们也是有同样要求的。如果把这些所有的要求都考虑在一起，那么很自然，我的顶点就只能是这种情况:



$\vec{r}_1$、$\vec{r}_2$、$\vec{r}_3$、$\vec{r}_4$、$\vec{r}_5$、$\vec{r}_6$是一个正八面体的顶点，因此这个群也就叫 O 群

（Octahedron）了。这个正八面体，外面还可以接一个立方体。也就是说只考虑转动的情况下，这个群描述的是立方体，或正八面体的对称性。

这个正八面体（里面虚线），相对正三角形的中心连线是个三阶轴（或者说事外接立方体相对顶点连线）。这样的三阶轴一共有 4 条，对应 8 个极点。这些极点相互之间由于都可以用 4 阶转动联系起来，所以 G 轨道上是 8 个点，对应的就是我们的基本方程给出的$n_2 = 3$的情况了。

同时，正八面体相对棱的中点连线，对应的是 2 次轴（也是立方体相对棱的中点连线）。这样的 2 次轴有 6 条，对应 12 个极点。这些极点之间可以由 4 次转动联系起来，所以 G 轨道上是 12 个点，对应的就是基本方程中$n_1 = 2$的情况了。

最后，由于这些四次轴、三次轴、二次轴的极点都可以由群中其它元素联系起来，所以 G 轨道就三个。转$2\pi/3$与转$4\pi/3$的操作同类，转$\pi/2$与转$3\pi/2$的操作同类。而转π的操作，存在两种情况，一种是绕 2 次轴的转动，一种是绕 4 次轴的转动，但转两次。这两种转动的转动轴，是不能通过群中其它元素联系起来的。这样的话总共 24 个操作的分类是：

{E}、$\{C_2^{(1)}$、$C_2^{(2)}$、$C_2^{(3)}$、$C_2^{(4)}$、$C_2^{(5)}$、$C_2^{(6)}\}$、

$\{C_3$、C_3'、C_3''、C_3'''、C_3^2、$C_3'^2$、$C_3''^2$、$C_3'''^2\}$、$\{C_4$、C_4'、C_4''、C_4^3、$C_4'^3$、$C_4''^3\}$、$\{C_4^2$、$C_4'^2$、$C_4''^2\}$

其中二次轴与四次轴的夹角是 45 度，这样的话虽然绕四次轴转两次和绕二次轴转一次转动角相同，但转轴不能通过群中其它元素练习起来，就不是一类了。

同时再做前面说过的，D_3 与 S_3 的类比，我们会发现这里 T（四个顶点）是 S_4（24 个元素）的一个子群，O（六个顶点）是 S_6 的（720 个元素）的一个子群。只不过因为这 6 个顶点相互位置不能乱换，O 群的阶比 S_6 群的阶小得很多。

5. C_n、D_n、T、O 之后最后一种第一类点群：

$l = 3$，三个极点 G 轨道；

$n = 60$，60 个对称操作；

$n_1 = 2$，第一个 G 轨道对应的是 2 次轴的极点，上面有 30 个点；

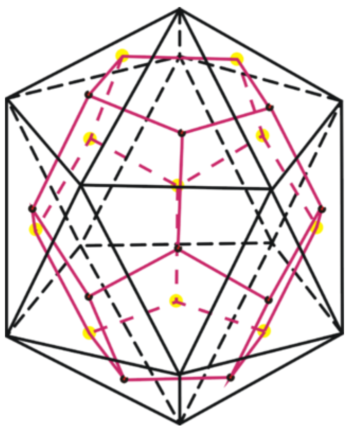
$n_2 = 3$，第二个 G 轨道对应的是 3 次轴的极点，上面有 20 个点；

$n_3 = 5$，第一个 G 轨道对应的是 5 次轴的极点，上面有 12 个点；

还是从最高阶轴开始，设$\vec{r}_1$、$\vec{r}_2$、……、$\vec{r}_{12}$对应这 12 个极点，他们的集合要在五次转动下不变。

以绕$\vec{r}_1$的转动为例，这些转动要把$\vec{r}_2$、……、$\vec{r}_{12}$这 11 个极点转到它们本身。与前面的分析类似，这种情况，只能将这 11 个点分成三组，前两组每组五个点，等间距分布在以$\vec{r}_1$为极点的等纬度线上。最后一个点，与$\vec{r}_1$相对。

同时，这十二个点要相互等价，这样的话对每个极点，另 11 个都要满足这样的性质。综合起来，结果就只有一种可能：



这是一个由 20 个正三角形组成的二十面体，因此这个群也称为正二十面体群（Icosahedron），记为 Y。这个正二十面体也可以内接一个正十二面体，每个面试个正五边形。它们的对称性是完全一样的。

就二十面体而言，每两个相对的极点的连线都是一个五次轴，一共有 12 个极点，6 个轴，相对极点可由其它变换（二次转动）联系起来，所以这个轨道有 12 个极点。

同时每两个相对的正三角形中点的连线是个三阶轴，三角形有 20 个，所以三阶轴是 10 个。相对极点同样可通过二次转动联系起来，这个轨道上有 20 个点。

每两个相对棱的中点连线为二次轴，一共有 30 条棱，也就是 15 个二阶轴。同样，相对极点可由其它二阶转动联系起来，所以轨道上有 30 个点。

在这个群中，由于它已经越来越像球了，对称性也越来越高，这个时候具有相同转角的转动就越有可能被其它转动操作联系起来，从而形成一类。Y 群的 60 个元素的分类情况也就是:

{E}、

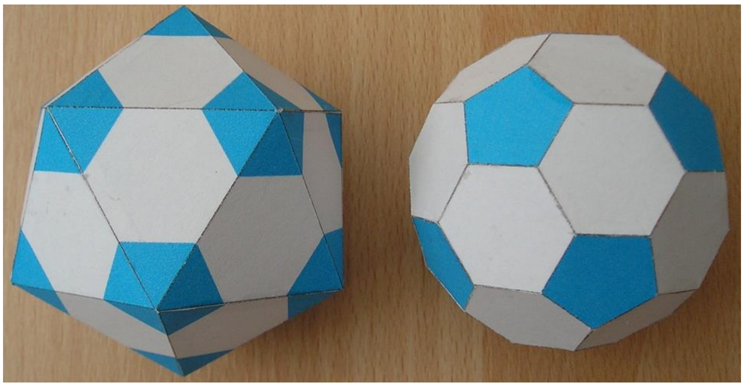
$\{C_2^{(1)}、C_2^{(2)}、\cdots、C_2^{(15)}\}$（15 个）、

$\{C_3^{(1)}、\cdots、C_3^{(10)}、C_3^{(1)2}、\cdots、C_3^{(10)2}\}$（20 个）、

$\{C_5^{(1)}、\cdots、C_5^{(6)}、C_5^{(1)4}、\cdots、C_5^{(6)4}\}$（12 个）、

$\{C_5^{(1)2}、\cdots、C_5^{(6)2}、C_5^{(1)3}、\cdots、C_5^{(6)3}\}$（12 个）

而这个正二十面体，你如果把每条棱都三等分，然后再把头去掉，那么你最终得到的，就是一个足球。相关的诺奖是 1996 年化学奖，C_{60}。



3.3 第二类点群

前面我们是通过第一类点群的基本方程，把第一类点群的所有情况作了一个介绍。根据这个介绍，我们现在就可以再之前我们说的定理 3.3 的第二与第三种情况，把所有的第二类点群推出来了。

先看第二种情况：当 G 不只包含纯转动操作时，如果 G 中包含纯反演操作 I，那么 G 与 K 的关系必然是 $G= K\cup IK$；这个时候，因为有五种第一类点群，与之对应的第二类点群也就是五种。下面我们用[II, 中]来表示这些第二类点群，II 是第二类点群的意思，‘中’代表具有中心反演对称性。这里由于中心反演对称操作与任意转动操作互易，所以 IK 这个部分不改变 K 的分类，只是把 K 中所有的类又在乘上 I 之后重复了一遍。

1. $C_n\cup IC_n$，这是一个 2n 阶的 Abel 群，C_n中的每个元素自成一类，IC_n中的每个元素也自成一类。
2. $D_n\cup ID_n$，这里D_n是 2n 阶的，$D_n\cup ID_n$就是 4n 阶的。前面说了，n 为奇数时，D_n有(n+3)/2 个类，$D_n\cup ID_n$就有$n+3$ 个类。N 为偶数时，D_n有$n/2+3$ 个类，$D_n\cup ID_n$就有$n+6$ 个。
3. $T\cup IT$阶为 24，有 8 个类，记为T_h。
4. $O\cup IO$阶为 48，有 10 个类，记为O_h。

5. $Y \cup IY$阶为 120，有 10 个类，记为Y_h。(后面会解释为什么用这个 h)

除了上面说的[I]、[II，中]，第三种情况说的是：当 G 不只包含纯转动操作，且 G 中不包含纯反演操作 I 时,G 必与一个纯转动群G^+同构,这里$G^+ = K \cup K^+$，而K^+的定义是：$K^+ = \{Ig|g \in G，但\ g \notin K\}$。

换句话说这里的第二类点群不包含纯反演操作,同时它与一个第一类点群同构。这样的话我们只需要找到与之同构的第一类点群$K \cup K^+$,然后对它做$K \cup IK^+$这样一个变换就可以了。

而对$K \cup K^+$这样一个第一类点群，如果我们把 K 当作一部分，K^+当作一部分，它与二阶循环群是同态的，为什么?

（因为$K \cup IK^+$本身是一个群，IK^+中的K^+就是我们这个第一类点群的第二部分。由于重排定理，对$K \cup IK^+$，取 K 中任何一个元素，它乘上 K 这个集合，必给出 K 这个集合；而它乘上 IK^+这个集合，必给出 IK^+这个集合。同时 IK^+中任意元素，乘上 K 这个集合，必给出 IK^+这个集合；它乘上 IK^+这个结合，给出 K。由于 I 是可以单独提出的，所以对$K \cup K^+$这个第一类点群，必存在这样的性质：K 乘上 K 等于 K，K 乘上K^+等于K^+，K^+乘上 K 等于K^+，K^+乘上K^+等于 K。也就是说$\{K，K^+\}$与二阶循环群同态)。

这样的话 K 必须是$\{K, K^+\}$的不变子群，并且阶数是它的一半。根据这样一个规则,现在我们就可以来通过我们知道的第一类点群,构造这种第二类点群了。

在C_n、D_n、T、O、Y 里面符合这个条件的，只有C_{2n}、D_n、D_{2n}、O 这四种情况，下面我们来分开介绍（符号在前面五种第二类点群的基础上继续)：

6. C_{2n}，对它来讲，$\{C_{2n}^2、C_{2n}^4、\cdots、C_{2n}^{2n} = E\}$形成不变子群。

$\{C_{2n}、C_{2n}^3、\cdots、C_{2n}^{2n-1}\}$为其陪集，形成的第二类子群是：

$\left\{\left\{C_{2n}^{2}、C_{2n}^{4}、\cdots、C_{2n}^{2n}=E\right\}、I\left\{C_{2n}、C_{2n}^{3}、\cdots、C_{2n}^{2n-1}\right\}\right\}$。

7. 与D_n同构的第二类点群，这里纯转动部分是：$\{C_n、C_n^2、\cdots、E\}$，另外一部分是：$I\{C_2^{(1)}、C_2^{(2)}、\cdots、C_2^{(n)}\}$。

   由于 I 与任意元素互易，所以它的分类情况与D_n完全相同，n 为奇数是，是(n+3)/2，偶数时，是n/2+3。

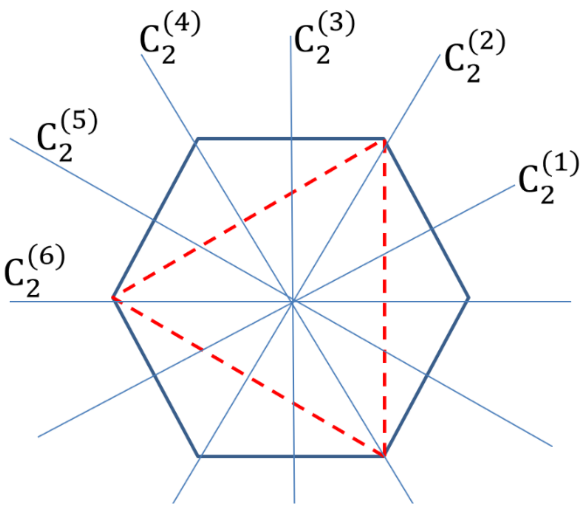
8. 对D_n，当 n 为偶数时，也就是D_{2n}这种情况，它除了C_{2n}这个不变子群，还有D_n也是它的不变子群。这个时候，如果根据D_n去做这个第二类点群，又能得到一种情况。这个时候纯转动部分是：

$$\{C_{2n}^{2}、C_{2n}^{4}、\cdots、C_{2n}^{2n}=E、C_2^{(2)}、C_2^{(4)}、\cdots、C_2^{(2n)}\}$$

   转动反演部分是：

$$I\{C_{2n}、C_{2n}^{3}、\cdots、C_{2n}^{2n-1}、C_2^{(1)}、C_2^{(3)}、\cdots、C_2^{(2n-1)}\}$$

   以D_6为例，这里是取它的不变子群D_3，这里$C_2^{(1)}$、$C_2^{(2)}$、…、$C_2^{(2n)}$的分布就是：

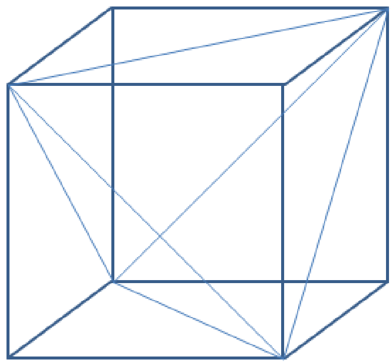


   由于 I 与任意群元互易，所以它的分类情况与D_{2n}群完全一样，也是2n/2+3=n+3。

9. 最后一种情况，基于的第一类点群是 O 群，它的不变子群是 T。

   这个怎么理解呢？我们有一个立方体，它的纯转动对称群是 O 群，现在针对

它做一个内接正四面体，这个四面体，纯转动操作相对于 O 群减少了一半，但是除了这些纯转动操作，它多了一些转动反演操作。这些转动反演操作加上保留下来的纯转动操作，形成的第二类点群与 O 群同构，也是 24 个操作。比如这个对这个正四面体，如果我对 z 轴转 90 度，再做反演，它回到它本身。这个操作就是这个正四面体具有的，它是一个转动反演操作，与立方体本身转 90 度的纯转动操作对应。



这里 K 等于：

$$\{C_3、C_3^{'}、C_3^{''}、C_3^{'''}、C_3^2、C_3^{'2}、C_3^{''2}、C_3^{'''2}、E、C_4^2、C_4^{'2}、C_4^{''2}\}$$

IK^+等于：

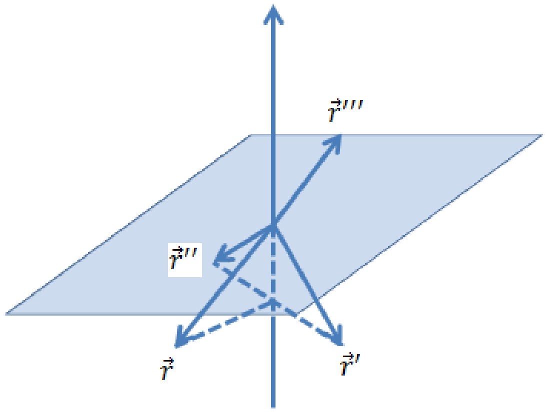
$$I\{C_2^{(1)}、C_2^{(2)}、C_2^{(3)}、C_2^{(4)}、C_2^{(5)}、C_2^{(6)}、C_4、C_4'、C_4''、C_4^3、C_4'^3、C_4''^3\}$$

同样，由于 I 与任意元素互易，这个群与 O 群分类相同，5 个类。

到这儿，我们是讲完了所有的点群，它们是如何分类的，都具有哪些对称造作。但光有这些了解，你们还没法看文献，因为文献中一般都会用一些符号去标识一个特定的点群，比如T_d、T_h、O_h。这些符号直接告诉了我们这个点群是什么，而不用让我们去写比如：与 O 同构的不含反演操作的第二类点群，或者 T 与中心反演操作结合形成的点群，这些东西。

这些符号叫熊夫利符号，因为它是我们在工作中经常接触的东西，我们在这

里详细说一下。我们先说明的一点是熊夫利符号与点群的对称元素有着最直接的联系。同时，在对称元素的描述中，熊夫利符号倾向于使用转动反射面，而不是转动反演轴。在前面的讨论中，因为转动反演轴更便于我们讲点群分类，所以我们一直采用它，后面要换一下。前面讲过，它与转动反射面的关系很简单，是：$\sigma_{\vec{k}} C_{\vec{k}}\left(\frac{2\pi}{n}\right) = I C_{\vec{k}}\left(\frac{2\pi}{n} + \pi\right)$。



在熊夫利的命名规则中，一个点群的最高阶转轴、与某反射面垂直的轴、或某个转动反演轴会被当作是主轴。命名的时候是基于第一类点群的符号，结合反射面或转动反射轴来进行的。主轴的方向一般我们称为垂直方向。水平的放射面记为σ_h，而过主轴与水平面垂直的反射面记为σ_v或σ_d。这里 v 与 d 还有些区别，我们一会儿再讲。

熊夫利命名规则，说白了，就是根据前面我们分析出来的各种群的特征，找到一个可以标识它的对称元素的符号，用这个符号来代表这个群。或者说就是起名，起名的根据是对称元素。这句话说起来简单，但做起来并不好做。下面我们具体得来分析，根据这个图：

点群分类:

[I]:	[II, 中]:	[II, 非中]:
C_n	$C_n \cup I C_n$	与 C_{2n} 同构
D_n	$D_n \cup I D_n$	与 D_n 同构
T	$T \cup I T$	与 D_{2n} 同构
O	$O \cup I O$	与 O 同构
Y	$Y \cup I Y$	

To be labeled

其中第一类点群名字已经有了。对第二类点群，我们最终是要把它分成的情况是：

[II, 中]:

$C_n \cup I C_n \begin{cases} 2n+1 - S_{4n+2} & (6) \\ 2n - C_{2nh} & (8) \end{cases}$

$D_n \cup I D_n \begin{cases} 2n+1 - D_{2n+1d} & (12) \\ 2n - D_{2nh} & (10) \end{cases}$

$T \cup I T$ ----- T_h (1)

$O \cup I O$ ----- O_h (2)

$Y \cup I Y$ ----- Y_h (3)

[II, 非中]:

与 C_{2n} 同构 $\begin{cases} 4n+2 - C_{2n+1h} & (9) \\ 4n - S_{4n} & (7) \end{cases}$

与 D_n 同构 ----- C_{nv} (4)

与 D_{2n} 同构 $\begin{cases} 4n+2 - D_{2n+1h} & (11) \\ 4n - D_{2nd} & (13) \end{cases}$

与 O 同构 ----- T_d (5)

$\boxed{\text{有：} S_{2n},\ C_{nv},\ C_{nh},\ D_{nh},\ D_{nd},\ T_h,\ O_h,\ Y_h,\ T_d}$

下面我们按照兰色标记的十三个数字逐个讲，这 13 个数字，其中在熊夫利符号中重复的情况，比如 10、11。它们在我们之前以定理 3.3 来推各种点群的时候，属于定理 3.3 的不同情况，但这里它们由相似的对称元素标识。因此，这 13 种可能性又可以在熊夫利的框架下缩小为 9 种标识的情况。下面，我们先走遍这 13 个兰色数字，再对它们进行黑框中的归纳：

1. 先看 $T \cup IT$。

   T 的操作是：$\{E、C_2、C_2'、C_2''、C_3、C_3'、C_3''、C_3'''、C_3^2、C_3'^2、C_3''^2、C_3'''^2\}$，并上 IT，也就是 $I\{E、C_2、C_2'、C_2''、C_3、C_3'、C_3''、C_3'''、C_3^2、C_3'^2、C_3''^2、C_3'''^2\}$，这是是它所有的操作。

这些操作中，有纯转动，有转动反射。在熊夫利的命名规则中，把IC_2这个转动反演操作所对应的反射面当作非纯转动部分的代表，并把这个反射面放到水平的位置。这样我用 T 可以把纯转动部分包括，用σ_h对 T 做陪集就可以把转动反演部分包括。子群与陪集结合产生所有这个群里面的元素，与之相应这个群也就可以记为：T_h。

2. 对 O，一样，有 IC_4^2这个操作，我们可以把它对应的平面定为水平面，用σ_h与 O 来标识这个群，记为：O_h。

3. 对 Y，有 IC_2，把它对应的平面定为水平面，用σ_h与 Y 来标识这个群，记为：Y_h。

4. 与D_n同构的第二类点群，对称操作为：

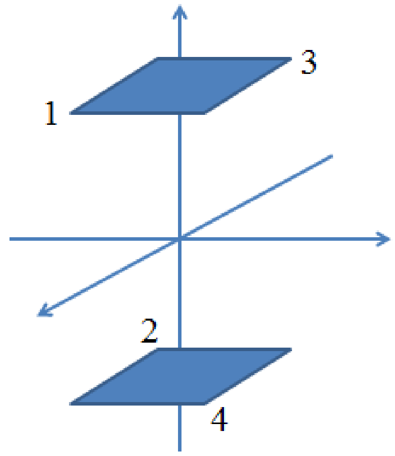
$\left\{\left\{C_n、C_n^2、\cdots、E\right\}、I\left\{C_2^{(1)}、C_2^{(2)}、\cdots、C_2^{(n)}\right\}\right\}$。

C_n这个高阶转动轴为主轴，形成子群$\left\{C_n、C_n^2、\cdots、E\right\}$。陪集部分是$I\left\{C_2^{(1)}、C_2^{(2)}、\cdots、C_2^{(n)}\right\}$。由于$C_2^{(i)}$在水平面上，所以他们代表的是垂直水平面的反射面$\sigma_v$，这个 v 代表 vertical。两者结合起来，我们用C_{nv}来标识这样的群。

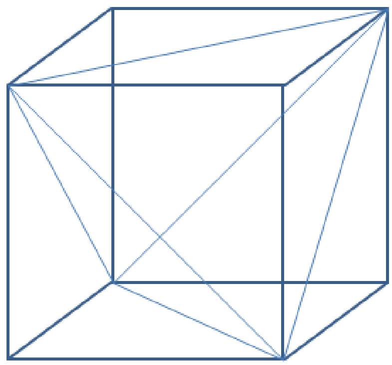
5. 与 O 同构的第二类点群，包含的操作是：

$$\{C_3、C_3'、C_3''、C_3'''、C_3^2、C_3'^2、C_3''^2、C_3'''^2、E、C_4^2、C_4'^2、C_4''^2\}$$
$$\cup I\{C_2^{(1)}、C_2^{(2)}、C_2^{(3)}、C_2^{(4)}、C_2^{(5)}、C_2^{(6)}、C_4、C_4'、C_4''、C_4^3、C_4'^3、C_4''^3\}$$

纯转动部分是个 T 群，最高转动轴位三次轴。转动反演部分有三个 4 次转动反演轴。对于 4 次转动反演轴，我们可以在实空间画一下它对应的等价的点：



从这些点我们可以看出 4 次转动反演轴等价于 4 次转动反射轴。我们以这个转动反射轴为主轴。这个轴是本身 O 群的 4 次轴，也就是下图中的 z 轴：



这个时候，我们对这个与 O 群同构的第二类点群，纯转动部分是 T，转动反演部分只要找出一个操作，就可以通过陪集的方式把这个群确定下来了。在上个图中，我们知道 O 群会有两个水平的二次轴，对应$C_2^{(i)}$中的两个，它们乘上 I，给出的是垂直于水平面的反射面。这样的话我们就可以用 T 与这个反射面来标识这个群了。

但需要注意的是，前面我们说垂直于水平面的反射面，会有两种情况，σ_v与σ_d。σ_v就是一个一般的垂直水平面的反射面，前面我们也用过。而σ_d，说的是这个反射面除了垂直于水平面，还平分水平面上两个二次轴的夹角。d 是 diagonal 的意思。好多教材没有解释这个，大家有兴趣的话，可以看一下朗道

《量子力学》第 93 节那部分[8]，或者 Dresselhaus 那本《Group Theory Applications o Physics of Condensed Matter》的第 45 页。

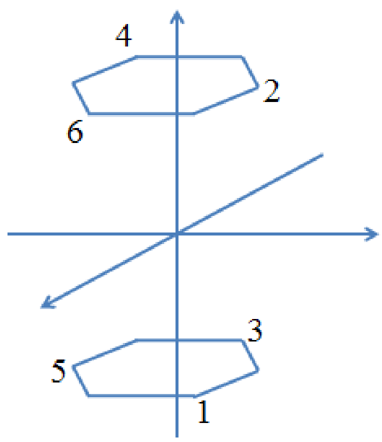
这样的话对与 O 同构的第二类点群，我们就可以用T_d来标识了。

6. $C_n \cup IC_n$，n 为奇数，可记为$C_{2n+1} \cup IC_{2n+1}$，这个群包含的元素是：

$$\left\{C_{2n+1}、C_{2n+1}^2、\cdots、C_{2n+1}^{2n+1}=E\right\} \cup I\{C_{2n+1}、C_{2n+1}^2、\cdots、C_{2n+1}^{2n+1}=E\}$$

这些元素的集合与S_{4n+2}这个转动反射轴作为基本生成元，形成的群是一样的，所以在熊夫利符号中，记为S_{4n+2}。

以S_6为例，通过这个操作，我们可以知道一个点的等价点的集合为：



从这个等价的点的集合，我们很容易想象它的对称群是：

$$\left\{C_3、C_3^2、E\right\} \cup I\left\{C_3、C_3^2、E\right\}$$

7. 与C_{2n}同构的第二类点群中的一种情况，当 2n 为 4 的整数倍，也就是 4n，或者直接说与C_{4n}同构的第二类点群。这时这个群为$C_{2n} \cup I(C_{4n}-C_{2n})$，它包含的群元有：

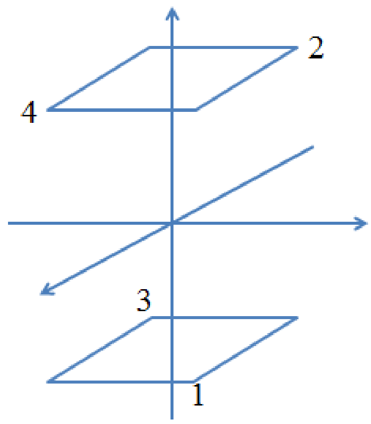
$$\left\{C_{4n}^2、C_{4n}^4、\cdots、C_{4n}^{4n}=E\right\} \cup I\{C_{4n}、C_{4n}^3、\cdots、C_{4n}^{4n-1}\}$$

这些元素的集合与S_{4n}这个转动反射轴作为基本生成元，形成的群是一样的，

[8] 我第一年上课的时候，一个叫杨康的学生帮我发现的，谢谢！

所以在熊夫利符号中，记为S_{4n}。

以S_4为例，通过这个操作，我们可以知道一个点的等价点的集合为：



从这个等价的点的集合，我们很容易想象它的对称群是：

$$\left\{C_4^2、E\right\} \cup I\left\{C_4^1、C_4^3\right\}$$

8. $C_n \cup IC_n$时，n 为偶数，也就是$C_{2n} \cup IC_{2n}$。这个群包含的元素是：

$$\left\{C_{2n}、C_{2n}^2、\cdots、C_{2n}^{2n}=E\right\} \cup I\{C_{2n}、C_{2n}^2、\cdots、C_{2n}^{2n}=E\}$$

这里，既有C_{2n}，又有转动反射$IC_{2n}^n=\sigma_h$，因此可记为C_{2nh}。

9. 与C_{4n+2}同构的第二类点群，群元：

$$\left\{C_{4n+2}^2、C_{4n+2}^4、\cdots、C_{4n+2}^{4n+2}=E\right\} \cup I\{C_{4n+2}、\cdots、C_{4n+2}^{2n+1}、\cdots、C_{4n+2}^{4n+1}\}$$

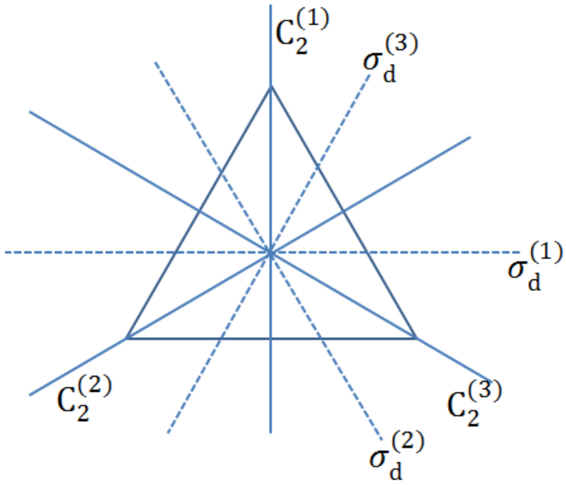
有C_{2n+1}这个第一类点群的所有操作，有$IC_{4n+2}^{2n+1}=\sigma_h$，因此记为$C_{2n+1h}$。

10. $D_{2n} \cup ID_{2n}$，有D_{2n}的全部对称操作，有$IC_{2n}^n=\sigma_h$，因此可记为D_{2nh}。

11. 与D_{4n+2}同构的第二类点群，群为$D_{2n+1} \cup I(D_{4n+2}-D_{2n+1})$。它有$D_{2n+1}$的全部对称性，同时还包括$IC_{4n+2}^{2n+1}=\sigma_h$，所以也记为$D_{2n+1h}$。

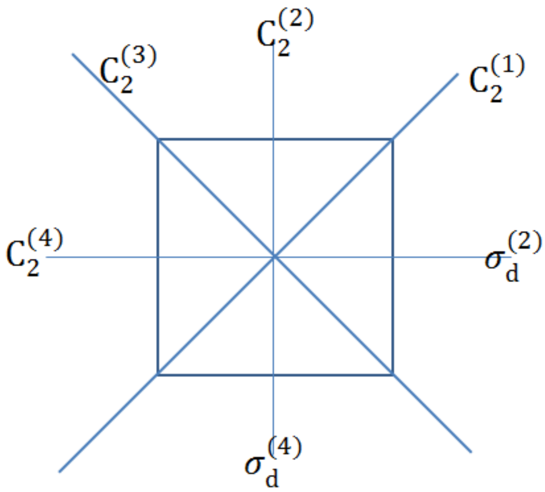
12. $D_{2n+1} \cup ID_{2n+1}$，有 2n+1 个垂直反射面$IC_2^{(1)}$、$\cdots$、$IC_2^{(2n+1)}$。

以$D_3 \cup ID_3$为例：



图中$\sigma_d^{(1)} = IC_2^{(1)}$、$\sigma_d^{(2)} = IC_2^{(2)}$、$\sigma_d^{(3)} = IC_2^{(3)}$，都是垂直于水平面的反射面，我们在这里用 d 而不是用 v，是因为它们刚好又在二次轴的平分线上。由于这个群有D_{2n+1}的全部对称性，又有$\sigma_d^{(i)}$，它被记为D_{2n+1d}。

13. 与D_{4n}同构的第二类点群，$D_{2n} \cup I(D_{4n} - D_{2n})$，以$D_2 \cup I(D_4 - D_2)$为例，$D_4$有四个水平二阶轴，现在两个保持（记为$C_2^{(1)}$、$C_2^{(3)}$），两个变为转动二阶轴（记为$IC_2^{(2)}$、$IC_2^{(4)}$）。它们的关系见下图：



在这里$\sigma_d^{(2)} = IC_2^{(2)}$，它在$C_2^{(1)}$、$C_2^{(3)}$平分线上，用 d 标识。这个群又有$D_{2n}$的所有对称性，所以记为$D_{2nd}$。

这 13 种情况中，6（S_{4n+2}）、7（S_{4n}）都对应S_{2n}；8（C_{2nh}）、9（C_{2n+1h}）都对应C_{nh}；10（D_{2nh}）、11（D_{2n+1h}）都对应D_{nh}；12（D_{2n+1d}）、13（D_{2nd}）都对

应D_{nd}。所以合在一起就是S_{2n}、C_{nh}、D_{nh}、D_{nd}、C_{nv}、T_h、O_h、Y_h、T_d九种情况。

3.4 晶体点群与空间群

现在我们是把点群基础、第一类点群、与第二类点群以及点群的熊夫利符号讲完了。利用这些知识，我们可以具体的去研究一个在我们物理学近一百多年的发展史中占据核心地位的系统——晶体。我们会先研究一下晶体里面的点群，然后再把点群这个概念进行一个扩充，讲一下空间群。

所谓晶体，简单的说，就是这个系统必须要由全同的、由原子的集合构成的结构单元组成，并且这个结构单元在三维空间中可以“无限地”重复。它要有转动（含转动反演）与平移两种对称性。晶体点群，是忽略了平移对称性，能够将晶体变到其本身的转动与转动反演对称性的集合。在点群的所有对称操作中，晶体有一个点是不动的。

晶体点群，相对于普通点群（比如说分子中的点群），最重要的一个性质就是晶体制约定理。

定理 3.4 设 G 是晶体点群，则 G 中转动元素只能是C_1（也就是 E）、C_2、C_3、C_4、C_6，所有转动反演元素，只能是 I、IC_2、IC_3、IC_4、IC_6。

（在证明这个定理的时候中要用到的一个概念是晶格，它是由三个线性无关的向量$\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$的整数线性组合组成的。而晶体，可以看作是那些重复单元，坐在晶格上形成的）

证明：

设晶格 L 是 G 不变的，L 的基本向量是$\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$，则对$\forall g\in G$，有：

$$g\vec{a}_i=\sum_{j=1}^{3}c_{ji}\vec{a}_j$$

对这个等式我们先看左边，$g\vec{a}_i$这个向量本身必须在晶格上，因此右边的c_{ij}必为整数。这个是我们从左边向量性质推出的右边系数的性质。

而另一方面，G 是 O(3)群的子群，上式同时还代表着如果选$\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$为基的话，由系数c_{ji}形成的矩阵 C(g)是群 G 的表示矩阵。与之相应的{C(g)}就是 G 的一个表示。

这个表示和我们用三维欧式空间中正交的单位向量$\vec{i}$、$\vec{j}$、$\vec{k}$形成的表示差的就是一个相似变换，从$\vec{i}$、$\vec{j}$、$\vec{k}$到$\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$的相似变换，对吧？这个相似变换是不改变标识的特征标的。也就是说对{C(g)}这个表示，它的特征标还等于$\pm(1+2\cos\Psi)$，其中Ψ是转角。

这也就意味着$\mathrm{tr}(C(g))$一方面等于$\sum_{i=1}^{3} c_{ii}$，另一方面等于$\pm(1+2\cos\Psi)$。

前面说过c_{ii}为整数，那么$\pm(1+2\cos\Psi)$就必为整数，这样的话这里的Ψ只能为 0、$\pi/3$、$\pi/2$、$2\pi/3$、π。纯转动操作为C_1（也就是 E)、C_2、C_3、C_4、C_6，转动反演操作为 I、IC_2、IC_3、IC_4、IC_6。（C_5、C_7、C_8、…就不会存在）

（证毕）

有了晶体制约定理，再回到我们之前讲的第一类、第二类点群，我们就很容易知道：

一. 第一类点群中可以在晶体中出现的是C_n里面的C_1、C_2、C_3、C_4、C_6，D_n里面的D_2、D_3、D_4、D_6，O，T，共 11 个。Y 不能存在因为它有五次轴。

二. 第二类点群里面可以在晶体中出现的包括：

1. S_{2n}中的S_2、S_4、S_6。因为$S_{4n+2}=C_{2n+1}\cup IC_{2n+1}$，这个里面可以存在的是$S_2$和$S_6$，$S_{10}$及其以上都不能存在；$S_{4n}=C_{2n}\cup I(C_{4n}-C_{2n})$，这里 n 只能为 1，对应$S_4$。（3 个）

2. C_{nv}（与D_n同构的第二类点群）中的C_{2v}、C_{3v}、C_{4v}、C_{6v}。（4 个）

3. C_{nh}中的C_{1h}、C_{2h}、C_{3h}、C_{4h}、C_{6h}。因为$C_{2nh} = C_{2n} \cup IC_{2n}$，它可以贡献$C_{2h}$、$C_{4h}$、$C_{6h}$；$C_{2n+1h} = C_{2n+1} \cup I(C_{4n+2} - C_{2n+1})$，它可以贡献$C_{1h}$、$C_{3h}$。（5 个）

4. D_{nh}中的D_{2h}、D_{3h}、D_{4h}、D_{6h}。因为$D_{2n+1\,h} = D_{2n+1} \cup I(D_{4n+2} - D_{2n+1})$，它可以$D_{3h}$；$D_{2nh} = D_{2n} \cup ID_{2n}$，它可以贡献$D_{2h}$、$D_{4h}$、$D_{6h}$。（4 个）

5. D_{nd}中的D_{2d}、D_{3d}。其中$D_{2nd} = D_{2n} \cup I(D_{4n} - D_{2n})$可以贡献$D_{2d}$；$D_{2n+1d} = D_{2n+1} \cup ID_{2n+1}$可以贡献$D_{3d}$。（2 个）

6. $T_h = T \cup IT$。（1 个）

7. $T_d = T \cup I(O - T)$。（1 个）

8. $O_h = O \cup IO$。（1 个）

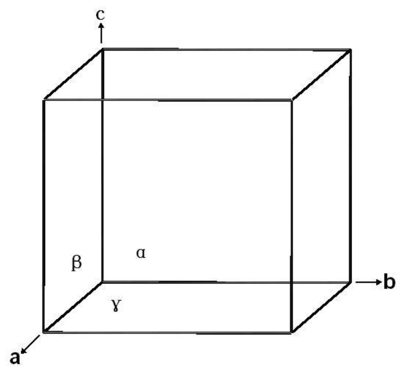
共 21 个第二类点群。

两者加在一起就是 32 种晶体点群。任何晶体，它的转动与转动反演对称性的集合，必属于这 32 种点群。利用这 32 种点群，我们是可以对晶体进行一个分类的。具有相同点群的晶体，它们会有一些共同的特征，比如红外谱、拉曼谱、能带，这个我们后面第四章会专门讲到。

除了按这 32 种点群对晶体进行分类，在这 32 种点群中，依据各点群间对称操作的对称元素的相似性，这 32 种点群还可以进行一个划分。以T、O、T_d、T_h、O_h这五种点群为例，具有这些对称性的晶体，它们都有 4 个三次轴。这 4 个三次轴，会让它们的宏观对称性呈现出一些相似性。我们把它们归为一类，这样的一个类，称为一个晶系。有 4 个三次轴的晶系是立方晶系，它们是晶体中对称性最高的一个群体，宏观性质上，x、y、z 轴三者等价。如果沿 z 轴方向做个拉伸，

使得x、y等价，z轴和它们不等价，造成的一个结果就是系统只在一个方向（z轴）有四阶转动轴或四阶转动反演轴。对称操作的对称元素具备这个特征的点群再形成一个群体，包括C_4、D_4、C_{4h}、S_4、D_{4h}、C_{4v}、D_{2d}，我们称为四方系。

为什么要进行这样的分类呢？之前我们说过，最早研究晶体结构的是晶体学家，早于X射线、早于电子衍射谱。因此，晶体的宏观特征是他们在描述晶体内部结构时一定要抓住的特征。T、O、T_d、T_h、O_h这五种点群，它们都有4个三次轴，肉眼上可以看到的性质就是x、y、z三个轴等价。晶体中类似的晶系有七种，它们的划分依据，是共同的对称操作的对称元素，比如立方系的三次轴。在描述这些点群之间对称操作的对称元素共同特征的时候，我们可以借助于晶胞这个反映晶体对称性的最小结构单元。这些对称操作的对称元素的共同特征可以由晶胞参数（$\vec{a}$、$\vec{b}$、$\vec{c}$、α、β、γ，定义见下图）反映出来。



下面我们就按照这七种晶系的定义（对称操作的对称元素的相似性），以及它们晶胞参数的特性，依次把32种晶体点群进行归纳：

1. 三斜晶系(Triclinic Crystal System)

   这种晶系中，不同点群的对称元素的共性是只存在一重轴或一重转动轴。

   在上面的讨论中，我们知道满足这个要求的点群包括：$S_2 = C_1 \cup IC_1$、C_1两种。

   其晶胞参数的限制就是$\vec{a}$、$\vec{b}$、$\vec{c}$长度不同，夹角任意，都不为90度。S_2对应

的是有中心反演对称性的情况，它在此晶系中对称性最高。C_1对应的是连I都没有的情况。

2. 单斜晶系(Monoclinic Crystal System)

这种晶系中，不同点群的对称元素的共性是只在一个轴方向存在二重轴或二重反轴。

在上面的讨论中，满足这个要求的点群包括:

1) 第一类点群：C_2

2) 第二类点群：$C_2 \cup IC_2 = C_{2h}$、$C_1 \cup I(C_2 - C_1) = C_{1h}$

在这三种点群中，C_{2h}对称性最高。

对其晶胞，要求是：$a \neq b \neq c$，$\alpha = \beta = 90^{\circ}$，$\gamma \neq 90^{\circ}$。

3. 正交晶系(Orthorhombic Crystal System)

这种晶系中，不同点群的对称元素的共性是有三个相互垂直的二重轴或二重反轴。

在上面的讨论中，满足这个要求的点群包括:

1) 第一类点群：D_2

2) 第二类点群：$D_2 \cup ID_2 = D_{2h}$、$C_2 \cup I(D_2 - C_2) = C_{2v}$

在这三种点群中，D_{2h}对称性最高。

对其晶胞，要求是：$a \neq b \neq c$，$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$。

4. 四方晶系(Tetragonal Crystal System)

这种晶系中，不同点群的对称元素的共性是在唯一高次轴方向有四重轴或四重反轴。

在上面的讨论中，满足这个要求的点群包括:

1) 第一类点群：C_4、D_4

2) 第二类点群：包括从C_4出发的$C_4 \cup IC_4 = C_{4h}$、$C_2 \cup I(C_4 - C_2) = S_4$；以及由$D_4$出发的$D_4 \cup ID_4 = D_{4h}$、$C_4 \cup I(D_4 - C_4) = C_{4v}$、$D_2 \cup I(D_4 - D_2) = D_{2d}$。

在这三种点群中，D_{4h}对称性最高。

对其晶胞，要求是：$a = b \neq c$，$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$。

5. 三方晶系(也叫三角晶系，Trigonal Crystal System)

这种晶系中，不同点群的对称元素的共性是在唯一高次轴方向有三重轴或三重反轴。

在上面的讨论中，满足这个要求的点群包括：

1) 第一类点群：C_3、D_3

2) 第二类点群：包括从C_3出发的$C_3 \cup IC_3 = S_6$；以及由D_3出发的$D_3 \cup ID_3 = D_{3d}$、$C_3 \cup I(D_3 - C_3) = C_{3v}$。

在这三种点群中，D_{3d}对称性最高。

晶胞方面，有两种取法，第一种是$a = b \neq c$，$\alpha = \beta = 90^{\circ}$，$\gamma = 120^{\circ}$；或者$a = b = c$，$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^{\circ}$。

6. 六角晶系(Hexagonal Crystal System)

这种晶系中，不同点群的对称元素的共性是在唯一高次轴方向有六重轴或六重反轴。

在上面的讨论中，满足这个要求的点群包括：

1) 第一类点群：C_6、D_6

2) 第二类点群：包括从C_6出发的$C_6 \cup IC_6 = C_{6h}$、$C_3 \cup I(C_6 - C_3) = C_{3h}$；以

及由D_6出发的$D_6 \cup ID_6 = D_{3h}$、$C_6 \cup I(D_6 - C_6) = C_{6v}$、$D_3 \cup I(D_6 - D_3) = D_{3h}$。

在这三种点群中，D_{6h}对称性最高。

晶胞方面，$a = b \neq c$，$\alpha = \beta = 90^\circ$，$\gamma = 120^\circ$。

三方系与六角系，当三方系的晶胞按第一种取法取时，从晶胞参数上看不出任何差别。它们的本质的差别还是体现在主轴的对称性上，对六角系是六次。

7. 立方晶系(Cubic Crystal System)

这种晶系中，不同点群的对称元素的共性是四个三次轴。

在上面的讨论中，满足这个要求的点群包括：

1) 第一类点群：T、O
2) 第二类点群：包括从T出发的$T \cup IT = T_h$；以及由O出发的$O \cup IO = O_h$、$T \cup I(O - T) = T_d$。

在这三种点群中，O_h对称性最高。

晶胞方面，$a = b = c$，$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$。

有了这些知识，你们就应该知道在以后事科研工作中，如果老板问你研究的晶体是什么晶系（Crystal System）？它的点群是什么？他/她指的是什么意思。

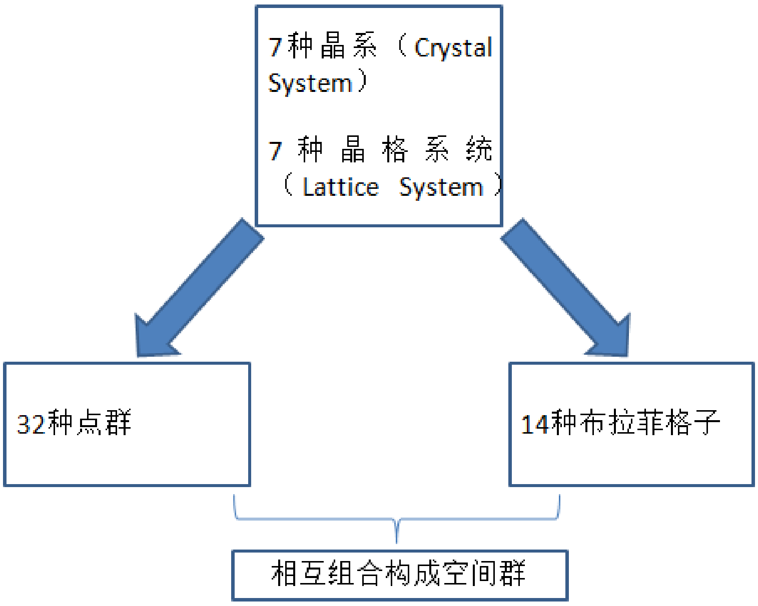
现在我们清楚了晶系与晶体点群两个概念，下一步是往空间群过渡。七种晶系可容纳 32 种点群。对于一个点群，它属于某晶系，晶胞特征可以由$\vec{a}$、$\vec{b}$、$\vec{c}$之间的关系描述。对于由$\vec{a}$、$\vec{b}$、$\vec{c}$形成的六面体，我们也只是想象它的顶点有个东西。以立方晶系中的O_h群为例。如果只是由$\vec{a}$、$\vec{b}$、$\vec{c}$形成的六面体顶点有原子，它可以形成一种晶体。如果我们将这个六面体的体心加一个原子，可以形成另一种晶体，这个晶体也具备O_h对称性。把每个面心都加一个原子，同样也可以在不

破坏点群对称性的基础上生成另一种晶体。这些晶体无疑是不一样的（空间群不一样），但点群与晶系这两个概念不能描述这种差别。要描述这种差别，我们需要引入另一个概念，就是晶格（布拉菲格子 Bravais Lattice），一共 14 种。说到底，晶格是一个空间群的概念。

和前面讲点群一样，这 14 个晶格也是分别属于前面我们提到的类似于晶系的东西。前面是 7 种晶系（Crystal System），每种容纳几个点群，加在一起容纳 32 个点群。这里是 7 种晶格系统（Lattice System），每种容纳几个布拉菲格子，加在一起容纳 14 个布拉菲格子。前面 7 种晶系（Crystal System）和这里的 7 种晶格系统（Lattice System）大部分相同，但略有区别，这里必须解释一下。晶系，是基于晶体点群对称性对晶体的分类，它的基础是点群中对称操作的对称元素的共性。晶格系统，是基于晶体的空间群的对称性对晶体进行的分类，它的基础是晶格。

要详细说明这个差别，我们先做一个对比。前面的 7 种晶系（Crystal System）分别是：Triclinic（三斜）、Monoclinic（单斜）、Orthorhombic（正交）、Tetrogonal（四角）、Trigonal（三方）、Hexagonal（六角）、Cubic（立方）。这里的 7 种晶格系统（Lattice System）分别是：Triclinic（三斜）、Monoclinic（单斜）、Orthorhombic（正交）、Tetrogonal（四角）、Rhombohedral（菱方）、Hexagonal（六角）、Cubic（立方）。其中，这两者之间的 Triclinic（三斜）、Monoclinic（单斜）、Orthorhombic（正交）、Tetrogonal（四角）、Cubic（立方）这五种是完全一样的。差别出现在晶系（Crystal System）中的 Trigonal（三方）、Hexagonal（六角）和晶格系统（Lattice System）中的 Rhombohedral（菱方）、Hexagonal（六角）上面，它们之间有交叉。以后你们看文献，说到 Rhombohedral（菱方），你们一定要知道说的是晶格系统（Lattice System），它指的是 Bravais Lattice 的分类；说到 Trigonal（三方或三角），

你们一定要知道说的是 Crystal System，它指的是晶系的分类；说到 Hexagonal（六角），即可以指晶系（Crystal System）也可以指晶格系（Lattice System）。后面我们会通过表格来详细解释这个差别。这里先通过一个图来说明：点群、晶系、晶格系统、布拉菲格子之间的关系。通过这种关系，引出 14 布拉菲格子。然后再详细介绍它们之间以及它们与空间群之间的关系。



也就是说每个晶格系统（Lattice System）容纳一到几个晶格（即布拉菲格子），一共容纳 14 个晶格。每个晶系所容纳几个点群，一共容纳 32 种点群。在同一个晶系（Crystal System）或者晶格系统（Lattice System）容纳的点群与晶格之间，可以相互组合，从而构造出空间群。晶系（Crystal System）和晶格系统（Lattice System）处在中心的位置向两边辐射，两边可交叉。

在产生 14 种布拉菲格子的过程中，我们总是针对某个晶系/晶格系统[9]里晶胞的六面体，在体心、面心这些高对称点添加与六面体顶点相同的重复单元（原

[9] 更准确的说，应该是晶格系统 Lattice System。这里为了方便讨论，先从晶系 Crystal System 开始说。14 种布拉菲格子都出现以后，这种差别其实已经可以体现了。在后面讲空间群的时候，我们会用一个表格进行更为详细的说明。

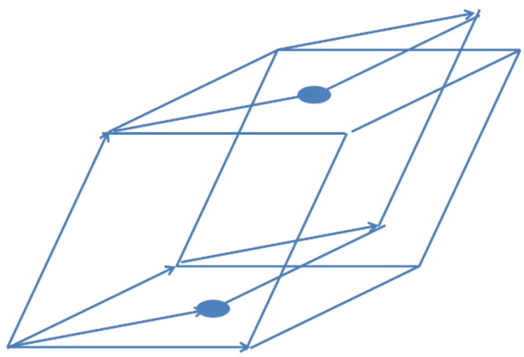
子或原子的集合）使晶格发生变化。7 种晶系/晶格系统，通过添加这些修饰，我们可以产生 14 种布拉菲格子。对于这种修饰，我们有两个要求：

1. 修饰完了以后不改变晶胞的点群对称性（因此修饰都在体心、单面心、或全面心这些高对称点进行）；
2. 修饰完了以后，晶胞不能被进一步简化为更小的可反映点群对称性的晶胞。

下面，我们以三斜和单斜为例，讲一下这 14 种布拉菲格子是怎么出来的：

1. 三斜晶系：特点是$a \neq b \neq c$，$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$。

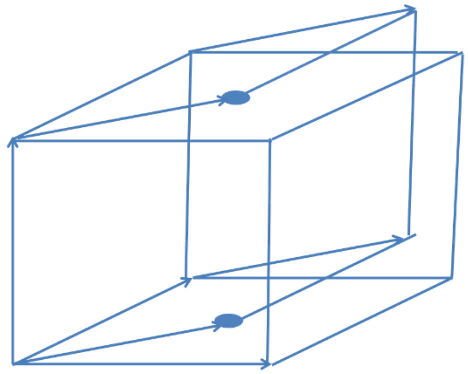
   在这样的晶胞中，如果我们在体心、面心加修饰的话，我们总能找到更小的反应点群对称性的晶胞，比如下图：

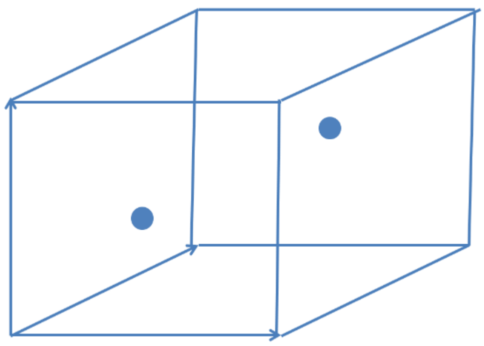
   结果就是对三斜晶系来说，修饰起不到任何作用，它所对应的布拉菲格子只有一个。在以后的讨论中，我们会把只在顶点有东西的格子称为简单格子，记为 P 格子。

2. 单斜晶系：特点是$a \neq b \neq c$，$\alpha = \beta = 90^{\circ}$，$\gamma \neq 90^{\circ}$。

   在这样的一个晶系中，除了 P 格子，如果我们在上下表面的中心加一个修饰，我们可以回到另一个 P 格子，如图：

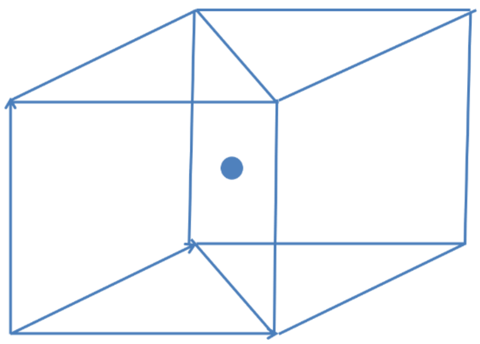


如果我们在一个侧面的面心加修饰，那我们可以得到一个新的格子，记为 A 面心：

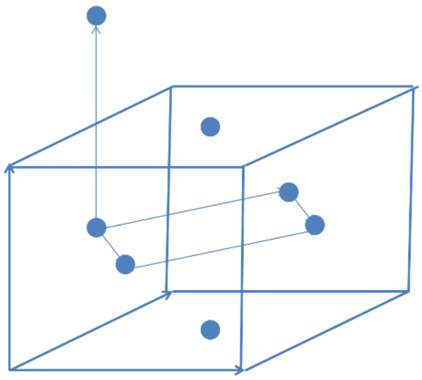


在另一个侧面的面心加修饰是同一个效果。

在体心加修饰的话，我可以把过体心的面当作一个面心，回到侧面面心修饰的状态：



如果在三个侧面的面心同时加修饰，可以通过重新选项 a、b 轴回到体心：



再由体心回到一个侧面心的情况。

综合一下，对单斜晶体，布拉菲格子就是 P 与 A 两种。

3. 正交晶系：特点是$a \neq b \neq c$，$\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$。

P 格子单独存在；

随便在哪个面心加个修饰，也单独存在；

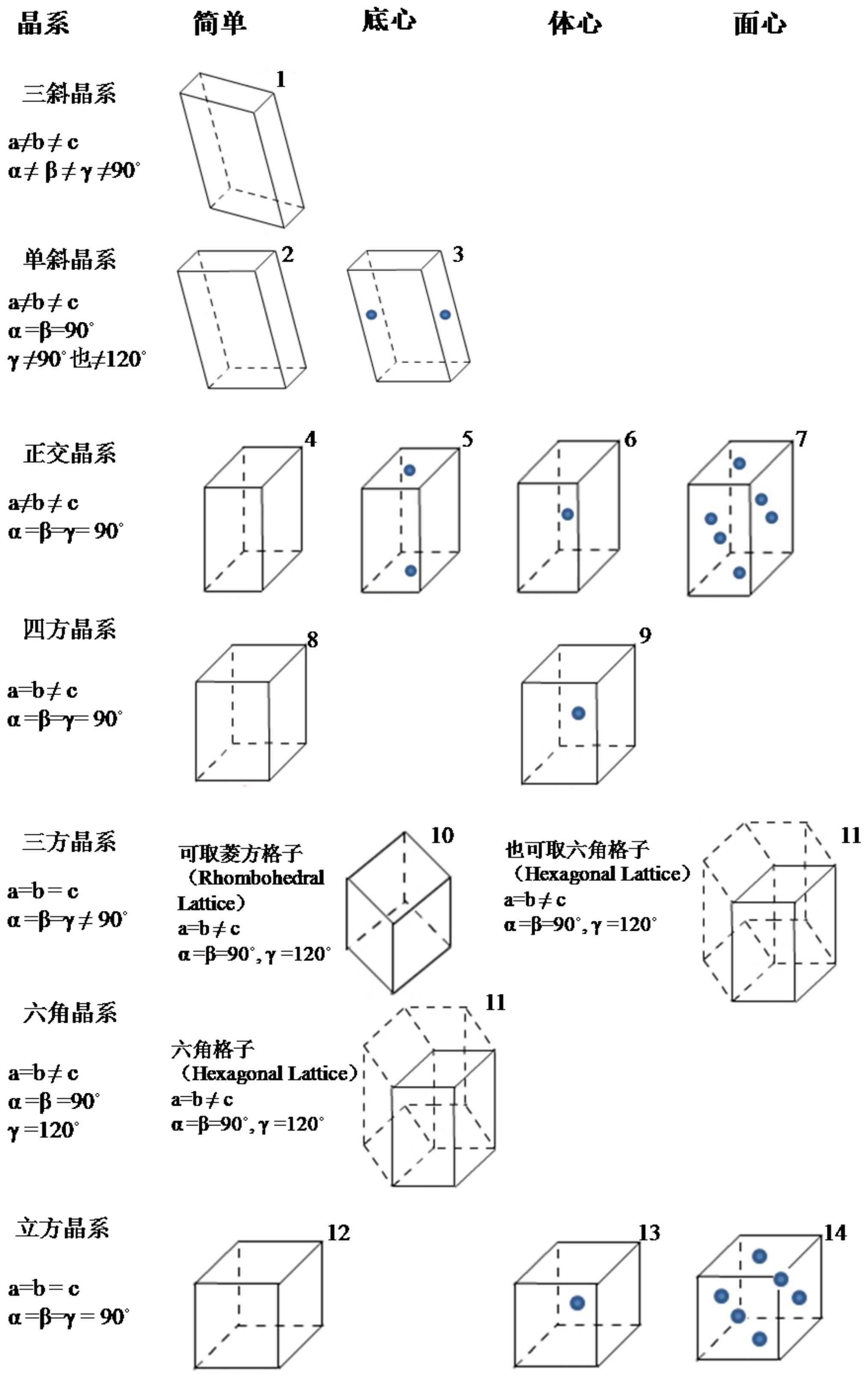
体心加修饰，单独存在；

三个面心同时加修饰，也单独存在；

所以对正交格子，有 P、A、I、F 四种布拉菲格子。

依次重复下去，最终我们会得到这样一张图：

布拉菲格子



一共是 14 种布拉菲格子。

其中，前面提到的晶系（Crystal System）与晶格系统（Lattice System）的差别在这里就有体现。除了三方晶系与六角晶系，其它五种晶系 Crystal System 与 Lattice System 两个概念完全重合，1-9、12-14 共 12 种格子分别属于某一个晶系，没有模糊的地方。

对三方和六角晶系（Crystal System），在 Lattice System 的概念中，它们的**集合**对应菱方格子（Rhombohedral Lattice）与六角格子（Hexagonal Lattice）的**集合**。但相互之间个体并不对应个体。在三方晶系（Crystal System）的晶体中，依据格子的选取，有些在晶格系统（Lattice System）中属于菱方格子（Rhombohedral Lattice）的晶体，有些属于六角格子（Hexagonal Lattice）的晶体。六角晶系（Crystal System）的晶体对应的都是晶格系统中属于六角格子（Hexagonal Lattice）的晶体。换句话说，晶系中的三方晶系材料一部分具有菱方格子，一部分具有六角格子。而六角晶系材料都是六角格子。用表格的方式表达，就是：

<table>
<tr><th>晶系</th><th>点群</th><th>布拉菲格子</th><th>晶格系统</th></tr>
<tr><td>三斜</td><td>2（S_2、C_1）</td><td>1</td><td>三斜</td></tr>
<tr><td>单斜</td><td>3（C_{2h}、C_2、C_{1h}）</td><td>2</td><td>单斜</td></tr>
<tr><td>正交</td><td>3（D_{2h}、D_2、C_{2v}）</td><td>4</td><td>正交</td></tr>
<tr><td>四方</td><td>7（D_{4h}、C_4、S_4、D_4、C_{4v}、C_{4h}、D_{2d}）</td><td>2</td><td>四方</td></tr>
<tr><td rowspan="2">三方 Trigonal</td><td rowspan="2">5（D_{3d}、S_6、C_3、C_{3v}、D_3）</td><td>1</td><td>菱方 Rhombohedral</td></tr>
<tr><td rowspan="2">1</td><td rowspan="2">六角 Hexagonal</td></tr>
<tr><td>六角 Hexagonal</td><td>7（D_{6h}、C_6、C_{3h}、C_{6h}、C_{6v}、D_6、D_{3h}）</td></tr>
</table>

立方	5（O_h、T、O、T_h、T_d）	3	立方
共 7 种	共 32 种	共 14 种	共 7 种

最后一部分我们要讨论的是 Hermann-Mauguin 符号，也是目前点群空间群描述中的国际符号。目前人们是在对分子对称性描述的时候，倾向于用熊夫利符号；对晶体结构描述的时候，倾向于用 Hermann-Mauguin 符号，因为后者对平移对称性的描述更方便。

这个国际符号的基本特征是用不等价的轴或平面来标记晶体的对称性。这个轴包含纯转动轴与转动反演轴，纯转动轴是 1、2、3、4、6，转动反演轴是$\bar{1}$、$\bar{2}$、$\bar{3}$、$\bar{4}$、$\bar{6}$。在熊夫利符号中，我们用转动反射面S_1、S_2、S_3、S_4、S_6，它们与转动反演轴的关系是：$S_1=\bar{2}$、$S_2=\bar{1}$、$S_3=\bar{6}$、$S_4=\bar{4}$、$S_6=\bar{3}$（下去自己画图理解）。由这个关系，我们就知道 32 种点群在国际符号下分别是：

1. S_2、S_4、S_6：$\bar{1}$、$\bar{4}$、$\bar{3}$；
2. C_1、C_2、C_3、C_4、C_6：1、2、3、4、6；
3. D_2：222；

   D_3：32（有一组同类的 2 次轴与主轴垂直）；

   D_4：422（两组二次轴不同类）；

   D_6：622（两组二次轴不同类）；
4. T：23（主轴是 2 次轴，3 次轴都同类）；

   O：432（主轴 4 次轴，3 次、2 次都同类）；
5. C_{1h}：m；

   C_{2h}：2/m（主轴为 2 次轴，m 与之垂直）；

   C_{3h}（说白了是S_3）：$\bar{6}$；

C_{4h}：$4/m$；

C_{6h}：$6/m$；

6. C_{2v}：mm2（过主轴两类与水平面垂直的反射面）；

C_{3v}：3m（三个反射面同类）；

C_{4v}：4mm（反射面不同类）；

C_{6v}：6mm（反射面不同类）；

7. $D_{2h} = D_2 \cup ID_2$：$2/m\,2/m\,2/m$（三个 2 阶轴都有一个与之垂直的反射面，且相互不同类）；

$D_{4h} = D_4 \cup ID_4$：$4/m\,m\,m$（既有与主轴垂直，又有过主轴的发射面，且过主轴的反射面分两类）；

$D_{3h} = D_3 \cup I(D_6 - D_3)$：$\bar{6}$ m 2（$\bar{6}$为主轴，m 为过主轴反射面，2 为二阶轴）；

$D_{6h} = D_6 \cup ID_6$：$6/m\,2/m\,2/m$（6/m 代表 6 阶轴以及与之垂直的反射面，2/m 代表 2 阶轴以及与之垂直的反射面，2/m 有两类）；

8. $D_{2d} = D_2 \cup I(D_4 - D_2)$：$\bar{4}$ 2 m；

$D_{3d} = D_3 \cup ID_3$：$\bar{3}$ 2/m；

9. $T_h = T \cup IT$：2/m $\bar{3}$；

$T_d = T \cup I(O - T)$：$\bar{4}$ 3 m；

10. $O_h = O \cup IO$：4/m $\bar{3}$ 2/m；

现在我们把我们知道的晶系，点群的熊夫利、国际符号做个汇总，写成下面这个表格：

晶体点群按晶系分类

晶系（全面对称群）	熊夫利符号	国际符号

三斜系（S_2）	S_2 C_1	$\bar{1}$ 1
单斜系（C_{2h}）	C_{2h} C_2 C_{1h}	2/m 2 M
正交系（D_{2h}）	D_{2h} D_2 C_{2v}	2/m 2/m 2/m 222 mm2
四角系（D_{4h}）	D_{4h} C_4 S_4 D_4 C_{4v} C_{4h} D_{2d}	4/m m m 4 $\bar{4}$ 422 4mm 4/m $\bar{4}$ 2 m
三方系（D_{3d}）	D_{3d} S_6 C_3 C_{3v} D_3	$\bar{3}$ 2/m $\bar{3}$ 3 3m 32
六角系（D_{6h}）	D_{6h} C_6 C_{3h} C_{6h} C_{6v} D_6 D_{3h}	6/m 2/m 2/m 6 $\bar{6}$ 6/m 6mm 622 $\bar{6}$ m 2
立方系（O_h）	O_h T O T_h T_d	4/m $\bar{3}$ 2/m 23 432 2/m $\bar{3}$ $\bar{4}$ 3 m

你把这个表看懂了，在文献中跟晶体点群相关的东西你也就都明白了。之后在这个讲义中我想提一下的一个概念是极射赤面投影图。它是对点群对称性的一种图形表述。理解这种图，大家抓住 6 点，就很容易理解：

1. 极射赤面投影图是什么样的图?

它是用球形图 Sr 的赤道面来描述点群对称性的图。

它的来源是球形图 Sr，这个球的南北极连线 S-N 是晶体点群的主轴。

极射赤面投影图显示的，是赤道面上的东西，这个需要把球面上的东西往赤道面做投影，因此叫极射赤面投影图，也叫测地投影图。

2. 怎么描述?

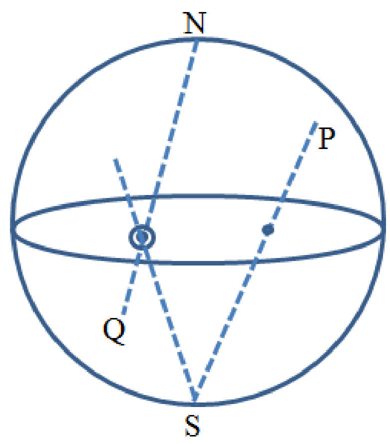
用两个赤面来描述。一般左边那个描述的是球面上的任意一点，在点群 G 的所有操作下形成的轨道的投影；右边那个描述的是 G 的所有对称元素，在赤道面的投影。

3. 左边那个投影图怎么画?

它画的必须是 Sr 上面的一个普通的点，在 G 中所有元素的作用下，得到的 G 轨道。

所谓普通，就是这个点在 G 中的迷向子群必为{E}，这样它的 G 轨道才能把 G 中所有元素反映出来。

当这个轨道上的点 P 在 Sr 的北半球时，我们做投影的时候是把这个点与南极连起来，连线与赤面的交点用实心点表示。



当这个轨道上的点 Q 在 Sr 的南半球时，我们做投影的时候是把它与北极连

起来，连线与赤面的交点用空心的圈表示。

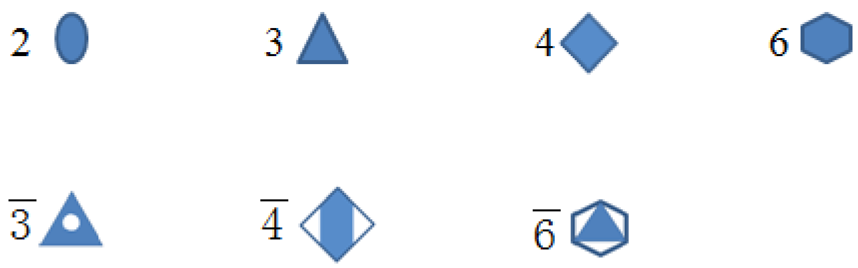
当赤面上出现◎时，说明这个轨道上在南北半球有可以被镜面反射联系起来的点。

之后是右边这个反应对称元素的图怎么画，注意三点：

4. 对反射面，它与南北半球都有交线，我们在赤面上反映的只是它与北半球的交线的投影，画成粗线。

   作为一个结果：与水平面垂直的反射面在赤面上反映为直的粗线；水平的反射面反映为绕赤道的粗圆周；斜的反射面反映为粗的曲线。

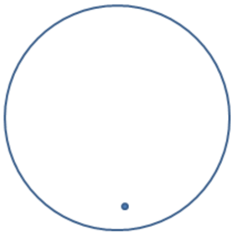
5. 转动轴与转动反演轴，类似，之取它们与北半球的交点做投影。轴水平时，赤面圆周的相对的两端各出现一次。在这个过程中，转动轴、转动反演轴的符号分别是：



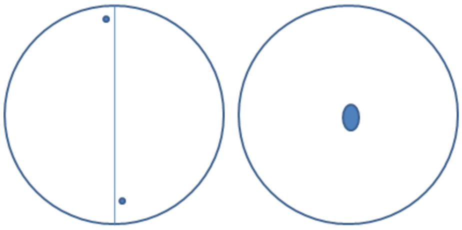
6. 右边图中应标出点群的所有对称元素，这个与国际符号中只写出能够确定点群的最小的对称元素不同。

看几个例子：

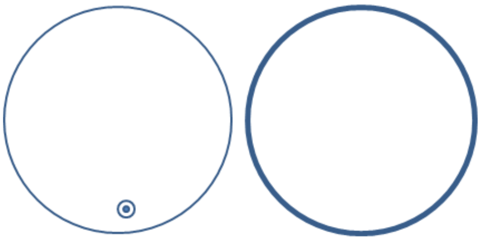
1. C1 群，没有非 E 对称元素，只画左边一个图就可以。任意一点，轨道上也就一点，可以画为：



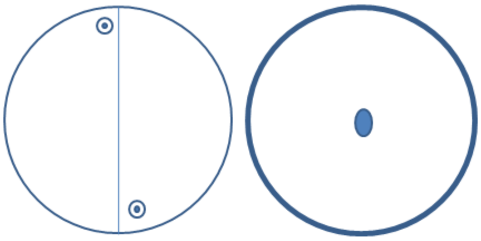
2. C2 群，有一个二次轴，Sr 上任意一点的轨道有两个点，转 180 度，所以是：



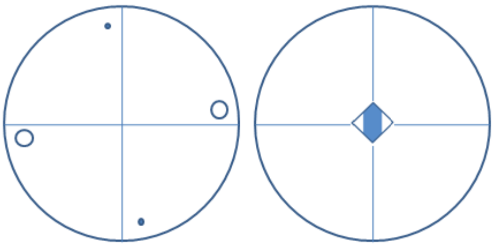
3. $C_{1h} = C_1 \cup I(C_2 - C_1)$，对应的图形是：



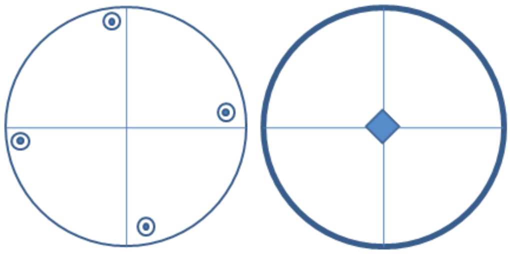
4. $C_{2h} = C_2 \cup IC_2$，对应的图形是：



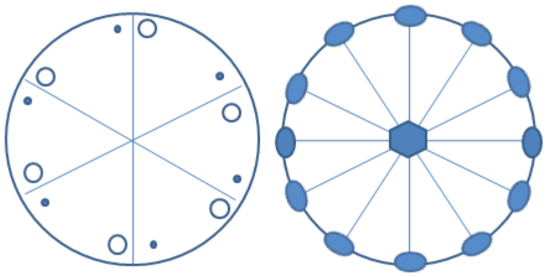
5. $S_4 = C_2 \cup I(C_4 - C_2)$，对应的图形是：



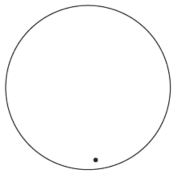
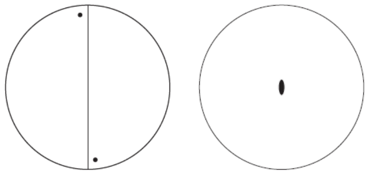
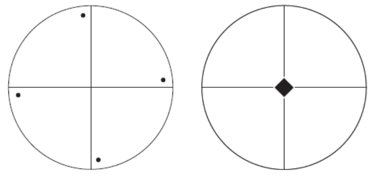
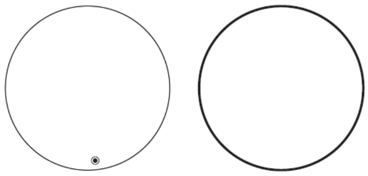
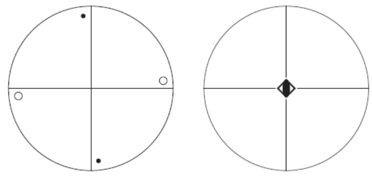
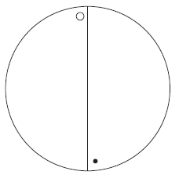
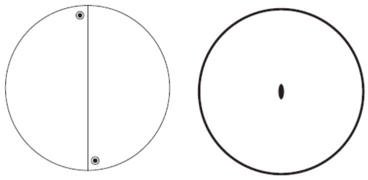
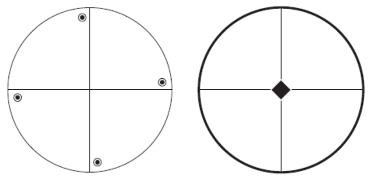
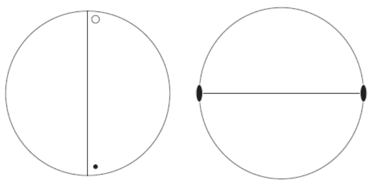
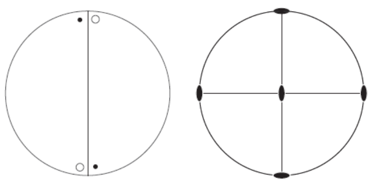
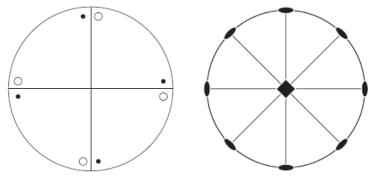
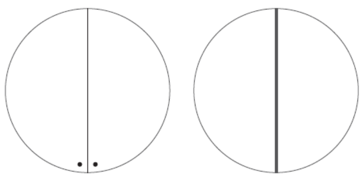
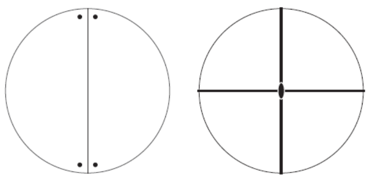
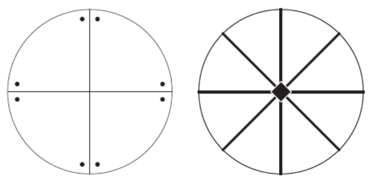
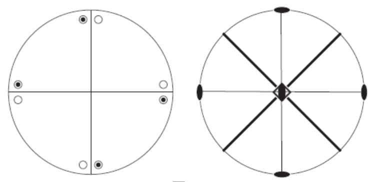
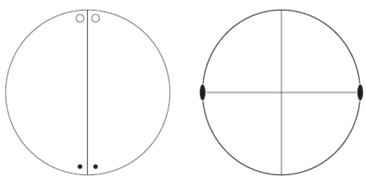
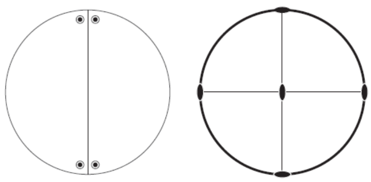
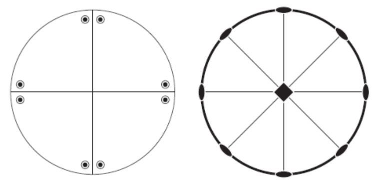
6. $C_{4h} = C_4 \cup IC_4$，对应的图形是：

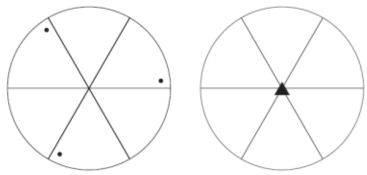
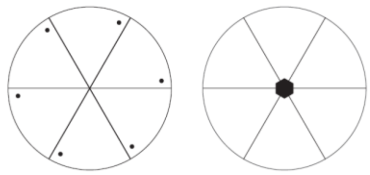
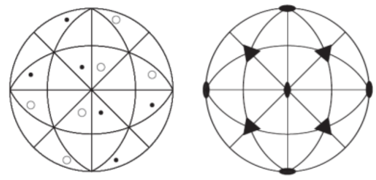
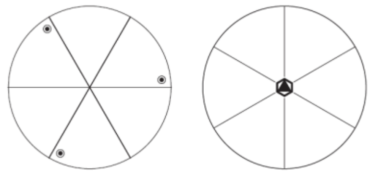
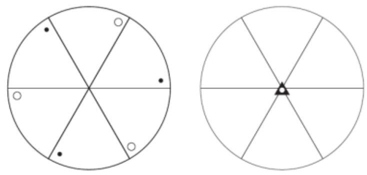
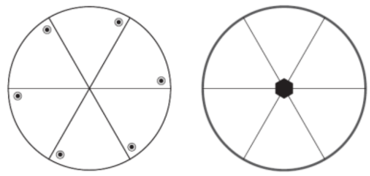
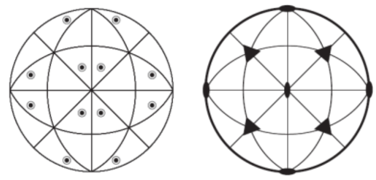
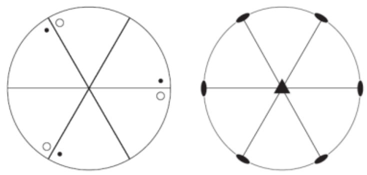
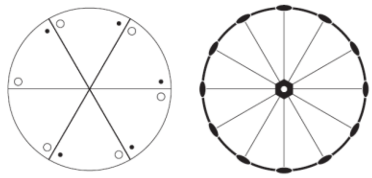
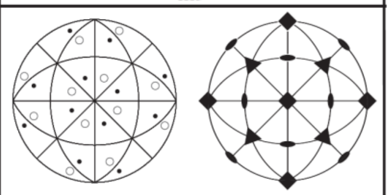
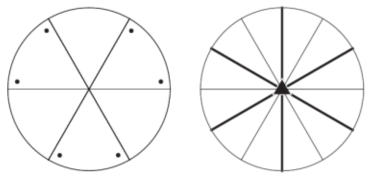
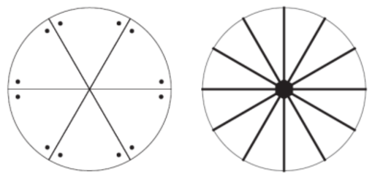
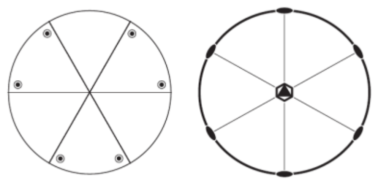
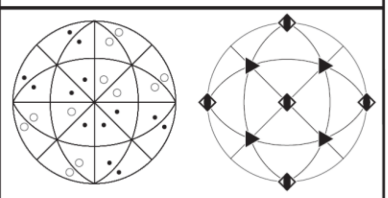
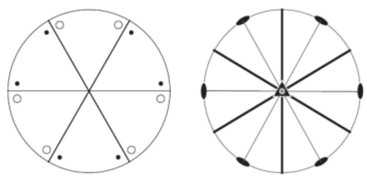
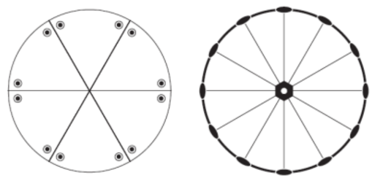
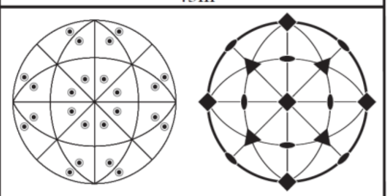


7. D_6，对应的图形是:



其他的投影图可总结为：

	三　斜　系	单斜系（第一组）	四　角　系
X	 1	 2	 4
X̄（偶）		 m	 $\bar{4}$
X（偶）加对称中心及X̄（奇）	 $\bar{1}$	 2/m	 4/m
	单斜系（第二组）	正　交　系	
X2	 2	 222	 422
Xm	 m	 mm2	 4mm
X̄2（偶）或X̄m（偶）			 $\bar{4}$2m
X2或Xm加对称中心及$\bar{X}$m（奇）	 2/m	 mmm	 4/mmm

	三角系	六角系	立方系
X	 3	 6	 23
$\overline{X}$ （偶）		 m	
X （偶） 加对称 中心及 $\overline{X}$ （奇）	 $\bar{3}$	 6/m	 m3
$\overline{X}2$	 32	 622	 432
Xm	 3m	 6mm	
$\overline{X}2$ （偶） 或 $\overline{X}m$ （偶）			 $\bar{4}3m$
X2 或 Xm 加对称 中心及 $\overline{X}m$ （奇）	 $\bar{3}m$	 6/mmm	 m3m

（图的内容摘自韩其智、孙洪洲老师教材，新图由张小伟、张雪峰同学制作）

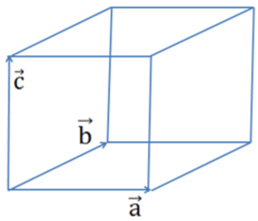
最后讲一下空间群，这是一个什么概念呢？

- 点群，大家都知道是只考虑了晶体的转动对称性的群，对称操作为 R；
- 空间群呢，是在考虑了晶体转动的基础上，同时考虑它的平移不变性，从而得到的所有对称操作形成的群。对称操作为$\{R|\vec{t}\}$，晶体在$\{R|\vec{t}\}$操作下回到自身。

举个例子，前面我们讲晶体的时候，我们说了它根据所允许的点群，可分成 7 种晶系。同时，我们还可以利用 7 种晶格系统来划分 14 种布拉菲格子。我们前面提到，点群和格子之间可以相互组合。

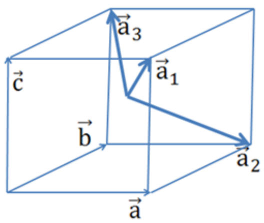
以立方晶系为例，它允许简单、体心、面心三种格子，同时它允许T、O、T_h、T_d、O_h五种点群。当这个晶体的点群为 T 是，我们可以去简单、体心、面心三种格子，这样我们得到的三种$\{R|\vec{t}\}$的组合是不是肯定就不一样了？（这里是 R 相同，$\vec{t}$不同，见下图）

对P格子



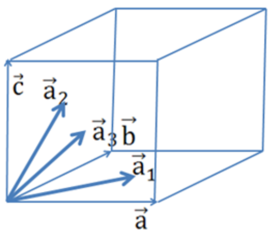
空间群元素为：$\{R|n_1\vec{a}+n_2\vec{b}+n_3\vec{c}\}$

对B格子



空间群元素为：$\{R|n_1\vec{a}_1+n_2\vec{a}_2+n_3\vec{a}_3\}$

对F格子



空间群元素为：$\{R|n_1\vec{a}_1+n_2\vec{a}_2+n_3\vec{a}_3\}$

同样晶体点群是 O 时，我们可以做同样的处理，以此类推，对立方晶系，我们如

果只考虑这种简单的组合，我们是可以得到$3 \times 5 = 15$种空间群。

现在我们把前面提到的晶系、布拉菲格子、点群的相互关系拿出来，做一个简单的估计：

<table>
<tr><th>晶系</th><th>点群</th><th>布拉菲格子</th><th>晶格系统</th><th>简单空间群</th></tr>
<tr><td>三斜</td><td>2</td><td>1</td><td>三斜</td><td>2</td></tr>
<tr><td>单斜</td><td>3</td><td>2</td><td>单斜</td><td>6</td></tr>
<tr><td>正交</td><td>3</td><td>4</td><td>正交</td><td>12</td></tr>
<tr><td>四方</td><td>7</td><td>2</td><td>四方</td><td>14</td></tr>
<tr><td rowspan="2">三方
Trigonal</td><td rowspan="2">5</td><td>1</td><td>菱方
Rhombohedral</td><td>5</td></tr>
<tr><td rowspan="2">1</td><td rowspan="2">六角
Hexagonal</td><td rowspan="2">5
7</td></tr>
<tr><td>六角
Hexagonal</td><td>7</td></tr>
<tr><td>立方</td><td>5</td><td>3</td><td>立方</td><td>15</td></tr>
<tr><td>共 7 种</td><td>共 32 种</td><td>共 14 种</td><td>共 7 种</td><td>共 66 种</td></tr>
</table>

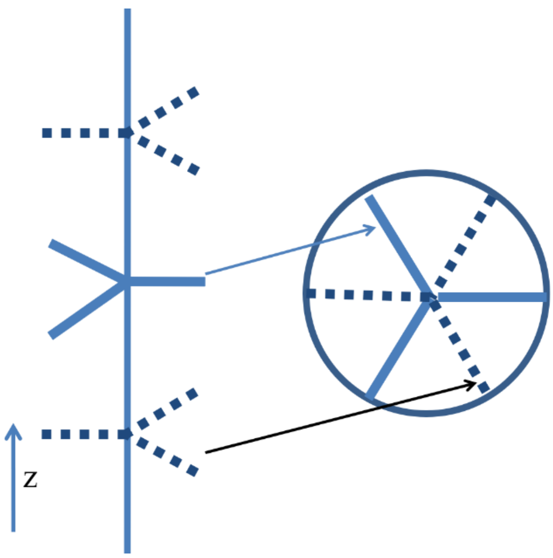
这种最简单的组合可以给出 66 种空间群，在这些空间群里面，平移矢量$\vec{t}$是平移周期性最小重复单元的整数倍。对所有 R，取$\vec{t}$=0，也就是不做平移时，$\{R|0\}$都是空间群中的元素。这样的空间群我们称为简单空间群。

不过需要说明的是上面表格里面我们对简单空间群的计算方式还是太简单了。实际上简单空间群并不止我们上面算的 66 种，应该是 73 种。这个原因是对有些布拉菲格子，它与点群的结合方式不止一种。比如正交晶系的底心格子，我们再算布拉菲格子的时候，把底心和侧面面心算成是一种格子，但当它与$C_{2v} =$

$C_2 \cup I(D_2 - C_2)$结合的时候，如果取主轴为 z 轴，这两种格子给出的空间群是不一样的。对我们这 7 种晶系，类似情况可以再多给出 7 种简单空间群。所以总的简单空间群个数是 73 个。

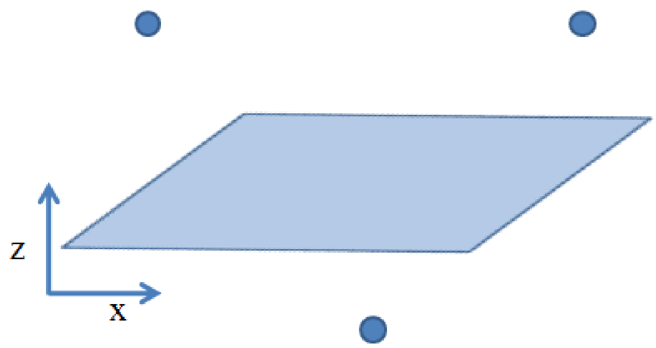
除了这些简单空间群，在晶体中，$\{R|\vec{t}\}$操作还存在另外一种情况，就是$\vec{t}$并不是空间平移对称性最小重复单元的整数倍。而是它的分数倍，比如下面两种情况：

1. 螺旋轴（Screw axis），说的是存在这样的操作，我相对于某个轴转一定角度之后，再沿着这个轴做一个平移，系统回到了与原来不可分辨的状态。比如：



这样黄色和蓝色是用来区别 z 轴不同的高度，它们代表的结构单元是一样的。右边是俯视图。纯平移的周期性是 a，但转动 60 度再做 a/2 的平移也是系统的对称操作。它所对应的空间群元素$\{R|\vec{t}\}$中的 R 不可以脱离$\vec{t}$单独存在。与之相应，拥有这样操作的空间群也不属于简单空间群。

2. 滑移平面（Slide plance），指的是对一个平面先做反射，再平移一个$\vec{t}/m$，比如：



这里沿 x 轴方向平移 a 是对称操作，平移 a/2 不是。但这个 a/2 与镜面反射结合就是了。

加上这些对称操作后，空间群的情况就会多很多。这种群中对称元素平移部分包含平移对称性分数倍情况的空间群，称为非简单空间群，它有 157 种。两者加在一起是 230 种。弄明白这个事情，是 19 世纪下半叶欧洲的一些晶体学家、数学家的研究热点，但大家可以想象这个其实是非常具有挑战性的。这个里面最早做出工作的是个德国数学家，叫 Leonhard Sohncke，时间是 1879 年，他推出了 66 种空间群。这个和我们前面讲的通过点群和格子的组合生成的 66 种不完全一样，因为当时人们还没有我们现在的这种理解。他的 66 种空间群里面，还有一些重复的情况。但这个工作之后引起了德国人熊夫利和俄国人 Fedorov 的注意，他们之后是在相互独立，但又有一些交流的情况下，分别于 1891 年与 1892 年发表专著解释了空间群的 230 种情况。这 230 种空间群，根据前面提到的晶系、晶格系统的划分情况是:

晶系	点群	空间群	布拉菲格子	晶格系统
三斜	2	2	1	三斜
单斜	3	13	2	单斜
正交	3	59	4	正交

四方	7	68	2	四方
三方 Trigonal	5	7	1	菱方 Rhombohedral
		18	1	六角 Hexagonal
六角 Hexagonal	7	27		
立方	5	36	3	立方
共 7 种	共 32 种	共 230 种	共 14 种	共 7 种

现在人们需要用到空间群的时候，一般就是先知道它的国际符号（Hermann-Mauguin 符号），然后查这个群中的对称操作$\{R|\vec{t}\}$，通过这些对称操作，就可以把晶体结构彻底搞清。同时这些对称操作$\{R|\vec{t}\}$对我们理解系统的电子态分布也非常有用，下一章我们会做详细介绍。

空间群的完整的对称操作的表格，有一个很好的网站，叫 Bilbao Crystallographic Server（在 google 中输入 Bilbao Crystal 就可以找到）[24]。进入这个网站后，有个 GENPOS 的选项，点入后直接输入你的空间群序号，比如 122、150，所有的对称操作就出来了。在这个网站中，你还可以看具有每个空间群的晶体的布里渊区的样子，以及很多其它你们以后研究中可以用到的信息。最近，这个网站还增加了关于后面我们要讲的双群以及这个讲义中并不触及但在磁性材料物性研究中很有用的磁空间群的内容。

和这个网站差不多，英国也有一个网站[10]：

http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/large/sgp.htm

里面有类似的功能，这两个网站都建议收藏。

有了这些对称操作后，在读很多文献的时候，他们给晶体结构只会给晶体中

[10] 这个网站是某一年的一个学生（来自北京大学量子中心的陈玉琴同学）告诉我的。

不等价的原子的位置与晶体空间群。你们可以做的事情是对每个原子，用这些空间群对称操作操作一遍，如果得到的原子已经出现了，就掠过，如果没有，就保存，从而得到具体的晶体结构。现在，一些通行的材料模拟方面的软件（比如Material Studio）也会提供类似功能。应该说对于需要应用此方面知识的从业人员，辅助工具越来越强大了。只要我们能够理解这些基本原理，在应用这些知识的时候，我们拥有前人无法想象的友善的软环境。

3.5 晶体点群的不可约表示

最后一部分是晶体点群的不可约表示。在学完前两章之后，我们后面讲任何一种具体的群，基本都是这个路子。先讲这个群是什么，再分析它有多少种群，每种群的分类情况，最后看它们的不等价不可约表示是什么？为什么要看这些不等价不可约表示，我们下一章《群论与量子力学》中会做详细说明。

找所有晶体点群的不等价不可约表示这个任务乍一看挺吓人的，因为我们有32 种晶体点群。但实际上，我们之前讲的一些定理可以在这里大大简化这个问题。这些定理里面的第一个是第二章里面的：直接群$\mathrm{G}=\mathrm{G}_1\otimes\mathrm{G}_2$的所有不等价不可约表示，可以由$\mathrm{G}_1$与$\mathrm{G}_2$的不等价不可约表示给出。第二个是我们这章的定理3.3：点群三种情况，纯转动、纯转动与{E、I}的直积、与某个纯转动同构的不含I 的第二类点群。这就意味着对点群，只要我们把所有的第一类点群的不等价不可约表示搞明白了，我们就可以很自然的通过定理 3.3 的第二点与第三点得到所有的第二类点群的不等价不可约表示。

第一类点群有 11 种：C_1、C_2、C_3、C_4、C_6、D_2、D_3、D_4、D_6、T、O。下面我们就一一地把这 11 种情况过一遍。

1. 先看 C_n 群，这些群都是循环群，我们前面说过，n 阶就有 n 个类，也就是 n

个不等价不可约表示，对生成元 a，它的表示是：

$$A^{p}(a)=\exp[(p-1)2\pi i/n]$$

其中 p 是不等价不可约表示的 index，为 1、2、…、n 中的一个数。

这样 11 种第一类点群的前五种情况就包括了。

2. 第六种情况是 D_2 群，它有四个元素：e、绕 z 轴转π角的操作 a、绕 x 轴转π角的操作 b、绕 y 轴转π角的操作 c。

{e、a}是它的不变子群，因为 z 这个轴不能通过群中其它元素变到 x 与 y 轴。同理{e、b}也是，且 ab=ba，这样的话$D_2=${e、a}$\otimes${e、b}。{e、a}与{e、b}的特征标表为：

	e	A
1	1	1
1	1	-1

那么D_2的特征标表就是：

	e(ee)	a(ae)	b(eb)	c(ab)
1	1	1	1	1
1	1	-1	1	-1
1	1	1	-1	-1
1	1	-1	-1	1

3. D_3群，有三个类，6 个元素，C_3是它的不变子群，含{e、d、f}，D_3/C_3同构与二阶循环群，于是有了 A_2这个表示。再由正交定理，得 A_3。整体的特征标表是：

	1{e}	2{d}	3{a}

A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
A_3	2	-1	0

4. D_4群，五个类，为：

$\{E\}$、$\{C_4、C_4^3\}$、$\{C_4^2\}$、$\left\{C_2^{(1)}、C_2^{(3)}\right\}$、$\left\{C_2^{(2)}、C_2^{(4)}\right\}$

$$S_1^2+S_2^2+S_3^2+S_4^2+S_5^2=8$$

解为：

$$S_1=S_2=S_3=S_4=1、S_5=2$$

D_4 群有不变子群：$\{E、C_4、C_4^2、C_4^3\}$、$\{E、C_4^2、C_2^{(1)}、C_2^{(3)}\}$、$\{E、C_4^2、C_2^{(2)}、C_2^{(4)}\}$，这样的话由每个不变子群产生的商群都与二阶循环群同构，可以得到D_4群到二阶循环群的三个同态映射，其中恒等部分相同，非恒等部分给出三个一维非恒等表示。

之后再由正交关系确认最后一个二维表示，得到特征标表为：

	$1\{E\}$	$1\{C_4^2\}$	$2\{C_4\}$	$2\{C_2^{(1)}\}$	$2\{C_2^{(2)}\}$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
A_3	1	1	-1	1	-1
A_4	1	1	-1	-1	1
A_5	2	-2	0	0	0

5. D_6，有 12 个元素，为：

$$\{E、C_6^2、C_6^4、C_2^{(1)}、C_2^{(3)}、C_2^{(5)}；C_6^1、C_6^3、C_6^5、C_2^{(2)}、C_2^{(4)}、C_2^{(6)}\}$$

其中前六个是D_3群，它是D_6的不变子群，后面 6 个是它的陪集。在这个陪

集里面C_6^3自成一类（它与其它六次轴转动角度不同，与二次轴转动虽角度相同但转轴无法通过群中元素联系起来），因此{E、C_6^3}也是一个不变子群，D_6=D_3⊗{E、C_6^3}。

6. T 群，有{E}、{$C_2^{(1)}$、$C_2^{(2)}$、$C_2^{(3)}$}、{C_3'、C_3''、C_3'''、C_3''''}、{$C_3'^2$、$C_3''^2$、$C_3'''^2$、$C_3''''^2$}四个类。

$$S_1^2+S_2^2+S_3^2+S_4^2=12$$

解为:

$$S_1=S_2=S_3=1、S_4=3$$

T 的不变子群是: {E、$C_2^{(1)}$、$C_2^{(2)}$、$C_2^{(3)}$}，把 T 和它做商群，可以产生一个三阶循环群，三阶循环群有三个一维表示，所以给出 A_1 到 A_3。最后一个三维表示由正交关系得到:

	{E}	3{$C_2^{(1)}$}	4{C_3'}	4{$C_3'^2$}
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	ε	$ε^2$
A_3	1	1	$ε^2$	ε
A_4	3	-1	0	0

7. 最后一个，是这节最难的一个，O 群，有 24 个元素，分五类:

{E}、{$C_2^{(1)}$、$C_2^{(2)}$、…、$C_2^{(6)}$}、{C_3'、C_3''、C_3'''、C_3''''、$C_3'^2$、$C_3''^2$、$C_3'''^2$、$C_3''''^2$}、{C_4'、C_4''、C_4'''、$C_4'^3$、$C_4''^3$、$C_4'''^3$}、{$C_4'^2$、$C_4''^2$、$C_4'''^2$}

$$S_1^2+S_2^2+S_3^2+S_4^2+S_5^2=24$$

解为:

$$S_1=S_2=1、S_3=2、S_4=S_5=3$$

O 有不变子群 T，包含:

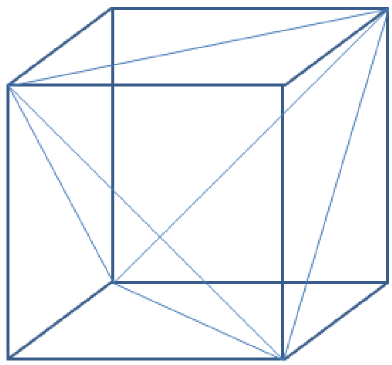
$\{E、C_3'、C_3''、C_3'''、C_3''''、C_3'^2、C_3''^2、C_3'''^2、C_3''''^2、C_4'^2、C_4''^2、C_4'''^2\}$

因此通过 O/T 商群与二阶循环群的同构，可以得到两个一维表示。

二维表示怎么办？我们可以利用前面讲的诱导表示的概念。

我们想用 T 群，这个 O 群的子群的非恒等的一维表示 A_2，得到 O 群的一个二维表示。我们要做的事情，就是把 O 分成 T 与它的陪集，$O=\{g_0T、g_1T\}$，这里 g_0 是单位元素，g_1 有多种选择，我们取 $g_1=C_2^{(1)}$。

T 群与 O 群的关系是：



我们利用诱导表示的表示矩阵：

$$U^B(g)=\begin{pmatrix}\dot{B}(g_0gg_0^{-1}) & \dot{B}(g_0gg_1^{-1})\\ \dot{B}(g_1gg_0^{-1}) & \dot{B}(g_1gg_1^{-1})\end{pmatrix}$$

其中：

$$\dot{B}(g_igg_j^{-1})=\begin{cases}A_2(g_igg_j^{-1}) \text{if} g_igg_j^{-1}\in T\\ 0 \qquad\qquad\qquad \text{otherwise}\end{cases}$$

而：

$$A_2(g_igg_j^{-1})=\begin{cases}1 \quad \text{if} \quad g_igg_j^{-1}\in\{E、C_4'^2、C_4''^2、C_4'''^2\}\\ \varepsilon \quad \text{if} \quad g_igg_j^{-1}\in\{C_3'、C_3''、C_3'''、C_3''''\}\\ \varepsilon^2 \quad \text{if} \quad g_igg_j^{-1}\in\{C_3'^2、C_3''^2、C_3'''^2、C_3''''^2\}\end{cases}$$

再利用公式（2.12）：

$$\chi^{\mathrm{U}}(\mathrm{g})=\frac{1}{m}\sum_{t\in O}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tgt}^{-1})$$

这里 m 是 T 的阶，我们很容易得到：

$$\chi^{U}(\mathrm{E})=\frac{1}{12}\sum_{t\in O}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tEt}^{-1})=\frac{1}{12}\cdot 24\cdot 1=2$$

$$\chi^{U}(\mathrm{C}_3')=\frac{1}{12}\sum_{t\in O}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tC}_3'\mathrm{t}^{-1})=\frac{1}{12}\cdot 12\cdot(\varepsilon+\varepsilon^2)=-1$$

$$\chi^{U}(\mathrm{C}_4')=\frac{1}{12}\sum_{t\in O}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tC}_4'\mathrm{t}^{-1})=0$$

$$\cdots\cdots\mathrm{tC}_4'\mathrm{t}^{-1}\notin\mathrm{T}$$

$$\chi^{U}(\mathrm{C}_4'^2)=\frac{1}{12}\sum_{t\in O}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tC}_4'^2\mathrm{t}^{-1})=\frac{1}{12}\cdot 24\cdot 1=2$$

$$\cdots\cdots\mathrm{tC}_4'^2\mathrm{t}^{-1}\in\{\mathrm{C}_4'^2、\mathrm{C}_4''^2、\mathrm{C}_4'''^2\}$$

$$\chi^{U}\left(\mathrm{C}_2^{(1)}\right)=\frac{1}{12}\sum_{t\in O}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}\left(\mathrm{tC}_2^{(1)}\mathrm{t}^{-1}\right)=0$$

$$\cdots\cdots\mathrm{tC}_2^{(1)}\mathrm{t}^{-1}\notin\mathrm{T}$$

这个诱导表示对 O 群的五个类而言特征标分别是：

2，　　0，　　2，　　-1，　　0

做内积，满足归一条件，为不可约表示。

	$\{E\}$	$6\{C_4'\}$	$3\{C_4'^2\}$	$8\{C_3'\}$	$6\{C_2^{(1)}\}$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	-1	1	1	-1
A_3	2	0	2	-1	0
A_4	3	$\chi^4(C_4')$	$\chi^4(C_4'^2)$	$\chi^4(C_3')$	$\chi^4(C_2^{(1)})$
A_5	3	$\chi^5(C_4')$	$\chi^5(C_4'^2)$	$\chi^5(C_3')$	$\chi^5(C_2^{(1)})$

最后就剩下两个三维表示了。求法和上面一样，还是利用诱导表示。不过这

里用的是 T 的三维表示，导出的 O 的表示是六维的。它的特征标是:

$$\chi^{U}(\mathrm{E})=\frac{1}{12}\sum_{t\in\mathrm{O}}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tEt}^{-1})=\frac{1}{12}\cdot 24\cdot 3=6$$

$$\chi^{U}(\mathrm{C}_3')=\frac{1}{12}\sum_{t\in\mathrm{O}}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tC}_3'\mathrm{t}^{-1})=0$$

$\cdots\cdots$ T 的三维表示中C_3' 的特征标也是零

$$\chi^{U}(\mathrm{C}_4')=\frac{1}{12}\sum_{t\in\mathrm{O}}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tC}_4'\mathrm{t}^{-1})=0$$

$$\cdots\cdots\mathrm{tC}_4'\mathrm{t}^{-1}\notin\mathrm{T}$$

$$\chi^{U}(\mathrm{C}_4'^2)=\frac{1}{12}\sum_{t\in\mathrm{O}}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}(\mathrm{tC}_4'^2\mathrm{t}^{-1})=\frac{1}{12}\cdot 24\cdot(-1)=-2$$

$$\cdots\cdots\mathrm{tC}_4'^2\mathrm{t}^{-1}\in\{\mathrm{C}_4'^2、\mathrm{C}_4''^2、\mathrm{C}_4'''^2\}$$

$$\chi^{U}\left(\mathrm{C}_2^{(1)}\right)=\frac{1}{12}\sum_{t\in\mathrm{O}}\mathrm{tr}\dot{\mathrm{B}}\left(\mathrm{tC}_2^{(1)}\mathrm{t}^{-1}\right)=0$$

$$\cdots\cdots\mathrm{tC}_2^{(1)}\mathrm{t}^{-1}\notin\mathrm{T}$$

这个六维表示肯定是可约的，如果它是两个 A_4 或两个 A_5 的直和。对应的 A_4 或 A_5 的特征标为：3、0、-1、0、0，做内积的话不等于 1，不是不可约表示。

还有一种可能是它是 A_4 与 A_5 的直和，如果是这样的话，我们就有:

$$\chi^4(\mathrm{C}_4')+\chi^5(\mathrm{C}_4')=0$$
$$\chi^4(\mathrm{C}_4'^2)+\chi^5(\mathrm{C}_4'^2)=-2$$
$$\chi^4(\mathrm{C}_3')+\chi^5(\mathrm{C}_3')=0$$
$$\chi^4\left(\mathrm{C}_2^{(1)}\right)+\chi^5\left(\mathrm{C}_2^{(1)}\right)=0$$

对这样的条件，有一种解是:

$\chi^4(\mathrm{C}_4')=1$、$\chi^4(\mathrm{C}_4'^2)=-1$、$\chi^4(\mathrm{C}_3')=0$、$\chi^4\left(\mathrm{C}_2^{(1)}\right)=1$

$\chi^5(\mathrm{C}_4')=-1$、$\chi^5(\mathrm{C}_4'^2)=-1$、$\chi^5(\mathrm{C}_3')=0$、$\chi^5\left(\mathrm{C}_2^{(1)}\right)=-1$

这个解是满足特征标归一条件的，所以是对应两个三维不可约表示（填到上

面那个表中)。这样 O 群的不等价不可约表示特征标表就也出来了。

最后一个需要提一下的，你们在看一些文献上给出的点群特征标表的时候，经常会看到这样的例子。比如 O_h 特征标表，在有些文献中，会写成这个样子:

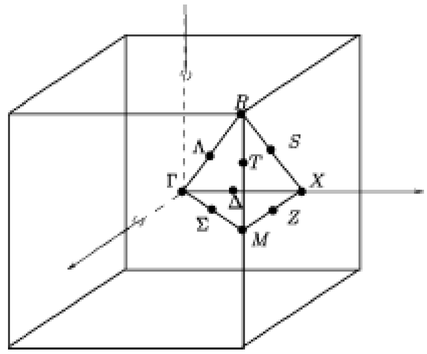
representation	basis functions	E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	i	$3iC_4^2$	$6iC_4$	$6iC_2$	$8iC_3$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	$\begin{cases} x^4(y^2-z^2)+ \\ y^4(z^2-x^2)+ \\ z^4(x^2-y^2) \end{cases}$	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1	1
Γ_{12}	$\begin{cases} x^2-y^2 \\ 2z^2-x^2-y^2 \end{cases}$	2	2	0	0	−1	2	2	0	0	−1
Γ_{15}	x, y, z	3	−1	1	−1	0	−3	1	−1	1	0
Γ_{25}	$z(x^2-y^2)$, etc.	3	−1	−1	1	0	−3	1	1	−1	0
Γ_1'	$\begin{cases} xyz[x^4(y^2-z^2)+ \\ y^4(z^2-x^2)+ \\ z^4(x^2-y^2)] \end{cases}$	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ_2'	xyz	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	−1
Γ_{12}'	$xyz(x^2-y^2)$, etc.	2	2	0	0	−1	−2	−2	0	0	1
Γ_{15}'	$xy(x^2-y^2)$, etc.	3	−1	1	−1	0	3	−1	1	−1	0
Γ_{25}'	xy, yz, zx	3	−1	−1	1	0	3	−1	−1	1	0

在另一些文献中，又被写成:

repr.	basis functions	E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2'$	$8C_3$	i	$3iC_4^2$	$6iC_4$	$6iC_2'$	$8iC_3$
A_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_2^+	$\begin{cases} x^4(y^2-z^2)+ \\ y^4(z^2-x^2)+ \\ z^4(x^2-y^2) \end{cases}$	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1	1
E^+	$\begin{cases} x^2-y^2 \\ 2z^2-x^2-y^2 \end{cases}$	2	2	0	0	−1	2	2	0	0	−1
T_1^-	x, y, z	3	−1	1	−1	0	−3	1	−1	1	0
T_2^-	$z(x^2-y^2)\ldots$	3	−1	−1	1	0	−3	1	1	−1	0
A_1^-	$\begin{cases} xyz[x^4(y^2-z^2)+ \\ y^4(z^2-x^2)+ \\ z^4(x^2-y^2)] \end{cases}$	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
A_2^-	xyz	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	−1
E^-	$xyz(x^2-y^2)\ldots$	2	2	0	0	−1	−2	−2	0	0	1
T_1^+	$xy(x^2-y^2)\ldots$	3	−1	1	−1	0	3	−1	1	−1	0
T_2^+	xy, yz, zx	3	−1	−1	1	0	3	−1	−1	1	0

第一种表述方法遵循的是 Wigner 在 1936 年和 Bouckert、Smoluchowski 合写的

一篇文章中的习惯。他们在这里的基本逻辑是对一些高对称的空间群的晶体，如果我把它的布里渊区画出来的话，那么它的布里渊区里面不同的点具有不同的点群对称性。比如一个晶体是简立方的晶格，那么它的布里渊区就是这个样子：



（立方系，简单晶格对应的空间群的布里渊区，第 221 个空间群）

这样的一个布里渊去里面，不同的点的点群对称性分别如下。因为这个原因，对 O_h 这个点群，由于只有 Γ 点具有它的对称性，所以在标识 O_h 的不可约表示的时候，用了 Γ。这个是做固体物理的人比较喜欢的习惯。

lattice	point	$\boldsymbol{k}$	symmetry
#221[a]	Γ	(0,0,0)	O_h
	R	$[(2\pi/a)(1,1,1)]$	O_h
	X	$[(2\pi/a)(1,0,0)]$	D_{4h}
	M	$[(2\pi/a)(1,1,0)]$	D_{4h}
	Λ	$[(2\pi/a)(x,x,x)]$	C_{3v}
	Σ	$[(2\pi/a)(x,x,0)]$	C_{2v}
	Δ	$[(2\pi/a)(x,0,0)]$	C_{4v}
	S	$[(2\pi/a)(1,z,z)]$	C_{2v}
	T	$[(2\pi/a)(1,1,z)]$	C_{4v}
	Z	$[(2\pi/a)(1,y,0)]$	C_{2v}

另一拨人（比如原子分子物理、理论化学专业），可能又比较喜欢用 A、B、E、T 来标记点群不可约表示，A、B 是一维的，E 是二维的，T 是三维的。现在由于学科交融，做固体物理的很多时候也会使用 A、B、E、T 这种标识。因此，这个就是一个习惯问题，背后有这样一个故事，但不绝对。

当点群中存在空间反演操作 I 时，第一个表中后五个 Γ 带撇了。这个撇代表这五个不可约表示的基函数是奇宇称的。对 A、B、E、T 这种表述，上面的例子是用‘+’、‘-’这些上标给区分出来。在有些其它的文献中，也会用 A_g、A_u 这类 g 和 u 的下标来区分。这里 g 是 gerade，德语 even 的意思，u 是 ungerade，德语 odd 的意思，对应的还是宇称。

最后，在 basis function 那一栏，好多文献中会给出一些 x、y、z 的齐次函数的例子。后面我们会讲一个量子力学系统的本征态往往对应一个不可约表示的基，这样的话给出这些齐次函数的例子就很重要了。这个后面我们会细讲，这里大家先记住是不可约表示的一些比较典型的基就可以了。

3.6 习题与思考

1. 设O是三维实正交群一个元素，$\mathrm{C}_{\vec{k}}(\theta)$是其中的某纯转动操作，$\mathrm{S}_{\vec{k}}(\theta)$是其中的某转动反射操作。问$\mathrm{O}\mathrm{C}_{\vec{k}}(\theta)\mathrm{O}^{-1}$是什么样的操作？$\mathrm{O}\mathrm{S}_{\vec{k}}(\theta)\mathrm{O}^{-1}$是什么样的操作？

2. 某点群有个垂直 xy 水平面的二阶轴C_2，和过C_2的反射面σ_{v}，它是什么点群？以$\{xy, xz, yz\}$为基，它的表示是什么？它可约吗？如可约，请约化。

3. 以$\{2xy, x^2-y^2\}$、$\{R_x = yp_z - zp_y,\ R_y = zp_x - xp_z\}$为基，求$\mathrm{D}_3$的表示矩阵。

4. 某点群有奇数阶转动轴S_{2n+1}，证明：必存在独立的转动轴C_{2n+1}及水平反射面。

5. 4n 阶转动反射轴S_{4n}为生成元，能否产生反演操作I？

6. 求出二维实空间中所有点群。

7. 用熊夫利符号，说出如下点群：1）基于C_6群中，增加空间反演操作；2）在$\mathrm{C}_{5\mathrm{h}}$群中，去掉所有转动反演操作；3）基于T_{d}群中，增加空间反演操作。

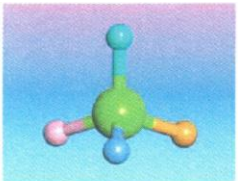
8. 1)上 Bilbao Crystallographic Server 的网站查基于D_2点群一个空间群 P222 的所有对称操作，写出来。2)某篇关于晶体结构的文章在给结构的时候只给出非等价

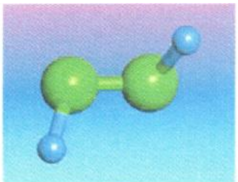
的原子的位置。如果给出的这个原子是C，它在晶胞内的相对坐标是(0.125, 0.125, 0.125)，写出晶胞内所有原子的位置。3）如果这个空间群是$P2_122$，情况又怎样？4）空间群是C222，情况又怎样？（本题写相对坐标就可以）

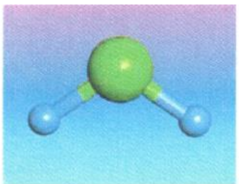
9. 一个立方体，点群是什么？沿对角线方向拉伸，点群变成什么？如果它是完美单晶，这个晶体会由什么晶系变成什么晶系？

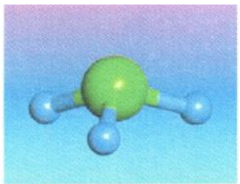
10. 参考附录内容中三方晶系包含的空间群，体会本节描述晶系、点群、布拉菲格子、晶格系统那个表格，指出哪些是基于菱方的晶格系统？

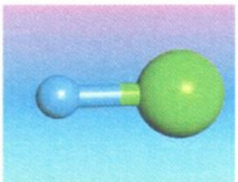
11. 指出下列分子的点群：

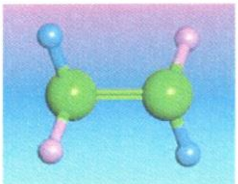

(a) CHFClBr

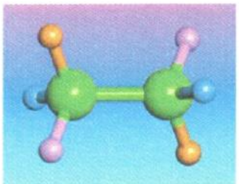

(b) H_2O_2

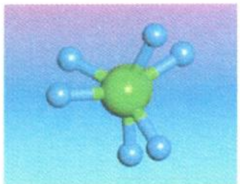

(c) H_2O

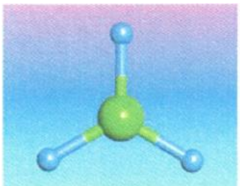

(d) NH_3

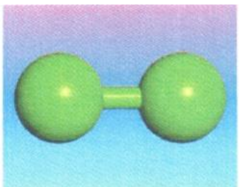

(e) 无对称中心的线形分子

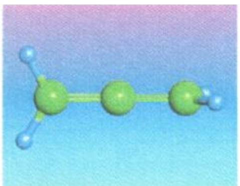

(f) 反式的 CHCl=CHCl

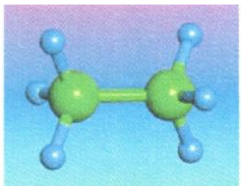

(g) 反式 CHClBr-CHClBr

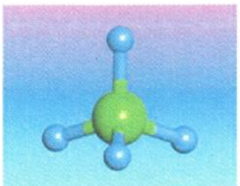

(h) 部分交错式的 CH_3-CH_3


(i) 三氟化硼（BF_3）


(j) 有对称中心的线形分子


(k) 丙二烯（CH_2=C=CH_2）


(l) 交错式乙烷（CH_3-CH_3）


(m) CH_4


(n) SF_6

12. 基于本节中已知第一类点群特征标表，不要参考附录，完整地写出C_{4h}群的特征标表（要求过程，同时写明每个类包含哪些元素）。

13. 基于本节中已知第一类点群特征标表，不要参考附录，完整地写出D_{4d}群的特征标表（要求过程，同时写明每个类包含哪些元素）。

第四章 群论与量子力学

现在我们把我们这门课的理论基础以及我们在以后面对实际材料的时候遇到的最为重要的点群、空间群讲完了。我们这门课还有两类群需要讲：转动群与置换群。在讲之前，以我自己学这门课和讲这门课的经验来看，最大的困难是我们在学了很多很难理解的概念和定理之后并不知道它有什么用？**我觉得这个坑必须现在先填上**。

这一章的作用就是填坑。方法是用一些我知道的量子力学、固体物理、原子分子物理中的例子，来理解群论到底怎么去用？理解的话你可以去想量子力学、固体物理、原子分子物理是物理，群论是数学，由于量子力学在物理这边起最基础的作用，这一章的题目我们把它叫作《群论与量子力学》。

具体而言，作为物理系、化学系的学生，面对微观世界，我们是需要用量子力学的概念去理解其物理、化学性质的。我们观测到的任何东西，最终解释的时候都会落到你所观测的系统的一些本征态上。以分子或凝聚态体系为例，这些本征态可以是电子态，可以是声子态，也可以是它们之间的耦合形成的其它准粒子态。这些态是如何产生的？它与你所观测的系统的对称性存在什么样的关联？你观测的系统在一个外界扰动下，从一个本征态向另一个本征态跃迁会呈现什么样的规律？这些都是你们在以后的科研中要遇到的实际问题。在你花费了巨大精力学习完这门课后，如果你以后在科研中遇到类似问题，不懂得如何用对称性原理去理解，这门课你就白上了。也正是因为这个原因，我把《群论与量子力学》这章当成我们这门课里面重点的重点。

要讲的内容包括八节。第一节哈密顿算符群与相关定理是总体的讲量子力学与对称性之间的关系，其中的概念与定理是对我们这一章内容进行理解的基础。

第二节讲微扰引起的能级分裂,是一个具体的系统对称性的变化导致物性变化的例子。具体会说明在这个变化过程中，我们如何用对称性的语言去描述和理解物性的变化。第三节讲投影算符与久期行列式的对角化。其中投影算符是数学基础部分，它将教会我们如何让一组基函数具备物理系统的对称性。久期行列式的对角化是对称化的基函数在解薛定谔方程的时候的应用,它可以简化这个求解过程。第四节讲一些矩阵元定理与选择定则。它说的是本来系统有个哈密顿量，有一系列的本征波函数。根据我们第一节讲的内容，我们应该知道这些本征态基函数能反映系统的对称性。现在我加了个微扰，系统会在原来哈密顿量的本征态之间发生一些跃迁。这一节会告诉我们如何利用对称性的知识去理解哪些跃迁可以发生、哪些跃迁不能发生？第五节我想讲一下你们以后做实验应该会经常接触到的红外谱、拉曼谱、和频光谱。第六节与第七节回到固体物理，从平移与转动两个角度去讲解晶体中的这些对称性对晶体能带的影响。最后一节讲时间反演对称性。这些内容只是根据我在过去五年中的课程进度放入的内容,使得讲义本身可以在一个学期讲完。更多应用建议大家仔细阅读 Dresselhaus 那本书。

4.1 哈密顿算符群与相关定理

这部分讨论的基础是哈密顿量的变换性质，把它搞明白了，所有的概念与定理就清楚了。而要明白哈密顿量的变换性质，首先就要清楚哈密顿量是什么？简单来说，它有这样的性质：

1. 它是一个坐标的函数（这个坐标是个广义的坐标，暂记为$\vec{x}$）;
2. 它是一个算符;
3. 我们一般把它记为$\widehat{H}(\vec{x})$;
4. 它与一个物理系统对应。

因为它是坐标的函数，那么如果我们对它的变量空间做变换 g 的话，这个函数的变量就变成了$g\vec{x}$。这个时候，如果$\hat{H}(\vec{x}) = \hat{H}(g\vec{x})$（注意，这个要求是哈密顿量不变，它同时包含动能与势能项），我们称 g 是保持哈密顿量不变的一个操作。换句话说，g 是让系统回到和之前不可分辨状态的一个操作。它存在会给系统带来什么样的性质呢？

既然 g 是作用到$\vec{x}$上的一个变换，对于波函数所在希尔伯特空间的任意一个向量$\varphi(\vec{x})$，那它肯定对应一个线性变换算符$\hat{P}_g$。根据我们之前讲过的变换规则，$\hat{P}_g$作用到$\varphi(\vec{x})$上后果为：$\hat{P}_g\varphi(\vec{x}) = \varphi(g^{-1}\vec{x})$。

同时，如果我们定义 g 这个作用到$\vec{x}$上的变换，与 f 这个作用到$\vec{x}$上的变换，它们的乘积 fg 所对应的线性变换算符$\hat{P}_{fg} = \hat{P}_f\hat{P}_g$，那么我们就会有：

$$\hat{P}_{g^{-1}}\hat{P}_g\varphi(\vec{x}) = \hat{P}_{g^{-1}}\left(\hat{P}_g\varphi(\vec{x})\right) = \hat{P}_{g^{-1}}\varphi(g^{-1}\vec{x}) = \varphi(\vec{x})$$

由于这个等式对希尔伯特空间中的任意一个函数$\varphi(\vec{x})$都成立，因此：$\hat{P}_{g^{-1}} = \hat{P}_g^{-1}$。

这样的话，对$\hat{H}(\vec{x})\varphi(\vec{x})$，就会有：

$$\hat{H}(\vec{x})\varphi(\vec{x}) = \hat{P}_g\hat{P}_{g^{-1}}\hat{H}(\vec{x})\varphi(\vec{x}) = \hat{P}_g\hat{H}(g\vec{x})\varphi(g\vec{x}) = \hat{P}_g\hat{H}(g\vec{x})\hat{P}_{g^{-1}}\varphi(\vec{x})$$
$$= \hat{P}_g\hat{H}(g\vec{x})\hat{P}_g^{-1}\varphi(\vec{x})$$

对任意一个希尔伯特空间中的函数$\varphi(\vec{x})$成立，因此$\hat{H}(\vec{x}) = \hat{P}_g\hat{H}(g\vec{x})\hat{P}_g^{-1}$。而我们之前说过 g 是保持系统哈密顿量不变的一个操作，它的性质是：$\hat{H}(\vec{x}) = \hat{H}(g\vec{x})$，因此我们可进一步得到：$\hat{H}(\vec{x}) = \hat{P}_g\hat{H}(\vec{x})\hat{P}_{g^{-1}} = \hat{P}_g\hat{H}(\vec{x})\hat{P}_g^{-1}$，从而：

$$\hat{P}_g\hat{H}(\vec{x}) = \hat{H}(\vec{x})\hat{P}_g$$

这也就意味着如果 g 是保持哈密顿量$\hat{H}(\vec{x})$不变的坐标空间的变换，那么它所对应希尔伯特空间的函数变换算符$\hat{P}_g$与$\hat{H}(\vec{x})$互易。

这个性质是我们这章经常会用到的一个性质，由它可以得到很多的定理。在

讲这些定理之前，我们先看两个概念，分别是哈密顿算符群与哈密顿算符的群。

定义 4.1 哈密顿算符的群：所有保持哈密顿量$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})$不变的变换 g 的集合形成的群，称为哈密顿算符的群，或薛定谔方程的群，记为：

$$\mathrm{G_H} = \{\mathrm{g} \big| \widehat{\mathrm{H}}(\mathrm{g}\vec{\mathrm{x}}) = \widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})\}$$

定义 4.2 哈密顿算符群（也叫薛定谔方程群）：由哈密顿算符的群中群元对应的函数变换算符形成的群，称为哈密顿算符群，或薛定谔方程群，记为：

$$\mathrm{P_{G_H}} = \{\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g} | \mathrm{g} \in \mathrm{G_H}\}$$

有了哈密顿算符的群、哈密顿算符群两个概念，并且知道了哈密顿算符群中的元素与哈密顿量互易这个性质，我们进一步去看群的表示理论与量子力学的联系。其中第一个是关于具有相同本征能量的本征函数的。

定理 4.1 哈密顿量算符$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})$的具有相同本征能量的本征函数，构成哈密顿算符群$\mathrm{P_{G_H}}$（也叫薛定谔方程群）的群表示的基函数。

（这个意思就是说$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})$不是有一系列本征能级吗？每个能级上，都有一个或几个本征态。现在以能级为基本单元，把它上面的本征态做线性组合形成线性空间。如果这个能级不简并，这个线性空间是一维的；如果 n 重简并，这线性空间是 n 维的。这个定理说的是这些线性空间都是这个系统的哈密顿算符群$\{\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}\}$的表示空间，$\{\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}\}$这个群，和把$\{\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}\}$作用到每个空间上，得到的矩阵群同态）

证明：

取一个本征能级$\mathrm{E_n}$，设它是 l 重简并的。这样的话就有 l 个线性无关的本征函数，$\Psi_i(\vec{\mathrm{x}})$，其中 i 从 1 到 l。它们形成的线性空间记为$\mathrm{W^H}$。

对$\forall\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g} \in \mathrm{P_{G_H}}$，由于有$\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}}) = \widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}$，因此$\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}$作用到$\forall\Psi_i(\vec{\mathrm{x}})$上，都有：

$$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}\Psi_i(\vec{\mathrm{x}}) = \widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})\Psi_i(\vec{\mathrm{x}}) = \widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}\mathrm{E_n}\Psi_i(\vec{\mathrm{x}}) = \mathrm{E_n}\widehat{\mathrm{P}}_\mathrm{g}\Psi_i(\vec{\mathrm{x}})$$

这也就意味着$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\Psi_i(\vec{\mathrm{x}})$仍然是$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})$本征值为$\mathrm{E_n}$的本征函数。

之前我们说过$\mathrm{E_n}$是 l 重简并的，对应的线性空间为$\mathrm{W^H}$，那么$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\Psi_i(\vec{\mathrm{x}})$必为这个空间中的向量，对应：

$$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\Psi_i(\vec{\mathrm{x}}) = \sum_{i'=1}^{l} \Delta_{i'i}^{(\mathrm{n})}(\mathrm{g})\Psi_{i'}(\vec{\mathrm{x}})$$

$\{\Delta^{(\mathrm{n})}(\mathrm{g})\}$这个矩阵群就是$\{\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\}$的 l 维表示。

（证毕）

这里说明一下。这个定理说的是一个能级上的本征态形成的线性空间可以承载这个哈密顿算符群的表示。这个表示，要么不可约，要么可以约化为一系列不可约表示的直和。但是对这个里面的每个不可约表示，它们的基对应的本征态的本征能量是一样的。

跟这个定理对应，还有一个定理，说的是不同能级上的本征态，如果通过线性组合形成表示空间的话，承载的不可能是一个不可约表示。总结起来，是下面一句话。

定理 4.2 构成哈密顿算符群的不可约表示的本征函数必属于同一能级。

证明：（反证）

设$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})$的 l 个本征函数$\Psi_i(\vec{\mathrm{x}})$构成哈密顿算符群的第α个不可约表示，而它们的能量并不相同。取最简单的例子，前$l-1$个属于能级 E，最后一个属于能级E'。也就是$\mathrm{E}_i = \mathrm{E}$，for $i \le l-1$；$\mathrm{E}_i = \mathrm{E}'$，for $i = l$。

这样的话，由薛定谔方程，我们知：

$$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{x}})\Psi_l(\vec{\mathrm{x}}) = \mathrm{E}'\Psi_l(\vec{\mathrm{x}})$$

取$\forall\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}} \in \mathrm{P}_{\mathrm{G_H}}$，作用到这个方程两边，

$$左边 = \widehat{P}_g \widehat{H}(\vec{x}) \Psi_l(\vec{x}) = \widehat{H}(\vec{x}) \widehat{P}_g \Psi_l(\vec{x}) = \widehat{H}(\vec{x}) \sum_{i=1}^{l} \Delta_{il}^{(\alpha)}(g) \Psi_i(\vec{x})$$

其中$\Delta_{il}^{(\alpha)}(g)$是第α个不可约表示的第$i$行、第 l 列。它继续等于:

$$\sum_{i=1}^{l} \Delta_{il}^{(\alpha)}(g) E_i \Psi_i(\vec{x})$$

对右边,

$$右边 = E' \widehat{P}_g \Psi_l(\vec{x}) = E' \sum_{i=1}^{l} \Delta_{il}^{(\alpha)}(g) \Psi_i(\vec{x})$$

而左右两边是由线性无关的矢量$\Psi_i(\vec{x})$组成的线性组合，如果相等，每个分量都应该相等，这样的话就有:

$$\Delta_{il}^{(\alpha)}(g) E_i = \Delta_{il}^{(\alpha)}(g) E'$$

对任意 i 都成立，但是在$i \leq l-1$时，$E_i \neq E'$，这样的话$\Delta_{il}^{(\alpha)}(g)$必为零。这也就是说$\Delta_{il}^{(\alpha)}(g) = 0$对$\forall g$成立，进而表示$\Delta^{\alpha}$可约。这个与已知矛盾。

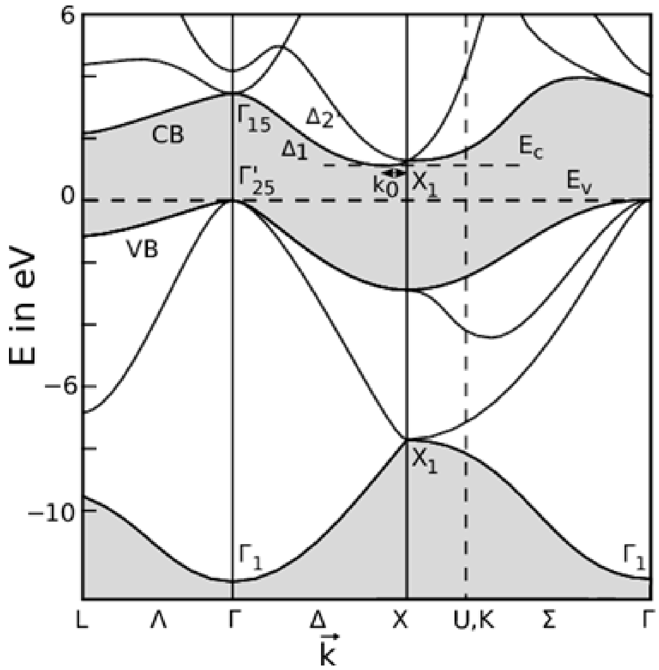
（证毕）

这两个定理合在一起，给了我们一个什么样的图像呢？就是对一个体系，它有哈密顿量,对应一个哈密顿算符群。这个算符群有一系列的不等价不可约表示。对薛定谔方程的一个本征能级,它上面的本征态波函数是可以形成这个哈密顿算符群的表示空间的。这个表示空间可以可约也可以不可约，可约时，它可以化为一系列不可约表示的直和。但是对某一不可约表示，承载它的本征态波函数的本征能量必相同。

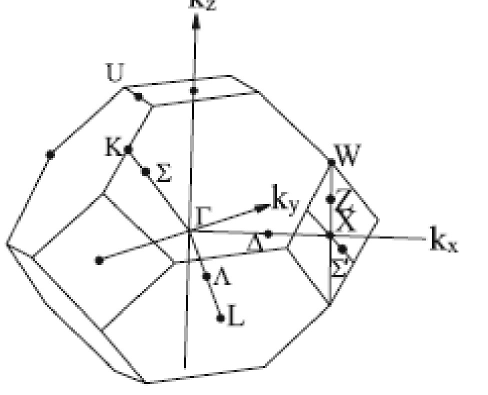
其中，由后者带来的不同本征态之间本征能量相同的这种情况，我们称为必然简并，它是由对称性引起的。如某个能级上的表示可约，那这里不同不可约表示间能量相同的状况我们称为偶然简并。

这些讨论的物理基础是态叠加原理。在量子力学中，我们可以用某个本征态

它所承载的不可约表示来标识它。为了给大家一个你们能记住，以后也应该能用上的具体的例子，我们看一下 Si 的能带。Si 大家都知道晶体结构就是一个 fcc 的晶格上，除了在原点放个 Si，沿立方体对角线 1/4 处，再放一个。它的布拉菲格子是面心立方。费米面附近的能带是这个样子：



与我们讨论相关的是我们对这些高对称的 k 点的本征态的标记。以 Γ 点、X 点、K 点、L 点以及它们之间的连线为例。由于这个晶体的布里渊区如下：



Γ 点、X 点、K 点的点群对称性分别是：O_h、D_{4h}、和C_{2v}。Γ 点与 X 点连线上的点的点群对称性是C_{4v}，X 点与 K 点连线就是C_1。为什么倒空间中相差整数个倒

格矢的 k 点所对应的准粒子激发态相互等价，我们会在后面第六、第七节详细介绍。这里大家先接受一下。

按照我们前面讲的$\mathrm{O_h}=\mathrm{O}\otimes\{\mathrm{E、I}\}$，O 有两个 1 维、一个 2 维、两个 3 维不可约表示，所以$\mathrm{O_h}$的不可约表示有四个 1 维、两个 2 维、四个 3 维的。$\mathrm{D_{4h}}=\mathrm{D_4}\otimes\{\mathrm{E、I}\}$，$\mathrm{D_4}$有四个 1 维和一个 2 维不可约表示，所以$\mathrm{D_{4h}}$的不可约表示是八个 1 维和两个 2 维的。$\mathrm{C_{2v}}$与$\mathrm{D_2}$同构，它的不可约表示是两个 1 维的。$\mathrm{C_{4v}}$与$\mathrm{D_4}$同构，它的不可约表示是四个 1 维和一个 2 维的。$\mathrm{C_1}$只有一个 1 维不可约表示。

与之相应，我们看能带上的点，基本也都能反映这些特征。比如 Γ 点，它都是用$\mathrm{O_h}$特征标表中的不可约表示标识的：

representation	$\{E\|0\}$	$3\{C_4^2\|0\}$	$6\{C_4\|\tau_d\}$	$6\{C_{2'}\|\tau_d\}$	$8\{C_3\|0\}$	$\{i\|\tau_d\}$	$3\{iC_4^2\|\tau_d\}$	$6\{iC_4\|0\}$	$6\{iC_{2'}\|0\}$	$8\{iC_3\|\tau_d\}$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1	1
Γ_{12}	2	2	0	0	−1	2	2	0	0	−1
Γ_{15}	3	−1	1	−1	0	−3	1	−1	1	0
Γ_{25}	3	−1	−1	1	0	−3	1	1	−1	0
Γ_1'	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ_2'	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	−1
Γ_{12}'	2	2	0	0	−1	−2	−2	0	0	1
Γ_{15}'	3	−1	1	−1	0	3	−1	1	−1	0
Γ_{25}'	3	−1	−1	1	0	3	−1	−1	1	0

从 Γ 到 X 连线上的点记作Δ，对称群从$\mathrm{O_h}$变成了$\mathrm{C_{4v}}$。$\mathrm{C_{4v}}$没有三维不可约表示，特征标表为：

representation	basis functions	E	C_4^2	$2C_4$	$2iC_4^2$	$2iC_2'$
Δ_1	$1; x; 2x^2-y^2-z^2$	1	1	1	1	1
Δ_2	y^2-z^2	1	1	−1	1	−1
Δ_2'	yz	1	1	−1	−1	1
Δ_1'	$yz(y^2-z^2)$	1	1	1	−1	−1
Δ_5	$y, z; xy, xz$	2	−2	0	0	0

与之相应，费米面下本来 3 重简并的点分裂为 1 个 2 重简并（上面）和 1 个 1 重简并（下面）的态。

到了 X 点，对称群变成了$\mathrm{D_{4h}}$，有八个 1 维与两个 2 维不可约表示，特征标

表为：

representation	basis	E	$2C_{4\perp}^2$	$C_{4\parallel}^2$	$2C_{4\parallel}^2$	$2C_2$	i	$2iC_{4\perp}^2$	$iC_{4\parallel}^2$	$2iC_{4\parallel}$	$2iC_2$
X_1	$1; 2x^2-y^2-z^2$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
X_2	y^2-z^2	1	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1
X_3	yz	1	−1	1	−1	1	1	−1	1	−1	1
X_4	$yz(y^2-z^2)$	1	−1	1	1	−1	1	−1	1	1	−1
X_5	xy, xz	2	0	−2	0	0	2	0	−2	0	0
X_1'	$xyz(y^2-z^2)$	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
X_2'	xyz	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1
X_3'	$x(y^2-z^2)$	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1
X_4'	x	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1
X_5'	y, z	2	0	−2	0	0	−2	0	2	0	0

这个时候，大家可以注意。费米面一下第一个能带在 X 点，还没有劈裂开，还是一个 2 重简并。但它承载的不可约表示，却是两个 1 维不可约表示。这个时候的简并就不是由对称性强制的了，这时的简并是偶然简并。

从 X 点到 K 点，不可约表示全是一维。在 K 点对称性是C_{2v}，相应的特征标表为：

representation					
	Z	E	C_4^2	iC_4^2	$iC_{4\perp}^2$
	Σ	E	C_2	iC_4^2	iC_2
	G, K, U, S	E	C_2	iC_4^2	iC_2
	D	E	C_4^2	iC_2	$iC_{2\perp}$
Σ_1		1	1	1	1
Σ_2		1	1	−1	−1
Σ_3		1	−1	−1	1
Σ_4		1	−1	1	−1

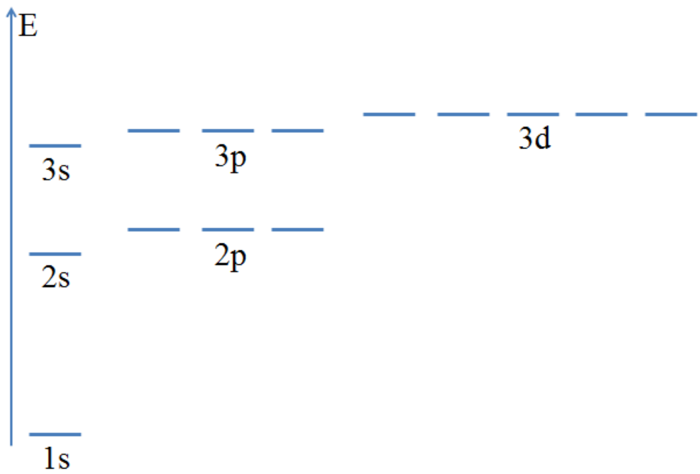
这里不可约表示用 Σ 来标识，是因为 Σ、U 这些布里渊区的点对称性也都是C_{2v}。对应的简并也相应的全部消除，所有的能级都不简并，承载一维不可约表示。

到这个地方，我们量子力学中的本征态与哈密顿算符群对称性的逻辑关系就讲完了。在这个逻辑关系中，偶然简并是可以存在的。但是当你遇到偶然简并的情况的时候，不要理所当然的认为它就是偶然简并。因为它同时可能意味着你的

哈密顿算符群的对称性没有找全。当你的哈密顿算符群的对称性找全的时候，高维的不可约表示在新的对称群中就可以存在了。这时，如果你再回过头看你本征态之间的简并，它们经常会对应新的对称群的不可约表示。也就是说新的对称性是的可约表示变成了不可约表示，相应的偶然简并也变成了必然简并。这种情况，在我们量子力学的发展过程中是经常出现的。在 40、50 年代，当时物理学研究的前沿是求很多量子力学模型的解。往往你解出了一个好的模型，你就完成了一个很好的博士论文。在当时的这些文章中，你们会经常看到一些关于 accidental degeneracy 和 hidden symmetry 的讨论，说的就是这样一个事情。就是你原来认为的偶然简并，在你真正理解了这个量子力学系统的对称性之后，你会发现这个简并其实必然（对称性升高，其所要求的简并度增加）。

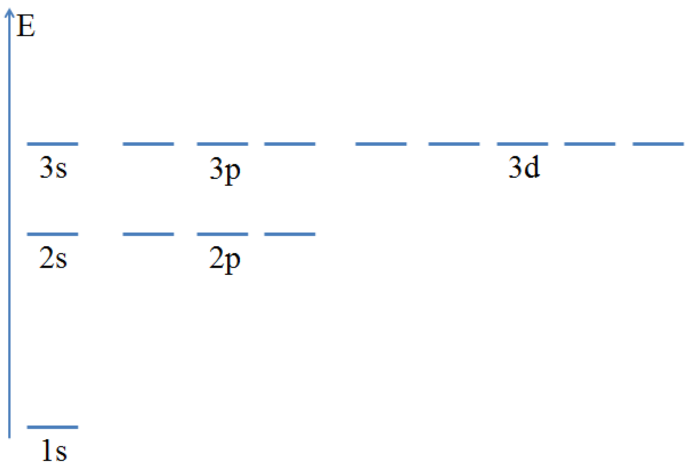
这个里面最典型的一个例子是氢原子模拟的本征态能量求解。氢原子大家去想它的对称性是什么？它与其它含有多个电子的原子去对比，对称性有不同吗？

最直接地去想，我们可能都会认为没啥不同，都是球对称。相应的哈密顿算符群是 SO(3)群。如果是 SO(3)群，我们下一章会讲，它的不可约表示的基是球谐函数，对一个特定的 l，不可约表示的简并度为 $2l+1$。我们原子物理中给出的原子轨道的分布一般也都是这样的，能量从低到高，一般原子分别是 1s、2s、2p、3s、3p、4s、3d、4p、…



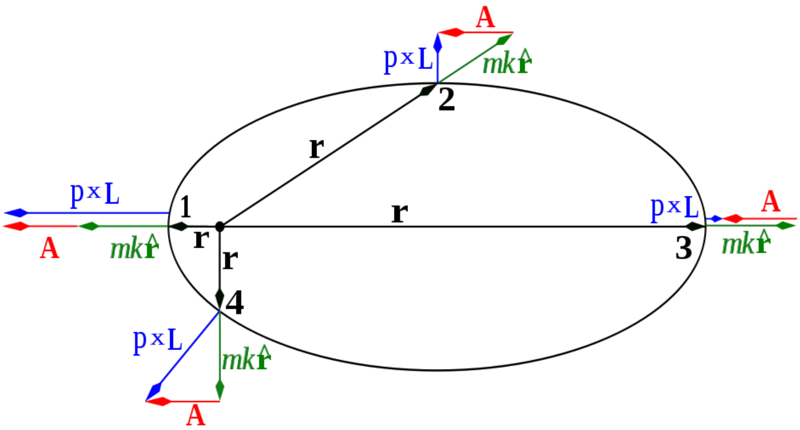
这个大家应该都很熟悉，也不会有什么疑问。

但是对于氢原子,如果我们看它的能级分布图的话,我们会看到这样的现象:



这个图和上面那个图就有很大的差别了，因为相同的 n 本征能量都相同。

为什么会存在这个差别,这个在高量课上一般会讲。氢原子中库仑势是 $1/r$,这个 $1/r$ 很特别，因为早期在天文学的研究中，人们已经知道，在一个具有$\vec{\mathrm{F}} = -{k}/{r^2}\,\hat{\mathrm{r}}$形式的引力场中，存在一个 Laplace-Range-Lenz 守恒量$\vec{\mathrm{A}} = \vec{\mathrm{p}} \times \vec{\mathrm{L}} - \mathrm{m}k\hat{\mathrm{r}}$,其中$\vec{\mathrm{L}} = \vec{\mathrm{r}} \times \vec{\mathrm{p}}$。更具体的这些向量的形式如下图:



由于这个守恒量的存在，Noether 定理告诉我们它（这个守恒量）必对应一个对称性。这个导致的结果就是氢原子中，我守恒量比简单球对称体系多，所以我实际的对称性也比球对称体系高。我们把这个对称性称为一种动力学对称性，相应的氢原子的对称群是 SO(4)。而 SO(4)群的简并就符合上面那个图的能级分布了。对其它原子，因为电子之间相互作用，这个 $1/r$ 的对称性不成立，对应的群还是 SO(3)群[11]。

这一节总结起来就是量子力学中的简并度与对称性息息相关。我们的研究中，经常遇到的是因为对称性的升高或降低所引起的能带的合并与劈裂。偶然简并有时可以出现，但它出现的时候我们往往要非常小心，因为它经常意味着我们对系统哈密顿量的对称性没有找全。

4.2 微扰引起的能级分裂

有了上一节的理论基础，这一节我们要讲的微扰引起的能级劈裂很好理解。说的是这样一个事情：本来系统不是有个哈密顿量$\hat{H}_0(\vec{x})$，它的哈密顿算符群是$P_{G_{H_0}}$，它的本征态我们用$P_{G_{H_0}}$的不等价不可约表示来标识。

[11] 关于氢原子的动力学对称性的详细、严格的讨论，请阅读曾谨言老师《量子力学》卷 II 的 7.1 节。那一节，曾老师分氢原子的经典力学描述、二维氢原子的 SO(3)对称性、三维氢原子的 SO(4)对称性、n 维氢原子的 SO(n+1)对称性对这个话题进行了严格的讨论。

现在我们给系统加了一个微扰$\hat{H}'(\vec{x})$，它的哈密顿量变成了$\hat{H}(\vec{x}) = \hat{H}_0(\vec{x}) + \hat{H}'(\vec{x})$，相应的哈密顿算符群也会发生变化，变为$P_{G_H}$。

显然，新的本征态就需要用P_{G_H}的不等价不可约表示来标识了。我们这部分讨论要干的事情，就是在不解薛定谔方程的情况下，看微扰$\hat{H}'(\vec{x})$对能级简并情况的影响。具体情况分两种：

1. $P_{G_{H_0}}$的对称性比较高，加入微扰后，对称性降低了。新的哈密顿算符群P_{G_H}是$P_{G_{H_0}}$的子群。这种情况下，原来简并的能级上的态构成$P_{G_{H_0}}$的不可约表示，在加入微扰之后，它们对应的P_{G_H}的表示就不一定不可约了。相应的简并不被对称性保护，从而引起由对称性破缺诱发的能级劈裂。
2. $\hat{H}'(\vec{x})$的对称性大于等于$\hat{H}_0(\vec{x})$，也就是说$\hat{H}_0(\vec{x})$有的对称性$\hat{H}'(\vec{x})$都有。这个时候，P_{G_H}相对于$P_{G_{H_0}}$不发生变化。原来的必然简并还是必然简并。但偶然简并的破缺是可以发生变化的。

作为一个例子，我们来看一下把一个独立原子放到一个简立方的晶格场中，它的能级会发生什么样的变化？（与之相关的理论在历史上，上个世纪 40 年代之前，在物理学发展过程中曾经起过很重要的作用，有个专门的名字，叫晶格场理论 Crystal Field Theory。这个理论主要研究的是原子轨道在晶格场中的劈裂情况，手段是量子力学与群论；应用是早期激光器，一般都是把稀土元素或过渡金属元素作为杂质，掺到透明的晶体中，它的光谱由晶格场中的电子能级决定）

不考虑空间反演对称性。我们假设自旋-轨道耦合很弱，这样在没有晶格场的时候，原子轨道可以用 n、l、m 三个好量子数来标识。$P_{G_{H_0}}$是下一章要讲的SO(3)群。加入晶格场之后，P_{G_H}变成了有限点群 O。

我们要讨论的是$\hat{H}_0(\vec{x})$的本征态，也就是 SO(3)群的不可约表示的基，在加入

晶格场的微扰之后，发生什么样的变化？其中最重要的，就是要在$\hat{\mathrm{H}}_0(\vec{\mathrm{x}})$的每个本征能级上(这里的简并都是必然简并)，求出$\mathrm{P}_{\mathrm{G_H}}$的表示矩阵。进而求得特征标，然后参照O群的特征标表。把这个表示约化为O群的不等价不可约表示的直和。这样就知道了必然简并在这里要发生什么样的劈裂了？

先看O群的对称操作，有24个，分五类，分别是：$\{\mathrm{E}\}$、$8\{\mathrm{C}_3^{(1)}\}$、$3\{\mathrm{C}_4^{(1)2}\}$、$6\{\mathrm{C}_4^{(1)}\}$、$6\{\mathrm{C}_2^{(1)}\}$。我们要看的是它们这些操作在SO(3)群不可约表示表示空间的表示矩阵的特征标。

我们看s、p、d、f四个态。其中s态在SO(3)群中是个一维不可约表示，基函数的球谐部分为：

$$Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}}$$

由于$\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}$这些转动操作只作用到本征态的角向部分，而径向函数部分至于 n、l 有关，所以我们在求表示矩阵的时候，可以根本就不关心这个径向函数部分。

对s态，O群中的任何元素对应的表示矩阵都是1这个1阶单位矩阵，所以特征标都是1。

对p态，角向部分基函数是：

$$Y_{1-1}(\theta,\varphi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\mathrm{e}^{-i\varphi}\sin\theta$$

$$Y_{10}(\theta,\varphi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cos\theta$$

$$Y_{11}(\theta,\varphi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\mathrm{e}^{i\varphi}\sin\theta$$

转动作用到类似的球谐函数基上，得到的表示矩阵的特征标只与转动角度有关。因此，我们取绕z轴的转动，对于O群中的各个类，通过$\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}$作用到这些基上产生

表示矩阵。这些表示矩阵的特征标分别是:

1. $\{E\}$: $\chi = 1+1+1=3$;

2. $8\{C_3^{(1)}\}$: $\chi = e^{i\frac{2\pi}{3}} + 1 + e^{-i\frac{2\pi}{3}} = 0$;

3. $3\{C_4^{(1)2}\}$: $\chi = e^{i\pi} + 1 + e^{-i\pi} = -1$;

4. $6\{C_4^{(1)}\}$: $\chi = e^{i\frac{\pi}{2}} + 1 + e^{-i\frac{\pi}{2}} = 1$;

5. $6\{C_2^{(1)}\}$: $\chi = e^{i\pi} + 1 + e^{-i\pi} = -1$。

对 d 态、f 态，球谐函数的普遍形式是:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \mathrm{P}_l^m(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\varphi}$$

其中$\mathrm{P}_l^m(x)$为 m 阶 l 次连带勒让德多项式，微分形式为:

$$\mathrm{P}_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{1}{2^l l!} \frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}} (x^2-1)^l$$

以 d 态为例, O 群中的各个类所对应的哈密顿算符作用到 d 态波函数的这组基上产生的表示矩阵的特征标就是:

1. $\{E\}$: $\chi = 1+1+1+1+1=5$;
2. $8\{C_3^{(1)}\}$: $\chi = e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}} + 1 + e^{-i\frac{2\pi}{3}} + e^{-i\frac{4\pi}{3}} = -1$;
3. $3\{C_4^{(1)2}\}$: $\chi = e^{i2\pi} + e^{i\pi} + 1 + e^{-i\pi} + e^{-i2\pi} = 1$;
4. $6\{C_4^{(1)}\}$: $\chi = e^{i\pi} + e^{i\frac{\pi}{2}} + 1 + e^{-i\frac{\pi}{2}} + e^{-i\pi} = -1$;
5. $6\{C_2^{(1)}\}$: $\chi = e^{i2\pi} + e^{i\pi} + 1 + e^{-i\pi} + e^{-i2\pi} = 1$。

f 态可同理求出。这样 O 群中的元素在球谐函数下的表示（可约表示）的特征标表就是:

	$\{E\}$	$8\{C_3^{(1)}\}$	$3\{C_4^{(1)2}\}$	$6\{C_4^{(1)}\}$	$6\{C_2^{(1)}\}$
s	1	1	1	1	1
p	3	0	-1	1	-1

d	5	-1	1	-1	1
f	7	1	-1	-1	-1

这个时候，参考 O 群的不等价不可约表示特征标表：

	$\{E\}$	$8\{C_3^{(1)}\}$	$3\{C_4^{(1)2}\}$	$6\{C_4^{(1)}\}$	$6\{C_2^{(1)}\}$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
T_1	3	0	-1	1	-1
T_2	3	0	-1	-1	1

我们就可以得到，s 态还对应 A_1 这个一维恒等表示；p 态对应 T_1 这个不可约表示，也不劈裂；d 态变为：$E \oplus T_2$；f 态变为：$A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$。

其中 d 轨道往 E 和T_2的劈裂在固体物理中经常用到，特别是关于过渡金属氧化物电子态的讨论。在这些固体中，很多过渡金属处在一个八面体的笼子里面，它的对称性就是O_h。再加上空间反演对称性，这个时候我们可以看到很多文献上关于E_g、T_{2g}的讨论，说的就是这个事情。

4.3 投影算符与久期行列式的对角化

这一节想给大家讲得具体问题是利用对称化的基函数，去简化薛定谔方程的久期行列式。为了让大家知道如何去对称化一组基，我们需要去学习一下投影算符，确切地说是哈密顿算符群的群表示投影算符。在这一节的学习中，投影算符是数学工具，久期行列式的对角化是这里的物理问题。这个物理问题是量子力学里面的一个常见问题。

除了这个物理问题，投影算符在群论这门学科本身又有什么用呢？一句话回

答，就是可以简化群的表示。在求群表示过程中，我们是需要一组基的，这组基我们可以任意选。当然，如果我们任意选的话，我们得到的矩阵群一般是不具备豆腐块的特征的。我们无法判断其是否可约。我们可以通过对比特征标来进行这个判断。判断完了以后，如果它可约，我们是需要经过一个相似变换把这个矩阵群变成豆腐块的矩阵群的。但如何去找到这个相似变换，其实是很难的。

除了相似变换，另一条路是在我们建立这个群的表示矩阵的时候直接将你给我的表示空间约化为几个群不变的真子空间的直和。也就是直接将基函数对称化。这个群的群表示投影算符干的事情，就是将你给我的表示空间约化为群不变的真子空间的直和，也就是将空间中的基函数对称化。

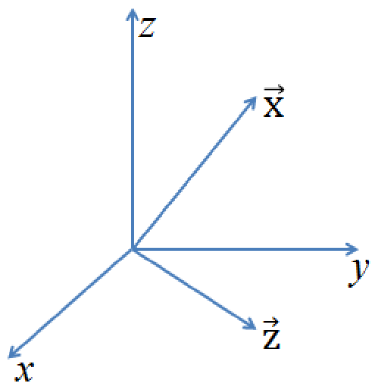
了解了这些目的，我们就知道在简化群表示以及久期行列式的对角化中，能够理解和使用投影算符是至关重要的。学习过程我们分几步走，先看投影算符最基本的意思。

定义 4.3 投影算符：线性空间 V 上的线性算符$\widehat{\mathrm{P}}$，若满足$\widehat{\mathrm{P}}^2 = \widehat{\mathrm{P}}$，则称$\widehat{\mathrm{P}}$是 V 上的一个投影算符。

$\widehat{\mathrm{P}}$的值域是：$\mathrm{R}_p = \widehat{\mathrm{P}}V = \{\vec{\mathrm{z}} \in V \big| \vec{\mathrm{z}} = \widehat{\mathrm{P}}\vec{x},\ \vec{x} \in V\}$

$\widehat{\mathrm{P}}$的核是：$\mathrm{N}_p = \{\vec{\mathrm{z}} \in V \big| \overrightarrow{\widehat{\mathrm{P}}\mathrm{z}'} = 0\}$

这个定义有些抽象，看一个具体的例子，V 是三维欧式空间，$\widehat{\mathrm{P}}$是对其 xy 平面的投影。



因为：$\widehat{P}^2\vec{x}=\widehat{P}\vec{x}=\vec{z}$，所以$\widehat{P}$是投影算符。z 轴上所有向量都是$\widehat{P}$的核，xy 平面是它的值域。

由这个关系，我们很容易知道：

1. 对$\vec{z}\in R_p$，有$\widehat{P}\vec{z}=\vec{z}$；
2. $\widehat{P}$是 V 上得投影算符，则$\widehat{E}-\widehat{P}$也是，且有$\widehat{P}(\widehat{E}-\widehat{P})=0$；
3. 如存在$\widehat{P}$，则 $V=R_p\oplus N_p$；同时如果有一个空间 $V=W_1\oplus W_2$，则一定存在一个相应的投影算符$\widehat{P}$。

由这个定义，我们还可以知道下面这个定理。

定理 4.4 若线性空间 $V=W_1\oplus W_2\oplus\cdots\oplus W_k$，则 V 上存在投影算符$\widehat{P}_1$、$\widehat{P}_2$、…、$\widehat{P}_k$，满足：

1. $\widehat{P}_i^2=\widehat{P}_i$；
2. $\widehat{P}_i\widehat{P}_j=0$，当$i\neq j$；
3. $\widehat{P}_1+\widehat{P}_2+\cdots+\widehat{P}_k=\widehat{E}$；
4. $\widehat{P}_iV=W_i$，$i=1$、2、…、k。

同时，反之，若线性空间 V 上存在算符$\widehat{P}_1$、$\widehat{P}_2$、…、$\widehat{P}_k$满足上面四个条件，则 $V=W_1\oplus W_2\oplus\cdots\oplus W_k$。

讲完了这两个定义，我们现在来看群表示投影算符，这个其实是一个定理。

定理 4.5 设群 G 的不可约酉表示为$A^{(\alpha)}$，$\alpha=1、2、\cdots、q$，维数为s_α。P_G为 G 对应的算符群，$P_G=\{\widehat{P}_g|g\in G\}$。定义算符$\widehat{P}_{kj}^{(\alpha)}=\frac{s_\alpha}{n}\sum_{g\in G}A_{kj}^{(\alpha)*}(g)\widehat{P}_g$，则这些算符满足下列关系：

$$\widehat{P}_{kj}^{(\alpha)}\widehat{P}_{il}^{(\beta)}=\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\widehat{P}_{kl}^{(\alpha)}$$

且$\widehat{P}_{jj}^{(\alpha)}$为投影算符。

证明：

$$\widehat{P}_{kj}^{(\alpha)}\widehat{P}_{il}^{(\beta)}=\frac{s_\alpha s_\beta}{n^2}\sum_{g\in G}A_{kj}^{(\alpha)*}(g)\widehat{P}_g\sum_{g'\in G}A_{il}^{(\beta)*}(g')\widehat{P}_{g'}$$

$$=\frac{s_\alpha s_\beta}{n^2}\sum_{g\in G}\sum_{g'\in G}A_{kj}^{(\alpha)*}(g)A_{li}^{(\beta)}(g'^{-1})\widehat{P}_{gg'}$$

令$gg'=g''$，则上式继续等于：

$$=\frac{s_\alpha s_\beta}{n^2}\sum_{g\in G}\sum_{g''\in G}A_{kj}^{(\alpha)*}(g)A_{li}^{(\beta)}(g''^{-1}g)\widehat{P}_{g''}$$

$$=\frac{s_\alpha s_\beta}{n^2}\sum_{g\in G}\sum_{g''\in G}A_{kj}^{(\alpha)*}(g)\sum_{m=1}^{s_\beta}A_{lm}^{(\beta)}(g''^{-1})A_{mi}^{(\beta)}(g)\widehat{P}_{g''}$$

$$=\frac{s_\alpha}{n}\sum_{m=1}^{s_\beta}\sum_{g''\in G}\left[\frac{s_\beta}{n}\sum_{g\in G}A_{kj}^{(\alpha)*}(g)\,A_{mi}^{(\beta)}(g)\right]A_{lm}^{(\beta)}(g''^{-1})\widehat{P}_{g''}$$

$$=\frac{s_\alpha}{n}\sum_{m=1}^{s_\beta}\sum_{g''\in G}\delta_{\alpha\beta}\delta_{km}\delta_{ji}\,A_{lm}^{(\beta)}(g''^{-1})\widehat{P}_{g''}$$

$$=\delta_{\alpha\beta}\delta_{ji}\left[\frac{s_\alpha}{n}\sum_{g''\in G}A_{kl}^{(\beta)*}(g'')\widehat{P}_{g''}\right]=\delta_{\alpha\beta}\delta_{ji}\widehat{P}_{kl}^{(\beta)}$$

这个是我们要证明的等式，对这样一个等式，取$\alpha=\beta$、$i=j=k=l$时，有：

$$\widehat{P}_{jj}^{(\alpha)}\widehat{P}_{jj}^{(\alpha)}=\widehat{P}_{jj}^{(\alpha)}$$

因此$\widehat{P}_{jj}^{(\alpha)}$是投影算符。

（证毕）

对这类投影算符，它满足一个性质：

定理 4.6 $\sum_{\alpha=1}^{q}\sum_{i=1}^{s_\alpha}\widehat{P}_{ii}^{(\alpha)}=\widehat{P}_e$，其中$\widehat{P}_e$为恒等算符。

证明：

用到不等价不可约表示矩阵元完备定理：

$$\sum_{\beta=1}^{q}\sum_{k,l=1}^{s_\alpha}\frac{s_\beta}{n}A_{kl}^{(\alpha)*}(g')A_{kl}^{(\alpha)}(g)=\delta_{gg\prime}$$

由算符$\widehat{P}_{kl}^{(\alpha)}$定义，有：$\widehat{P}_{kl}^{(\alpha)}=\frac{s_\alpha}{n}\sum_{g\in G}A_{kl}^{(\alpha)*}(g)\widehat{P}_g$

两边乘上$A_{kl}^{(\alpha)}(g')$并对α、k、l求和，有：

$$\sum_{\alpha=1}^{q}\sum_{k,l=1}^{s_\alpha}A_{kl}^{(\alpha)}(g')\widehat{P}_{kl}^{(\alpha)}=\sum_{g\in G}\left[\sum_{\alpha=1}^{q}\sum_{k,l=1}^{s_\alpha}\frac{s_\alpha}{n}A_{kl}^{(\alpha)*}(g)A_{kl}^{(\alpha)}(g')\right]\widehat{P}_g$$
$$=\sum_{g\in G}\delta_{gg\prime}\widehat{P}_g=\widehat{P}_{g\prime}$$

取$g'=e$，上式可得：

$$\sum_{\alpha=1}^{q}\sum_{k,l=1}^{s_\alpha}A_{kj}^{(\alpha)}(e)\widehat{P}_{kl}^{(\alpha)}=\widehat{P}_e$$

由于$A_{kl}^{(\alpha)}(e)=\delta_{kl}$，所以上式继续给出：

$$\sum_{\alpha=1}^{q}\sum_{k,l=1}^{s_\alpha}\delta_{kl}\widehat{P}_{kl}^{(\alpha)}=\widehat{P}_e$$

进而：

$$\sum_{\alpha=1}^{q}\sum_{k=1}^{s_\alpha}\widehat{P}_{kk}^{(\alpha)}=\widehat{P}_e$$

（证毕）

关于这个群表示投影算符，有两个比较重要的性质，以定理的形式给出：

定理 4.7 有限群不可约酉表示基函数定理 I：

设$P_G=\{\widehat{P}_g|g\in G\}$是群 G 的函数作用算符群（相当于我们前面介绍的哈密顿算符群），由它可以定义算符$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}$。这时，有一个性质，就是一组基函数$\varphi_i^{(\alpha)}$，$i=1$、2、

…、s_α构成P_G的第α个不可约酉表示基函数的充要条件是：

$$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}\varphi_j^{(\alpha)}=\varphi_i^{(\alpha)}$$

这里$\varphi_i^{(\alpha)}$称为对称化基函数。

证明：

1. 必要性

（由$\varphi_i^{(\alpha)}$，$i=1$、2、…、s_α构成P_G的第α个不可约酉表示基证明$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}\varphi_j^{(\alpha)}=\varphi_i^{(\alpha)}$）

设$\varphi_i^{(\alpha)}$，$i=1$、2、…、s_α构成P_G的第α个不可约酉表示基，则：

$$\widehat{P}_g\varphi_k^{(\alpha)}=\sum_{l=1}^{s_\alpha}A_{lk}^{(\alpha)}(g)\varphi_l^{(\alpha)}$$

两边乘上$A_{ij}^{(\alpha)*}(g)$并对群元求和，有：

$$\begin{aligned}\sum_{g\in G}A_{ij}^{(\alpha)*}(g)\widehat{P}_g\varphi_k^{(\alpha)}&=\sum_{g\in G}A_{ij}^{(\alpha)*}(g)\sum_{l=1}^{s_\alpha}A_{lk}^{(\alpha)}(g)\varphi_l^{(\alpha)}\\&=\sum_{l=1}^{s_\alpha}\left[\sum_{g\in G}A_{ij}^{(\alpha)*}(g)A_{lk}^{(\alpha)}(g)\right]\varphi_l^{(\alpha)}\\&=\sum_{l=1}^{s_\alpha}\frac{n}{s_\alpha}\delta_{il}\delta_{jk}\,\varphi_l^{(\alpha)}\\&=\frac{n}{s_\alpha}\delta_{jk}\varphi_i^{(\alpha)}\end{aligned}$$

由定义$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}=\frac{s_\alpha}{n}\sum_{g\in G}A_{ij}^{(\alpha)*}(g)\widehat{P}_g$，上式等同于：

$$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}\varphi_k^{(\alpha)}=\delta_{jk}\varphi_i^{(\alpha)}$$

取$j=k$，则有：

$$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}\varphi_j^{(\alpha)}=\varphi_i^{(\alpha)}$$

2. 充分性（已知$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}\varphi_j^{(\alpha)}=\varphi_i^{(\alpha)}$，推$\varphi_i^{(\alpha)}$，$i=1$、2、…、$s_\alpha$构成$P_G$的第α个不可约酉表示基）

由$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}\varphi_j^{(\alpha)}=\varphi_i^{(\alpha)}$知：

$$\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\varphi_i^{(\alpha)}=\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\hat{\mathrm{P}}_{ij}^{(\alpha)}\varphi_j^{(\alpha)}$$

$$=\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\frac{\mathrm{s}_\alpha}{n}\sum_{\mathrm{g}'\in\mathrm{G}}\mathrm{A}_{ij}^{(\alpha)*}(\mathrm{g}')\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}'}\varphi_j^{(\alpha)}$$

$$=\sum_{\mathrm{g}'\in\mathrm{G}}\frac{\mathrm{s}_\alpha}{n}\mathrm{A}_{ij}^{(\alpha)*}(\mathrm{g}')\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{gg}'}\varphi_j^{(\alpha)}$$

取$\mathrm{gg}'=\mathrm{g}''$，则上式可化为：

$$=\sum_{\mathrm{g}''\in\mathrm{G}}\frac{\mathrm{s}_\alpha}{n}\mathrm{A}_{ij}^{(\alpha)*}(\mathrm{g}^{-1}\mathrm{g}'')\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}''}\varphi_j^{(\alpha)}$$

$$=\frac{\mathrm{s}_\alpha}{n}\sum_{\mathrm{g}''\in\mathrm{G}}\sum_{k=1}^{\mathrm{s}_\alpha}\mathrm{A}_{ik}^{(\alpha)*}(\mathrm{g}^{-1})\mathrm{A}_{kj}^{(\alpha)*}(\mathrm{g}'')\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}''}\varphi_j^{(\alpha)}$$

$$=\sum_{k=1}^{\mathrm{s}_\alpha}\mathrm{A}_{ik}^{(\alpha)*}(\mathrm{g}^{-1})\left[\frac{\mathrm{s}_\alpha}{n}\sum_{\mathrm{g}''\in\mathrm{G}}\mathrm{A}_{kj}^{(\alpha)*}(\mathrm{g}'')\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}''}\varphi_j^{(\alpha)}\right]$$

$$=\sum_{k=1}^{\mathrm{s}_\alpha}\mathrm{A}_{ki}^{(\alpha)}(\mathrm{g})\,\hat{\mathrm{P}}_{kj}^{(\alpha)}\varphi_j^{(\alpha)}$$

$$=\sum_{k=1}^{\mathrm{s}_\alpha}\mathrm{A}_{ki}^{(\alpha)}(\mathrm{g})\,\varphi_k^{(\alpha)}$$

这也就是说$\varphi_i^{(\alpha)}$，$i=1$、2、…、s_α构成P_G的第α个不可约酉表示基。

（证毕）

定理 4.8 有限群不等价、不可约酉表示的基函数定理 II：

有限群不等价、不可约酉表示的基函数$\varphi_i^{(\alpha)}$，$i=1$、2、…、s_α，$\alpha=1$、2、…、q满足如下正交关系：

$$\left(\varphi_i^{(\alpha)}\middle|\varphi_j^{(\beta)}\right)=\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}f^{(\alpha)}$$

其中$f^{(\alpha)}$与 i、j 无关。

证明：

设 G 是系统的对称群，P_G是 G 对应的算符群（变换群），也就是说P_G是 G 的表示（G 到线性变换群P_G的一一对应关系成立）。

由于这个表示是酉表示，$\hat{P}_g$这个线性变换群P_G中的元素是个酉变换。这些是已知条件。

除了这个已知条件，另外一个已知条件是：$\varphi_i^{(\alpha)}$，$i = 1$、2、…、s_α与$\varphi_j^{(\beta)}$，$j = 1$、2、…、s_β都是线性变换群P_G的表示空间，承载的是群 G 的第α个与第β个不等价不可约酉表示。

由这些已知条件，我们可以得到：

$$\left(\varphi_i^{(\alpha)}\middle|\varphi_j^{(\beta)}\right) = \left(\hat{P}_g\varphi_i^{(\alpha)}\middle|\hat{P}_g\varphi_j^{(\beta)}\right)$$

因为$\hat{P}_g$是酉变换（保内积）。

而这个式子的右边我们可以写成：

$$\left(\sum_{k=1}^{s_\alpha} A_{ki}^{(\alpha)}(g)\varphi_k^{(\alpha)} \middle| \sum_{l=1}^{s_\beta} A_{lj}^{(\beta)}(g)\varphi_l^{(\beta)}\right)$$
$$= \sum_{k=1}^{s_\alpha}\sum_{l=1}^{s_\beta} A_{ki}^{(\alpha)*}(g)A_{lj}^{(\beta)}(g)\left(\varphi_k^{(\alpha)}\middle|\varphi_l^{(\beta)}\right)$$

也就是说：

$$\left(\varphi_i^{(\alpha)}\middle|\varphi_j^{(\beta)}\right) = \sum_{k=1}^{s_\alpha}\sum_{l=1}^{s_\beta} A_{ki}^{(\alpha)*}(g)A_{lj}^{(\beta)}(g)\left(\varphi_k^{(\alpha)}\middle|\varphi_l^{(\beta)}\right)$$

这个式子两边都对 g 求和，左边不依赖于 g，相当于直接乘上 n，而右边有正交性定理，因此有：

$$n\left(\varphi_i^{(\alpha)}\middle|\varphi_j^{(\beta)}\right) = \sum_{k=1}^{s_\alpha}\sum_{l=1}^{s_\beta} \frac{n}{s_\alpha}\delta_{kl}\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}\left(\varphi_k^{(\alpha)}\middle|\varphi_l^{(\beta)}\right)$$
$$= \frac{n}{s_\alpha}\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}\sum_{k=1}^{s_\alpha}\left(\varphi_k^{(\alpha)}\middle|\varphi_k^{(\beta)}\right)$$

两边 n 约掉，有：

$$\left(\varphi_i^{(\alpha)}\middle|\varphi_j^{(\beta)}\right) = \frac{1}{s_\alpha}\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}\sum_{k=1}^{s_\alpha}\left(\varphi_k^{(\alpha)}\middle|\varphi_k^{(\beta)}\right)$$

正交性成立。

取：

$$f^{(\alpha)}=\frac{1}{\mathrm{s}_{\alpha}}\sum_{k=1}^{\mathrm{s}_{\alpha}}\left(\varphi_{k}^{(\alpha)}\middle|\varphi_{k}^{(\beta)}\right)$$

这个量显然与 i、j 无关。这也就是说对一个有限群，不等价不可约酉表示的基函数相互正交。

（证毕）

在前面两个基函数定理中，我们讨论的是一个群的不可约表示空间基函数的性质。如果把哈密顿量的对称性同时考虑进去，我们还有另外一个定理。

定理 4.9 若$\varphi_{k}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})$是哈密顿算符群的第$\alpha$个不等价不可约表示的第 k 个基，那么$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{r}})\varphi_{k}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})$也按照这个群的第$\alpha$个不等价不可约表示的第 k 个基变化。

（换句话说，$\varphi_{i}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})$，$i=1$、2、…、$\mathrm{s}_{\alpha}$，形成哈密顿算府群第$\alpha$个不等价不可约表示的一组基，则$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{r}})\varphi_{i}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})$，$i=1$、2、…、$\mathrm{s}_{\alpha}$，也形成哈密顿算府群第$\alpha$个不等价不可约表示的一组基。这两组基，次序一样）

证明：

$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}$是哈密顿算符群的一个变换算符，那么，由$\varphi_{k}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})$是哈密顿算符群的第$\alpha$个不等价不可约表示的第 k 个基知：

$$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\varphi_{k}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})=\sum_{l=1}^{\mathrm{s}_{\alpha}}\mathrm{A}_{lk}^{(\alpha)}(\mathrm{g})\varphi_{l}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})$$

由$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{r}})\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}=\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{r}})$又知：

$$\begin{aligned}\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\left[\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{r}})\varphi_{k}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})\right]&=\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{r}})\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{g}}\varphi_{k}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})\\&=\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{r}})\sum_{l=1}^{\mathrm{s}_{\alpha}}\mathrm{A}_{lk}^{(\alpha)}(\mathrm{g})\varphi_{l}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})\\&=\sum_{l=1}^{\mathrm{s}_{\alpha}}\mathrm{A}_{lk}^{(\alpha)}(\mathrm{g})\left[\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{r}})\varphi_{l}^{(\alpha)}(\vec{\mathrm{r}})\right]\end{aligned}$$

这也就是说$\varphi_k^{(\alpha)}(\vec{r})$，$k=1$、⋯、$s_\alpha$是哈密顿算符群的第$\alpha$个不等价不可约表示的基时，$\widehat{H}(\vec{r})\varphi_k^{(\alpha)}(\vec{r})$，$k=1$、⋯、$s_\alpha$也构成哈密顿算符群的第$\alpha$个不等价不可约表示的基。

（证毕）

上面的这些基函数定理非常有用，因为它可以让很多问题简化。一个典型的例子就是解薛定谔方程的时候对久期行列式的对角化。

这个怎么一个事情呢？就是很多薛定谔方程没有解析解，我们求解的时候最重要的一个步骤用一组基来展开波函数，然后对角久期行列式。

我们设这一组基是：$\varphi_1(\vec{r})$、$\varphi_2(\vec{r})$、⋯、$\varphi_n(\vec{r})$、⋯，波函数的展开形式是：

$$\Psi(\vec{r})=\sum_{p=1}^{\infty}c_p\varphi_p(\vec{r})$$

这里c_p为待定的展开系数。把这样一个表达式带入薛定谔方程中，并用各个基函数去做内积，我们有：

$$\left|\left(\varphi_q(\vec{r})\middle|\widehat{H}(\vec{r})\varphi_p(\vec{r})\right)-E\left(\varphi_q(\vec{r})\middle|\varphi_p(\vec{r})\right)\right|=0$$

这样一个久期方程了。

为了求解这个久期方程，我们的基函数空间必须做个截断，因为这个 p、q 不能一直走下去，这个近似叫截断近似，这个在量子力学里面你们都接触过。当$\varphi_p(\vec{r})$走遍从$\varphi_1(\vec{r})$到$\varphi_N(\vec{r})$的时候，久期行列式就是一个 N×N 的行列式。在这个行列式中，假如基函数本身没有什么对称性，那么它就是一个正常的 N×N 的行列式，解起来计算量随 N 的变化规律是N^3。但是如果$\varphi_p(\vec{r})$本身有对称性，那么根据上面两个定理，属于不同不等价不可约表示的矩阵元就正交。这样这个矩阵就会具备很好的对角化的特征，解起来就很方便了。

举个例子：

已知$\Phi_1(\vec{r})$、⋯、$\Phi_6(\vec{r})$这个函数组形成波函数的展开空间。由它们直接形成的哈密顿算符群的表示是可约的，但如果通过线性组合，我们是可以找到另外六个线性无关的向量，来承载不可约表示的。如果以原来的基展开波函数，那么久期行列式就是正常的 6×6 行列式。但如果用对称化的基函数，那么久期行列式就可以简单很多。

如果组合成的六个对称化的波函数是：$\varphi_{11}^1(\vec{r})$、$\varphi_{11}^2(\vec{r})$、$\varphi_{12}^2(\vec{r})$、$\varphi_{11}^3(\vec{r})$、$\varphi_{12}^3(\vec{r})$、$\varphi_{13}^3(\vec{r})$，这里我们用上标代表那个不可约表示，下标的第一个数代表这个不可约表示出现的次数，第二个数代表这个不可约表示第几个基。这种情况就是 1、2、3 维不可约表示各出现一次，共六个对称化基。

这时，由我们上面讲到的后两个定理，我们知道矩阵元：

$$\mathrm{K}_{jn,im}^{lk} = \left(\varphi_{jn}^{l}(\vec{r})\middle|\hat{\mathrm{H}}(\vec{r})\varphi_{im}^{k}(\vec{r})\right) - \mathrm{E}\left(\varphi_{jn}^{l}(\vec{r})\middle|\varphi_{im}^{k}(\vec{r})\right)$$

直接对角，相应的行列式为：

$$\begin{vmatrix} \mathrm{K}_{11,11}^{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{K}_{11,11}^{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{K}_{12,12}^{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathrm{K}_{11,11}^{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathrm{K}_{12,12}^{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathrm{K}_{13,13}^{33} \end{vmatrix} = 0$$

而如果组合成的六个对称化的波函数是：$\varphi_{11}^1(\vec{r})$、$\varphi_{21}^1(\vec{r})$、$\varphi_{11}^2(\vec{r})$、$\varphi_{12}^2(\vec{r})$、$\varphi_{21}^2(\vec{r})$、$\varphi_{22}^2(\vec{r})$，1 维、2 维不可约表示各出现两次，那么这个行列式就不能完全对角了，但还可以保持比较强的准对角特征。如果我们把它们重新排列顺序：$\varphi_{11}^1(\vec{r})$、$\varphi_{21}^1(\vec{r})$、$\varphi_{11}^2(\vec{r})$、$\varphi_{21}^2(\vec{r})$、$\varphi_{12}^2(\vec{r})$、$\varphi_{22}^2(\vec{r})$，那么行列式为：

$$\begin{vmatrix} K_{11,11}^{11} & K_{11,21}^{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K_{21,11}^{11} & K_{21,21}^{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & K_{11,11}^{22} & K_{11,21}^{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & K_{21,11}^{22} & K_{21,21}^{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K_{12,12}^{22} & K_{12,22}^{22} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K_{22,12}^{22} & K_{22,22}^{22} \end{vmatrix} = 0$$

总的来说，利用对称化的基函数还是会让这个久期行列式简单很多。

既然对称化的基函数有这些优点，那么从一般的基中如何产生对称化的基函数呢？这个步骤比较规范，我们可以利用的就是前面讲的投影算符$\widehat{P}_{ii}^{(\alpha)}$。我们把投影算符作用到这个基函数，也就是向量上，得到的就是这个向量在我这个对称化的基上的投影。有了这个投影，我就可以用：

$$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}\varphi_j^{(\alpha)} = \varphi_i^{(\alpha)}$$

得到其它的基函数了。

当然，这样做的前提是我们知道所有不等价不可约表示的矩阵元，从而可以构造出来$\widehat{P}_{ij}^{(\alpha)}$。如果我们不知道这个，我们只知道特征标表，那么我们也可以通过下面的三个简单的步骤来执行：

1. 构造特征标投影算符：

$$\widehat{P}^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(\alpha)*}(g)\widehat{P}_g$$

   它和投影算符$\widehat{P}_{ii}^{(\alpha)}$的关系是：

$$\widehat{P}^{(\alpha)} = \sum_{i=1}^{s_\alpha}\widehat{P}_{ii}^{(\alpha)}$$

2. 然后我们把这样的一个算符作用到线性空间 V 的任意一个向量上。这个向量记为Ψ，它可以分解为群的不等价不可约表示的基的线性和：

$$\Psi = \sum_i\sum_\beta\sum_l a_{il}^{(\beta)}\varphi_{il}^{(\beta)}$$

其中 i 是某个不等价不可约表示重复出现的 index，β是不等价不可约表示的 index，l 是这个不等价不可约表示中基的 index。

把$\hat{\mathrm{P}}^{(\alpha)}$作用到$\Psi$上，效果为:

$$\hat{\mathrm{P}}^{(\alpha)}\Psi = \hat{\mathrm{P}}^{(\alpha)}\sum_i\sum_\beta\sum_l a_{il}^{(\beta)}\varphi_{il}^{(\beta)}$$

$$= \sum_i\sum_\beta\sum_l a_{il}^{(\beta)}\hat{\mathrm{P}}^{(\alpha)}\varphi_{il}^{(\beta)}$$

$$= \sum_i\sum_\beta\sum_l a_{il}^{(\beta)}\sum_{j=1}^{s_\alpha}\hat{\mathrm{P}}_{jj}^{(\alpha)}\varphi_{il}^{(\beta)}$$

$$= \sum_i\sum_\beta\sum_l a_{il}^{(\beta)}\sum_{j=1}^{s_\alpha}\delta_{jl}\,\delta_{\alpha\beta}\varphi_{il}^{(\beta)}$$

$$= \sum_i\sum_\beta\sum_l a_{il}^{(\beta)}\delta_{\alpha\beta}\varphi_{il}^{(\beta)}$$

$$= \sum_i\sum_l a_{il}^{(\alpha)}\varphi_{il}^{(\alpha)}$$

也就是说你任意给我一个向量，我只把它属于我的某个不等价不可约表示表示空间的部分取出来。如果我这个不可约表示就出现一次，很好办。如果出现多次，我需要在进行一个内部的对称化处理。

3. 用$\hat{\mathrm{P}}_g$对这些向量进行作用，找出其它维度上的独立向量。

我们看几个例子。

例1. D3 群的表示空间为 x、y、z 的二次齐次函数空间，基为:

$\varphi_1 = x^2$、$\varphi_2 = y^2$、$\varphi_3 = z^2$、$\varphi_4 = xy$、$\varphi_5 = yz$、$\varphi_6 = xz$

试用投影算符的方法将其组合为 6 个对称化的基函数，并验证新基下表示的对称性。

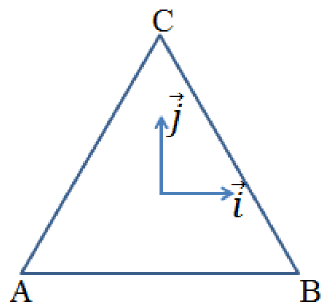
我们这里需要的是 D3 群的特征标表:

	1{e}	2{d}	3{a}

A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
A_3	2	-1	0

解：

第一步是求出 D3 群中的元素在三维欧式空间中的表示矩阵以及它们的逆，因为我们要操作的线性空间是一个函数空间，我们依赖的基本变换关系是：$\widehat{P}_g\Psi(\vec{r}) = \Psi(g^{-1}\vec{r})$。



$$A(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = A^{-1}(e)$$

$$A(d) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = A^{-1}(f)$$

$$A(f) = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = A^{-1}(d)$$

$$A(a) = \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = A^{-1}(a)$$

$$A(b) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = A^{-1}(b)$$

$$A(c) = \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = A^{-1}(c)$$

第二步是写出三个不可约表示的特征标投影算符：

$$\widehat{P}^{(1)} = \frac{1}{6}(\widehat{P}_e + \widehat{P}_d + \widehat{P}_f + \widehat{P}_a + \widehat{P}_b + \widehat{P}_c)$$

$$\widehat{P}^{(2)} = \frac{1}{6}(\widehat{P}_e + \widehat{P}_d + \widehat{P}_f - \widehat{P}_a - \widehat{P}_b - \widehat{P}_c)$$

$$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}=\frac{2}{6}(2\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{e}}-\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{d}}-\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{f}})$$

第三步是将这些特征标投影算符作用到基函数上面，其中$\widehat{\mathrm{P}}^{(1)}$作用的结果为：

$$\widehat{\mathrm{P}}^{(1)}x^2=\frac{1}{6}\left[x^2+\left(-\frac{1}{2}x+\frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2+\left(-\frac{1}{2}x-\frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2+\left(\frac{1}{2}x+\frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2\right.$$
$$\left.+(-x)^2+\left(\frac{1}{2}x-\frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2\right]=\frac{1}{2}(x^2+y^2)$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(1)}y^2=\frac{1}{2}(x^2+y^2)$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(1)}z^2=z^2$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(1)}xy=0$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(1)}yz=0$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(1)}xz=0$$

也就是说这一组基六个函数，往 D3 群的第一个不等价不可约表示的表示空间做投影，只能生成$\frac{1}{2}(x^2+y^2)$与z^2两个向量。

把$\widehat{\mathrm{P}}^{(2)}$作用到这六个函数上，结果是：

$$\widehat{\mathrm{P}}^{(2)}x^2=0$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(2)}y^2=0$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(2)}z^2=0$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(2)}xy=0$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(2)}yz=0$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(2)}xz=0$$

这六个函数在 A_2 这个不等价不可约表示的表示空间没有投影。

把$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}$作用到这六个函数上，结果是：

$$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}x^2=\frac{2}{6}\left[2x^2-\left(-\frac{1}{2}x+\frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2-\left(-\frac{1}{2}x-\frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2\right]=\frac{1}{2}(x^2-y^2)$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}y^2=\frac{2}{6}\left[2y^2-\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{1}{2}y\right)^2-\left(\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{1}{2}y\right)^2\right]=-\frac{1}{2}(x^2-y^2)$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}z^2=0$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}xy=xy$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}yz=yz$$
$$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}xz=xz$$

这也就是说这六个函数，往 A_3 这个不可约表示上作投影的话，可以产生 4 个线性无关的向量。这 4 个如何两两配对形成两组承载 A_3 的基？我们还需要进行进一步的变换才知道。

我们取其中的$\frac{1}{2}(x^2-y^2)$，用$\hat{P}_d$作用到它上面，效果是：

$$\hat{P}_d\frac{1}{2}(x^2-y^2)=\frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}x+\frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2-\frac{1}{2}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}x-\frac{1}{2}y\right)^2$$
$$=-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}(x^2-y^2)\right]-\frac{\sqrt{3}}{2}xy$$

也就是说$\frac{1}{2}(x^2-y^2)$与xy形成一组基。与之相应，我们还可以对 yz 做变换，知道它与xz形成一组基。最后对称化的基组就是：

$\varphi_{11}^1=\frac{1}{2}(x^2+y^2)$、$\varphi_{21}^1=z^2$、$\varphi_{11}^3=\frac{1}{2}(x^2-y^2)$、$\varphi_{12}^3=xy$、$\varphi_{21}^3=yz$、$\varphi_{22}^3=xz$。

对应的表示矩阵为：

$$A(d)=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&-1/2&\sqrt{3}/2&0&0\\0&0&-\sqrt{3}/2&-1/2&0&0\\0&0&0&0&-1/2&\sqrt{3}/2\\0&0&0&0&-\sqrt{3}/2&-1/2\end{pmatrix}$$

其它类似，用$\hat{P}_g$作用到φ_{11}^1、φ_{21}^1、φ_{11}^3、φ_{12}^3、φ_{21}^3、φ_{22}^3的方法推出。

例2. 用投影算符方法求出 D3 群的群空间中 6 个对称化的基，它们分别承载哪些不可约表示？

这道题要用到 D3 群的乘法表：

	e	**d**	**f**	**a**	**b**	**c**
e	e	d	f	a	b	c
d	d	f	e	c	a	b
F	f	e	d	b	c	a

a	a	b	c	e	d	f
b	b	c	a	f	e	d
c	c	a	b	d	f	e

解:

第一步，取 D3 群的群空间的六个基:

$\varphi_1 = e$、$\varphi_2 = d$、$\varphi_3 = f$、$\varphi_4 = a$、$\varphi_5 = b$、$\varphi_6 = c$

第二步，取特征标投影算符:

$$\widehat{P}^{(1)} = \frac{1}{6}(\widehat{P}_e + \widehat{P}_d + \widehat{P}_f + \widehat{P}_a + \widehat{P}_b + \widehat{P}_c)$$
$$\widehat{P}^{(2)} = \frac{1}{6}(\widehat{P}_e + \widehat{P}_d + \widehat{P}_f - \widehat{P}_a - \widehat{P}_b - \widehat{P}_c)$$
$$\widehat{P}^{(3)} = \frac{2}{6}(2\widehat{P}_e - \widehat{P}_d - \widehat{P}_f)$$

第三步，将这些特征标投影算符作用到群空间的基上，对$\widehat{P}^{(1)}$，由重排定理，作用到φ_1到φ_6的任何一个得到的都是:

$$\frac{1}{6}(e + d + f + a + b + c)$$

它承载 D3 的一维恒等表示。在群代数中归一化为:

$$\varphi_{11}^{1} = \frac{1}{\sqrt{6}}(e + d + f + a + b + c)$$

对$\widehat{P}^{(2)}$，它给出的结果是:$\frac{1}{6}(e + d + f - a - b - c)$或$\frac{1}{6}(a + b + c - e - d - f)$。也就是说它们往 D3 群的 A_2 表示上作投影，投影部分都是$\frac{1}{6}(e + d + f - a - b - c)$这个维度上的向量。在群代数中归一化为:

$$\varphi_{11}^{2} = \frac{1}{\sqrt{6}}(e + d + f - a - b - c)$$

还剩下四个维度，它必然给出两个二维不可约表示。但由:

$$\widehat{P}^{(\alpha)}\Psi = \sum_i \sum_l a_{il}^{(\alpha)} \varphi_{il}^{(\alpha)}$$

我们知道像上面这些例子那样我们直接把$\widehat{P}^{(\alpha)}$作用到Ψ上就得到某个不可约表示空间中的向量的例子其实是非常幸运的。很多情况下，我们还有一个同

一个不可约表示出现次数的 index 的加和。对于剩下的四个维度，如果我们直接用$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}$作用到$\varphi_1$到$\varphi_6$上，我们就会得到类似的情况。

为了处理方便，我们采取的策略是：

$$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}(\mathrm{e}+\mathrm{a})=\frac{2}{6}(2\mathrm{e}-\mathrm{d}-\mathrm{f}+2\mathrm{a}-\mathrm{c}-\mathrm{b})$$

在群代数中归一化为：

$$\varphi_{11}^{3}=\frac{1}{2\sqrt{3}}(2\mathrm{e}-\mathrm{d}-\mathrm{f}+2\mathrm{a}-\mathrm{c}-\mathrm{b})$$

然后，用$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{d}}$作用到它上面，得：

$$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{d}}\varphi_{11}^{3}=\frac{1}{2\sqrt{3}}(2\mathrm{d}-\mathrm{f}-\mathrm{e}+2\mathrm{c}-\mathrm{a}-\mathrm{b})$$

$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{d}}\varphi_{11}^{3}$与$\varphi_{11}^{3}$线性无关，但并不正交。对它们进行正交化处理，再归一化，可得：

$$\varphi_{12}^{3}=\frac{1}{2}(\mathrm{d}-\mathrm{f}+\mathrm{c}-\mathrm{b})$$

同理，有：

$$\widehat{\mathrm{P}}^{(3)}(\mathrm{e}-\mathrm{a})=\frac{2}{6}(2\mathrm{e}-\mathrm{d}-\mathrm{f}-2\mathrm{a}+\mathrm{c}+\mathrm{b})$$

进而：

$$\varphi_{21}^{3}=\frac{1}{2\sqrt{3}}(2\mathrm{e}-\mathrm{d}-\mathrm{f}-2\mathrm{a}+\mathrm{c}+\mathrm{b})$$

同样，用$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{d}}$作用到它上面，在与$\varphi_{21}^{3}$进行正交归一处理，可得：

$$\varphi_{22}^{3}=\frac{1}{2}(\mathrm{d}-\mathrm{f}+\mathrm{b}-\mathrm{c})$$

4.4 矩阵元定理与选择定则、电偶极跃迁

这一节说的是微扰引起的跃迁，以及跃迁矩阵元与对称性之间的关系。也就是说我系统本身有个$\widehat{\mathrm{H}}_0$，系统处在一系列分立的本征态上，每个本征态都可以用哈密顿算符群的一个不等价不可约表示的基来标识。比如Ψ_α、Ψ_β，它们都是某个不可约表示的基，对应$\widehat{\mathrm{H}}_0$的哈密顿算符群。

现在你给我一个扰动$\hat{H}'$，根据微扰理论，这个系统的两个态就可能通过$(\Psi_\alpha|\hat{H}'\Psi_\beta)$联系起来了。$(\Psi_\alpha|\hat{H}'\Psi_\beta)$是跃迁矩阵元。严格意义上，我可以把它算出来。怎么算，是量子力学、固体物理这些课程要告诉我们的事情。群论这门课程要干的事情，是通过我们已有的群论的知识，去理解这个矩阵元什么时候必须是零，什么时候可以不为零？也就是给我们一个思路去判断，这个思路是基于对称性原理的。

怎么去理解这个思路呢？很简单，就是把我这个跃迁矩阵元中的三个部分分别当成$\hat{H}_0$的哈密顿算符群的表示基函数：

第一部分是$\hat{H}'$，它可以是一个算符，也可以是个函数。在这里我们把它看作$\hat{H}_0$的哈密顿算符群的一个表示（记为D_v）的基（这个表示不一定不可约）。

第二部分是Ψ_β，它承载的是$\hat{H}_0$的哈密顿算符群的一个不可约表示（记为D_β）。这两部分合起来，$\hat{H}'\Psi_\beta$这个函数，对应的，就是D_v与D_β的直积表示的基函数。

第三个部分是Ψ_α，它承载的是$\hat{H}_0$的哈密顿算符群的一个不可约表示（记为D_α）。

这个时候，我们求跃迁矩阵元$(\Psi_\alpha|\hat{H}'\Psi_\beta)$这个内积，就可以利用不可约表示基的正交关系来判断。我们要做的事就是先做$D_v \otimes D_\beta$，然后把它分解，看是否有D_α的成分。如果有，跃迁被对称性允许；没有，被禁止。就这么简单。

为了满足跃迁被对称性允许，我们对$\hat{H}'$的对称性有没有什么要求？答案是：有。我们可以想一下，假如这个$\hat{H}'$的对称性很高，以至于对所有$\hat{H}_0$中的对称操作，它都不变。那么它承载的是$\hat{H}_0$的哈密顿算符群的什么表示？

一维恒等。这样的话$D_v \otimes D_\beta = D_\beta$，也就是说$\hat{H}'\Psi_\beta$承载的$\hat{H}_0$的哈密顿算符群的表示，$\Psi_\beta$承载的完全相同！并且对应的表示中的基的 index 也完全相同！

这个时候，如果Ψ_α与Ψ_β对应的是同一个不可约表示的同一个基的话，这个跃迁还是被允许的。不然，所以这个跃迁将完全被禁止。

同时反过来，对微扰$\widehat{\mathrm{H}}'$而言，如果它的对称性比$\widehat{\mathrm{H}}_0$的低，那么$\widehat{\mathrm{H}}'\Psi_\beta$在进行直积后做直和分解，包含$\Psi_\alpha$对应的不等价不可约表示的基的几率会大大增加。因此，从对称性的角度，我们总是希望$\widehat{\mathrm{H}}'$的对称性低，这样才能尽量多的诱发出系统在$\widehat{\mathrm{H}}_0$的不同本征态之间的跃迁。

有了这个认识，我们来看最常见的一种情况，扰动是个电磁场。电场：$\vec{\mathrm{E}} = -\frac{\partial \vec{\mathrm{A}}}{\partial \mathrm{t}}$，磁场：$\vec{\mathrm{B}} = \nabla \times \vec{\mathrm{A}}$。加入电磁场后，哈密顿量变成了：

$$\widehat{\mathrm{H}}(\vec{\mathrm{r}}) = \frac{1}{2\mathrm{m}}\left(\hat{\mathrm{p}} - \frac{\mathrm{e}}{\mathrm{c}}\vec{\mathrm{A}}\right)^2 + \mathrm{V}(\vec{\mathrm{r}})$$
$$= \frac{1}{2\mathrm{m}}\hat{\mathrm{p}}^2 + \mathrm{V}(\vec{\mathrm{r}}) - \frac{\mathrm{e}}{\mathrm{mc}}\hat{\mathrm{p}}\cdot\vec{\mathrm{A}} + \frac{\mathrm{e}^2\mathrm{A}^2}{2\mathrm{mc}^2}$$

在弱场下，最后一项是绝对的微扰。讨论这个跃迁问题，我们很自然的把$\widehat{\mathrm{H}}_0$与$\widehat{\mathrm{H}}'$选为：

$$\widehat{\mathrm{H}}_0 = \frac{1}{2\mathrm{m}}\hat{\mathrm{p}}^2 + \mathrm{V}(\vec{\mathrm{r}})$$
$$\widehat{\mathrm{H}}' = -\frac{\mathrm{e}}{\mathrm{mc}}\hat{\mathrm{p}}\cdot\vec{\mathrm{A}}$$

这个时候，跃迁矩阵元为：$\left(\Psi_\alpha\middle|-\frac{\mathrm{e}}{\mathrm{mc}}\hat{\mathrm{p}}\cdot\vec{\mathrm{A}}\,\Psi_\beta\right)$。这里$\hat{\mathrm{p}}$是个动量算符，当我对系统进行对称操作的时候，它是会变化的。$\vec{\mathrm{A}}$是外场，你对系统进行对称操作，对我而言，是你的家务事，与我无关。$-\frac{\mathrm{e}}{\mathrm{mc}}$是个常数，对称操作跟它更不相关了。

因此，从对称性的角度来说，我这个跃迁矩阵元为不为零，完全由$\left(\Psi_\alpha\middle|\hat{\mathrm{p}}\middle|\Psi_\beta\right)$决定。对$\left(\Psi_\alpha\middle|\hat{\mathrm{p}}\middle|\Psi_\beta\right)$这个矢量，我们$\frac{\mathrm{mc}}{i\hbar}\left[\vec{\mathrm{r}},\widehat{\mathrm{H}}\right]$来代替$\hat{\mathrm{p}}$，它可以进一步化为：

$$\frac{\mathrm{mc}}{i\hbar}(\mathrm{E}_\alpha - \mathrm{E}_\beta)\left(\Psi_\alpha\middle|\vec{\mathrm{r}}\middle|\Psi_\beta\right)$$

也就是说归根结底，如果我们想用对称性的语言来描述$\left(\Psi_\alpha\middle|\widehat{\mathrm{H}}'\Psi_\beta\right)$这个外界电磁场所引起的跃迁矩阵元的话（对应光子吸收过程），它的性质与$\left(\Psi_\alpha\middle|\vec{\mathrm{r}}\middle|\Psi_\beta\right)$这个矩

阵元是完全一样的。

这里，由于电偶极算符$\mu = -e\vec{r}$与它只差一个正电子电荷，我们也把这种跃迁称为电偶极跃迁。

对于这样的一个电偶极跃迁，对称性对它的选择定则有什么样的影响呢？我们可以看一个例子，晶体，对称性是O_h，特征标表是：

repr.	basis functions	E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2'$	$8C_3$	i	$3iC_4^2$	$6iC_4$	$6iC_2'$	$8iC_3$
A_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_2^+	$\begin{cases} x^4(y^2-z^2)+ \\ y^4(z^2-x^2)+ \\ z^4(x^2-y^2) \end{cases}$	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1	1
E^+	$\begin{cases} x^2-y^2 \\ 2z^2-x^2-y^2 \end{cases}$	2	2	0	0	−1	2	2	0	0	−1
T_1^-	x,y,z	3	−1	1	−1	0	−3	1	−1	1	0
T_2^-	$z(x^2-y^2)\ldots$	3	−1	−1	1	0	−3	1	1	−1	0
A_1^-	$\begin{cases} xyz[x^4(y^2-z^2)+ \\ y^4(z^2-x^2)+ \\ z^4(x^2-y^2)] \end{cases}$	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
A_2^-	xyz	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	−1
E^-	$xyz(x^2-y^2)\ldots$	2	2	0	0	−1	−2	−2	0	0	1
T_1^+	$xy(x^2-y^2)\ldots$	3	−1	1	−1	0	3	−1	1	−1	0
T_2^+	xy,yz,zx	3	−1	−1	1	0	3	−1	−1	1	0

对$\left(\Psi_\alpha\middle|\vec{r}\middle|\Psi_\beta\right)$而言，由上表可知，$\vec{r}$承载的表示是$T_1^-$，也叫$T_{1u}$。这个时候，如果我的$\Psi_\beta$为$T_2^+$，也叫$T_{2g}$。那么这个时候$T_{1u}\otimes T_{2g}$对应的特征标就是：

E	$3C_4^2$	$6C_4^1$	$6C_2^1$	$8C_3$	i	$3iC_4^2$	$6iC_4^1$	$6iC_2^1$	$8iC_3$
9	1	-1	-1	0	-9	-1	1	1	0

它可以分解为：$A_{2u}\otimes E_u\otimes T_{1u}\otimes T_{2u}$，也就是上个表中的：$A_2^-\otimes E^-\otimes T_1^-\otimes T_2^-$。

也就是说在这个电偶极跃迁中，如果初态是一个具有T_{2g}对称性的态，那么末态的对称性只能是上面这四种。

这里大家有两个地方可以注意：

1. 在这个表中，因为O_h属于立方系，x、y、z 三个轴等价，所以我的吸收对光的

偏振方向没有选择。如果我把晶体对称性破坏为四方，比如$\mathrm{D_{4h}} = \mathrm{D_4} \otimes \{E, i\}$：

D_4 (422)			E	$C_2 = C_4^2$	$2C_4$	$2C_2'$	$2C_2''$
x^2+y^2, z^2		A_1	1	1	1	1	1
	R_z, z	A_2	1	1	1	-1	-1
x^2-y^2		B_1	1	1	-1	1	-1
xy		B_2	1	1	-1	-1	1
(xz, yz)	$\left.\begin{matrix}(x,y)\\(R_x,R_y)\end{matrix}\right\}$	E	2	-2	0	0	0

$D_{4h} = D_4 \otimes i$ $(4/mmm)$ (tetragonal)

这个时候大家就会注意到 x、y 与 z 承载的不可约表示就不一样了。这个时候，光的偏振方向就会有由对称性诱发的选择性吸收了。具体你要做的，还是上面的步骤，直积，再分解。对于同一个初态，偏振光沿 z 方向的时候，我用$\mathrm{A_2}$作直积；偏振光在 xy 平面时，我用E来作。这样允许的末态就会不一样了。

2. 在$A_{2\mathrm{u}} \otimes E_{\mathrm{u}} \otimes T_{1\mathrm{u}} \otimes T_{2\mathrm{u}}$这四个态中，我们有共同的下标 u，代表我的末态是奇宇称。这个是为什么？

   原因很简单，我的初态是偶宇称，微扰是奇宇称，那末态必须为奇宇称，不然空间积分为零。反过来，如果我的初态是奇宇称，那么我的末态就必须是偶宇称。也就是说电偶极跃迁只能发生在两个不同宇称的态之间。

类似讨论有意义的体系是具有中心反演对称性的体系。这里，我们可以通过$\hat{\mathrm{H}}'$的对称性，展开类似讨论。如果$\hat{\mathrm{H}}'$对中心反演不变，那么跃迁应该是发生在具有相同宇称的态之间了。

在上面的讨论中，有一个很重要的细节，不知道你们注意到没有？就是我的哈密顿量里面，变量只有$\vec{\mathrm{r}}$，这个电子坐标。这就意味着我们所讨论的光吸收或辐射对应的必须是电子态之间的跃迁。由于电偶极算符的奇宇称，两个电子态之

间的宇称必须相反。

但在实际的情况中，后来人们发现，被电偶极跃迁联系起来的两个电子态的宇称有时是相同的。这是为什么？这个对应的实际情况一般是跃迁过程中包含了声子的参与。这样的话我们考虑的跃迁矩阵元就必须是这样一个东西了：

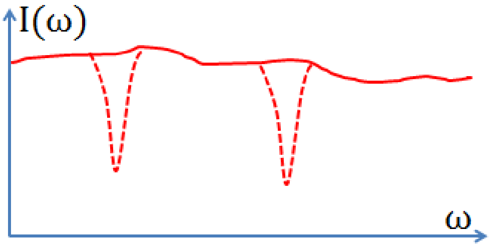
$$\langle \Psi_v' \Psi_e' | \vec{\mu} | \Psi_v \Psi_e \rangle$$

我们要做的，就是表示D_e、D_v、D_μ的直积，然后分解，看是否包含$D_e' \otimes D_v'$了。这个时候，很多在纯电子行为中被禁戒的跃迁就可以发生了。也就是说不是我们的对称性分析出了问题，而是实际情况更复杂了。对这种复杂的情况，对称性的语言依然适用，只不过复杂了一些。

4.5 红外、拉曼谱、和频光谱

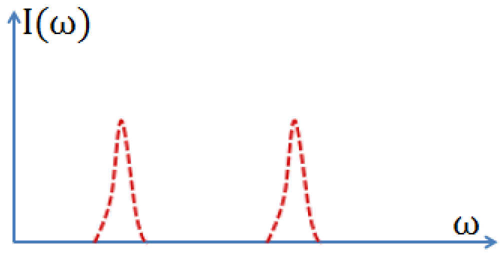
声子本身，除了对电子态之间的跃迁起辅助作用外，它们也是可以吸收或者散射电磁波的。与之相应，有两种非常常用的实验手段，红外（IR）与拉曼（Raman）。在分析这两种谱的时候，对称性也会帮助我们理解很多东西。

这两个里面，红外比较简单，说的是这样一个事情。我们对一个样品打入一个连续的、处于红外波段的光谱。假设我们入射光的强度随频率的变化是下面图中的这个实线。那么在每个频率，我们给样品的，是一个以这个频率振荡的电磁场。



在我们的光经过样品的时候，对于有些频率，由于它与晶格或者分子的本征振动频率相同，这个能量会被声子吸收，从而使得我们在不放样品的时候得到的

谱线是上图中的实线，放了样品后，得到的是虚线。如果把它们的差求出来，就是：



这个谱，反映的就是我们的样品在红外这个波段，由于声子振动对电磁场的吸收，因此叫红外谱。

对于这样的一个吸收，它的选择定则应该怎样理解呢？我们可以这样去想：我们加入的电磁场（光子）的电场强度为$\vec{E}$。对于频率为ω的光子，它与晶格本身的处在这个频率上的一个本征振动耦合，从而损失能量，被吸收。假设这个振动所带来的样品电偶极矩的变化是$\vec{\mu}$。这个$\vec{\mu}$是由原子核偏离平衡位置而引起的电荷重新分布决定的，叫 induced dipole moment。那么由于声子与电磁场的耦合而带来的系统的能量降低就是：

$$\hat{H}' = -\vec{E}\cdot\vec{\mu}$$

与之相应，这个微扰所带来的跃迁矩阵元就是：

$$\langle \Psi_v' | \hat{H}' | \Psi_v \rangle$$

其中Ψ_v为振动的基态，就是原子核处于平衡位置的状态，它所对应的$\hat{H}_0$的哈密顿算符群的不可约表示是一维恒等表示。

$\hat{H}' = -\vec{E}\cdot\vec{\mu}$，其中$\vec{E}$是不依赖于晶体取向的外场（由光子给的），对晶体或分子进行的对称操作对它不起作用。$\vec{\mu}$是由振动引起的系统电偶极矩的变化，它在对称操作下的变换规律与 x、y、z 这些函数是一样的。当取一个偏振光只有E_x的分量的时候，在振动中，只有μ_x对$\hat{H}'$有贡献。与之相应，微扰项所承载的表示

与 x 所承载的表示是相同的。

这时，在$\hat{\mathrm{H}}'$与Ψ_v作直积的时候，由于Ψ_v的表示为一维恒等表示，结果就是只承载一个 x 本身可以承载的表示。相应，Ψ_v'这个吸收了 IR 光子所对应的本征振动态，也必须承载这个 x 可以承载的不可约表示。这也就意味着在点群特征标表中，只有那些 x 承载的不可约表示是对应的本征振动可以被激发。

这样的话红外吸收的选择定则就简单了，以具有C_{2h}对称性的晶体为例，它的特征标表是：

$C_{2h}(2/m)$			E	C_2	σ_h	I
x^2、y^2、z^2、xy	R_z	A_g	1	1	1	1
	z	A_u	1	1	−1	−1
xz、yz	R_x、R_y	B_g	1	−1	−1	1
	x、y	B_u	1	−1	1	−1

由这个特征标表，我们可以知道当偏振光沿 z 轴时，它只能激发对称性为A_u的本征振动；当偏振光沿 x、y 轴时，它只能激发对称性为B_u的本征振动。

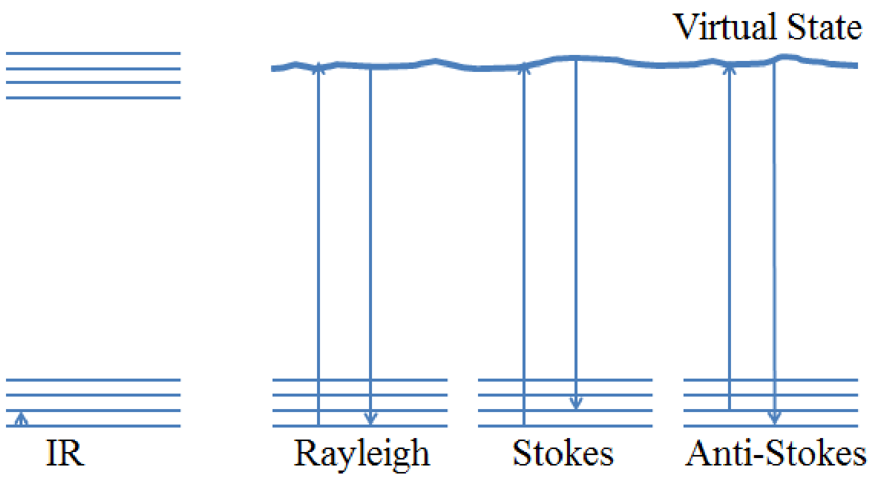
当偏振方向含 z 轴分量，也含 x 或 y 轴分量的时候，它可以激发A_u或者B_u，但它怎么都不能激发A_g与B_g。

大家注意一下，这里，对下标有个选择性。u 这个奇宇称可以，g 这个偶宇称就不行。这个是为什么呢？原因很简单，我们选择的这个体系具有中心反演对称性。因此，这个系统的本征态具有特定的宇称。我们这里激发振动的时候是由基态，也就是承载一维恒等表示的状态向某本征振动态激发。基态是偶宇称，中间的微扰是奇宇称，所以末态必须是奇宇称。

当我的系统不具备中心反演对称性的时候，如何去判断一个本征振动是否具

有红外活性呢？答案很简单，上个例子前半部分的讨论依然成立。也就是承载 x、y、z 这些一次齐次函数的不可约表示所对应的本征振动依然具有红外活性。唯一不同的地方就是宇称不再是个好量子数了，这个不可约表示不会再有‘u’这样的下标了。

除了红外，以后你们不管做不做实验，在实际科研中都很可能接触到另一类光谱，拉曼（这个拉曼和玻色一样都是印度人，玻色没得诺奖，拉曼得了，同时拉曼还是印度科学院的缔造者，对近代物理学在印度的传播起了非常大的作用）。在拉曼谱的理解上应该说对一个真实系统电子能级与振动能级的认识是基础。大家可以看这样一个图像：



对任何多原子系统，它的能级都可分为电子能级与振动能级。在能量空间的分布一般如上图。在电子的基态上，会比较密地分布一些振动能级。它们合在一起占据了一些能量空间，对应的是电子基态，振动的基态与不同激发态。之后会有一个很大的禁区，这个禁区之后才是电子的第一激发态以及它对应的振动基态与不同激发态。

在红外吸收中，吸收谱对应的是声子的共振吸收。系统的跳跃就像左边这个图描述的。电子始终都处在基态，在吸收过程中，因为原子核动了，电子在其基

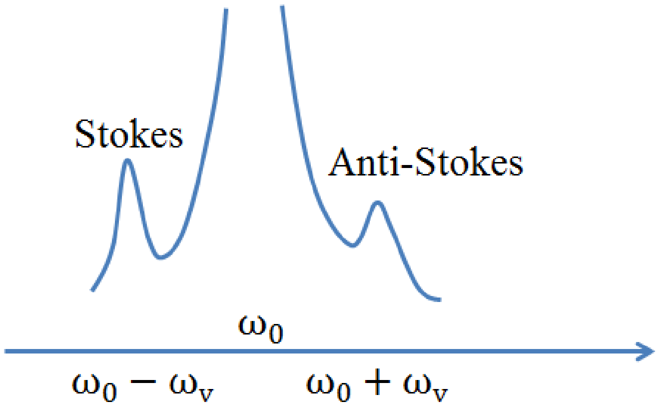
态上有个重新分布，这个重新分布带来一个电偶极矩，这个电偶极矩与外场耦合产生共振。系统的状态,是从电子基态的声子基态,调到电子基态的声子激发态。

而拉曼谱，它不是吸收谱，它是散射谱。它对应的物理过程是一束光照到样品上以后，由于光子本身的电磁场，可以诱发一个样品的极化。我们把这个由光子的电磁场诱发的样品的极化描述成一个虚的吸收,也就是说电子从基态跃迁到了一个虚的激发态。当这个光子被弹性地散射（也就是瑞利散射）的时候，光子与物质相互作用后只改变动量，不改变能量，系统跳回基态。整个物理过程就像第二列描述的这样。(跟瑞利散射相关的最常见的自然现象就是晴天天是蓝的，官方解释是散射强度与波长的四次方成反比，蓝光散射的多)。

除了这个弹性散射，很自然我们还可以想到非弹性散射。在这个非弹性散射中，入射光在回到电子基态的时候，会损失或得到一定的能量。损失能量过程对应的是它回到了电子的基态，声子的激发态。光子的能量损失给声子了。这个过程叫 Stokes 散射。而得到能量的过程对应的是系统开始处在电子基态，声子的激发态。散射完了以后系统回到电子基态，声子基态。与之对应，在这个过程就就是样品的声子把能量给了光子。当时人们对声子这个东西应该说还没有很深入的理解,但这个非弹性散射过程的特性,使得拉曼在这个工作做出(1928 年)之后，很快（1930 年）就得了诺贝尔物理奖。这个背后的原因是什么，其实很值得我们回味，可能这个光子能量的改变所蕴藏的对光的粒子性支持，应该说是很重要的原因，因为那个年代是建立量子力学基本概念的年代，最热的就是这个东西。康普顿散射也是类似的东西，光子和电子的非弹性散射，1923 年的实验，1927 年就得了诺奖。现在的科研处在一个什么样的状态，有什么样的特征，这个需要大家在学习的过程中同样慢慢体会。一句话，物理学发展史上任何重要的东西，重不

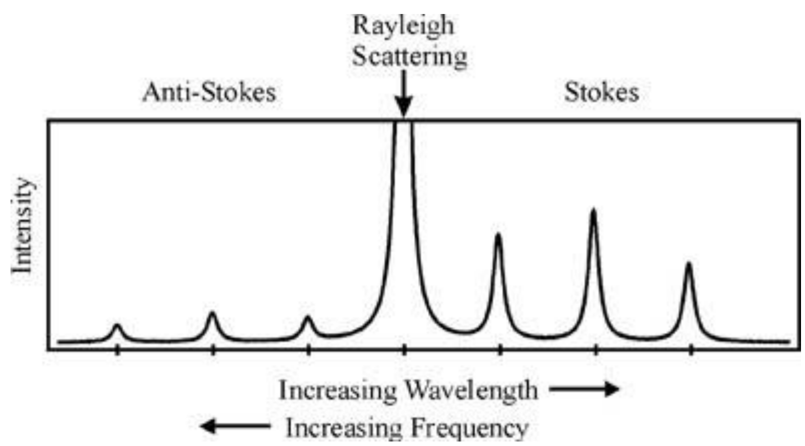
重要，这个要通过时间检验，看它到底对我们对这个世界的认识增加了多少东西？得不得诺奖，有时候看那些年的潮流热什么？

回到正题，基于这个对拉曼散射过程的描述，在实验里面，理想的拉曼图就是这样的：



中间的大峰对应的是瑞利散射。对 Anti-Stokes 峰，由于它需要系统开始的时候就处在振动的激发态，所以低温下不明显，温度高一些比较好测。

而同时我们如果把弹性散射部分扣除，我们就可以得到纯振动部分。上面那个图只给了一个振动模式，实际情况往往是一系列。这一系列的移动，代表的就是系统的本征振动频率。



（这是另一种画法，右边是长波长，低能部分，与上图相反）

拉曼谱和红外一样，也有个选择定则，可以通过对称性的知识去理解。但和

红外不同的是，在拉曼谱里面，诱导电偶极据并不是由原子核运动直接产生的。在红外里面，吸收信号反映的是声子的本征振动与外场之间的耦合。也就是说声子振动产生电偶极矩，这个电偶极矩直接与光子的电场耦合来产生吸收。这个过程是个一阶过程。

而拉曼谱里面，一般有两束光产生作用。入射光的作用是产生一个诱导电偶极矩，然后由入射光产生的诱导电偶极矩会和散射光的光场耦合。由于入射光并不激发系统的本征振动，它要产生偶极矩的话，必须通过一个极化率。这个极化率记为$\bar{\bar{\alpha}}$，它是个3×3的张量。入射光的电场为$\vec{\mathrm{E}}_{\mathrm{i}}\cos(\omega \mathrm{t})$，$\omega$为入射光频率。它们一起产生的诱导电偶极矩是：

$$\vec{\mu} = \bar{\bar{\alpha}} \cdot \vec{\mathrm{E}}_{\mathrm{i}}\cos(\omega \mathrm{t})$$

这里$\bar{\bar{\alpha}}$叫拉曼极化率张量（Raman polarizability tensor）。

它是随着原子核的运动有变化的。我们把原子核在平衡位置的时候的极化率记为$\bar{\bar{\alpha}}_0$，把原子核的运动对它的改变记为$\Delta\bar{\bar{\alpha}}$，那么总的极化率就是$\bar{\bar{\alpha}} = \bar{\bar{\alpha}}_0 + \Delta\bar{\bar{\alpha}}$，其中$\bar{\bar{\alpha}}_0$不随时间变化，$\Delta\bar{\bar{\alpha}}$会以晶格或分子的振动频率$\omega_{\mathrm{v}}$随时间变化，等于$\Delta\bar{\bar{\alpha}}_0\cos(\omega_{\mathrm{v}}\mathrm{t})$，$\Delta\bar{\bar{\alpha}}_0$是不随时间变化的由晶格振动引起的极化率变化幅度。

这样由它们产生的诱导电偶极矩就分别为：$\bar{\bar{\alpha}}_0 \cdot \vec{\mathrm{E}}_{\mathrm{i}}\cos(\omega \mathrm{t})$、$\Delta\bar{\bar{\alpha}} \cdot \vec{\mathrm{E}}_{\mathrm{i}}\cos(\omega \mathrm{t})$。其中$\omega$为入射光频率，极矩整体是：

$$\vec{\mu} = \bar{\bar{\alpha}} \cdot \vec{\mathrm{E}}_{\mathrm{i}}\cos(\omega \mathrm{t})$$

$$= (\bar{\bar{\alpha}}_0 + \Delta\bar{\bar{\alpha}}) \cdot \vec{\mathrm{E}}_{\mathrm{i}}\cos(\omega \mathrm{t})$$

$$= (\bar{\bar{\alpha}}_0 + \Delta\bar{\bar{\alpha}}_0\cos(\omega_{\mathrm{v}}\mathrm{t})) \cdot \vec{\mathrm{E}}_{\mathrm{i}}\cos(\omega \mathrm{t})$$

$$= \bar{\bar{\alpha}}_0 \cdot \vec{\mathrm{E}}_{\mathrm{i}}\cos(\omega \mathrm{t}) + \frac{\Delta\bar{\bar{\alpha}}_0}{2}[\cos(\omega - \omega_{\mathrm{v}})\mathrm{t} + \cos(\omega + \omega_{\mathrm{v}})\mathrm{t}] \cdot \vec{\mathrm{E}}_{\mathrm{i}}$$

其中的第一项频率与入射光相同，对应的是正常的瑞利散射的部分。第二项与第

三项对应的是拉曼效应中的 Stokes 与 Anti-Stokes 移动。

这些拉曼所对应的系统哈密顿量的变化是:

$$\widehat{\mathrm{H}}' = -\left[\frac{\Delta\bar{\bar{\alpha}}_0}{2}\cos(\omega \pm \omega_\mathrm{v})\mathrm{t}\right] \cdot \vec{\mathrm{E}}_\mathrm{i} \cdot \vec{\mathrm{E}}_\mathrm{s}$$

$\vec{\mathrm{E}}_\mathrm{s}$为散射光的电场强度。这样，拉曼谱中的微扰，所对应的跃迁矩阵元就是:

$$\left(\Psi_\mathrm{v}'\middle| -\left[\frac{\Delta\bar{\bar{\alpha}}_0}{2}\cos(\omega \pm \omega_\mathrm{v})\mathrm{t}\right] \cdot \vec{\mathrm{E}}_\mathrm{i} \cdot \vec{\mathrm{E}}_\mathrm{s} \middle| \Psi_\mathrm{v}\right)$$

我们现在要干的事情，就是利用对称性，来分析由这个跃迁矩阵元决定的选择定则。

和红外一样，我们的初态$|\Psi_\mathrm{v})$是振动基态，对应哈密顿算符群的一维恒等表示。微扰项$-\left[\frac{\Delta\bar{\bar{\alpha}}_0}{2}\cos(\omega \pm \omega_\mathrm{v})\mathrm{t}\right] \cdot \vec{\mathrm{E}}_\mathrm{i} \cdot \vec{\mathrm{E}}_\mathrm{s}$里面，$\vec{\mathrm{E}}_\mathrm{i}$与$\vec{\mathrm{E}}_\mathrm{s}$是外场，对系统的对称操作不变。我们现在需要知道的，就是$\Delta\bar{\bar{\alpha}}_0$这个由振动引起的二阶张量承载的是哈密顿算符群的那些表示。然后，与本征振动$|\Psi_\mathrm{v}')$所对应的哈密顿算符群的表示对应就行了。

而$\Delta\bar{\bar{\alpha}}_0$这个二阶张量，代表的是由于原子核的运动对系统极化率的影响。它对哈密顿算符群的对称操作的变换性质与二次函数x^2、y^2、z^2、xy、yz、xz相同。

因此对一个具有特定对称群的分子或晶体,我们要看它的那些本征振动是有拉曼活性的？就看它这个振动对应的不可约表示是否承载x^2、y^2、z^2、xy、yz、xz这些二次函数基就可以了。还是上面得那个$\mathrm{C_{2h}}$点群，由它的特征标表，我们就可以看出对应其$\mathrm{A_g}$与$\mathrm{B_g}$不可约表示的本征振动是有拉曼活性的，对应$\mathrm{A_u}$与$\mathrm{B_u}$的没有。

前面我们讲红外的时候说过对应$\mathrm{A_u}$与$\mathrm{B_u}$的本征振动是有红外活性的。这里的下标刚好反过来了。其背后的原因，就是红外的$\widehat{\mathrm{H}}'$是奇宇称的，对应的$|\Psi_\mathrm{v}')$也要是奇宇称的，所以有红外活性的振动下标都是 u。而拉曼的$\widehat{\mathrm{H}}'$是偶宇称的，对

应的$|\Psi_v'\rangle$也要是偶宇称的，所以有拉曼活性的振动下标都是 g。这两个活性互补。需要注意的是，这种互补只对具有中心反演对称性的体系成立。当系统没有中心反演对称性时，我们无法通过‘u’、‘g’这些标示把红外和拉曼活性的振动区分开，这个时候，某个振动，是允许同时具备拉曼和红外活性的。

与这个直接相关的一个例子就是这些年很流行的一个测表面振动的方法，叫和频光谱（Sum frequency generation）。这个技术在近代非线性光学的发展里面很重要。其基本特征就是我要测量的是一个三阶过程，内部包含红外吸收这个一阶过程与拉曼吸收这个二阶过程，我们要求这个振动同时具备红外与拉曼活性。在液体内部，由于液体本身的均匀性，我们一般认为系统具备中心反演对称性。对于具备中心反演对称性的系统，由于红外与拉曼的互补，和频信号就会很弱。而液体表面，由于中心反演对称性的破缺，红外与拉曼不再互补，这样和频信号就会强很多。因此，和频光谱技术是为数不多的这样一门技术，具备液体表面敏感这样一个特征[18，19]。

最后一个需要说明的地方是上面在对跃迁矩阵元：

$$\left\langle \Psi_v' \middle| -\left[\frac{\Delta\bar{\bar{\alpha}}_0}{2}\cos(\omega\pm\omega_v)t\right]\cdot\vec{E}_i\cdot\vec{E}_s \middle| \Psi_v \right\rangle$$

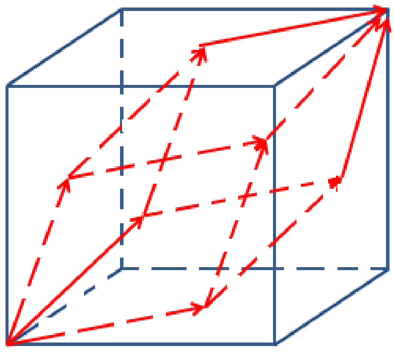
的讨论中，我们假定$\vec{E}_i$、$\vec{E}_s$在声子波函数的变化范围内使常数。如果在这个空间尺度，这些外场也随 r 变化，那么前面讨论的选择定则失效。这个不是天方夜谭，而是通过局域场的调制来破坏一些传统实验手段的局限。针尖增强拉曼散射（Tip-enhanced Raman Scattering, TERS）技术的发展就是这方面的一个例子。这方面中国科技大学董振超老师、罗毅老师团队近期有一些合作的代表性工作，感兴趣的同学可以了解一下[20，21]。

4.6 平移不变性与 Bloch 定理

在空间群部分，我们讲过晶体的一个重要特性就是原子（离子、或分子）排列的周期性。这个周期性（平移对称性）可以由点阵来描述。点阵中任意一个格点可描述为一个正格矢，$\vec{R}_l$，具体形式为：

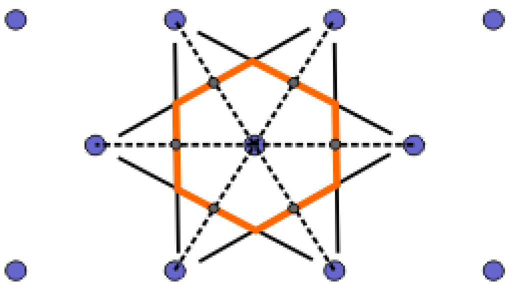
$$\vec{R}_l = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$$

其中l_1、l_2、l_3为整数，$\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$为点阵的基矢，它们构成的平行六面体为原胞。这个原胞一般不反映晶体点阵的对称性，以 fcc 格子为例，它的原胞就是：

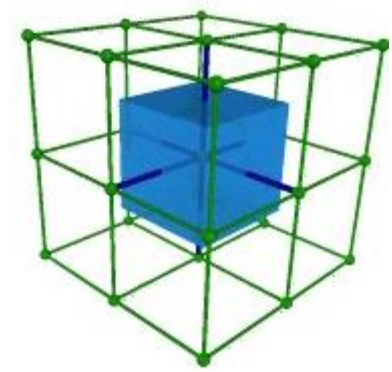


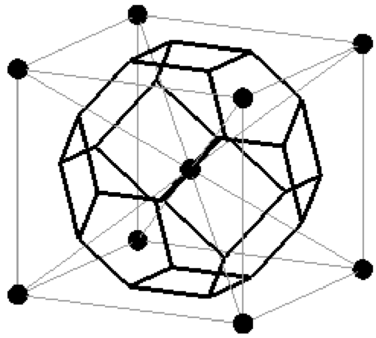
从这个平行六面体，你看不出任何点阵的对称性。

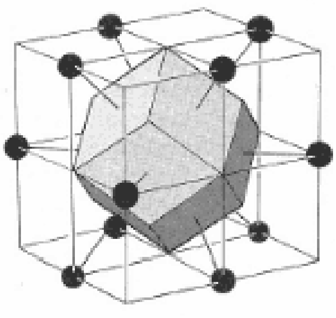
要想看出这个对称性，两种方法。一是取晶胞，就像上面图中的蓝色立方体，我的 cell 变大了，这个大的 cell 可以反映出点阵的对称性；二是对原胞做另一种取法，Wigner-Seitz Cell。以二维晶体为例，这个 cell 的取法是我相对于原点，对每个格点与原点的连线做平分线，所围出来的最小的面积，比如：



三维情况下，简立方、体心、面心的 Wigner-Seitz Cell 分别是：







这些都是实空间的东西。

对于晶体中的元激发，它们的状态我们一般可以用波矢量来描述，波矢量对应的是倒空间。与实空间中的点阵对应，倒空间也有点阵，它们是由$\vec{b}_1$、$\vec{b}_2$、$\vec{b}_3$的整数线性组合构成的，其中：

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$$

Ω为实空间中原胞体积。晶体是 fcc，对应倒空间点阵是 bcc；晶体是 bcc，对应倒空间点阵是 fcc。

上面是我们对固体物理中一些基础知识的回顾，现在看平移对称性。所谓平移对称性，指的是将晶体平移$\vec{R}_l$，系统回到与原来不可分辨状态的属性。当晶体无穷大时，平移操作$\{E|\vec{R}_l\}$无穷多。有限晶体，我们会使用周期性边界条件，取$\{E|N_1\vec{a}_1\} = \{E|N_2\vec{a}_2\} = \{E|N_3\vec{a}_3\} = \{E|0\}$。这样的话由元素$\{E|\vec{R}_l\}$形成的集合是构成一个群的，因为：

1．任意两个平移的乘积仍为一个形势为$\{E|\vec{R}_l\}$平移；

2．结合律；

3．$\{E|\vec{R}_l\}$逆为$\{E|-\vec{R}_l\}$；

4．恒等操作$\{E|0\}$。

这个群称为平移群。

现在我们知道了晶体中存在平移群，这会带来什么后果呢？答案很简单，就是布洛赫定理。在讲这个定理之前我们先明确一点，就是平移群是个阿贝尔群。因此，对于由$\{E|N_1\vec{a}_1\} = \{E|N_2\vec{a}_2\} = \{E|N_3\vec{a}_3\} = \{E|0\}$这个周期性边界条件定义的晶体，平移群的阶为$N_1 \times N_2 \times N_3$，类的个数也是$N_1 \times N_2 \times N_3$，有$N_1 \times N_2 \times N_3$个一维的不等价不可约表示。

以固体中的电子，这样一个处在晶格周期场中的量子的粒子为例，它的元激发对应某本征态。这个本征态，按照前面哈密顿算符群部分的讨论，它是承载固体的哈密顿算符群的一个表示的。这里平移群是固体的哈密顿算符的群，群元为g。与之相应，有个哈密顿算符群，群元是$\hat{P}_g$。晶体中的电子态是要承载这个哈密顿算符群的表示的。在求这个表示的过程中，只需要知道平移群基本生成元$\{E|\vec{a}_1\}$、$\{E|\vec{a}_2\}$、$\{E|\vec{a}_3\}$所对应的$\hat{P}_g$的表示矩阵，整个哈密顿算符群的表示矩阵就出来了。

以$\{E|\vec{a}_1\}$为例，对应$\hat{P}_g\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a}_1) = D(\{E|\vec{a}_1\})\,\psi(\vec{r})$。由于周期性边界条

件，有$D^{N_1}(\{E|\vec{a}_1\})\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r}-N_1\vec{a}_1)=\psi(\vec{r})$，对$\forall\vec{r}$成立。因此有$D^{N_1}(\{E|\vec{a}_1\})=1$。对$\{E|\vec{a}_2\}$、$\{E|\vec{a}_3\}$，同样有$D^{N_2}(\{E|\vec{a}_2\})=1$、$D^{N_3}(\{E|\vec{a}_3\})=1$。这些是对$D(\{E|\vec{a}_1\})$、$D(\{E|\vec{a}_2\})$、$D(\{E|\vec{a}_3\})$的要求。当$D(\{E|\vec{a}_1\})$、$D(\{E|\vec{a}_2\})$、$D(\{E|\vec{a}_3\})$定下以后，不可约表示就定下了。

要让$D^{N_1}(\{E|\vec{a}_1\})=1$、$D^{N_2}(\{E|\vec{a}_2\})=1$、$D^{N_3}(\{E|\vec{a}_3\})=1$，我们只需要取$D(\{E|\vec{a}_1\})=\exp\left[2\pi i\frac{n_1}{N_1}\right]$、$D(\{E|\vec{a}_2\})=\exp\left[2\pi i\frac{n_2}{N_2}\right]$、$D(\{E|\vec{a}_3\})=\exp\left[2\pi i\frac{n_3}{N_3}\right]$，就满足要求。也就是说平移群的一维不等价、不可约表示，最终可以用$\frac{n_1}{N_1}$、$\frac{n_2}{N_2}$、$\frac{n_3}{N_3}$这个数组来标识。在这个数组确定后，在这个确定的不等价不可约表示中，平移操作 $\vec{R}_l=l_1\vec{a}_1+l_2\vec{a}_2+l_3\vec{a}_3$所对应的表示矩阵就是：

$$D\left(\{E|\vec{R}_l\}\right)=\exp\left[2\pi i\left(\frac{n_1}{N_1}l_1+\frac{n_2}{N_2}l_2+\frac{n_3}{N_3}l_3\right)\right]$$

这个时候，引入我们之前关于倒空间的讨论，结合$\vec{b}_1$、$\vec{b}_2$、$\vec{b}_3$与$\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$的关系$\vec{a}_i\cdot\vec{b}_j=2\pi\delta_{ij}$，我们就可以用倒空间中的向量：

$$\vec{k}=\frac{n_1}{N_1}\vec{b}_1+\frac{n_2}{N_2}\vec{b}_2+\frac{n_3}{N_3}\vec{b}_3$$

来标识平移群的一维不等价、不可约表示，而这里的$\vec{k}$，就是倒空间中第一布里渊区的点。相应的表示就是：

$$D_{\vec{k}}\left(\{E|\vec{R}_l\}\right)=\exp\left[i\vec{k}\cdot\vec{R}_l\right]$$

这样的话我们用$\vec{k}$来标识电子的本征态$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$，这个本征态波函数就会具有下面的特征。当$\hat{P}_{\{E|\vec{R}_l\}}$作用到$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$上时，一方面有：

$$\hat{P}_{\{E|\vec{R}_l\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r}-\vec{R}_l\right)$$

另一方面有：

$$\hat{P}_{\{E|\vec{R}_l\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=D_{\vec{k}}\left(\{E|\vec{R}_l\}\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\exp\left[i\vec{k}\cdot\vec{R}_l\right]\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

因此：

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}-\vec{R}_l)=\exp[i\vec{k}\cdot\vec{R}_l]\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

或：

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}_l)=\exp[-i\vec{k}\cdot\vec{R}_l]\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

这个就是 Bloch 定理。

由 Bloch 定理，我们知道，如果我们把$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$写成$\exp[-i\vec{k}\cdot\vec{r}]u_{\vec{k}}(\vec{r})$的形式，那么$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}_l)$一方面会等于$\exp[-i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R}_l)]u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}_l)$，另一方面又等于

$$\exp[-i\vec{k}\cdot\vec{R}_l]\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\exp[-i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R}_l)]u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

因此：

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}_l)=u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

也就是说处在晶格周期场中元激发的本征态波函数，一定可以写成$\exp[-i\vec{k}\cdot\vec{r}]u_{\vec{k}}(\vec{r})$（其中$u_{\vec{k}}(\vec{r})$为晶格周期函数）的形式。而这里的$\vec{k}$，就是倒空间第一布里渊区中的点。换句话说，处在晶格周期场中本征元激发，都可以用倒空间第一布里渊区的点来标识，其相应的波函数，具备$\exp[-i\vec{k}\cdot\vec{r}]u_{\vec{k}}(\vec{r})$的特征。这个是由晶格的平移对称性决定的。

4.7 布里渊区与晶格对称性

前面的讨论主要关注的是晶体中平移对称性带来的晶体中本征激发的性质。除了平移，点群空间群部分我们已经说过，晶体中还有转动对称性。这些转动对称性也会对我们晶体中的本征激发带来很多内在的属性。其中最重要的，就是前面提到标识晶格周期场中本征激发的第一布里渊区的点，可以通过转动对称性的折叠，缩小到一个很小的区域，叫不可约（irreducible）布里渊区。下面我们就来详细解释这个为什么发生？

出发点是晶体空间群的基本操作，$\{\alpha|\vec{t}\}$。这里$\alpha=E$时，$\vec{t}$只能为$\vec{R}_l$，这个时

候它就是平移群。当α为非恒等转动时，$\vec{t}$可以不为$\vec{R}_l$。它们所有的组合，形成空间群。$\{\alpha|\vec{t}\}$这些元素的逆、乘法满足的规律是：

$$\{\alpha|\vec{t}\}\vec{r}=\alpha\vec{r}+\vec{t}$$

$$\{\alpha|\vec{t}\}\{\beta|\vec{s}\}\vec{r}=\{\alpha|\vec{t}\}(\beta\vec{r}+\vec{s})=\alpha\beta\vec{r}+\alpha\vec{s}+\vec{t}=\{\alpha\beta|\alpha\vec{s}+\vec{t}\}\vec{r}$$

因此：

$$\{\alpha|\vec{t}\}\{\beta|\vec{s}\}=\{\alpha\beta|\alpha\vec{s}+\vec{t}\}$$

要想让$\{\alpha|\vec{t}\}\{\beta|\vec{s}\}=\{E|0\}$，需要：$\{\beta|\vec{s}\}=\{\alpha^{-1}|-\alpha^{-1}\vec{t}\}$。因此

$$\{\alpha|\vec{t}\}^{-1}=\{\alpha^{-1}|-\alpha^{-1}\vec{t}\}$$

这些是空间群群元的性质。

这些对称元素的存在会对晶体场中的本征激发带来什么影响呢？我们还是以电子的元激发为例。$\{\alpha|\vec{t}\}$为对称操作，$\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}$为其对应的函数变换算符。由本章第一节的讨论我们知道：

$$\hat{P}^{-1}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\hat{H}\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}=\hat{H}$$

同时，因为$\{E|-\vec{R}_l\}\{\alpha|\vec{t}\}=\{\alpha|-\vec{R}_l+\vec{t}\}$、$\{\alpha|\vec{t}\}\{E|-\alpha^{-1}\vec{R}_l\}=\{\alpha|-\vec{R}_l+\vec{t}\}$，所以：

$$\{E|-\vec{R}_l\}\{\alpha|\vec{t}\}=\{\alpha|\vec{t}\}\{E|-\alpha^{-1}\vec{R}_l\}$$

基于这些性质，我们知道对$\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}$、$\hat{P}_{\{E|\vec{R}_l\}}$，有：

$$\hat{P}_{\{E|-\vec{R}_l\}}\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\hat{P}_{\{E|-\alpha^{-1}\vec{R}_l\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$=\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\exp\left[i\vec{k}\cdot(-\alpha^{-1}\vec{R}_l)\right]\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$=\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\exp\left[-i\alpha\vec{k}\cdot\vec{R}_l\right]\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$=\exp\left[-i\alpha\vec{k}\cdot\vec{R}_l\right]\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

这也就是说$\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$对于平移群来说，可承载$\alpha\vec{k}$这个第一布里渊区的$\vec{k}$点所对应的不可约表示。

而另一方面，由前面的讨论，我们知道$\psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r})$本身是承载$\alpha\vec{k}$这个第一布里渊区的$\vec{k}$点所对应的不可约表示。当 band index 一样时，它们必对应相同的线性空间。因此:

$$\psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r}) = \lambda\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

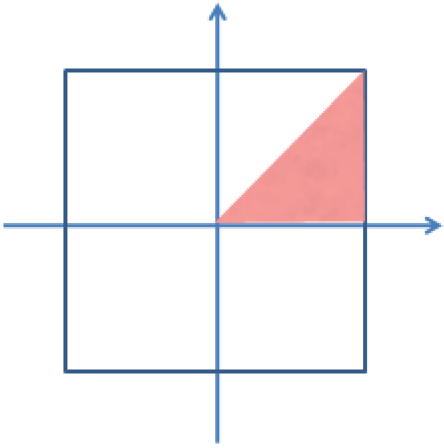
两者都归一的话$|\lambda| = 1$。

由这个关系，我们看$\psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r})$这个本征态的本征能量与$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$这个本征态的本征能量存在什么样的关系？答案很简单:

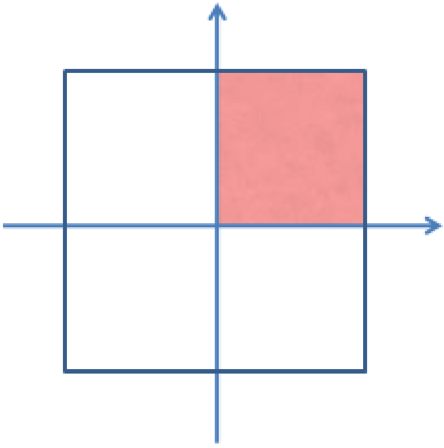
$$
\begin{aligned}
E_{\alpha\vec{k}} &= \left(\psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r})\middle|\hat{H}\middle|\psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r})\right) \\
&= \left(\lambda\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\middle|\hat{H}\middle|\lambda\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\right) \\
&= \left(\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\middle|\hat{H}\middle|\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\right) \\
&= \left(\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\middle|\hat{P}^{-1}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\hat{H}\,\hat{P}_{\{\alpha|\vec{t}\}}\middle|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\right) = \left(\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\middle|\hat{H}\middle|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\right) = E_{\vec{k}}
\end{aligned}
$$

也就是说对于空间群，只要存在群元$\{\alpha|\vec{t}\}$，这里的$\vec{t}$不要求为$\vec{R}_l$（晶格矢的整数倍），都可以使$\alpha\vec{k}$与$\vec{k}$所对应的本征态能量相等（当然，band index ‘*n*’必须相同）。这也是为什么对固体能带，我们最关心的其实不是晶体的点群，而是晶体‘空间群的点群’。也就是取空间群所有元素$\{\alpha|\vec{t}\}$，把α单独拿出来，形成的转动操作的集合。布里渊区的转动对称性，是由**空间群的点群**决定的。

同时，在画能带的时候，我们也不需要把布里渊区所有点都画出来。我们只需要画不可约的布里渊区就可以了。以二维系统为例，如果空间群的点群是 D4，不可约布里渊区就是（阴影部分）:



如果空间群的点群是C4，不可约布里渊区就是：



空间群的点群对称性越高，不可约布里渊区越小。

4.8 时间反演对称性

最后一节我们讲时间反演对称性（之前刚才不管是转动还是平移都是空间的）。这一节的内容我们先做一个概念性的整体介绍，这个整体介绍很好理解，也对你们了解一些与时间反演对称性相关的基本规律有好处。之后，我们做一个更深层次的理论层面的讲解。

先看概念性介绍。时间反演是改变时间符号的操作，它对我们系统的主要物理量带来的变化是：t变为$-t$、$\vec{r}$不变、$\vec{p}$变为$-\vec{p}$（或者说$\vec{k}$变为$-\vec{k}$)、$\vec{L}$变为$-\vec{L}$、$\vec{\sigma}$变为$-\vec{\sigma}$。在无外磁场，且系统没有固有磁序的时候，由于动能正比于$\vec{p}^2$、势能

$V(\vec{r})$不变，所以哈密顿量不发生变化，系统具有时间反演对称性。有外场，或者系统具有固有磁序的时候，哈密顿量中多了$\vec{B}\cdot\vec{\sigma}$这一项，在时间反演操作下变化，加上其它项不变，系统不具备时间反演对称性。

对电子本征激发 Bloch 态$\psi_{n,\vec{k},\uparrow}(\vec{r})$，它的时间反演态是$\psi_{n,-\vec{k},\downarrow}(\vec{r})$。无外磁场，且系统没有固有磁序时，由于哈密顿量具备时间反演对称性，对于晶体能级能量，存在：

$$E_{n,\vec{k},\uparrow}=E_{n,-\vec{k},\downarrow}$$

这个简并是由时间反演对称性要求的。

在时间反演对称性的基础上，如果系统继续有空间反演对称性，那么继续有：

$$E_{n,\vec{k},\uparrow}=E_{n,-\vec{k},\uparrow}$$

这也就是说，当空间与时间反演对称性同时存在，这两个式子一结合，就有：

$$E_{n,\vec{k},\uparrow}=E_{n,\vec{k},\downarrow}$$

也就是说同一个波矢的两个不同自旋态相互简并，这个简并称为 Kramer 简并。

同时，由于$E_{n,\vec{k},\uparrow}=E_{n,\vec{k},\downarrow}$、$E_{n,\vec{k},\uparrow}=E_{n,-\vec{k},\downarrow}$、$E_{n,-\vec{k},\uparrow}=E_{n,\vec{k},\downarrow}$，有：

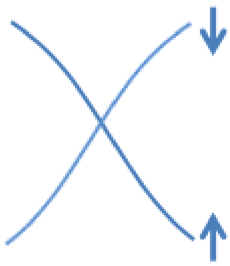
$$E_{n,\vec{k},\uparrow}=E_{n,\vec{k},\downarrow}=E_{n,-\vec{k},\uparrow}=E_{n,-\vec{k},\downarrow}$$

也就是在系统同时具有时间、空间反演对称性的时候。$E_{n,\vec{k},\sigma}$对$\vec{k}$、对σ的正负号都有简并的特征。

因为这个原因，当一个系统既有 time-reversal symmetry，又有 iversion symmetry 的时候，它的 electronic bands 必有 spin 简并的特征。在一些关于电子结构的讨论中，你们应该经常会看到一些类似讨论句子，比如：In order to break the spin degeneracy, one has to break either the timer-reversal or the inversion symmetry，说的就是这个道理。

空间反演对称性如果去除，时间反演对称性依然要求$E_{n,\vec{k},\uparrow}=E_{n,-\vec{k},\downarrow}$。前些年

比较热的拓扑绝缘体中，一个基本特征就是存在时间反演对称性，不存在空间反演对称性，因此，文献上画出的能到总具有如下特征：



其背后原因，也是这个东西。

现在看背后更深层次的原理性的东西。如果你只想理解上面的内容的话，这个东西本来可以不讲。但前两年有细心的同学，会问我一个关于晶体点群特征标表（附录 A）的问题。对于C_3、C_4、C_6、C_{3h}、C_{4h}、C_{6h}、S_4、S_6、T这些点群，有个有意思的情况，就是我们有时会把两个一维表示放在一起用 E 来标识。根据我们以前将的习惯，E 一般是用来标识二维不可约表示的。这里为什么要这样处理呢？这个时候，如果你再细心点，你会发现放在一起的两个一维表示是相互共轭的。相互共轭就意味着它们的表示可以写为D与D^*。背后所对应的物理就是时间反演对称性可以让这两个不被空间的点群对称性要求简并的量子态简并。而要理解这个，我们又必须从头说起。

前面说过，时间反演是一种操作。我们可以把它记作$\hat{T}$，它做的事情是：t变为$-t$、$\vec{r}$不变、$\vec{p}$变为$-\vec{p}$（或者说$\vec{k}$变为$-\vec{k}$）、$\vec{L}$变为$-\vec{L}$、$\vec{\sigma}$变为$-\vec{\sigma}$。它联系起来的是两个量子态：原来的态$\psi(\vec{r},t)$与它的时间反演共轭态$\psi(\vec{r},-t)$。通过：$\psi(\vec{r},-t)=\hat{T}\psi(\vec{r},t)$。下面我们来理解$\hat{T}$在数学上等效于什么？

现在先不考虑自旋，假设系统哈密顿量具有时间反演对称性，那么这个不考虑自旋的粒子的含时波函数满足的方程是：

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=\widehat{H}(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$$

$t=0$时刻的波函数是定态波函数，可以写成实函数$\psi(\vec{r},0)$[12]。这样的话，沿时间正轴方向演化的含时波函数就是:

$$\psi(\vec{r},t)=e^{-i\widehat{H}(\vec{r},t)t/\hbar}\psi(\vec{r},0)$$

它的时间反演对称态就是: $\psi(\vec{r},-t)=\psi^*(\vec{r},t)$。这也就是说在不考虑自旋的时候，时间反演算符$\widehat{T}$就等于复数共轭算符$\widehat{K}$。

考虑自旋，最简单的 level，自旋轨道耦合，哈密顿量就变成了:

$$\widehat{H}(\vec{r},t)=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+V(\vec{r})+\frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\cdot(\nabla V(\vec{r})\times\hat{p})$$

这个时候，为了保证这个哈密顿量在$\widehat{T}$下不变，就要求$\widehat{T}\vec{\sigma}=-\vec{\sigma}$。前两项不变是在不考虑自旋的时候已经讨论过的，第三项要想不变，$\hat{p}$变号了，$\nabla V(\vec{r})$没有，所以$\vec{\sigma}$必须变号。这也就是说时间反演对称性要求$\widehat{T}\vec{\sigma}=-\vec{\sigma}$。

怎么才能让$\widehat{T}\vec{\sigma}=-\vec{\sigma}$呢？我们就需要利用泡利矩阵的性质了。取$\widehat{T}=\widehat{K}\sigma_y$，看这样能不能满足$\widehat{T}\vec{\sigma}=-\vec{\sigma}$的要求？$\vec{\sigma}$是: $\left[\sigma_x、\sigma_y、\sigma_z\right]$。其中$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$、$\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$、$\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$。$\widehat{T}=\widehat{K}\sigma_y$作用到它上面的后果是:

$$\widehat{T}\vec{\sigma}=\widehat{K}\sigma_y\vec{\sigma}=\widehat{K}\sigma_y\left[\sigma_x、\sigma_y、\sigma_z\right]=\left[\widehat{K}\sigma_y\sigma_x、\widehat{K}\sigma_y\sigma_y、\widehat{K}\sigma_y\sigma_z\right]$$

下一步利用到的性质是: $\sigma_y\sigma_x=-\sigma_x\sigma_y$，进而$\widehat{K}\sigma_y\sigma_x=-\widehat{K}\sigma_x\sigma_y=-\sigma_x\widehat{K}\sigma_y$；$\sigma_y\sigma_y=\sigma_y\sigma_y$，进而$\widehat{K}\sigma_y\sigma_y=-\sigma_y\widehat{K}\sigma_y$；$\sigma_y\sigma_z=-\sigma_z\sigma_y$，进而$\widehat{K}\sigma_y\sigma_z=-\widehat{K}\sigma_z\sigma_y=-\sigma_z\widehat{K}\sigma_y$。这样综合上面的式子，我们就有:

$$\widehat{T}\vec{\sigma}=\widehat{K}\sigma_y\vec{\sigma}=-\left[\sigma_x\widehat{K}\sigma_y、\sigma_y\widehat{K}\sigma_y、\sigma_z\widehat{K}\sigma_y\right]=-\vec{\sigma}\widehat{K}\sigma_y=-\vec{\sigma}\widehat{T}$$

也就是$\widehat{T}$让$\vec{\sigma}$反号了。综合一下，就是说不考虑自旋时$\widehat{T}=\widehat{K}$，考虑时$\widehat{T}=\widehat{K}\sigma_y$。

[12]定态波函数满足$\widehat{H}(\vec{r})\psi(\vec{r},0)=E\psi(\vec{r},0)$，E 是实数。对这个方程取转置共轭，有$\widehat{H}^+(\vec{r})\psi^*(\vec{r},0)=\widehat{H}(\vec{r})\psi^*(\vec{r},0)=E\psi^*(\vec{r},0)$。由这个，可知$\widehat{H}(\vec{r})[\psi(\vec{r},0)+\psi^*(\vec{r},0)]=E[\psi(\vec{r},0)+\psi^*(\vec{r},0)]$。而$\psi(\vec{r},0)+\psi^*(\vec{r},0)$是实函数。这也就是说定态波函数总可以写成实函数。

前面提到的附录 A 中点群属于不考虑自旋的情况。这个时候，以C_4这个点群为例，它的特征标表是：

<table>
<tr><td colspan="3">$C_4(4)$</td><td>E</td><td>C_2</td><td>σ_v</td><td>$\sigma_{v'}$</td></tr>
<tr><td>x^2+y^2、z^2</td><td>R_z、z</td><td>A</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td></tr>
<tr><td>x^2-y^2、xy</td><td></td><td>B</td><td>1</td><td>-1</td><td>1</td><td>-1</td></tr>
<tr><td rowspan="2">$\left(xz、yz\right)$
$\left(xz^2、yz^2\right)$</td><td rowspan="2">$\left(x、y\right)$
$\left(R_x、R_y\right)$</td><td rowspan="2">E</td><td>1</td><td>i</td><td>-1</td><td>-i</td></tr>
<tr><td>1</td><td>-i</td><td>-1</td><td>I</td></tr>
</table>

按理说点群对称性是不要求 E 这两个不可约表示简并的，这里时间反演对称性就起作用了。因为上面那个表示我们记作 D，它的基是ψ。由于有时间反演对称性，这个ψ我们可以把它变作ψ^*。D 对ψ的那些变换也可以对应D^*对ψ^*的变化。这样，点群对称操作加上$\hat{T}$，ψ 与ψ^*也就通过对称操作联系起来了，它们的能量自然简并。

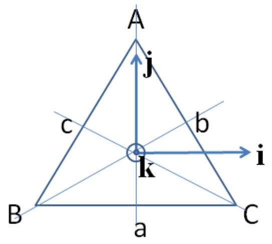
4.9 习题与思考

1. 根据C_{3v}群特征标表，将下面四个函数：1) z、2) xy、3) x^2、4) x^2y形成的线性空间，约化为C_{3v}群的群不不变子空间的直和；
2. D_3群的表示空间为x、y、z的六个二次齐次函数组成的六维空间。试用投影算符的方法将它们组合为六个对称化的新基，并写出 d、f 在这组对称化的新基下的表示矩阵？
3. 一个杂质原子放到一个晶体中，假设晶体场对称性为 O。不考虑自旋轨道耦合，结合 O 群特征标表讨论原子 d 轨道的劈裂情况。这里要用到下一章的一点知识，就是一个角度为α的转动，在转动群，也就是原子不考虑自旋轨道耦合的对称群中，特征标是$\frac{\sin[(l+1/2)\alpha]}{\sin[\alpha/2]}$，对 d 轨道$l=2$。

4. （接上题）之后，我们对此单晶沿 z 方向均匀拉伸，晶体场对称群变成了什么？这些轨道又会进行什么样的劈裂？

5. （接上题）之后，我们对此单晶沿 y 方向在进行一个不同于 z 方向的均匀拉伸，晶体场对称群又变成了什么？这些轨道又会进行什么样的劈裂？

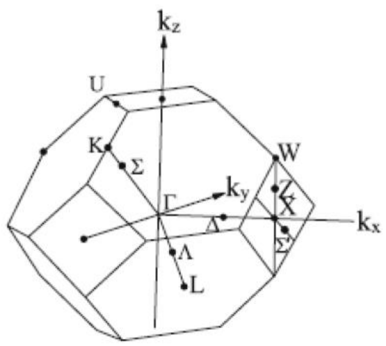
6. 根据下图，以 a 轴为$C_2^{(1)}$，b 轴为$C_2^{(2)}$，c 轴为$C_2^{(3)}$，定义C_{3v}群。用投影算符的方法说明从 1) z，2) xy 出发，生成的C_{3v}群的表示空间是什么（指出几维，以及线性无关的基函数）？他们承载的是哪些不可约表示？



7. 小明生长出来一种晶体，为了对其结构有所了解，他做了一个红外谱实验，又做了一个拉曼谱实验。他发现在 1700cm^{-1}、1750cm^{-1} 的位置（具体数字不重要），两种谱线都有明显的振动峰。基于这些观测，我们在下面四种点群中，可以排除哪些，为什么？

   a) T_h　　b) C_{3v}　　c) T_d　　d) D_{3d}

8. 晶体结构是 fcc，布里渊区如下：



在理解Γ、X、K 点的本征电子态时，分别应基于哪些点群的特征标表来分析？

从对称性的角度考虑，从Γ点向 X 点移动的过程中，简并度一般是升高还是

降低?

第五章 转动群

前面在点群部分我们曾经说过三维实正交群O(3)与三维实特殊正交群SO(3)，那里的三维实特殊正交群 SO(3)就是我们这里要讲的三维转动群，它是三维实正交群 O(3)中行列式为 1 的部分。物理中的中心力场问题都与这样的一个群相关，它是非阿贝尔李群(群元有连续参数、参数之间有关系、关系可有解析函数表达)这种连续群的一个例子。

学习转动群这一章，我们的核心任务是三个：1) SO(3)与 SU(2)群是什么，它们有怎样的关系？2) SO(3)与 SU(2)群的不可约表示是什么？3)在物理系统中有什么用。这三个内容我们分三节来讲。

5.1 SO(3)群与二维特殊酉群 SU(2)

我们前面讲过 SO(3)群中的元素可以用$\mathrm{C}_{\vec{\mathrm{k}}}(\psi)$，其中$\vec{\mathrm{k}}(\theta,\varphi)$是转动轴，$\psi$是转角。当$\vec{\mathrm{k}}$为$\hat{\mathrm{i}}$、$\hat{\mathrm{j}}$、$\hat{\mathrm{k}}$中的$\hat{\mathrm{k}}$时，$\hat{\mathrm{i}}$、$\hat{\mathrm{j}}$与之垂直，

$$\mathrm{C}_{\vec{\mathrm{k}}}(\psi)=\begin{pmatrix}\cos\psi & -\sin\psi & 0\\ \sin\psi & \cos\psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

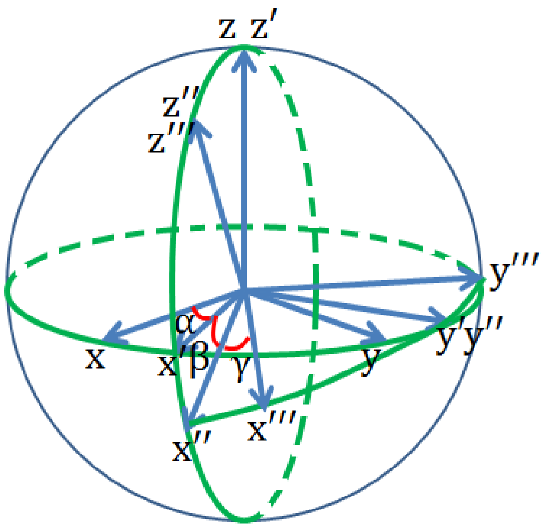
而 SO(3)群中元素进行的操作，说白了，就是将一个球面转到与其重合的另一个位置,且不改变手性。从球心到球面上的三个向量在转动后夹角不变、手性不变。

由于这个原因,SO(3)群中的元素可以用欧拉角α、β、γ来标记,记作$R(\alpha,\beta,\gamma)$。这些欧拉角怎么定义呢?

设$\mathrm{O}_{\mathrm{xyz}}$是三维欧式空间中固定的笛卡尔坐标系，$R(\alpha,\beta,\gamma)$是 SO(3)群中的元素，它可以表示为三个连续转动的乘积。这三个连续转动的定义是:

1. 先绕 z 轴转α角，$0\le\alpha<2\pi$，此时坐标系由$\mathrm{O}_{\mathrm{xyz}}$变为$\mathrm{O}_{\mathrm{x'y'z'}}$；
2. 再绕$\vec{\mathrm{y}}'$转β角，$0\le\beta\le\pi$，此时$\mathrm{O}_{\mathrm{x'y'z'}}$变为$\mathrm{O}_{\mathrm{x''y''z''}}$；

3. 最后绕$\vec{z}''$转γ角，$0 \le \gamma < 2\pi$，此时$O_{x''y''z''}$变为$O_{x'''y'''z'''}$。



这三个合在一起，就意味着：

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = C_{\vec{z}''}(\gamma)C_{\vec{y}'}(\beta)C_{\vec{z}}(\alpha)$$

这里为什么要求$0 \le \alpha < 2\pi$、$0 \le \beta \le \pi$、$0 \le \gamma < 2\pi$呢？大家可以想象一个球，它有八个象限。β这个转动的作用，是使得上面北半球中的任意一个点，可以到达南半球。而α、γ是使得南北半球内四个象限可以互换。所以β从 0 到π就够了，但为了北极点能到南极点，这个π是闭的。而α、γ的2π开的就可以了。

除了这点，还有一点需要说明一下。就是$\beta = 0$的时候，$\alpha + \gamma$相同的操作对应的是同一个 SO(3)群中的元素；当$\beta = \pi$时，$\alpha - \gamma$相同的操作对应同一个 SO(3)群中的元素。这也就是说同一个类似的特殊转动，在使用欧拉角描述的时候，存在多种欧拉角的组合对应同一个转动的情况。不过我们写成 SO(3)群的矩阵表示的时候，这种多种组合的表示又会归一到同一个矩阵表示，这个一会儿我们会解释。

这两点说明之后，我们就来看一下在使用欧拉角表示三维转动的时候，这个表示矩阵应该是什么样子？我们取的基是$\hat{i}$、$\hat{j}$、$\hat{k}$，沿 x、y、z 方向。之前我们说

了，$\mathrm{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathrm{C}_{\vec{z}''}(\gamma)\mathrm{C}_{\vec{y}'}(\beta)\mathrm{C}_{\vec{z}}(\alpha)$，因此要求$R(\alpha,\beta,\gamma)$，知道$\mathrm{C}_{\vec{z}''}(\gamma)$、$\mathrm{C}_{\vec{y}'}(\beta)$、$\mathrm{C}_{\vec{z}}(\alpha)$在$\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$下是什么就可以了。

这三个里面最简单的肯定是$\mathrm{C}_{\vec{z}}(\alpha)$，因为它是绕着$\hat{k}$旋转$\alpha$角的操作，在$\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$下矩阵形式为：

$$\mathrm{C}_{\vec{z}}(\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

现在的任务就是要知道$\mathrm{C}_{\vec{z}''}(\gamma)$、$\mathrm{C}_{\vec{y}'}(\beta)$在$\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$下是什么？为了写出这两个矩阵，我们先进行下面一个简短的讨论。之前做过，就是相似变换。有两组基$(\vec{e}_1,\vec{e}_2,\cdots,\vec{e}_n)$与$(\vec{f}_1,\vec{f}_2,\cdots,\vec{f}_n)$，我们把前者称为旧基B，后者称为新基B′，两者由：

$$(\vec{f}_1,\vec{f}_2,\cdots,\vec{f}_n)=(\vec{e}_1,\vec{e}_2,\cdots,\vec{e}_n)(\mathrm{P})$$

联系起来。

对于一个线性变换 A，它在旧基B下的矩阵为$[\mathrm{A}]_{\mathrm{B}}$与它在新基B′下的矩阵形式$[\mathrm{A}]_{\mathrm{B}'}$的关系就是：

$$[\mathrm{A}]_{\mathrm{B}}=\mathrm{P}[\mathrm{A}]_{\mathrm{B}'}\mathrm{P}^{-1}$$

由这个关系我们知道转动$\mathrm{C}_{\vec{y}'}(\beta)$在坐标系$\mathrm{O}_{x'y'z'}$下的矩阵为：

$$\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}$$

我们需要求出的，是它在O_{xyz}这个旧基下的表示。我们知道新基$\mathrm{O}_{x'y'z'}$与旧基O_{xyz}的联系，这个联系是：

$$(\hat{\imath}',\hat{\jmath}',\hat{k}')=(\hat{\imath},\hat{\jmath},\hat{k})\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

套用上面的关系，$\mathrm{C}_{\vec{y}'}(\beta)$在$\mathrm{O}_{xyz}$中的表示就是：

$$C_{\vec{y}'}(\beta)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}^{-1}$$

同理，$C_{\vec{z}''}(\gamma)$在$O_{x''y''z''}$下的表示是:

$$\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

而$O_{x''y''z''}$的基$\left(\hat{\imath}'',\hat{\jmath}'',\hat{k}''\right)$与$O_{xyz}$的基$\left(\hat{\imath},\hat{\jmath},\hat{k}\right)$的联系是:

$$\left(\hat{\imath}'',\hat{\jmath}'',\hat{k}''\right)=\left(\hat{\imath},\hat{\jmath},\hat{k}\right)\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}$$

这样的话$C_{\vec{z}''}(\gamma)$在O_{xyz}下的表示就是:

$$C_{\vec{z}''}(\gamma)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}^{-1}$$

最后，$C_{\vec{z}''}(\gamma)C_{\vec{y}'}(\beta)C_{\vec{z}}(\alpha)$等于:

$$\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}^{-1}$$
$$\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}^{-1}$$
$$\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma-\sin\alpha\cos\gamma & \cos\alpha\sin\beta\\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma+\cos\alpha\sin\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma+\cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta\\ -\sin\beta\cos\gamma & \sin\beta\sin\gamma & \cos\beta\end{pmatrix}$$

从这个矩阵形式，大家也可以很容易看出$\beta=0$时，$\alpha+\gamma$相同对应同一转动；

$\beta=\pi$时，$\alpha-\gamma$相同对应同一转动。

现在我们知道了SO(3)群一个元素在三维实空间中用欧拉角是怎么描述的了。在转动群这一章，最核心的一个地方，应该说是利用一个叫二维特殊酉群（SU(2)群）与 SO(3)群的同态关系，来讨论 SO(3)群的不可约表示以及它在具体物理系统中的应用。因此，在介绍完SO(3)群的群元之后很自然的一个任务就是介绍这个SU(2)群，以及它与SO(3)群的同态映射关系。

这个 SU(2)群叫二维特殊酉群，它是由行列式为 1 的二阶幺正矩阵组成的。由这个条件，如果我们假设其中元素为：

$$\mathrm{u}=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

其中a、b、c、$d\in \mathrm{C}$（复数）。那么，由酉群这个限制，我们就会由：

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}=\mathrm{E}$$

得到：

$$aa^*+bb^*=1$$
$$cc^*+dd^*=1$$
$$ac^*+bd^*=0$$

以及：

$$ad-bc=1$$

四个独立的限制条件。

再由$ac^*+bd^*=0$，我们可得：

$$a^*c+b^*d=0$$

进而$d=-a^*c/b^*$，代入$ad-bc=1$，有：

$$-a\frac{a^*c}{b^*}-bc=-\frac{(aa^*+bb^*)c}{b^*}=-\frac{c}{b^*}=1$$

从而$c=-b^*$。

这个条件，代入$d=-a^*c/b^*$，又得：$d=a^*$。这样的话 u 这个矩阵就简化

为了：

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

其中$aa^* + bb^* = 1$，a、b 为复数。

有这个条件限制的二维幺模矩阵是否构成群呢？我们可以取任意的：

$$\mathrm{u}_1 = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ -b_1^* & a_1^* \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{u}_2 = \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ -b_2^* & a_2^* \end{pmatrix}$$

那么：

$$\mathrm{u}_1\mathrm{u}_2 = \begin{pmatrix} a_1a_2 - b_1b_2^* & a_1b_2 + b_1a_2^* \\ -a_2b_1^* - a_1^*b_2^* & a_1^*a_2^* - b_1^*b_2 \end{pmatrix}$$

这个矩阵显然具有 u 的形式，同时$|\mathrm{u}_1\mathrm{u}_2| = |\mathrm{u}_1||\mathrm{u}_2| = 1$，所以具有封闭性。

除了封闭性，结合律自然成立，有单位矩阵，同时，酉矩阵的逆矩阵还是酉矩阵（由$\mathrm{u}^+\mathrm{u} = \mathrm{E}$知，$(\mathrm{u}^{-1})^+\mathrm{u}^{-1} = \mathrm{u}\mathrm{u}^{-1} = \mathrm{E}$），因此所有二维幺模酉矩阵构成一个群。这个群我们称为 SU(2)群（二维特殊酉群）。

现在讲完了 SO(3)群群元用欧拉角的表述方式，SU(2)群的特性。下一个任务就是要说明这个 SU(2)群和 SO(3)群的关系。要理解它们之间的联系，其中最关键的地方就是理解二阶零迹厄米矩阵σ与三维实空间中的向量$\vec{\mathrm{r}}$的一一对应关系。这个怎么理解呢？我们需要引入泡利矩阵（前面提到过）。

泡利矩阵，在量子力学里面大家都学过，有三个，分别是：

$$\sigma_\mathrm{x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}、\sigma_\mathrm{y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}、\sigma_\mathrm{z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

它们都是二阶、零迹，且厄米的矩阵。同时，它们包含了二阶零迹厄米矩阵的所有三个维度（零迹厄米，说明对角必须为实数，且合为零；而非对角要实部相等，虚部相反）。

这也就意味这如果我们用实的展开系数把上面那三个泡利矩阵进行线性组

合的话，我们可以建立一个二阶零迹厄米矩阵：

$$\mathrm{h}=x\sigma_{\mathrm{x}}+y\sigma_{\mathrm{y}}+z\sigma_{\mathrm{z}}=\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma}=\begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix}$$

其中$\vec{\sigma}=\sigma_{\mathrm{x}}\hat{\imath}+\sigma_{\mathrm{y}}\hat{\jmath}+\sigma_{\mathrm{z}}\hat{\mathrm{k}}$，与三维欧式空间中向量$\vec{\mathrm{r}}$的一一对应关系。也就是说一组 x、y、z 对应一个 h，也对应一个$\vec{\mathrm{r}}$。

之后呢？对于由 x、y、z 对应的零迹厄米矩阵 h=$\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma}$，它可以由我们前面提到的二阶幺正矩阵 u 进行$\mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})\mathrm{u}^{-1}$这样一个相似变换。这个相似变换不改变矩阵的迹，所以$\mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})\mathrm{u}^{-1}$仍然为零迹。同时，它的转置共轭是：

$$[\mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})\mathrm{u}^{-1}]^{+}=(\mathrm{u}^{-1})^{+}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})^{+}\mathrm{u}^{+}$$

u 是幺正，$\mathrm{u}^{+}=\mathrm{u}^{-1}$；$\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma}$厄米，$(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})^{+}=\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma}$，因此：

$$[\mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})\mathrm{u}^{-1}]^{+}=\mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})\mathrm{u}^{-1}$$

$\mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})\mathrm{u}^{-1}$仍然零迹厄米。

之前我们说过，零迹厄米矩阵可以与三维实空间中的一个向量联系起来，因此我们可以记$\mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})\mathrm{u}^{-1}=\vec{\mathrm{r}}'\cdot\vec{\sigma}$。这也意味着$\mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})\mathrm{u}^{-1}$中的u，实际上对应的是三维实空间的一个变换$\mathrm{R_u}$，它的作用是：$\vec{\mathrm{r}}'=\mathrm{R_u}\vec{\mathrm{r}}$。

由于 u 是由 a、b 决定的，$\mathrm{R_u}$也是由 a、b 决定的。这个$\mathrm{R_u}$的确定方式非常简单，利用：$\mathrm{u}(\vec{\mathrm{r}}\cdot\vec{\sigma})\mathrm{u}^{-1}=\vec{\mathrm{r}}'\cdot\vec{\sigma}$，知：

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^{*} & a^{*} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a^{*} & -b \\ b^{*} & a \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} z' & x'-iy' \\ x'+iy' & -z' \end{pmatrix}$$

而：$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}=\mathrm{R_u}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$。因此，由上式决定的$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$与$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$之间的关系，可知：

$$\mathrm{R_u}=\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^{2}+a^{*2}-b^{2}-b^{*2}) & -\frac{i}{2}(a^{2}-a^{*2}+b^{2}-b^{*2}) & -(ab+a^{*}b^{*}) \\ \frac{i}{2}(a^{2}-a^{*2}-b^{2}+b^{*2}) & \frac{1}{2}(a^{2}+a^{*2}+b^{2}+b^{*2}) & i(a^{*}b^{*}-ba) \\ a^{*}b+b^{*}a & i(a^{*}b-b^{*}a) & aa^{*}-bb^{*} \end{pmatrix}$$

对这个$\mathrm{R_u}$，有两点需要说明：

1. 由于：

$$|\vec{r}'\cdot\vec{\sigma}| = \begin{pmatrix} z' & x'-iy' \\ x'+iy' & -z' \end{pmatrix} = |u(\vec{r}\cdot\vec{\sigma})u^{-1}| = |\vec{r}\cdot\vec{\sigma}| = \begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix}$$

所以$|\vec{r}'| = \sqrt{(x'^2+y'^2+z'^2)} = \sqrt{(x^2+y^2+z^2)} = |\vec{r}|$。

也就是说每个 SU(2)群中的 u，对应的R_u，属于 O(3)。

2. 同时，由于R_u是 a、b 的连续函数，取 a=1、b=0，u 为单位矩阵，行列式为 1。而实正交矩阵的行列式只能为 1 或-1，这里已经有了它为 1 的情况，同时它对 a、b 连续，不会出现从 1 到-1的跳跃。所以在实正交矩阵中，我们进一步知道$|R_u| = 1$，也就是说它进一步属于 SO(3)。

这也就是说对任意 SU(2)群中的元素 u，都有一个 SO(3)群中的转动与之对应。这个是我们说明 SU(2)与 SO(3)群同态对应关系成立的第一步。之后，我们还需要说明乘法规律不变以及任意 SO(3)群中的元素都有 SU(2)群中的元素与之对应才可以:

1. 乘法规律不变。

对$\forall u、v \in SU(2)$，有 SO(3)群中的元素R_u、R_v与之对应，那么 uv 所对应的三维实空间中的转动R_{uv}，是否等于R_uR_v?

我们已知:

$$u(\vec{r}\cdot\vec{\sigma})u^{-1} = \vec{r}'\cdot\vec{\sigma} = R_u\vec{r}\cdot\vec{\sigma}$$
$$v(\vec{r}\cdot\vec{\sigma})v^{-1} = \vec{r}''\cdot\vec{\sigma} = R_v\vec{r}\cdot\vec{\sigma}$$

那么$uv(\vec{r}\cdot\vec{\sigma})(uv)^{-1}$一方面等于:

$$uv(\vec{r}\cdot\vec{\sigma})(uv)^{-1} = uv(\vec{r}\cdot\vec{\sigma})v^{-1}u^{-1} = u(R_v\vec{r}\cdot\vec{\sigma})u^{-1} = R_uR_v\vec{r}\cdot\vec{\sigma}$$

另一方面它又直接等于:

$$uv(\vec{r}\cdot\vec{\sigma})(uv)^{-1} = R_{uv}\vec{r}\cdot\vec{\sigma}$$

因此：$R_uR_v = R_{uv}$。

2. 任何 SO(3)群中的元素都可以找到 SU(2)群中的元素与之对应（也就是满射）。

由我们之前知道的 u 与R_u的对应关系，取:

$$\mathrm{u}_1(\alpha)=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-i\alpha/2} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{i\alpha/2}\end{pmatrix}$$

它对应:

$$\mathrm{R}_{\mathrm{u}_1(\alpha)}=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

同样，取:

$$\mathrm{v}_2(\beta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}$$

它对应:

$$\mathrm{R}_{\mathrm{v}_2(\beta)}=\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}$$

取:

$$\mathrm{u}_1(\gamma)=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-i\gamma/2} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{i\gamma/2}\end{pmatrix}$$

$$\mathrm{R}_{\mathrm{u}_1(\gamma)}=\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

这样的话$\mathrm{u}_1(\alpha)\mathrm{v}_2(\beta)\mathrm{u}_1(\gamma)$这个 SU(2)群中的元素，就会对应:

$$\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

这个 SO(3)群中的转动。而这里$\mathrm{u}_1(\alpha)\mathrm{v}_2(\beta)\mathrm{u}_1(\gamma)$等于:

$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-i\alpha/2} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{i\alpha/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-i\gamma/2} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{i\gamma/2}\end{pmatrix}\\ &\quad=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{-i(\alpha-\gamma)/2}\\ \sin\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{i(\alpha+\gamma)/2}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

由于 SO(3)群中的任意一个转动都可以用一组欧拉角描述。同时需要说明的是：在$\beta=0$时，$\alpha+\gamma$相同的组合对应同一转动；$\beta=\pi$时，$\alpha-\gamma$相同的组合

对应同一转动这个性质在：

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix}$$

这个公式中也有体现。

结合这上面的三点（任意 SU(2)群元有 SO(3)群元与之对应，乘法关系不变，满射），SU(2)与 SO(3)同态。其中的同态核是 SO(3)中的：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

对应的 SU(2)群中的元素。根据上面那个：

$$\begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

与

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos\frac{\beta}{2}\mathrm{e}^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix}$$

的对应关系，我们知道$\alpha+\gamma=0, \beta=0$对应的 SO(3)群中元素是单位矩阵，SU(2)群中元素也是单位矩阵。同时 SU(2)群中取$\alpha+\gamma=2\pi$，$\beta=0$，元素为：

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

根据上面的对应关系，给出的 SO(3)群中的元素仍然为：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

这也说明同态核是：

$$\left\{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right\}$$

再由同态核定理，同态核{E、-E}为 SU(2)群的不变子群，且其中任意一个陪集{u、-u}对应 SO(3)群中的同一个转动$\mathrm{R_u}$。（这个其实我们从最初$\mathrm{R_u}$作为 a、b 函

数的那个表达式也可以看出，a、b 同取负号，R_u不变）

5.2SO(3)群与 SU(2)群的不可约表示

现在如果我们把第一节的内容做个总结的话，基本上是下面三句话：

1. SU(2)群与 SO(3)群存在 2 对 1 的同态映射关系，SU(2)群的两个元素u与$-u$对应 SO(3)群中的一个转动R_u；
2. 如已知 SU(2)群中的元素u，可由R_u的表达式求出R_u；
3. 如已知 SO(3)群中的元素$R(\alpha、\beta、\gamma)$，也可由：

$$\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

对应

$$\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\\ \sin\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)/2}\end{pmatrix}$$

求出u与$-u$。

在已知这个 SO(3)与 SU(2)的关系以后，下一个任务，很自然，就是求它们的不等价、不可约表示。怎么求？这个其实是困扰了我好几年的一个问题，因为不同的教材给出的做法不是很统一。我这里采取的是我认为最严格的一个做法，follow 的是马中骐老师的那本英文版的教材。它的基本思路是这样的，我们要取一个线性空间作为表示空间，这个线性空间我们记为$\mathcal{L}^j$，它是一个函数空间。其中的基为$\psi^j_m(\vec{x})$，其中$\vec{x}$为 SU(2)群这个线性变换群所对应的线性空间中的向量，由$\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}$表示。SU(2)群中的线性变换 u 作用到这个向量$\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}$上，得到新的向量$\begin{pmatrix}x'_1\\x'_2\end{pmatrix}$。两者之间的联系是：

$$\begin{pmatrix}x'_1\\x'_2\end{pmatrix}=u\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a & b\\ -b^* & a^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}$$

同时，既然我们说线性空间$\mathcal{L}^j$由 j 来标识，那么对于一个特定的 j（非负整数或半整数），就会存在不同$\psi_m^j(\vec{x})$，这些$\psi_m^j(\vec{x})$通过线性组合形成线性空间。这里，我们取$\psi_m^j(\vec{x})$的形式为：

$$\psi_m^j(\vec{x}) = \psi_m^j\left(x_1, x_2\right) = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}} x_1^{j-m} x_2^{j+m}$$

m取值范围是从j逐次减一到−j。

这样根据前面讲的函数空间变换规则，u所对应的函数变换算符$\widehat{P}_u$作用到$\psi_m^j\left(x_1, x_2\right)$上，结果应该是：

$$\widehat{P}_u \psi_m^j(\vec{x}) = \psi_m^j(u^{-1}\vec{x})$$

我们唯一需要做的，就是将$\psi_m^j(u^{-1}\vec{x})$按$\sum_{m'} \psi_{m'}^j(\vec{x})\, A_{m'm}^j(u)$展开来确定矩阵的列，从而产生表示矩阵。其中m′、m 的取值是从 j 到 − j，排列也是按这个来排列。

明确了这些，我们就按这个步骤来看 SU(2)群的元素 u 在线性空间$\mathcal{L}^j$中的表示矩阵是什么了？前面说过由于 SO(3)群中的转动与 SU(2)群中的元素{u、-u}的对应关系，u 本身可以用欧拉角描述为：

$$\begin{aligned} u &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} e^{-\frac{i(\alpha+\gamma)}{2}} & -\sin\frac{\beta}{2} e^{-\frac{i(\alpha-\gamma)}{2}} \\ \sin\frac{\beta}{2} e^{\frac{i(\alpha-\gamma)}{2}} & \cos\frac{\beta}{2} e^{\frac{i(\alpha+\gamma)}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

当u对应绕z轴转α角的转动R(α、0、0)时，$u = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}$。把u记为$\left(\vec{e}_3, \alpha\right)$，这时，

$$\left(\vec{e}_3, \alpha\right)^{-1} = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix}$$

对应的变换

$$\widehat{\mathrm{P}}_{\left(\vec{\mathrm{e}}_3,\ \alpha\right)}\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}(\vec{\mathrm{x}})=\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}\left(\left(\vec{\mathrm{e}}_3,\ \alpha\right)^{-1}\vec{\mathrm{x}}\right)=\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}\left(\mathrm{e}^{\frac{i\alpha}{2}}\mathrm{x}_1,\ \mathrm{e}^{-\frac{i\alpha}{2}}\mathrm{x}_2\right)$$

$$=\frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}\mathrm{x}_1^{j-m}\mathrm{x}_2^{j+m}\mathrm{e}^{-i\alpha m}=\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}\left(\mathrm{x}_1,\ \mathrm{x}_2\right)\mathrm{e}^{-im\alpha}=\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}(\vec{\mathrm{x}})\mathrm{e}^{-im\alpha}$$

而$\widehat{\mathrm{P}}_{\left(\vec{\mathrm{e}}_3,\ \alpha\right)}\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}(\vec{\mathrm{x}})=\sum_{\mathrm{m}'}\psi_{\mathrm{m}'}^{\mathrm{j}}(\vec{\mathrm{x}})\,\mathrm{A}_{\mathrm{m}'\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}\left(\left(\vec{\mathrm{e}}_3,\ \alpha\right)\right)$，因此相应的$\mathrm{A}_{\mathrm{m}'\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}\left(\left(\vec{\mathrm{e}}_3,\ \alpha\right)\right)$为：

$$\mathrm{A}_{\mathrm{m}'\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}\left(\left(\vec{\mathrm{e}}_3,\ \alpha\right)\right)=\delta_{\mathrm{m}'\mathrm{m}}\mathrm{e}^{-im\alpha}$$

同样，对与$\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\frac{i\gamma}{2}} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\frac{i\gamma}{2}}\end{pmatrix}$这个绕 z 轴转$\gamma$的操作$\mathrm{R}\left(0、0、\gamma\right)$，把u记为$\left(\vec{\mathrm{e}}_3,\ \gamma\right)$，也有：

$$\mathrm{A}_{\mathrm{m}'\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}\left(\left(\vec{\mathrm{e}}_3,\ \gamma\right)\right)=\delta_{\mathrm{m}'\mathrm{m}}\mathrm{e}^{-im\gamma}$$

最后剩下的是对$\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}$这个绕 y 轴转$\beta$角的操作$\mathrm{R}(0、\beta、0)$，把u记为$\left(\vec{\mathrm{e}}_2,\ \beta\right)$，情况会稍微复杂些，因为：

$$\left(\vec{\mathrm{e}}_2,\ \beta\right)^{-1}=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\beta}{2} & \sin\dfrac{\beta}{2}\\ -\sin\dfrac{\beta}{2} & \cos\dfrac{\beta}{2}\end{pmatrix}$$

这样的话

$$\widehat{\mathrm{P}}_{\left(\vec{\mathrm{e}}_2,\ \beta\right)}\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}(\vec{\mathrm{x}})=\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}\left(\left(\vec{\mathrm{e}}_2,\ \beta\right)^{-1}\vec{\mathrm{x}}\right)$$

$$=\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}\left(\cos\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_1+\sin\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_2,\ -\sin\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_1+\cos\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_2\right)$$

$$=\frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}\left(\cos\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_1+\sin\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_2\right)^{j-m}\left(-\sin\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_1+\cos\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_2\right)^{j+m}$$

这时，利用：

$$(\mathrm{x}+\mathrm{y})^n=\sum_{r=0}^{n}\frac{n!}{r!\,(n-r)!}\mathrm{x}^r\mathrm{y}^{n-r}$$

$\widehat{\mathrm{P}}_{\left(\vec{\mathrm{e}}_2,\ \beta\right)}\psi_{\mathrm{m}}^{\mathrm{j}}(\vec{\mathrm{x}})$继续等于：

$$\frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}\left\{\sum_{r=0}^{j-m}\frac{(j-m)!}{r!\,(j-m-r)!}\left(\cos\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_1\right)^{j-m-r}\left(\sin\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_2\right)^{r}\right\}$$
$$\left\{\sum_{r'=0}^{j+m}\frac{(j+m)!}{r'!\,(j+m-r')!}\left(-\sin\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_1\right)^{j+m-r'}\left(\cos\frac{\beta}{2}\mathrm{x}_2\right)^{r'}\right\}$$
$$=(-1)^{j-m}\sum_{r=0}^{j-m}\sum_{r'=0}^{j+m}\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}{r!\,(j-m-r)!\,r'!\,(j+m-r')!}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{j-m-r+r'}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{j+m-r'+r}$$
$$(-1)^{j+m-r'}(\mathrm{x}_1)^{2j-r-r'}(\mathrm{x}_2)^{r+r'}$$

令$m'=r+r'-j$，则$\mathrm{x}_1^{2j-r-r'}\mathrm{x}_2^{r+r'}=\mathrm{x}_1^{j-m'}\mathrm{x}_2^{j+m'}$，$r'=j+m'-r$，$j+m-r'=j+m-(j+m'-r)=r+m-m'$，进而上式继续等于:

$$\sum_{m'=j}^{-j}\sum_{r=0}^{j-m}\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+m')!\,(j-m')!}}{r!\,(j-m-r)!\,(j+m'-r)!\,(r+m-m')!}(-1)^r\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-m-2r+m'}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m+2r-m'}$$
$$\frac{(-1)^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!\,(j-m')!}}\mathrm{x}_1^{j-m'}\mathrm{x}_2^{j+m'}$$
$$=\sum_{m'=j}^{-j}\mathrm{A}^{\mathrm{j}}_{\mathrm{m'm}}\left(\left(\vec{\mathrm{e}}_2,\ \beta\right)\right)\psi^{\mathrm{j}}_{\mathrm{m'}}(\vec{\mathrm{x}})$$

这个里面-1的指数从$(j-m)+(j+m-r')=2j-r'$变为$r+j-m'$。这个变化的原因是：$r'=j+m'-r$，因此$2j-r'=2j-(j+m'-r)=r+j-m'$。指数不发生变化。

这个表达式中，$\mathrm{A}^{\mathrm{j}}_{\mathrm{m'm}}\left(\left(\vec{\mathrm{e}}_2,\ \beta\right)\right)$等于:

$$\sum_{r=0}^{j-m}\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+m')!\,(j-m')!}}{r!\,(j-m-r)!\,(j+m'-r)!\,(r+m-m')!}(-1)^r\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-m-2r+m'}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m+2r-m'}$$

这里对加和指标r的要求是:

1. $r\geq 0$；2. $r\leq j-m$；3. $r\leq j+m'$；4. $r\geq m'-m$。

而完整的一个SU(2)群中的元素

$$u=\begin{pmatrix}e^{-i\alpha/2} & 0\\ 0 & e^{i\alpha/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-i\gamma/2} & 0\\ 0 & e^{i\gamma/2}\end{pmatrix}$$

所对应的$\mathcal{L}^{j}$中的变换矩阵就是:

$$A^{j}_{m'm}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=\left\{A^{j}\left((\vec{e}_3,\ \alpha)\right)A^{j}\left((\vec{e}_2,\ \beta)\right)A^{j}\left((\vec{e}_3,\ \gamma)\right)\right\}_{m'm}$$
$$=e^{-im'\alpha}A^{j}_{m'm}\left((\vec{e}_2,\ \beta)\right)e^{-im\gamma}$$

这里，m'、m 的取值是从 j 到 $-j$，排列也是按这个顺序来排列。

这里，当u变为$-u$时，表示矩阵要么不变，要么反号。怎么理解？我们分特殊情况（三种）与一般情况展开讨论。

特殊情况一，$\begin{pmatrix}e^{-\frac{i\alpha}{2}} & 0\\ 0 & e^{\frac{i\alpha}{2}}\end{pmatrix}$与$\begin{pmatrix}e^{-\frac{i\gamma}{2}} & 0\\ 0 & e^{\frac{i\gamma}{2}}\end{pmatrix}$不变，$\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}$变成了$-\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}$。这时，对$e^{-im'\alpha}A^{j}_{m'm}\left((\vec{e}_2,\ \beta)\right)e^{-im\gamma}$的变化，关键看$A^{j}_{m'm}\left((\vec{e}_2,\ \beta)\right)$。由于$2j-m-2r+m'+m+2r-m'=2j$，因此，当$j$为整数时，这个表示为偶表示；当$j$为半整数时，这个表示为奇表示。

特殊情况二和三，$\begin{pmatrix}e^{-\frac{i\alpha}{2}} & 0\\ 0 & e^{\frac{i\alpha}{2}}\end{pmatrix}$与$\begin{pmatrix}e^{-\frac{i\gamma}{2}} & 0\\ 0 & e^{\frac{i\gamma}{2}}\end{pmatrix}$中的一个反号，另一个不变，$\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}$不变。这时$e^{-im'\alpha}A^{j}_{m'm}\left((\vec{e}_2,\ \beta)\right)e^{-im\gamma}$的变化还是$j$为整数时不变，当$j$为半整数时反号。

一般情况，u 变为 $-u$不能分解为上面三项中一项反号。但这种情况可以通过一个相似变换的方式和上面的特殊情况联系起来，$u_g=\alpha u_s\alpha^{-1}$。$u_g$代表一般情况，$u_s$代表上面的特殊情况。$u_g$变成$-u_g$实际上是$\alpha(-u_s)\alpha^{-1}$。这时:

$$A(-u_g)=A(\alpha(-u_s)\alpha^{-1})=A(\alpha)A(-u_s)A(\alpha)^{-1}$$

这样，根据上面特殊情况同理。当j为整数时，$A(-u_s)=A(u_s)$，因此$A(-u_g)=$

$A(u_g)$；当j为半整数时，$A(-u_s)=-A(u_s)$，$A(-u_g)=-A(u_g)$。不管怎样，都是当j为整数时，表示为偶表示；当j为半整数时，表示为奇表示。

下面看一下简单的几个具体情况中表示矩阵元是什么：

1. 当$j=0$时，这时m与m'只能为零，r也只能为零，对应的基组就一个基函数，是 1 这个常数，表示矩阵也是 1 阶的，为：

$$A_{00}^{0}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=1$$

一维恒等表示。

2. 当$j=1/2$时，

第一个矩阵元：

$$A_{1/2,1/2}^{\frac{1}{2}}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=\cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i(\alpha+\gamma)}{2}}$$

这里$j=1/2$、$\mathrm{m}=1/2$、$\mathrm{m}'=1/2$，加和指标r的要求是：

1. $r\geq 0$；2. $r\leq j-m=0$；3. $r\leq j+m'=1$；4. $r\geq m'-m=0$，综合就是$r=0$。因此，

$$A_{1/2,1/2}^{\frac{1}{2}}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=e^{-\frac{i\alpha}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\gamma}{2}}=\cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i(\alpha+\gamma)}{2}}$$

第二个矩阵元：

$$A_{1/2,-1/2}^{1/2}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=-\sin\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i(\alpha-\gamma)}{2}}$$

这里$j=1/2$、$\mathrm{m}=-1/2$、$\mathrm{m}'=1/2$，加和指标r的要求是：

1. $r\geq 0$；2. $r\leq j-m=1$；3. $r\leq j+m'=1$；4. $r\geq m'-m=1$，综合就是$r=1$。因此，

$$A_{1/2,-1/2}^{\frac{1}{2}}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=e^{-\frac{i\alpha}{2}}\left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)e^{\frac{i\gamma}{2}}=-\sin\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i(\alpha-\gamma)}{2}}$$

第三个矩阵元：

$$A^{1/2}_{-1/2,1/2}(\alpha,\ \beta,\ \gamma) = \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i(\alpha-\gamma)}{2}}$$

这里$j = 1/2$、$\mathrm{m} = 1/2$、$\mathrm{m}' = -1/2$，加和指标r的要求是：

1. $r \geq 0$；2. $r \leq j - m = 0$；3. $r \leq j + m' = 0$；4. $r \geq m' - m = -1$，综合就是$r = 0$。因此，

$$A^{\frac{1}{2}}_{-1/2,1/2}(\alpha,\ \beta,\ \gamma) = e^{\frac{i\alpha}{2}}\sin\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\gamma}{2}} = \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i(\alpha-\gamma)}{2}}$$

第四个矩阵元：

$$A^{1/2}_{-1/2,-1/2}(\alpha,\ \beta,\ \gamma) = \cos\frac{\beta}{2}e^{\frac{i(\alpha+\gamma)}{2}}$$

这里$j = 1/2$、$\mathrm{m} = -1/2$、$\mathrm{m}' = -1/2$，加和指标r的要求是：

1. $r \geq 0$；2. $r \leq j - m = 1$；3. $r \leq j + m' = 0$；4. $r \geq m' - m = 0$，综合就是$r = 0$。因此，

$$A^{\frac{1}{2}}_{-1/2,-1/2}(\alpha,\ \beta,\ \gamma) = e^{-\frac{i\alpha}{2}}\cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\gamma}{2}} = \cos\frac{\beta}{2}e^{\frac{i(\alpha+\gamma)}{2}}$$

这四个矩阵元放在一起形成的矩阵是$\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i(\alpha+\gamma)}{2}} & -\sin\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i(\alpha-\gamma)}{2}} \\ \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i(\alpha-\gamma)}{2}} & \cos\frac{\beta}{2}e^{\frac{i(\alpha+\gamma)}{2}}\end{pmatrix}$,刚好就是 SU(2)这个群中的矩阵本身。

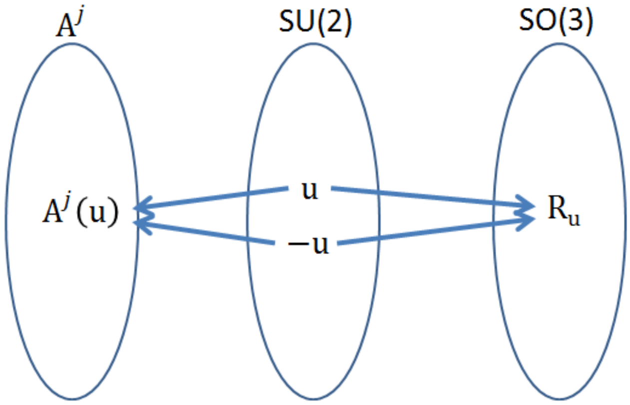
3. j更大时，还是按照这个规则来，只是矩阵元的产生过程更复杂一些。

当j走遍所有的正的整数与半整数时，A^j给出 SU(2)群的所有不等价、不可约酉表示。

前面我们说过，前两节的核心任务是理解：1) SO(3)与 SU(2)群是什么，它们有怎样的关系？2) SO(3)与 SU(2)群的不可约表示是什么？现在我们第一点是完全知道了，第二点知道了 SU(2)群的不可约表示，还剩 SO(3)群的没有说。要说这部分，用到的知识就是 SO(3)与 SU(2)群的关系。

我们分两个方面来理解这种关系。一方面，在 SU(2)群与 SO(3)群的对应上，

我们知道 SU(2)群中的u与$-\mathrm{u}$都对应 SO(3)群中的转动$\mathrm{R_u}$，对应关系基于欧拉角。同时，在讲 SU(2)群的不可约表示A^j的时候，我们也说了当j为整数的时候，有$\mathrm{A}^j(\mathrm{u})=\mathrm{A}^j(-\mathrm{u})$，这也就意味着存在这样一个关系：



也就是说当j为整数时，A^j也是 SO(3)群的表示。同时当j走遍所有整数的时候，A^j给出所有 SO(3)群的不等价不可约酉表示。这样的话它们的不等价不可约表示的情况就清楚了。

5.3 双群与自旋半奇数粒子的旋量波函数

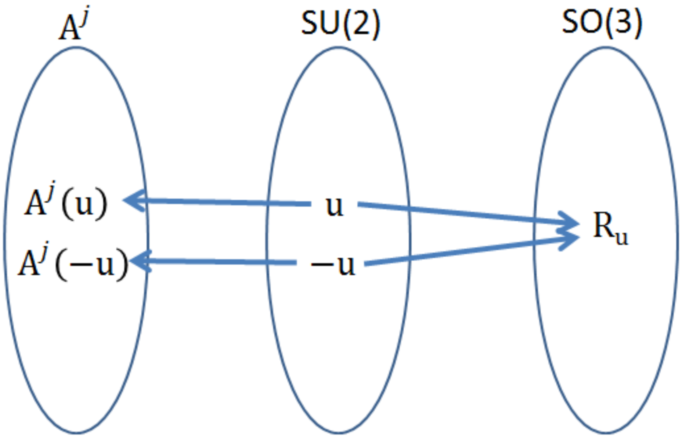
上面那些讨论给我们的信息里面，目前我们直接和真实的物理系统建立联系的是 SO(3)群，它对应的物理系统是中心力场。如果我们只是为了这个目的，那么我们可以去想一下，上面关于 SU(2)群的讨论有很多是不必要的，虽然我们利用它给出了 SO(3)群的不可约表示A^j（j为整数）。

为什么要对它进行这么多的讨论？应该说本质上的原因是 SU(2)可以描述一个自旋 1/2 的费米子系统在转动操作下波函数的自旋部分变换的性质。其中最基本的一个就是对这样一个系统，你在三维实空间转2π角的时候，它的波函数不回到其本身，而是多了一个负号。其中，三维空间波函数回到了它本身，但电子自旋内禀空间的并没有。与之相应，我们在描述这类系统时，也就不能用 SO(3)群了，而是要用它的双群$\mathrm{SO^D}(3)$。同时，当系统的对称性由中心力场降低为分子或

晶体中的点群的时候，我们描述它的对称性的工具，也不能是前面讲的点群了，而是要用点群的双群。

在我们的日常的研究中，一个最常见的问题就是在考虑自旋轨道耦合的时候，我们的能级或能带如何劈裂？下面，我们就会以这几个概念（$SO^D(3)$、点群的双群、旋轨耦合引起的能级劈裂）为重点，来讲一下前两节的内容在这类物理系统中的应用。

先看 SO(3)群的双群$SO^D(3)$。这里的基础是一个与上节最后相似的关系，不过对应的是j为半整数的情况。这个时候，由于$A^j(-u) = -A^j(u)$，这样A^j矩阵群、SU(2)群、SO(3)群的关系就变成了这样：



这个时候一个 SO(3)群中的转动$R(\alpha, \beta, \gamma)$会对应相差一个负号的两个 SU(2)群中的元素u与$-u$，同样也对应相差一个负号的两个矩阵$A^j(u)$与$A^j(-u) = -A^j(u)$。

如果我们把“表示”这个概念中“一个群元对应一个矩阵”弱化为“一个群元对应相差一个负号的两个矩阵”；同时把保持乘法规则不变这个规定弱化为保持乘法规则在相差一个负号的情况下不变，也就是：$A^j(u_1)A^j(u_2) = \pm A^j(u_1 u_2)$，这时我们可以把$A^j(u)$，在$j$为半整数时对 SO(3)群的表示称为一个双值表示。

这是处理 SO(3)群中的元素 u 与$A^j(u)$这个矩阵在j为半整数时对应关系的一种手段。和它差不多，我们还可以采取另外一个手段，就是利用 SO(3)群中元素$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(\alpha+2\pi,\beta,\gamma)$这样一个特征，把绕某轴转$2\pi$角的操作定义为一个新的非恒等操作$\overline{E}$。这个$\overline{E}\neq E$，但$\overline{EE}=E$。这个时候，我们再把每个 SO(3)群中的元素乘上$\overline{E}$，得到一个新的元素集合，每个 SO(3)群中的元素都唯一的对应这个集合中的元素。

现在把这个集合与 SO(3)放在一起，形成一个新的集合。这个新的集合，在与 SO(3)群相同的乘法规则下，是形成一个群的。这个群，就与 SU(2)同构，相应的，在j为半整数时的矩阵群$\{A^j(u)\}$，也就很自然的形成了它的一个表示。

那么我们这里的处理是保持“表示”本身的定义不变，但是把 SO(3)群扩大了一倍。这样形成的一个群，称为 SO(3)群的双群$SO^D(3)$。也就是说为了描述前面两个图的差别，我们可以做两个处理。一个是用双值表示这个概念，一个是用双群。双值表示就是一个概念，很多教材会提到，但实用价值不大；双群的实用价值很大。

需要注意的是在我这个$SO^D(3)$中，SO(3)群元素的结合形成一个子集，但它不再是子群了。因为我规定转2π不等于不转，也就是我两个 SO(3)群中的元素，各转$3\pi/2$，乘完的元素转3π，它就不属于 SO(3)这个集合了。也正是因为这个原因，$SO^D(3)$并不是 SO(3)与$\{E,\overline{E}\}$的直积，相应的$SO^D(3)$的表示就不再是 SO(3)的表示乘上$\{E,\overline{E}\}$的一维恒等于一维非恒等表示那么简单了。

这样的一个双群，在物理系统中，具体对应电子的自旋态。我们学过量子力学的都知道电子并不是一个简单的具有三个自由度的粒子，它还有一个自由度必须有自旋来描述。自旋，按照曾谨言老师《量子力学》这本书第一册、第八章、

第一小节、第三部分的第一段话，是这样描述的“自旋这个力学量虽然有角动量的性质，但与轨道角动量不同，它并无经典对应（当$\hbar$趋紧于时，自旋效应自然消失)。自旋的系统理论属于相对论量子力学的范围，它是电子场在空间转动下的特性的反映。在非相对论量子力学中，可以唯象地根据实验上反映出来的自旋的特点，选择适当的数学工具来描述它。”很惭愧我自己到现在都没有学过相对论量子力学，就课程讲授而言，我们权且把自旋理解为这样一个东西：它是电子的内禀属性；它有相应的角动量与磁矩；在任何一个方向，它都有两个分立的值。

由于自旋轨道耦合的原因，对一个单电子问题中的单电子，它的总的角动量$\hat{\mathrm{J}}$，就是其轨道角动量$\hat{\mathrm{L}}$与自旋角动量$\hat{\mathrm{S}}$的矢量和：

$$\hat{\mathrm{J}} = \hat{\mathrm{L}} + \hat{\mathrm{S}}$$

当我们选定一个特定轴（比如 z）的时候，电子本征态波函数是一个旋量波函数，形式是：

$$\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}}, \hbar/2, t) \\ \Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}}, -\hbar/2, t) \end{pmatrix}$$

其中$\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}}, \hbar/2, t)$为该本征态自旋在 z 轴投影为$\hbar/2$的的空间依赖部分，$\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}}, -\hbar/2, t)$为该本征态自旋在 z 轴投影为$-\hbar/2$的空间依赖部分。

在该本征态下，系统自旋向上的几率为：$\int \left|\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}}, \hbar/2, t)\right|^2 d\vec{\mathrm{r}}$，自旋向下的几率为：$\int \left|\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}}, -\hbar/2, t)\right|^2 d\vec{\mathrm{r}}$。总的波函数归一条件是：$\int \left[\left|\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}}, \hbar/2, t)\right|^2 + \left|\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}}, -\hbar/2, t)\right|^2\right] d\vec{\mathrm{r}} = 1$

这里的两个好量子数是j、m，对应的力学量期待值是：

$$\hat{\mathrm{J}}^2 \Psi_{jm} = j(j+1)\hbar^2 \Psi_{jm}$$

$$\hat{\mathrm{J}}_z \Psi_{jm} = m\hbar \Psi_{jm}$$

$\hat{\mathrm{J}}$为总角动量，$\hat{\mathrm{J}}_z$为它在 z 方向的投影。就好量子数取值而言$j = 1/2$，3/2，5/2，

…；对一个特定的j，$m=-j$，$-j+1$，…，$j-1$，j。

对于这样一个旋量波函数，如果我们把一个绕 z 轴转动α角的操作$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{z},\alpha}=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{\mathrm{J}}_z}$作用到它上面，效果就是：

$$\widehat{\mathrm{P}}_{\mathrm{z},\alpha}\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}},t)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{\mathrm{J}}_z}\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}},t)=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\alpha m\hbar}\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}},t)=\mathrm{e}^{-i\alpha m}\Psi_{jm}(\vec{\mathrm{r}},t)$$

由于j为半奇数，m也是半奇数。这也就意味着我系统转2π角的时候，本征态波函数反号。只有转4π的时候才回到本身。这个就和 SO(3)群的双群$\mathrm{SO^D}(3)$就对应起来了。

在不考虑自旋轨道耦合的时候，由于总的角动量为整数，所以转2π角之后系统到了本身。系统的对称性就是 SO(3)或点群，但考虑了自旋轨道耦合之后，由于总自旋变为了半奇数，系统的对称性就变成了$\mathrm{SO^D}(3)$或双点群。相应，在本征态标注的环节，在不考虑自旋轨道耦合的时候，系统的群要么是 SO(3)群，要么是某个点群，它的本征态对应的是 SO(3)或者这个点群的不可约表示。在考虑了自旋轨道耦合之后，由于$\mathrm{SO^D}(3)$并不是 SO(3)与$\{\mathrm{E},\ \overline{\mathrm{E}}\}$的直积，或者说点群双群不是点群与$\{\mathrm{E},\overline{\mathrm{E}}\}$的直积，那么原来对应不可约表示的本征态现在对应的就不再是不可约表示了，相应的能带或能级就会发生劈裂。

在原子物理中，这种自旋轨道耦合效应带来的一个直接后果是在研究原子光谱的时候，我们需要用总的角动量去理解这些原子谱。历史上，也正是由于要解释这些原子光谱的需求，才导致了人们发现电子自旋这个内禀属性（Uhlenbeck，Goudsmit，Kronig 这些人在薛定谔方程、狄拉克方程提出前的工作）。

就我们利用这样一个对称性来理解物性而言，我这里举两个例子，就是晶体里面考虑了自旋轨道耦合后，能带会发生怎样的变化？（这个你们以后都会遇到）

例1.　系统本身是D_2群，它有四个类，E、c_{2x}、c_{2y}、c_{2z}。对应 4 个一维不可约

表示。对它的双群D_2^D，由于$\overline{E}$的引入，多了四个元素，现在八个元素是:
E、c_{2x}、c_{2y}、c_{2z}、$\overline{E}$、$\overline{E}c_{2x}$、$\overline{E}c_{2y}$、$\overline{E}c_{2z}$，这里$\overline{E}$为绕 z 轴转2π的操作。它们的阶是 1、4、4、4、2、4、4、4。

对c_{2z}，它代表绕 z 轴逆时针转π角的操作；$\overline{E}c_{2z}$，代表绕 z 轴转3π角的操作，它们不相等。但是由于c_{2x}的存在，$(c_{2x})^{-1}\overline{E}c_{2z}(c_{2x})$代表绕 z 轴负方向转$3\pi$，也就是 z 轴转$\pi$的操作$c_{2z}$。即$(c_{2x})^{-1}\overline{E}c_{2z}(c_{2x}) = c_{2z}$，$c_{2z}$与$\overline{E}c_{2z}$同类。

对c_{2x}，它代表绕 x 轴逆时针转π角的操作；$\overline{E}c_{2x}$，代表绕 x 轴转3π角的操作，它们不相等。注意，这个$\overline{E}$我的严格的定义是绕某轴。这个“某”，我是可以选取的。但是由于c_{2z}的存在，$(c_{2z})^{-1}\overline{E}c_{2x}(c_{2z})$代表绕 x 轴负方向转$3\pi$，也就是 x 轴转$\pi$的操作$c_{2x}$。即$(c_{2z})^{-1}\overline{E}c_{2x}(c_{2z}) = c_{2x}$，$c_{2x}$与$\overline{E}c_{2x}$同类。

对c_{2y}、$\overline{E}c_{2y}$，同理。这样我的D_2^D就有五个类。{E}、{$\overline{E}$}、$\left\{c_{2x}、\overline{E}c_{2x}\right\}$、$\left\{c_{2y}、\overline{E}c_{2y}\right\}$、$\left\{c_{2z}、\overline{E}c_{2z}\right\}$。相应于$D_2$群的四个一维表示，$D_2^D$的 Burnside 方程就是:

$$1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 = 8$$

它就有四个一维不可约表示，一个二维不可约表示。

D_2群的特征标表是:

	$1\{E\}$	$1\{c_{2x}\}$	$1\{c_{2y}\}$	$1\{c_{2z}\}$
A^1	1	1	1	1
A^2	1	1	-1	-1
A^3	1	-1	1	-1
A^4	1	-1	-1	1

D_2^D群的特征标表是:

	$1\{E\}$	$1\{\overline{E}\}$	$2\{c_{2x}\}$	$2\{c_{2y}\}$	$2\{c_{2z}\}$
A^1	1	1	1	1	1
A^2	1	1	1	-1	-1
A^3	1	1	-1	1	-1
A^4	1	1	-1	-1	1
A^5	2	-2	0	0	0

现在考虑一个具有D_2群对称性的晶体本征态，在引入自旋轨道耦合后的能带变化情况。

在引入旋轨耦合前，总体波函数的空间依赖部分是$\psi(r)$，对称群为D_2，表示是D_2的A^1到A^4中间的一个，由于这些不可约表示是一维的，轨道部分是单重态。而自旋部分，可容纳↑、↓两个态（自旋双重态），对称群是 SU(2)，以↑、↓两个态为基，表示就是 SU(2)这个矩阵群，具体形式是:

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix}$$

（请对照 SU(2)群那部分的讨论进行深入理解。比如为什么在那里用到 Pauli 矩阵？为什么用 u 表示对矩阵 h= $\vec{r}\cdot\vec{\sigma}$的相似变换？）

要看考虑自旋轨耦合后的本征能级变化，说白了，就是做$\psi(r)$承载的D_2的不可约表示与电子自旋承载的 SU(2)群的二维不可约表示的直积，然后往

D_2^D的不可约表示上做投影即可。如$\psi(r)$承载的D_2群的不可约表示是A^1，$\{E\}$、$\{\bar{E}\}$、$\left\{c_{2x}、\bar{E}c_{2x}\right\}$、$\left\{c_{2y}、\bar{E}c_{2y}\right\}$、$\left\{c_{2z}、\bar{E}c_{2z}\right\}$对应的$D_2$群的特征标分别是 1、1、1、1、1。而它们承载的 SU(2)群的不可约表示的特征标分别是 2、-2、0、0、0。这样的话直积表示的特征标就是 2、-2、0、0、0。这个时候对应的情况是在考虑旋轨耦合之前，轨道部分承载D_2的不可约表示A^1，自旋部分简并得坐着自旋向上、向下两个电子，考虑旋轨耦合之后，这两个电子的本征态变成了D_2^D的不可约表示A^5所对应的本征态。对称性也要进行相应的变化。

如$\psi(r)$承载的D_2群的不可约表示是A^2，A^3，或A^4，$\{E\}$、$\{\bar{E}\}$、$\left\{c_{2x}、\bar{E}c_{2x}\right\}$、$\left\{c_{2y}、\bar{E}c_{2y}\right\}$、$\left\{c_{2z}、\bar{E}c_{2z}\right\}$对应的$D_2$群的特征标分别是 1、1、1、-1、-1，1、1、-1、1、-1，或 1、1、-1、-1、1。而它们承载的 SU(2)群的不可约表示的特征标还是 2、-2、0、0、0。这样的话直积表示的特征标也还是 2、-2、0、0、0。对应的情况和上一段的讨论很类似，考虑旋轨耦合之前，轨道部分承载D_2的不可约表示A^2、A^3、或A^4，自旋部分简并得坐着自旋向上、向下两个电子，考虑旋轨耦合之后，这两个电子的本征态变成了D_2^D的不可约表示A^5所对应的本征态。对称性也要进行相应的变化。还是二重简并，但这个时候的那个态就不是自旋纯态了。

我们需要说明的是在上面的讨论中，由于c_{2x}的存在，使得c_{2y}与$\bar{E}c_{2y}$、c_{2z}与$\bar{E}c_{2z}$成为同一类元素。由于c_{2y}的存在，使得c_{2x}与$\bar{E}c_{2x}$也成为同一类元素。这些元素同类的条件都是有一个二次轴与这个二次轴相互垂直。这个时候由于我们上面的分析，每个二次转动与它乘上$\bar{E}$之后形成的元素属于同一类。

例2. 系统本身是D_4群，它有五个类，$\{E\}$、$\left\{C_4^1、C_4^3\right\}$、$\{C_4^2\}$、$\left\{C_2^{(1)}、C_2^{(3)}\right\}$、$\left\{C_2^{(2)}、C_2^{(4)}\right\}$。对应 4 个一维不可约表示、1 个二维不可约表示。对它的双群D_4^D，由于$\overline{E}$的引入，多了八个元素，现在 16 个元素。C_4^1代表 z 轴正向逆时针转$\pi/2$；$\overline{E}C_4^3$代表 z 轴正向逆时针转$7\pi/2$，相当于 z 轴反向逆时针转$\pi/2$，因此C_4^1与$\overline{E}C_4^3$同类。同理，C_4^2与$\overline{E}C_4^2$一类；C_4^3与$\overline{E}C_4^1$一类；$C_2^{(1)}$、$\overline{E}C_2^{(1)}$、$C_2^{(3)}$、$\overline{E}C_2^{(3)}$一类；$C_2^{(2)}$、$\overline{E}C_2^{(2)}$、$C_2^{(4)}$、$\overline{E}C_2^{(4)}$一类。再加上$\{E\}$是一类，$\{\overline{E}\}$是一类，一共七类。

例3. O 群有 24 个元素 5 个类：$\{E\}$、$\{3C_4^2\}$、$\{6C_4\}$、$\{6C_2\}$、$\{8C_3\}$。在加入了$\overline{E}$后，$\{E\}$、$\{6C_4\}$、$\{8C_3\}$都是在乘上$\overline{E}$后，与原来$\{E\}$、$\{6C_4\}$、$\{8C_3\}$这个集合进行重组，给出：$\{E\}$、$\{\overline{E}\}$、$\left\{3C_4、3\overline{E}C_4^3\right\}$、$\left\{3C_4^3、3\overline{E}C_4\right\}$、$\{8C_3\}$、$\{8\overline{E}C_3\}$六个类。对$\{3C_4^2\}$，由于这三个二次轴相互垂直，$\{3\overline{E}C_4^2\}$与它们同类，在$O^D$中，这个类是：$\left\{3C_4^2、3\overline{E}C_4^2\right\}$。同样，$\{6C_2\}$也是，在$O^D$中，这个类是：$\left\{6C_2、6\overline{E}C_2\right\}$。

综合起来，O^D群就有 48 个元素，$\{E\}$、$\left\{3C_4、3\overline{E}C_4^3\right\}$、$\{8C_3\}$、$\{\overline{E}\}$、$\left\{3C_4^3、3\overline{E}C_4\right\}$、$\{8\overline{E}C_3\}$、$\left\{3C_4^2、3\overline{E}C_4^2\right\}$、$\left\{6C_2、6\overline{E}C_2\right\}$八个类。

对应的 Burnside 定理就是：

$$1^2+1^2+2^2+3^2+3^2+2^2+2^2+4^2=48$$

O^D群的不可约表示特征标表是：

	$1\{E\}$	$1\{\overline{E}\}$	$6\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{\overline{E}C_4\}$	$12\{C_2\}$	$8\{C_3\}$	$8\{\overline{E}C_3\}$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1	-1	-1	1	1

Γ_{12}	2	2	2	0	0	0	-1	-1
$\Gamma_{15'}$	3	3	-1	1	1	-1	0	0
$\Gamma_{25'}$	3	3	-1	-1	-1	1	0	0
Γ_6	2	-2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	1	-1
Γ_7	2	-2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	1	-1
Γ_8	4	-4	0	0	0	0	-1	1

上面的讨论是对应纯转动点群，在考虑反演操作的时候，如考虑的非纯转动点群包含 I 操作，那么对应的非纯转动点群的双群O_h^D的特征标表，按照我们前面讲的，就是利用上个表格，与{E、I}的一维不可约表示做直积。相应的不可约表示的标识，也会由Γ_1变成Γ_1^+、Γ_1^-这样的偶、奇宇称态。Γ_2变成Γ_2^+、Γ_2^-；Γ_{12}变成Γ_{12}^+、Γ_{12}^-，以此类推。

如果不包含 I，就是利用同构关系依照某个纯转动点群双群的特征标表去理解物性。

这些是铺垫性讨论，现在回到能带与能级劈裂这个话题本身，还是刚才那句话，在不考虑双群的时候，O_h不可约表示的每个维度可以坐两个电子；而考虑了旋轨耦合带来的双群，O_h^D不可约表示的每个维度就坐一个电子。

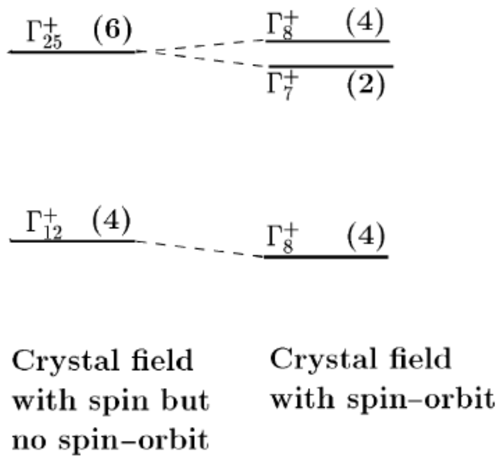
以我们之前讲过的原子轨道在晶格场中的劈裂作为例子。之前我们说过，一个 3d 过渡金属原子，在一个具备O_h对称性的晶体中，d 轨道会劈裂为

E_g与T_{2g},这个 E 与 T 是对点群不可约表示的一种标识,对应二维与三维,g 代表这个态是偶宇称的。

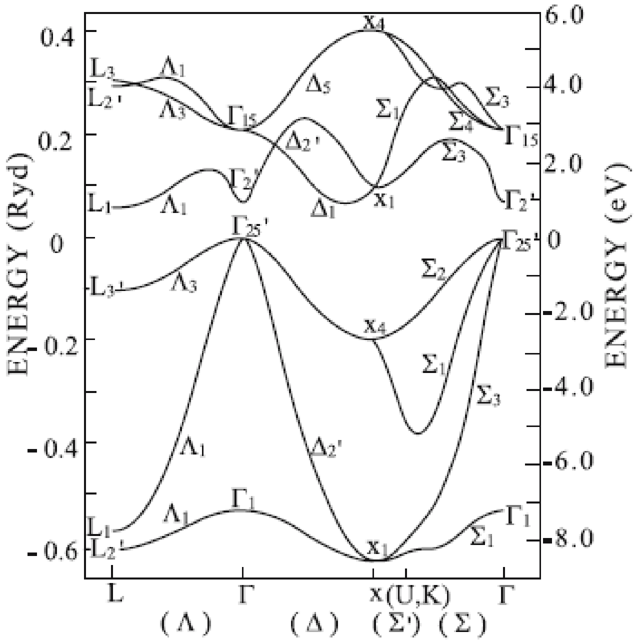
有些文献上,在 Wigner 的标识习惯中,E_g与T_{2g}会被写为Γ_{12}^{+}与Γ_{25}^{+}。Γ_{12}^{+}是个二维表示,上面坐四个电子,Γ_{25}^{+}是个三维表示,上面坐六个电子。这个只是一种习惯,没有什么复杂的。

现在考虑自旋轨道耦合,Γ_{12}^{+}与Γ_{25}^{+}这两个态就会发生劈裂了。对于电子这样的自旋 1/2 的费米子,它劈裂的规则是按上面讨论的,由这个自旋 1/2 费米子所对应 SU(2)群二维表示与Γ_{12}^{+}、Γ_{25}^{+}作直积,然后再往O_h^D的不可约表示做直和分解得到了。

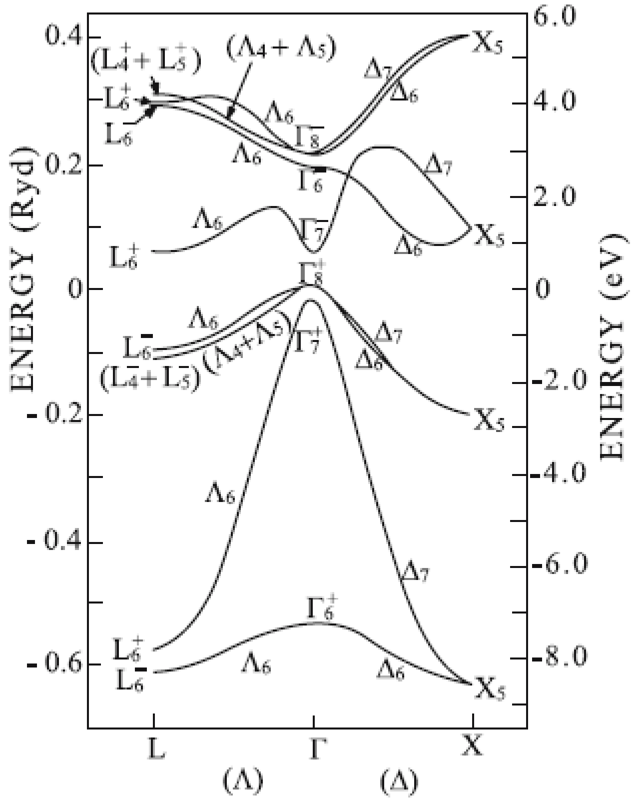
结果,往往是这样的:



这是一个例子。对于具有O_h点群对称性的晶体,它的能带在没有考虑旋轨耦合的时候我们可以这样标识:



考虑了旋轨耦合以后，就会是：



为什么这样？为简单起见，我们先忽略空间反演操作 I，解释为什么Γ_{25}会变成Γ_7和Γ_8的直和。之后 g、u（或者正、负）这些代表宇称的指标直接加上就可以了。

对于 O 群的Γ_{25}的本征态，O^D群的下面这些类的特征标分为：

$1\{E\}$	$1\{\bar{E}\}$	$6\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{\bar{E}C_4\}$	$12\{C_2\}$	$8\{C_3\}$	$8\{\bar{E}C_3\}$
3	3	-1	-1	-1	1	0	0

这些类在自旋空间，SU(2)群的不可约表示下的特征标根据：

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix}$$

又分别等于：

$1\{E\}$	$1\{\bar{E}\}$	$6\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{\bar{E}C_4\}$	$12\{C_2\}$	$8\{C_3\}$	$8\{\bar{E}C_3\}$
2	-2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	1	-1

这两个表示做直乘，结果是：

$1\{E\}$	$1\{\bar{E}\}$	$6\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{\bar{E}C_4\}$	$12\{C_2\}$	$8\{C_3\}$	$8\{\bar{E}C_3\}$
6	-6	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	0

这个结果，刚好分解为下面两个O^D群的不可约表示的直和：

Γ_7	2	-2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	1	-1
Γ_8	4	-4	0	0	0	0	-1	1

因为这个原因，我们在文献中看到的就是前面介绍的东西。理解这些东西，套路是用点群与自旋的 SU(2)做直积，然后往点群双群做分解。需要的就是点群的特征标表与双群的特征标表。32 种晶体点群的特征标表我们在附录 A 中给出，对应双群的请参考文献 [5, 22-24]。

这些东西为什么重要？因为旋轨耦合是一种相对论效应，也是我们在研究电子结构的时候非常关注的一个课题。大家去注意近期凝聚态物理的一些新的进展，

比如拓扑绝缘体、Weyl Semimetal，旋轨耦合在里面都起了最为关键的作用。这些问题应该说是近些年赋予了能带论很多新的内容,你们从事研究的时候很可能触及，因为这个原因，我相信这些会对你们中的很多人挺有用的。以后具体做研究的时候，更多细节需要你们在文献[5, 22-24]中挖掘。

5.4 Clebsch-Gordan 系数

C-G 系数这个概念最早是由两个德国数学家 Alfred Clebsh（1833-1872）与 Paul Gordan（1837-1912）提出。他们想解决的问题是两个球谐函数相乘后，如何再用球谐函数进行加和展开?[13] 后来，人们发现它可以描述量子力学中的角动量耦合。而这个物理问题的根，又是群论中的不可约表示直积与直和分解问题。因为这个原因，这部分内容是《群论》课程需要介绍的。我们不展开，之说简单规则，出于以后使用的时候方便的考虑。

最典型的物理问题还是自旋轨道角动量耦合。比如轨道角动量为j_1，对应量子力学本征态$|j_1,\ m_1\rangle$，其中m_1取值是$-j_1$到j_1；自旋角动量j_2，对应量子力学本征态$|j_2,\ m_2\rangle$，其中m_2取值是$-j_2$到j_2。轨道部分的对称群是 SO(3)群，自旋部分的对称群是 SU(2)群。前面已经讲过，当j_2是半整数的时候，考虑了旋轨耦合后对称群变成了 SO(3)群的双群，与 SU(2)群同构。对应的不可约表示是 SU(2)群的不可约表示中角动量是半整数的情况。当j_2是整数的时候，考虑了旋轨耦合后对称群与 SO(3)群同构。对应的不可约表示是 SU(2)群的不可约表示中角动量是整

[13]略作展开讨论：这是一个纯数学问题，他们两个人也是数学家。但德国科学在 19 世纪-20 世纪的发展中，数学家、物理学家、化学家的交流使得科学在这个阶段产生了质变。Alfred Clebsh 除了学术成就,1868 年他与数学物理学家 Carl Neumann（此诺伊曼的研究与磁通量单位的那个 Weber 和温度与熵的那个 Clausius 有交集，非我们更熟悉的那个量子力学的诺伊曼）一起建立的 Mathematische Annalen 杂志对后来的数学与物理发展很关键。Paul Gordan 被称为不变量理论之王，他是雅可比的学生。C-G 系数这个早期数学上的处理，在量子力学发展起来之后，真正发挥出了价值。

数的情况。两者综合起来，对应的群论中的问题就是 SU(2)群的两个由j_1与j_2标识的不可约表示在进行直积后，如何进行直和分解，分解为不同j对应的 SU(2)群不可约表示的直和?

空间分解情况很简单，由j_1标识的非耦合表象空间维度是$2j_1+1$，由j_2标识的非耦合表象空间维度是$2j_2+1$。两者直积空间的维度是$(2j_1+1)\times(2j_2+1)$。耦合后，j的取值从j_1-j_2到j_1+j_2，每个j的维度是$2j+1$，总维度数还是$(2j_1+1)\times(2j_2+1)$。这个问题是一个从$(2j_1+1)\times(2j_2+1)$维空间向$(2j_1+1)\times(2j_2+1)$维空间的约化，约化完了以后每个维度由j、m进行标识。我们需要知道的，是$|j, m\rangle$这个本征态是怎么由$|j_1, m_1\rangle$与$|j_2, m_2\rangle$的乘积通过线性组合组成的?这里要用到的式子很简单，就是:

$$\psi_{jm}=\sum_{m_1,m_2}\left(\begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix}\middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix}\right)\psi_{m_1}^{j_1}\psi_{m_2}^{j_2}$$

其中$\left(\begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix}\middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix}\right)$对$j_2=1/2$的形式最简单也最常用到，这里直接给出:

$\left(\begin{matrix} j_1 & 1/2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix}\middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix}\right)$		
j	$m_1=1/2$	$m_2=-1/2$
$j_1+1/2$	$\left(\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right)^{\frac{1}{2}}$	$\left(\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right)^{\frac{1}{2}}$
$j_1-1/2$	$-\left(\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right)^{\frac{1}{2}}$	$\left(\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}\right)^{\frac{1}{2}}$

对于j_2是整数或其它半整数的情况，请参考曾谨言老师《量子力学》第一卷第九章。

第六章 置换群

置换群之所以在物理中重要，一个重要的原因是真实的物理系统拥有这样的对称性，比如全同粒子系统。另外，在置换理论发展过程中发展起来的杨算符方法在近代物理的发展过程中也起到了非常重要的作用。与此同时，所有的有限群，均同构于置换群的子群（第一章的凯莱定理）。结合这些，置换群是我们《群论一》的重要组成部分。

单单把这段的第一点展开，就可以牵扯出很多内容。最直接的一个，就是我们前面讲到的点群与空间群、转动群描述的都是一个单粒子本征态的对称性；而这里的置换群，其实描述的是一个由全同粒子构成的多体系统的对称性。以多电子体系为例（这个电子体系可以是一个原子中多电子，也可以是分子或固体中多电子体系），其多粒子本征态就需要用置换群的不可约表示来标识。类似研究在 1926 年薛定谔方程针对氢原子这个单电子体系提出之后一度是一个热点（量子体系由单电子向多电子体系过渡再自然不过）。其中最直接的过渡就是除氢以外的其它原子体系。类似体系既有完全转动群，又有我们这里要讲的置换群对称性。到了上世纪 40 年代，人们在方面的研究又有了一些扩展，对象是晶体或者分子配位场中的过渡金属原子。对称性由完全转动群下降为某点群，但置换对称性保留。这方面的理论叫配位场理论 Ligand Field Theory（或称晶体场理论，Crystal Field Theory）[24]。再后来，凝聚态物理中的非线性光学问题与弹性理论发展过程中，置换群理论也有一定程度的应用[5]。

本课程中，我们如下四部分内容：1)n 阶置换群；2)杨盘及其引理；3)置换群的不可约表示；4)多电子原子体系波函数。其中杨盘及其引理部分牵扯到许多证明，由于时间限制，课上主要讲解这个证明的基本逻辑，具体证明过程也放在附

录D中。配位场理论感兴趣的同学可参考文献[24]，凝聚态体系非线性光学问题与弹性理论中的置换可参考Dresselhaus教材第18章。

最后要说明的一点是由于笔者的背景并不是理论物理,因此对置换群在粒子物理中多粒子体系的应用没有什么体会,建议选修《群论二》的同学参考文献[6、9、10、11、17]了解更多内容。

6.1 n阶置换群

（首先是置换的定义）

定义6.1 将n个数字{1、2、⋯、n}的排列a_1，a_2，⋯，a_{n}（注意，是“排列”，“组合”只有一个）映为排列b_1，b_2，⋯，b_{n}的操作，称为一个n阶置换，记为s，s的形式为：

$$\mathrm{s}=\begin{pmatrix} a_1, & a_2, & \cdots, & a_{\mathrm{n}} \\ b_1, & b_2, & \cdots, & b_{\mathrm{n}} \end{pmatrix}$$

这个置换干的事情，就是把a_1变为b_1，a_2变为b_2，⋯，a_{n}变为b_{n}。它取决于诸对数码的对换，与诸对数码的排列顺序无关，比如：

$$\begin{pmatrix} a_1, & a_2, & a_3, & \cdots, & a_{\mathrm{n}} \\ b_1, & b_2, & b_3, & \cdots, & b_{\mathrm{n}} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_1, & a_3, & a_2, & \cdots, & a_{\mathrm{n}} \\ b_1, & b_3, & b_2, & \cdots, & b_{\mathrm{n}} \end{pmatrix}$$

只要配对相同即可。

定义6.2 置换群：定义两个置换r、s的乘积rs为先执行置换s，再执行置换r，则在此乘法规则下所有的n阶置换的集合构成一个群，这个群就称为n阶置换群或n阶对称群，记为$\mathrm{S_n}$。

在这个群中，单位元是恒等置换。对$\mathrm{s}=\begin{pmatrix} a_1, & a_2, & \cdots, & a_{\mathrm{n}} \\ b_1, & b_2, & \cdots, & b_{\mathrm{n}} \end{pmatrix}$，逆元为$\mathrm{s}^{-1}=\begin{pmatrix} b_1, & b_2, & \cdots, & b_{\mathrm{n}} \\ a_1, & a_2, & \cdots, & a_{\mathrm{n}} \end{pmatrix}$。置换的乘法满足封闭性与结合律，$\mathrm{S_n}$群的阶为n!。

定义 6.3 轮换：一种特殊的置换$\begin{pmatrix} e_1, & e_2, & \cdots, & e_{\mathrm{m}} \\ e_2, & e_3, & \cdots, & e_1 \end{pmatrix}$称为轮换，记为$\left(e_1, e_2, \cdots, e_{\mathrm{m}}\right)$，轮换数码的个数 m 称为轮换的阶。

关于轮换，它的性质包括：

1. 轮换内的数码作轮换，仍代表同一个轮换，即：

$$\left(e_1, e_2, \cdots, e_{\mathrm{m}}\right) = \left(e_2, e_3, \cdots, e_{\mathrm{m}}, e_1\right) = \left(e_{\mathrm{m}}, e_1, e_2, \cdots, e_{\mathrm{m}-1}\right)$$

2. 两个轮换$\left(e_1, e_2, \cdots, e_{\mathrm{m}}\right)$与$\left(f_1, f_2, \cdots, f_{\mathrm{n}}\right)$若没有公共数码，则称它们相互独立，相互独立的轮换之间的乘法满足交换律，即：

$$\begin{aligned}
&\left(e_1, e_2, \cdots, e_{\mathrm{m}}\right)\left(f_1, f_2, \cdots, f_{\mathrm{n}}\right) \\
&= \begin{pmatrix} e_1, & e_2, & \cdots, & e_{\mathrm{m}}, & f_1, & f_2, & \cdots, & f_{\mathrm{n}} \\ e_2, & e_3, & \cdots, & e_1, & f_2, & f_3, & \cdots, & f_1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} f_1, & f_2, & \cdots, & f_{\mathrm{n}}, & e_1, & e_2, & \cdots, & e_{\mathrm{m}} \\ f_2, & f_3, & \cdots, & f_1, & e_2, & e_3, & \cdots, & e_1 \end{pmatrix} \\
&= \left(f_1, f_2, \cdots, f_{\mathrm{n}}\right)\left(e_1, e_2, \cdots, e_{\mathrm{m}}\right)
\end{aligned}$$

3. 任意的 n 阶置换总可以分别为相互独立的轮换的乘积，比如：

$$\begin{pmatrix} 1, & 2, & 3, & 4, & 5, & 6 \\ 4, & 2, & 6, & 5, & 1, & 3 \end{pmatrix} = (1, 4, 5)(2)(3, 6)$$

你要做的很简单，就是先盯上第一个数，看它变到几，再盯上那个数，依次类推，这样总能找到一个轮换；

在找到这个轮换之后，取不属于这个轮换的第一个数，重复上面操作。依次类推。这样任何一个置换都可以分解为轮换的乘积。

4. 轮换的逆，就是反过来，比如：

$$\left(e_1, e_2, \cdots, e_{\mathrm{m}}\right)^{-1} = \left(e_{\mathrm{m}}, e_{\mathrm{m}-1}, \cdots, e_1\right)$$

5. 二阶轮换(e_1, e_2)称为对换，任意一个 m 阶轮换都可以写成$m-1$个对换的乘积。因为：

$$(e_1, e_2, \cdots, e_m) = \begin{pmatrix} e_1, & e_2, & e_3, & \cdots, & e_m \\ e_2, & e_3, & e_4, & \cdots, & e_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1, & e_2, & e_3, & \cdots, & e_m \\ e_2, & e_1, & e_3, & \cdots, & e_m \\ e_2, & e_1, & e_3, & \cdots, & e_m \\ e_2, & e_3, & e_4, & \cdots, & e_1 \end{pmatrix}$$

$$= (e_1, e_3, \cdots, e_m)(e_1, e_2)$$

$$= (e_1, e_4, \cdots, e_m)(e_1, e_3)(e_1, e_2)$$

$$= \cdots = (e_1, e_m)(e_1, e_{m-1})\cdots(e_1, e_3)(e_1, e_2)$$

6. 上面的逻辑是一个任意置换可以写成轮换的乘积，而任意一个轮换可以写成对换的乘积。但是在这个轮换分别为对换的过程中，对换的对象不一定是相邻的数。针对这个，第 6 个性质说的是对$\forall(e_1, e_k)$，有：

$$(e_1, e_k) = (e_2, e_k)(e_1, e_2)(e_2, e_k)$$

因为：

$$(e_2, e_k)(e_1, e_2)(e_2, e_k) = \begin{pmatrix} e_1, & e_2, & e_k \\ e_1, & e_k, & e_2 \\ e_1, & e_k, & e_2 \\ e_2, & e_k, & e_1 \\ e_2, & e_k, & e_1 \\ e_k, & e_2, & e_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1, & e_2, & e_k \\ e_k, & e_2, & e_1 \end{pmatrix} = (e_1, e_k)$$

这样一个性质，结合 3、5 两点，就一个把任意一个置换分解为相临对换的乘积了。比如：

$$\begin{pmatrix}1, & 2, & 3, & 4\\3, & 2, & 4, & 1\end{pmatrix}=(1,\ 3,\ 4)=(1,\ 4)(1,\ 3)$$

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

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

基于上面的介绍，我们可以给出这一部分的第一个定理。

定理 6.1 具有相同轮换结构的置换构成置换群S_n的一个类。

（相同的轮换结构这样的规定有两个意思，既指它们有相同个数的轮换因子，又指各轮换因子中数码个数也完全相同）

证明：

（分两个方面，一是共轭的置换有相同的轮换结构；二是具有相同轮换结构的置换共轭）

1. 先证共轭置换有相同的轮换结构。取：

$$\forall s=\begin{pmatrix}1, & 2, & \cdots, & n\\c_1, & c_2, & \cdots, & c_n\end{pmatrix}\in S_n$$

由 $\forall t\in S_n$，可产生一个 s 的共轭置换，

$$t=\begin{pmatrix}1, & 2, & \cdots, & n\\d_1, & d_2, & \cdots, & d_n\end{pmatrix}$$

为了求出tst^{-1}是多少，我们把$(1,\ 2,\ \cdots,\ n)$重排为$(c_1,\ c_2,\ \cdots,\ c_n)$，这样的话 t 也可以写成：

$$t=\begin{pmatrix}c_1, & c_2, & \cdots, & c_n\\f_1, & f_2, & \cdots, & f_n\end{pmatrix}$$

同样，t^{-1}也可以写为：

$$\begin{pmatrix}f_1, & f_2, & \cdots, & f_n\\c_1, & c_2, & \cdots, & c_n\end{pmatrix}$$

或

$$\begin{pmatrix} d_1, & d_2, & \cdots, & d_n \\ 1, & 2, & \cdots, & n \end{pmatrix}$$

而tst^{-1}就是：

$$\begin{pmatrix} d_1, & d_2, & \cdots, & d_n \\ 1, & 2, & \cdots, & n \\ 1, & 2, & \cdots, & n \\ c_1, & c_2, & \cdots, & c_n \\ c_1, & c_2, & \cdots, & c_n \\ f_1, & f_2, & \cdots, & f_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1, & d_2, & \cdots, & d_n \\ f_1, & f_2, & \cdots, & f_n \end{pmatrix}$$

这也就是说 s 的共轭元素tst^{-1}是由 t 对 s 的上下两行$\begin{pmatrix} 1, & 2, & \cdots, & n \\ c_1, & c_2, & \cdots, & c_n \end{pmatrix}$同时作置换得到的。这里 t 既可以写成$\begin{pmatrix} 1, & 2, & \cdots, & n \\ d_1, & d_2, & \cdots, & d_n \end{pmatrix}$对 s 上面那行操作，也可写成$\begin{pmatrix} c_1, & c_2, & \cdots, & c_n \\ f_1, & f_2, & \cdots, & f_n \end{pmatrix}$对 s 下面那行操作。 最终的结果是：$\begin{pmatrix} d_1, & d_2, & \cdots, & d_n \\ f_1, & f_2, & \cdots, & f_n \end{pmatrix}$。

现在假设 s 有 k 个独立的轮换因子，$s = s_1 s_2 \cdots s_k$，那么其共轭tst^{-1}可写为：$ts_1t^{-1}ts_2t^{-1}\cdots ts_kt^{-1}$。对 s 的第 i 个轮换因子，我们看ts_it^{-1}的效果：

$$s_i = \begin{pmatrix} s_1, & s_2, & \cdots, & s_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_1, & s_2, & \cdots, & s_m, & s_{m+1}, & s_{m+2}, & \cdots, & s_n \\ s_2, & s_3, & \cdots, & s_1, & s_{m+1}, & s_{m+2}, & \cdots, & s_n \end{pmatrix}$$

任意取一个 t，它是：

$$\begin{pmatrix} s_1, & s_2, & \cdots, & s_m, & s_{m+1}, & s_{m+2}, & \cdots, & s_n \\ t_1, & t_2, & \cdots, & t_m, & t_{m+1}, & t_{m+2}, & \cdots, & t_n \end{pmatrix}$$

由置换与队的排列顺序无关这个特点，我们知道 t 也可写为：

$$\begin{pmatrix} s_2, & \cdots, & s_m, & s_1, & s_{m+1}, & s_{m+2}, & \cdots, & s_n \\ t_2, & \cdots, & t_m, & t_1, & t_{m+1}, & t_{m+2}, & \cdots, & t_n \end{pmatrix}$$

这样的话，由*号讨论内容，ts_it^{-1}就是利用上面两式对s_i的上下行分别进行置换，

也就是：

$$\begin{pmatrix} t_1, & t_2, & \cdots, & t_m, & t_{m+1}, & t_{m+2}, & \cdots, & t_n \\ t_2, & \cdots, & t_m, & t_1, & t_{m+1}, & t_{m+2}, & \cdots, & t_n \end{pmatrix} = (t_1, t_2, \cdots, t_m)$$

也就是说ts_it^{-1}与s_i是同阶轮换。对其它轮换因子，做同样操作，依次类推，这样$ts_1t^{-1}ts_2t^{-1}\cdots ts_kt^{-1}$就与$s_1s_2\cdots s_k$有相同的轮换结构。也就是$tst^{-1}$与 s 有相同的轮换结构（共轭置换的轮换结构相同）。

2. 现在看第二部分，具有相同轮换因子的置换共轭，取两个这样的置换：

$$s = (a_1, a_2, \cdots, a_{n_1})(b_1, b_2, \cdots, b_{n_2})\cdots(c_1, c_2, \cdots, c_{n_l})$$

$$r = (d_1, d_2, \cdots, d_{n_1})(e_1, e_2, \cdots, e_{n_2})\cdots(f_1, f_2, \cdots, f_{n_l})$$

这个时候，一定$\exists t \in S_n$，

$$t = \begin{pmatrix} a_1, & a_2, & \cdots, & a_{n_1} \\ d_1, & d_2, & \cdots, & d_{n_1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1, & b_2, & \cdots, & b_{n_2} \\ e_1, & e_2, & \cdots, & e_{n_2} \end{pmatrix}\cdots\begin{pmatrix} c_1, & c_2, & \cdots, & c_{n_l} \\ f_1, & f_2, & \cdots, & f_{n_l} \end{pmatrix}$$

使得：

$$tst^{-1} = \begin{pmatrix} d_1, & d_2, & \cdots, & d_{n_1}, & e_1, & e_2, & \cdots, & e_{n_2}, & f_1, & f_2, & \cdots, & f_{n_l} \\ a_1, & a_2, & \cdots, & a_{n_1}, & b_1, & b_2, & \cdots, & b_{n_2}, & c_1, & c_2, & \cdots, & c_{n_l} \\ a_1, & a_2, & \cdots, & a_{n_1}, & b_1, & b_2, & \cdots, & b_{n_2}, & c_1, & c_2, & \cdots, & c_{n_l} \\ a_2, & a_3, & \cdots, & a_1, & b_2, & b_3, & \cdots, & b_1, & c_2, & c_3, & \cdots, & c_1 \\ a_2, & a_3, & \cdots, & a_1, & b_2, & b_3, & \cdots, & b_1, & c_2, & c_3, & \cdots, & c_1 \\ d_2, & d_3, & \cdots, & d_1, & e_2, & e_3, & \cdots, & e_1, & f_2, & f_3, & \cdots, & f_1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} d_1, & d_2, & \cdots, & d_{n_1}, & e_1, & e_2, & \cdots, & e_{n_2}, & f_1, & f_2, & \cdots, & f_{n_l} \\ d_2, & d_3, & \cdots, & d_1, & e_2, & e_3, & \cdots, & e_1, & f_2, & f_3, & \cdots, & f_1 \end{pmatrix}$$

$$= (d_1, d_2, \cdots, d_{n_1})(e_1, e_2, \cdots, e_{n_2})\cdots(f_1, f_2, \cdots, f_{n_l}) = r$$

具有相同轮结构的置换必共轭。

结合这两点，我们现在就知道了置换群的类与轮换结构存在一一对应的关系。

（证毕）

这个性质是置换群的一个关键的性质。正是因为它的存在，我们才可以用杨图（Young Diagram）来分析置换群。与这个性质相关的置换群的其它性质还包括：

1. 可以由轮换分解来划分置换群的类别。这个很显然，因为每个置换都可以写成轮换的乘积，而轮换结构与类之间存在一一对应的关系。

   这个轮换分解我们标记为：(γ)，$(\gamma)=\left(1^{\gamma_1},\ 2^{\gamma_2},\ 3^{\gamma_3},\ \cdots,\ \mathrm{n}^{\gamma_\mathrm{n}}\right)$，即该类中有$\gamma_1$个一阶轮换，$\gamma_2$个二阶轮换，…，$\gamma_\mathrm{n}$个 n 阶轮换。

   且由于变换对象只有 n 个，所以：

$$\gamma_1+2\gamma_2+\cdots+\mathrm{n}\gamma_\mathrm{n}=\mathrm{n}$$

   这里γ_1、γ_2、…、γ_n为非负整数。

2. $\mathrm{S_n}$中类(γ)里的置换群元个数为：

$$\frac{\mathrm{n}!}{(1^{\gamma_1}\gamma_1!)(2^{\gamma_2}\gamma_2!)\cdots(\mathrm{n}^{\gamma_\mathrm{n}}\gamma_\mathrm{n}!)}$$

   这是因为我们一共有 n 个空要去填，填法是$\mathrm{n}^{\gamma_\mathrm{n}}$种。但是对其中的一个 m 阶轮换，

$$\left(e_1,\ e_2,\ \cdots,\ e_\mathrm{m}\right)=\left(e_2,\ e_3,\ \cdots,\ e_1\right)=\cdots=\left(e_\mathrm{m},\ e_1,\ \cdots,\ e_{\mathrm{m}-1}\right)$$

   这 m 种填法代表同样的置换。这样如果有γ_m个 m 阶置换的话，类似的重复会出现$\mathrm{m}^{\gamma_\mathrm{m}}$次。

   同时对这γ_m个 m 阶置换，由于它们没有公共因子，排列的前后顺序不影响结果，类似重复又会出现$\gamma_\mathrm{m}!$次，所以上面的分母是那个样子。

3. 根据这样一个轮换分解的标记$(\gamma)=\left(1^{\gamma_1},\ 2^{\gamma_2},\ 3^{\gamma_3},\ \cdots,\ \mathrm{n}^{\gamma_\mathrm{n}}\right)$，我们来定义杨图，它的标记方式是：$[\lambda]=\left[\lambda_1,\ \lambda_2,\ \cdots,\ \lambda_\mathrm{n}\right]$，其中：

$$\begin{gathered}\lambda_1=\gamma_1+\gamma_2+\cdots+\gamma_\mathrm{n}\\ \lambda_2=\gamma_2+\cdots+\gamma_\mathrm{n}\\ \vdots\\ \lambda_\mathrm{n}=\gamma_\mathrm{n}\end{gathered}$$

这样的话$\lambda_n \geq \lambda_{n-1} \geq \cdots \geq \lambda_1$。且由：

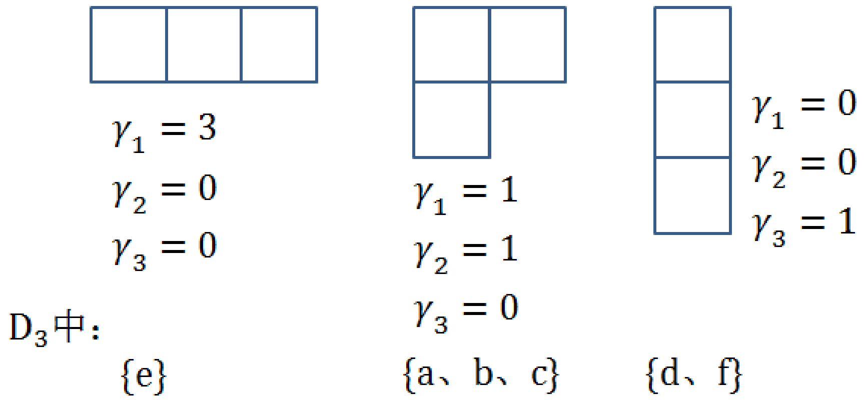
$$\gamma_1 + 2\gamma_2 + \cdots + n\gamma_n = n$$

我们知：

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n = n$$

4. 这样的话S_n的分类就可以用杨图来表示了。它就是 n 个小方格，排列方式为第一行、第二行、…、第 n 行分别是λ_1、λ_2、…、λ_n个小方格，它们的第一列靠左对其。

例：S_3可由$[\lambda]$写成$[3]$、$[2，1]$、$[1，1，1]$。杨图为：



对杨图而言，如果一个杨图可由另一个杨图通过转置得到，则称这两个杨图共轭。如果一个杨图转置后不变，则称其自轭。杨图共轭与元素共轭是两回事。

6.2 杨盘及其引理

上一节我们讲的杨图，是针对置换群分类的一个工具。这节课我们要讲的杨盘（Young Tableau），针对的是置换群的不等价不可约表示。

其中最核心的地方，是杨盘定理。这个定理证明起来比较麻烦，有 7 个引理，分别都需要证明。细走这些步骤，对于不学《群论二》的同学，更多的是时间上的浪费。对于学《群论二》的同学，你们可参考附录中的内容进行理解。在课堂上，我们着重于讲解几个重要的概念：1) 什么是杨盘？2) 什么是杨算符？3) 什

么是本质幂等元？4) 杨盘定理说的是什么？5)它是怎么证明的？下面，我们会根据这个逻辑展开讲解。

定义 6.4 杨盘：将数字 1、2、…、n 分别填到S_n的杨图的 n 个小方格中，得到的就是杨盘（填完了数的杨图）。

例：S_6的杨图[3、2、1]的两个杨盘 T_a、T_b。

T_a

1	2	5
3	4	
6		

T_b

1	4	6
5	2	
3		

由这个定义我们知道杨盘可以具有下面的性质：

1. 由一个杨图可以得到 n！个杨盘；
2. 一个杨盘中的数字可以由其行与列来确定；
3. 同一个杨图的不同杨盘 T_a、T_b，可通过一个置换相互转换。将 T_a、T_b 中的数按照从左到右，从上到下的顺序排成有序对a_1，a_2，…，a_n；b_1，b_2，…，b_n。则杨盘 T_a 到杨盘 T_b 的置换为：

$$s=\begin{pmatrix}a_1, & a_2, & \cdots, & a_n\\ b_1, & b_2, & \cdots, & b_n\end{pmatrix}$$

   以上图为例：

$$s=\begin{pmatrix}1, & 2, & 5, & 3, & 4, & 6\\ 1, & 4, & 6, & 5, & 2, & 3\end{pmatrix}=(1)(2,\ 4)(5,\ 6,\ 3)$$

$$T_b=(1)(2,\ 4)(5,\ 6,\ 3)T_a$$

4. 由一个杨盘 T 可以定义行置换$R(T)$与列置换$C(T)$。

   $R(T)$是保持杨盘 T 的各行中的数字还在其相对行上的所有置换$\hat{p}$的集合$\{\hat{p}\}$；

   $C(T)$是保持杨盘 T 的各列中的数字还在其相对列上的所有置换$\hat{q}$的集合$\{\hat{q}\}$。

显然$R(T)$、$C(T)$都是S_n这个置换群的子群，他们有唯一的公共元素s_0；若杨盘 T 对应的杨图为$[\lambda]=\left[\lambda_1,\ \lambda_2,\ \cdots,\ \lambda_n\right]$，则$R(T)$的阶为：$\lambda_1!\,\lambda_2!\cdots\lambda_n!$；$C(T)$的阶为$\tilde{\lambda}_1!\,\tilde{\lambda}_2!\cdots\tilde{\lambda}_n!$，其中$[\tilde{\lambda}]=\left[\tilde{\lambda}_1,\ \tilde{\lambda}_2,\ \cdots,\ \tilde{\lambda}_n\right]$为杨图$[\lambda]$的共轭。

5. 由行、列置换$\hat{p}$、$\hat{q}$可以定义两个算符$\widehat{P}(T)$与$\widehat{Q}(T)$：

$$\widehat{P}(T)=\sum_{\hat{p}\in R(T)}\hat{p}$$

$$\widehat{Q}(T)=\sum_{\hat{q}\in C(T)}\delta_q\hat{q}$$

其中$\delta_q=1$如果$\hat{q}$为偶置换，$\delta_q=-1$如果$\hat{q}$为奇置换。这里偶置换与奇置换指的是在置换本身化为对换的乘积后，对换的个数是偶数个还是奇数个？

举个例子，前面的杨盘 T_a。对它来说：

$$R(T_a)=\begin{Bmatrix}(1),\ (1,\ 2),\ (1,\ 5),\ (2,\ 5),\ (1,\ 2,\ 5),\ (1,\ 5,\ 2); \\ (3,\ 4),\ (3,\ 4)(1,\ 2),\ (3,\ 4)(1,\ 5),\ (3,\ 4)(2,\ 5), \\ (3,\ 4)(1,\ 2,\ 5),\ (3,\ 4)(1,\ 5,\ 2)\end{Bmatrix}$$

$$C(T_a)=\begin{Bmatrix}(1),\ (1,\ 3),\ (1,\ 6),\ (3,\ 6),\ (1,\ 3,\ 6),\ (1,\ 6,\ 3); \\ (2,\ 4),\ (2,\ 4)(1,\ 3),\ (2,\ 4)(1,\ 6),\ (2,\ 4)(3,\ 6), \\ (2,\ 4)(1,\ 3,\ 6),\ (2,\ 4)(1,\ 6,\ 3)\end{Bmatrix}$$

而$\widehat{P}(T_a)$就是$R(T_a)$中所有操作的和。$\widehat{Q}(T_a)$就是$C(T_a)$中所有操作乘上它的奇偶性的和。对$(2,\ 4)(1,\ 3,\ 6)$这个操作而言，$(1,\ 3,\ 6)$是两个对换，$(2,\ 4)$是一个对换，所以总的对换数是 3，这个操作的奇偶性为奇。

由这个$\widehat{P}(T)$与$\widehat{Q}(T)$的定义，我们知道它们是置换群中群元的线性组合，这个很容易让我们联想到前面讲过的一个概念：群代数。后面，我们会通过杨算符把$\widehat{P}(T)$、$\widehat{Q}(T)$与群代数联系起来。

6. 杨盘所具备的最后一个性质是同一个杨图的不同杨盘，其对应的行置换群相

互同构，列置换群也相互同构。

这个性质很直接，以：

T_a

1	2	5
3	4	
6		

T_b

1	4	6
5	2	
3		

为例，$R(T_a)$、$R(T_b)$同构，$C(T_a)$、$C(T_b)$同构，看一下就知道了。

有了杨图、杨盘这些概念，下一个是杨算符。

定义 6.5 杨算符：它是杨盘 T 的算符$\hat{P}(T)$与$\hat{Q}(T)$的乘积，形式为：

$$\hat{E}(T) = \hat{P}(T)\hat{Q}(T) = \sum_{\hat{p}\in R(T)} \sum_{\hat{q}\in C(T)} \delta_q \, \hat{p}\hat{q}$$

显然杨算符是群空间R_{S_n}中的一个矢量。一个杨盘有一个杨算符。

与杨算符相关的性质有很多，先说两个：

1. 若$\hat{p}$、$\hat{p}' \in R(T)$，$\hat{q}$、$\hat{q}' \in C(T)$，且$\hat{p}\hat{q} = \hat{p}'\hat{q}'$，则必有：$\hat{p}=\hat{p}'$、$\hat{q} = \hat{q}'$。这个性质的证明用到的很重要的一点就是对$R(T)$、$C(T)$这两个这两个$S_n$的子群，它们的交集只有单位元素$s_0$，这样的话由$\hat{p}\hat{q} = \hat{p}'\hat{q}'$可以得出：$\hat{p}'^{-1}\hat{p} = \hat{q}'\hat{q}^{-1}$，这个等式左边$\in R(T)$，右边$\in C(T)$，所以只能有$\hat{p}'^{-1}\hat{p} = \hat{q}'\hat{q}^{-1} = s_0$，这样的话就只能有：$\hat{p}=\hat{p}'$、$\hat{q} = \hat{q}'$。
2. 同时由上面一点我们也很容易知道对$\hat{E}(T) = \sum_{\hat{p}\in R(T)} \sum_{\hat{q}\in C(T)} \delta_q \, \hat{p}\hat{q}$的加和，一定不会出现不同$\hat{p}$、$\hat{q}$产生相同的乘积，进而由于$\delta_q$的变号所带来的$\hat{p}\hat{q}$相互抵消的情况。所以$\hat{E}(T)$一定是非零的群空间中的向量。

现在是讲完了杨图、杨盘、和杨算符的概念了。再说一个幂等元，我们就可以把杨盘定理的内容讲出来了。这个幂等元，和之前讲的投影算符相关。

定义 6.6 幂等元：在群代数R_G中，满足$\vec{e}^2=\vec{e}$的元素$\vec{e}$，称为幂等元。而满足$\vec{e}^2=\lambda\vec{e}$的元素$\vec{e}$，称为本质幂等元。

对本质幂等元，你可以这样理解：只要满足$\vec{e}^2=\lambda\vec{e}$，那么这个$\vec{e}$只要乘上一个常数，它就是幂等元，或者说它本质上就是一个幂等元。而这个常数，是λ^{-1}，因为：$(\lambda^{-1}\vec{e})^2=\lambda^{-2}\vec{e}^2=\lambda^{-2}\lambda\vec{e}=\lambda^{-1}\vec{e}$。

现在看这个幂等元的定义是不是和前面讲的投影算符$\widehat{P}_i^2=\widehat{P}_i$有相似的地方？它们之间确实存在着重要的联系，这个联系是：群代数R_G中左正则变换$L(G)$的群不变的子空间及其投影算符与群代数R_G中的幂等元一一对应。总结为下面一个定理。

定理 6.2 群代数R_G中有多少个幂等元，群空间就有多少个对左正则变换不变的子空间。相应的，就有多少个投影算符。

要证明这个定理，需要另一个定理 6.3。这个定理比较好证，我们先证这个，然后回到 6.2。

定理 6.3 对群 G 在表示空间 V 上的表示$A(g)$，若 V 可分解为$W_1\oplus W_2\oplus\cdots\oplus W_k$这 k 个子空间的直和，则其中$W_i$为群不变的子空间的充要条件为$W_i$对应的投影算符$\widehat{P}_i$与任意一个 g 对应的$A(g)$互易，即$A(g)\widehat{P}_i=\widehat{P}_i A(g)$，对$\forall g\in G$成立。

证明：

必要性，由W_i为群不变的子空间，推W_i对应的投影算符$\widehat{P}_i$与任意一个 g 对应的 A(g) 互易。由于$\widehat{P}_i$为W_i对应的投影算符，满足：${\widehat{P}_i}^2=\widehat{P}_i$，$\widehat{P}_i\widehat{P}_j=0$（当$i\neq j$），$\widehat{P}_iV=W_i$，$\widehat{P}_i\vec{x}_i=\vec{x}_i$，所以：

$$A(g)\widehat{P}_i\vec{x}_i=A(g)\vec{x}_i=\widehat{P}_iA(g)\vec{x}_i$$

对$\forall\vec{x}_i$成立。由于$\vec{x}_i$的任意性，$A(g)\widehat{P}_i=\widehat{P}_i A(g)$。

充分性，若 V 上存在投影算符$\widehat{P}_i$并且有：$A(g)\widehat{P}_i=\widehat{P}_i A(g)$，对$\forall g\in G$成立，则对

$\forall \vec{x}_i \in W_i$，由$\widehat{P}_i\vec{x}_i = \vec{x}_i$，有：

$$A(g)\vec{x}_i = A(g)\widehat{P}_i\vec{x}_i = \widehat{P}_i(A(g)\vec{x}_i) \in W_i$$

所以W_i为群不变的子空间。

（证毕）

现在回到**定理** 6.2。

证明：

要证明在群代数R_G中，幂等元与左正则变换不变子空间的一一对应关系，需要说明两点：

1. 若$W_i = \widehat{P}_i R_G$为正则变换 G 不变的子空间，则存在一个幂等元与之对应；
2. 若有一个幂等元，则存在一个与之对应的 G 不变的R_G的子空间与投影算符。

先看第一点：

有$W_i = \widehat{P}_i R_G$为正则变换 G 不变的子空间，$\widehat{P}_i$为投影算符。这时，群代数R_G中有这样一个向量$\vec{e}_i = \widehat{P}_i\vec{g}_0$（$\vec{g}_0$为$R_G$中单位元素），这个向量是幂等元。

为什么呢？这个就要用到我们刚才介绍的那个性质了。因为W_i为对左正则变换 L(G)而言是 G 不变的子空间，所以有$L(g)\widehat{P}_i = \widehat{P}_i L(g)$对$\forall g \in G$成立，也就是$g\widehat{P}_i = \widehat{P}_i g$对$\forall g \in G$成立。

这样的话对

$$\forall \vec{x} = \sum_k x_k \vec{g}_k \in R_G$$

有

$$\widehat{P}_i\vec{x} = \sum_k x_k \widehat{P}_i\vec{g}_k\,\vec{g}_0 = \sum_k x_k\left(\widehat{P}_i\vec{g}_k\right)\left(\widehat{P}_i\vec{g}_0\right) = \sum_k x_k\vec{g}_k\widehat{P}_i\,\widehat{P}_i\vec{g}_0 = \sum_k x_k\vec{g}_k\widehat{P}_i\,\vec{g}_0$$

$$= \sum_k x_k\vec{g}_k\,\vec{e}_i = \vec{x}\vec{e}_i$$

（这里用到了$\hat{P}_i\vec{g}_k\vec{g}_0=\left(\hat{P}_i\vec{g}_k\right)\left(\hat{P}_i\vec{g}_0\right)$也就是一个算符作用到了两个向量乘积上，等于它分别作用到两个向量上，再做乘积。这个是算符操作的严格定义。就这一章的内容而言，由于投影算符与幂等元对应，投影的方式也是群代数中的向量乘法。$\hat{P}_i\vec{g}_k\vec{g}_0$也直接等于$\left(\hat{P}_i\vec{g}_k\right)\vec{g}_0$。在这一章里，两者等价。）

由$\hat{P}_i\vec{x}=\vec{x}\vec{e}_i$，进而

$$\hat{P}_i^2\vec{x}=\hat{P}_i\hat{P}_i\vec{x}=\hat{P}_i\vec{x}\vec{e}_i=\left(\hat{P}_i\vec{x}\right)\left(\hat{P}_i\vec{e}_i\right)=\vec{x}\vec{e}_i\left(\hat{P}_i\hat{P}_i\vec{g}_0\right)=\vec{x}\vec{e}_i\left(\hat{P}_i\vec{g}_0\right)=\vec{x}\vec{e}_i\vec{e}_i$$

而$\hat{P}_i$为投影算符，$\hat{P}_i^2=\hat{P}_i$，所以$\hat{P}_i^2\vec{x}=\hat{P}_i\vec{x}$。这样就有：

$$\vec{x}\vec{e}_i=\vec{x}\vec{e}_i\vec{e}_i$$

对$\forall\vec{x}\in R_G$成立。这样的话：

$$\vec{e}_i=\vec{e}_i^2$$

对$W_i=\hat{P}_iR_G$这个对正则变换 G 不变的子空间，我们就找到了与之对应的幂等元$\vec{e}_i$，它等于$\hat{P}_i\vec{g}_0$。

再看第二点：

设$\vec{e}_i\in R_G$为幂等元，要找与之对应的 G 不变的子空间以及相应的投影算符。

定义算符$\hat{P}_i$，为$\hat{P}_i\vec{x}=\vec{x}\vec{e}_i$，$\vec{e}_i$就是我们已知的幂等元，$\vec{x}$为$R_G$中任意向量。

由这个定义，知：

$$\hat{P}_i^2\vec{x}=\hat{P}_i\left(\hat{P}_i\vec{x}\right)=\hat{P}_i\vec{x}\vec{e}_i=\left(\hat{P}_i\vec{x}\right)\left(\hat{P}_i\vec{e}_i\right)=\left(\hat{P}_i\vec{x}\right)(\vec{e}_i\vec{e}_i)=\left(\hat{P}_i\vec{x}\right)\vec{e}_i=\vec{x}\vec{e}_i\vec{e}_i=\vec{x}\vec{e}_i=\hat{P}_i\vec{x}$$

对$\forall\vec{x}\in R_G$成立。因此$\hat{P}_i^2=\hat{P}_i$，$\hat{P}_i$为投影算符。

这个$\hat{P}_i$作用到群代数上形成的子空间是 G 不变的子空间。这个好证，因为对任意置换群群元$\vec{g}_k$，有：

$$\hat{P}_i\vec{g}_k\vec{x}=\vec{g}_k\vec{x}\vec{e}_i$$

而$\vec{g}_k\hat{P}_i\vec{x}=\vec{g}_k\vec{x}\vec{e}_i$。因此$\hat{P}_i\vec{g}_k\vec{x}=\vec{g}_k\hat{P}_i\vec{x}$对任意$\vec{x}$成立，$\hat{P}_i\vec{g}_k=\vec{g}_k\hat{P}_i$。再由定理 6.2，知

$\widehat{P}_i$作用到群代数上形成的子空间是 G 不变的子空间。这个与$\widehat{P}_i$是投影算符合在一起，就是我们前面说的第二个方面。

两个方面都证完了，自然就有群代数R_G对左正则表示 G 不变的子空间及其投影算符与群代数R_G中的幂等元一一对应。

（证毕）

这里这个幂等元是：$\widehat{P}_i\vec{g}_0$。我们要求$\widehat{P}_iR_G$为 G 不变的R_G的子空间，并不要求它承载不可约表示。也就是说它承载表示，但这个表示不一定不可约，幂等元与表示对应，不一定与不可约表示对应。

与不可约表示对应的幂等元称为本原幂等元。它的特点是它对应的群代数中群不变的子空间，为不可约的群不变的子空间。换句话说，它是最基本的，“本原”的。幂等元与R_G的 G 不变的子空间对应，本原幂等元与R_G的 G 不变的**不可约的**子空间对应。本原是其中最小的部分。

现在这些概念的积累说完了，我们看杨盘定理说的是什么？实际上，它是用 7 个引理来说明三句话。

定理 6.4（杨盘定理）

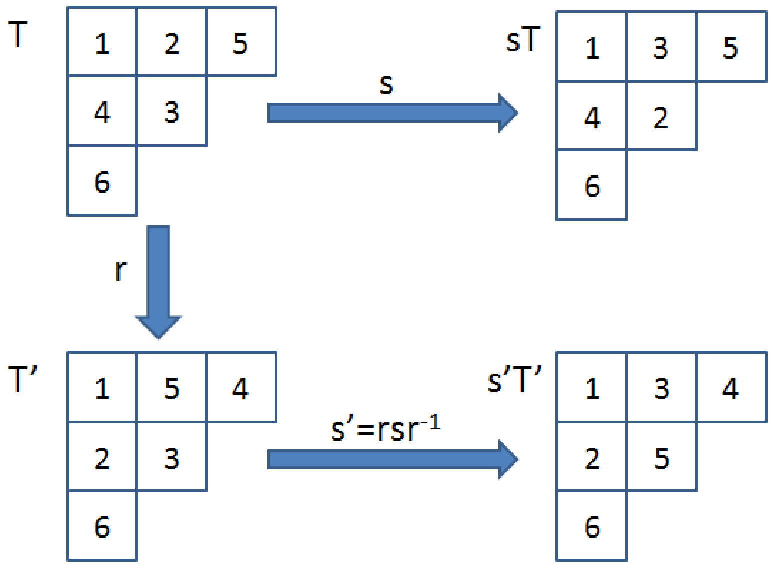
1. 杨盘 T 的杨算符$\widehat{E}(T)$可给出置换群群空间R_{S_n}中的一个本原幂等元$\widehat{E}(T)/\theta$，其中θ为一个常数。也就是说一个杨盘给出置换群在其群空间R_{S_n}中的一个不可约表示；
2. 同一个杨图的不同杨盘给出的不可约表示相互等价；
3. 不同杨图给出的不可约表示不等价。

这七个引理分别是：

引理 6.1 设T、T′是由置换 r 联系起来的杨盘，$T' = rT$，如果置换 s 作用在T

上，使得$T(i, j)$数字变到sT中的(i', j')处，则$s' = rsr^{-1}$也会使得$T'(i, j)$中的数字变到$s'T'$的(i', j')处。

用图来理解，这个引理说的就是：



其中，

$$r = \begin{pmatrix} 1, & 2, & 3, & 4, & 5, & 6 \\ 1, & 5, & 3, & 2, & 4, & 6 \end{pmatrix}$$

$$s = \begin{pmatrix} 1, & 2, & 3, & 4, & 5, & 6 \\ 1, & 3, & 2, & 4, & 5, & 6 \end{pmatrix}$$

$$rsr^{-1} = \begin{pmatrix} 1, & 5, & 3, & 2, & 4, & 6 \\ 1, & 3, & 5, & 2, & 4, & 6 \end{pmatrix}$$

而$rsr^{-1}T'$，等于：

1	3	4
2	5	
6		

s干的事情，是将 T 的 2、3 互换；s'干的事情，是将T'的 3、5 互换。2、3 在 T 中

的位置，和 3、5 在T'中的位置，是相同的。

由这个引理，我们还可以知道：

$T' = rT$时，有$R(T') = rR(T)r^{-1}$，$C(T') = rC(T)r^{-1}$，$\hat{P}(T') = r\hat{P}(T)r^{-1}$，$\hat{Q}(T') = r\hat{Q}(T)r^{-1}$，$\hat{E}(T') = r\hat{E}(T)r^{-1}$。

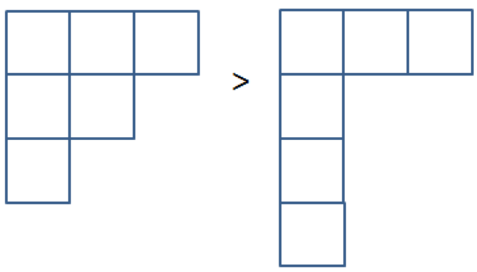
这些引理（到 6.7）与性质的详细证明，均见附录。

引理 6.2 设$\hat{p}$、$\hat{q}$是杨盘 T 的行、列置换，则 T 中位于同一行的任意两个数字不可能出现在$T' = \hat{p}\hat{q}T$的同一列中；反之，若$T' = rT$时，T 中位于同一行的任意两个数字都不出现在T'的同一列中，则杨盘 T 存在行、列置换$\hat{p}$、$\hat{q}$，使$r = \hat{p}\hat{q}$。

这两个引理，说的都是同一杨图的不同杨盘的性质，结合杨盘定理本身内容，我们知道它们是在后面说明同一个杨图的不同杨盘给出的不可约表示等价的时候会有用。

引理 6.4 设杨盘T和T'分别属于杨图$[\lambda]$、$[\lambda']$，且$[\lambda]>[\lambda']$

（这里，$[\lambda]>[\lambda']$是指$[\lambda] = \left[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\right]$，$[\lambda'] = \left[\lambda'_1, \lambda'_2, \cdots, \lambda'_n\right]$，第一个不等于零的$\lambda_i - \lambda'_i$，一定满足$\lambda_i > \lambda'_i$，比如：



）

则存在两个数码位于T的同一行与T'的同一列。

引理 6.4 若有两个数字，位于杨盘T的同一行与杨盘T'的同一列，则它们的杨算符$\hat{E}(T')\hat{E}(T) = 0$。

（这两个引理对应两个不同杨图的杨盘的性质，它们的杨算符$\hat{E}(T')\hat{E}(T) = 0$。这

个我们把它放到杨盘定理全部内容的背景下，说的就是不同杨图的杨盘给出的杨算符对应的群空间中的子空间相互正交。相应，它们的不可约表示相互不等价。）

引理 6.5 设置换群S_n的群代数R_{S_n}中的矢量$\vec{x}=\sum_{s\in S_n}x_n s$，T为$S_n$的杨盘。若$\forall\hat{p}\in R(T)$，$\forall\hat{q}\in C(T)$，$\hat{p}\vec{x}\hat{q}=\delta_q\vec{x}$，则$\vec{x}$与T盘的杨算符$\hat{E}(T)$相差一个常数因子，即$\vec{x}=\theta\hat{E}(T)$，常数θ与$\vec{x}$有关。

引理 6.6 杨盘T的杨算符$\hat{E}(T)$是置换群S_n的群代数R_{S_n}中的一个本质的本原幂等元，不变子空间$R_{S_n}\hat{E}(T)$是置换群S_n的一个不可约表示的表示空间，其维数是n！的因子。

这两个引理很明显 6.6 是重点，6.5 是为了证 6.6，而引理 6.6 说的就是杨盘定理的前半部分，杨盘T的杨算符$\hat{E}(T)$是其置换群群代数的本质的本原幂等元，$R_{S_n}\hat{E}(T)$给出置换群S_n的一个不可约表示。

而引理 6.1 到 6.4，合在一起，是为了说明杨盘定理的后半部分。我们把这个后半部分归纳为引理 6.7。

引理 6.7 置换群S_n的同一个杨图的不同杨盘，给出的不可约表示是等价的，不同杨盘给出的该置换群的不等价、不可约的表示。

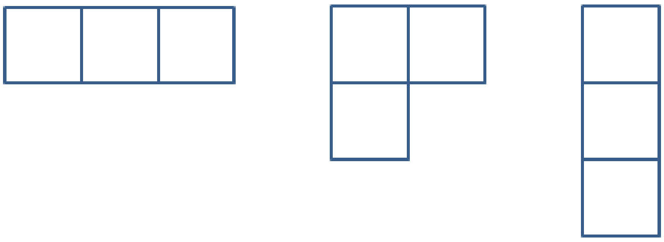
引理 6.6 加上引理 6.7，就给出了杨盘定理。再结合杨图个数等于置换群类的个数进而等于不等价不可约表示数，我们就最终这一部分要传达的信息归结为下面三句：

1. 一个置换群的不等价、不可约表示数等于其杨图的个数；
2. 从一个杨图，我们可以基于其杨盘来求置换群的不可约表示；
3. 因为一个杨图的杨盘有很多，这个不可约表示有很多的等价形式。

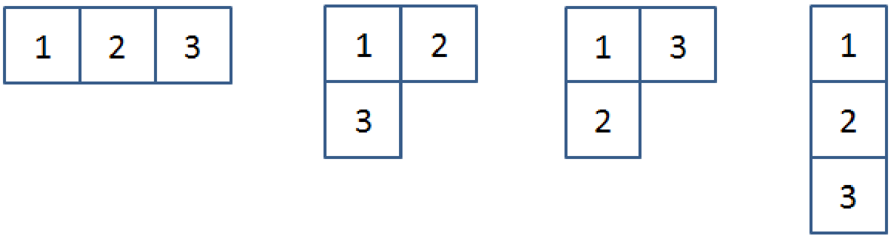
具体怎么求这个不等价、不可约表示？操作过程中需要再理解一个定义，一个定理。

定义 6.7 （标准盘，Standard Young Tableau）杨盘中，每行、每列，数字从左到右，从上到下都是逐渐增加的盘，就叫标准盘。

以三阶循环群为例，杨图有：



它们的标准盘有：



定理 6.5 杨图[λ]对应的不可约表示的维度，等于其标准盘的个数[14]。

以上面的三阶置换群为例，三个杨图所对应的不可约表示的维度，分别是 1、2、1。它们的平方和刚好满足 Burnside 定理。

定义 6.8 （标准盘，Normal Tableau）杨盘中，数字从左到右、从上到下都是逐渐增加的盘，就叫标准盘。

还以这个为例，杨图[2，1]的不可约表示怎么求呢？我们从标准盘

[14]一个杨图可以容纳的杨盘的个数是n!，其中标准盘的个数等于其对应的不可约表示的维度。

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \multicolumn{1}{|c}{} \\ \cline{1-1}\end{array}$$

出发，它所对应的R(T)、C(T)分别是：

$$R(T) = \{(1)、(1,\ 2)\}$$

$$C(T) = \{(1)、(1,\ 3)\}$$

杨算符：

$$\hat{E}(T) = \{(1) + (1,\ 2)\}\{(1) - (1,\ 3)\}$$

$$= (1) + (1,\ 2) - (1,\ 3) - (1,\ 2)(1,\ 3)$$

$$= (1) + (1,\ 2) - (1,\ 3) - (1,\ 3,\ 2)$$

不可约表示空间为$R_{S_3}\hat{E}(T)$，维度是 2。因此，我们要确定它的两个基，再作表示矩阵。如何确定这两个基呢？我们可以做：

$$(1)\hat{E}(T) = (1) + (1,\ 2) - (1,\ 3) - (1,\ 3,\ 2) = \hat{E}(T)$$

$$(1,\ 2)\hat{E}(T) = (1,\ 2)\{(1) + (1,\ 2) - (1,\ 3) - (1,\ 3,\ 2)\}$$

$$= (1,\ 2) + (1) - (1,\ 2)(1,\ 3) - (1,\ 2)(1,\ 3,\ 2)$$

$$= (1,\ 2) + (1) - (1,\ 3,\ 2) - (1,\ 3) = \hat{E}(T)$$

$$(1,\ 3)\hat{E}(T) = (1,\ 3)\{(1) + (1,\ 2) - (1,\ 3) - (1,\ 3,\ 2)\}$$

$$= (1,\ 3) + (1,\ 2,\ 3) - (1) - (2,\ 3)$$

$$(2,\ 3)\hat{E}(T) = (2,\ 3)\{(1) + (1,\ 2) - (1,\ 3) - (1,\ 3,\ 2)\}$$

$$= (2,\ 3) + (2,\ 3)(2,\ 1) - (2,\ 3)(1,\ 3) - (2,\ 3)(1,\ 2)(1,\ 3)$$

$$=(2,\ 3)+(2,\ 1,\ 3)-(3,\ 2)(3,\ 1)-(2,\ 3)(2,\ 1)(1,\ 3)$$

$$=(2,\ 3)+(1,\ 3,\ 2)-(3,\ 1,\ 2)-(2,\ 1,\ 3)(1,\ 3)$$

$$=(2,\ 3)+(1,\ 3,\ 2)-(1,\ 2,\ 3)-(1,\ 3,\ 2)(1,\ 3)$$

$$=(2,\ 3)+(1,\ 3,\ 2)-(1,\ 2,\ 3)-(1,\ 2)(1,\ 3)(1,\ 3)$$

$$=(2,\ 3)+(1,\ 3,\ 2)-(1,\ 2,\ 3)-(1,\ 2)$$

$$=-\{(1)+(1,\ 2)-(1,\ 3)-(1,\ 3,\ 2)\}$$

$$-\{(1,\ 3)+(1,\ 2,\ 3)-(1)-(2,\ 3)\}$$

$$=-\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})-(1,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

$$(1,\ 2,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})=(1,\ 3)(1,\ 2)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})=(1,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

$$(1,\ 3,\ 2)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})=(2,\ 1,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

$$=(2,\ 3)(2,\ 1)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

$$=(2,\ 3)(1,\ 2)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

$$=(2,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

$$=-\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})-(1,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

因此$\mathrm{R}_{\mathrm{S}_3}\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$的两个基是：$\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$、$(1,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$。以它们为基，我们可求出这个三阶置换群的表示矩阵。以群元$(1,\ 3,\ 2)$为例：

$$(1,\ 3,\ 2)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})=-\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})-(1,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

$$(1,\ 3,\ 2)(1,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})=(1,\ 2)(1,\ 3)(1,\ 3)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

$$=(1,\ 2)\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})=\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$$

因此表示矩阵为：

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

其它群元的表示矩阵求法类似。

6.3 多电子原子本征态波函数

现在开始基于前面的置换群基础理论讲应用。具体例子是置换对称性允许的全同粒子体系（比如n个电子）本征态波函数。

我们用到的例子是多电子原子的本征态。在这个例子中，除了电子置换对称性，系统对称性还包含：1. 原子体系本身的SO(3)对称性、2. 电子自旋的SU(2)对称性。讨论中，我们会先从置换群对称性出发，推出的承载置换群不可约表示的多体波函数。这个多体波函数不一定会同时承载SO(3)与SU(2)的不可约表示。但由于此类系统同时具备这三种对称性，由置换群对称性推出的承载置换群不可约表示的波函数在进行线性组合后，也可构成同时承载SO(3)与SU(2)的不可约表示形式。这种组合对两电子体系很简单，但对更多电子体系会比较麻烦。因此，在两电子体系的讨论中，我们会详细说明在得到置换群的不可约表示本征态后如何线性组合同时得到SO(3)与SU(2)群的不可约表示。在三电子及以上电子数的例子中，由于这节的主要内容是置换群，我们会将讨论重点放在置换对称性，不针对SO(3)与SU(2)群的不可约表示进行特殊讨论。

这里要用到的群论知识主要是一个 n 阶置换群（群元个数是n!）根据 Burnside 定理得到的各不等价、不可约表示的维度以及各个置换群的特征标表，用我们本章前一节的内容可以求得，但过程会很复杂。这一节，我们用到的时候会把它们当作已知条件给出。

群	类数	$\mathrm{n}! = \sum_i l_i^2$
S_1	1	$1! = 1 = 1^2$

S_2	2	$2! = 2 = 1^2 + 1^2$
S_3	3	$3! = 6 = 1^2 + 1^2 + 2^2$
S_4	5	$4! = 24 = 1^2 + 1^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2$
S_5	7	$5! = 120 = 1^2 + 1^2 + 4^2 + 4^2 + 5^2 + 5^2 + 6^2$
S_6	11	$6! = 720 = 1^2 + 1^2 + 5^2 + 5^2 + 5^2 + 5^2 + 9^2 + 9^2 + 10^2 + 10^2 + 16^2$
S_7	15	$7! = 5040 = 1^2 + 1^2 + 6^2 + 6^2 + 14^2 + 14^2 + 14^2 + 14^2 + 15^2 + 15^2 + 21^2 + 21^2 + 35^2 + 35^2 + 20^2$
S_8	22	$8! = 40320 = 1^2 + 1^2 + 7^2 + 7^2 + 14^2 + 14^2 + 20^2 + 20^2 + 21^2 + 21^2 + 28^2 + 28^2 + 35^2 + 35^2 + 56^2 + 56^2 + 64^2 + 64^2 + 70^2 + 70^2 + 42^2 + 90^2$
…	…	…

表 6.1 置换群不等价、不可约表示维度

同时，对两电子体系，在考虑SO(3)与SU(2)对称性的时候我们还会用到上一章最后一节的一些内容(具体而言就是C-G系数,其对应的物理问题是角动量耦合)。但前面说过，这一节重点讨论的是置换对称性，SO(3)与SU(2)对称性也只是在方便讨论的时候详细讨论。

上面是对要用到的群论知识的简单介绍。除此之外，在本节的讨论中还有两点需要说明。第一点是在本节描述多电子波函数的时候，我们把它描述为**无相互作用的多体系统**。也就是说我们用下面的单体哈密顿量:

$$\hat{\mathrm{H}}(\vec{x}_i) = \frac{\hat{p}_i^2}{2\mathrm{m}} + \mathrm{V}(\vec{x}_i)$$

确定单电子态$\psi_0(\vec{x}_i)$、$\psi_1(\vec{x}_i)$、…。其中$\vec{x}_i$是第 i 个电子的坐标，包含空间部分（$\vec{r}_i$，三个连续分量）与自旋部分（两个状态α或β，也就是自旋向上↑或自旋向下↓两个分立值）。电子之间由于其全同性，允许交换。同时，电子是费米子，其波函数必须交换反对称。我们会根据这个限制，说明在一个无相互作用的 n 电子系统中，其 **n 阶置换群的对称性会允许或禁止什么样的多体波函数存在**?

除了上面提到的第一点说明，第二点是电子的空间坐标与自旋坐标严格意义

上有耦合。为简单起见，我们忽略旋轨耦合，将多电子波函数的自旋部分与轨道部分分开处理。也就是说电子间的轨道角动量$\vec{l}_i$耦合为$\vec{L}=\sum_{i=1}^{n}\vec{l}_i$，自旋角动量$\vec{s}_i$耦合为$\vec{S}=\sum_{i=1}^{n}\vec{s}_i$，但$\vec{L}$与$\vec{S}$之间的耦合我们不考虑，在此基础上讨论置换。在粒子物理的很多例子中，人们也会采用类似处理，把自由度分开。先讨论各个自由度本身的置换对称性，然后合在一起让其满足玻色子或费米子的性质要求。最典型的一个粒子就是标准模型中人们对Δ^{++}重子（Baryon）的描述。它是一个自旋3/2 粒子，由三个夸克（Quark）组成。三个夸克排列一样，自旋部分交换对称。同时，它的空间部分与味（Flavor）部分也交换对称。如果只有这三个自由度的话，就和它本身的费米子属性矛盾了。这个问题在上世纪 60 年代曾经困扰了人们一段时间。后来的处理方式是引入色（Color）这个量子数，系统在这个自由度下处在交换反对称的单重态，由此拯救费米统计。

我们讨论两电子原子与三电子原子。更复杂情况按讨论规则展开。先看两电子系统，它的置换对称群是S_2，特征标表如下：

	1{E}	1{A}	
Γ_1^s	1	1	
Γ_1^a	1	-1	
$\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_1)$	1	1	$\Rightarrow \Gamma_1^s$
$\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_2)$	2	0	$\Rightarrow \Gamma_1^s \oplus \Gamma_1^a$

表 6. 2 二阶置换群特征标表

这个表的前三行是前面经常用到的特征标表的正常内容。后面两行的意思是如果两个电子占据的态是$\psi_1\psi_1$（或$\psi_1\psi_2$）的时候，在由$\psi_1\psi_1$（或$\psi_1\psi_2$）形成的线性空间中，二阶置换群S_2的表示特征标$\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_1)$（或$\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_2)$）是什么？

以及它可以分解为哪些不可约表示的直和？更具体来说，就是 permut 代表置换 permutation。$\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_1)$代表当我们可以置换的两个电子分别处在$\psi_1$态与$\psi_1$态时置换群的表示。$\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_2)$代表当我们可以置换的两个电子一个处在$\psi_1$态另一个处在$\psi_2$态时候置换群的表示。由于$\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_1)$与$\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_2)$可能是可约表示，后两行的最后一列代表它们可以约化为哪些不可约表示的直积？

在原子环境下，单电子态分别是 1s、2s、2p、3s、3p、3d、4s…。这些单电子态在能量轴的不连续分布如下：

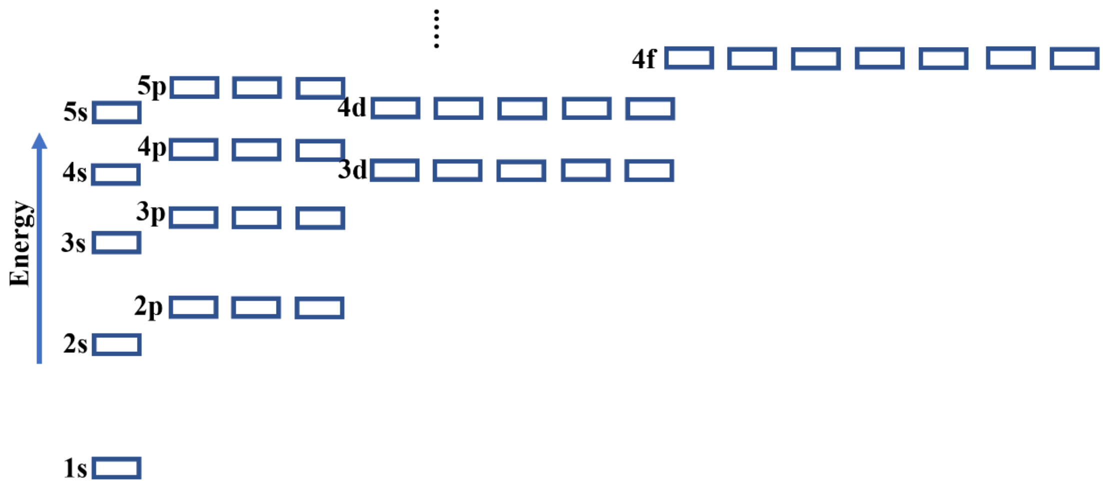


图 6.1 原子中的单电子轨道示意图

由于忽略了电子之间的相互作用，两个单电子态组成的双电子态直接就是这个双电子系统本征态。我们对这个态的唯一要求是费米统计。在下面讨论中，我们会先确定要用到哪两个单电子态？然后讨论它们形成的双电子系统的双电子波函数的情况。当然，对双电子波函数的描述，还是将自旋部分与轨道部分分开讨论。

先看自旋部分，两个电子态分别是自旋向上↑或自旋向下↓，记为α或β。当两个电子的自旋状态相同（即都是α或都是β）的时候，根据表 6.2 倒数第二行，置换群表示空间是一维的。这个一维空间承载二阶置换群S_2的一维恒等表示Γ_1^s。它对应的自旋构型分两种，$\alpha_1\alpha_2$、$\beta_1\beta_2$。

当两个电子的自旋处在的状态不同，也就是一个自旋向上、一个自旋向下的时候，根据表 6.2 最后一行，由$\alpha\beta$这种状态可形成由$\alpha_1\beta_2$、$\alpha_2\beta_1$组成的二维表示空间（下标 1、2 代表是哪个电子）。这个表示空间承载二维表示，它可约化为二阶置换群的一个一维恒等与一维非恒等的直和$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_1^a$。其中承载一维恒等表示$\Gamma_1^s$的正交归一基是$(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1)/\sqrt{2}$，承载一维非恒等表示$\Gamma_1^a$的正交归一基是$(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)/\sqrt{2}$。由于电子自旋只有两种状态，这四种情况（$\alpha_1\beta_2$、$\beta_1\alpha_2$、$(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1)/\sqrt{2}$、$(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)/\sqrt{2}$）就对应了两电子体系自旋部分的所有可能。其中$\alpha_1\beta_2$、$\beta_1\alpha_2$、$(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1)/\sqrt{2}$承载二阶置换群的一维恒等表示$\Gamma_1^s$，置换对称；$(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)/\sqrt{2}$承载置换的一维非恒等表示$\Gamma_1^a$，置换反对称。与此同时，根据第五章第三节内容（C-G 系数展开），前三个态刚好对应一个自旋$\mathrm{S} = 1$系统的自旋三重态，最后一个态对应自旋$\mathrm{S} = 0$的自旋单重态。它们承载$\mathrm{SU}(2)$的三维不可约表示与一维不可约表示。这样，自旋的部分的两个对称性：$\mathrm{SU}(2)$对称性、S_2对称性，在这个多体波函数自旋部分的描述中就同时梳理清楚了。这样的自旋部分两体波函数可同时反映$\mathrm{SU}(2)$对称性与S_2对称性。

再看轨道部分，如果两个电子都占 1s 轨道，那么轨道角动量耦合$L = 0$。同时两个电子的轨道部分波函数，根据表 6.2，承载置换群的交换对称表示Γ_1^s。这个时候，费米统计要求自旋部分只能选承载Γ_1^a的自旋单重态。在原子物理的语言中，不考虑旋轨耦合与电子间相互作用的时候，多电子波函数经常用${}^{2S+1}L_M^{S_z}$来标识。根据前面的对称性讨论，当两个电子都坐在 1s 轨道时，允许的双电子态就只能有 ${}^1\mathrm{S}_0^0$。这里的这个S代表$L = 0$对应的双电子轨道态（不同电子轨道之间的耦合已经考虑）。

如果一个电子处在 1s 轨道、另一个处在 2s 轨道，轨道角动量耦合的L依然

为零。但由于ψ_{1s}态与ψ_{2s}态不同，和前面自旋部分讨论一样，两体波函数的轨道部分有两种可能：$\left(\psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{2s}(\vec{r}_2)+\psi_{1s}(\vec{r}_2)\psi_{2s}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$、$\left(\psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{2s}(\vec{r}_2)-\psi_{1s}(\vec{r}_2)\psi_{2s}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$，分别承载二阶置换群的交换对称表示$\Gamma_1^{\mathrm{s}}$与交换对称反表示$\Gamma_1^{\mathrm{a}}$。当轨道部分是$\left(\psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{2s}(\vec{r}_2)+\psi_{1s}(\vec{r}_2)\psi_{2s}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$时，由于交换对称，自旋部分必须交换反对称，对应单重态。总体两体波函数用${}^{2S+1}L_M^{S_z}$来标识就是${}^1\mathrm{S}_0^0$，也可简单标记为${}^1\mathrm{S}$。当轨道部分是$\left(\psi_{1s}(\vec{r}_1)\psi_{2s}(\vec{r}_2)-\psi_{1s}(\vec{r}_2)\psi_{2s}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$时，由于交换反对称，自旋部分必须交换对称，对应三重态。综合轨道与自旋部分，两体波函数用${}^{2S+1}L_M^{S_z}$来标识就是${}^3\mathrm{S}_0^{-1}$、${}^3\mathrm{S}_0^0$、${}^3\mathrm{S}_0^1$，共同标记为${}^3\mathrm{S}$。两者综合，如果一个电子处在1s轨道、另一个处在2s轨道，允许的双电子态就是${}^1\mathrm{S}$、${}^3\mathrm{S}$。

如果一个是s态、一个是p态，轨道角动量耦合的L是1，用P来标识。由于ψ_{ns}态与$\psi_{n'\mathrm{p}}$态不同，两体波函数的轨道部分有两种可能：$\left(\psi_{ns}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}}(\vec{r}_2)+\psi_{ns}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$、$\left(\psi_{ns}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}}(\vec{r}_2)-\psi_{ns}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$，分别承载二阶置换群的交换对称表示$\Gamma_1^{\mathrm{s}}$与交换反对称表示$\Gamma_1^{\mathrm{a}}$。当轨道部分是$\left(\psi_{ns}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}}(\vec{r}_2)+\psi_{ns}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$时，由于交换对称，自旋部分必须交换反对称，对应单重态。总体两体波函数用${}^{2S+1}L_M^{S_z}$来标识就是${}^1\mathrm{P}_{-1}^0$、${}^1\mathrm{P}_0^0$、${}^1\mathrm{P}_1^0$，共同标记为${}^1\mathrm{P}$。当轨道部分是$\left(\psi_{ns}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}}(\vec{r}_2)-\psi_{ns}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$时，由于交换反对称，自旋部分必须交换对称，对应三重态。总体两体波函数用${}^{2S+1}L_M^{S_z}$来标识就是${}^3\mathrm{P}_{-1}^{-1}$、${}^3\mathrm{P}_0^{-1}$、${}^3\mathrm{P}_1^{-1}$、${}^3\mathrm{P}_{-1}^0$、${}^3\mathrm{P}_0^0$、${}^3\mathrm{P}_1^0$、${}^3\mathrm{P}_{-1}^1$、${}^3\mathrm{P}_0^1$、${}^3\mathrm{P}_1^1$，共同标记为${}^3\mathrm{P}$。

两个电子都处在p态，轨道角动量耦合的L可以是0、1、2，用S、P、D来标识。$\psi_{n\mathrm{p}}$态有三种选择（$\psi_{n\mathrm{p}^1}$、$\psi_{n\mathrm{p}^0}$、$\psi_{n\mathrm{p}^{-1}}$），$\psi_{n'\mathrm{p}}$态同样三种选择（$\psi_{n'\mathrm{p}^1}$、$\psi_{n'\mathrm{p}^0}$、$\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}$）。但讨论要分$n=n'$与$n\neq n'$两个情况展开。

当$n=n'$时，两体波函数基的选择有：$\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)$、$\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)$、

$\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)$九种（3 乘 3）。$\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)$三种为单粒子轨道相同的情况，对应表 6.2 中倒数第二行，承载二阶置换群一维对称恒等表示。而$\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)$六种为轨道不同情况，根据电子置换规则与表 6.2，$\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)$与$\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)$形成一个二阶置换群二维表示空间。其中，$\left(\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)+\psi_{np^1}(\vec{r}_2)\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$承载一维不可约交换对称表示，$\left(\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)-\psi_{np^1}(\vec{r}_2)\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$承载一维不可约交换反对称表示。$\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)$与$\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)$、$\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)$与$\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)$分别形成的二阶置换群二维表示空间的情况与前例类似。也就是说由不考虑置换对称性的基形成的 9 维空间，在进行线性变换后，可整理出六个维度（3 个相同单粒子轨道的情况，3 个不同单粒子轨道的情况）承载交换对称的一维恒等不可约表示，三个维度（都是不同单粒子轨道的情况）承载交换反对称的一维非恒等不可约表示。置换对称性的要求不会造成维度浪费。

通过上述处理，我们可以找出承载二阶置换群不可约表示的多体轨道波函数的形式。但与自旋部分不同的是这些承载二阶置换群不可约表示的波函数并不反映SO(3)群的对称性。要想让这些反映置换群对称性的波函数同时也反映SO(3)群的对称性，我们还需要再进行一些线性操作。具体而言，就是：

1. $\Psi(L=2,M=2)=\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)$
2. $\Psi(L=2,M=1)=\left(\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)+\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2}$
3. $\Psi(L=2,M=0)$

$$= \left[\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2) + \left(\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2) + \psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2}\right]/\sqrt{2}$$

4. $\Psi(L=2, M=-1) = \left(\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2) + \psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2}$
5. $\Psi(L=2, M=-2) = \psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)$

承载一维交换对称恒等表示Γ_1^{s}的同时，它们还承载SO(3)群的五维不可约表示，对应$L=2$，也就是D轨道。除了这五个维度，剩下的四个维度中，有三个:

1. $\Psi(L=1, M=1) = \left(\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2) - \psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2}$
2. $\Psi(L=1, M=0) = \left(\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2) - \psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^1}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2}$
3. $\Psi(L=1, M=-1) = \left(\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2) - \psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2}$

就二阶置换群对称性而言，承载一维交换反对称非恒等表示Γ_1^{a}。就SO(3)群对称性而言，承载三维不可约表示，对应$L=1$，也就是P轨道。最后的一个维度:

1. $\Psi(L=0, M=0)$
$$= \left[\psi_{np^0}(\vec{r}_1)\psi_{np^0}(\vec{r}_2) + \left(\psi_{np^1}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2) + \psi_{np^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{np^{-1}}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2}\right]/\sqrt{2}$$

就二阶置换群对称性而言，承载一维交换对称恒等表示Γ_1^{s}。就SO(3)群对称性而言，承载一维不可约表示，对应$L=0$，也就是S轨道。这样的化轨道波函数部分，我们也同时按二阶置换群S_2、SO(3)进行了对称化的处理。

现在我们把轨道部分与自旋部分合起来，当轨道部分是$\Psi(L=0, M=0)$，也就是S态时，自旋部分只能是交换反对称的单重态。对应两体波函数用${}^{2S+1}L_M^{S_z}$来标识就是${}^1\mathrm{S}_0^0$。当轨道部分是$\Psi\left(L=1, M=0、\pm 1\right)$，也就是P态时，自旋部分只能是交换对称的三重态。对应两体波函数用${}^{2S+1}L_M^{S_z}$来标识就是${}^3\mathrm{P}_{-1}^{-1}$、${}^3\mathrm{P}_{-1}^{0}$、${}^3\mathrm{P}_{-1}^{1}$、${}^3\mathrm{P}_0^{-1}$、${}^3\mathrm{P}_0^0$、${}^3\mathrm{P}^1$、${}^3\mathrm{P}_1^{-1}$、${}^3\mathrm{P}_1^0$、${}^3\mathrm{P}_1^1$，共同标记为${}^3\mathrm{P}$。当轨道部分是$\Psi\left(L=2, M=0、\pm 1、\pm 2\right)$，也就是D态时，自旋部分只能是交换反对称的单重态。对应两体波函数用${}^{2S+1}L_M^{S_z}$来标识就是${}^1\mathrm{D}_{-2}^0$、${}^1\mathrm{D}_{-1}^0$、${}^1\mathrm{D}_0^0$、${}^1\mathrm{D}_1^0$、${}^1\mathrm{D}_2^0$，共同标记为${}^1\mathrm{D}$。

当占据态是p^2的$n \neq n'$时，分析与上面$\mathrm{p}^2(n=n')$类似。不同的是两体 9 组

基由于$n \neq n'$，可通过置换再产生 9 个维度。具体而言，就是相对于前面 9 个维度的情况相比，将交换对称与交换反对称的情况补全。以$L=2$的情况为例，就会从原来的 5 个维度交换对称的维度，变成 10 个既包含交换对称又包含交换反对称的维度。其中：

1. $\Psi^{\mathrm{s}}(L=2,M=2)=\left(\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)+\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$

2. $\Psi^{\mathrm{s}}(L=2,M=1)$

$$=\left(\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)+\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2} \\ +\left(\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)+\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$$

3. $\Psi^{\mathrm{s}}(L=2,M=0)$

$$=\left\{\left[\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)+\left(\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)+\psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2}\right] \\ +\left[\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1) \\ +\left(\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)+\psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}\right]\right\}/2$$

4. $\Psi^{\mathrm{s}}(L=2,M=-1)$

$$=\left(\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)+\psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2} \\ +\left(\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)+\psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$$

5. $\Psi^{\mathrm{s}}(L=2,M=-2)=\left(\psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)+\psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$

本身是承载SO(3)群的$L=2$不可约表示的态，它们同时又交换对称。而：

1. $\Psi^{\mathrm{a}}(L=2,M=2)=\left(\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)-\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$

2. $\Psi^{\mathrm{a}}(L=2,M=1)$

$$=\left(\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)+\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)\right)/\sqrt{2} \\ -\left(\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)+\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1)\right)/\sqrt{2}$$

3. $\Psi^{\mathrm{a}}(L=2,M=0)$

$$= \left\{ \left[\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2) + \left(\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2) + \psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2) \right) / \sqrt{2} \right] \right.$$

$$- \left[\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1) \right.$$

$$\left. \left. + \left(\psi_{n\mathrm{p}^1}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1) + \psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1) \right) / \sqrt{2} \right] \right\} / 2$$

4. $\Psi^{\mathrm{a}}(L=2, M=-1)$

$$= \left(\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2) + \psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2) \right) / \sqrt{2}$$

$$- \left(\psi_{n\mathrm{p}^0}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1) + \psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^0}(\vec{r}_1) \right) / \sqrt{2}$$

5. $\Psi^{\mathrm{a}}(L=2, M=-2) = \left(\psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2) - \psi_{n\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_2)\psi_{n'\mathrm{p}^{-1}}(\vec{r}_1) \right) / \sqrt{2}$

在承载SO(3)群的$L=2$不可约表示的态的同时，又承载置换群的一维非恒等交换反对称表示。这样的话，每个L对应的轨道就可以即和自旋单重态结合，又和自旋三重态结合了。$L=1$、$L=0$的情况类似。

总结一下，在保证总体波函数的交换反对称的前提下，我们就可以知道允许下述两体态的存在：

构型（表示空间维度）	态	不可约表示	最终允许的态
αα（一维）	$S_z = 1$	Γ_1^{s}	
ββ（一维）	$S_z = -1$	Γ_1^{s}	
αβ（二维）	$S_z = 0$	$\Gamma_1^{\mathrm{s}} \oplus \Gamma_1^{\mathrm{a}}$	
s^2	$L = 0$	Γ_1^{s}	^1S
1s2s	$L = 0$	$\Gamma_1^{\mathrm{s}} \oplus \Gamma_1^{\mathrm{a}}$	^1S、^3S
Sp	$L = 1$	$\Gamma_1^{\mathrm{s}} \oplus \Gamma_1^{\mathrm{a}}$	$^1\mathrm{P}$、$^3\mathrm{P}$
$\mathrm{p}^2(n = n')$	$L = 0$	Γ_1^{s}	^1S
$\mathrm{p}^2(n = n')$	$L = 1$	Γ_1^{a}	$^3\mathrm{P}$
$\mathrm{p}^2(n = n')$	$L = 2$	Γ_1^{s}	$^1\mathrm{D}$

$p^2(n \neq n')$	$L = 0$	$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_1^a$	${}^1S$、 ${}^3S$
$p^2(n \neq n')$	$L = 1$	$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_1^a$	${}^1P$、 ${}^3P$
$p^2(n \neq n')$	$L = 2$	$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_1^a$	${}^1D$、 ${}^3D$

表 6.3 双电子体系交换反对称态

有些教材会在讲解两电子系统的时候说情况很简单，跳过很多步骤。根据这个分析，我们应该知道即使是对这样一个简单的两体系统，将对称性分析清楚，其实并不简单。

三电子系统的情况类似，但会更复杂。它的置换对称群是S_3，特征标表如下：

	$1\{E\}$	$3\{A、B、C\}$	$2\{D、E\}$	
S_3	$(1)(2)(3)$	$(1，2)(3)$、$(2，3)(1)$、$(3，1)(2)$、	$(1，2，3)$、$(1，3，2)$	
Γ_1^s	1	1	1	
Γ_1^a	1	1	-1	
Γ_2	2	-1	0	
$\Gamma_{permut}(\psi_1\psi_1\psi_1)$	1	1	1	$\Rightarrow \Gamma_1^s$
$\Gamma_{permut}(\psi_1\psi_1\psi_3)$	3	1	0	$\Rightarrow \Gamma_1^s \oplus \Gamma_2$
$\Gamma_{permut}(\psi_1\psi_2\psi_3)$	6	0	0	$\Rightarrow \Gamma_1^s \oplus \Gamma_1^a \oplus 2\Gamma_2$

表 6.4 三阶置换群特征标表

这里前两行将D_3群与S_3群做了一个同构分析。3-5 行是正常的特征标表内容。最后三行的内容与表 6.2 类似，就是如果三个电子占据的态是$\psi_1\psi_1\psi_1$（或$\psi_1\psi_1\psi_3$、$\psi_1\psi_2\psi_3$）的时候，在由$\psi_1\psi_1\psi_1$（或$\psi_1\psi_1\psi_3$、$\psi_1\psi_2\psi_3$）形成的线性空间中，三

阶置换群 S_3 的表示特征标 $\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_1\psi_1)$（或 $\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_1\psi_3)$、$\Gamma_{\text{permut}}(\psi_1\psi_2\psi_3)$）。

最后三行表示的特征标如何确定呢？对由$\psi_1\psi_1\psi_1$确定的表示，很显然线性空间是一维的。S_3群中任意一个元素作用到这个基上，都是这个向量本身，所以特征标都是1。这个表示也是一维恒等对称表示Γ_1^s。

由$\psi_1\psi_1\psi_3$可以形成一个三维线性空间，基为$\psi_1(\vec{x}_1)\psi_1(\vec{x}_2)\psi_3(\vec{x}_3)$、$\psi_1(\vec{x}_2)\psi_1(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_1)$、$\psi_1(\vec{x}_1)\psi_1(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_2)$。当$S_3$群中元素作用到这三个基上时，$(1)(2)(3)$ 的表示矩阵是三维单位矩阵，特征标是 3。$(1,2)(3)$ 使 $\psi_1(\vec{x}_1)\psi_1(\vec{x}_2)\psi_3(\vec{x}_3)$变成其本身，$\psi_1(\vec{x}_2)\psi_1(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_1)$变成$\psi_1(\vec{x}_1)\psi_1(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_2)$，$\psi_1(\vec{x}_1)\psi_1(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_2)$变成$\psi_1(\vec{x}_2)\psi_1(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_1)$，矩阵为：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

特征标为 1；$(1,2,3)$把$\psi_1(\vec{x}_1)\psi_1(\vec{x}_2)\psi_3(\vec{x}_3)$变成$\psi_1(\vec{x}_2)\psi_1(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_1)$，$\psi_1(\vec{x}_2)\psi_1(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_1)$ 变成 $\psi_1(\vec{x}_3)\psi_1(\vec{x}_1)\psi_3(\vec{x}_2)$，$\psi_1(\vec{x}_1)\psi_1(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_2)$ 变成 $\psi_1(\vec{x}_1)\psi_1(\vec{x}_2)\psi_3(\vec{x}_3)$，表示矩阵为：

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

特征标为0。显然这是一个可约表示，它可以约化为：$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_2$。

基于$\psi_1\psi_2\psi_3$的置换群表示空间是六维的，基于$\psi_1(\vec{x}_1)\psi_2(\vec{x}_2)\psi_3(\vec{x}_3)$、$\psi_1(\vec{x}_1)\psi_2(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_2)$、$\psi_1(\vec{x}_2)\psi_2(\vec{x}_1)\psi_3(\vec{x}_3)$、$\psi_1(\vec{x}_2)\psi_2(\vec{x}_3)\psi_3(\vec{x}_1)$、$\psi_1(\vec{x}_3)\psi_2(\vec{x}_1)\psi_3(\vec{x}_2)$、$\psi_1(\vec{x}_3)\psi_2(\vec{x}_2)\psi_3(\vec{x}_1)$做表示。很容易得到其特征标为 6、0、0。这个表示也可约，它可以约化为：$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_1^a \oplus 2\Gamma_2$。

这些是特征标表给我们的信息，现在来看波函数。先看自旋部分，三个电子，

每个电子自旋两个状态，一共是 8 个状态。其中$\alpha\alpha\alpha$、$\beta\beta\beta$各占一个，$\alpha\alpha\beta$、$\alpha\beta\beta$各占三个。根据特征标表，$\alpha\alpha\alpha$、$\beta\beta\beta$给出的两个状态都承载交换群的一维恒等表示。$\alpha\alpha\beta$给出的三个承载$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_2$。其中，承载$\Gamma_1^s$表示的基是：

$$(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + \alpha_1\beta_2\alpha_3 + \beta_1\alpha_2\alpha_3)/\sqrt{3}$$

它承载一维恒等表示。另外两个基：

$$\left(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + e^{i2\pi/3}\alpha_1\beta_2\alpha_3 + e^{i4\pi/3}\beta_1\alpha_2\alpha_3\right)/\sqrt{3}$$

$$\left(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + e^{i4\pi/3}\alpha_1\beta_2\alpha_3 + e^{i2\pi/3}\beta_1\alpha_2\alpha_3\right)/\sqrt{3}$$

给出的三类的特征标是2、0、-1，对应不可约表示Γ_2。

$\alpha\beta\beta$的情况类似，也是三个维度，其中：

$$(\alpha_1\beta_2\beta_3 + \beta_1\alpha_2\beta_3 + \beta_1\beta_2\alpha_3)/\sqrt{3}$$

承载一维恒等表示。

$$\left(\alpha_1\beta_2\beta_3 + e^{i2\pi/3}\beta_1\alpha_2\beta_3 + e^{i4\pi/3}\beta_1\beta_2\alpha_3\right)/\sqrt{3}$$

$$\left(\alpha_1\beta_2\beta_3 + e^{i4\pi/3}\beta_1\alpha_2\beta_3 + e^{i2\pi/3}\beta_1\beta_2\alpha_3\right)/\sqrt{3}$$

承载Γ_2。

总结一下，就是自旋部分 8 个多体态，其中$\alpha_1\alpha_2\alpha_3$、$(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + \alpha_1\beta_2\alpha_3 + \beta_1\alpha_2\alpha_3)/\sqrt{3}$、$(\alpha_1\beta_2\beta_3 + \beta_1\alpha_2\beta_3 + \beta_1\beta_2\alpha_3)/\sqrt{3}$、$\beta_1\beta_2\beta_3$四个维度对应一维置换恒等表示，它们四个刚好也形成$S = 3/2$对应的自旋四重态。$\left(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + e^{i2\pi/3}\alpha_1\beta_2\alpha_3 + e^{i4\pi/3}\beta_1\alpha_2\alpha_3\right)/\sqrt{3}$、$\left(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + e^{i4\pi/3}\alpha_1\beta_2\alpha_3 + e^{i2\pi/3}\beta_1\alpha_2\alpha_3\right)/\sqrt{3}$都是$S_z = 1/2$态，承载$\Gamma_2$表示。$\left(\alpha_1\beta_2\beta_3 + e^{i2\pi/3}\beta_1\alpha_2\beta_3 + e^{i4\pi/3}\beta_1\beta_2\alpha_3\right)/\sqrt{3}$、$\left(\alpha_1\beta_2\beta_3 + e^{i4\pi/3}\beta_1\alpha_2\beta_3 + e^{i2\pi/3}\beta_1\beta_2\alpha_3\right)/\sqrt{3}$都是$S_z = -1/2$态，承载$\Gamma_2$。这四个态，在目前的表示中，只反映置换群对称性。它们通过线性组合，是可以写成两个同

时反映SU(2)群对称性的自旋双重态的。具体产生过程，需要用到 C-G 系数[15]。换句话说，自旋部分的 8 个维度，可分解为：$4\Gamma_1^s \oplus 2\Gamma_2$。

再看轨道部分。如果三个电子都处在同一个 s 轨道，比如 1s。这样，它们轨道部分的多体波函数根据表 6.4 倒数第三行，承载置换群的Γ_1^s表示。而$\Gamma_1^s \otimes (4\Gamma_1^s \oplus 2\Gamma_2)$怎么都不可能有$\Gamma_1^a$的成分，所以这种情况不可能发生。这个分析可以说是 Pauli 不相容原理的一种群论表达。

当两个电子处在同一个 s 轨道（比如 1s），另一个电子处在另一个 s 轨道（比如 2s）时，根据表 6.4 倒数第二行，它们形成的表示空间承载$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_2$。自旋部分

[15]要用到的式子是：

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1,m_2} \left(\begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix} \right) \psi_{m_1}^{j_1} \psi_{m_2}^{j_2}$$

以及表 6.1、表 6.2。这里的$\psi_{j=1,m=0,\pm1}$对应的就是前面讲到的$\alpha_1\alpha_2$、$(\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2)/\sqrt{2}$、$\beta_1\beta_2$，$\psi_{j=0,m=0}$对应的是$(\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2)/\sqrt{2}$。它们是前两个电子二维不可约表示直积的结果。这个结果再与第三个电子的二维不可约表示利用上式做直积，结果包含一个自旋四重态与一个自旋二重态。四重态是：

$$\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle = \alpha_1\alpha_2\alpha_3$$

$$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha_1\alpha_2\beta_3+\alpha_1\beta_2\alpha_3+\beta_1\alpha_2\alpha_3)$$

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha_1\beta_2\beta_3+\beta_1\alpha_2\beta_3+\beta_1\beta_2\alpha_3)$$

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle = \beta_1\beta_2\beta_3$$

其中每个基都承载置换群的一维恒等对称表示Γ_1^s。自旋二重态是：

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\alpha_1\alpha_2\beta_3-\alpha_1\beta_2\alpha_3-\beta_1\alpha_2\alpha_3)$$

$$\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(\alpha_1\beta_2\beta_3+\beta_1\alpha_2\beta_3-2\beta_1\beta_2\alpha_3)$$

它也承载三阶置换群某个表示。做$(1)(2)(3)$、$(1,2)(3)$、$(1,2,3)$的特征标，$(1)(2)(3)$得到的2。$(1,2)(3)$作用到$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$上，得到：$\frac{1}{\sqrt{6}}(2\alpha_1\alpha_2\beta_3-\alpha_2\beta_1\alpha_3+\beta_2\alpha_1\alpha_3)$，是结果是$2$、$-1$、$0$，因此它承载置换群的不可约表示$\Gamma_2$。

是$4\Gamma_1^s \oplus 2\Gamma_2$，$\Gamma_2$与$\Gamma_2$直积，可分解为$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_1^a \oplus \Gamma_2$，有$\Gamma_1^a$的情况。因此这种构型可以被置换对称性允许。我们需要注意的是虽然允许，置换对称性在这里已经帮助我们排除了很多构型。自旋部分维度为 8，轨道部分维度为 3，严格意义上三体波函数有 24 个维度。这里，要想有$2\Gamma_2 \otimes \Gamma_2$包含$2\Gamma_1^a$，也就是说这 24 个构型空间的维度，只有两个是可以形成合格的三体波函数的。它们都对应$S = 1/2$的自旋双重态。这个态用${}^{2S+1}L_M^{S_z}$来标识的话，形式就是 ^{2}S。

三电子体系的其它构型,分析类似。前面几个轨道置换对称允许的构型如下:

构型	态	不可约表示	最终允许的态
$\left\|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$	自旋双重态$S = \frac{1}{2}$	Γ_2	
$\left\|\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\right\rangle$	自旋四重态$S = \frac{3}{2}$	Γ_1^s	
s^3	$L = 0$	Γ_1^s	无
$1s^2 2s$	$L = 0$	$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_2$	${}^2S$
$s^2 p$	$L = 1$	$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_2$	^{2}P
sp^2	$L = 0$	$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_2$	${}^2S$
sp^2	$L = 1$	$\Gamma_1^a \oplus \Gamma_2$	^{2}P、 ^{4}P
sp^2	$L = 2$	$\Gamma_1^s \oplus \Gamma_2$	^{2}D

更多电子体系，也是用同样的方法分析。需要用到的置换群特征标表，完整的内容请参考 Dresselhaus 那本教材的第 17 章，我们这里重点讲解思路。

参考文献

[1] E. Noether *"Invariante Variationsprobleme".* Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse **1918**, 235 – 257 (1918) (http://gdz.sub.uni-goettingen.de/dms/load/img/?PPN=GDZPPN00250510X&IDDOC=63716)

[2] E. P. Wigner, *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quanten mechanik der Atomspektren (in German).* Braunschweig, Germany: Friedrich Vieweg und Sohn. page 251 – 254 (1931)

[3] E. P. Wigner, E. P. *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra. translation from German by J. J. Griffin. New York: Academic Press.* page 233 – 236, ISBN 978-0-1275-0550-3 (1959)

[4] H. Weyl, *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*, Dover Publications, New York (1950)

(Note: In 1929 Hermann Weyl's *The theory of groups and quantum mechanics* was published in German. A second German edition of the work was published by Hirzel in Leipzig in 1931. An English translation of the book was published by Dover Publications, New York, in 1950)

[5] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio, *Group Theory: Applications to the Physics of Condensed Matter.* Springer

[6] 韩其智、孙洪洲，*群论*，北京大学出版社

[7] 王宏利，*群论讲义*，未出版

[8] 徐婉棠、喀兴林，*群论及其在固体物理中的应用*，高等教育出版社

[9] ZhongQi Ma, *Group Theory for Physicists,* World Scientific

[10] 马中骐，*物理学中的群论*，科学出版社

[11] Wu-Ki Tung, *Group Theory in Physics*, 世图影印

[12] F. Albert Cotton, *Chemical Applications of Group Theory*, John Willey&Sons. Inc

[13] 陶瑞宝，*物理学中的群论*，高等教育出版社

[14] 张端明、李小刚、何敏华，*应用群论*，科学出版社

[15]俞文海，*晶体结构的对称群*，科大出版社

[16] 曾谨言，*量子力学*，科学出版社

[17] S. Sternberg, *Group theory and physics*, Cambridge（世界图书出版公司）

[18] P. B. Miranda and Y. R. Shen, *Liquid interfaces: A study by sum-frequency vibrational spectroscopy*, J. Phys. Chem. B 103, 3292 (1999)

[19] Z. Chen, Y. R. Shen, and G. A. Somorjai, *Studies of polymer surfaces by sum frequency generation vibrational spectroscopy*, Annu. Rev. Phys. Chem. 53, 437 (2002)

[20] R. Zhang, Y. Zhang, Z. C. Dong, S. Jing, C. Zhang, L. G. Chen, L. Zhang, Y. Liao, J. Aizpurua, Y. Luo, J. L. Yang, and J. G. Hou, *Chemical mapping of a single molecule by plasmon-enhanced Raman scattering*, Nature 498, 82 (2013)

[21] Y. Zhang, Y. Luo, Y. Zhang, Y. J. Yu, Y. M. Kuang, L. Zhang, Q. S. Meng, Y. Luo, J. L. Yang, Z. C. Dong, and J. G. Hou, *Visualizing coherent intermolecular dipole-dipole coupling in real space*, Nature 531, 623 (2016)

[22] G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, and H. Statz, *Properties of the thirty-two point groups*, MIT press, Cambridge, 1964

[23] S. C. Miller and W. H. Love, *Tables of irreducible representations of space groups and co-representations of magnetic space groups*, Pruett press, Denver, 1967

[24] http://www.cryst.ehu.es/ Bilbao Crystallographic Server, University of the Basque Country, Bilbao, Basque Country, Spain

[25] Oleksandr Ney, *Magnetism and dynamics of oxide interfaces (electronic theory)*, Dissertation (i.e. Ph.D Thesis), Martin-Luther-University Halle-Wittenberg, 2003, https://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/diss-online/03/04H047/

附录 A 晶体点群的特征标表

这部分我们先按晶系的分类给出 32 种晶体点群的特征标表。之后，再针对一些晶体中并不存在的点群给出其特征标表。

需要提前说明的是在不等价不可约表示的标识中，我们采用原子分子物理领域常用的标识规则，用 A、B 表示一维不可约表示，E 表示二维，T 表示三维。对于有些点群，比如C_3、C_4、C_5、C_6、C_{3h}、C_{4h}、C_{5h}、C_{6h}、S_4、S_6、T等，它们会存在**两个一维表示互为共轭不等价**的情况。也就是说，仅仅依据这些点群的对称性以及 Burnside 定理，这两个不可约表示所对应的本征态不简并（对称性不要求它们简并）。但是由于这两个一维表示**相互共轭又不等价**，当系统存在时间反演不变性的时候，时间反演对称性要求它们相互简并。也就是说这种简并并不是点群对称性要求的，是额外的时间反演对称性要求的。由于时间反演对称性在很多实际量子体系中存在，在这里的特征标表中（包括文献上可以找到的绝大部分特征标表中），人们都习惯上把它们放在一起，用二维表示 E 来表示。稍微详细一些的讨论见 4.8 节结尾部分。

附录 A（特征标表）主要参考 Dresselhaus 的教材以及下面这个网站：
http://www.webqc.org/symmetry.php

三斜系（S_2、C_1）：

$S_2(\bar{1})$			E	I
x^2、y^2、z^2、xy、xz、yz	R_x、R_y、R_z	A_g	1	1
	x、y、z	A_u	1	-1

$C_1(1)$	E
A	1

单斜系（C_{2h}、C_2、C_{1h}）：

$C_{2h}(2/m)$			E	C_2	σ_h	I
x^2、y^2、z^2、xy	R_z	A_g	1	1	1	1
	Z	A_u	1	1	-1	-1
yz、xz	R_x、R_y	B_g	1	-1	-1	1
	x、y	B_u	1	-1	1	-1

$C_2(2)$			E	C_2
x^2、y^2、z^2、xy	R_z、z	A	1	1
xz、yz	x、y、R_x、R_y	B	1	-1

$C_{1h}(m)$			E	σ_h
x^2、y^2、z^2、xy	R_z、x、y	A'	1	1
xz、yz	R_x、R_y、z	A''	1	-1

正交系（D_{2h}、D_2、C_{2v}）：

$D_{2h}(2/m2/m\,2/m)=D_2\otimes S_2$			E	C_{2z}	C_{2y}	C_{2x}	I	IC_{2z}	IC_{2y}	IC_{2x}
x^2、y^2、z^2		A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
Xy	R_x	B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
Xz	R_y	B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
Yz	R_z	B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
xyz		A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
z^3、$z(x^2-y^2)$	x	B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
yz^2、$y(3x^2-y^2)$	y	B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
xz^2、$x(x^2-3y^2)$	z	B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

$D_2(222)$			E	C_{2z}	C_{2y}	C_{2x}
x^2、y^2、z^2		A_1	1	1	1	1
Xy	R_z、z	B_1	1	1	-1	-1
Xz	R_x、x	B_2	1	-1	1	-1
yz	R_y、y	B_3	1	-1	-1	1

$C_{2v}(2mm)$			E	C_2	σ_v	$\sigma_{v'}$
x^2、y^2、z^2	Z	A_1	1	1	1	1
Xy	R_z	A_2	1	1	-1	-1
Xz	R_x、x	B_1	1	-1	1	-1
Yz	R_y、y	B_2	1	-1	-1	1

四方系（ D_{4h}、C_4、S_4、D_4、C_{4v}、C_{4h}、D_{2d}）：

$D_{4h}(4/mmm) = D_4 \otimes S_2$			E	$2C_4^1$	C_4^2	$2C_2^{(1)}$	$2C_2^{(2)}$	I	$2IC_4^1$	IC_4^2	$2IC_2^{(1)}$	$2IC_2^{(2)}$
x^2+y^2、z^2		A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	R_z	A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
x^2-y^2		B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1
xy		B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
$(xz、yz)$	$\begin{pmatrix} R_x、\\ R_y \end{pmatrix}$	E_g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0
		A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
z^3	Z	A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
Xyz		B_{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
$z(x^2-y^2)$		B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
$(xz^2、yz^2)$ $\begin{pmatrix} x(x^2-3y^2)、\\ y(3x^2-y^2) \end{pmatrix}$	$(x、y)$	E_u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0

$C_4(4)$			E	C_4	C_4^2	C_4^3
x^2+y^2、z^2	R_z、z	A	1	1	1	1
x^2-y^2、xy		B	1	-1	1	-1
$(xz、yz)$	$(x、y)$	E	1	i	-1	-i
$(xz^2、yz^2)$	$(R_x、R_y)$		1	-i	-1	i

（ 基组，以 $(x、y)$为例，代表当系统具备时间反演对称性时，后两个一维不可约表示简并，对应的二维基组。下面的特征标表类似处理。）

$S_4(\bar{4})$			E	C_4^2	IC_4^1	IC_4^3
x^2+y^2、z^2	R_z	A	1	1	1	1
	z	B	1	1	-1	-1
$(xz、yz)$	$(x、y)$	E	1	-1	i	-i
$(xz^2、yz^2)$	$(R_x、R_y)$		1	-1	-i	i

$D_4(422)$			E	C_4^2	$2C_4^1$	$2C_2^{(1)}$	$2C_2^{(2)}$
x^2+y^2、z^2		A_1	1	1	1	1	1
	R_z、z	A_2	1	1	1	-1	-1
x^2-y^2		B_1	1	1	-1	1	-1
xy		B_2	1	1	-1	-1	1
$(xz、yz)$	$(x、y)$ $(R_x、R_y)$	E	2	-2	0	0	0

$C_{4v}(4mm)$			E	C_4^2	$2C_4^1$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
x^2+y^2、z^2	z	A_1	1	1	1	1	1
	R_z	A_2	1	1	1	-1	-1
x^2-y^2		B_1	1	1	-1	1	-1
xy		B_2	1	1	-1	-1	1
$(xz、yz)$	$(x、y)$ $(R_x、R_y)$	E	2	-2	0	0	0

$C_{4h}(4/m)=C_4\otimes S_2$			E	C_4^1	C_4^2	C_4^3	I	IC_4^1	σ_h	IC_4^3
x^2+y^2、z^2	R_z	A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
x^2-y^2、xy		B_g	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
$(xz、yz)$	$(R_y、R_z)$	E_g	1	i	-1	-i	1	I	-1	-i
			1	-i	-1	i	1	-i	-1	i
z^3	z	A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
xyz、$z(x^2-y^2)$		B_{1u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
$(xz^2、yz^2)$	$(x、y)$	E_u	1	i	-1	-i	-1	-i	1	i
			1	-i	-1	i	-1	i	1	-i

$D_{2d}(\bar{4}2m)$			E	C_2	$2S_4$	$2C_2^{(1)}$	$2\sigma_d$
x^2+y^2、z^2		A_1	1	1	1	1	1
	R_z	A_2	1	1	1	-1	-1
x^2-y^2		B_1	1	1	-1	1	-1
xy	z	B_2	1	1	-1	-1	1
$(xz、yz)$	$(x、y)$ $(R_x、R_y)$	E	2	-2	0	0	0

三方系（ D_{3d}、S_6、C_3、C_{3v}、D_3）：

$D_{3d}(\bar{3}m)$			E	$2C_3$	$3C_2$	I	$2IC_3$	$3IC_2$
x^2+y^2、z^2		A_{1g}	1	1	1	1	1	1
	R_z	A_{2g}	1	1	-1	1	1	-1
$(xz、yz)$ $(x^2-y^2、xy)$	$(R_x、R_y)$	E_g	2	-1	0	2	-1	0
		A_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1
	z	A_{2u}	1	1	-1	-1	-1	1
	$(x、y)$	E_u	2	-1	0	-2	1	0

$S_6(\bar{3})$			E	C_3	C_3^2	I	IC_3	IC_3^2
x^2+y^2、z^2	R_z	A_g	1	1	1	1	1	1
$(x^2-y^2、xy)$ $(xz、yz)$	$(R_x、R_y)$	E_g	1	ε	$ε^*$	1	ε	$ε^*$
			1	$ε^*$	ε	1	$ε^*$	ε
z^3、$x(x^2-3y^2)$	Z	A_u	1	1	1	-1	-1	-1
z^3 $(xz、yz)$	$(x、y)$	E_u	1	ε	$ε^*$	-1	-ε	$-ε^*$
			1	$ε^*$	ε	-1	$-ε^*$	-ε

（上表中$ε=\exp(2\pi i/3)$）

$C_3(3)$			E	C_3	C_3^2
x^2+y^2、z^2	R_z、z	A	1	1	1
$(xz、yz)$ $(x^2-y^2、xy)$	$(x、y)$ $(R_x、R_y)$	E	1	ε	$ε^*$
			1	$ε^*$	ε

$C_{3v}(3m)$			E	$2C_3$	$3\sigma_v$
x^2+y^2、z^2	z	A_1	1	1	1
	R_z	A_2	1	1	-1
$(x^2-y^2$、$xy)$ $(xz$、$yz)$	$(x$、$y)$ $(R_x$、$R_y)$	E	2	-1	0

$D_3(32)$			E	$2C_3$	$3C_2$
x^2+y^2、z^2		A_1	1	1	1
	R_z、z	A_2	1	1	-1
$(x^2-y^2$、$xy)$ $(xz$、$yz)$	$(x$、$y)$ $(R_x$、$R_y)$	E	2	-1	0

六角系（ D_{6h}、C_6、C_{3h}、C_{6h}、C_{6v}、D_6、D_{3h}）：

$D_{6h}(\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m})=D_6\otimes S_2$			E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3C_2^{(1)}$	$3C_2^{(2)}$	I	IC_2	$2IC_3$	$2IC_6$	$3IC_2^{(1)}$	$3IC_2^{(2)}$
x^2+y^2、z^2		A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	R_z	A_{2g}	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1
		B_{1g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
		B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1	1	1
$(xz、yz)$	$\begin{pmatrix}R_x、\\R_y\end{pmatrix}$	E_{1g}	2	-2	-1	1	0	0	2	-2	-1	1	0	0
$(x^2-y^2、xy)$		E_{2g}	2	2	-1	-1	0	0	2	2	-1	-1	0	0
		A_{1u}	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
	Z	A_{2u}	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
		B_{1u}	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1
		B_{2u}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1
	$(x、y)$	E_{1u}	2	-2	-1	1	0	0	-2	2	1	-1	0	0
		E_{2u}	2	2	-1	-1	0	0	-2	-2	1	1	0	0

$C_6(6)$			E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5
x^2+y^2、z^2	R_z、z	A	1	1	1	1	1	1
		B	1	-1	1	-1	1	-1
$(xz、yz)$	$(x、y)$	E′	1	ε	ε^2	ε^3	ε^4	ε^5
	$(R_x、R_y)$		1	ε^5	ε^4	ε^3	ε^2	E
$(x^2-y^2、xy)$		E″	1	ε^2	ε^4	1	ε^2	ε^4
			1	ε^4	ε^2	1	ε^4	ε^2

（上表中：$\varepsilon=e^{i2\pi/6}$）

$C_{3h}(S_3)$			E	C_3	C_3^2	σ_h	S_3	$\sigma_h C_3^2$
x^2+y^2、z^2	R_z、z	A	1	1	1	1	1	1
		B	1	1	1	-1	-1	-1
$(x^2-y^2$、$xy)$	$(x$、$y)$	E'	1	ε	ε^2	1	ε	ε^2
			1	ε^2	ε	1	ε^2	E
$(xz$、$yz)$	$(R_x$、$R_y)$	E''	1	ε	ε^2	-1	$-\varepsilon$	$-\varepsilon$
			1	ε^2	ε	1	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$

（上表中：$\varepsilon = e^{i2\pi/3}$）

$C_{6h}(\bar{6}) = C_6 \otimes S_2$			E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5	I	IC_6	IC_3	IC_2	IC_3^2	IC_6^5
x^2+y^2、z^2		A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		B_g	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
$(xz$、$yz)$	$(R_x，R_y)$	E_{1g}	1	ε	ε^2	ε^3	ε^4	ε^5	1	ε	ε^2	ε^3	ε^4	ε^5
			1	ε^5	ε^4	ε^3	ε^2	ε	1	ε^5	ε^4	ε^3	ε^2	ε
$(x^2-y^2$、$xy)$		E_{2g}	1	ε^2	ε^4	1	ε^2	ε^4	1	ε^2	ε^4	1	ε^2	ε^4
			1	ε^4	ε^2	1	ε^4	ε^2	1	ε^4	ε^2	1	ε^4	ε^2
Z		A_u	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
		B_u	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1
$(x$、$y)$		E_{1u}	1	ε	ε^2	ε^3	ε^4	ε^5	-1	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon^3$	$-\varepsilon^4$	$-\varepsilon^5$
			1	ε^5	ε^4	ε^3	ε^2	ε	-1	$-\varepsilon^5$	$-\varepsilon^4$	$-\varepsilon^3$	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$
	$(x$、$y)$	E_{2u}	1	ε^2	ε^4	1	ε^2	ε^4	-1	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon^4$	-1	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon^4$
			1	ε^4	ε^2	1	ε^4	ε^2	-1	$-\varepsilon^4$	$-\varepsilon^2$	-1	$-\varepsilon^4$	$-\varepsilon^2$

（上表中：$\varepsilon = e^{i2\pi/6}$）

$C_{6v}(6mm)$			E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
x^2+y^2、z^2	z	A_1	1	1	1	1	1	1
	R_z	A_2	1	1	1	1	-1	-1
		B_1	1	-1	1	-1	-1	1
		B_2	1	-1	1	-1	1	-1
$(xz、yz)$	$(x、y)$ $(R_x、R_y)$	E_1	2	-2	-1	1	0	0
$(x^2-y^2、xy)$		E_1	2	2	-1	-1	0	0

$D_6(622)$			E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3C_2^{(1)}$	$3C_2^{(2)}$
x^2+y^2、z^2		A_1	1	1	1	1	1	1
	R_z、z	A_2	1	1	1	1	-1	-1
		B_1	1	-1	1	-1	1	-1
		B_2	1	-1	1	-1	-1	1
$(xz、yz)$	$(x、y)$ $(R_x、R_y)$	E_1	2	-2	-1	1	0	0
$(x^2-y^2、xy)$		E_1	2	2	-1	-1	0	0

$D_{3h}(\bar{6}m2) = D_3 \otimes \sigma_h$			E	σ_h	$2C_3$	$2S_3$	$3C_2'$	$3\sigma_v$
$x^2 + y^2$、z^2		A_1	1	1	1	1	1	1
	R_z	A_2	1	1	1	1	-1	-1
		A_1'	1	-1	1	-1	1	-1
	z	A_2'	1	-1	1	-1	-1	1
$\left(x^2 - y^2\text{、}xy\right)$	$\left(x\text{、}y\right)$	E_1	2	2	-1	-1	0	0
$\left(xz\text{、}yz\right)$	$\left(R_x\text{、}R_y\right)$	E_1'	2	-2	-1	1	0	0

立方系（ O_h、T、O、T_h、T_d）：

$O_h(4/m\bar{3}2/m) = O\otimes S_2$			E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2'$	$8C_3$	I	$3IC_4^2$	$6IC_4$	$6IC_2'$	$8IC_3$
$x^2+y^2+z^2$		A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
$(2z^2-x^2-y^2、x^2-y^2)$		E_g	2	2	0	0	-1	2	2	0	0	-1
	$(R_x、R_y、R_z)$	T_{1g}	3	-1	1	-1	0	3	-1	1	-1	0
	$(x、y、z)$	T_{2g}	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0
		A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
z		A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
		E_u	2	2	0	0	-1	-2	-2	0	0	1
$(x、y、z)$		T_{1u}	3	-1	1	-1	0	-3	1	-1	1	0
		T_{2u}	3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0

T(23)			E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3'$
$x^2+y^2+z^2$		A	1	1	1	1
$(x^2-y^2、2z^2-x^2-y^2)$		E	1	1	ε	ε^2
			1	1	ε^2	E
$(yz、zx、xy)$	$(R_x、R_y、R_z)$ $(x、y、z)$	T	3	-1	0	0

（上表中：$\varepsilon = e^{i2\pi/3}$）

$O(432)$			E	$8C_3$	$3C_4^2$	$6C_2'$	$6C_4$
$x^2+y^2+z^2$		A_1	1	1	1	1	1
		A_2	1	1	1	-1	-1
$\left(x^2-y^2、2z^2-x^2-y^2\right)$		E	2	-1	2	0	0
	$\left(R_x、R_y、R_z\right)$ $\left(x、y、z\right)$	T_1	3	0	-1	-1	1
$\left(xy、yz、zx\right)$		T_2	3	0	-1	1	-1

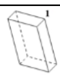
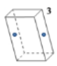
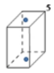
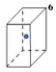
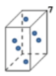
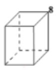
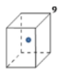
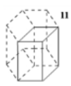
$T_h(2/m\bar{3})=T\otimes S_2$			E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3'$	I	$3IC_2$	$4IC_3$	$4IC_3'$
$x^2+y^2+z^2$		A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
$\left(x^2-y^2、2z^2-x^2-y^2\right)$		E_g	1	1	ε	ε^2	1	1	ε	ε^2
			1	1	ε^2	ε	1	1	ε^2	ε
$\left(yz、zx、xy\right)$	$\left(R_x、R_y、R_z\right)$	T_g	3	-1	0	0	3	-1	0	0
		A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
		E_u	1	1	ε	ε^2	-1	-1	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$
			1	1	ε^2	ε	-1	-1	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$
	$\left(x、y、z\right)$	T_u	3	-1	0	0	-3	1	0	0

（上表中：$\varepsilon=e^{i2\pi/3}$）

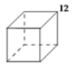
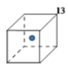
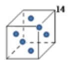
$T_d(\bar{4}3m)$			E	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
x^2+y^2、z^2		A_1	1	1	1	1	1
		A_2	1	1	1	-1	-1
$\left(x^2-y^2、2z^2-x^2-y^2\right)$		E	2	-1	2	0	0
$\left(yz、zx、xy\right)$	$\left(R_x、R_y、R_z\right)$	T_1	3	0	-1	-1	1
	$\left(x、y、z\right)$	T_2	3	0	-1	0	-1

附录B 空间群情况说明

本附录是对第三章基于下表讨论简单空间群的情况的详细介绍，以及 230 种空间群所属晶格系统情况的简单说明[16]。

<table>
<tr><th>晶系</th><th>点群</th><th>布拉菲格子</th><th>晶格系统</th><th>简单空间群</th></tr>
<tr><td>三斜</td><td>2 (C_1、S_2)</td><td>1 </td><td>三斜</td><td>2</td></tr>
<tr><td>单斜</td><td>3
(C_2、C_{1h}、C_{2h})</td><td>2
、</td><td>单斜</td><td>6</td></tr>
<tr><td>正交</td><td>3
(D_2、C_{2v}、D_{2h})</td><td>4
、、、
</td><td>正交</td><td>12</td></tr>
<tr><td>四方</td><td>7(C_4、S_4、C_{4h}、
D_4、C_{4v}、D_{4h}
D_{2d})</td><td>2
、</td><td>四方</td><td>14</td></tr>
<tr><td rowspan="2">三方
Trigonal</td><td rowspan="2">5
(C_3、D_3、D_{3d}、
S_6、C_{3v})</td><td>1
</td><td>菱方
Rhombohedral</td><td>5</td></tr>
<tr><td rowspan="2">1
</td><td rowspan="2">六角
Hexagonal</td><td>5</td></tr>
<tr><td>六角
Hexagonal</td><td>7(C_6、C_{3h}、C_{6h}、
D_6、D_{3h}、C_{6v}、
D_{6h})</td><td>7</td></tr>
</table>

[16]注意，这里用的名词是晶格系统，不是晶系，因为讨论的是空间群

立方	5 (T、T_d、O、 T_h、O_h)	3 、、 	立方	15
共 7 种	共 32 种	共 14 种	共 7 种	共 66 种

什么是针对简单群的详细介绍呢？就是上面的算法给出 66 种简单群，实际上是 73 种，我们把多余的七种抠出来。

73 种简单空间群，三斜晶格系统含 2 种、单斜晶格系统含 6 种、正交晶格系统含 13 种、四方晶格系统含 16 种、菱方晶格系统含 5 种、六角晶格系统含 16 种、立方晶格系统含 15 种。对照上图，我们知道相对于简单组合多出的几个分别是：正交晶格系统多出 1 种、四方晶格系统多出 2 种、六角晶格系统多出 4 种。

其中，正交晶格系统多出的一种是C_{2v}点群与面心晶格组合的时候，组合不知一种，而是三种，但C_{2v}的对称性使得其中两个等价，最终可以出现两种情况。这样正交晶格系统中简单空间群的总数就是 3 乘 4 加 1，共 13 种。

四方晶格系统多出的两种是D_{2d}与简单、体心晶格组合的时候，垂直方向的反射面（连带平分其的二次轴）选取也各有两种情况。这样总数正交晶格系统中简单空间群的个数就是 7 乘 2 加 2，共 16 种。

六角晶格系统的情况复杂。简单组合的时候，三方晶系贡献 5 种简单空间群，六角晶系贡献 7 种简单空间群，共 12 种。多出的四种分别是：三方晶系中的D_3依据水平方向 2 次轴的选取多贡献 1 种，C_{3v}依据垂直方向发射面的选取多贡献 1 种，三方晶系中的D_{3d}依据垂直方向的反射面（连带平分其的二次轴）选取多贡献 1 种，以及六角晶系中的D_{3h}依据其母群D_6群的二次轴的选取多贡献一种。

理解到这里，晶系是点群概念、晶格系统是空间群概念这句话笔者想表达的

意思就基本清楚了。230 种空间群要想推出来，笔者想都没有想过。熊夫利他们确实太厉害了！从实用的角度，大家知道所有详细内容都在 Bilbao 的那个服务器上，并会用就可以了。

附录C 晶体点群的双群的特征标表

本附录很大程度上文献[22]的全部以及文献[5]（也就是Dresselhaus教材）的附录D[17]。和附录A类似，我们还是按晶系展开讨论。为了与文献[22]一致，在表示点群双群的不可约表示的时候，我们不再像附录A那样采用A、B、E、T这些符号，而是采用Γ加下标的方式。

其它文献中的特征标表有的使用转动反射来标识点群群元，有的使用转动反演来标识点群群元。这里，为了和讲义主体中点群划分的讨论一致，我们多使用转动反演。对于占用空间比较大，为了省空间，我们也会使用转动反射。它们之间的关系是：$S_3 = IC_6^{-1}$、$S_3^{-1} = IC_6$、$S_4 = IC_4^{-1}$、$S_4^{-1} = IC_4$、$S_6 = IC_3^{-1}$、$S_6^{-1} = IC_3$。

1. 三斜系（S_2^D、C_1^D）：

S_2^D	E	I	$\bar{E}$	$\bar{E}I$
Γ_1^+	1	1	1	1
Γ_1^-	1	-1	1	-1
Γ_2^+	1	1	-1	-1
Γ_2^-	1	-1	-1	1

C_1^D	E	$\bar{E}$
Γ_1	1	1
Γ_2	1	-1

[17] 其中文献[5]的附录D主要参考的是文献[22]与文献[23]。

2. 单斜系（C_{2h}^D、C_2^D、C_{1h}^D）：

C_{2h}^D	E	C_2	σ_h	I	$\bar{E}$	$\bar{E}C_2$	$\bar{E}\sigma_h$	$\bar{E}I$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_1^-	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1
Γ_2^+	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1
Γ_2^-	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1
Γ_3^+	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1
Γ_3^-	1	1	−1	−1	−1	−1	1	1
Γ_4^+	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1
Γ_4^-	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1

C_2^D	E	C_2	$\bar{E}$	$\bar{E}C_2$
C_{1h}^D	E	σ_h	$\bar{E}$	$\bar{E}\sigma_h$
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	−1	1	−1
Γ_3	1	1	−1	−1
Γ_4	1	−1	−1	1

3. 正交系（D_{2h}^D、D_2^D、C_{2v}^D）：

D_{2h}^D	E	$\bar{E}$	$\{C_{2z}$ $\bar{E}C_{2z}\}$	$\{C_{2y}$ $\bar{E}C_{2y}\}$	$\{C_{2x}$ $\bar{E}C_{2x}\}$	I	$\bar{E}I$	$\{IC_{2z}$ $I\bar{E}C_{2z}\}$	$\{IC_{2y}$ $I\bar{E}C_{2y}\}$	$\{IC_{2x}$ $I\bar{E}C_{2x}\}$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	−1	1	−1	1	1	−1	1	−1
Γ_3^+	1	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1
Γ_4^+	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1	1
Γ_1^-	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ_2^-	1	1	−1	1	−1	−1	−1	1	−1	1
Γ_3^-	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1
Γ_4^-	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	−1
Γ_5^+	2	−2	0	0	0	2	−2	0	0	0
Γ_5^-	2	−2	0	0	0	−2	2	0	0	0

D_2^D	E	$\bar{E}$	$\{C_{2z}、\bar{E}C_{2z}\}$	$\{C_{2y}、\bar{E}C_{2y}\}$	$\{C_{2x}、\bar{E}C_{2x}\}$
C_{2v}^D	E	$\bar{E}$	$\{C_2、\bar{E}C_2\}$	$\{\sigma_v、\bar{E}\sigma_v\}$	$\{\sigma_{v'}、\bar{E}\sigma_{v'}\}$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	1	-1
Γ_3	1	1	1	-1	-1
Γ_4	1	1	-1	-1	1
Γ_5	2	-2	0	0	0

4. 四方系（ D_{4h}^D、C_4^D、S_4^D、D_4^D、C_{4v}^D、C_{4h}^D、D_{2d}^D）：

D_{4h}^D	E	$\bar{E}$	$2C_4^1$	$2\bar{E}C_4^1$	$\{C_4^2$ $\bar{E}C_4^2\}$	$\{2C_2^{(1)}$ $2\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{2C_2^{(2)}$ $2\bar{E}C_2^{(2)}\}$	I	$\bar{E}I$	$2IC_4^3$	$2\bar{E}IC_4^3$	$\{IC_4^2$ $I\bar{E}C_4^2\}$	$\{2IC_2^{(1)}$ $2\bar{E}IC_2^{(1)}\}$	$\{2IC_2^{(2)}$ $2\bar{E}IC_2^{(2)}\}$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1
Γ_3^+	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1
Γ_4^+	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	1
Γ_5^+	2	2	0	0	-2	0	0	2	2	0	0	-2	0	0
Γ_1^-	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ_2^-	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
Γ_3^-	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
Γ_4^-	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1
Γ_5^-	2	2	0	0	-2	0	0	-2	-2	0	0	2	0	0
Γ_6^+	2	-2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0	0	2	-2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0	0
Γ_7^+	2	-2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	0	2	-2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	0
Γ_6^+	2	-2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0	0	-2	2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	0
Γ_7^+	2	-2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	0	-2	2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0	0

C_4^D	E	$\bar{E}$	C_4	$\bar{E}C_4$	C_4^2	$\bar{E}C_4^2$	C_4^3	$\bar{E}C_4^3$
S_4^D	E	$\bar{E}$	IC_4	$\bar{E}IC_4$	C_4^2	$\bar{E}C_4^2$	IC_4^3	$\bar{E}IC_4^3$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
Γ_3	1	1	I	I	-1	-1	$-i$	$-i$
Γ_4	1	1	$-i$	$-i$	-1	-1	I	I
Γ_5	1	-1	ω	$-\omega$	i	$-i$	$-\omega^3$	Ω
Γ_6	1	-1	$-\omega^3$	ω^3	$-i$	i	Ω	$-\omega^3$
Γ_7	1	-1	$-\omega$	ω	i	$-i$	ω^3	$-\omega$
Γ_8	1	-1	ω^3	$-\omega^3$	$-i$	i	$-\omega$	ω^3

上表中$\omega = \exp[\pi i/4]$。

D_4^D	E	$\bar{E}$	$2C_4$	$2\bar{E}C_4$	$\{C_4^2$ $\bar{E}C_4^2\}$	$\{2C_2^{(1)}$ $2\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{2C_2^{(2)}$ $2\bar{E}C_2^{(2)}\}$
C_{4v}^D	E	$\bar{E}$	$2C_4$	$2\bar{E}C_4$	$\{C_4^2$ $\bar{E}C_4^2\}$	$\{2\sigma_v$ $2\bar{E}\sigma_v\}$	$\{2\sigma_d$ $2\bar{E}\sigma_d\}$
D_{2d}^D	E	$\bar{E}$	$2IC_4^3$	$2\bar{E}IC_4^3$	$\{C_4^2$ $\bar{E}C_4^2\}$	$\{2C_2^{(1)}$ $2\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{2\sigma_d$ $2\bar{E}\sigma_d\}$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	1	-1	-1
Γ_3	1	1	-1	-1	1	1	-1
Γ_4	1	1	-1	-1	1	-1	1
Γ_5	2	2	0	0	-2	0	0
Γ_6	2	-2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0	0
Γ_7	2	-2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	0

C_{4h}^{D}	E	$\bar{E}$	C_4	$\bar{E}C_4$	C_4^2	$\bar{E}C_4^2$	C_4^3	$\bar{E}C_4^3$	I	$\bar{E}I$	IC_4	$\bar{E}IC_4$	σ_h	$\bar{E}\sigma_h$	IC_4^3	$\bar{E}IC_4^3$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1
Γ_3^+	1	1	i	i	−1	−1	−i	−i	1	1	i	i	−1	−1	−i	−i
Γ_4^+	1	1	−i	−i	−1	−1	I	i	1	1	−i	−i	−1	−1	I	i
Γ_1^-	1	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ_2^-	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1	−1	−1	1	1	−1	−1	1	1
Γ_3^-	1	1	i	i	−1	−1	−i	−i	−1	−1	−i	−i	1	1	i	i
Γ_4^-	1	1	−i	−i	−1	−1	i	i	−1	−1	I	i	1	1	−i	−i
Γ_5^+	1	−1	ω	$-\omega$	i	−i	$-\omega^3$	ω^3	1	−1	Ω	$-\omega$	I	−i	$-\omega^3$	ω^3
Γ_6^+	1	−1	$-\omega^3$	ω^3	−i	i	Ω	$-\omega$	1	−1	$-\omega^3$	ω^3	−i	i	ω	$-\omega$
Γ_7^+	1	−1	$-\omega$	ω	i	−i	ω^3	$-\omega^3$	1	−1	$-\omega$	ω	I	−i	ω^3	$-\omega^3$
Γ_8^+	1	−1	ω^3	$-\omega^3$	−i	i	$-\omega$	ω	1	−1	ω^3	$-\omega^3$	−i	i	$-\omega$	ω
Γ_5^-	1	−1	ω	$-\omega$	i	−i	$-\omega^3$	ω^3	−1	1	$-\omega$	ω	−i	i	ω^3	$-\omega^3$
Γ_6^-	1	−1	$-\omega^3$	ω^3	−i	i	Ω	$-\omega$	−1	1	ω^3	$-\omega^3$	I	−i	$-\omega$	ω
Γ_7^-	1	−1	$-\omega$	ω	i	−i	ω^3	$-\omega^3$	−1	1	Ω	$-\omega$	−i	i	$-\omega^3$	ω^3
Γ_8^-	1	−1	ω^3	$-\omega^3$	−i	i	$-\omega$	ω	−1	1	$-\omega^3$	ω^3	I	−i	ω	$-\omega$

上表中$\omega = \exp[\pi i/4]$。

5. 三方系（ D_{3d}^{D}、S_6^{D}、C_3^{D}、C_{3v}^{D}、D_3^{D}）：

D_{3d}^{D}	E	$\bar{E}$	$2C_3$	$2\bar{E}C_3$	$3C_2$	$3\bar{E}C_2$	I	$\bar{E}I$	$2IC_3^2$	$2\bar{E}IC_3^2$	$3IC_2$	$3\bar{E}IC_2$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	1	1	−1	−1	1	1	1	1	−1	−1
Γ_3^+	2	2	−1	−1	0	0	2	2	−1	−1	0	0
Γ_1^-	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ_2^-	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1
Γ_3^-	2	2	−1	−1	0	0	−2	−2	1	1	0	0
Γ_4^+	2	−2	1	−1	1	1	2	−2	1	−1	0	0
Γ_5^+	1	−1	−1	1	i	−i	1	−1	−1	1	I	−i
Γ_6^+	1	−1	−1	1	−i	i	1	−1	−1	1	−i	I
Γ_4^-	2	−2	1	−1	1	1	−2	2	−1	1	0	0
Γ_5^-	1	−1	−1	1	i	−i	−1	1	1	−1	−i	I
Γ_6^-	1	−1	−1	1	−i	i	−1	1	1	−1	I	−i

S_6^D	E	$\overline{E}$	C_3	$\overline{E}C_3$	C_3^2	$\overline{E}C_3^2$	I	$\overline{E}I$	IC_3	$\overline{E}IC_3$	IC_3^2	$\overline{E}IC_3^2$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	ω^2	ω^2	$-\omega$	$-\omega$	1	1	ω^2	ω^2	$-\omega$	$-\omega$
Γ_3^+	1	1	$-\omega$	$-\omega$	ω^2	ω^2	1	1	$-\omega$	$-\omega$	ω^2	ω^2
Γ_1^-	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ_2^-	1	1	ω^2	ω^2	$-\omega$	$-\omega$	-1	-1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	ω	ω
Γ_3^-	1	1	$-\omega$	$-\omega$	ω^2	ω^2	-1	-1	ω	ω	$-\omega^2$	$-\omega^2$
Γ_4^+	1	-1	ω	$-\omega$	$-\omega^2$	ω^2	1	-1	ω	$-\omega$	$-\omega^2$	ω^2
Γ_5^+	1	-1	$-\omega^2$	ω^2	ω	$-\omega$	1	-1	$-\omega^2$	ω^2	ω	$-\omega$
Γ_6^+	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1
Γ_4^-	1	-1	ω	$-\omega$	$-\omega^2$	ω^2	-1	1	$-\omega$	ω	ω^2	$-\omega^2$
Γ_5^-	1	-1	$-\omega^2$	ω^2	ω	$-\omega$	-1	1	ω^2	$-\omega^2$	$-\omega$	ω
Γ_6^-	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1

上表中$\omega = \exp[\pi i/3]$。

C_3^D	E	$\overline{E}$	C_3	$\overline{E}C_3$	C_3^2	$\overline{E}C_3^2$
Γ_1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	ω^2	ω^2	$-\omega$	$-\omega$
Γ_3	1	1	$-\omega$	$-\omega$	ω^2	ω^2
Γ_4	1	-1	ω	$-\omega$	$-\omega^2$	ω^2
Γ_5	1	-1	$-\omega^2$	ω^2	ω	$-\omega$
Γ_6	1	-1	-1	1	-1	1

上表中$\omega = \exp[\pi i/3]$。

D_3^D	E	$\overline{E}$	$2C_3$	$2\overline{E}C_3$	$3C_2^{(1)}$	$3\overline{E}C_2^{(1)}$
C_{3v}^D	E	$\overline{E}$	$2C_3$	$2\overline{E}C_3$	$3\sigma_v$	$3\overline{E}\sigma_v$
Γ_1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	-1	-1
Γ_3	2	2	-1	-1	0	0
Γ_4	2	-2	1	-1	0	0
Γ_5	1	-1	-1	1	i	$-i$
Γ_6	1	-1	-1	1	$-i$	I

6. 六角系（ D_{6h}^D、C_6^D、C_{3h}^D、C_{6h}^D、C_{6v}^D、D_6^D、D_{3h}^D）：

C_{6h}^D	E	$\bar{E}$	C_6	$\overline{C_6}$	C_3	$\overline{C_3}$	C_2	$\overline{C_2}$	C_3^2	$\overline{C_3^2}$	C_6^5	$\overline{C_6^5}$	I	$\bar{I}$	S_3^{-1}	$\overline{S_3^{-1}}$	S_6^{-1}	$\overline{S_6^{-1}}$	σ_h	$\overline{\sigma_h}$	S_6	$\overline{S_6}$	S_3	$\overline{S_3}$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	ω^4	ω^4	1	1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	ω^4	ω^4	1	1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	ω^4	ω^4	1	1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	ω^4	ω^4
Γ_3^+	1	1	ω^4	ω^4	$-\omega^2$	$-\omega^2$	1	1	ω^4	ω^4	$-\omega^2$	$-\omega^2$	1	1	ω^4	ω^4	$-\omega^2$	$-\omega^2$	1	1	ω^4	ω^4	$-\omega^2$	$-\omega^2$
Γ_4^+	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
Γ_5^+	1	1	ω^2	ω^2	ω^4	ω^4	-1	-1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	$-\omega^4$	$-\omega^4$	1	1	ω^2	ω^2	ω^4	ω^4	-1	-1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	$-\omega^4$	$-\omega^4$
Γ_6^+	1	1	$-\omega^4$	$-\omega^4$	$-\omega^2$	$-\omega^2$	-1	-1	ω^4	ω^4	ω^2	ω^2	1	1	$-\omega^4$	$-\omega^4$	$-\omega^2$	$-\omega^2$	-1	-1	ω^4	ω^4	ω^2	ω^2
Γ_1^-	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ_2^-	1	1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	ω^4	ω^4	1	1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	ω^4	ω^4	-1	-1	ω^2	ω^2	$-\omega^4$	$-\omega^4$	-1	-1	ω^2	ω^2	$-\omega^4$	$-\omega^4$
Γ_3^-	1	1	ω^4	ω^4	$-\omega^2$	$-\omega^2$	1	1	ω^4	ω^4	$-\omega^2$	$-\omega^2$	-1	-1	$-\omega^4$	$-\omega^4$	ω^2	ω^2	-1	-1	$-\omega^4$	$-\omega^4$	ω^2	ω^2
Γ_4^-	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
Γ_5^-	1	1	ω^2	ω^2	ω^4	ω^4	-1	-1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	$-\omega^4$	$-\omega^4$	-1	-1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	$-\omega^4$	$-\omega^4$	1	1	ω^2	ω^2	ω^4	ω^4
Γ_6^-	1	1	$-\omega^4$	$-\omega^4$	$-\omega^2$	$-\omega^2$	-1	-1	ω^4	ω^4	ω^2	ω^2	-1	-1	ω^4	ω^4	ω^2	ω^2	1	1	$-\omega^4$	$-\omega^4$	$-\omega^2$	$-\omega^2$
Γ_7^+	1	-1	ω	$-\omega$	ω^2	$-\omega^2$	i	$-$i	$-\omega^4$	ω^4	$-\omega^5$	ω^5	1	-1	ω	$-\omega$	ω^2	$-\omega^2$	i	$-$i	$-\omega^4$	ω^4	$-\omega^5$	ω^5
Γ_8^+	1	-1	$-\omega^5$	ω^5	$-\omega^4$	ω^4	$-$i	I	ω^2	$-\omega^2$	ω	$-\omega$	1	-1	$-\omega^5$	ω^5	$-\omega^4$	ω^4	$-$i	i	ω^2	$-\omega^2$	ω	$-\omega$
Γ_9^+	1	-1	$-\omega$	ω	ω^2	$-\omega^2$	$-$i	i	$-\omega^4$	ω^4	ω^5	$-\omega^5$	1	-1	$-\omega$	ω	ω^2	$-\omega^2$	$-$i	i	$-\omega^4$	ω^4	ω^5	$-\omega^5$
Γ_{10}^+	1	-1	ω^5	$-\omega^5$	$-\omega^4$	ω^4	i	$-$i	ω^2	$-\omega^2$	$-\omega$	ω	1	-1	ω^5	$-\omega^5$	$-\omega^4$	ω^4	I	$-$i	ω^2	$-\omega^2$	$-\omega$	ω
Γ_{11}^+	1	-1	$-$i	I	-1	1	i	$-$i	-1	1	i	$-$i	1	-1	$-$i	i	-1	1	i	$-$i	-1	1	i	$-$i
Γ_{12}^+	1	-1	i	$-$i	-1	1	$-$i	i	-1	1	$-$i	i	1	-1	i	$-$i	-1	1	$-$i	i	-1	1	$-$i	i
Γ_7^-	1	-1	ω	$-\omega$	ω^2	$-\omega^2$	i	$-$i	$-\omega^4$	ω^4	$-\omega^5$	ω^5	-1	1	$-\omega$	ω	$-\omega^2$	ω^2	$-$i	i	ω^4	$-\omega^4$	ω^5	$-\omega^5$

Γ_8^-	1	−1	$-\omega^5$	ω^5	$-\omega^4$	ω^4	−i	I	ω^2	$-\omega^2$	ω	−ω	−1	1	ω^5	$-\omega^5$	ω^4	$-\omega^4$	I	−i	$-\omega^2$	ω^2	−ω	Ω
Γ_9^-	1	−1	−ω	ω	ω^2	$-\omega^2$	−i	I	$-\omega^4$	ω^4	ω^5	$-\omega^5$	−1	1	ω	−ω	$-\omega^2$	ω^2	i	−i	ω^4	$-\omega^4$	$-\omega^5$	ω^5
Γ_{10}^-	1	−1	ω^5	$-\omega^5$	$-\omega^4$	ω^4	i	−i	ω^2	$-\omega^2$	−ω	ω	−1	1	$-\omega^5$	ω^5	ω^4	$-\omega^4$	−i	i	$-\omega^2$	ω^2	ω	−ω
Γ_{11}^-	1	−1	−i	I	−1	1	i	−i	−1	1	i	−i	−1	1	i	−i	1	−1	−i	i	1	−1	−i	i
Γ_{12}^-	1	−1	i	−i	−1	1	−i	I	−1	1	−i	i	−1	1	−i	i	1	−1	i	−i	1	−1	i	−i
C_{6h}^D	E	$\bar{E}$	C_6	$\overline{C_6}$	C_3	$\overline{C_3}$	C_2	$\overline{C_2}$	C_3^2	$\overline{C_3^2}$	C_6^5	$\overline{C_6^5}$	I	$\bar{I}$	S_3^{-1}	$\overline{S_3^{-1}}$	S_6^{-1}	$\overline{S_6^{-1}}$	σ_h	$\overline{\sigma_h}$	S_6	$\overline{S_6}$	S_3	$\overline{S_3}$

上表中$\omega = \exp[\pi i/6]$。由于空间限制，对于非单位群元A，我们使用$\bar{A}$来表示$\bar{E}A$。

D_{6h}^D	E	$\bar{E}$	$\{C_2$ $\bar{E}C_2\}$	$2C_3$	$2\bar{E}C_3$	$2C_6$	$2\bar{E}C_6$	$\{3C_2^{(1)}$ $3\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{3C_2^{(2)}$ $3\bar{E}C_2^{(2)}\}$	I	$\bar{E}$ I	$\{IC_2$ $I\bar{E}C_2\}$	$2IC_3$	$2I\bar{E}C_3$	$2IC_6$	$2I\bar{E}C_6$	$\{3IC_2^{(1)}$ $3I\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{3IC_2^{(2)}$ $3I\bar{E}C_2^{(2)}\}$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1
Γ_3^+	1	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1
Γ_4^+	1	1	−1	1	1	−1	−1	−1	1	1	1	−1	1	1	−1	−1	−1	1
Γ_5^+	2	2	−2	−1	−1	1	1	0	0	2	2	−2	−1	−1	1	1	0	0
Γ_6^+	2	2	2	−1	−1	−1	−1	0	0	2	2	2	−1	−1	−1	−1	0	0
Γ_1^-	1	1	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ_2^-	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1
Γ_3^-	1	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	−1	1
Γ_4^-	1	1	−1	1	1	−1	−1	−1	1	−1	−1	1	−1	−1	1	1	1	−1
Γ_5^-	2	2	−2	−1	−1	1	1	0	0	−2	−2	2	1	1	−1	−1	0	0

Γ_6^-	2	2	2	-1	-1	-1	-1	0	0	-2	-2	-2	1	1	1	1	0	0
Γ_7^+	2	-2	0	1	-1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0	2	-2	0	1	-1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0
Γ_8^+	2	-2	0	1	-1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0	2	-2	0	1	-1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0
Γ_9^+	2	-2	0	-2	2	0	0	0	0	2	-2	0	-2	2	0	0	0	0
Γ_7^-	2	-2	0	1	-1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0	-2	2	0	-1	1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0
Γ_8^-	2	-2	0	1	-1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0	-2	2	0	-1	1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0
Γ_9^-	2	-2	0	-2	2	0	0	0	0	-2	2	0	2	-2	0	0	0	0
D_{6h}^D	E	$\bar{E}$	$\{C_2$ $\bar{E}C_2\}$	$2C_3$	$2\bar{E}C_3$	$2C_6$	$2\bar{E}C_6$	$\{3C_2^{(1)}$ $3\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{3C_2^{(2)}$ $3\bar{E}C_2^{(2)}\}$	I	$\bar{E}\,I$	$\{IC_2$ $I\bar{E}C_2\}$	$2IC_3$	$2I\bar{E}C_3$	$2IC_6$	$2I\bar{E}C_6$	$\{3IC_2^{(1)}$ $3I\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{3IC_2^{(2)}$ $3I\bar{E}C_2^{(2)}\}$

C_6^D	E	$\bar{E}$	C_6	$\bar{E}C_6$	C_3	$\bar{E}C_3$	C_2	$\bar{E}C_2$	C_3^2	$\bar{E}C_3^2$	C_6^5	$\bar{E}C_6^5$
C_{3h}^D	E	$\bar{E}$	IC_6	$\bar{E}IC_6$	C_3	$\bar{E}C_3$	σ_h	$\bar{E}\sigma_h$	C_3^2	$\bar{E}C_3^2$	IC_6^5	$\bar{E}IC_6^5$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	ω^4	ω^4	1	1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	ω^4	ω^4
Γ_3	1	1	ω^4	ω^4	$-\omega^2$	$-\omega^2$	1	1	ω^4	ω^4	$-\omega^2$	$-\omega^2$
Γ_4	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
Γ_5	1	1	ω^2	ω^2	ω^4	ω^4	1	1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	$-\omega^4$	$-\omega^4$
Γ_6	1	1	$-\omega^4$	$-\omega^4$	$-\omega^2$	$-\omega^2$	1	1	ω^4	ω^4	ω^2	ω^2
Γ_7	1	-1	ω	$-\omega$	ω^2	$-\omega^2$	i	$-i$	$-\omega^4$	ω^4	$-\omega^5$	ω^5
Γ_8	1	-1	$-\omega^5$	ω^5	$-\omega^4$	ω^4	$-i$	i	ω^2	$-\omega^2$	ω	$-\omega$
Γ_9	1	-1	$-\omega$	ω	ω^2	$-\omega^2$	$-i$	i	$-\omega^4$	$-\omega^4$	ω^5	$-\omega^5$
Γ_{10}	1	-1	ω^5	$-\omega^5$	$-\omega^4$	ω^4	i	$-i$	ω^2	$-\omega^2$	$-\omega$	ω
Γ_{11}	1	-1	$-i$	i	-1	1	i	$-i$	-1	1	i	$-i$
Γ_{12}	1	-1	i	$-i$	-1	1	$-i$	i	-1	1	$-i$	i

上表中$\omega=\exp[\pi i/6]$。

D_6^D	E	$\bar{E}$	$\{C_2$ $\bar{E}C_2\}$	$2C_3$	$2\bar{E}C_3$	$2C_6$	$2\bar{E}C_6$	$\{3C_2^{(1)}$ $3\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{3C_2^{(2)}$ $3\bar{E}C_2^{(2)}\}$
C_{6v}^D	E	$\bar{E}$	$\{C_2$ $\bar{E}C_2\}$	$2C_3$	$2\bar{E}C_3$	$2C_6$	$2\bar{E}C_6$	$\{3IC_2^{(1)}$ $3I\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{3IC_2^{(2)}$ $3I\bar{E}C_2^{(2)}\}$
D_{3h}^D	E	$\bar{E}$	$\{IC_2$ $\bar{E}IC_2\}$	$2C_3$	$2\bar{E}C_3$	$2C_6$	$2\bar{E}C_6$	$\{3C_2^{(1)}$ $3\bar{E}C_2^{(1)}\}$	$\{3IC_2^{(2)}$ $3I\bar{E}C_2^{(2)}\}$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1
Γ_3	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1
Γ_4	1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	1
Γ_5	2	2	-2	-1	-1	1	1	0	0
Γ_6	2	2	2	-1	-1	-1	-1	0	0
Γ_7	2	-2	0	1	-1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0
Γ_8	2	-2	0	1	-1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0
Γ_9	2	-2	0	-2	2	0	0	0	0

7. 立方系（O_h、T、O、T_h、T_d）：

O_h^D	E	$\bar{E}$	$8C_3$	$8\bar{E}C_3$	$\{3C_4^2$ $3\bar{E}C_4^2$	$6C_4$	$6\bar{E}C_4$	$\{6C_2'$ $6\bar{E}C_2'\}$	I	$\bar{I}$	$8IC_3$	$8I\bar{E}C_3$	$\{3IC_4^2$ $3I\bar{E}C_4^2$	$6IC_4$	$6I\bar{E}C_4$	$\{6IC_2'$ $6I\bar{E}C_2'\}$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1
Γ_3^+	2	2	−1	−1	2	0	0	0	2	2	−1	−1	2	0	0	0
Γ_4^+	3	3	0	0	−1	1	1	−1	3	3	0	0	−1	1	1	−1
Γ_5^+	3	3	0	0	−1	−1	−1	1	3	3	0	0	−1	−1	−1	1
Γ_1^-	1	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ_2^-	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1	1
Γ_3^-	2	2	−1	−1	2	0	0	0	−2	−2	1	1	−2	0	0	0
Γ_4^-	3	3	0	0	−1	1	1	−1	−3	−3	0	0	1	−1	−1	1
Γ_5^-	3	3	0	0	−1	−1	−1	1	−3	−3	0	0	1	1	1	−1
Γ_6^+	2	−2	1	−1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	2	−2	1	−1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
Γ_7^+	2	−2	1	−1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	2	−2	1	−1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
Γ_8^+	4	−4	−1	1	0	0	0	0	4	−4	−1	1	0	0	0	0
Γ_6^-	2	−2	1	−1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	−2	2	−1	1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
Γ_7^-	2	−2	1	−1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	−2	2	−1	1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0

Γ_8^-	4	−4	−1	1	0	0	0	0	−4	4	1	−1	0	0	0	0

O_h^D	E	$\bar{E}$	$\{3C_2$ $3\bar{E}C_2\}$	$4C_3$	$4\bar{E}C_3$	$4C_3^{-1}$	$4\bar{E}C_3^{-1}$	I	$\bar{I}$	$\{3IC_2$ $3I\bar{E}C_2\}$	$4IC_3$	$4I\bar{E}C_3$	$4IC_3^{-1}$	$4\bar{E}IC_3^{-1}$
Γ_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2^+	1	1	1	ω	ω	ω^2	ω^2	1	1	1	ω	ω	ω^2	ω^2
Γ_3^+	1	1	1	ω^2	ω^2	ω	Ω	1	1	1	ω^2	ω^2	ω	ω
Γ_4^+	3	3	−1	0	0	0	0	3	3	−1	0	0	0	0
Γ_1^-	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ_2^-	1	1	1	ω	ω	ω^2	ω^2	−1	−1	−1	$-\omega$	$-\omega$	$-\omega^2$	$-\omega^2$
Γ_3^-	1	1	1	ω^2	ω^2	ω	ω	−1	−1	−1	$-\omega^2$	$-\omega^2$	$-\omega$	$-\omega$
Γ_4^-	3	3	−1	0	0	0	0	−3	−3	1	0	0	0	0
Γ_5^+	2	−2	0	1	−1	1	−1	2	−2	0	1	−1	1	−1
Γ_6^+	2	−2	0	ω	$-\omega$	ω^2	$-\omega^2$	2	−2	0	ω	$-\omega$	ω^2	$-\omega^2$
Γ_7^+	2	−2	0	ω^2	$-\omega^2$	ω	$-\omega$	2	−2	0	ω^2	$-\omega^2$	ω	$-\omega$
Γ_5^-	2	−2	0	1	−1	1	−1	−2	2	0	−1	1	−1	1
Γ_6^-	2	−2	0	ω	$-\omega$	ω^2	$-\omega^2$	−2	2	0	$-\omega$	ω	$-\omega^2$	ω^2
Γ_7^-	2	−2	0	ω^2	$-\omega^2$	Ω	$-\omega$	−2	2	0	$-\omega^2$	ω^2	$-\omega$	ω

T^D	E	$\bar{E}$	$\{3C_2$ $3\bar{E}C_2\}$	$4C_3$	$4\bar{E}C_3$	$4C_3'$	$4\bar{E}C_3'$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	ω	ω	ω^2	ω^2
Γ_3	1	1	1	ω^2	ω^2	ω	ω
Γ_4	3	3	-1	0	0	0	0
Γ_5	2	-2	0	1	-1	1	-1
Γ_6	2	-2	0	ω	$-\omega$	ω^2	$-\omega^2$
Γ_7	2	-2	0	ω^2	$-\omega^2$	ω	$-\omega$

上面两个表中$\omega = \exp[\pi i/3]$。

O^D	E	$\bar{E}$	$8C_3$	$8\bar{E}C_3$	$\{3C_4^2$ $3\bar{E}C_4^2\}$	$6C_4$	$6\bar{E}C_4$	$\{6C_2'$ $6\bar{E}C_2'\}$
T_d^D	E	$\bar{E}$	$8C_3$	$8\bar{E}C_3$	$\{3C_2$ $3\bar{E}C_2\}$	$6S_4$	$6\bar{E}S_4$	$\{6\sigma_d$ $6\bar{E}\sigma_d\}$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	1	-1	-1	-1
Γ_3	2	2	-1	-1	2	0	0	0
Γ_4	3	3	0	0	-1	1	1	-1
Γ_5	3	3	0	0	-1	-1	-1	1
Γ_6	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
Γ_7	2	-2	1	-1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
Γ_8	4	4	-1	1	0	0	0	0

附录D 置换群部分相关定理与引理证明

补充定理1（本原幂等元判别定理）：幂等元$\vec{e}_i$为本原幂等元的充要条件为：$\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i = \lambda\vec{e}_i$对$\forall\vec{x} \in R_G$成立，其中$\lambda$为常数。

证明：

必要性，设$\vec{e}_i$为本原幂等元，对应投影算符$\widehat{P}_i$，子空间$W_i = \widehat{P}_i R_G$为群不变的不可约的子空间。由上个定理，知$L(g)\widehat{P}_i = \widehat{P}_i L(g)$对$\forall g \in G$成立。

这时，对$\forall\vec{x} \in R_G$，定义一个与$\vec{x}$相关的算符$\widehat{A}$，这个算符作用到群空间中向量$\vec{y}$上的效果是$\widehat{A}\vec{y} = \vec{y}\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i$。

这样的话，当$\widehat{A}$作用到$L(g)\vec{y}$上的时候，就有：

$$\widehat{A}(L(g)\vec{y}) = L(g)\vec{y}\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i$$

而$\widehat{A}\vec{y} = \vec{y}\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i$，所以进一步有：

$$\widehat{A}(L(g)\vec{y}) = L(g)\left(\widehat{A}\vec{y}\right)$$

由于$\vec{y}$为R_G中任意向量，所以$\widehat{A}L(g) = L(g)\widehat{A}$对$\forall g \in G$成立。

对这个$\vec{y}$，可分为属于本原幂等元$\vec{e}_i$所对应的子空间W_i的部分$\vec{y}_1$与不属于W_i的部分$\vec{y}_2$。由于$\widehat{A}$与$L(g)$都是线性算符，$\widehat{A}L(g) = L(g)\widehat{A}$对$\vec{y}_1$、$\vec{y}_2$都是成立的。同时$\widehat{A}\vec{y} = \vec{y}\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i$也可分解为$\widehat{A}\vec{y}_1 = \vec{y}_1\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i$与$\widehat{A}\vec{y}_2 = \vec{y}_2\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i$两个部分。

先看$\vec{y}_1$部分，由于$\widehat{A}L(g) = L(g)\widehat{A}$，由舒尔引理二可知$\widehat{A}$在$W_i$上对应的矩阵只能是常数矩阵。这样的话：

$$\widehat{A}\vec{y}_1 = \lambda\vec{y}_1 = \lambda\widehat{P}_i\vec{y}_1$$

再看$\vec{y}_2$，它不属于W_i，由

$$\widehat{A}\vec{y}_2 = \vec{y}_2\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i$$

结合正文定理 6.2 的证明中我们说过的幂等元$\vec{e}_i$与它对应的投影算符$\widehat{P}_i$的关系$\widehat{P}_i\vec{y} = \vec{y}\vec{e}_i$，可知上式右边等于：

$$\vec{y}_2\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i=(\hat{P}_i\vec{y}_2)\vec{x}\vec{e}_i=\hat{P}_i\left((\hat{P}_i\vec{y}_2)\vec{x}\right)$$

由于$\hat{P}_i\vec{y}_2=0$，所以$\hat{A}\vec{y}_2=\hat{P}_i(0\vec{x})=0=\lambda\hat{P}_i\vec{y}_2$，其中$\lambda$为任意复数。

这个$\hat{A}\vec{y}_2=\lambda\hat{P}_i\vec{y}_2$与前面$\hat{A}\vec{y}_1=\lambda\hat{P}_i\vec{y}_1$结合，有$\hat{A}\vec{y}=\lambda\hat{P}_i\vec{y}$。再由$\vec{y}$的任意性，可知$\hat{A}=\lambda\hat{P}_i$。

这个时候，再结合$\hat{A}$的定义，即对$\forall\vec{y}\in R_G$，有：

$$\hat{A}\vec{y}=\vec{y}\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i$$

以及：

$$\hat{A}\vec{y}=\lambda\hat{P}_i\vec{y}=\lambda\vec{y}\vec{e}_i=\vec{y}\lambda\vec{e}_i$$

可得：

$$\vec{y}\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i=\vec{y}\lambda\vec{e}_i$$

这个等式，同样是对$\forall\vec{y}\in R_G$成立的，因此$\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i=\lambda\vec{e}_i$。必要性得证。由$W_i$为不可约表示空间可得$\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i=\lambda\vec{e}_i$。这里不可约在舒尔引理二的应用中起了关键作用。

充分性，由$\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i=\lambda\vec{e}_i$推$\vec{e}_i$对应的$W_i$为不可约表示空间。反证，设$\vec{e}_i$不是本原幂等元，它可以继续分为$\vec{e}_{i1}+\vec{e}_{i2}$，于是：

$$\begin{aligned}\vec{e}_i\vec{e}_{i1}\vec{e}_i&=(\vec{e}_{i1}+\vec{e}_{i2})\vec{e}_{i1}(\vec{e}_{i1}+\vec{e}_{i2})\\&=\vec{e}_{i1}^3+\vec{e}_{i1}^2\vec{e}_{i2}+\vec{e}_{i2}\vec{e}_{i1}^2+\vec{e}_{i2}\vec{e}_{i1}\vec{e}_{i2}=\vec{e}_{i1}\end{aligned}$$

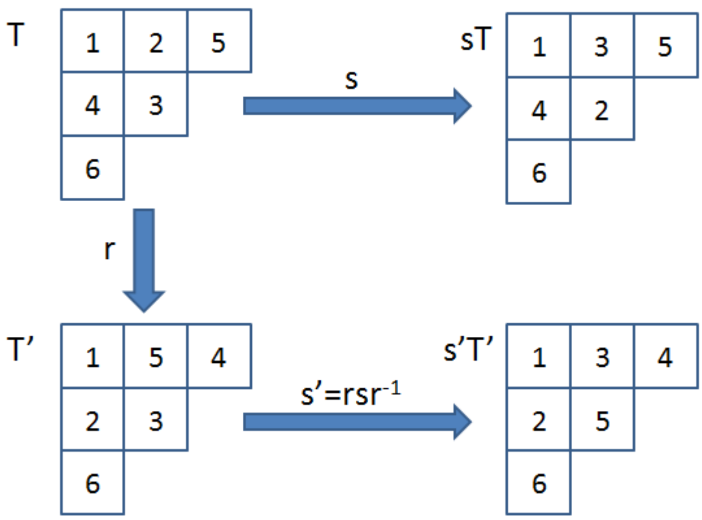
这个等式成立的原因是$\vec{e}_{i1}$、$\vec{e}_{i2}$为$\vec{e}_i$继续分解的两个部分，它们都是幂等元，且相互正交。因此，等式的第一项三次方等于一次方（幂等元性质），后三项等于零（正交性质）。理解正交性质一点，大家可参考$\hat{P}_i\vec{y}=\vec{y}\vec{e}_i$这个幂等元与投影算符的关系式。换句话说，$\vec{e}_i$是群代数中这样一个向量，它与任何的一个向量相乘，结果就是$\hat{P}_i$所对应的群不变子空间中的向量。$\hat{P}_{i1}$与$\hat{P}_{i2}$的子空间相互正交，$\vec{e}_{i1}$、$\vec{e}_{i2}$也相互正交。

而$\vec{e}_i\vec{x}\vec{e}_i=\lambda\vec{e}_i$，所以上式还等于$\lambda\vec{e}_i$，进而$\vec{e}_{i1}=\lambda\vec{e}_i$。

这样的话，可以继续有：$\vec{e}_{i1}^2 = \lambda^2\vec{e}_i^2$。同时，$\vec{e}_{i1}^2 = \vec{e}_{i1} = \lambda\vec{e}_i$，所以$\lambda$要么为零，要么为一。$\lambda$为零时，$\vec{e}_{i1} = \lambda\vec{e}_i = 0$，$\vec{e}_i = \vec{e}_{i2}$；$\lambda$为一时，$\vec{e}_{i1} = \lambda\vec{e}_i = \vec{e}_i$，$\vec{e}_{i2} = 0$。不管怎样，都是说$\vec{e}_i$不能继续分，是个本原幂等元。充分性同样得证。

引理 6.1 设T、T'是由置换 r 联系起来的杨盘，$T' = rT$，如果置换 s 作用在T上，使得$T(i, j)$数字变到sT中的(i', j')处，则$s' = rsr^{-1}$也会使得$T'(i, j)$中的数字变到$s'T'$的(i', j')处。

（正文部分讲过，这个引理要说明的关系就是下面这个图。



杨盘sT中各个数相对杨盘T中的变化与杨盘$s'T'$中各个数相对与杨盘T'中各个数的变化完全一样。）

证明：

把杨盘T、T'、sT、$s'T'$中的数均按从左到右、从上到下的顺序排列，记为：$\{t_1, t_2, \cdots, t_n\}$、$\{t'_1, t'_2, \cdots, t'_n\}$、$\{st_1, st_2, \cdots, st_n\}$、$\{s't'_1, s't'_2, \cdots, s't'_n\}$。

由上图关系，知

$$r = \begin{pmatrix} t_1, & t_2, & \cdots, & t_n \\ t'_1, & t'_2, & \cdots, & t'_n \end{pmatrix}$$

$$s=\begin{pmatrix} t_1, & t_2, & \cdots, & t_n \\ st_1, & st_2, & \cdots, & st_n \end{pmatrix}$$

$$s'=\begin{pmatrix} t'_1, & t'_2, & \cdots, & t'_n \\ s't'_1, & s't'_2, & \cdots, & s't'_n \end{pmatrix}$$

同时，由于$s'=rsr^{-1}$，这意味着它干的事是把s的上下两行分别用r置换。上面那行是把t_1，t_2，$\cdots$，t_n变成了t'_1，t'_2，$\cdots$，t'_n，下面那行是把st_1，st_2，$\cdots$，st_n变成了$s't'_1$，$s't'_2$，$\cdots$，$s't'_n$，所以r其实有两种写法，分别是：

$$\begin{pmatrix} t_1, & t_2, & \cdots, & t_n \\ t'_1, & t'_2, & \cdots, & t'_n \end{pmatrix}、\begin{pmatrix} st_1, & st_2, & \cdots, & st_n \\ s't'_1, & s't'_2, & \cdots, & s't'_n \end{pmatrix}$$

比较这两个等价的写法，我们就知道，当左边第i列的数码t_i在右边的位置为第j列，也就是$t_i=st_j$时，一定有：$t'_i=s't'_j$。也就是上面图中说的规律。

这个引理还有个推论：

设$T'=rT$，则有$R(T')=rR(T)r^{-1}$，$C(T')=rC(T)r^{-1}$，$\widehat{P}(T')=r\widehat{P}(T)r^{-1}$，$\widehat{Q}(T')=r\widehat{Q}(T)r^{-1}$，$\widehat{E}(T')=r\widehat{E}(T)r^{-1}$。

证明：

还是基于上面那张图。对$\forall r\in S_n$，取$\forall \hat{p}\in C(T)$，把这个$\hat{q}$理解为上面图中的s，只不过它干的事情只是将T中同列的数码相互置换。这样的话，由于上图中s对T的置换在相对位置上完全等同于rsr^{-1}对rT的置换，所以如果$\hat{q}$是对杨图T的列置换的话，$r\hat{q}r^{-1}$就是对杨图$T'=rT$的等同的列置换。这种等同是一对一的关系，所以在$\hat{q}$走遍C(T)中所有元素的时候$r\hat{q}r^{-1}$也走遍$C(T')$中所有元素。最终的效果就是$C(T')=rC(T)r^{-1}$。

对$R(T')=rR(T)r^{-1}$，逻辑是完全类似的。而对$\widehat{P}(T')=r\widehat{P}(T)r^{-1}$、$\widehat{Q}(T')=r\widehat{Q}(T)r^{-1}$、$\widehat{E}(T')=r\widehat{E}(T)r^{-1}$也一样，只不过这里置换的集合变成了置换的线性叠加罢了。

引理 6.2 设$\hat{p}$、$\hat{q}$是杨盘 T 的行、列置换，则 T 中位于同一行的任意两个数字不可能出现在$T'' = \hat{p}\hat{q}T$的同一列中；反之，若$T'' = rT$时，T 中位于同一行的任意两个数字都不出现在T'的同一列中，则杨盘 T 存在行、列置换$\hat{p}$、$\hat{q}$，使$r = \hat{p}\hat{q}$。

证明：

还是基于引理 6.1 那张图，$\hat{p} \in R(T)$，$\hat{q} \in C(T)$，$T'' = \hat{p}\hat{q}T$，证 T 中位于同一行的任意两个数字不可能出现在T''的同一列中。

令$T' = \hat{p}T$，$\hat{q}' = \hat{p}\hat{q}\hat{p}^{-1}$。现在讨论的内容与上面那张图的对应关系是这里的$T$对应图中的$T$，这里的$\hat{p}$对应图中的$r$，这里的$T'$对应图中的$T'$，这里的$\hat{q}$对应图中的$s$，这里的$\hat{q}' = \hat{p}\hat{q}\hat{p}^{-1}$对应图中的$\hat{s}' = rsr^{-1}$，这里的$T'' = \hat{p}\hat{q}T = \hat{p}\hat{q}\hat{p}^{-1}\hat{p}T = \hat{q}'T'$对应图中的$\hat{s}'T'$。

这个定理说白了，说的是左上角那个图中T中同一行的任意两个数字，不可能通过取$r = \hat{p}$、$s = \hat{q}$的方式，由上面图中显示的变换，变换到右下角$T'' = \hat{q}'T'$的同一列中。

怎么理解？很容易，由上个引理推论中的讨论，$\hat{q}$是T的列置换，$\hat{q}'$也是T'的列置换。因此$\hat{q}'$不可能将T'中位于同行的两个数码换到T''的同一列中。而另一方面$T' = \hat{p}T$，所以T'的行数码与T的行数码是相同的。所以T中的行数码在经历了$\hat{p}$这个行置换变成T'，再经历$\hat{q}' = \hat{p}\hat{q}\hat{p}^{-1}$这个列置换变成$T'' = \hat{p}\hat{q}T$后，不可能处在$T''$的同一列中。这个是这个引理第一部分说的事情。

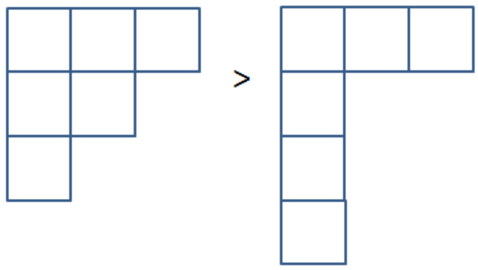
反过来，$T'' = rT$，若T中同一行的任意两个数码都不出现在T''的同一列中，要证$r = \hat{p}\hat{q}$。由已知条件T中同一行的任意两个数码都不出现在T''的同一列中，知我们总可以用行置换$\hat{p} \in R(T)$对杨图T操作，使得结果$T' = \hat{p}T$与T''的各列数码相同，只是每列中各个数码的上下位置可以不同。这样的话，我们可以在这个基础上对

T'进行一个列置换$\hat{q}'$，调整每一列中各数码的行，使得$\hat{q}'\ T'$与T'完全相同。如果取$\hat{q}' = \hat{p}\hat{q}\hat{p}^{-1}$，这样的话$\hat{q}'\ T'$就是$\hat{p}\hat{q}\hat{p}^{-1}\hat{p}T = \hat{p}\hat{q}T$，它与$T'' = rT$完全相同。这样就一定有$r = \hat{p}\hat{q}$。问题得证。

前面也说过，引理 6.1 与 6.2 说的是同一个杨图的杨盘的性质。

引理 6.3 设杨盘T和T'分别属于杨图$[\lambda]$、$[\lambda']$，且$[\lambda]>[\lambda']$

（这里，$[\lambda]>[\lambda']$是指$[\lambda] = \left[\lambda_1,\ \lambda_2,\ \cdots,\ \lambda_n\right]$，$[\lambda'] = \left[\lambda'_1,\ \lambda'_2,\ \cdots,\ \lambda'_n\right]$，第一个不等于零的$\lambda_i - \lambda'_i$，一定满足$\lambda_i > \lambda'_i$，比如：



）

则存在两个数码位于T的同一行与T'的同一列。

证明：

反证法，设杨盘T中任意两个同行的数码均处在T'的不同列中。这样的话要想让T中第一行的λ_1个数字出现在T'的不同列中，需要$\lambda'_1 \geq \lambda_1$。而已知条件是$[\lambda]>[\lambda']$，所以$\lambda'_1$只能等于$\lambda_1$。这样处理完以后，$T'$的第一行被T第一行的数字占满。再看第二行，同样道理，也有$\lambda'_2 = \lambda_2$。第二行也被占满，类推，最终会有$[\lambda'] = [\lambda]$。这与已知$[\lambda]>[\lambda']$矛盾，因此假设不成立，当$[\lambda]>[\lambda']$时，T和T'必存在两个数码位于T的同一行与T'的同一列。

引理 6.4 若有两个数字，位于杨盘T的同一行与杨盘T'的同一列，则它们的杨算符$\hat{E}(T')\hat{E}(T) = 0$。

证明：

设数字a_1、a_2是位于杨盘T的同一行与杨盘T′的同一列的两个数码，则有对换$t = \left(a_1, a_2\right)$，这个对换既属于杨盘T的行置换R(T)，又属于杨盘T′的列置换C(T′)。而R(T)、C(T′)又同时为S_n的子群，且$t^2 = s_0$，t为奇置换，$\delta_t = -1$。由重排定理，我们知道：

$$t\hat{P}(T) = t\sum_{\hat{p}\in R(T)} \hat{p} = \hat{P}(T)$$

$$\hat{Q}(T')t = \sum_{\hat{q}\in C(T')} \delta_q \hat{q}\, \delta_t \delta_t t = \delta_t \sum_{\hat{q}\in C(T')} \delta_q \delta_t \hat{q}\, t = \delta_t \sum_{\widehat{qt}\in C(T')} \delta_{qt} \widehat{qt} = \delta_t \hat{Q}(T')$$

这样的话就会有：

$$\hat{Q}(T')\hat{P}(T) = \hat{Q}(T')s_0\hat{P}(T) = \hat{Q}(T')tt\hat{P}(T) = \delta_t\hat{Q}(T')\hat{P}(T) = -\hat{Q}(T')\hat{P}(T)$$

因此$\hat{Q}(T')\hat{P}(T) = 0$。

对于这个式子，再左乘$\hat{P}(T')$、右乘$\hat{Q}(T)$，就会有：

$$\hat{P}(T')\hat{Q}(T')\hat{P}(T)\hat{Q}(T) = 0$$

进而：

$$\hat{E}(T')\hat{E}(T) = 0。$$

得证。

这样的话，结合引理 6.3 与 6.4，我们就知道当T、T′属于不同杨图$[\lambda]$、$[\lambda']$，且$[\lambda]>[\lambda']$时，有$\hat{E}(T')\hat{E}(T) = 0$。

引理 6.5 设置换群S_n的群代数R_{S_n}中的矢量$\vec{x} = \sum_{s\in S_n} x_s s$，T为$S_n$的杨盘。若$\forall \hat{p} \in R(T)$，$\forall \hat{q} \in C(T)$，$\hat{p}\vec{x}\hat{q} = \delta_q \vec{x}$，则$\vec{x}$与T盘的杨算符$\hat{E}(T)$相差一个常数因子，即$\vec{x} = \theta\hat{E}(T)$，常数θ与$\vec{x}$有关，为$\vec{x}$中$s_0$的系数。

（这个引理说的是群代数R_{S_n}中对一个特定的T满足$\hat{p}\vec{x}\hat{q} = \delta_q\vec{x}$的向量$\vec{x}$的性质，它在证明下一个引理时会用到。课上如果讲这个附录，时间又紧，从逻辑关系上这个证明的过程可以略过）

证明：

分两步，第一步证S_n中不能写成$\hat{p}\hat{q}$形式的群元s一定可以表示为$\hat{p}s\hat{q}$的形式，即$s=\hat{p}s\hat{q}$，其中$\hat{p} \in R(T)$，$\hat{q} \in C(T)$。

令$T' = sT$，由于s不具备$\hat{p}\hat{q}$的形式，由引理 5.2 的逆否命题，知至少存在两个数码a_1、a_2，位于T的同一行，T'的同一列。

取$t = \left(a_1，a_2\right)$，有$t \in R(T) \cap C(T')$，$t^2 = s_0$。由于$T = s^{-1}T'$，由引理 6.1 可知$t \in C(T')$时$s^{-1}ts \in C(T)$。这样的话，如果我们取$\hat{p} = t$、$\hat{q} = s^{-1}ts$，则

$$\hat{p}s\hat{q} = tss^{-1}ts = t^2s = s$$

第二步，由$\hat{p}\vec{x}\hat{q} = \delta_q\vec{x}$来求$\vec{x}$。由于$\vec{x} = \sum_{s\in S_n} x_s s$，只需定出展开系数$x_s$即可。这样的话，一方面

$$\hat{p}\vec{x}\hat{q} = \hat{p}\sum_{s\in S_n} x_s s\,\hat{q} = \sum_{s\in S_n} x_s \hat{p}s\,\hat{q}$$

另一方面

$$\delta_q\vec{x} = \sum_{s\in S_n} \delta_q x_s s$$

要想$\hat{p}\vec{x}\hat{q} = \delta_q\vec{x}$成立，需$\sum_{s\in S_n} x_s \hat{p}s\,\hat{q} = \sum_{s\in S_n} \delta_q x_s s$。

当s不具备$\hat{p}\hat{q}$的形式时，由于$\hat{p}s\hat{q} = s$，上式左边这个s上的分量是$\delta_q x_s$，右边这个s上的分量是x_s，由于$\hat{q} = s^{-1}ts$为奇置换，所以$\delta_q = -1$。因此$x_s = -x_s$，$x_s = 0$。

当s具备$\hat{p}\hat{q}$的形式时，取该$\hat{p}$、$\hat{q}$代入$\hat{p}\vec{x}\hat{q} = \delta_q\vec{x}$，并看该$\hat{p}\hat{q}$分量的系数。由$\sum_{s\in S_n} x_s \hat{p}s\,\hat{q} = \sum_{s\in S_n} \delta_q x_s s$这个等式，知左边的$\hat{p}\hat{q}$系数是$x_{s_0}$，而右边的$\hat{p}\hat{q}$项系数是$\delta_q x_{pq}$，于是$x_{s_0} = \delta_q x_{pq}$。取$\theta = x_{s_0}$，有$x_{pq} = \delta_q\theta$。对不同的具备$\hat{p}\hat{q}$的形式的s，$\vec{x}$在它上面的分量$x_s = x_{pq} = \delta_q\theta$，其中$\theta$与$\vec{x}$有关。

两者综合起来，就是对于对$\forall\hat{p} \in R(T)$、$\forall\hat{q} \in C(T)$，满足$\hat{p}\vec{x}\hat{q} = \delta_q\vec{x}$的$R_{S_n}$中的矢量$\vec{x}$，其分量满足：

$$x_s=\begin{cases}0\text{，当 s 不具备}\hat{p}\hat{q}\text{的形式}\\ \delta_q\theta\text{，当 s 具备}\hat{p}\hat{q}\text{的形式}\end{cases}$$

这样的话：

$$\vec{x}=\sum_{s\in S_n}x_s s=\sum_{\substack{p\in R(T)\\ q\in C(T)}}x_{pq}\hat{p}\hat{q}=\sum_{\substack{p\in R(T)\\ q\in C(T)}}\delta_q\theta\hat{p}\hat{q}=\theta\hat{E}(T)$$

其中θ与$\vec{x}$有关。引理得证。

引理 6.6 杨盘T的杨算符$\hat{E}(T)$是置换群S_n的群代数R_{S_n}中的一个本质的本原幂等元，不变子空间$R_{S_n}\hat{E}(T)$是置换群S_n的一个不可约表示的表示空间，其维数是n！的因子。

证明：

第一步，证$\hat{E}(T)$就是群代数R_{S_n}中幂等元（利用引理 6.5）。

对$\forall\hat{p}\in R(T)$、$\forall\hat{q}\in C(T)$，由重排定理，有：

$$\hat{p}\hat{E}(T)^2\hat{q}=\hat{p}\hat{P}(T)\hat{Q}(T)\hat{P}(T)\hat{Q}(T)\hat{q}=\hat{P}(T)\hat{Q}(T)\hat{P}(T)\delta_q\hat{Q}(T)=\delta_q\hat{E}(T)^2$$

结合引理 6.5，我们知道$\hat{E}(T)^2$一定具备$\theta\hat{E}(T)$的形式。这样的话$\hat{E}(T)^2=\theta\hat{E}(T)$，$\hat{E}(T)$为本质幂等元。其中$\theta$，由前面的讨论，知为$\hat{E}(T)^2$中$s_0$的系数，待定（因为除了$s_0$，阶为 2 的群元也会有贡献）。$\hat{E}(T)/\theta$为幂等元。

第二步，确定θ，证$\hat{E}(T)/\theta$对应的群代数R_{S_n}中群不变的子空间$R_{S_n}\hat{E}(T)/\theta$维数是n!的因子。

由正文部分的讨论，一个幂等元$\hat{E}(T)/\theta$对应一个投影算符$\hat{P}$，关系是：对$\forall\vec{x}\in R_{S_n}$，有$\hat{P}\vec{x}=\vec{x}\hat{E}(T)/\theta$。

对这个算符$\hat{P}$，取R_{S_n}的基为s_0、s_1、…、$s_{n!-1}$，则表示矩阵对角元满足：

$$P_{jj}=\left(\hat{P}s_j\right)_{s_j}=\left(s_j\hat{E}(T)/\theta\right)_{s_j}$$

其中$\hat{E}(T)$贡献的，必为s_0。而$\hat{E}(T)$的s_0分量的系数是 1，所以$P_{jj}=1/\theta$。这样算符

$\widehat{\mathrm{P}}$的迹就是$\mathrm{n}!/\theta$。

线性变换后，取$\mathrm{R}_{\mathrm{S}_\mathrm{n}}$的基$\mathrm{v}_1$、$\mathrm{v}_2$、 ⋯、$\mathrm{v}_\mathrm{f}$、$\mathrm{v}_{\mathrm{f}+1}$、 ⋯、$\mathrm{v}_{\mathrm{n}!}$，其中$\mathrm{v}_1$、$\mathrm{v}_2$、 ⋯、$\mathrm{v}_\mathrm{f}$为$\mathrm{R}_{\mathrm{S}_\mathrm{n}}\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})/\theta$所对应的群不变的子空间W的基。这时，对$1 \le \mathrm{j} \le \mathrm{f}$，有$\mathrm{v}_\mathrm{j} \in \mathrm{R}_{\mathrm{S}_\mathrm{n}}\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})/\theta$，因此$\widehat{\mathrm{P}}\mathrm{v}_\mathrm{j} = \mathrm{v}_\mathrm{j}$，它们所对应的$\left(\widehat{\mathrm{P}}\mathrm{v}_\mathrm{j}\right)_\mathrm{j} = 1$。而对$\mathrm{j} > \mathrm{f}$，$\widehat{\mathrm{P}}\mathrm{v}_\mathrm{j} = \mathrm{v}_\mathrm{j}\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})/\theta \in \mathrm{W}$，它在$\mathrm{v}_\mathrm{j}$上的分量为零。所以$\left(\widehat{\mathrm{P}}\mathrm{v}_\mathrm{j}\right)_\mathrm{j} = 0$。这样的话算符$\widehat{\mathrm{P}}$的迹就是f。而这段的讨论与上面一段的讨论差的就是一个线性变换，不改变矩阵的迹，所以$\mathrm{f} = \mathrm{n}!/\theta$。由于f必为整数，而$\theta$为$\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})^2$中$\mathrm{s}_0$的系数，也必为整数，f必为n!的因子。

第三步，证幂等元$\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})/\theta$为本原幂等元（利用本原幂等元判别定理以及引理 6.5）。

对$\forall\vec{\mathrm{x}} \in \mathrm{R}_{\mathrm{S}_\mathrm{n}}$，$\hat{\mathrm{p}} \in \mathrm{R}(\mathrm{T})$，$\hat{\mathrm{q}} \in \mathrm{C}(\mathrm{T})$，有

$$\hat{\mathrm{p}}\left(\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right)\vec{\mathrm{x}}\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right)\right)\hat{\mathrm{q}} = \left(\frac{\hat{\mathrm{p}}\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right)\vec{\mathrm{x}}\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})\hat{\mathrm{q}}}{\theta}\right)$$

$$= \left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right)\vec{\mathrm{x}}\delta_\mathrm{q}\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right) = \delta_\mathrm{q}\left(\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right)\vec{\mathrm{x}}\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right)\right)$$

这样结合引理 5.5，就有$\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right)\vec{\mathrm{x}}\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right) = \mu\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})$，其中$\mu$为$\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right)\vec{\mathrm{x}}\left(\frac{\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})}{\theta}\right)$中$\mathrm{s}_0$系数。

由前面讲到的本原幂等元判据定理，知$\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})/\theta$为本原幂等元，$\mathrm{R}_{\mathrm{S}_\mathrm{n}}\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})/\theta$为$\mathrm{S}_\mathrm{n}$的不可约表示空间。引理得证。

由这个引理，我们也知一个杨盘T，可求出一个本原幂等元$\widehat{\mathrm{E}}(\mathrm{T})/\theta$，从而得到n阶置换群$\mathrm{S}_\mathrm{n}$的一个不可约表示。

引理 6.7 置换群S_n同一个杨图的不同杨盘给出的不可约表示是等价的，不同杨图的杨盘给出的不可约表示是不等价的。

证明：

对S_n，群代数$\mathrm{R}_{\mathrm{S}_\mathrm{n}}$是群元素算符的不变空间，对应的表示是正则表示，现在我们考虑左正则表示$\mathrm{L}(\mathrm{g})$，$\mathrm{g} \in \mathrm{S}_\mathrm{n}$。

设有两个杨盘T与T'，杨算符分别是$\widehat{E}(T)$、$\widehat{E}(T')$，它们是本质幂等元，对应的不可约表示为$A(g)$、$A'(g)$，表示空间为$W = R_{S_n}\widehat{E}(T)$、$W' = R_{S_n}\widehat{E}(T')$，群空间向它们的表示空间得投影算符是$\widehat{P}$、$\widehat{P'}$。设$\widehat{E}^2(T) = \theta\widehat{E}(T)$、$\widehat{E}^2(T') = \theta'\widehat{E}(T')$，取其相应幂等元为$\vec{e} = \theta^{-1}\widehat{E}(T)$、$\vec{e}' = {\theta'}^{-1}\widehat{E}(T')$。

第一步，我们需要先说明：杨算符$\widehat{E}(T)$、$\widehat{E}(T')$所对应的不可约表示等价的充要条件是至少存在一个群代数R_{S_n}中的元素$\vec{c}$，使得$\widehat{E}(T)\vec{c}\widehat{E}(T') \neq 0$。

先看充分性，由至少存在一个群代数R_{S_n}中的元素$\vec{c}$，使得$\widehat{E}(T)\vec{c}\widehat{E}(T') \neq 0$，来推$\widehat{E}(T)$、$\widehat{E}(T')$所对应的不可约表示等价。

若$\widehat{E}(T)\vec{c}\widehat{E}(T') \neq 0$，可定义映射$\widehat{P}''$：$W \to W'$，操作规则是对$\forall\vec{w} \in W$，$\widehat{P}''\vec{w} = \vec{w}\vec{e}\vec{c}\vec{e}'$。这里，由于$\vec{w}\vec{e}\vec{c}\vec{e}' = \widehat{P'}(\vec{w}\vec{e}\vec{c}) \in W'$，所以定义的$\widehat{P}''$作用到$W$中向量时，得到的新的向量属于$W'$。我们需要证明$\widehat{P}''$是从$W$到$W'$的一一满映射。

这个证明很简单。先定义$\widehat{P}''$作用到W上得到的向量的合集是W''，W''是W'的子集，只要证明它非空，且群不变，就可以利用W'是不可约表示的表示空间得到W''等于W'。这个是第一步满映射，之后再证明是单射，两者结合，就是一一满映射了。

具体过程先看满映射，$W'' = \widehat{P}''W = \{\vec{w}\vec{e}\vec{c}\vec{e}' | \vec{w} \in W\}$，对$\forall\vec{w}'' = \vec{w}\vec{e}\vec{c}\vec{e}' \in W''$，有：

$$L(g)\vec{w}'' = g\vec{w}'' = g\vec{w}\vec{e}\vec{c}\vec{e}' = (L(g)\vec{w})\vec{e}\vec{c}\vec{e}' \in W''$$

所以W''是群不变的子空间。同时对$\vec{e} \in W$，有$\vec{e}\vec{e}\vec{c}\vec{e}' = \vec{e}\vec{c}\vec{e}' \neq 0$，所以$W''$非空。结合$W''$是不可约表示的表示空间，$W'' = W'$。满映射成立。

单射：若不同$\vec{w}_1$、$\vec{w}_2 \in W$对应$\widehat{P}''\vec{w}_1 = \widehat{P}''\vec{w}_2$，则$\widehat{P}''(\vec{w}_1 - \vec{w}_2) = 0$，进而$(\vec{w}_1 - \vec{w}_2)\vec{e}\vec{c}\vec{e}' = 0$。由于$\vec{w}_1 - \vec{w}_2$不为零，所以$\vec{e}\vec{c}\vec{e}' = 0$，与已知矛盾（已知是$\widehat{E}(T)\vec{c}\widehat{E}(T') \neq 0$，因此$\vec{c} \neq 0$、$\vec{e}\vec{c}\vec{e}' \neq 0$）。因此$\widehat{P}''$不光是满映射，还是单射。存在逆$\widehat{P}''^{-1}$。

这个时候，因为对$\forall\vec{w}\in W$，有：

$$\hat{P}''L(g)\vec{w}=\hat{P}''(g\vec{w})=(g\vec{w})\vec{e}\vec{c}\vec{e}'=g(\vec{w}\vec{e}\vec{c}\vec{e}')=L(g)\hat{P}''\vec{w}$$

左边，$L(g)$是作用在$\vec{w}$的线性空间W的；右边，$L(g)$是作用在$\hat{P}''\vec{w}$的线性空间W'的。同时这个等式对$\forall\vec{w}\in W$成立。因此，写成表示的形式，就有：

$$\hat{P}''A(g)=A'(g)\hat{P}''$$

而$\hat{P}''^{-1}$存在，所以$A'(g)=\hat{P}''A(g)\hat{P}''^{-1}$，$A$与$A'$等价。充分性得证。

必要性，由A与A'等价来证至少存在一个群代数R_{S_n}中的元素$\vec{c}$，使得$\hat{E}(T)\vec{c}\hat{E}(T')\neq 0$。既然等价，一定存在$\hat{P}''$，使得对$\forall g\in S_n$，$\forall\vec{w}\in W$，有：

$$\hat{P}''A(g)\vec{w}=A'(g)\hat{P}''\vec{w}$$

即

$$\hat{P}''g\vec{w}=g\hat{P}''\vec{w}$$

由于$\hat{P}''$为非奇异线性算符，可通过线性组合使得对$\forall\vec{x}\in R_{S_n}$，有$\hat{P}''\vec{x}\vec{w}=\vec{x}\hat{P}''\vec{w}$。

定义$\vec{c}=\hat{P}''\vec{e}$，由于$\hat{P}''$为非奇异线性算符，所以$\vec{c}\neq 0$。对这样定义的$\vec{c}$，有：

$$\vec{c}=\hat{P}''\vec{e}\vec{e}=\vec{e}\hat{P}''\vec{e}=\vec{e}\vec{c}$$

同时由于$\vec{c}\in W'$，还存在$\vec{c}\vec{e}'=\hat{P}'\vec{c}=\vec{c}$，进而：

$$\vec{c}=\vec{e}\vec{c}\vec{e}'$$

由于$\vec{c}\neq 0$，所以$\vec{e}\vec{c}\vec{e}'\neq 0$，进而$\hat{E}(T)\vec{c}\hat{E}(T')\neq 0$。

现在是证明了杨算符$\hat{E}(T)$、$\hat{E}(T')$所对应的不可约表示等价的充要条件是至少存在一个群代数R_{S_n}中的元素$\vec{c}$，使得$\hat{E}(T)\vec{c}\hat{E}(T')\neq 0$。下面看杨盘$T$与$T'$属于与不属于同一个杨图时，会发生什么事情？

当杨盘T与T'属于同一个杨图时，由前面的讨论，必存在$r\in S_n$，且$\vec{r}\neq 0$，使得$T'=rT$，进而$\hat{E}(T')=r\hat{E}(T)r^{-1}$。

此时，有$r^{-1}\in R_{S_n}$，使得$\hat{E}(T)r^{-1}\hat{E}(T')=r^{-1}\hat{E}^2(T')=\theta r^{-1}\hat{E}(T')$。这个$\hat{E}(T)r^{-1}\hat{E}(T')\neq 0$，因为不然的话就会有$\hat{E}(T')=0$。正文中，定义 6.5 讨论过，杨算符一定不为零。

这样的话由上半部分的讨论，结合$\widehat{E}(T)r^{-1}\widehat{E}(T') \neq 0$，就知道$\widehat{E}(T)$、$\widehat{E}(T')$所对应的不可约表示等价。

另一种情况，就是T与T'属于不同杨图$[\lambda]$、$[\lambda']$。不同的两个杨图可以通过之前的讨论定义大小，不失一般性，取$[\lambda] > [\lambda']$。这样的话对$\forall s \in S_n$，我们知道杨盘sT的杨算符是$s\widehat{E}(T)s^{-1}$。

这个时候，由引理 5.4，不同杨图的杨盘对应的杨算符满足$\widehat{E}(T')s\widehat{E}(T)s^{-1} = 0$。两边乘上$s$，有$\widehat{E}(T')s\widehat{E}(T) = 0$。这个时候，由$s$的一般性，可知对$\forall \vec{x} \in R_{S_n}$，都有$\widehat{E}(T')\vec{x}\widehat{E}(T) = 0$。这样，同样结合上面的讨论，知道$T$与$T'$对应的不可约表示相互之间不等价。

这七个引理结合在一起，就给出了杨盘定理的全部内容。