物理类专业系列教材

物理学中的群论基础

徐建军　编著

清华大学出版社

ISBN 978-7-302-23393-0



定价：29.00元

物理类专业系列教材

物理学中的群论基础

徐建军　编著

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书为物理学中涉及的群论知识的简明教程，适合理工科各相关专业学生使用。全书共分7章，其中第1章介绍群论的基本概念，第2章讨论群的表示，第3章是群论在量子力学中的应用，第4章则是点群和空间群的介绍，第5章给出置换群的主要结果，最后两章分别是Lie群和Lie代数的初步论述。书末提供习题答案与提示，一些重要结果则以附录的形式给出。

版权所有，侵权必究。侵权举报电话：010-62782989　13701121933

图书在版编目(CIP)数据

物理学中的群论基础/徐建军编著. --北京：清华大学出版社，2010.9
(物理类专业系列教材)
ISBN 978-7-302-23393-0
Ⅰ.①物… Ⅱ.①徐… Ⅲ.①群论－应用－物理学－高等学校－教材 Ⅳ.①O411.1
中国版本图书馆CIP数据核字(2010)第156822号

责任编辑：邹开颜
责任校对：刘玉霞
责任印制：杨　艳
出版发行：清华大学出版社　　**地　　址**：北京清华大学学研大厦A座
http://www.tup.com.cn　　**邮　　编**：100084
社　总　机：010-62770175　　**邮　购**：010-62786544
投稿与读者服务：010-62776969，c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质　量　反　馈：010-62772015，zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 装 者：清华大学印刷厂
经　　销：全国新华书店
开　　本：185×260　**印　张**：14.5　**字　数**：332千字
版　　次：2010年9月第1版　　**印　　次**：2010年9月第1次印刷
印　　数：1～3000
定　　价：29.00元

产品编号：032546-01

目　录

引论 ····· 1

第 1 章　群论的基本概念 ····· 5

1.1　群的定义 ····· 5

1.2　子群，重排定理 ····· 7

1.3　共轭类，陪集 ····· 10

1.4　群的同态和同构 ····· 15

1.5　群的直积 ····· 17

习题 1 ····· 19

第 2 章　群的表示 ····· 20

2.1　表示的定义 ····· 20

2.2　群表示论的一些基本定理 ····· 24

2.3　正则表示 ····· 35

2.4　基础表示 ····· 38

2.5　诱导表示 ····· 39

2.6　特征标表 ····· 41

2.7　表示的直积，C-G 系数 ····· 44

2.8　投影算符 ····· 48

习题 2 ····· 52

第 3 章　群论与量子力学 ····· 54

3.1　Schrödinger 方程和对称算符 ····· 54

3.2　不可约张量算符和 Wigner-Eckart 定理 ····· 58

3.3　实表示 ····· 60

3.4　时间反演对称和附加简并 ····· 63

习题 3 ····· 66

第 4 章　点群和空间群 ····· 67

4.1　Euclid 群 ····· 67

4.2　点群中的对称算符和对称元素 ····· 69

4.3　第一类点群 ····· 73

4.4　第二类点群 ····· 77

4.5　Bravais 格子和空间群 ····· 81

4.6　平移群的不可约表示 ····· 90

4.7　空间群的不可约表示 ····· 93

习题 4 ····· 99

第 5 章 置换群 ····· 101
5.1 置换 ····· 101
5.2 共轭类，配分和 Young 图 ····· 103
5.3 Frobenius 公式和图形方法 ····· 107
5.4 Young 算符 ····· 111
5.5 外积 ····· 114
习题 5 ····· 116
第 6 章 Lie 群 ····· 118
6.1 Lie 群的定义 ····· 118
6.2 SO(3) 群和 SU(2) 群 ····· 125
6.3 无穷小生成元和无穷小算符 ····· 128
6.4 SU(2) 群的不可约表示 ····· 140
6.5 群上的不变积分 ····· 143
6.6 SU(2) 群和 SO(3) 群的同态映射 ····· 145
6.7 角动量及其耦合 ····· 151
6.8 转动矩阵 $\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的一些性质 ····· 159
6.9 Lorentz 群及其表示 ····· 162
6.10 经典 Lie 群的张量表示 ····· 166
习题 6 ····· 170
第 7 章 Lie 代数 ····· 172
7.1 Lie 代数 ····· 172
7.2 伴随表示 ····· 176
7.3 Killing 形式 ····· 177
7.4 单根与 Dynkin 图 ····· 177
7.5 权与 Lie 代数的表示 ····· 185
7.6 Casimir 算符 ····· 188
习题 7 ····· 189
习题答案与提示 ····· 190
附录 ····· 199
附录 A 线性代数 ····· 199
附录 B 点群操作的矩阵表示 ····· 203
附录 C 点群的特征标表 ····· 205
附录 D 置换群的特征标表 ····· 209
附录 E 230 个空间群 ····· 211
附录 F Clebsch-Gordon 系数 ····· 214
附录 G 经典 Lie 代数的 Dynkin 图 ····· 218
参考文献 ····· 222
索引 ····· 225

引　论

群论是现代数学的一个分支，即抽象代数学 (近世代数学) 的一部分。群论也是用来描写物理世界对称性的一个非常有用的数学工具。

自然界中有许多对称现象，例如雪花，古人很早就注意到其特殊的对称性 (见图 0.1)，两千多年前的《韩诗外传》一书中就有“凡草木花多五出，雪花独六出”的说法。古希腊学者 Pythagoras 也早在两千五百多年前就证明了正多面体只有正四面体、立方体、正八面体、正十二面体和正二十面体 5 种。正是由于人们对自然界中各种对称现象的长期观察，才逐渐产生了对称的概念。

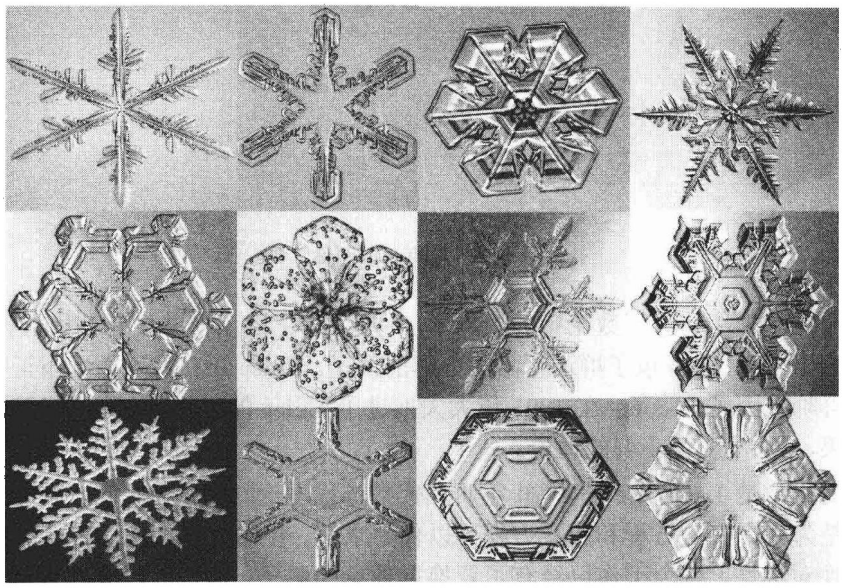


图 0.1　漂亮的雪花

群论的概念实际上主要来自于三个部分，即 19 世纪开始兴起的非欧几何、数论及 18 世纪末开始的代数方程理论研究，正是这些研究导致了置换群理论研究的开始。

几何学的研究从古希腊的 Euclid 几何开始，到 19 世纪后逐渐与直接度量分离，开始往非欧几何的方向发展，而对 n 维空间几何的研究则使数学家开始注意到几何本身的抽象性质。

Lambert，Gauss，Lobachevsky 和 János Bolyai 等人在 19 世纪开始了对非欧几何的研究，尽管当时还完全没有群的概念，但 Möbius 在 1827 年实际上已经开始了将几何按照在特定群作用下的不变量性质来进行分类的工作，Steiner 在 1832 年的工作则成为变换群理论的开端。

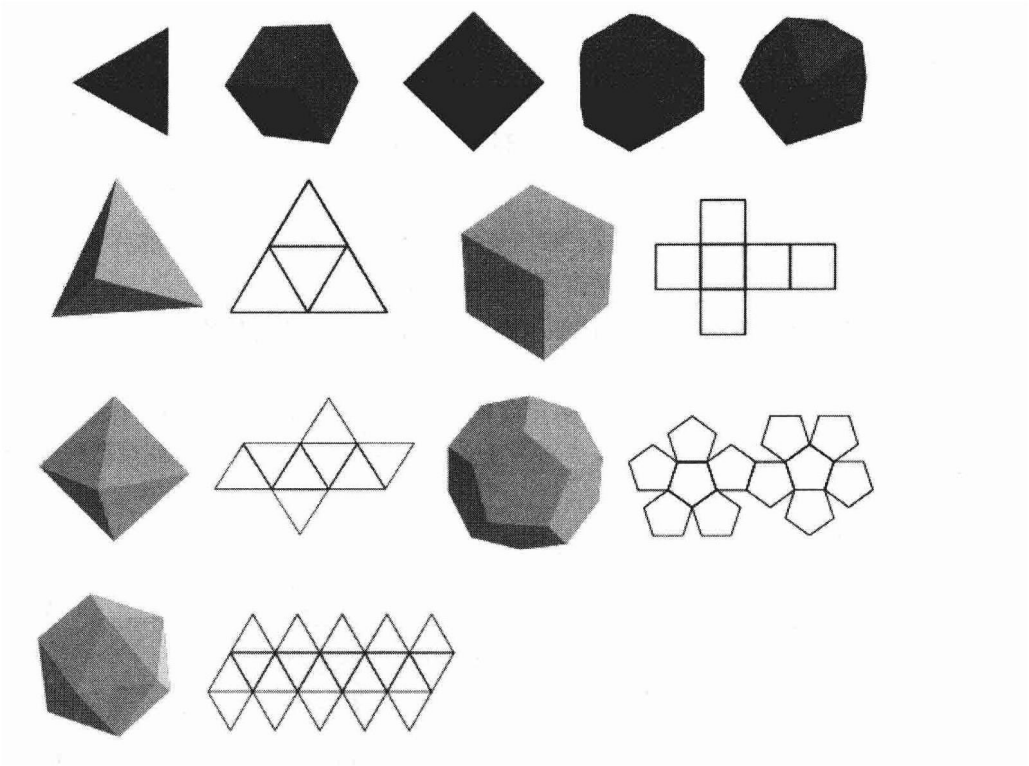


图 0.2 五种正多面体

Euler 在 1761 年研究了数论中的模算术，尽管 Euler 的工作并没有使用群论的语言，但实际上给出了 Abel 群按子群进行陪集分解的例子。Euler 还在特殊情况下证明了子群的阶数是群阶的因子。Gauss 在 1801 年大大推进了 Euler 的工作，在模算术等领域取得了显著成果，丰富了 Abel 群的理论。

置换的概念是 Lagrange 在 1770 年研究代数方程理论时提出的，他当时的主要目的是想弄清楚为什么三次方程和四次方程可以代数求解。在研究中，Lagrange 注意到了方程根的置换对称性，这个工作已经有了置换群理论的影子，但他并没有在最终的论文中提到群论。

第一个指出五次方程不能代数求解的人是 Ruffini，在 1799 年，他发表论文证明了一般的五次方程不可代数求解。Ruffini 的工作建立在 Lagrange 的基础之上，他引入了置换群的概念。

Cauchy 在发展置换群理论方面做出了很大贡献。他从 1815 年开始研究方程根的置换，到 1844 年转而研究置换本身的性质，Cauchy 还引入了循环和共轭的概念。

Galois 在 1831 年第一次认识到了代数方程的可解性和某个与方程对应的置换群的结构密切相关，即代数方程存在根式解的充要条件是所对应的群可解。他的工作是 19 世纪数学中最杰出的成就之一，Galois 理论是代数学发展中的一个里程碑。在 Galois 之前，代数学研究的中心问题是代数方程的求根问题；而在 Galois 之后，其中心问题转化为研究群、环、域等代数系统的结构与分类，这就步入了近世代数的时代。

但十分可惜，Galois 的工作在他生前无人能够理解，直到 1846 年由 Liouville 整理发表后才为世人所知。虽然 Liouville 清楚地看到了 Cauchy 的置换群理论和 Galois 工作之间的关系，但是他并没有意识到 Galois 的工作在奠定群论基础方面的重要性，而最终是由 Betti 首先看到了 Galois 关于代数方程的群就是现代意义上的置换群这个事实。

1849 年，Cayley 对群论的发展作出了重要贡献，他给出了抽象群的定义并给出了乘法表，认识到矩阵集合和四元数都可以构成群。但 Cayley 的工作超越了当时的时代，因而在当时没有产生太大的影响。1878 年后他证明了 Cayley 定理和其他许多重要结果，大大促进了群论的研究，直接引发了 Hölder 的研究工作。

Jordan 在 1865 至 1870 年间的工作真正认识到了置换群的重要意义，清晰而全面地阐述了 Galois 理论，为群论在 19 世纪最后 30 年间的发展奠定了基础。Jordan 给出了置换群的 Jordan-Hölder 定理。Hölder 在 1889 年给出了这一定理在抽象群意义下的完整证明。

Klein 在 1872 年提出了著名的 Erlangen 纲领，给出了几何学按对称群的分类，群论从此走上了数学的中心舞台。

Frobenius 及其学生 Schur 和 Kronecker 的学生 Netto 等人将群论的研究大大推进，其后 Klein 的学生 von Dyck 引进了生成元的概念，开始抽象群论的系统研究，群的表示理论应运而生。

随着 Burnside 的《有限群理论》在 1897 年的出版，真正的群论时代到来了。Heinrich Weber (Dedekind 的学生) 的两卷本《代数教程》也在 1895 年出版并成为了标准教科书。这些著作影响了几代数学家，对群论的发展起了巨大作用。

1831 年，Hessel 首次给出了 32 个三维晶格点群 (正交群 O(3) 的分立有限子群) 的分类，由格点周期性排列构成的网络具有晶格空间群对称的结论是首先由 Frankenheim 在 1835 年发现的，随后 Bravais 给出了 14 种晶格类型。Klein 建议找出所有三维空间的晶格空间群，到 1891 年，Schönflies 和 Fedorov 找到了所有的 230 个晶格空间群。在 19 世纪末，Fedorov，Schönflies 和 Barlow 给出了二维空间的 17 个空间群。

20 世纪 70 年代利用计算机证明了四维空间的空间群有 4783 个。五维以上高维空间的空间群个数还没有明确的答案，但 Bieberbach 在 1910 年证明了任意维空间的空间群数目都是有限的，这实际上是 Hilbert 在 1900 年提出的 23 个问题中第 18 个问题的一部分。

1890 年，Lie 试图将 Galois 理论推广到微分方程领域，这导致了 Lie 群和 Lie 代数理论的建立。1893 年，Lie 和 Friedrich Engel 出版了《变换群理论》。

1890 年，Killing 完成了对复单 Lie 代数的分类，他的工作在 1894 年被 Cartan 进一步推广和严格化。到 20 世纪初，Weyl 和 Cartan 开始注意到 Lie 群的整体性质，这方面的研究直到 70 年代后在纤维丛理论中有了新的发展。

Wigner 在 1930 年之前就已经阐明了群论和量子力学之间的密切联系，并将结果总结在他的名著《群论及其在原子光谱的量子力学中的应用》一书中。从此以后，现代物理学各个领域的发展都越来越关注体系蕴含的对称性所起的重要作用，Noether 定理则给出了对称性与守恒定律之间的深刻联系。

现阶段, 群论已经在几乎所有的物理学领域都得到了广泛应用, 如固体物理、凝聚态物理、原子分子物理、核物理和粒子物理等, 在化学和生命科学等领域也已经有了诸多应用。因此, 群论现在已经成为物理系学生乃至科学工作者必不可少的一个数学工具。

本书是作者在多年来为复旦大学物理系研究生和高年级本科生开设的群论课程讲义的基础上经扩充和修改后而成的。全书共分 7 章, 内容安排如下。第 1 章介绍群论的基本概念, 第 2 章讨论群的表示, 第 3 章是群论的初步应用, 第 4 章是点群和空间群的介绍, 第 5 章给出置换群的主要结果, 最后两章分别是 Lie 群和 Lie 代数的讨论。书末给出了所有习题的答案或提示, 一些重要结果则以附录的形式给出。

作者十分感谢复旦大学物理系多年来的培养和支持, 30 多年来作者一直在这里学习和工作。作者要感谢陶瑞宝院士和胡嗣柱教授, 正是他们在 20 世纪 80 年代初所开设的群论课, 使作者第一次领略到了群论的无穷魅力。作者也要感谢多年来听课的学生们, 他们的建议和讨论使作者获益颇多。最后要感谢清华大学出版社的邹开颜编辑, 如果没有她的鼓励和帮助, 本书的出版也是不可能的。

限于作者的学识水平, 书中难免有错误和表达不当之处, 恳请读者给予批评指正。

第 1 章　群论的基本概念

群论是用来描写对称性的一个非常有用的数学工具。一个物理体系的对称性往往和某种变换联系在一起，如时空平移，空间转动，Lorentz 变换，宇称变换，相位变换等。这些对称性可以是连续对称，也可以是分立对称；可以是时空对称，也可以是内部空间对称。群论揭示了体系的对称性和守恒量之间的深刻联系。本章将介绍群论的一些基本概念和基本性质。

1.1　群 的 定 义

定义 1.1　设 G 是一个集合，在 G 上给定一个二元运算，称之为乘法运算，即给定一个映射 $G\times G\to G$，使其满足下列条件：

1. 集合 G 在乘法下是封闭的，即对任意两个元素 $g_i,g_j\in G$，有

$$g_ig_j=g_k\in G; \tag{1.1}$$

2. 乘法满足结合律，即对任意元素 $g_i,g_j,g_k\in G$，有

$$g_i(g_jg_k)=(g_ig_j)g_k; \tag{1.2}$$

3. 存在唯一的单位元 $e\in G$，对所有 $g\in G$ 满足

$$eg=ge=g; \tag{1.3}$$

4. 对每个元素 $g\in G$，都存在与之对应的唯一的逆元 $g^{-1}\in G$，满足

$$gg^{-1}=g^{-1}g=e。 \tag{1.4}$$

则称集合 G 在所给运算下构成群，这个二元运算称为群的乘法。定义中的条件称为群的公理。如果一个集合在某个乘法下构成群，那么这四条公理都必须满足。需要指出的是，所谓群的乘法不一定是普通的乘法，可以是非常一般的二元运算。

群 G 所包含的元素数目如果是有限的，则称之为有限群，如果包含的元素数目是无限的，则称之为无限群。

可以证明，条件 (1.3) 可以放宽为只要求 $eg=g$ 或 $ge=g$，条件 (1.4) 可以放宽为只要求 $g^{-1}g=e$ 或 $gg^{-1}=e$，即单位元和逆元是唯一的。下面给出一些简单例子。

例 1.1　$G_1=\{e\}$，这是最简单的只包含一个元素 (即单位元) 的平凡群。

例 1.2　$G_2=\{e,a\}$，最简单的非平凡群至少包含两个元素，其中一个必须是单位元。记另一个元素为 a，则容易推得群元之间的乘法关系

$$ae=ea=a,\quad aa=a^2=e,\quad a^{-1}=a。$$

物理上有很多只包含两个元素的对称群。例 1.2 中的元素 a 可以是字称变换 $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$，数字 1 和 2 的置换，绕某定轴旋转 π 角等。

例 1.3 $G_3 = \{e, a, b\}$，对于包含三个元素的群，容易看到有 $ab = e$ (因为不可能有 $ab = a$ 或 $ab = b$)，因此有 $a^2 = b$ (不可能有 $a^2 = a$ 或 $a^2 = e$)，进一步有 $b^2 = a^2 b = ae = a$。即

$$G_3 = \{a, b = a^2, e = ab = a^3\}。$$

注意到 1 的三次根构成的集合 $\{1, \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i}/3}, \mathrm{e}^{4\pi \mathrm{i}/3}\}$ 在普通乘法下是具有上述结构的三阶群，绕正三角形的中心轴分别转动 $\{2\pi/3, 4\pi/3, 2\pi\}$ 也构成类似的三阶群。这一结构可以推广为

$$G_n = \{a, a^2, \cdots, a^{n-1}, a^n = e\}。 \tag{1.5}$$

具有 (1.5) 式中结构的群称为循环群。下面给出几个重要定义。

定义 1.2 如果群 G 的乘法是可交换的，即对任意的 $a, b \in G$ 有 $ab = ba$，则称群 G 是 Abel 群。否则称其为非 Abel 群。

定义 1.3 如果群 G 是有限群，则 G 所包含元素的数目称为群 G 的阶。

定义 1.4 对于任意群元 $a \in G$，满足方程 $a^n = e$ 的最小正整数 n 称为群元 a 的阶。

易见，n 阶群元 a 可以生成 n 阶循环群。

例 1.4 最简单的非循环群是四阶群。四阶群 $G_4 = \{e, a, b, c\}$ 有两种结构，一种是循环群，记为

$$G_4^1 = \{a, b = a^2, c = a^3, e = a^4\},$$

其中下标 4 表示群 G 的阶数，上标 1 表示四阶群的第一种结构，后文沿用这一记号。非循环群记为 $G_4^2 = \{e, a, b, c\}$，其中群元满足下列关系：

$$a^2 = b^2 = c^2 = e, \quad ab = ba = c, \quad ac = ca = b, \quad bc = cb = a。$$

这个群可以用一个几何对称群，即 D_2 点群来具体实现。从图 1.1 中容易看到，绕相应的轴旋转 π 角将保持图形不变。

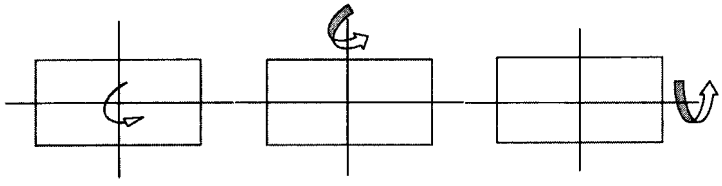


图 1.1 矩形的对称转动

例 1.5 实数集合 $\mathbf{R}$ 在普通加法下构成群，其中单位元和实数 a 的逆元分别为

$$e = 0, \quad a^{-1} = -a。$$

n 维实数空间 $\mathbf{R}^n$ 中的点 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 可以看成是 n 维空间中的向量，因此 n 维空间中的向量集合在向量加法下构成群。

易见，整数集合 $\mathbf{Z}$ 在普通加法下也构成群，但正整数集合 $\mathbf{Z}_+$ 在普通加法下不构成群。如果定义模 n 的加法，则集合

$$Z_n = \{0, 1, 2, \cdots, n-1\}$$

构成群。其中当 $p+q \geqslant n$ 时定义 $p+q \equiv p+q-n$。

例 1.6 非零实数集合 $\mathbf{R}^*$ 在普通乘法下构成群，其中单位元和实数 a 的逆元分别为

$$e = 1, \quad a^{-1} = 1/a。$$

显然，非零有理数集合 $\mathbf{Q}^*$ 在普通乘法下构成群，模为 1 的复数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ 在普通乘法下也构成群。

例 1.7 下列 2×2 矩阵集合在矩阵乘法下构成群：

$$g_1 = e = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad g_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad g_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad g_4 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$g_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad g_6 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad g_7 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad g_8 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}。$$

由于

$$g_5 g_6 = g_2 \neq g_6 g_5 = g_3,$$

所以这是非 Abel 群。不难得到

$$g_2^2 = g_3^2 = g_4^2 = g_5^2 = g_8^2 = g_6 g_7 = g_7 g_6 = g_1 = e。$$

例 1.8 所有非奇异的 $n \times n$ 矩阵集合在矩阵乘法下构成群，其中单位元即为单位矩阵，逆元即为相应的逆矩阵。这个群通常称为一般线性变换群，记为 $\mathrm{GL}(n, \mathbf{R})$ 或 $\mathrm{GL}(n, \mathbf{C})$。它实际上是第 6 章将要讨论的 Lie 群的一种。

1.2 子群，重排定理

最简单的非 Abel 群是六阶群。可以证明，六阶群也只有两种结构，其中一个是循环群

$$G_6^1 = \{a, a^2, a^3, a^4, a^5, a^6 = e\},$$

另一个是最简单的非 Abel 群 $G_6^2 = \{e, a, b, c, d, f\}$，满足关系

$$a^2 = b^2 = c^2 = e, \quad d^2 = f, \quad f^2 = d, \quad fd = df = e。$$

例 1.9 保持正三角形不变的所有转动对称变换构成六阶非 Abel 群，即点群 D_3。一共有 6 个对称操作使正三角形不变 (见图 1.2)：

e 恒等变换；

c_3^1, c_3^2 分别绕中心点 O 逆时针旋转 $2\pi/3$ 和 $4\pi/3$ 角；

c_{2x}, c_{2y}, c_{2z} 分别绕 x, y, z 轴旋转 π 角。

容易证明，这些操作是不可交换的，如 $c_3^1 c_{2x} = c_{2z} \neq c_{2x} c_3^1 = c_{2y}$ 等。

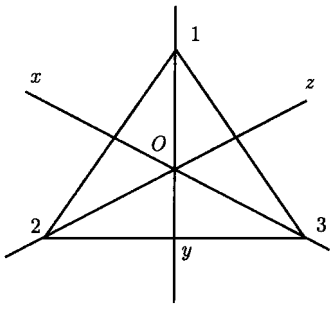


图 1.2 正三角形的对称操作

例 1.10 三个符号 $1,2,3$ 的所有可能置换也构成六阶非 Abel 群，即置换群 S_3。我们可以将置换写成

$$\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix} = e, \quad \begin{pmatrix}123\\213\end{pmatrix} = (12), \quad \begin{pmatrix}123\\132\end{pmatrix} = (23),$$

$$\begin{pmatrix}123\\321\end{pmatrix} = (31), \begin{pmatrix}123\\231\end{pmatrix} = (123), \begin{pmatrix}123\\312\end{pmatrix} = (132),$$

其中循环记号 (123) 表示

$$1 \to 2, \quad 2 \to 3, \quad 3 \to 1。$$

置换的乘法定义为

$$(23)(132) = \begin{pmatrix}123\\132\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\312\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}312\\213\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\312\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}123\\213\end{pmatrix} = (12)。$$

容易看到，如果我们将正三角形的顶点用 $1,2,3$ 编号，则正三角形的对称变换群就是置换群 S_3。关于置换群的详细讨论将在第 5 章进行。

定义 1.5 群 G 的子集 H 如果在和群 G 相同的乘法规则下也构成群，则称 H 为群 G 的子群。

对于任意的群 G，一阶群 $G_1 = \{e\}$ 和 群 G 本身一定是 G 的子群。除此之外的其他子群称为真子群或固有子群，简称子群。我们通常只讨论真子群。

例 1.11 四阶群 G_4^2 有 3 个子群，$H_1 = \{e, a\}$, $H_2 = \{e, b\}$, $H_3 = \{e, c\}$。这些子群的结构都和二阶群 G_2 的结构相同。

例 1.12 置换群 S_3 有 4 个子群：

$$H_1 = \{e, (12)\}, \quad H_2 = \{e, (13)\}, \quad H_3 = \{e, (23)\}, \quad H_4 = \{e, (123), (132)\}。$$

类似地，D_3 点群也有 4 个子群。下面介绍一个重要定理。

定理 1.1 (重排定理) 如果 $g \in G$ 是群 G 中的任意群元，则有

$$gG = Gg = G,$$

其中

$$gG = \{gg_i | g_i \in G\}, \quad Gg = \{g_i g | g_i \in G\}。$$

证明 对任意的 $g, g_i \in G$，我们有

$$g^{-1} \in G \quad 及 \quad g^{-1} g_i \in G。$$

这意味着可以找到另一个群元 $g_j \in G$，使得

$$g^{-1} g_i = g_j \quad 或 \quad g_i = g g_j \in gG,$$

由此得到 $G \subset gG$。类似地，对于 $gg_i \in gG$，由于 $g \in G, g_i \in G$，故

$$gg_i \in G,$$

此即 $gG \subset G$。因此有 $gG = G$。类似可以证明 $Gg = G$。

重排定理也可以表述成另一种形式：如果 $g, g_i, g_j \in G$，则由 $gg_i = gg_j$ 可以推出 $g_i = g_j$。这表示如果 g_i, g_j 是不同的群元，则 gg_i, gg_j 也一定是不同的。

重排定理虽然很简单，但它是一个很重要的定理，以后会经常用到。

考虑一个 n 阶的有限群，将其表示为

$$G = \{e = g_1, g_2, \cdots, g_n\},$$

每个群元用一个给定群元 g 左乘后得到

$$gG = \{gg_1, gg_2, \cdots, gg_n\} = \{g_{p_1}, g_{p_2}, \cdots, g_{p_n}\},$$

其中 $p_g = (p_1 p_2 \cdots p_n)$ 是序列 $1, 2, \cdots, n$ 由群元 g 确定的一个置换。这样就给出了群元 $g \in G$ 和置换 $p_g = (p_1 p_2 \cdots p_n)$ 之间的自然映射关系。容易证明，$(12\cdots n)$ 的所有可能置换构成群，即置换群 S_n，这是 $n!$ 阶的群。

到现在为止讨论的几个六阶群都具有和抽象群 G_6^2 相同的结构，如对于 S_3，我们可以记

$$e, \quad a = (12), \quad b = (23), \quad c = (31), \quad d = (123), \quad f = (132);$$

对于群 D_3，我们可以记

$$e, \quad a = c_{2x}, \quad b = c_{2y}, \quad c = c_{2z}, \quad d = c_3^1, \quad f = c_3^2;$$

还可以有

$$\begin{cases} e = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & a = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & b = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, \\ c = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, & d = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, & f = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}。 \end{cases} \tag{1.6}$$

容易验证，这几个六阶群的群元之间的乘法关系都是相同的。

例 1.13 令

$$\boldsymbol{r}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$$

为晶格向量，n_1, n_2, n_3 是任意整数，T_n 是作用在坐标函数 $f(\boldsymbol{r})$ 上的平移算符，且有

$$T_n f(\boldsymbol{r}) = f(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}_n),$$

则集合 $\{T_n\}$ 在算符乘积意义下构成群，称为平移群。这是无限 Abel 群。

对于有限群，任意两个元素相乘的结果可以列成一个表，即所谓的乘法表。下面给出一些低阶有限群的乘法表，其中交叉位置的元素是第一列和第一行中对应元素的乘积。

G_2	e	a
e	e	a
a	a	e

G_3	e	a	b
e	e	a	b
a	a	b	e
b	b	e	a

G_4^1	e	a	b	c
e	e	a	b	c
a	a	b	c	e
b	b	c	e	a
c	c	e	a	b

G_4^2	e	a	b	c
e	e	a	b	c
a	a	e	c	b
b	b	c	e	a
c	c	b	a	e

G_6^2	e	a	b	c	d	f
e	e	a	b	c	d	f
a	a	e	d	f	b	c
b	b	f	e	d	c	a
c	c	d	f	e	a	b
d	d	c	a	b	f	e
f	f	b	c	a	e	d

1.3 共轭类，陪集

群 G 的元素可以按共轭类或者陪集进行分解。

定义 1.6 对于群 G 中的两个元素 g_i, g_j，如果存在另一个元素 $g \in G$ 使下式成立：

$$g_i = g g_j g^{-1}, \tag{1.7}$$

则称 g_i, g_j 是互相共轭的，用符号 $\sim$ 表示，记为 $g_i \sim g_j$。共轭是一种等价关系，具有下列性质：

1. 每个元素都与自身共轭，$g_i \sim g_i$；(反身性)
2. 如果 $g_i \sim g_j$，则有 $g_j \sim g_i$；(对称性)
3. 如果 $g_i \sim g_j$，$g_j \sim g_k$，则有 $g_i \sim g_k$。(传递性)

因此我们可以利用共轭关系来对群元进行分类。

定义 1.7 群 G 内彼此共轭的元素集合构成共轭类，简称类。

显然，一个群中的每个元素都属于且仅属于一个类，单位元自成一类，因为单位元只与自身共轭。通常用记号 $[g]$ 表示群元 g 所在类的元素集合。

如果群 G 是 Abel 群，则由关系

$$g g_i g^{-1} = g_i g g^{-1} = g_i, \quad g, g_i \in G$$

可知，Abel 群的每个元素都构成一个类。易见同类元素具有相同的阶。

对于矩阵群，显然所有同类的元素彼此都只相差一个相似变换。

例 1.14 置换群 S_3 有三个类：

$$[e] = \{e\}, \quad [(12)] = \{(12), (23), (31)\}, \quad [(123)] = \{(123), (132)\},$$

故可以将 S_3 群按类分解为

$$S_3 = [e] \oplus [(12)] \oplus [(123)]。$$

定义 1.8 设 $H \subset G$ 为群 G 的子群，令 $g_i \in G$, $g_i \notin H$，则集合

$$g_iH = \{g_ih | h \in H\}$$

称为子群 H 的左陪集。

类似地可以定义子群 H 的右陪集

$$Hg_i = \{hg_i | h \in H\}。$$

一般来说，左陪集不一定和相应的右陪集相同，即 $g_iH \neq Hg_i$。

除子群 H 外，陪集不是群 G 的子群。(因为没有单位元!)

例 1.15 对于六阶群 $G_6^2 = \{e, a, b, c, d, f\}$，考虑子群 $H_1 = \{e, a\}$，则有

$$bH_1 = \{b, f\}, \quad cH_1 = \{c, d\}, \quad H_1b = \{b, d\}, \quad H_1c = \{c, f\}。$$

易见

$$bH_1 \neq H_1b, \quad cH_1 \neq H_1c。$$

如果考虑子群 $H_2 = \{e, d, f\}$，则有

$$aH_2 = H_2a = \{a, b, c\}。$$

因此有陪集分解

$$\begin{aligned} G_6^2 &= H_1 \oplus bH_1 \oplus cH_1 = H_2 \oplus aH_2 \\ &= H_1 \oplus H_1b \oplus H_1c = H_2 \oplus H_2a。 \end{aligned}$$

定理 1.2 子群 H 的两个左 (右) 陪集或者完全相同，或者没有相同的元素。

证明 设 gH 和 $g'H$ 为子群 H 的两个左陪集，假定这两个陪集中有一个元素是相同的，即对子群 H 中的两个元素 h_i, h_j，有

$$gh_i = g'h_j,$$

此即

$$g'^{-1}g = h_jh_i^{-1} \in H。$$

由重排定理得

$$g'^{-1}gH = h_jh_i^{-1}H = H,$$

两边乘 g' 即得

$$gH = g'H。$$

因此，如果两个陪集有一个元素是相同的，则这两个陪集一定是完全相同的。换言之，如果 $g' \in gH$，则有

$$gH = g'H。$$

这意味着陪集的代表元是可以任意选取的。给定一个 n_H 阶的子群 H，则群 G 的元素可以按子群 H 分解成 n/n_H 个不同的陪集。

定理 1.3 (Lagrange 定理) 有限群 G 的阶 n 一定能被其子群的阶 n_H 整除，即 $n/n_H = l$ 为整数，称 l 为子群 H 的指数。

证明 设子群 H 的阶为 n_H，取

$$g_1 \in G, \quad g_1 \notin H,$$

可得陪集

$$g_1 H \neq H。$$

然后取

$$g_2 \in G, \quad g_2 \notin H, \quad g_2 \notin g_1 H,$$

得到第二个陪集

$$g_2 H \neq H, \quad g_2 H \neq g_1 H。$$

继续这个过程，可以得到一系列的陪集。容易看到，所有的陪集都具有相同数目的元素，而所有的陪集都没有共同的元素。因此最后一定可以将群 G 的所有元素都划分到某一个陪集中去。即

$$G = H \oplus g_1 H \oplus g_2 H \oplus \cdots \oplus g_{l-1} H。$$

由于每个陪集都各不相同且包含的元素数目相同，因此得

$$n = n_H l。$$

显然，如果 n 是素数，则 l 只能是 1 或 n，这意味着素数阶的群没有真子群。

例 1.16 如果 $a \in G$，则集合

$$Z(a) = \{g | gag^{-1} = a, \, g \in G\}$$

是群 G 的一个子群。因为若有群元 $g \in G$ 满足

$$gag^{-1} = a,$$

即 $g \in Z(a)$，则有

$$a = g^{-1}ag = (g^{-1})a(g^{-1})^{-1},$$

即存在逆元 $g^{-1} \in Z(a)$。如果

$$gag^{-1} = a, \quad g'ag'^{-1} = a,$$

则有

$$gag^{-1} = gg'ag'^{-1}g^{-1} = (gg')a(gg')^{-1} = a,$$

此即 $gg' \in Z(a)$，封闭性满足。由 $eae^{-1} = a$ 可知存在单位元，$e \in Z(a)$。结合律显然满足，因此集合 $Z(a)$ 构成群，是群 G 的子群，通常称之为 a 在群 G 中的中心。

利用这个例子可以证明，群 G 任意一个类的元素数目是群阶的因子。

如果 H 是群 G 的子群，$g \in G$，则集合

$$H' = \{ghg^{-1} | h \in H, g \in G\}$$

也是群 G 的子群，H' 称为 H 的共轭子群。显然，如果 H 和 H' 彼此共轭，则它们的阶数相同。

定义 1.9 设 H 是群 G 的一个子群，如果对任意的 $g \in G$ 都有

$$gHg^{-1} = H \quad 或 \quad gH = Hg,$$

即 H 的每个左陪集都与其相应的右陪集完全相同，则子群 H 称为群 G 的不变子群或正规子群。

关于不变子群，有如下定理。

定理 1.4 如果 H 是群 G 的不变子群，则 H 一定包含群 G 的一些完整的类。反之，如果子群 H 包含了群 G 的完整的类，则 H 一定是群 G 的不变子群。

证明 设 H 是群 G 的不变子群，如果 $h \in H$ 是子群 H 的任意元素，$g \in G$ 是与 h 共轭的元素，则由类的定义，一定可以找到 $g' \in G$, 使得

$$g = g'hg'^{-1}。$$

因为 H 是群 G 的不变子群，故对任意的 $g' \in G$, 都有

$$g'Hg'^{-1} = H,$$

即

$$g'hg'^{-1} \in H。$$

因此有

$$g = g'hg'^{-1} \in H,$$

即和 h 同类的元素也一定是子群 H 的元素，H 包含的是一些完整的类。

反之，如果 H 包含的是群 G 的一些完整的类，则对任意的 $h \in H$ 和 $g \in G$ 都有

$$ghg^{-1} \in H \quad 或 \quad gHg^{-1} \subset H。$$

进一步，由于 H 包含的是一些完整的类，故 gHg^{-1} 包含的也是一些完整的类，而 ghg^{-1} 是和 h 同类的元素，故

$$h \in gHg^{-1} \quad 或 \quad H \subset gHg^{-1}。$$

由此得到 $H = gHg^{-1}$，所以 H 是群 G 的不变子群。

对于六阶群 G_6^2，子群 $H_1 = \{e, a\}$ 是群 G_6^2 的子群，但不是不变子群。子群 $H_2 = \{e, d, f\}$ 是群 G_6^2 的不变子群。

从前面的定理可以看到，如果群 G 是 Abel 群，则其所有子群皆为不变子群。同理可证，如果子群 H 的指数为 2，则 H 也一定是不变子群。

如果群 H 是群 G 的不变子群，则可将群 G 分解为下列陪集的直和：

$$G = H \oplus g_1 H \oplus g_2 H \oplus \cdots \oplus g_{l-1} H,$$

其中 $g_i H = H g_i$。由此可以定义陪集之间的乘法

$$(g_i H)(g_j H) = g_i H g_j H = g_i g_j H H = g_k H。$$

可以证明，这样定义的乘法是自洽的。由于陪集的代表元是可以任意选取的，如果 $g_i' \in g_i H, g_j' \in g_j H$，则存在 $h, h' \in H$，使得 $g_i' = g_i h, g_j' = g_j h'$，因此

$$g_i' g_j' = g_k' = g_i h g_j h',$$

但 $h g_j \in H g_j = g_j H$，故存在 $h'' \in H$ 使得 $h g_j = g_j h''$，代入上式后得

$$g_i' g_j' = g_k' = g_i h g_j h' = g_i g_j h'' h' = g_k h'' h' \in g_k H。$$

因此，如果选取不同的陪集代表元，同样得到

$$(g_i' H)(g_j' H) = g_i' g_j' H = g_k' H = g_k H,$$

其中 $g_k' \in g_k H$。这样，商集

$$G/H = \{H, g_1 H, g_2 H, \cdots, g_{l-1} H\}$$

构成阶数为 $l = n/n_H$ 的群，称为群 G 的商群。

例 1.17 考虑四阶循环群 G_4^1，它有不变子群 $H = \{e, a^2\}$，陪集 $M = aH = \{a, a^3\}$。容易得到

$$HH = H, \quad MM = H, \quad HM = MH = M。$$

因此商集

$$G_4^1/H = \{H, M\}$$

构成一个二阶群。

例 1.18 考虑六阶群 G_6^2，它有不变子群 $H = \{e, d, f\}$，陪集 $M = aH = \{a, b, c\}$，商群

$$G_6^2/H = \{H, M\}$$

也是二阶群。

定义 1.10 一个群如果不包含任何非平凡的不变子群，则称之为单群 (即单群可以有子群，但没有非平凡的不变子群)。一个群如果不包含任何 Abel 不变子群，则称之为半单群 (即半单群可以有不变子群，但没有 Abel 不变子群)。

例 1.19 素数阶的循环群是单群，因为素数阶的群没有真子群。群 G_4^1 和 G_6^2 既不是单群也不是半单群，因为都有 Abel 不变子群。

有限单群的结构分类问题是群论中的重要问题，已在 20 世纪 80 年代得到解决，这是数学史上的一个重大成果。

1.4 群的同态和同构

定义 1.11 从群 G 到另一个群 G' 的同态是一个映射 Γ (不一定是一一映射)，要求在映射中保持群的乘法。即对任意的 $g_i, g_j \in G$，有映射

$$g'_i = \Gamma_{g_i}, \quad g'_j = \Gamma_{g_j} \in G',$$

使得

$$g'_i g'_j = \Gamma_{g_i}\Gamma_{g_j} = \Gamma_{g_i g_j} = \Gamma_{g_k} = g'_k。$$

如果映射是一一对应的，则称之为同构。同构是同态的特殊情况。

在最简单的情况下，我们可以将群 G 的所有元素都映射为单位元，即

$$\forall g \in G \mapsto \Gamma_g = e' \in G'_1,$$

也就是说，群 G 可以和一阶群 (只包含单位元的平凡群) G'_1 同态。对于六阶群 G_6^2，可以建立同态

$$H = \{e, d, f\} \mapsto e', \quad M = \{a, b, c\} \mapsto a',$$

即从六阶群 G_6^2 到二阶群 $G'_2 = \{e', a'\}$ 的同态。容易看到，存在从商群 G_6^2/H 到 G'_2 的同构映射。

在上面的例子中，群 G_6^2 中的元素 e, d, f 都映射为群 G'_2 的单位元。将群同态中映射为单位元的元素集合称为同态的核。

定理 1.5 (同态定理) 设 f 是从群 G 到群 G' 的同态，则同态的核 H 构成群 G 的不变子群，商群 G/H 则同构于群 G'。

证明 由同态核的定义，有

$$H = \{h | f(h) = e',\ h \in G\},$$

于是可知，如果 $h_i, h_j \in H$，则有

$$h_i h_j \to e'e' = e' \mapsto h_i h_j \in H。$$

类似地，有

$$e \mapsto e' \mapsto e \in H, \quad h^{-1} \mapsto e'^{-1} = e' \mapsto h^{-1} \in H。$$

因此 H 构成群。进一步对任意的 $h \in H$, $g \in G$，有

$$ghg^{-1} \mapsto g'e'g'^{-1} = e' \mapsto ghg^{-1} \in H。$$

这表明 H 是群 G 的不变子群，由此可以得到商群 G/H。

考虑映射

$$f' :\ g_i H \mapsto g'_i \quad (f :\ g_i \mapsto g'_i),$$

如果 $g_iH = g_jH$，则有

$$(g_iH)(g_jH)^{-1} = g_jHg_j^{-1}H = H \mapsto e',$$

故

$$(g_jH)^{-1} \mapsto g_i'^{-1} \quad \text{或} \quad g_jH \mapsto g_i'。$$

同时，如果

$$g_iH \mapsto g_i', \quad g_jH \mapsto g_i',$$

则

$$g_j^{-1}g_iH = g_j^{-1}Hg_iH = (g_jH)^{-1}g_iH \mapsto g_i'^{-1}g_i' = e',$$

即

$$g_j^{-1}g_iH = H \mapsto g_iH = g_jH。$$

因而映射 f' 是一一对应的，它保持了群的乘法，即有

$$(g_iH)(g_jH) = g_ig_jH \mapsto g_i'g_j' = (g_ig_j)'。$$

因此，f' 是同构映射。

若 $H = \{e\}$，即同态的核只包含单位元，则有 $G/H = G$，此时的同态实际上是同构，用符号 $\cong$ 表示。两个彼此同构的群具有相同的乘法表，在代数上具有完全相同的结构，因此在数学上可以看成是相同的群。例如

$$G_6^2 \cong S_3 \cong D_3。$$

定理 1.6 (Cayley 定理) 任意 n 阶群都同构于置换群 S_n 的一个子群。

证明 由重排定理，对任意的 $a \in G$，有 $aG = G$。于是

$$ag_i = g_{a_i}, \quad i = 1, 2, \cdots, n,$$

上式给出了从群 G 到置换群 S_n 的一个子集 $P_n \subset S_n$ 的一一映射：

$$a \mapsto p_a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix} \in P_n \subset S_n。$$

由 $ab = c$, 可得

$$\begin{aligned} p_ap_b &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \\ a_{b_1} & a_{b_2} & \cdots & a_{b_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ a_{b_1} & a_{b_2} & \cdots & a_{b_n} \end{pmatrix}。 \end{aligned}$$

另一方面，还可以知道

$$g_{a_{b_i}} = ag_{b_i} = a(bg_i) = abg_i = cg_i = g_{c_i},$$

即有

$$a_{b_i} = c_i,$$

因此得到

$$p_a p_b = p_c。$$

所以映射

$$a \in G \mapsto p_a \in P_n \subset S_n$$

保持了群的乘法，是 n 阶群 G 到 $P_n \subset S_n$ 的一一对应的同构映射。

因此，对所有 $a \in G$，置换

$$p_a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

的全体构成群，它是 S_n 的子群，并与群 G 同构。

例 1.20 容易写出与 S_n 的子群同构的低阶群的一些例子：

$$G_3 \cong \{e, (123), (321)\},$$

$$G_4^1 \cong \{e, (1234), (12)(34), (4321)\},$$

$$G_4^2 \cong \{e, (12)(34), (13)(24), (14)(23)\},$$

以上使用了循环记号

$$(1\ 2\ 3) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1\ 2)(3\ 4) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 4 & 3 \end{pmatrix}。$$

一般地，一个置换可以写成一些不同长度的循环之积。比如，可以将 6 个符号的置换写成

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 5 & 4 & 1 & 2 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 & 2 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 1 & 5 & 2 & 6 \end{pmatrix} = (1\ 3\ 4)(2\ 5)(6)。$$

从群 G 到置换群 S_n 子群的同构有一个有趣的特征，即除单位元外，任何元素所对应的置换都不会出现 1- 循环。这是因为 1- 循环意味着对某个元素 g_i，有 $ag_i = g_i$。但如果 a 不是单位元的话这是不可能的。进一步可以看到，如果 p_a 是一些循环的乘积，则所有的循环必须具有相同的长度。因为如果出现 $p_a = (12)(3\cdots)$ 之类的情况，则将得到

$$a^2 \mapsto p_{a^2} = (12)^2(3\cdots)^2 = (1)(2)(3\cdots),$$

而这是不允许的。因此，如果群 G 的阶数是素数，则与其同构的 S_n 子群中仅包含那些不可分解的 n- 循环。

1.5 群的直积

许多物理上有用的对称群都是一些较简单的群的直积。在这种情况下，只需研究那些简单的群的结构和表示就可以了。

定义 1.12 设 G_1, G_2 是两个群，这两个群的直积定义为

$$G = G_1 \otimes G_2 = \{(g_1, g_2) | g_1 \in G_1, g_2 \in G_2\}。$$

乘法规则定义为

$$gg' = (g_1, g_2)(g_1', g_2') = (g_1 g_1', g_2 g_2')。$$

不难证明，在这一定义下，群的公理全部满足，即群的直积仍构成群。容易看到，集合

$$H = \{(g_1, e_2) | \, g_1 \in G_1, e_2 \in G_2\}, \quad H' = \{(e_1, g_2) | \, e_1 \in G_1, g_2 \in G_2\}$$

是 $G_1 \otimes G_2$ 的两个子群。在这个定义中，G_1, G_2 可以是完全不同类型的群。

如果 $G_1 = H_1, G_2 = H_2$ 是群 G 的两个子群，且除单位元外没有相同的元素。H_1 的每个元素和 H_2 的每个元素的乘法都可交换，并且群 G 的每个元素可以唯一写成

$$g = h_1 h_2, \quad h_1 \in H_1, \quad h_2 \in H_2,$$

则可将 H_1 和 H_2 之间的直积定义为

$$G = H_1 \otimes H_2 = \{h_1 h_2 | \, h_1 \in H_1, h_2 \in H_2\}。$$

例 1.21 对六阶循环群 $G_6^1 = \{e, a, a^2, a^3, a^4, a^5\}$，取

$$H_1 = \{e, a^3\}, \quad H_2 = \{e, a^2, a^4\},$$

则可将 G_6^1 写成 H_1 和 H_2 的直积

$$G_6^1 = H_1 \otimes H_2。$$

可以证明，若 $G = H_1 \otimes H_2$，则 H_1 和 H_2 一定是群 G 的不变子群。这是因为对任意的 $g = h_1 h_2 \in G$, $h_1 \in H_1$, $h_2 \in H_2$ 及 $a \in H_1$，有

$$gag^{-1} = h_1 h_2 a h_2^{-1} h_1^{-1} = h_1 a h_1^{-1} \in H_1。$$

因此 H_1 是群 G 的不变子群。如果 $a \in H_2$，同样有

$$gag^{-1} = h_1 h_2 a h_2^{-1} h_1^{-1} = h_2 a h_2^{-1} \in H_2。$$

因此 H_2 也是群 G 的不变子群。由此可以构造商群 $G/H_1 \cong H_2$ 和 $G/H_2 \cong H_1$。

但反之不一定成立。即使 H_1 是群 G 的不变子群，$G/H_1 \cong H_2$，但由于 H_1 和 H_2 的元素乘法不一定可交换，因而群 G 并不一定就能写成 H_1 和 H_2 的直积 $H_1 \otimes H_2$。例如对群 $G_6^2 = \{e, a, b, c, d, f\}$，尽管有子群

$$H_1 = \{e, d, f\}, \quad H_2 = \{e, a\},$$

但并不能将其写成 $G_6^2 = H_1 \otimes H_2$，因为 a 和 d, f 的乘积是不可交换的。

如果 H_1 是群 G 的不变子群，H_1, H_2 除单位元外没有相同的元素，并且群 G 的每个元素可以唯一写成 H_1 的一个元素和 H_2 的一个元素的乘积，则称群 G 是 H_1 和 H_2 的半直积，记为

$$G = H_1 \rtimes H_2。$$

物理上有很多对称群虽然不能写成直积形式，但可以写成半直积形式。

群的直积可以推广到包含 n 个群因子的情形，即

$$G = G_1 \otimes G_2 \otimes \cdots \otimes G_n = \{(g_1, g_2, \cdots, g_n) | \, g_i \in G_i, i = 1, 2, \cdots, n\}。$$

习 题 1

1.1 推导四阶群的非循环结构。

1.2 证明六阶群只有两种结构。

1.3 证明九阶群只有两种结构。

1.4 证明十阶群只有两种结构。

1.5 找出正方形的对称群 (即 D_4 点群)。

1.6 将置换群 S_3 作陪集分解，找出子群，不变子群和商群。

1.7 证明：群 G 任意一个类的元素数目是群阶的因子。

1.8 证明：素数阶的群只能是循环群。

1.9 若 K 和 H 是群 G 的两个子群，则当且仅当 $HK=KH$ 时，集合 HK 也是群 G 的子群。

1.10 设 G 是群，证明集合

$$H=\{q_1q_2\cdots q_m, m=1,2,\cdots\}$$

是群 G 的不变子群，其中

$$q_i=g_i^{-1}g_i'^{-1}g_ig_i', \quad g_i,g_i'\in G。$$

1.11 证明：如果 $eg=g, ge'=g$，则有 $e=e'$。

1.12 证明：如果 $g^{-1}g=e, gg'^{-1}=e$，则有 $g^{-1}=g'^{-1}$。

1.13 无理数集合在普通乘法或普通加法下是否构成群？

1.14 证明指数为 2 的子群一定是不变子群。

1.15 证明 $H\subset G$ 是子群的充要条件是当 $h_i,h_j\in H$ 时，有 $h_ih_j^{-1}\in H$。

1.16 令 $C_a(a=1,2,\cdots)$ 为群 G 的类，证明任意两个类的乘积为某些类的和，即

$$C_aC_b=\sum_\alpha C_\alpha,$$

其中乘积定义为

$$C_aC_b=\{g_1g_2|g_1\in C_a, g_2\in C_b\}。$$

1.17 证明：两个群的直积仍然是群。

第2章　群的表示

群表示论是群论中最重要的内容之一，在物理学应用中，对称群与所研究体系的对称变换紧密相关。体系的解构成线性向量空间，而我们的兴趣就在于将群的对称性与这个线性向量空间中的对称变换联系在一起。本章将讨论群表示论的一些基本定理和群表示的具体构造。

2.1　表示的定义

定义 2.1　如果存在从群 G 到作用在线性向量空间 V 上的算符群 Γ_G 的一个同态，即

$$g \in G \mapsto \Gamma_g \in \Gamma_G,$$

其中 Γ_g 是与群元 g 对应的算符，满足

$$\Gamma_{g_1}\Gamma_{g_2} = \Gamma_{g_1 g_2},$$

则算符群 Γ_G 称为群 G 的一个表示，线性向量空间 V 的维数称为表示的维数。如果这一同态同时也是同构 (即为一一对应的映射)，则该表示称为忠实表示。

如果在 d 维向量空间 V 中选择一组基 $\{\boldsymbol{e}_i, i = 1, 2, \cdots, d\}$，则 Γ_g 可以用 $d \times d$ 的矩阵来实现，具体为

$$\Gamma_g \boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{e}_i' = \sum_{j=1}^{d} \boldsymbol{e}_j D_{ji}(g) \equiv \boldsymbol{e}_j D_{ji}(g), \quad g \in G, i = 1, 2, \cdots, d, \tag{2.1}$$

其中用到了 Einstein 规则，即相同指标表示自动求和。上式表明，向量空间 V 在算符 $\Gamma_g (g \in G)$ 的作用下不变，即向量空间 V 中的任意向量在算符 Γ_g 的作用下都可以用基的线性组合表示出来，称向量空间 V 是群 G 的不变空间。连续作用给出了

$$\Gamma_{g_1}\Gamma_{g_2}\boldsymbol{e}_i = \Gamma_{g_1}\boldsymbol{e}_j D_{ji}(g_2) = \boldsymbol{e}_k D_{kj}(g_1) D_{ji}(g_2) = \boldsymbol{e}_k (D(g_1)D(g_2))_{ki},$$

最后一个等式用到了矩阵的乘法。而

$$\Gamma_{g_1 g_2}\boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{e}_k D_{ki}(g_1 g_2),$$

由同态关系 $\Gamma_{g_1}\Gamma_{g_2} = \Gamma_{g_1 g_2}$，即可得到

$$\boldsymbol{D}(g_1)\boldsymbol{D}(g_2) = \boldsymbol{D}(g_1 g_2)。$$

可见，映射

$$g \in G \mapsto \boldsymbol{D}(g) \in \boldsymbol{D}(G)$$

也是群 G 的同态。称矩阵集合 $\{\boldsymbol{D}(g), g \in G\}$ 为群 G 的一个矩阵表示，简称表示。今后，文中所说的群表示均为矩阵表示，表示矩阵的维数即为表示的维数。

容易证明，对任何表示都有

$$\boldsymbol{D}(e) = \boldsymbol{I},\ \boldsymbol{D}(g^{-1}) = \boldsymbol{D}(g)^{-1},$$

即单位元的表示矩阵一定是单位阵，而逆元的表示矩阵为相应元素表示矩阵的逆矩阵。

对于群 G 的一个表示，可以在给定的一组基 $\{\boldsymbol{e}_i\}$ 下写出其对应的表示矩阵，此时称基 $\{\boldsymbol{e}_i\}$ 负载了群 G 的一个表示 (矩阵)。下面给出几个表示的例子。

例 2.1 映射

$$g \mapsto \boldsymbol{D}(g) = 1, \quad \forall g \in G$$

将群 G 的所有元素都映射为 1，即 1×1 的单位阵。

容易证明这是群 G 的一个表示，称之为恒等表示，通常用 $\Gamma^{(1)}$ 表示。显然每个群都有一维恒等表示，它是平凡的一维表示。

如果 G 是矩阵群，则可以作映射

$$\boldsymbol{g} \mapsto \boldsymbol{D}(\boldsymbol{g}) = \det(\boldsymbol{g}),\ \forall \boldsymbol{g} \in G,$$

由行列式性质可知

$$\det(\boldsymbol{g}_1)\det(\boldsymbol{g}_2) = \det(\boldsymbol{g}_1\boldsymbol{g}_2),$$

这是非平凡的一维表示。

对于群 $D_2(G_4^2)$，如果令 a, b, c 分别为绕 x, y, z 轴旋转 π 角的操作，取 (x, y) 为表示的基，则由

$$\Gamma_a(x, y) = (x, -y) = (x, y)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

可得群元 a 的表示矩阵

$$\boldsymbol{D}(a) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}。$$

类似地可以得到其余群元的表示矩阵为

$$\boldsymbol{D}(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}(b) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}(c) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

这些矩阵构成了 $D_2(G_4^2)$ 群的二维表示，并且是忠实表示 (一一对应)。

对于六阶群 G_6^2，除了前面给出的一维恒等表示外，还可以构造下列非平凡的一维表示：

$$\{e, d, f\} \mapsto 1, \quad \{a, b, c\} \mapsto -1,$$

或

$$\boldsymbol{D}(e) = \boldsymbol{D}(d) = \boldsymbol{D}(f) = 1, \quad \boldsymbol{D}(a) = \boldsymbol{D}(b) = \boldsymbol{D}(c) = -1。$$

如果作映射

$$\boldsymbol{D}(e)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{D}(a)=\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{D}(b)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&\sqrt{3}\\\sqrt{3}&-1\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{D}(c)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&-1\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{D}(d)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&-\sqrt{3}\\\sqrt{3}&-1\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{D}(f)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&-1\end{pmatrix},$$

则可以证明这 6 个 2×2 的矩阵构成 G_6^2 的二维表示，并且是忠实表示。

从以上例子可以看到，一个群可以有很多维数相同或维数不同的表示。

定义 2.2 设 $\boldsymbol{D}(G)$ 是群 G 的一个 d 维表示，则集合

$$\{\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1}:g\in G\}$$

也是群 G 的一个 d 维表示，称 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(G)\boldsymbol{S}^{-1}$ 是 $\boldsymbol{D}(G)$ 的等价表示，其中 $\boldsymbol{S}$ 是一个 $d\times d$ 的非奇异矩阵。

容易看到，如果 $\boldsymbol{D}(G)$ 是群 G 的同态，则 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(G)\boldsymbol{S}^{-1}$ 也是群 G 的同态，即

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g_1)\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g_2)\boldsymbol{S}^{-1}=\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g_1)\boldsymbol{D}(g_2)\boldsymbol{S}^{-1}=\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g_1g_2)\boldsymbol{S}^{-1}。$$

如果负载表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 的基是

$$\{\boldsymbol{e}_i,i=1,2,\cdots,d\},$$

而负载表示 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(G)\boldsymbol{S}^{-1}$ 的基是

$$\{\boldsymbol{e}'_i,i=1,2,\cdots,d\},$$

则这两组基之间的关系可以通过下面的过程推得。由表示定义得

$$\Gamma_g\boldsymbol{e}'_i=\boldsymbol{e}'_j(\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1})_{ji}=\boldsymbol{e}'_jS_{jl}D_{lm}(g)(\boldsymbol{S}^{-1})_{mi}。$$

两边乘 S_{in} 并对指标 i 求和，有

$$\Gamma_g\boldsymbol{e}'_iS_{in}=e'_jS_{jl}D_{lm}(g)(\boldsymbol{S}^{-1})_{mi}S_{in}=\boldsymbol{e}'_jS_{jl}D_{ln}(g)。$$

上式表明，负载表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 的基为 $\{\boldsymbol{e}'_jS_{ji}\}$。与 方程 (2.1) 比较，即得

$$\boldsymbol{e}_i=\boldsymbol{e}'_jS_{ji}$$

或

$$\boldsymbol{e}'_i=\boldsymbol{e}_j(\boldsymbol{S}^{-1})_{ji}。$$

因此，当表示作相似变换时，相应的基就作线性变换。

由于存在无穷多的非奇异矩阵，也就存在着无穷多的等价表示。对于物理问题而言，等价表示给出的是相同的物理。因此实际上只需研究等价表示中的一个就足够了，换句话说，我们只需要研究彼此不等价的表示。

若 $d=1$，则有

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(G)\boldsymbol{S}^{-1}=\boldsymbol{D}(G),$$

即对两个一维表示而言，或者完全相同，或者完全不同。但对于高维表示，两个表示是否等价，并不是一眼就能看出的，表面上完全不同的两个表示可能是彼此等价的。

定义 2.3 如果群 G 的表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 可以通过相似变换化为

$$\boldsymbol{D}(g)=\begin{pmatrix}\boldsymbol{D}_1(g) & \boldsymbol{R}(g)\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2(g)\end{pmatrix},\quad \forall\, g\in G,$$

则 $\boldsymbol{D}(G)$ 称为是可约表示。如果矩阵 $\boldsymbol{R}(g)=\boldsymbol{0}$，则称之为完全可约表示。如果表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 无法通过相似变换化成方块对角的形式，则称其为不可约表示。

如果一个表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 是完全可约的，即

$$\boldsymbol{D}(g)=\begin{pmatrix}\boldsymbol{D}_1(g) & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2(g)\end{pmatrix},\quad \forall\, g\in G,$$

则称 $\boldsymbol{D}(G)$ 是 $\boldsymbol{D}_1(G)$ 和 $\boldsymbol{D}_2(G)$ 的直和。记为

$$\boldsymbol{D}(G)=\boldsymbol{D}_1(G)\oplus\boldsymbol{D}_2(G)。$$

可以证明 $\boldsymbol{D}_1(G)$ 和 $\boldsymbol{D}_2(G)$ 也是群 G 的表示。显然，原来的不变空间已经被分解为两个不变子空间的直和

$$V=V_1\oplus V_2。$$

如果 V_1 和 V_2 的维数分别为 d_1 和 d_2，则有

$$\Gamma_g\boldsymbol{e}_i=\sum_{j=1}^{d_1}\boldsymbol{e}_j(\boldsymbol{D}_1(g))_{ji},\quad i=1,2,\cdots,d_1, \tag{2.2}$$

$$\Gamma_g\boldsymbol{e}_i=\sum_{j=d_1+1}^{d_1+d_2=d}\boldsymbol{e}_j(\boldsymbol{D}_2(g))_{ji},\quad i=d_1+1,d_1+2,\cdots,d_1+d_2=d。 \tag{2.3}$$

假如 $\boldsymbol{D}_1(G)$ 或 $\boldsymbol{D}_2(G)$ 仍是完全可约表示，则可以继续分解，直到把 $\boldsymbol{D}(G)$ 完全分解为不可约表示的直和

$$\boldsymbol{D}(G)=\overset{\oplus}{\sum_{p}}a_p\boldsymbol{D}^{(p)}(G),$$

其中 a_p 是群 G 的第 p 个不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G)$ 在表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 中出现的重数。

定义 2.4 设 $\boldsymbol{D}(G)$ 是群 G 的 d 维表示，定义

$$\chi(g)=\operatorname{Tr}\boldsymbol{D}(g)=\sum_{i=1}^{d}\boldsymbol{D}_{ii}(g),$$

称 $\chi(g)$ 为群元 $g\in G$ 在表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 中的特征标。

容易证明，群 G 中所有同一类的元素具有相同的特征标，即

$$\chi(g') = \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{D}(g') = \mathrm{Tr}[\boldsymbol{D}(h)\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{D}(h^{-1})] = \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{D}(g) = \chi(g)。$$

等价表示具有相同的特征标，即

$$\chi'(g) = \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{D}'(g) = \mathrm{Tr}[\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1}] = \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{D}(g) = \chi(g)。$$

由于在任何表示中，单位元的表示矩阵一定是单位矩阵，故有

$$\chi(e) = \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{D}(e) = \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{I} = d,$$

即单位元在任何表示中的特征标就是该表示的维数。

定义 2.5 如果表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 的所有表示矩阵都是幺正的，即

$$\boldsymbol{D}(g)^{\dagger} = \boldsymbol{D}(g)^{-1}, \quad \forall\, g \in G,$$

则表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 称为幺正表示。其中 † 表示 Hermite 共轭, 即转置后再取复共轭, $D^{\dagger}_{ij} = D^{*}_{ji}$。

2.2 群表示论的一些基本定理

本节将证明群表示论中的一些重要定理。

定理 2.1 如果群 G 有非平凡的不变子群 H，则商群 $K = G/H$ 的任何表示也是群 G 的表示。这个表示是群 G 的非忠实表示。反之，如果 $\boldsymbol{D}(G)$ 是群 G 的非忠实表示，则群 G 至少有一个不变子群 H 使得 $\boldsymbol{D}(G)$ 是商群 G/H 的忠实表示。

证明 由映射

$$g \in G \mapsto k = gH \in K \mapsto \boldsymbol{D}(k)$$

可知，$\boldsymbol{D}(K)$ 是群 G 的一个表示。因为这是多对一的映射，所以表示是非忠实表示。

反之，如果 $\boldsymbol{D}(G)$ 是群 G 的一个非忠实表示，即存在从 G 到 $\boldsymbol{D}(G)$ 的一个同态，则由第 1 章的同态定理可知，同态的核 H 是群 G 的不变子群，且存在从 G/H 到 $\boldsymbol{D}(G)$ 的同构。因此 $\boldsymbol{D}(G)$ 是商群 $K = G/H$ 的忠实表示。

定理 2.2 对有限群，可约表示一定是完全可约的。

证明 假定一个可约表示已经通过相似变换化成如下形式：

$$\boldsymbol{D}(g) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{D}_1(g) & \boldsymbol{R}(g) \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2(g) \end{pmatrix}, \quad \forall\, g \in G,$$

其中 $\boldsymbol{D}_1(g)$ 是 $d_1 \times d_1$ 矩阵，$\boldsymbol{D}_2(g)$ 是 $d_2 \times d_2$ 矩阵，$\boldsymbol{R}(g)$ 是 $d_1 \times d_2$ 矩阵。则由条件 $\boldsymbol{D}(gg') = \boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{D}(g')$ 可得

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \boldsymbol{D}_1(gg') & \boldsymbol{R}(gg') \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2(gg') \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{D}_1(g) & \boldsymbol{R}(g) \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2(g) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{D}_1(g') & \boldsymbol{R}(g') \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2(g') \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{D}_1(g)\boldsymbol{D}_1(g') & \boldsymbol{D}_1(g)\boldsymbol{R}(g') + \boldsymbol{R}(g)\boldsymbol{D}_2(g') \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2(g)\boldsymbol{D}_2(g') \end{pmatrix}。 \end{aligned}$$

比较等式两边，得

$$\boldsymbol{D}_1(gg')=\boldsymbol{D}_1(g)\boldsymbol{D}_1(g'),$$

$$\boldsymbol{D}_2(gg')=\boldsymbol{D}_2(g)\boldsymbol{D}_2(g'),$$

$$\boldsymbol{R}(gg')=\boldsymbol{D}_1(g)\boldsymbol{R}(g')+\boldsymbol{R}(g)\boldsymbol{D}_2(g')。$$

选取非奇异矩阵

$$\boldsymbol{S}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_1 & \boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_2\end{pmatrix},$$

则其逆为

$$\boldsymbol{S}^{-1}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_1 & -\boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_2\end{pmatrix},$$

其中矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的定义为

$$\boldsymbol{C}=-\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\boldsymbol{R}(g)\boldsymbol{D}_2(g^{-1})。$$

然后作相似变换

$$\begin{aligned}\boldsymbol{D}'(g)=&\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_1 & \boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{D}_1 & \boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_1 & -\boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_2\end{pmatrix}\\ =&\begin{pmatrix}\boldsymbol{D}_1 & \boldsymbol{R}+\boldsymbol{C}\boldsymbol{D}_2-\boldsymbol{D}_1\boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2\end{pmatrix},\end{aligned}$$

利用

$$\boldsymbol{D}_1(g)\boldsymbol{R}(g')=\boldsymbol{R}(gg')-\boldsymbol{R}(g)\boldsymbol{D}_2(g'),$$

可得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{C}\boldsymbol{D}_2-\boldsymbol{D}_1\boldsymbol{C}=&\frac{1}{n}\sum_{g'\in G}[-\boldsymbol{R}(g')\boldsymbol{D}_2(g'^{-1})\boldsymbol{D}_2(g)+\boldsymbol{D}_1(g)\boldsymbol{R}(g')\boldsymbol{D}_2(g'^{-1})]\\ =&\frac{1}{n}\sum_{g'\in G}\{-\boldsymbol{R}(g')\boldsymbol{D}_2(g'^{-1}g)+[\boldsymbol{R}(gg')-\boldsymbol{R}(g)\boldsymbol{D}_2(g')]\boldsymbol{D}_2(g'^{-1})\}\\ =&\frac{1}{n}\sum_{g'\in G}[-\boldsymbol{R}(g')\boldsymbol{D}_2(g'^{-1}g)+\boldsymbol{R}(gg')\boldsymbol{D}_2(g'^{-1})]-\boldsymbol{R}(g)\\ =&-\boldsymbol{R}(g)。\end{aligned}$$

以上用到了表示的同态性质。因此，表示是完全可约的，即有

$$\boldsymbol{D}'(g)=\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{D}_1(g) & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_2(g)\end{pmatrix},\quad \forall g\in G。$$

如果 $\boldsymbol{D}_1(g)$ 或 $\boldsymbol{D}_2(g)$ 仍是可约的，则可将其进一步约化。最后，可以将一个可约表示约化为一些不可约表示的直和 (在等价的意义下，即不再明显写出相似变换矩阵 $\boldsymbol{S}$)：

$$\boldsymbol{D}(g)=\boldsymbol{D}_1(g)\oplus\boldsymbol{D}_2(g)\oplus\cdots\oplus\boldsymbol{D}_s(g)=\sum_p^{\oplus}a_p\boldsymbol{D}^{(p)}(g),\quad g\in G。$$

负载群表示的不变空间也就被约化为一些不变子空间的直和，即

$$V = V_1 \oplus V_2 \oplus \cdots \oplus V_s,$$

其中 $V_i \cap V_j = \varnothing (i \neq j)$。

定理 2.3 有限群 G 的每个表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 都有等价的幺正表示。

证明 为了证明这一定理，只需要证明，可以找到非奇异矩阵 $\boldsymbol{S}$ 使得 $\boldsymbol{D}'(g) = \boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1}$ 是幺正的即可。为了做到这点，首先构造矩阵

$$\boldsymbol{H} = \sum_{g \in G} \boldsymbol{D}^{\dagger}(g)\boldsymbol{D}(g),$$

容易证明 $\boldsymbol{H}$ 是 Hermite 矩阵，$\boldsymbol{H}^{\dagger} = \boldsymbol{H}$。按照线性代数理论，任何幺正或 Hermite 矩阵都可以通过适当的幺正相似变换将其对角化。因此，可以找到幺正矩阵 $\boldsymbol{U}$ 使得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{H}' &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{H}\boldsymbol{U}^{-1} = \sum_{g \in G} \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{\dagger}(g)\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{U}^{-1} \\ &= \sum_{g \in G} \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{\dagger}(g)\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{U}^{-1} = \sum_{g \in G} \boldsymbol{D}'^{\dagger}(g)\boldsymbol{D}'(g)\end{aligned}$$

是对角矩阵，即

$$H'_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}。$$

将其代入上式，得

$$\lambda_i = \sum_{g \in G}\sum_{j=1} D'^{\dagger}_{ij}(g)D'_{ji}(g) = \sum_{g \in G}\sum_{j=1} |D'_{ji}(g)|^2 \geqslant 0, \quad i = 1, 2, \cdots。 \tag{2.4}$$

由于表示矩阵都是非奇异的，故

$$\det \boldsymbol{D}'(g) = \det \boldsymbol{D}(g) \neq 0, \quad \forall\, g \in G,$$

任何一列的矩阵元都不可能全为零，故和式 (2.4) 不可能为零，即有 $\lambda_i > 0\,(i = 1, 2, \cdots)$。构造矩阵

$$\boldsymbol{\Lambda}^{1/2} = (\lambda_i^{1/2}\delta_{ij}), \quad \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = (\lambda_i^{-1/2}\delta_{ij}),$$

然后令 $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{U}$，则可证明

$$\boldsymbol{D}''(g) = \boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1} = \boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}$$

是幺正的，具体过程为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{D}''(g)^{\dagger}\boldsymbol{D}''(g) &= \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{\dagger}(g)\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{\Lambda}^{1/2} \cdot \boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \\ &= \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\boldsymbol{D}'^{\dagger}(g)\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\left(\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\sum_{g' \in G}\boldsymbol{D}'^{\dagger}(g')\boldsymbol{D}'(g')\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\right)\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{D}'(g)\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \sum_{g' \in G} \boldsymbol{D}'^{\dagger}(g) \boldsymbol{D}'^{\dagger}(g') \boldsymbol{D}'(g') \boldsymbol{D}'(g) \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \\
&= \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \sum_{g' \in G} \boldsymbol{D}'^{\dagger}(g'g) \boldsymbol{D}'(g'g) \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \\
&= \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \sum_{g'' \in G} \boldsymbol{D}'^{\dagger}(g'') \boldsymbol{D}'(g'') \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \boldsymbol{I},
\end{aligned}
$$

其中已经用到了等式

$$
\boldsymbol{H}' = \boldsymbol{\Lambda}^{1/2} \cdot \boldsymbol{\Lambda}^{1/2}
$$

及

$$
\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \boldsymbol{H}' \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \sum_{g' \in G} \boldsymbol{D}'^{\dagger}(g') \boldsymbol{D}'(g') \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \boldsymbol{I}。
$$

进一步可以证明，联系两个等价幺正表示的相似变换矩阵总可以取为幺正的。这个定理实际上可以推广到紧致 Lie 群的情况。

由于任何表示都有等价的幺正表示，因此以后我们将只讨论幺正表示。

定理 2.4 (Schur 引理) 设 $\boldsymbol{D}(G)$ 是群 G 的一个 d 维不可约表示，$\boldsymbol{M}$ 是任意一个 $d \times d$ 矩阵。如果 $\boldsymbol{M}$ 与所有表示矩阵对易，即

$$
\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}(g) = \boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{M}, \quad \forall g \in G, \tag{2.5}
$$

则矩阵 $\boldsymbol{M}$ 一定是常数和单位矩阵的乘积，即有

$$
\boldsymbol{M} = \lambda \boldsymbol{I}。
$$

证明 不失一般性，我们可以假定 $\boldsymbol{D}(G)$ 是幺正的，不然总可以通过适当的相似变换将其幺正化。对方程 (2.5) 两边取 Hermite 共轭，得

$$
\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{D}^{\dagger}(g) = \boldsymbol{D}^{\dagger}(g)\boldsymbol{M}^{\dagger}。
$$

利用表示的幺正性，得

$$
\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{D}^{-1}(g) = \boldsymbol{D}^{-1}(g)\boldsymbol{M}^{\dagger} \mapsto \boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{D}(g^{-1}) = \boldsymbol{D}(g^{-1})\boldsymbol{M}^{\dagger},
$$

此即

$$
\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{D}(g) = \boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{M}^{\dagger}, \quad \forall g \in G。
$$

这表明，如果 $\boldsymbol{M}$ 与所有表示矩阵对易，则 $\boldsymbol{M}^{\dagger}$ 也与所有表示矩阵对易。

因此可以进一步假定 $\boldsymbol{M}$ 是 Hermite 矩阵，否则可以考虑如下两个 Hermite 矩阵：

$$
\boldsymbol{M}_1 = \boldsymbol{M} + \boldsymbol{M}^{\dagger}, \quad \boldsymbol{M}_2 = \mathrm{i}(\boldsymbol{M} - \boldsymbol{M}^{\dagger}),
$$

如果定理对 $\boldsymbol{M}_1, \boldsymbol{M}_2$ 成立，则定理对 $\boldsymbol{M}$ 也成立。

现在假定 $\boldsymbol{M}$ 是 Hermite 矩阵，因此可以通过适当的幺正相似变换将 $\boldsymbol{M}$ 对角化为

$$\boldsymbol{M}' = \boldsymbol{U}\boldsymbol{M}\boldsymbol{U}^{-1} = (\lambda_i \delta_{ij}),$$

注意这里重复指标不自动求和。方程 (2.5) 两边分别乘 $\boldsymbol{U}, \boldsymbol{U}^{-1}$ 后得

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{M}\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{U}^{-1} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{M}\boldsymbol{U}^{-1},$$

记 $\boldsymbol{D}'(g) = \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{U}^{-1}$，即得

$$\boldsymbol{M}'\boldsymbol{D}'(g) = \boldsymbol{D}'(g)\boldsymbol{M}',$$

其中第 i 行，第 j 列的矩阵元可以写成

$$M'_{ik}D'_{kj}(g) = D'_{ik}(g)M'_{kj}。$$

由于 $\boldsymbol{M}'$ 是对角阵，$M'_{ik} = \lambda_i \delta_{ik}$，因此上式变成

$$(\lambda_i - \lambda_j)D'_{ij}(g) = 0。$$

如果所有的 λ_i 都不相同，即 $\lambda_i \neq \lambda_j (i \neq j)$，则有

$$D'_{ij}(g) = 0, \quad i \neq j。$$

这意味着 $\boldsymbol{D}'$ 实际上是对角阵，因而是可约表示。如果部分 λ_i 相同，比如

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_p,$$

则有

$$\boldsymbol{D}'(g)_{ij} = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, p, j = p+1, \cdots, d,$$

或

$$\boldsymbol{D}'(g)_{ij} = 0, \quad i = p+1, \cdots, d, j = 1, 2, \cdots p。$$

这意味着 $\boldsymbol{D}'$ 是方块对角的，因此是可约表示。于是导致 $\boldsymbol{D}$ 也是可约表示。但 $\boldsymbol{D}$ 是不可约表示，因此必须有

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_d = \lambda,$$

即 $\boldsymbol{M}$ 是一个常数和单位矩阵的乘积，$\boldsymbol{M} = \lambda \boldsymbol{I}$。

定理 2.5 设 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G)$ 和 $\boldsymbol{D}^{(q)}(G)$ 是群 G 的两个不可约表示，维数分别为 d_p 和 d_q。如果存在一个 $d_q \times d_p$ 的矩阵 $\boldsymbol{M}$，使得

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{(p)}(g) = \boldsymbol{D}^{(q)}(g)\boldsymbol{M}, \quad \forall g \in G, \tag{2.6}$$

则有如下结论：

1. 如果 $d_q \neq d_p$，则 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0}$；

2. 如果 $d_q = d_p$，则或者 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0}$，或者 $\det \boldsymbol{M} \neq 0$。

后者表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G)$ 和 $\boldsymbol{D}^{(q)}(G)$ 是等价表示，可以通过相似变换联系起来。

证明 可以假定这两个表示都是幺正表示，否则总可以通过适当的相似变换将其变换为等价的幺正表示。

为明确起见，不妨设 $d_p \geqslant d_q$。方程 (2.6) 两边取 Hermite 共轭，得

$$\boldsymbol{D}^{(p)\dagger}(g)\boldsymbol{M}^{\dagger} = \boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{D}^{(q)\dagger}(g),$$

利用表示的幺正性，得

$$\boldsymbol{D}^{(p)}(g^{-1})\boldsymbol{M}^{\dagger} = \boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{D}^{(q)}(g^{-1}), \tag{2.7}$$

此即

$$\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{M}^{\dagger} = \boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{D}^{(q)}(g), \quad \forall g \in G。$$

方程 (2.6) 左乘 $\boldsymbol{M}^{\dagger}$，上式右乘 $\boldsymbol{M}$，得

$$\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{(p)}(g) = \boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{D}^{(q)}(g)\boldsymbol{M}, \quad \boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{D}^{(q)}(g)\boldsymbol{M},$$

两式比较，即得

$$\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{(p)}(g) = \boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M}。$$

由于 $\boldsymbol{D}^{(p)}(g)$ 是不可约表示，故由 Schur 引理可得

$$\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M} = \lambda \boldsymbol{I}_p。$$

当 $d_p = d_q$ 时，如果 $\lambda = 0$，则由 $\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M} = \lambda \boldsymbol{I}_p = \boldsymbol{0}$ 可得

$$(\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M})_{ii} = \sum_{j=1}^{d_p} |M_{ij}|^2 = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, d_p。$$

由于上式是绝对值平方和，如果和式为零，则必须每项都为零。即

$$M_{ij} = 0, \quad i, j = 1, 2, \cdots, d_p,$$

此即 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0}$。如果 $\lambda \neq 0$，则有

$$\det(\lambda \boldsymbol{I}_p) = \lambda^{d_p} = \det(\boldsymbol{M}^{\dagger}\boldsymbol{M}) = |\det \boldsymbol{M}|^2 \neq 0。$$

故矩阵 $\boldsymbol{M}$ 非奇异，$\boldsymbol{M}^{-1}$ 存在，于是有

$$\boldsymbol{D}^{(q)}(g) = \boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{M}^{-1},$$

此时两个不可约表示是等价表示。

当 $d_p > d_q$ 时，矩阵 $\boldsymbol{M}$ 不是方阵，但可以添加一些 0 使其变成方阵，将添加后的矩阵记为

$$\boldsymbol{N} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1d_p} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2d_p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ m_{d_q1} & m_{d_q2} & \cdots & m_{d_qd_p} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}。$$

显然有

$$\boldsymbol{N}^\dagger \boldsymbol{N} = \boldsymbol{M}^\dagger \boldsymbol{M},$$

取行列式后即得

$$\det(\boldsymbol{N}^\dagger \boldsymbol{N}) = |\det \boldsymbol{N}|^2 = \det(\boldsymbol{M}^\dagger \boldsymbol{M}) = \det(\lambda \boldsymbol{I}_p) = \lambda^{d_p} = 0。$$

由此得到 $\lambda = 0$，并进一步可以得到 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0}$。因此，当两个不可约表示维数相同时，如果彼此等价，则矩阵 $\boldsymbol{M}$ 是非奇异的，两个不可约表示只相差一个相似变换。如果不等价，则 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0}$。当两个不可约表示维数不相同时，一定是不等价的，只能有 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0}$。这个定理是 Schur 引理的推广。

定理 2.6 (广义正交定理) 设 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G)$ 和 $\boldsymbol{D}^{(q)}(G)$ 是 n 阶群 G 的两个不等价不可约幺正表示，维数分别为 d_p 和 d_q。则下列正交关系成立：

$$\sum_{g \in G} D^{(p)*}_{\mu\nu}(g) D^{(q)}_{\mu'\nu'}(g) = \frac{n}{d_p} \delta_{pq} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}。 \tag{2.8}$$

令 $p = q$, $\mu = \mu'$, $\nu = \nu'$，得到

$$\sum_{g \in G} \left| D^{(p)}_{\mu\nu}(g) \right|^2 = \frac{n}{d_p}。$$

证明 定义矩阵

$$\boldsymbol{M} = \sum_{g \in G} \boldsymbol{D}^{(q)}(g) \boldsymbol{S} \boldsymbol{D}^{(p)}(g^{-1}),$$

其中 $\boldsymbol{S}$ 是任意一个 $d_q \times d_p$ 矩阵。由表示的性质可得

$$\begin{aligned} \boldsymbol{D}^{(q)}(g)\boldsymbol{M} &= \sum_{g' \in G} \boldsymbol{D}^{(q)}(g) \boldsymbol{D}^{(q)}(g') \boldsymbol{S} \boldsymbol{D}^{(p)}(g'^{-1}) \\ &= \sum_{g' \in G} \boldsymbol{D}^{(q)}(gg') \boldsymbol{S} \boldsymbol{D}^{(p)}((gg')^{-1}) \boldsymbol{D}^{(p)}(g) \\ &= \boldsymbol{M} \boldsymbol{D}^{(p)}(g)。 \end{aligned} \tag{2.9}$$

当 $p \neq q$ 时，两个表示是不等价的，按照定理 2.5，$\boldsymbol{M}$ 一定是零矩阵，即有

$$M_{\mu\mu'} = \sum_{g\in G}\sum_{\alpha\beta} D^{(q)}_{\mu\alpha}(g) S_{\alpha\beta} D^{(p)}_{\beta\mu'}(g^{-1}) = 0。$$

由于 $\boldsymbol{S}$ 是任意的，不妨取

$$S_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & 当\ \alpha=\nu,\ \beta=\nu'\ 时, \\ 0, & 其他, \end{cases}$$

于是有

$$\begin{aligned}\sum_{g\in G} D^{(q)}_{\mu\nu}(g) D^{(p)}_{\nu'\mu'}(g^{-1}) &= \sum_{g\in G} D^{(q)}_{\mu\nu}(g) D^{(p)\dagger}_{\nu'\mu'}(g) \\ &= \sum_{g\in G} D^{(p)*}_{\mu'\nu'}(g) D^{(q)}_{\mu\nu}(g) = 0。\end{aligned}$$

以上用到了表示的幺正性。当 $p=q$ 时，方程 (2.9) 变成

$$\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{(p)}(g)。$$

因为 $\boldsymbol{D}^{(p)}$ 是不可约表示，由 Schur 引理可知，矩阵 $\boldsymbol{M}$ 必须是常数和单位矩阵的乘积，即

$$\boldsymbol{M} = \lambda \boldsymbol{I}。$$

写成分量形式，即

$$M_{\mu\mu'} = \lambda \delta_{\mu\mu'}。$$

仍然取

$$S_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & 当\ \alpha=\nu',\ \beta=\nu\ 时, \\ 0, & 其他, \end{cases}$$

则得

$$\begin{aligned}\lambda\delta_{\mu'\mu} = M_{\mu'\mu} &= \sum_{g\in G}\sum_{\alpha\beta} D^{(p)}_{\mu'\alpha}(g) S_{\alpha\beta} D^{(p)}_{\beta\mu}(g^{-1}) \\ &= \sum_{g\in G} D^{(p)}_{\mu'\nu'}(g) D^{(p)}_{\nu\mu}(g^{-1}) = \sum_{g\in G} D^{(p)*}_{\mu\nu}(g) D^{(p)}_{\mu'\nu'}(g)。\end{aligned} \tag{2.10}$$

为了确定常数 λ，令 $\mu=\mu'$ 并对其求和，得

$$\begin{aligned}\sum_{g\in G}\sum_{\mu} D^{(p)*}_{\mu\nu}(g) D^{(p)}_{\mu\nu'}(g) &= \sum_{g\in G}\sum_{\mu} D^{(p)}_{\nu\mu}(g^{-1}) D^{(p)}_{\mu\nu'}(g) \\ &= \sum_{g\in G} D^{(p)}_{\nu\nu'}(g^{-1}g) = \sum_{g\in G} I_{\nu\nu'} = n\delta_{\nu\nu'} \\ &= \sum_{\mu} \lambda\delta_{\mu\mu} = \lambda d_p。\end{aligned}$$

由此得到

$$\lambda = \frac{n}{d_p}\delta_{\nu\nu'},$$

代入方程 (2.10) 后得

$$\sum_{g\in G} D^{(p)*}_{\mu\nu}(g)D^{(p)}_{\mu'\nu'}(g) = \frac{n}{d_p}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}。$$

综合上述结果，最后得到

$$\sum_{g\in G} D^{(p)*}_{\mu\nu}(g)D^{(q)}_{\mu'\nu'}(g) = \frac{n}{d_p}\delta_{pq}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}。$$

这就证明了不可约表示的广义正交定理，这是群表示论中的一个非常重要的定理。为了更清楚地理解这个定理，对于固定的 (p,μ,ν) 值，可以将

$$\left\{\sqrt{\frac{d_p}{n}}D^{(p)}_{\mu\nu}(g)\right\}$$

看成是具有 n 个分量的向量 $\boldsymbol{r}^{(p,\mu,\nu)}$，其中不同的群元依次对应了向量的不同分量，不同的 (p,μ,ν) 就代表了不同的向量。则上述方程可以写成向量的正交归一关系

$$\boldsymbol{r}^{(p,\mu,\nu)*}\cdot\boldsymbol{r}^{(q,\alpha,\beta)} = \delta_{pq}\delta_{\mu\alpha}\delta_{\nu\beta},$$

即向量族 $\{\boldsymbol{r}^{(p,\mu,\nu)}\}$ 彼此是互相正交的。

n 维向量空间中彼此正交的线性独立向量数最多为 n 个。如果群 G 总共有 r 个彼此不等价的不可约幺正表示，则一共有

$$d_1^2 + d_2^2 + \cdots + d_r^2$$

个不同的向量，因此条件

$$d_1^2 + d_2^2 + \cdots + d_r^2 \leqslant n$$

一定成立。事实上，我们有如下定理。

定理 2.7 (Burnside 定理) 群 G 的所有不等价不可约表示的维数平方和等于群 G 的阶数，即

$$d_1^2 + d_2^2 + \cdots + d_r^2 = n。$$

这个定理将在稍后加以证明。对于六阶群 G_6^2，已经知道有两个一维表示和一个二维表示，可以证明这些都是不可约表示。因此有

$$d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 = 1^2 + 1^2 + 2^2 = 6 = n,$$

不可约表示的维数平方和正好等于群的阶数。对于四阶群 $G_4^2 = \{e,a,b,c\}$，容易找到下列 4 个一维不可约表示：

$$\{e,a,b,c\}\to\{1,1,1,1\},\qquad \{e,a,b,c\}\to\{1,1,-1,-1\},$$
$$\{e,a,b,c\}\to\{1,-1,1,-1\},\quad \{e,a,b,c\}\to\{1,-1,-1,1\},$$

同样有

$$d_1^2+d_2^2+d_3^2+d_4^2=1^2+1^2+1^2+1^2=4=n。$$

定理 2.8 (特征标正交定理) 群 G 的不等价不可约表示的特征标满足正交关系

$$\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(p)*}(g)\chi^{(q)}(g)=\delta_{pq}。\tag{2.11}$$

证明 由广义正交定理，令 $\mu=\nu,\ \mu'=\nu'$ 并对其求和，得

$$\begin{aligned}\sum_{g\in G}\sum_{\mu\nu}D^{(p)*}_{\mu\mu}(g)D^{(q)}_{\nu\nu}(g)&=\sum_{g\in G}\chi^{(p)*}(g)\chi^{(q)}(g)\\&=\frac{n}{d_p}\delta_{pq}\sum_{\mu\nu}\delta_{\mu\nu}\delta_{\mu\nu}=\frac{n}{d_p}\delta_{pq}\sum_{\mu}\delta_{\mu\mu}=n\delta_{pq}。\end{aligned}$$

由于同类元素的特征标相同，可以将求和改写为

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k}k_i\chi^{(p)*}([g_i])\chi^{(q)}([g_i])=\delta_{pq},\tag{2.12}$$

其中 $[g_i]$ 表示群元 g_i 所在的类，k_i 是该类所包含的元素数。如果群 G 有 k 个类，则对固定的 p，可以将

$$\left\{\sqrt{\frac{k_i}{n}}\chi^{(p)}([g_i])\right\}$$

看成是一个 k 维向量 $\boldsymbol{r}^{(p)}$，其中不同的类对应了向量的不同分量，而不同的不可约表示则代表了不同的向量。这样，特征标的正交关系就变成了 k 维向量空间中的正交关系

$$\boldsymbol{r}^{(p)*}\cdot\boldsymbol{r}^{(q)}=\delta_{pq}。$$

k 维向量空间中彼此正交的线性独立的向量数最多不超过 k 个。如果群 G 一共有 r 个不等价不可约表示，则由此可以得到结论，群 G 不等价不可约表示的数目不会超过类的数目，$r\leqslant k$。实际上，我们有如下定理。

定理 2.9 群 G 不等价不可约表示的数目等于类的数目，即 $r=k$。

这个定理将在后面证明。通过定理 2.7 和定理 2.9 可以唯一确定群 G 的不等价不可约表示的数目和维数。对于 Abel 群，类的数目就是群 G 的阶数，因此有 n 个不等价的不可约表示。由定理 2.7 可知，Abel 群的所有不可约表示都必须是一维的，即满足

$$1^2+1^2+\cdots+1^2=n。$$

下面给出几个例子。六阶群 G_6^2 有 3 个类，因此有 3 个不可约表示。方程

$$d_1^2+d_2^2+d_3^2=6$$

的唯一的解是

$$1^2+1^2+2^2=6。$$

点群 D_4 为八阶群，有 5 个类，因此有 5 个不可约表示。方程

$$d_1^2+d_2^2+d_3^2+d_4^2+d_5^2=8$$

的唯一解是

$$1^2+1^2+1^2+1^2+2^2=8。$$

点群 T 是 12 阶群，有 4 个类，其解为

$$1^2+1^2+1^2+3^2=12。$$

置换群 S_4 是 24 阶群，有 5 个类，其解为

$$1^2+1^2+2^2+3^2+3^2=24。$$

定理 2.10 两个表示等价的充要条件是具有相同的特征标。

证明 必要性是显然的，因为等价表示具有相同的特征标。由

$$\boldsymbol{D}'(g)=\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1},$$

立即得到

$$\chi'(g)=\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{D}'(g)=\mathrm{Tr}[\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1}]=\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{D}(g)=\chi(g)。$$

充分性。任何可约表示总可以通过适当的相似变换将其约化为不可约表示的直和，即有

$$\boldsymbol{D}(g)=\sum_p a_p\boldsymbol{D}^{(p)}(g),$$

由此得相应的特征标为

$$\chi(g)=\sum_p a_p\chi^{(p)}(g)。$$

假定另一个表示 $\boldsymbol{D}'(g)$ 可以约化成

$$\boldsymbol{D}'(g)=\sum_p a'_p\boldsymbol{D}^{(p)}(g),$$

特征标为

$$\chi'(g)=\sum_p a'_p\chi^{(p)}(g)。$$

则由特征标相等的条件 $\chi(g)=\chi'(g)$ 可得

$$\sum_p(a_p-a'_p)\chi^{(p)}(g)=0。$$

两边乘以 $\chi^{(q)*}(g)$ 后对 $g\in G$ 求和，利用定理 2.8 即得

$$\sum_p(a_p-a'_p)\sum_{g\in G}\chi^{(q)*}(g)\chi^{(p)}(g)=\sum_p n(a_p-a'_p)\delta_{pq}=n(a_q-a'_q)=0,$$

此即

$$a_q = a'_q。$$

因此，如果两个表示具有相同的特征标，则它们包含相同的不可约表示，因而是等价的表示。

如果可约表示 $\boldsymbol{D}(g)$ 可以约化为一些不可约表示的直和，即有

$$\boldsymbol{D}(g) = \sum_p a_p \boldsymbol{D}^{(p)}(g),$$

相应的特征标为

$$\chi(g) = \sum_p a_p \chi^{(p)}(g),$$

则包含在表示 $\boldsymbol{D}(g)$ 中第 p 个不可约表示的重数 a_p 可以通过特征标正交关系求得，具体为

$$a_p = \frac{1}{n} \sum_{g \in G} \chi^{(p)*}(g)\chi(g)。$$

进一步有

$$\begin{aligned}\sum_{g\in G} |\chi(g)|^2 &= \sum_{g\in G} \sum_p a_p \chi^{(p)*}(g) \sum_q a_q \chi^{(q)}(g) \\ &= \sum_{p,q} a_p a_q \sum_{g\in G} \chi^{(p)*}(g)\chi^{(q)}(g) = \sum_{p,q} a_p a_q n \delta_{pq} = n \sum_p a_p^2 \geqslant n。\end{aligned}$$

如果表示是不可约的，则对某个 p 有 $a_p = 1$，其余 $a_p = 0$。因此

$$\sum_{g\in G} |\chi(g)|^2 = n$$

对不可约表示成立。而对于可约表示，则有

$$\sum_{g\in G} |\chi(g)|^2 > n。$$

这个条件提供了判断一个表示是否可约的判据。显然，一维表示一定是不可约表示。

2.3 正则表示

从表示的定义可以看到，要构造群 G 的一个表示，需要找到一个与群 G 同构或同态的算符群 Γ_G 以及在算符群作用下不变的线性向量空间。取定一组基后，用算符作用在这组基上就可以得到相应的表示矩阵。

由群的封闭性可知，如果将群 G 的 n 个群元看成是 n 维向量空间的基，即 $\boldsymbol{e}_i = g_i$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$，同时将群元 g 看成作用在这个向量空间上的算符，即 $\Gamma_g = g (g \in G)$，则算符对基的作用可以写成

$$\Gamma_g \boldsymbol{e}_i = g g_i = g_j, \quad \{g_i\} \xrightarrow{g} \{g_j\}。$$

上式表明这组基 $\{g_i\}$ 张成的向量空间在算符 $g(g \in G)$ 的作用下不变，因此可以负载群 G 的一个表示。这个表示称为正则表示。为了得出正则表示矩阵，将上式改写为

$$gg_i = \sum_{k=1}^{n} g_k D_{ki}^{(c)}(g), \quad \forall\, g \in G,$$

其中正则表示矩阵 $\boldsymbol{D}^{(c)}(g)$ 的定义为

$$D_{ki}^{(c)}(g) = \begin{cases} 1, & k = j,\ gg_i = g_j, \\ 0, & k \neq j,\ gg_i \neq g_j。 \end{cases}$$

容易证明 $\boldsymbol{D}^{(c)}(g)(g \in G)$ 满足群的同态关系，是群 G 的一个表示。由于

$$\left(\boldsymbol{D}^{(c)}(g_1)\boldsymbol{D}^{(c)}(g_2)\right)_{ki} = D_{kj}^{(c)}(g_1) D_{ji}^{(c)}(g_2),$$

当

$$g_2 g_i = g_j,\ g_1 g_j = g_k,$$

即

$$(g_1 g_2) g_i = g_k$$

时，有

$$(\boldsymbol{D}^{(c)}(g_1)\boldsymbol{D}^{(c)}(g_2))_{ki} = 1$$

及

$$D_{ki}^{(c)}(g_1 g_2) = 1。$$

而其余情况则有

$$\left(\boldsymbol{D}^{(c)}(g_1)\boldsymbol{D}^{(c)}(g_2)\right)_{ki} = D_{ki}^{(c)}(g_1 g_2) = 0。$$

因此

$$\boldsymbol{D}^{(c)}(g_1)\boldsymbol{D}^{(c)}(g_2) = \boldsymbol{D}^{(c)}(g_1 g_2),\ \forall g_1, g_2 \in G。$$

以上是用左作用 (左乘) 来定义群 G 的正则表示。当然，也可以用右作用来定义。

从定义可以知道，n 阶群的正则表示是 n 维表示。其中正则表示矩阵 $\boldsymbol{D}^{(c)}(g)$ 中的每行每列只有一个矩阵元是 1，其余都是 0。

可以利用乘法表来构造正则表示的表示矩阵。由正则表示的定义，仅当 $gg_i = g_j$ 或 $g = g_j g_i^{-1}$ 时，$\boldsymbol{D}_{ji}^{(c)}(g) = 1$。这意味着当 $g_j g_i^{-1}$ 等于 g 时，表示矩阵 $\boldsymbol{D}^{(c)}(g)$ 的第 j 行，第 i 列的矩阵元为 1，其余矩阵元为 0。

因此可以构造一个 $g_j \sim g_i^{-1}$ 的乘法表，然后按照下列规则很容易写出正则表示矩阵 $\boldsymbol{D}^{(c)}(g)$：

每当群元 g 在表中某个位置出现，就在表示矩阵的相应位置填上 1，其余位置则全部填 0。

显然对单位元有 $e = g_i g_i^{-1}$，因而相应的表示矩阵为单位阵，$\boldsymbol{D}^{(c)}(e) = \boldsymbol{I}$。并且除单位元外，所有群元的正则表示矩阵对角元都是 0，即

$$D_{ii}^{(c)}(g) = 0, \quad g \neq e, \quad i = 1, 2, \cdots, n。$$

因此正则表示的特征标为

$$\chi^{(c)}(g)=\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{D}^{(c)}(g)=\begin{cases}n, & g=e,\\ 0, & g\neq e。\end{cases}$$

由于

$$\sum_{g\in G}|\chi^{(c)}(g)|^2=n^2>n\qquad(n>1),$$

故正则表示一定是可约表示，可以将其约化为不可约表示的直和

$$\boldsymbol{D}^{(c)}(g)=\sum_p a_p\boldsymbol{D}^{(p)}(g),$$

相应的特征标为

$$\chi^{(c)}(g)=\sum_p a_p\chi^{(p)}(g),\tag{2.13}$$

其中约化系数为

$$a_p=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(p)*}(g)\chi^{(c)}(g)=\frac{1}{n}\chi^{(p)*}(e)\chi^{(c)}(e)=\frac{1}{n}\cdot d_p\cdot n=d_p,$$

这里 d_p 是群 G 第 p 个不可约表示的维数。上式表明，正则表示中包含群 G 的第 p 个不可约表示的重数正好是该表示的维数 d_p。因为 $d_p\neq 0$，故对任意的 p，都有 $a_p\neq 0$，即正则表示中包含了群 G 的所有不可约表示。

将 $a_p=d_p$ 代回方程 (2.13)，得

$$\chi^{(c)}(g)=\sum_p a_p\chi^{(p)}(g)=\sum_p d_p\chi^{(p)}(g)。$$

取 $g=e$，有

$$\chi^{(c)}(e)=\sum_p d_p\chi^{(p)}(e)=\sum_p d_p^2=n,\tag{2.14}$$

即群 G 的所有不可约表示的维数的平方和等于群的阶，这正是定理 2.7。如果 $g\neq e$，则有

$$\chi^{(c)}(g)=0,$$

或

$$\sum_p d_p\chi^{(p)}(g)=\sum_p\chi^{(p)*}(e)\chi^{(p)}(g)=0\quad(g\neq e)。\tag{2.15}$$

这可以进一步推广为

$$\frac{1}{n}\sum_p k_i\chi^{(p)*}([g_i])\chi^{(p)}([g_j])=\delta_{ij}。\tag{2.16}$$

这一结果将在稍后证明。

2.4 基础表示

前面叙述中负载正则表示的基是群元本身。实际上也可以用子群 H 的陪集 $\{g_iH\}$ 作为基来负载群 G 的表示，这样得到的表示称为基础表示。

设群 G 可以按子群 H 分解为陪集的直和

$$G = H \oplus g_2H \oplus \cdots \oplus g_lH = \sum_{i=1}^{l} g_iH,$$

其中 $g_1 = e$。由

$$g(g_iH) = gg_iH = g_jH \in \{g_iH\}$$

可以看到，陪集 $\{g_iH\}$ 张成的向量空间在群 G 的作用下是不变的，因而可以负载群 G 的表示。将上式改写为

$$g(g_iH) = \sum_{k=1}^{l} (g_kH) D_{ki}^{(d)}(g), \quad i = 1, 2, \cdots, l, \ g \in G,$$

其中矩阵 $\boldsymbol{D}^{(d)}(g)$ 定义为

$$D_{ki}^{(d)}(g) = \begin{cases} 1, & k = j, \ gg_i \in g_jH, \\ 0, & k \neq j, \end{cases}$$

这里

$$gg_i = g_jh_i(g)。$$

如果陪集的代表元是固定的，则式中 $h_i(g)$ 由 g, g_i 完全确定。

容易看到，当 $H = \{e\}$ 时，基础表示就是正则表示。

例 2.1 对于群 G_6^2，存在子群 $H = \{e, d, f\}$，有陪集分解

$$G_6^2 = eH \oplus aH。$$

当 $g = \{a, b, c\}$ 时，有

$$g(eH) = aH, \ g(aH) = eH;$$

当 $g = \{e, d, f\}$ 时，有

$$g(eH) = eH, \ g(aH) = aH。$$

由此得到基础表示矩阵

$$\boldsymbol{D}^{(d)}(a) = \boldsymbol{D}^{(d)}(b) = \boldsymbol{D}^{(d)}(c) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}^{(d)}(e) = \boldsymbol{D}^{(d)}(d) = \boldsymbol{D}^{(d)}(f) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}。$$

从定义可以看到，构造基础表示，并不要求 H 是不变子群。如果 H 是群 G 的不变子群，则基础表示就是商群 G/H 的正则表示。

可以用类似的方法来构造基础表示的表示矩阵。将 $gg_i \in g_jH$ 改写为

$$g \in g_j H g_i^{-1} = g_j H H g_i^{-1},$$

可以构造乘法表 $g_j H \sim H g_i^{-1}$，则当

$$g \in g_j H H g_i^{-1}$$

时，有

$$D_{ji}^{(d)}(g) = 1;$$

否则

$$D_{ji}^{(d)}(g) = 0。$$

因此，只要看群元 g 出现在表中哪个位置，就在相应位置填上 1，其余位置填上 0，即可得到表示矩阵 $\boldsymbol{D}^{(d)}(g)$。

例 2.2 考虑群 G_6^2 的子群 $H = \{e, a\}$，容易计算得到

$$aH = \{e, a\}, \quad bH = \{b, f\}, \quad cH = \{c, d\},$$
$$Ha^{-1} = \{e, a\}, \quad Hb^{-1} = \{b, d\}, \quad Hc^{-1} = \{c, f\}。$$

构造乘法表如下：

	Ha^{-1}	Hb^{-1}	Hc^{-1}
aH	$\{e, a\}$	$\{b, d\}$	$\{c, f\}$
bH	$\{b, f\}$	$\{e, c\}$	$\{a, d\}$
cH	$\{c, d\}$	$\{a, f\}$	$\{e, b\}$

则从表中很容易得到群 G_6^2 的基础表示矩阵

$$\boldsymbol{D}^{(d)}(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}^{(d)}(a) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}^{(d)}(b) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{D}^{(d)}(c) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}^{(d)}(d) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}^{(d)}(f) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}。$$

2.5 诱导表示

我们知道，群 G 的表示同时也是其子群的表示。反过来，如果找到子群 $H \subset G$ 的一个不可约表示，则通过诱导表示方法可以构造出群 G 的不可约表示。这个方法不仅可用于有限群，也可用于第 4 章讨论的晶格空间群和第 6 章讨论的紧致 Lie 群，甚至也可以用于更一般的连续群。

设负载子群 H 的不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(H)}$ 的基为 $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_d\}$，$d$ 为 $\boldsymbol{D}^{(H)}$ 的维数。则有

$$\Gamma_g \boldsymbol{e}_i = \sum_{j=1}^{d} D_{ji}^{(H)}(g) \boldsymbol{e}_j, \quad g \in H,$$

然后将群 G 按子群 H 作陪集分解得到

$$G=\sum_{\alpha=1}^{m} g_\alpha H, \quad m=n/s,$$

其中 n,s 分别是群 G 和子群 H 的阶数。作集合

$$\{\Gamma_{g_\alpha}\boldsymbol{e}_i\}, \quad \alpha=1,2,\cdots,m,\ i=1,2,\cdots,d,$$

集合中共有 md 个元素，可以用来负载群 G 的一个表示。这个表示称为 $\boldsymbol{D}^{(H)}$ 的诱导表示。

由 $gg_\alpha \in G$ 可得

$$gg_\alpha \in g_\beta H,$$

或

$$gg_\alpha = g_\beta h_\alpha(g),$$

其中 g_α, g_β 是陪集的代表元。上式可以写成

$$h_\alpha(g)=g_\beta^{-1}gg_\alpha。$$

由基础表示的定义，有

$$G^{(d)}_{\gamma\alpha}(g)=\begin{cases} 1, & \gamma=\beta,\ gg_\alpha\in g_\beta H,\\ 0, & \gamma\neq\beta, \end{cases}$$

于是对任意的 $g\in G$，有

$$\begin{aligned}\Gamma_g(\Gamma_{g_\alpha}\boldsymbol{e}_i)&=\Gamma_{gg_\alpha}\boldsymbol{e}_i=\Gamma_{g_\beta h_\alpha(g)}\boldsymbol{e}_i=\Gamma_{g_\beta}\Gamma_{h_\alpha(g)}\boldsymbol{e}_i\\ &=\Gamma_{g_\beta}\sum_{j=1}^{d}D^{(H)}_{ji}(h_\alpha(g))\boldsymbol{e}_j\\ &=\sum_{\gamma=1}^{m}D^{(d)}_{\gamma\alpha}(g)\Gamma_{g_\gamma}\sum_{j=1}^{d}D^{(H)}_{ji}(h_\alpha(g))\boldsymbol{e}_j\\ &=\sum_{\gamma=1}^{m}\sum_{j=1}^{d}\Gamma_{g_\gamma}\boldsymbol{e}_jD^{(d)}_{\gamma\alpha}(g)D^{(H)}_{ji}(h_\alpha(g))\\ &=\sum_{\gamma=1}^{m}\sum_{j=1}^{d}\Gamma_{g_\gamma}\boldsymbol{e}_jD^{(I)}_{\gamma j,\alpha i}(g),\end{aligned}$$

其中

$$D^{(I)}_{\gamma j,\alpha i}(g)=D^{(d)}_{\gamma\alpha}(g)D^{(H)}_{ji}(h_\alpha(g))。$$

因此，集合 $\{\Gamma_{g_\alpha}\boldsymbol{e}_i\}$ 在群 G 的作用下不变，可以负载群 G 的一个表示。进一步可以将表示矩阵写成

$$D^{(I)}_{[\beta\alpha]}(g)=D^{(d)}_{\beta\alpha}(g)\boldsymbol{D}^{(H)}(h_\alpha(g))。$$

这表示，超矩阵 $D^{(I)}_{[\beta\alpha]}(g)$ 的每一个矩阵元是矩阵 $\boldsymbol{D}^{(H)}(h_\alpha(g))$。因此，每个群元的诱导表示矩阵实际上是基础表示矩阵 $\boldsymbol{D}^{(d)}(g)$ 和相应的子群 H 的表示矩阵 $\boldsymbol{D}^{(H)}(h_\alpha(g))$ 的直积。

根据定义，我们可以按如下方式来构造诱导表示。首先按上节的方法构造群 G 的基础表示，然后根据非零矩阵元的位置，计算 $g_\beta^{-1}gg_\alpha = h_\alpha(g)$，最后将 1 换成子群 H 的表示矩阵 $\boldsymbol{D}^{(H)}(h_\alpha(g))$，0 换成相应维数的零矩阵，即得诱导表示矩阵。

容易求得诱导表示的特征标为

$$\chi^{(I)}(g) = \sum_{\alpha,i} D^{(I)}_{\alpha i,\alpha i}(g) = \sum_{\alpha} D^{(d)}_{\alpha\alpha}(g) \sum_{i} D^{(H)}_{ii}(h_\alpha(g)) = \sum_{\alpha} \chi^{(H)}(g_\alpha^{-1}gg_\alpha),$$

其中求和对所有满足 $g_\alpha^{-1}gg_\alpha \in H$ 的陪集代表元 g_α 进行。

很显然，如果取子群 H 的表示为一维恒等表示，则得到的诱导表示就是上节讨论的基础表示。如果取子群 H 的表示为正则表示，则得到的诱导表示即为群 G 的正则表示。

诱导表示 $\boldsymbol{D}^{(I)}$ 一般是群 G 的可约表示，可以按群 G 的不可约表示约化为

$$\boldsymbol{D}^{(I)}(g) = \sum_{G} a_G \boldsymbol{D}^{(G)}(g), \quad g \in G。$$

群 G 的不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(G)}(g)$ 也是子群 H 的表示，但一般是可约表示，可以按子群 H 的不可约表示进行约化为

$$\boldsymbol{D}^{(G)}(h) = \sum_{H} b_H \boldsymbol{D}^{(H)}(h), \quad h \in H。$$

由特征标正交关系可得

$$a_G = \frac{1}{n}\sum_{g\in G} \chi^{(G)*}(g)\chi^{(I)}(g) = \frac{1}{n}\sum_{g\in G,\,\alpha} \chi^{(G)*}(g)\chi^{(H)}(g_\alpha^{-1}gg_\alpha),$$

其中 g 满足 $g_\alpha^{-1}gg_\alpha = h \in H$，因此有

$$\chi^{(G)}(g) = \chi^{(G)}(g_\alpha h g_\alpha^{-1}) = \chi^{(G)}(h)。$$

代入上式后得

$$a_G = \frac{1}{n}\sum_{h\in H,\,\alpha} \chi^{(G)*}(h)\chi^{(H)}(h) = \frac{1}{s}\sum_{h\in H} \chi^{(G)*}(h)\chi^{(H)}(h) = b_H。$$

即诱导表示 $\boldsymbol{D}^{(I)}$ 中包含群 G 不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(G)}(g)$ 的重数正好等于 $\boldsymbol{D}^{(G)}(h)$ 中包含子群 H 的不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(H)}(h)$ 的重数。这个结果称为 Frobenius 倒易定理。

2.6 特征标表

设群 G 一共有 k 个类，其中类 $[g_i]$ 有 k_i 个元素。考虑类的和

$$\boldsymbol{C}_i = \sum_{g\in[g_i]} \boldsymbol{D}^{(p)}(g),$$

这是同类元素的不可约表示矩阵的和。容易推得下列性质：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{D}^{(p)}(g)&=\sum_{g'\in[g_i]}\boldsymbol{D}^{(p)}(g')\boldsymbol{D}^{(p)}(g)=\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{D}^{(p)-1}(g)\sum_{g'\in[g_i]}\boldsymbol{D}^{(p)}(g')\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\\&=\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\sum_{g'\in[g_i]}\boldsymbol{D}^{(p)}(g^{-1})\boldsymbol{D}^{(p)}(g')\boldsymbol{D}^{(p)}(g)=\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\sum_{g'\in[g_i]}\boldsymbol{D}^{(p)}(g^{-1}g'g)\\&=\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\sum_{g'\in[g_i]}\boldsymbol{D}^{(p)}(g')=\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{C}_i,\end{aligned}$$

即矩阵 $\boldsymbol{C}_i$ 与 $\boldsymbol{D}^{(p)}(g)$ 对易。按照 Schur 引理，如果 $\boldsymbol{D}^{(p)}(g)$ 是不可约表示，则 $\boldsymbol{C}_i$ 一定是常数和单位阵的乘积，即

$$\boldsymbol{C}_i=\lambda_i\boldsymbol{I}。$$

进一步可以推得

$$\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{C}_j\boldsymbol{D}^{(p)-1}(g)=\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{D}^{(p)-1}(g)\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{C}_j\boldsymbol{D}^{(p)-1}(g)=\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{C}_j,$$

即类的和之积仍与不可约表示对易。容易证明，只有完整类的和才与不可约表示对易。因此，类的和之积一定是一些完整类的和。可以将其写成

$$\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{C}_j=\sum_k a_{ij}^k\boldsymbol{C}_k,$$

或

$$\lambda_i\lambda_j=\sum_k a_{ij}^k\lambda_k。\tag{2.17}$$

取矩阵 $\boldsymbol{C}_i$ 的迹可得

$$\operatorname{Tr}\boldsymbol{C}_i=\sum_{g\in[g_i]}\operatorname{Tr}\boldsymbol{D}^{(p)}(g)=k_i\chi^{(p)}([g_i])=\lambda_i\operatorname{Tr}\boldsymbol{I}=d_p\lambda_i,$$

由此解得

$$\lambda_i=\frac{k_i\chi^{(p)}([g_i])}{d_p}=\frac{k_i\chi^{(p)}([g_i])}{\chi^{(p)}(e)},$$

代回方程 (2.17) 得

$$\lambda_i\lambda_j=\frac{k_ik_j\chi^{(p)}([g_i])\chi^{(p)}([g_j])}{[\chi^{(p)}(e)]^2}=\sum_l a_{ij}^l\lambda_l=\sum_l a_{ij}^l\frac{k_l\chi^{(p)}([g_l])}{\chi^{(p)}(e)},$$

由此得到

$$\chi^{(p)}([g_i])\chi^{(p)}([g_j])=\frac{1}{k_ik_j}\sum_l a_{ij}^lk_l\chi^{(p)}([g_l])\chi^{(p)}(e),$$

对指标 p 求和，得

$$\begin{aligned}\sum_p\chi^{(p)}([g_i])\chi^{(p)}([g_j])&=\frac{1}{k_ik_j}\sum_l a_{ij}^lk_l\sum_p\chi^{(p)}([g_l])\chi^{(p)}(e)\\&=\frac{1}{k_ik_j}\sum_l a_{ij}^lk_ln\delta_{l1}=\frac{nk_1}{k_ik_j}a_{ij}^1。\end{aligned}$$

以上推导用到了方程 (2.14) 和方程 (2.15)，其中 $k_1=1$ 是单位元 e 所在类的元素数，系数 a_{ij}^1 表示 $\boldsymbol{C}_i$ 和 $\boldsymbol{C}_j$ 的乘积中包含 $\boldsymbol{C}_1$ 的重数。由

$$\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{C}_j=\sum_{g\in[g_i]}\sum_{g'\in[g_j]}\boldsymbol{D}^{(p)}(gg')=a_{ij}^1\boldsymbol{C}_1+\sum_{k=2}a_{ij}^k\boldsymbol{C}_k$$

易见，当 $[g_j]=[g_i^{-1}]$ 时，上述求和中将包含 k_i 个 $\boldsymbol{C}_1$。即

$$a_{ij}^1=\begin{cases}k_i, & [g_i]=[g_j^{-1}],\\ 0, & [g_i]\neq[g_j^{-1}]。\end{cases}$$

因此有

$$\sum_p\chi^{(p)}([g_i])\chi^{(p)}([g_j])=\frac{n}{k_ik_j}a_{ij}^1=\frac{n}{k_i}\delta_{ij^{-1}},$$

其中 j^{-1} 是对应类 $[g_j^{-1}]$ 的指标。上式可写成

$$\sum_p\chi^{(p)}([g_i])\chi^{(p)}([g_j^{-1}])=\sum_p\chi^{(p)}([g_i])\chi^{(p)*}([g_j])=\frac{n}{k_i}\delta_{ij}。$$

这就证明了方程 (2.16)。与前面讨论类似，如果将

$$\left\{\sqrt{\frac{k_i}{n}}\,\chi^{(p)}([g_i])\right\}$$

表示成为 r 维空间中的向量 $\boldsymbol{r}_i$，其中不同的不可约表示构成向量的不同分量，而不同的类则给出了不同向量。这样，方程 (2.16) 可以改写为

$$\boldsymbol{r}_i^*\cdot\boldsymbol{r}_j=\delta_{ij}。$$

这是 r 维向量空间中的正交关系。如果群 G 有 k 个类，则一共有 k 个向量。由于在 r 维空间中讨论问题，彼此正交的线性独立向量数最多是 r 个，故有 $k\leqslant r$。

又由定理 2.8 知，$k\geqslant r$，因此最后得到 $k=r$，即群 G 不可约表示的数目等于群 G 的类数。这正是定理 2.9 的结论。

利用上面这些正交关系，可以构造群 G 的特征标表，其中包括了群 G 的所有不等价的不可约表示。

如对于群 G_6^2，有 3 个类，由 $d_1^2+d_2^2+d_3^2=6$ 可知，G_6^2 有 2 个一维表示，1 个二维表示。由此可以写出特征标表的第一行和第一列。其余未知的特征标可以通过正交关系 (2.12) 和方程 (2.16) 解出。分别按行正交和列正交关系写出下列方程：

$$1+3x+2y=0,\quad 2+3z+2w=0,\quad 1+x+2z=0,$$

$$1+y+2w=0,\quad 1+3x^2+2y^2=6。$$

容易求得其解为

$$x=-1,\quad y=1,\quad z=0,\quad w=-1。$$

最后得到群 G_6^2 的特征标表如下。

G_6^2	e	$3a$	$2d$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	x	y
$\Gamma^{(3)}$	2	z	w

$\longrightarrow$

G_6^2	e	$3a$	$2d$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	-1	1
$\Gamma^{(3)}$	2	0	-1

2.7 表示的直积，C-G 系数

设有两个群 G_1 和 G_2，阶数分别为 n_1, n_2，则直积群 $G_1 \otimes G_2$ 是 $n_1 n_2$ 阶的群。令 $\boldsymbol{D}_1^{(p)}(G_1), \boldsymbol{D}_2^{(q)}(G_2)$ 分别为群 G_1 和 G_2 的不可约表示，维数分别为 d_p^1 和 d_q^2。作直积

$$\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g) = \boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1) \otimes \boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2), \quad \forall g_1 \in G_1, g_2 \in G_2,$$

则可以证明，$\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)$ 是直积群 $G = G_1 \otimes G_2$ 的维数为 $d_p^1 d_q^2$ 的表示，并且是不可约表示。其中矩阵直积的定义为 (见附录 A)

$$(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{ik,jl} = A_{ij} B_{kl},$$

它具有如下性质：

$$(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})(\boldsymbol{C} \otimes \boldsymbol{D}) = (\boldsymbol{AC}) \otimes (\boldsymbol{BD}), \quad \mathrm{Tr}(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B}) = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{A}\,\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{B}。$$

如考虑两个 2×2 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，则有

$$\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{11,11} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{11,12} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{11,21} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{11,22} \\ (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{12,11} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{12,12} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{12,21} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{12,22} \\ (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{21,11} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{21,12} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{21,21} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{21,22} \\ (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{22,11} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{22,12} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{22,21} & (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})_{22,22} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}\boldsymbol{B} & A_{12}\boldsymbol{B} \\ A_{21}\boldsymbol{B} & A_{22}\boldsymbol{B} \end{bmatrix}。$$

显然

$$\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B} \neq \boldsymbol{B} \otimes \boldsymbol{A}。$$

这一运算很容易推广到一般情形。

容易证明 $\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)$ 是直积群 $G = G_1 \otimes G_2$ 的表示，即有

$$\begin{aligned} \boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g') &= [\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1) \otimes \boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2)][\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1') \otimes \boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2')] \\ &= [\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1')] \otimes [\boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2)\boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2')] \\ &= \boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1 g_1') \otimes \boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2 g_2') = \boldsymbol{D}^{(p,q)}(gg')。 \end{aligned}$$

下面来证明这个表示的不可约性。设矩阵 $\boldsymbol{M}$ 可以写成直积形式

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{M}_1\otimes\boldsymbol{M}_2,$$

如果

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)=\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)\boldsymbol{M},\ \ \forall g\in G,$$

则

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{M}_1\otimes\boldsymbol{M}_2][\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)\otimes\boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2)]&=[\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)]\otimes[\boldsymbol{M}_2\boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2)]\\&=[\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)\otimes\boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2)][\boldsymbol{M}_1\otimes\boldsymbol{M}_2]\\&=[\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)\boldsymbol{M}_1]\otimes[\boldsymbol{D}_2^{(q)}(g_2)\boldsymbol{M}_2]。\end{aligned}$$

取 $g=(g_1,e_2)$，则 $\boldsymbol{D}_2^{(q)}(e_2)=\boldsymbol{I}_q$ 是单位矩阵。因此有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)\otimes\boldsymbol{M}_2\boldsymbol{I}_q&=\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)\otimes\boldsymbol{M}_2\\&=\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)\boldsymbol{M}_1\otimes\boldsymbol{I}_q\boldsymbol{M}_2\\&=\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)\boldsymbol{M}_1\otimes\boldsymbol{M}_2。\end{aligned}$$

由于 $\boldsymbol{M}_2\neq\boldsymbol{0}$，$\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)$ 是 G_1 的不可约表示，故由

$$\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)=\boldsymbol{D}_1^{(p)}(g_1)\boldsymbol{M}_1,$$

得

$$\boldsymbol{M}_1=\lambda_1\boldsymbol{I}_p。$$

类似可以得到

$$\boldsymbol{M}_2=\lambda_2\boldsymbol{I}_q。$$

最后得到

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{M}_1\otimes\boldsymbol{M}_2=\lambda_1\lambda_2\boldsymbol{I}_p\otimes\boldsymbol{I}_q=\lambda_1\lambda_2\boldsymbol{I}_{pq}。$$

因此 $\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)$ 是直积群 $G=G_1\otimes G_2$ 的不可约表示。当指标 (p,q) 取遍 $p=1,2,\cdots,r_1,q=1,2,\cdots,r_2$ 时，将得到 r_1r_2 个不可约表示。表示维数的平方和为

$$\begin{aligned}&(d_1^{(1)}d_1^{(2)})^2+(d_1^{(1)}d_2^{(2)})^2+\cdots+(d_1^{(1)}d_{r_2}^{(2)})^2+(d_2^{(1)}d_1^{(2)})^2\\&+\cdots+(d_2^{(1)}d_{r_2}^{(2)})^2+\cdots+(d_{r_1}^{(1)}d_1^{(2)})^2+\cdots+(d_{r_1}^{(1)}d_{r_2}^{(2)})^2\\&=\big((d_1^{(1)})^2+\cdots(d_{r_1}^{(1)})^2\big)\big((d_1^{(2)})^2+\cdots(d_{r_2}^{(2)})^2\big)=n_1n_2=n,\end{aligned}$$

其中 $n=n_1n_2$ 是直积群 $G=G_1\otimes G_2$ 的阶数。这意味着当 (p,q) 取遍所有可能值时，就得到了直积群 $G=G_1\otimes G_2$ 的所有不可约表示。因此，对直积群 $G=G_1\otimes G_2$ 而言，只需要分别研究两个较小的群 G_1 和 G_2 的不可约表示即可。

现在来讨论群 G 的两个不可约表示的直积。我们有如下定理。

定理 2.11 设 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G)$, $\boldsymbol{D}^{(q)}(G)$ 是群 G 的两个不可约幺正表示，维数分别为 d_p 和 d_q，则这两个不可约表示的直积

$$\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)=\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(g),\quad \forall g\in G$$

是群 G 的维数为 d_pd_q 的幺正表示，它一般是可约表示。

证明 对任意的 $g,g'\in G$，有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g')&=[\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(g)][\boldsymbol{D}^{(p)}(g')\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(g')]\\&=[\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\boldsymbol{D}^{(p)}(g')]\otimes[\boldsymbol{D}^{(q)}(g)\boldsymbol{D}^{(q)}(g')]\\&=\boldsymbol{D}^{(p)}(gg')\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(gg')=\boldsymbol{D}^{(p,q)}(gg')。\end{aligned}$$

所以 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G)\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(G)$ 是群 G 的表示。而 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G),\boldsymbol{D}^{(q)}(G)$ 的幺正性保证了 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G)\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(G)$ 的幺正性，即

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(g)]^{\dagger}&=[\boldsymbol{D}^{(p)}(g)]^{\dagger}\otimes[\boldsymbol{D}^{(q)}(g)]^{\dagger}\\&=[\boldsymbol{D}^{(p)}(g)]^{-1}\otimes[\boldsymbol{D}^{(q)}(g)]^{-1}\\&=[\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(g)]^{-1},\end{aligned}$$

取迹后可得直积表示的特征标

$$\chi^{(p,q)}(g)=\operatorname{Tr}\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)=\operatorname{Tr}\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\operatorname{Tr}\boldsymbol{D}^{(q)}(g)=\chi^{(p)}(g)\chi^{(q)}(g)。$$

设负载不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G)$, $\boldsymbol{D}^{(q)}(G)$ 的向量空间分别为 U,V，相应的基为

$$\{\boldsymbol{e}_i^p\},\quad i=1,2\cdots,d_p$$

和

$$\{\boldsymbol{e}_j^q\},\quad j=1,2\cdots,d_q,$$

则直积空间的基为两者的张量积

$$\{\boldsymbol{w}_{i,j}=\boldsymbol{e}_i^p\otimes\boldsymbol{e}_j^q\},\quad i=1,2,\cdots,d_p,\ j=1,2,\cdots,d_q。$$

由不可约表示的定义，对任意的 $g\in G$ 有

$$\Gamma_g\boldsymbol{e}_i^p=\boldsymbol{e}_j^pD_{ji}^{(p)}(g),\quad \Gamma_g\boldsymbol{e}_i^q=\boldsymbol{e}_j^qD_{ji}^{(q)}(g),$$

以及

$$\Gamma_g\boldsymbol{w}_{i,j}=\Gamma_g\boldsymbol{e}_i^p\otimes\boldsymbol{e}_j^q=\boldsymbol{w}_{k,l}D_{kl,ij}^{(p,q)}(g)=\boldsymbol{e}_k^p\otimes\boldsymbol{e}_l^qD_{ki}^{(p)}(g)D_{lj}^{(q)}(g)。$$

由于 $\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)$ 是可约的，经过适当的幺正相似变换后可以将其约化为不可约表示的直和

$$\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)=\sum_{\lambda}a_{\lambda}\boldsymbol{D}^{(\lambda)}(g)。$$

即直积空间可以约化为一些不变子空间的直和。相应的特征标为

$$\chi^{(p,q)}(g)=\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{D}^{(p,q)}(g)=\chi^{(p)}(g)\chi^{(q)}(g)=\sum_{\lambda}a_\lambda\chi^{(\lambda)}(g)。$$

系数 a_λ 可以通过特征标的正交关系求出，即

$$a_\lambda=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(p)}(g)\chi^{(q)}(g)\chi^{(\lambda)*}(g)。$$

考虑 D_4 点群，特征标表如下 (见附录 C)。

D_4	e	c_4^1,c_4^3	c_4^2	$2c_2$	$2c_2'$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	1	−1
B_2	1	−1	1	−1	1
E	2	0	−2	0	0

容易得到

$$E\otimes E=A_1\oplus A_2\oplus B_1\oplus B_2。$$

表示的约化相当于基的重新线性组合。设约化后的基为

$$\{\boldsymbol{w}_l^{(\lambda)\alpha}\},\quad l=1,2,\cdots,d_\lambda,\quad \alpha=1,2,\cdots,a_\lambda,$$

它与原来的基有如下关系：

$$\boldsymbol{w}_l^{(\lambda)\alpha}=\sum_{i,j}\left\langle\begin{matrix}p&q\\i&j\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l&\end{matrix}\right\rangle\boldsymbol{w}_{i,j}。$$

逆变换为

$$\boldsymbol{w}_{i,j}=\sum_{\alpha,\lambda,l}\left\langle\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l&\end{matrix}\middle|\begin{matrix}p&q\\i&j\end{matrix}\right\rangle\boldsymbol{w}_l^{(\lambda)\alpha}。$$

由于是幺正变换，故系数满足

$$\left\langle\begin{matrix}p&q\\i&j\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l&\end{matrix}\right\rangle=\left\langle\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l&\end{matrix}\middle|\begin{matrix}p&q\\i&j\end{matrix}\right\rangle^*。$$

该系数称为 Clebsch-Gordan 系数，简称 C-G 系数。可以证明下列正交关系成立：

$$\sum_{\alpha,\lambda,l}\left\langle\begin{matrix}p&q\\i&j\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l&\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l&\end{matrix}\middle|\begin{matrix}p&q\\i'&j'\end{matrix}\right\rangle=\delta_{ii'}\delta_{jj'}。\tag{2.18}$$

由表示定义得

$$\Gamma_g\boldsymbol{w}_{i,j}=\boldsymbol{w}_{i',j'}D^{(p)}_{i'i}(g)D^{(q)}_{j'j}(g)=\Gamma_g\left\langle\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l&\end{matrix}\middle|\begin{matrix}p&q\\i&j\end{matrix}\right\rangle\boldsymbol{w}_l^{(\lambda)\alpha}$$

$$=\left\langle\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l&\end{matrix}\middle|\begin{matrix}p&q\\i&j\end{matrix}\right\rangle\boldsymbol{w}_{l'}^{(\lambda)\alpha}D^{(\lambda)}_{l'l}(g)=\left\langle\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l&\end{matrix}\middle|\begin{matrix}p&q\\i&j\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}p&q\\i'&j'\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda&\alpha\\l'&\end{matrix}\right\rangle\boldsymbol{w}_{i',j'}D^{(\lambda)}_{l'l}(g)。$$

注意以上除 p,q 外对重复指标求和。比较等式两边，得

$$D^{(p)}_{i'i}(g)D^{(q)}_{j'j}(g)=\sum_{\alpha,\lambda,l,l'}\left\langle\begin{matrix}p & q\\ i' & j'\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda & \alpha\\ l' & \end{matrix}\right\rangle D^{(\lambda)}_{l'l}(g)\left\langle\begin{matrix}\lambda & \alpha\\ l & \end{matrix}\middle|\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\right\rangle, \tag{2.19}$$

取 $g=e$，由于

$$D^{(p)}_{i'i}(e)=\delta_{i'i},\ D^{(q)}_{j'j}(e)=\delta_{j'j},\ D^{(\lambda)}_{l'l}(e)=\delta_{l'l},$$

对指标 l' 求和后就得到正交关系 (2.18)。

同理可得

$$\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\lambda\lambda'}D^{(\lambda)}_{l'l}(g)=\left\langle\begin{matrix}\lambda' & \alpha'\\ l' & \end{matrix}\middle|\begin{matrix}p & q\\ i' & j'\end{matrix}\right\rangle D^{(p)}_{i'i}(g)D^{(q)}_{j'j}(g)\left\langle\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda & \alpha\\ l & \end{matrix}\right\rangle,$$

取 $g=e$，得

$$\sum_{i,j}\left\langle\begin{matrix}\lambda & \alpha\\ l & \end{matrix}\middle|\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda' & \alpha'\\ l' & \end{matrix}\right\rangle=\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{ll'}\delta_{\lambda\lambda'}。$$

当 $\alpha=1$ 时，C-G 系数可以确定到差一个相因子。当 $\alpha>1$ 时，C-G 系数不能唯一确定。

设 $\alpha=1$，方程 (2.19) 乘以 $D^{(\lambda)*}_{k'k}(g)$ 并对 $g\in G$ 求和，利用不可约表示的正交性得

$$\begin{aligned}&\sum_{g\in G}D^{(p)}_{i'i}(g)D^{(q)}_{j'j}(g)D^{(\lambda')*}_{k'k}(g)\\ &=\sum_{\lambda,l,l'}\left\langle\begin{matrix}p & q\\ i' & j'\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda & \\ l' & \end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}\lambda & \\ l & \end{matrix}\middle|\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\right\rangle\sum_{g\in G}D^{(\lambda)}_{l'l}(g)D^{(\lambda')*}_{k'k}(g)\\ &=\sum_{\lambda,l,l'}\left\langle\begin{matrix}p & q\\ i' & j'\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda & \\ l' & \end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}\lambda & \\ l & \end{matrix}\middle|\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\right\rangle\frac{n}{d_\lambda}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{kl}\delta_{k'l'}\\ &=\frac{n}{d_{\lambda'}}\left\langle\begin{matrix}p & q\\ i' & j'\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda' & \\ k' & \end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}\lambda' & \\ k & \end{matrix}\middle|\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\right\rangle。\end{aligned}$$

由此得到

$$\left\langle\begin{matrix}p & q\\ i' & j'\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda & \\ k' & \end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}\lambda & \\ k & \end{matrix}\middle|\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\right\rangle=\frac{d_\lambda}{n}\sum_{g\in G}D^{(p)}_{i'i}(g)D^{(q)}_{j'j}(g)D^{(\lambda)*}_{k'k}(g)。$$

取 $i'=i,\ j'=j,\ k'=k$，即得

$$\left\langle\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda & \\ k & \end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}\lambda & \\ k & \end{matrix}\middle|\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\right\rangle=\left|\left\langle\begin{matrix}p & q\\ i & j\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\lambda & \\ k & \end{matrix}\right\rangle\right|^2=\frac{d_\lambda}{n}\sum_{g\in G}D^{(p)}_{ii}(g)D^{(q)}_{jj}(g)D^{(\lambda)}_{kk}(g)。 \tag{2.20}$$

因此，当知道不可约表示矩阵后，取定相因子即可由上述公式得到所有的 Clebsch-Gordan 系数。

2.8 投影算符

设 G 是作用在三维 Euclid 空间上的有限群，群元 $g\in G$ 对空间位矢 $\boldsymbol{r}$ 的作用为

$$\boldsymbol{r}'=g\boldsymbol{r}。$$

定义一组作用在标量函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 上的算符 $\Gamma_g(g\in G)$，满足

$$\Gamma_g\psi(\boldsymbol{r})=\psi'(\boldsymbol{r})=\psi(g^{-1}\boldsymbol{r}),\quad g\in G。$$

标量函数满足

$$\psi'(\boldsymbol{r}')=\psi(\boldsymbol{r})。$$

容易证明 Γ_G 是群 G 的同构。若

$$\boldsymbol{r}'=g_2\boldsymbol{r},\ \boldsymbol{r}''=g_1\boldsymbol{r}'=g_1g_2\boldsymbol{r}=g\boldsymbol{r},$$

则有

$$\begin{aligned}\Gamma_{g_1}\Gamma_{g_2}\psi(\boldsymbol{r})&=\Gamma_{g_1}\psi(g_2^{-1}\boldsymbol{r})=\psi(g_2^{-1}g_1^{-1}\boldsymbol{r})\\&=\psi[(g_1g_2)^{-1}\boldsymbol{r}]=\psi(g^{-1}\boldsymbol{r})\\&=\Gamma_g\psi(\boldsymbol{r})=\Gamma_{g_1g_2}\psi(\boldsymbol{r})。\end{aligned}$$

定义函数内积

$$(\phi,\psi)=\int\phi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=(\psi,\phi)^*,$$

如果算符 Γ_g 是幺正的，则

$$(\Gamma_g\phi,\Gamma_g\psi)=(\phi,\Gamma_g^\dagger\Gamma_g\psi)=(\phi,\psi)。$$

设 $\boldsymbol{D}^{(p)}(G)$ 是群 G 的不可约表示，负载这个表示的基为

$$\{\phi_\mu^{(p)}\},\quad \mu=1,2,\cdots,d_p,$$

则按表示定义有

$$\Gamma_g\phi_\mu^{(p)}(\boldsymbol{r})=\sum_\nu\phi_\nu^{(p)}(\boldsymbol{r})D_{\nu\mu}^{(p)}(g),\quad g\in G,\ \mu=1,2,\cdots,d_p。$$

称函数 $\phi_\mu^{(p)}$ 属于第 p 个不可约表示的第 μ 列，或者说是按第 p 个不可约表示的第 μ 列变换。

可以证明，属于不同不可约表示或同一不可约表示的不同列的函数彼此是正交的。即

$$(\phi_\mu^{(p)},\phi_\nu^{(q)})=0,\quad p\neq q\quad 或\quad \mu\neq\nu。$$

由于算符是幺正的，故有

$$\begin{aligned}(\phi_\mu^{(p)},\phi_\nu^{(q)})&=(\phi_\mu^{(p)},\Gamma_g^\dagger\Gamma_g\phi_\nu^{(q)})=(\Gamma_g\phi_\mu^{(p)},\Gamma_g\phi_\nu^{(q)})\\&=\sum_{\mu'\nu'}D_{\mu'\mu}^{(p)*}(g)D_{\nu'\nu}^{(q)}(g)(\phi_{\mu'}^{(p)},\phi_{\nu'}^{(q)})。\end{aligned}$$

对群元 $g\in G$ 求和，注意到左边与群元 g 无关。因此有

$$(\phi_\mu^{(p)},\phi_\nu^{(q)})=\frac{1}{n}\sum_{\mu'\nu'}(\phi_{\mu'}^{(p)},\phi_{\nu'}^{(q)})\sum_{g\in G}D_{\mu'\mu}^{(p)*}(g)D_{\nu'\nu}^{(q)}(g)$$

$$=\frac{1}{d_p}\sum_{\mu'\nu'}(\phi_{\mu'}^{(p)},\phi_{\nu'}^{(q)})\delta_{pq}\delta_{\mu\nu}\delta_{\mu'\nu'}=\frac{1}{d_p}\delta_{pq}\delta_{\mu\nu}\sum_{\lambda}(\phi_\lambda^{(p)},\phi_\lambda^{(p)})。$$

若 $p\neq q$, $\mu\neq\nu$, 则有

$$(\phi_\mu^{(p)},\phi_\nu^{(q)})=0,$$

若 $p=q$, $\mu=\nu$, 则有

$$(\phi_\mu^{(p)},\phi_\mu^{(p)})=\frac{1}{d_p}\sum_{\lambda}(\phi_\lambda^{(p)},\phi_\lambda^{(p)}),\quad \mu=1,2,\cdots,d_p。$$

注意到上式右边是对下标的求和，因此 $(\phi_\mu^{(p)},\phi_\mu^{(p)})$ 的值与下标 μ 无关，即有

$$(\phi_1^{(p)},\phi_1^{(p)})=(\phi_2^{(p)},\phi_2^{(p)})=\cdots=(\phi_{d_p}^{(p)},\phi_{d_p}^{(p)})。$$

如果将其归一化得到

$$(\phi_\mu^{(p)},\phi_\mu^{(p)})=1,$$

则最后可得

$$(\phi_\mu^{(p)},\phi_\nu^{(q)})=\delta_{pq}\delta_{\mu\nu}。$$

定理 2.12 若 $\{\boldsymbol{D}^{(p)}(G)\}(p=1,2,\cdots,r)$ 是作用在坐标空间的有限群 G 的所有不可约幺正表示，$\{\phi_\mu^{(p)}\}$ 是相应的归一化基，则任意平方可积函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 都可以用 $\{\phi_\mu^{(p)}\}$ 展开为下列形式：

$$\psi(\boldsymbol{r})=\sum_p\sum_\mu a_\mu^{(p)}\phi_\mu^{(p)}(\boldsymbol{r})。$$

证明 令

$$\psi_i=\Gamma_{g_i}\psi,\quad g_i\in G,\quad i=1,2,\cdots,n,\quad g_1=e,\quad \psi_1=\psi,$$

则可以得到 n 个函数，显然这 n 个函数 $\{\psi_i\}$ 张成的空间在 $\Gamma_g(g\in G)$ 的作用下是不变的。从这些函数中选出最大线性无关函数族，比如是

$$\{\psi_m\},\quad m=1,2,\cdots,d,$$

这些函数将负载群 G 的一个表示

$$\Gamma_g\psi_m(\boldsymbol{r})=\psi_nD_{nm}(g),\quad g\in G,\quad m=1,2,\cdots,d,$$

这个表示可能是可约表示。通过适当的相似变换可将其约化为

$$\boldsymbol{D}'(g)=\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{S}^{-1}=\sum_p a_p\boldsymbol{D}^{(p)}(g),\quad g\in G。$$

而负载表示 $\boldsymbol{D}'(g)$ 的基为

$$\phi_m = \psi_n(\boldsymbol{S}^{-1})_{nm},$$

或

$$\psi_m = \phi_n S_{nm}。$$

因此有

$$\psi = \psi_1 = \Gamma_{g_1}\psi = \sum_m \phi_m S_{m1} = \sum_p \sum_\mu a_\mu^{(p)} \phi_\mu^{(p)}(\boldsymbol{r}),$$

其中已经将表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}(g)$ 的基重新标记为 $\phi_\mu^{(p)}$。

定义投影算符

$$P_{\lambda\mu}^{(p)} = \frac{d_p}{n} \sum_{g\in G} D_{\mu\lambda}^{(p)}(g^{-1})\Gamma_g,$$

满足性质

$$\begin{aligned} P_{\lambda\mu}^{(p)}\phi_\nu^{(q)} &= \frac{d_p}{n} \sum_{g\in G} D_{\mu\lambda}^{(p)}(g^{-1})\Gamma_g \phi_\nu^{(q)} \\ &= \frac{d_p}{n} \sum_{g\in G} D_{\mu\lambda}^{(p)}(g^{-1}) D_{\nu'\nu}^{(q)}(g)\phi_{\nu'}^{(q)} \\ &= \frac{d_p}{n} \sum_{g\in G}\sum_{\nu'} D_{\lambda\mu}^{(p)*}(g) D_{\nu'\nu}^{(q)}(g)\phi_{\nu'}^{(q)} \\ &= \sum_{\nu'} \delta_{\mu\nu}\delta_{\lambda\nu'}\delta_{pq}\phi_{\nu'}^{(q)} = \delta_{pq}\delta_{\mu\nu}\phi_\lambda^{(q)}。 \end{aligned}$$

也就是说，当 $p \neq q$, $\mu \neq \nu$ 时，有

$$P_{\lambda\mu}^{(p)}\phi_\nu^{(q)} = 0,$$

以及

$$P_{\lambda\mu}^{(p)}\phi_\mu^{(p)} = \phi_\lambda^{(p)}。$$

对任意函数 $\psi(\boldsymbol{r})$，如果其中包含 $\phi_\mu^{(p)}$，则

$$\begin{aligned} P_{\lambda\mu}^{(p)}\psi(\boldsymbol{r}) &= \sum_q \sum_\nu a_\nu^{(q)} P_{\lambda\mu}^{(p)}\phi_\nu^{(q)}(\boldsymbol{r}) \\ &= \sum_q \sum_\nu a_\nu^{(q)}\phi_\lambda^{(q)}(\boldsymbol{r})\delta_{\mu\nu}\delta_{pq} = a_\mu^{(p)}\phi_\lambda^{(p)}(\boldsymbol{r})。 \end{aligned}$$

因此，投影算符 $P_{\lambda\mu}^{(p)}$ 的作用是从 $\psi(\boldsymbol{r})$ 中投影出分量 $\phi_\lambda^{(p)}$。容易证明

$$P_{\mu\nu}^{(p)}P_{\lambda\sigma}^{(q)} = \frac{d_p d_q}{n^2} \sum_{g,g'\in G} D_{\nu\mu}^{(p)}(g^{-1}) D_{\sigma\lambda}^{(q)}(g'^{-1})\Gamma_g\Gamma_{g'}$$

$$= \frac{d_p d_q}{n^2} \sum_{\kappa} \sum_{g,g' \in G} D^{(p)*}_{\mu\nu}(g) D^{(q)}_{\kappa\lambda}(g) D^{(q)}_{\sigma\kappa}[(gg')^{-1}] \Gamma_{gg'}$$

$$= \frac{d_p}{n} \sum_{\kappa} \sum_{g \in G} D^{(p)*}_{\mu\nu}(g) D^{(q)}_{\kappa\lambda}(g) P^{(q)}_{\kappa\sigma}$$

$$= \sum_{\kappa} \delta_{pq} \delta_{\mu\kappa} \delta_{\nu\lambda} P^{(q)}_{\kappa\sigma} = \delta_{pq} \delta_{\nu\lambda} P^{(p)}_{\mu\sigma}。$$

若定义特征标投影算符

$$P^{(p)} = \sum_{\mu} P^{(p)}_{\mu\mu} = \frac{d_p}{n} \sum_{g \in G} \chi^{(p)*}(g) \Gamma_g,$$

容易证明

$$P^{(p)} P^{(q)} = \sum_{\mu,\nu} P^{(p)}_{\mu\mu} P^{(q)}_{\nu\nu} = \sum_{\mu,\nu} \delta_{pq} \delta_{\mu\nu} P^{(q)}_{\mu\nu} = \delta_{pq} \sum_{\mu} P^{(q)}_{\mu\mu} = \delta_{pq} P^{(p)}。$$

进一步有

$$\sum_{p} \sum_{\mu} P^{(p)}_{\mu\mu} \phi^{(q)}_{\nu} = \sum_{p} \sum_{\mu} \delta_{\mu\nu} \delta_{pq} \phi^{(p)}_{\mu} = \phi^{(q)}_{\nu}。$$

因此算符

$$\sum_{p} \sum_{\mu} P^{(p)}_{\mu\mu} = \sum_{p} P^{(p)} = I$$

是恒等算符。

习 题 2

2.1 若 $\boldsymbol{D}(g), g \in G$ 是群 G 的表示，问下列集合

$$\boldsymbol{D}^{-1},\ \boldsymbol{D}^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{D}^{*},\ \boldsymbol{D}^{\dagger},\ (\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}})^{-1},\ (\boldsymbol{D}^{\dagger})^{-1},\ \det \boldsymbol{D},\ \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{D},\ \boldsymbol{S}\boldsymbol{D}\boldsymbol{S}^{-1}\ (\det \boldsymbol{S} \neq 0)$$

是否仍是群 G 的表示？

2.2 导出群 G_6^2 的正则表示矩阵。

2.3 构造置换群 S_4 的特征标表。

2.4 利用群 G_6^2 的特征标表，将 3 个二维表示的直积 $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)}$ 约化为不可约表示的直和。

2.5 考虑由 e_1, e_2 张成的二维空间，由点群 D_3 的 6 个操作，导出相应的表示矩阵。

2.6 证明 Abel 群的所有不可约表示都是一维的。

2.7 证明：如果取子群 H 的表示为正则表示，则得到的诱导表示即为群 G 的正则表示。

2.8 计算群 G_6^2 的二维表示的直积 $\boldsymbol{\Gamma}^{(3)} \otimes \boldsymbol{\Gamma}^{(3)}$ 约化的 C-G 系数。

2.9 有限群 G 是否存在 n 维的恒等表示，即 $g \in G \to \boldsymbol{I}_n$ ？如果有，这个表示是否满足广义正交定理？

2.10 证明：除恒等表示外，有限群 G 在任意不可约表示中的特征标之和等于零，即

$$\sum_{g\in G}\chi^{(p)}(g)=0,\quad p\neq 1。$$

2.11 证明：除单位元外，有限群 G 的任意元素在所有不可约表示中的特征标与表示维数乘积之和等于零，即

$$\sum_{p}d_p\chi^{(p)}(g)=0,\quad g\neq e。$$

第 3 章　群论与量子力学

群论在物理学特别是量子力学中有广泛的应用。著名物理学家 Wigner 在 20 世纪 20 年代末已经奠定了对称性在量子力学中的应用基础，并因此获得了 1963 年的 Nobel 物理学奖。

物理学中通常只有少数简单体系 (如氢原子等) 能够精确求解，大部分体系需要用数值方法求解。对称性分析在求解过程中将会起到重要作用，它往往能够显著减少计算的工作量。事实上，在不知道体系诸多细节的情况下，通过对称性的分析，我们就可以了解到体系内部的很多信息，从而得到一些重要的结论。这些结论往往是精确的，没有任何近似。

固体物理中的电子能带结构，分子振动谱和跃迁过程的选择定则等都是群论应用的典型例子。本章将介绍这些内容。

3.1　Schrödinger 方程和对称算符

在量子力学中，每个物理量都对应一个 Hermite 算符，如

$$E \to \hat{H}, \quad \boldsymbol{p} \to \hat{\boldsymbol{p}}, \quad \boldsymbol{L} \to \hat{\boldsymbol{L}}。$$

可以证明，Hermite 算符的本征值一定是实的，而这些算符的本征值就是测量该物理量时的可能值。

体系可能的能量 ε_n 是体系 Hamilton 量的本征值，满足 Schrödinger 方程

$$\hat{H}\psi_n(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_n \psi_n(\boldsymbol{r}), \quad n = 1, 2, \cdots,$$

其中 $\psi_n(\boldsymbol{r})$ 是对应本征值 ε_n 的本征函数，对应不同本征值的本征函数是彼此正交的。

在某些情况下，一个本征值 ε_n 可能对应多个本征函数 $\psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r})$，即

$$\hat{H}\psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_n \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r}), \quad \lambda = 1, 2, \cdots, d, \quad n = 1, 2, \cdots。$$

这种情况称为简并，或者说是 d 重简并。简并态的波函数一般彼此不是正交的，但可以通过 Schmidt 正交化过程，即重新线性组合使其正交。

本征函数的全体是完备的，任何函数都可以用本征函数展开。

考虑 Hamilton 量的对称性，设对称群为 G，相应的算符为 $\{\Gamma_g, g \in G\}$。如果

$$\hat{H}\Gamma_g \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_n \Gamma_g \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r}), \quad g \in G,$$

即 $\Gamma_g \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r})$ 也是 Hamilton 量的本征值为 ε_n 的本征函数，则称 Hamilton 量 H 在群 G 的作用下不变。由于这一关系对任意本征函数都成立，故

$$\hat{H}\Gamma_g \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_n \Gamma_g \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r}) = \Gamma_g \varepsilon_n \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r}) = \Gamma_g \hat{H} \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r})。$$

由此得到

$$\hat{H}\Gamma_g = \Gamma_g \hat{H},$$

或

$$[\hat{H}, \Gamma_g] = 0, \quad \forall g \in G。$$

即如果 Hamilton 量 H 在群 G 的作用下不变，则 H 与群算符对易。上式还可以写成

$$\Gamma_g \hat{H} \Gamma_g^{-1} = \hat{H}。$$

由于这 d 个本征函数是线性独立的，因此 $\Gamma_g \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r})$ 一定是原来那些本征函数的线性组合，即

$$\Gamma_g \psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\mu=1}^{d} \psi_{n\mu}(\boldsymbol{r}) D_{\mu\lambda}(g), \quad \lambda = 1, 2, \cdots, d。$$

容易看到，矩阵 $\boldsymbol{D}(g)$ 是群 G 的 d 维表示。负载这个表示的基就是对应本征值 ε_n 的 d 个简并波函数 $\psi_{n\mu}$。所以，Hamilton 量的本征函数可以负载群 G 的一个表示。

一般来说，这是一个可约表示，可以将其约化为不可约表示的直和

$$\boldsymbol{D}(g) = \sum_p a_p \boldsymbol{D}^{(p)}(g)。$$

相应的不可约表示的基记为

$$\{\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}\}, \quad p = 1, 2, \cdots, s, \quad \mu = 1, 2, \cdots, d_p, \quad \alpha_p = 1, 2, \cdots, a_p,$$

则有

$$\Gamma_g \phi_{\mu\alpha_p}^{(p)} = \sum_\nu \phi_{\nu\alpha_p}^{(p)} D_{\nu\mu}^{(p)}(g)。$$

这些基 $\{\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}\}$ 实际上是原来 d 个本征函数 $\psi_{n\lambda}(\boldsymbol{r})$ 的线性组合，因而仍是 Hamilton 量 H 的本征函数，且本征值不变，即有

$$\hat{H}\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_n \phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}(\boldsymbol{r}), \quad p = 1, 2, \cdots, s, \quad \mu = 1, 2, \cdots, d_p, \quad \alpha_p = 1, 2, \cdots, a_p。$$

但注意到，现在简并态用不可约表示作了重新标记，即原来的 d 重简并被分解为 a_1 个 d_1 重简并，a_2 个 d_2 重简并 $\cdots\cdots$；相应的波函数分别按照不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(1)}, \boldsymbol{D}^{(2)}, \cdots$ 变换。因为总的能级数不变，故有

$$a_1 d_1 + a_2 d_2 + \cdots + a_s d_s = d。$$

形式上将对应不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(1)}$ 的能级标记为

$$\varepsilon_{n1}^{(\alpha_1)}, \ \alpha_1 = 1, 2, \cdots, a_1,$$

简并度为 d_1；能级

$$\varepsilon_{n2}^{(\alpha_2)}, \ \alpha_2 = 1, 2, \cdots, a_2$$

的简并度为 $d_2,\cdots\cdots$ 能级

$$\varepsilon_{ns}^{(\alpha_s)},\ \alpha_s=1,2,\cdots,a_s$$

的简并度为 d_s。现在这些能级全部都是简并的，故有

$$\varepsilon_{n1}^{(\alpha_1)}=\varepsilon_{n2}^{(\alpha_2)}=\cdots=\varepsilon_{ns}^{(\alpha_s)}=\varepsilon_n。$$

将属于同一个不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}$ 的 d_p 重简并能级 $\varepsilon_{np}^{(\alpha_p)}$ (即对于固定的 p,α_p) 称为正常简并，而对应不同 p,α_p 的简并称为偶然简并。

如果没有偶然简并，则由简并波函数负载的表示一定是不可约表示。因此，体系的能级可以按照体系对称群的不可约表示进行分类。

下面来计算跃迁矩阵元

$$(\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)},H\phi_{\nu\beta_q}^{(q)})=\left\langle\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}\middle|H\middle|\phi_{\nu\beta_q}^{(q)}\right\rangle\equiv\int\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)*}H\phi_{\nu\beta_q}^{(q)}\mathrm{d}\tau。$$

利用幺正算符 Γ_g 和表示的性质

$$(\phi,\psi)=(\phi,\Gamma_g^{\dagger}\Gamma_g\psi)=(\Gamma_g\phi,\Gamma_g\psi),$$

可得

$$\begin{aligned}(\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)},H\phi_{\nu\beta_q}^{(q)})&=(\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)},\Gamma_g^{\dagger}\Gamma_gH\phi_{\nu\beta_q}^{(q)})=(\Gamma_g\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)},\Gamma_gH\phi_{\nu\beta_q}^{(q)})\\&=(\Gamma_g\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)},H\Gamma_g\phi_{\nu\beta_q}^{(q)})=\sum_{\mu'\nu'}D_{\mu'\mu}^{(p)*}(g)D_{\nu'\nu}^{(q)}(g)(\phi_{\mu'\alpha_p}^{(p)},H\phi_{\nu'\beta_q}^{(q)})\\&=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\sum_{\mu'\nu'}D_{\mu'\mu}^{(p)*}(g)D_{\nu'\nu}^{(q)}(g)(\phi_{\mu'\alpha_p}^{(p)},H\phi_{\nu'\beta_q}^{(q)})\\&=\frac{1}{d_p}\sum_{\mu'\nu'}(\phi_{\mu'\alpha_p}^{(p)},H\phi_{\nu'\beta_q}^{(q)})\delta_{pq}\delta_{\mu'\nu'}\delta_{\mu\nu}=\delta_{pq}\delta_{\mu\nu}\frac{1}{d_p}\sum_{\lambda}(\phi_{\lambda\alpha_p}^{(p)},H\phi_{\lambda\beta_p}^{(p)})。\end{aligned}$$

上式表明，属于不同不可约表示或同一个不可约表示的不同列之间的跃迁矩阵元一定是零。

进一步可以看到，这个跃迁矩阵元与下标 μ 无关，即

$$(\phi_{1\alpha_p}^{(p)},H\phi_{1\beta_p}^{(p)})=(\phi_{2\alpha_p}^{(p)},H\phi_{2\beta_p}^{(p)})=\cdots=\frac{1}{d_p}\sum_{\lambda}(\phi_{\lambda\alpha_p}^{(p)},H\phi_{\lambda\beta_p}^{(p)})。$$

假定可以给 Hamilton 量加上一个微扰，即令 $H=H_0+H'$，如果微扰 H' 具有与 H_0 相同的对称性，则有

$$\Delta\varepsilon\sim(\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)},H'\phi_{\nu\beta_q}^{(q)})=\delta_{pq}\delta_{\mu\nu}\Delta^{(p)}。$$

即能级的移动只和 p 有关，因而属于同一个不可约表示的能级移动是相同的。也就是说，对称微扰不会消除正常简并。而属于不同不可约表示的能级移动可能不同，因而对称微扰有可能消除偶然简并。

如果 H_0 的对称群是 G_0，H 的对称群是 $G \subset G_0$。能量的一级微扰修正可由方程

$$\varepsilon_{\mu\nu} = \varepsilon_0 \delta_{\mu\nu} + (\phi_\mu^{(p)}, H' \phi_\nu^{(p)})$$

得出，其中 ε_0 是 H_0 的本征值，对应于不可约表示 $\boldsymbol{D}_0^{(p)}$，相应的基为

$$\{\phi_1^{(p)}, \phi_2^{(p)}, \cdots, \phi_{d_p}^{(p)}\}。$$

ε_0 是 d_p 重简并的能级。一般地，G_0 的不可约表示对子群 G 来说是可约表示。如果可以约化为

$$\boldsymbol{D}_0^{(p)} = \sum a_r \boldsymbol{D}^{(r)},$$

其中 $\boldsymbol{D}^{(r)}$ 是 G 的第 r 个不可约表示，且 $\sum\limits_r a_r = n_p$，则原来简并的能级 ε_0 将分裂为 n_p 个能级。

例 3.1 设未加微扰前的对称群为 $G_0 = D_4$，能级 ε_0 由二维不可约表示 E 标记。因此 ε_0 是二重简并的能级。

加入微扰后，对称性降低，$H = H_0 + H'$，$G = D_2$。D_2 群有 4 个一维不可约表示。D_4 群的不可约表示对 D_2 群而言是可约表示。由特征标表可得表示的约化

$$E = B_1 \oplus B_2,$$

故原来的二重简并能级分裂为两条能级。

群论一个很重要的应用是求解 Schrödinger 方程。除了氢原子等少数几个简单体系能找到解析解之外，绝大部分情况都需要进行数值计算，而群论的运用将大大减少计算的工作量。考虑 Schrödinger 方程

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}) = \varepsilon\psi(\boldsymbol{r})。$$

为求解这个方程，将波函数用完备集展开为

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_p \sum_{\alpha_p} \sum_\mu a_{\mu\alpha_p}^{(p)} \phi_{\mu\alpha_p}^{(p)},$$

代入后方程化为

$$\sum_p \sum_{\alpha_p} \sum_\mu a_{\mu\alpha_p}^{(p)} (\hat{H}\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)} - \varepsilon\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}) = 0。$$

将上式与波函数 $\phi_{\nu\beta_q}^{(q)}$ 作内积得

$$\sum_p \sum_{\alpha_p} \sum_\mu a_{\mu\alpha_p}^{(p)} \left((\phi_{\nu\beta_q}^{(q)}, \hat{H}\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}) - \varepsilon(\phi_{\nu\beta_q}^{(q)}, \phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}) \right) = 0。$$

这是一个齐次线性方程，它有非平凡解的条件即为系数行列式等于零，即

$$\det \left((\phi_{\nu\beta_q}^{(q)}, \hat{H}\phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}) - \varepsilon(\phi_{\nu\beta_q}^{(q)}, \phi_{\mu\alpha_p}^{(p)}) \right) = 0。$$

从上面的讨论可知，仅当 $p=q,\mu=\nu$ 时，矩阵元才不为零。如果定义

$$D_{\alpha\beta}(p,\mu)=\left[(\phi^{(p)}_{\mu\alpha_p},\hat{H}\phi^{(p)}_{\mu\beta_p})-\varepsilon(\phi^{(p)}_{\mu\alpha_p},\phi^{(p)}_{\mu\beta_p})\right],$$

则久期方程可以写成

$$\det\begin{pmatrix}
\boldsymbol{D}(1,1) & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots\\
0 & \boldsymbol{D}(1,2) & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots\\
0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots\\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \\
0 & 0 & \cdots & \boldsymbol{D}(1,d_1) & 0 & 0 & \cdots\\
0 & 0 & \cdots & 0 & \boldsymbol{D}(2,1) & 0 & \cdots\\
0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \boldsymbol{D}(2,2) & \cdots\\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots &
\end{pmatrix}=0。$$

这一行列式是方块对角的，因此久期方程变成

$$\prod_p\prod_{\mu=1}^{d_p}\det\boldsymbol{D}(p,\mu)=0。$$

取遍所有的 p 以及分别令 μ 取 $1,2,\cdots,d_p$ 来求解方程

$$\det\boldsymbol{D}(p,\mu)=0,$$

就可以得到所有的本征值。进一步有

$$\boldsymbol{D}(p,1)=\boldsymbol{D}(p,2)=\cdots=\boldsymbol{D}(p,d_p)。$$

由于通常方程 $\det\boldsymbol{D}(p,\mu)=0$ 的阶数比原来的久期方程要小的多，因此计算工作量将大大减少。实际上对每个不可约表示 $\Gamma^{(p)}$ 只需求解一个久期方程，所得的能量本征值就是 d_p 重简并的能级。

3.2 不可约张量算符和 Wigner-Eckart 定理

引入一组算符

$$\{J^{(p)}_\lambda\},\quad \lambda=1,2,\cdots,d_p,$$

满足

$$\Gamma_g J^{(p)}_\lambda\Gamma_g^{-1}=\sum_{\mu=1}J^{(p)}_\mu D^{(p)}_{\mu\lambda}(g)_{\mu\lambda},\quad g\in G。\tag{3.1}$$

算符 $J^{(p)}_\lambda$ 称为不可约张量算符。如果 $\{\phi^{(q)}_\mu\}$ 是负载不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(q)}(g)$ 的基，则有

$$\Gamma_g J^{(p)}_\lambda\phi^{(q)}_\mu=\Gamma_g J^{(p)}_\lambda\Gamma_g^{-1}\Gamma_g\phi^{(q)}_\mu=\sum_{\lambda',\mu'}J^{(p)}_{\lambda'}\phi^{(q)}_{\mu'}D^{(p)}_{\lambda'\lambda}(g)D^{(q)}_{\mu'\mu}(g)$$

$$=\sum_{\lambda',\mu'}J^{(p)}_{\lambda'}\phi^{(q)}_{\mu'}\left(\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(g)\right)_{\lambda'\mu',\lambda\mu}。$$

因此 $\{J_\lambda^{(p)}\phi_\mu^{(q)}\}$ 负载的是直积表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(g)$，一般这是可约表示。设约化后的基为

$$\{\psi_\nu^{(r)\alpha}\},\quad \nu=1,2,\cdots,d_r,\quad \alpha=1,2,\cdots,a_r,$$

可以用原来的基线性组合表示为

$$\psi_\nu^{(r)\alpha}=\sum_{\lambda,\mu}\left\langle\begin{matrix}p & q\\ \lambda & \mu\end{matrix}\middle|\begin{matrix}r & \\ \nu & \alpha\end{matrix}\right\rangle J_\lambda^{(p)}\phi_\mu^{(q)},$$

其中 $\left\langle\begin{matrix}p & q\\ \lambda & \mu\end{matrix}\middle|\begin{matrix}r & \\ \nu & \alpha\end{matrix}\right\rangle$ 正是第 2 章引入的 C-G 系数。逆变换为

$$J_\lambda^{(p)}\phi_\mu^{(q)}=\sum_{r,\nu,\alpha}\left\langle\begin{matrix}r & \\ \nu & \alpha\end{matrix}\middle|\begin{matrix}p & q\\ \lambda & \mu\end{matrix}\right\rangle\psi_\nu^{(r)\alpha}=\sum_{r,\nu,\alpha}\left\langle\begin{matrix}p & q\\ \lambda & \mu\end{matrix}\middle|\begin{matrix}r & \\ \nu & \alpha\end{matrix}\right\rangle^*\psi_\nu^{(r)\alpha},$$

与 $\phi_\sigma^{(s)}$ 作标量积，可得

$$\begin{aligned}(\phi_\sigma^{(s)},J_\lambda^{(p)}\phi_\mu^{(q)})&=\sum_{r,\nu,\alpha}\left\langle\begin{matrix}p & q\\ \lambda & \mu\end{matrix}\middle|\begin{matrix}r & \\ \nu & \alpha\end{matrix}\right\rangle^*(\phi_\sigma^{(s)},\psi_\nu^{(r)\alpha})\\&=\sum_{r,\nu,\alpha,\eta}\left\langle\begin{matrix}p & q\\ \lambda & \mu\end{matrix}\middle|\begin{matrix}r & \\ \nu & \alpha\end{matrix}\right\rangle^*\delta_{sr}\delta_{\sigma\nu}(\phi_\eta^{(s)},\psi_\eta^{(s)\alpha})\\&=\sum_{\alpha}\left\langle\begin{matrix}p & q\\ \lambda & \mu\end{matrix}\middle|\begin{matrix}s & \\ \sigma & \alpha\end{matrix}\right\rangle^*f(s,\alpha),\end{aligned}$$

其中 $f(s,\alpha)$ 仅与 s,α 有关，称为约化矩阵元。如果 $\alpha=1$，则有

$$(\phi_\sigma^{(s)},J_\lambda^{(p)}\phi_\mu^{(q)})=\left\langle\begin{matrix}p & q\\ \lambda & \mu\end{matrix}\middle|\begin{matrix}s & \\ \sigma & \end{matrix}\right\rangle^*f(s)。$$

上式称为 Wigner-Eckart 定理。

由此可以推出分支比

$$\frac{(\phi_\sigma^{(s)},J_\lambda^{(p)}\phi_\mu^{(q)})}{(\phi_{\sigma'}^{(s)},J_{\lambda'}^{(p)}\phi_{\mu'}^{(q)})}=\frac{\left\langle\begin{matrix}p & q\\ \lambda & \mu\end{matrix}\middle|\begin{matrix}s & \\ \sigma & \end{matrix}\right\rangle^*}{\left\langle\begin{matrix}p & q\\ \lambda' & \mu'\end{matrix}\middle|\begin{matrix}s & \\ \sigma' & \end{matrix}\right\rangle^*}。$$

上式表明分支比仅由 C-G 系数决定，而 C-G 系数只与体系的对称性有关。

如果直积表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}(g)\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}(g)$ 不包含不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(r)}(g)$，则

$$(\phi_\nu^{(r)},J_\lambda^{(p)}\phi_\mu^{(q)})=0。$$

由此可以给出跃迁过程的选择定则。

3.3 实 表 示

设 $\boldsymbol{D}(G)$ 是群 G 的表示，容易看到其复共轭 $\boldsymbol{D}(G)^*$ 也是群 G 的表示。如果 $\boldsymbol{D}(G)$ 是不可约表示，则 $\boldsymbol{D}(G)^*$ 亦为不可约表示。

但表示 $\boldsymbol{D}(G)$ 不一定和其复共轭表示 $\boldsymbol{D}(G)^*$ 等价。如果 $\boldsymbol{D}(G)$ 与 $\boldsymbol{D}(G)^*$ 等价，并进一步等价于一个实数表示，则 $\boldsymbol{D}(G)$ 称为实表示。如果不能和一个实数表示等价，则称为非实表示。

可以用下列判据来判断一个表示是否是实表示。

定理 3.1 如果 $\boldsymbol{D}(G)$ 和 $\boldsymbol{D}(G)^*$ 是等价的不可约表示，即

$$\boldsymbol{D}(g)^* = \boldsymbol{C}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{C}^{-1}, \quad \forall\, g \in G, \tag{3.2}$$

则有

$$\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} = \pm\boldsymbol{C}。$$

当 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{C}$ 时，$\boldsymbol{D}(G)$ 是实表示；当 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} = -\boldsymbol{C}$ 时，$\boldsymbol{D}(G)$ 是非实表示。

证明 对方程 (3.2) 取复共轭得

$$\boldsymbol{D}(g) = \boldsymbol{C}^*\boldsymbol{D}^*(g)\boldsymbol{C}^{*-1} = \boldsymbol{C}^*\boldsymbol{C}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{C}^{*-1},$$

最后一步已经将 $\boldsymbol{D}^*(g)$ 代入。上式即

$$\boldsymbol{C}^*\boldsymbol{C}\boldsymbol{D}(g) = \boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{C}^*\boldsymbol{C}。$$

因为 $\boldsymbol{D}(G)$ 是不可约表示，由 Schur 引理得

$$\boldsymbol{C}^*\boldsymbol{C} = \lambda\boldsymbol{I}。$$

由此可得

$$\boldsymbol{C}^* = \lambda\boldsymbol{C}^{-1}, \quad (\boldsymbol{C}^*)^{-1} = \lambda^{-1}\boldsymbol{C}。 \tag{3.3}$$

假定 $\boldsymbol{D}(G)$ 是幺正的，则易证 $\boldsymbol{D}(G)^*$ 也是幺正的。故有

$$[\boldsymbol{D}^*(g)]^{-1} = [\boldsymbol{D}^*(g)]^\dagger = (\boldsymbol{C}^{-1})^\dagger\boldsymbol{D}^\dagger(g)\boldsymbol{C}^\dagger = (\boldsymbol{C}^\dagger)^{-1}\boldsymbol{D}^{-1}(g)\boldsymbol{C}^\dagger。$$

等式两边取逆，得

$$\boldsymbol{D}^*(g) = (\boldsymbol{C}^\dagger)^{-1}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{C}^\dagger。$$

再取复共轭，得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{D}(g) &= ((\boldsymbol{C}^\dagger)^{-1})^*\boldsymbol{D}^*(g)(\boldsymbol{C}^\dagger)^* = (\boldsymbol{C}^{*-1})^\dagger\boldsymbol{D}^*(g)(\boldsymbol{C}^*)^\dagger \\ &= (\lambda^{-1}\boldsymbol{C})^\dagger\boldsymbol{D}^*(g)(\lambda\boldsymbol{C}^{-1})^\dagger = \boldsymbol{C}^\dagger\boldsymbol{C}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{C}^{-1}(\boldsymbol{C}^\dagger)^{-1}。\end{aligned}$$

上面已经将方程 (3.3) 代入。由此得

$$\boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{C}\boldsymbol{D}(g)=\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{C}。$$

同理由 Schur 引理得

$$\boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{C}=\lambda'\boldsymbol{I},$$

取行列式

$$|\det\boldsymbol{C}|^2=\lambda^d=\lambda'^d,$$

即得

$$\lambda=\pm\lambda'。$$

因此有

$$\boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{C}=\pm\boldsymbol{C}^{*}\boldsymbol{C},$$

即

$$\boldsymbol{C}^{\dagger}=\pm\boldsymbol{C}^{*},$$

取复共轭后得

$$\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}=\pm\boldsymbol{C}。\tag{3.4}$$

如果 $\boldsymbol{D}(G)$ 是实表示，则存在相似变换使 $\boldsymbol{D}'=\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}\boldsymbol{S}^{-1}$ 为实数，$\boldsymbol{D}'^{*}=\boldsymbol{D}'$，即

$$\boldsymbol{S}^{*}\boldsymbol{D}^{*}(\boldsymbol{S}^{*})^{-1}=\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}\boldsymbol{S}^{-1}。$$

变换后得

$$\boldsymbol{D}^{*}=(\boldsymbol{S}^{*})^{-1}\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{S}^{*}。$$

与方程 (3.2) 比较后得

$$\boldsymbol{C}=(\boldsymbol{S}^{*})^{-1}\boldsymbol{S},$$

取转置，得

$$\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}((\boldsymbol{S}^{*})^{-1})^{\mathrm{T}}。$$

代入方程 (3.4) 后得

$$\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}((\boldsymbol{S}^{*})^{-1})^{\mathrm{T}}=\pm(\boldsymbol{S}^{*})^{-1}\boldsymbol{S}。$$

等式两边分别乘 $\boldsymbol{S}^{*}$ 和 $(\boldsymbol{S}^{*})^{\mathrm{T}}$ 并取转置，整理后得

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger}=\pm(\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger})^{*}。$$

当

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger}=(\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger})^{*}$$

时，矩阵 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger}$ 的所有矩阵元都是实的。

如果

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger}=-(\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger})^{*},$$

则矩阵 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger}$ 的所有矩阵元都是纯虚的或零。但 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger}$ 的对角元满足

$$(\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger})_{ii}=\sum_j s_{ij}s_{ji}^{\dagger}=\sum_j |s_{ij}|^2>0。$$

因为对任意的 i，一定存在某个 j 使 $s_{ij}\neq 0$ (否则 $\boldsymbol{S}$ 是奇异矩阵)。所以 $\boldsymbol{D}(G)$ 为实表示的唯一可能是

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger}=(\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\dagger})^{*},$$

即

$$\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{C}。$$

如果 $\boldsymbol{D}(g)$ 不与实表示等价，则有 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{C}$。

由定理 2.10，两个等价的表示特征标相等。所以若 $\boldsymbol{D}(g)$ 是实的，则

$$\chi(g)=\chi^{*}(g),\quad g\in G,$$

即实表示的特征标一定是实数。进一步有下面的定理。

定理 3.2 如果 $\chi(g)$ 是不可约表示 $\boldsymbol{D}(g)$ 的特征标，则

$$\sum_{g\in G}\chi(g^2)=\begin{cases} n, & \text{当 } \boldsymbol{D}(g) \text{ 是实表示时,}\\ 0, & \text{当 } \boldsymbol{D}(g) \text{ 与 } \boldsymbol{D}^{*}(g) \text{ 不等价时,}\\ -n, & \text{当 } \boldsymbol{D}(g) \text{ 与 } \boldsymbol{D}^{*}(g) \text{ 等价，但不是实表示时。}\end{cases}$$

证明 由特征标的定义可得

$$\sum_{g\in G}\chi(g^2)=\sum_{g\in G}\sum_{\mu}D_{\mu\mu}(g^2)=\sum_{g\in G}\sum_{\mu,\nu}D_{\mu\nu}(g)D_{\nu\mu}(g)=\sum_{\mu,\nu}\sum_{g\in G}(\boldsymbol{D}^{*}(g))^{*}_{\mu\nu}D_{\nu\mu}(g),$$

再由定理 2.6 可知，如果 $\boldsymbol{D}(g)$ 与 $\boldsymbol{D}(g)^{*}$ 不等价，则上式右边为零，即

$$\sum_{g\in G}\chi(g^2)=0。$$

如果 $\boldsymbol{D}(g)$ 与 $\boldsymbol{D}(g)^{*}$ 等价，则相差一个相似变换，即

$$\boldsymbol{D}^{*}(g)=\boldsymbol{C}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{C}^{-1}。$$

于是有

$$\begin{aligned}\sum_{g\in G}\chi(g^2)&=\sum_{g\in G}\sum_{\mu,\nu}D_{\mu\nu}(g)(\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{D}^{*}(g)\boldsymbol{C})_{\nu\mu}=\sum_{\mu,\nu,\alpha,\beta}\sum_{g\in G}D^{*}_{\alpha\beta}(g)D_{\mu\nu}(g)(\boldsymbol{C}^{-1})_{\nu\alpha}\boldsymbol{C}_{\beta\mu}\\&=\frac{n}{d}\sum_{\mu,\nu,\alpha,\beta}(\boldsymbol{C}^{-1})_{\nu\alpha}\boldsymbol{C}_{\beta\mu}\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu}=\frac{n}{d}\sum_{\mu,\nu}(\boldsymbol{C}^{-1})_{\nu\mu}\boldsymbol{C}_{\nu\mu}=\frac{n}{d}\sum_{\mu}(\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}})_{\mu\mu}。\end{aligned}$$

如果 $\boldsymbol{D}(G)$ 是实表示，则 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{C}$，因此得

$$\sum_{g\in G}\chi(g^2)=\frac{n}{d}\sum_{\mu}(\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}})_{\mu\mu}=\frac{n}{d}\sum_{\mu}I_{\mu\mu}=n。$$

如果 $\boldsymbol{D}(G)$ 不是实表示，则 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{C}$，故有

$$\sum_{g\in G}\chi(g^2)=\frac{n}{d}\sum_{\mu}(\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}})_{\mu\mu}=-\frac{n}{d}\sum_{\mu}I_{\mu\mu}=-n。$$

3.4 时间反演对称和附加简并

到目前为止，我们所讨论的对称性都是空间对称。实际上很多物理体系还具有另一种对称性，即时间反演对称。

如果体系具有时间反演对称，则相反的过程也是可能的物理过程 (即将电影倒过来放映)。在时间反演变换下有

$$\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r},\quad \boldsymbol{p}\to-\boldsymbol{p},\quad \boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\to-\boldsymbol{L},\quad H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\to H。$$

由于不同自旋的粒子在时间反演下的行为不同，首先考虑自旋为 0 的粒子，满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=H\psi(\boldsymbol{r},t)。$$

其中 $\hbar$ 为 Planck 常数。作变换 $t\to-t$ 同时取复共轭得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r},-t)=H\psi^*(\boldsymbol{r},-t),$$

其中已经假定体系 Hamilton 量在时间反演下不变，即

$$H(\boldsymbol{r},-t)=H(\boldsymbol{r},t),$$

记 $T\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi^*(\boldsymbol{r},-t)$，则有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}T\psi(\boldsymbol{r},t)=HT\psi(\boldsymbol{r},t)。$$

即 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 和 $T\psi(\boldsymbol{r},t)$ 满足相同的方程。T 称为时间反演算符，和通常的算符不同，时间反演算符 T 是一种反线性算符，即具有性质

$$T(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1^*T\psi_1+c_2^*T\psi_2。$$

如果 Hamilton 量不显含时间，即

$$H(\boldsymbol{r},t)=H(\boldsymbol{r}),$$

则 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 可以写成定态波函数形式

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}。$$

取复共轭并令 $t\to-t$ 后得

$$\psi^*(\boldsymbol{r},-t)=\psi^*(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar},$$

其中函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 满足静态的 Schrödinger 方程

$$H\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})。$$

如果 Hamilton 量具有时间反演对称，即 $HT=TH$，则

$$HT\psi(\boldsymbol{r})=TH\psi(\boldsymbol{r})=ET\psi(\boldsymbol{r}),$$

即当 $\psi(\boldsymbol{r})$ 是一个物理状态时，$T\psi(\boldsymbol{r})=\psi^*(\boldsymbol{r})$ 也是一个物理状态。

由 $T\psi(\boldsymbol{r})=\psi^*(\boldsymbol{r})$，得

$$T^2\psi(\boldsymbol{r})=T\psi^*(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})。$$

因此 T^2 是恒等算符。

对于自旋为 1/2 的粒子，满足的是 Dirac 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=[-\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla+\beta mc^2+V(\boldsymbol{r})]\psi(\boldsymbol{r},t),$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)$，$\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\beta}$ 是 4×4 矩阵，具体写为

$$\boldsymbol{\alpha}_i=\begin{pmatrix}\boldsymbol{0}&\boldsymbol{\sigma}_i\\ \boldsymbol{\sigma}_i&\boldsymbol{0}\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\beta}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}&\boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0}&-\boldsymbol{I}\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\sigma}_2=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\ \mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\sigma}_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}。$$

$\psi(\boldsymbol{r},t)$ 为旋量。定态 Dirac 方程为

$$[-\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla+\beta mc^2+V(\boldsymbol{r})]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})。$$

为了构造时间反演算符，令

$$T=\mathrm{i}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma}_2&\boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0}&\boldsymbol{\sigma}_2\end{pmatrix}\boldsymbol{C},$$

其中 $\boldsymbol{C}$ 是复共轭算符。注意到

$$\boldsymbol{\sigma}_2^*=-\boldsymbol{\sigma}_2,$$

则有

$$[-\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla+\beta mc^2+V(\boldsymbol{r})]T\psi(\boldsymbol{r})=ET\psi(\boldsymbol{r})。$$

因此 $\psi(\boldsymbol{r})$ 和 $T\psi(\boldsymbol{r})$ 满足相同的方程。由 $\boldsymbol{\sigma}_2^2=\boldsymbol{I}$ 可得

$$T^2=-\boldsymbol{C}^2\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma}_2&\boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0}&\boldsymbol{\sigma}_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma}_2&\boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0}&\boldsymbol{\sigma}_2\end{pmatrix}=-I,$$

即

$$T^2\psi(\boldsymbol{r})=-\psi(\boldsymbol{r})。$$

因此对 Dirac 方程，时间反演算符的平方不再是恒等算符，这与 Schrödinger 方程的情况不同。

现在假设能级是 d 重简并的，$\{\psi_\mu\}$ 是相应的本征函数，可以用来负载体系对称群 G 的不可约表示 $\boldsymbol{D}$, 即有

$$\Gamma_g\psi_\mu = \sum_{\lambda=1} D_{\lambda\mu}(g)\psi_\lambda。$$

由于体系是时间反演不变的，故

$$T\Gamma_g = \Gamma_g T,$$

因而有

$$T\Gamma_g\psi_\mu = \Gamma_g T\psi_\mu = \sum_{\lambda=1} D^*_{\lambda\mu}(g)T\psi_\lambda。$$

注意时间反演算符对常数的作用为取复共轭。上式表明 $\{T\psi_\mu\}$ 负载了表示 $\boldsymbol{D}^*$。

下面分三种情况讨论。

1. 如果 $\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{D}^*$ 不是等价的表示，则负载这两个不可约表示的基 $\{\psi_\mu\}$ 与 $\{T\psi_\mu\}$ 是互相独立的。由于这些本征函数具有相同的本征值，即相应的能量相同。因而体系实际上是 $2d$ 重简并的，即时间反演对称将产生附加简并。

2. 如果 $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}^*$ 是实表示，则 $\{\psi_\mu\}$ 和 $\{T\psi_\mu\}$ 属于同一个不可约表示的同一列，由广义正交定理可得内积

$$(\psi_\mu, T\psi_\nu) = \delta_{\mu\nu}(\psi_\lambda, T\psi_\lambda)。$$

可以看到，$\{\psi_\mu\}$ 和 $\{T\psi_\mu\}$ 线性相关的唯一可能是

$$T\psi_\mu = \lambda\psi_\mu。$$

进一步得

$$T^2\psi_\mu = \lambda^* T\psi_\mu = |\lambda|^2\psi_\mu。$$

对于自旋为 0 的粒子，有 $|\lambda|^2 = 1$，因此 ψ_μ 和 $T\psi_\mu$ 实际上是同一个状态，故时间反演对称不产生附加简并。

对于自旋为 1/2 的粒子，因为

$$T^2\psi(\boldsymbol{r}) = -\psi(\boldsymbol{r}), \quad T\psi_\mu \neq \lambda\psi_\mu,$$

故 $\{\psi_\mu\}$ 和 $\{T\psi_\mu\}$ 不可能线性相关。因而简并是 $2d$ 重的。

3. $\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{D}^*$ 等价，但不是实表示，即

$$\boldsymbol{D}^*(g) = \boldsymbol{C}\boldsymbol{D}(g)\boldsymbol{C}^{-1}, \quad \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} = -\boldsymbol{C},$$

相应的基 $\{\psi_\mu\}$ 和 $\{T\psi_\mu\}$ 则通过

$$T\psi_\mu = \sum_\nu (\boldsymbol{C}^{-1})_{\nu\mu}\psi_\nu$$

相联系, 则

$$T^2\psi_\mu=\sum_\nu(C^{-1})^*_{\nu\mu}T\psi_\nu=\sum_{\alpha,\nu}(C^{-1})^*_{\nu\mu}(C^{-1})_{\alpha\nu}\psi_\alpha=\sum_\alpha(C^{-1}(C^{-1})^*)_{\alpha\mu}\psi_\alpha$$

$$=\sum_\alpha(C^*C)^{-1}_{\alpha\mu}\psi_\alpha=-\sum(C^\dagger C)^{-1}_{\alpha\mu}\psi_\alpha=-\lambda'^{-1}\psi_\mu。$$

其中已经用到了

$$C^*=(C^{\mathrm{T}})^\dagger=-C^\dagger,$$

以及

$$C^\dagger C=\lambda' I。$$

由于 $\lambda'>0$，这一方程对自旋为 0 的粒子不可能满足，所以时间反演对称将会产生附加简并。

对于自旋为 1/2 的粒子，可以令 $\lambda'=1$。此时 $\{\psi_\mu\}$ 和 $\{T\psi_\mu\}$ 是线性相关的，因此时间反演对称不会产生附加简并。

习 题 3

3.1 不可约张量算符的定义可以写成

$$\Gamma_g J_\nu \Gamma_g^{-1}=J_\mu D_{\mu\nu}(g),$$

其中 $D(g)$, $g\in G$ 是群 G 的表示。如果将上式的右边换成如下各项，则哪一项将给出和上式类似的定义？什么情况下不同定义是等价的？

1) $J_\mu D^*_{\mu\nu}(g)$; 2) $J_\mu D_{\mu\nu}(g^{-1})$; 3) $J_\mu D^\dagger_{\mu\nu}(g)$; 4) $D^{\mathrm{T}}_{\nu\mu}(g)J_\mu$; 5) $D_{\nu\mu}(g^{-1})J_\mu$; 6) $D^\dagger_{\nu\mu}(g)J_\mu$。

3.2 设负载 D_3 点群 E 表示的基为 $\{\psi_1,\psi_2\}$，张量 $\{F_i\}$ 按表示 E 变换，求 $|(\psi_2,F_2\psi_1)|^2$ 和 $|(\psi_1,F_2\psi_1)|^2$ 的分支比。

3.3 设负载 O 点群 A_1 表示的基为 ϕ，负载 E 表示的基为 $\{\psi_1,\psi_2\}$，张量 $\{F_i\}$ 按表示 T_1 进行变换。证明

$$(\phi,F_i\psi_j)=0,\quad i=1,2,3;j=1,2。$$

3.4 证明群 G_6^2 的所有不可约表示都是实表示。

第 4 章　点群和空间群

群论在固体物理学中有着重要应用，晶格点群和晶格空间群是凝聚态物理中最重要的对称群。

点群实际上是三维正交群 O(3) 的分立子群，空间群是三维 Euclid 群 E_3 的分立子群。

平移不变和空间转动不变是物理体系最重要的对称性，这些不变性意味着孤立体系的物理实验结果不依赖于实验地点和空间特殊取向的选择。描述晶格上的平移不变和转动不变的数学工具是晶格点群和晶格空间群。本章将对晶格点群和晶格空间群及其表示作一介绍。

4.1　Euclid 群

三维空间是均匀各向同性的，因而孤立体系一定具有平移不变和转动不变，这类空间称为 Euclid 空间。

n 维 Euclid 空间的对称群称为 n 维 Euclid 群 E_n，一般人们比较感兴趣的是三维 Euclid 群 E_3。

如果考虑四维时空，则对称群将是 Poincaré 群，其中包括四维时空的平移和 Lorentz 变换。

Euclid 群 E_3 有两种对称操作，沿某个方向 $\boldsymbol{a}$ 平移距离 a 的操作 $T(\boldsymbol{a})$ 及绕某个轴 $\boldsymbol{n}$ 旋转 θ 角的操作 $R_{\boldsymbol{n}}(\theta)$，这两种操作一般不可对易。

考虑三维 Euclid 空间中的一般坐标变换

$$\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}, \tag{4.1}$$

写成分量形式为

$$x_i' = \sum_{j=1}^{3} R_{ij}x_j + a_i = R_{ij}x_j + a_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

其中 $\boldsymbol{R}_{ij}, a_i$ 是变换的参数，$\det \boldsymbol{R} \neq 0$。这里用到了重复指标代表求和的 Einstein 规则。容易证明，所有保持空间两点距离不变的变换的全体构成群，即三维 Euclid 群 E_3。易见变换 (4.1) 保持下式不变，即

$$|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|^2 = \sum_{i=1} (x_{1i} - x_{2i})^2。$$

变换 (4.1) 可以写成

$$\boldsymbol{r}' = g\boldsymbol{r} = \{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{a}\}\boldsymbol{r}。$$

连续变换给出了

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}''&=\{\boldsymbol{R}_1|\boldsymbol{a}_1\}\boldsymbol{r}'=\{\boldsymbol{R}_1|\boldsymbol{a}_1\}\{\boldsymbol{R}_2|\boldsymbol{a}_2\}\boldsymbol{r}\\&=\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{R}_1(\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2)+\boldsymbol{a}_1\\&=\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_1=\{\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{R}_2|\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_1\}\boldsymbol{r}。\end{aligned}$$

由此得出乘法规则

$$g_1g_2=\{\boldsymbol{R}_1|\boldsymbol{a}_1\}\{\boldsymbol{R}_2|\boldsymbol{a}_2\}=\{\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{R}_2|\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_1\}=g。$$

结合律显然满足。单位元即为 $e=\{\boldsymbol{I}|\boldsymbol{0}\}$，而 $g=\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{a}\}$ 的逆元为

$$g^{-1}=\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{a}\}^{-1}=\{\boldsymbol{R}^{-1}|-\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{a}\}。$$

容易验证

$$\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{a}\}\{\boldsymbol{R}^{-1}|-\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{a}\}=\{\boldsymbol{R}^{-1}|-\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{a}\}\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{a}\}=\{\boldsymbol{I}|\boldsymbol{0}\}。$$

故当 $\boldsymbol{a}=\boldsymbol{0}$ 时，$\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{0}\}$ 就是转动群，它包括转动，反演及其组合。当 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{I}$ 时，$\{\boldsymbol{I}|\boldsymbol{a}\}$ 就是平移群 $T(\boldsymbol{a})$，它是无限的 Abel 群，即有

$$T(\boldsymbol{b})T(\boldsymbol{a})\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}=T(\boldsymbol{a})T(\boldsymbol{b})\boldsymbol{r}。$$

在不引起混淆的情况下，今后也用矩阵 $\boldsymbol{I}$ 表示不产生旋转的操作，从而将 $\{\boldsymbol{I}|\boldsymbol{a}\}$ 记为 $\{I|\boldsymbol{a}\}$。可以证明，平移群 $T(\boldsymbol{a})$ 是 Euclid 群 E_3 的不变子群，即

$$\begin{aligned}\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{b}\}\{I|\boldsymbol{a}\}\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{b}\}^{-1}&=\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{b}\}\{I|\boldsymbol{a}\}\{\boldsymbol{R}^{-1}|-\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{b}\}\\&=\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{R}\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}\}\{\boldsymbol{R}^{-1}|-\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{b}\}\\&=\{I|\boldsymbol{R}\boldsymbol{a}\}。\end{aligned}$$

但转动群不是 E_3 群的不变子群。不难证明，E_3 群的一般群元可以分解为平移群和转动群的乘积

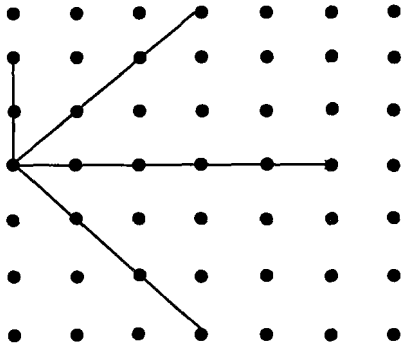


图 4.1 无限大晶格的对称性

$$g=\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{a}\}=\{I|\boldsymbol{a}\}\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{0}\}=T(\boldsymbol{a})\boldsymbol{R}。$$

平移和转动这两种对称操作一般不可对易，所以 E_3 群只能写成平移群和转动群的半直积

$$E_3=T\times R。$$

Euclid 群是连续群，在固体物理中我们感兴趣的是其分立子群，即晶格空间群。

考虑无限大的三维晶格，设晶格长度为 a_0，则绕某个轴旋转一定角度和沿某些方向平移晶格长度 a_0 的整数倍距离后晶格保持不变 (见图 4.1)。

所有满足条件 $|\boldsymbol{a}| \geqslant a_0$ 的对称操作 $\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{a}\}$ 的集合构成群，即晶格空间群。所有分立的平移操作集合构成分立的平移群，这也是 Abel 群。记

$$T = \{I|\boldsymbol{r}_n\}, \quad \boldsymbol{r}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots,$$

其中 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ 是三个线性独立的格点基向量，这三个基向量构成体积为 $\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)$ 的平行六面体，称为原胞。

空间群有三类对称操作：

- 平移操作 $T = \{I|\boldsymbol{r}_n\}$，由 $\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{b}\}\{I|\boldsymbol{r}_n\}\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{b}\}^{-1} = \{I|\boldsymbol{R}\boldsymbol{r}_n\}$ 可知，如果 $\boldsymbol{r}_n \in T$，则 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{r}_n \in T$，其中 $\boldsymbol{R}$ 是空间群的任意点操作；
- 点操作 $P = \{\alpha_s|\boldsymbol{0}\}$，在对称操作中保持至少一点固定不动，包括转动操作和反演操作；
- 组合操作 $Q = \{\alpha_p|\boldsymbol{\tau}\}$，其中 $\{\alpha_p|\boldsymbol{0}\} \notin G, \{I|\boldsymbol{\tau}\} \notin G$。这是转动或反演后再作一个非整数平移。

下面分别对其作详细讨论。

4.2 点群中的对称算符和对称元素

点群是描述分子或有限物体对称性的群。显然有限大小的物体不可能具有平移不变性。如图 4.2 所示，对一个立方体，可以有很多对称操作保持其不变。比如，绕轴 ag, bh, ce, df 转动 $2\pi/3, 4\pi/3$ 角度，绕轴 x, y, z 转动 $\pi/2, \pi, 3\pi/2$ 角度，绕连接 ad 和 fg 的中点的轴转动 π 角度等。此外，通过平面 $abgh$ 等的反演也是立方体的对称操作。这些对称轴和对称面都称之为对称元素。

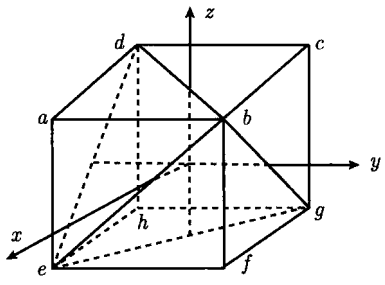


图 4.2 立方体的对称性

可以看到，所有的对称元素、对称轴、对称面等都相交于一点 —— 立方体的中心，这一点在任何对称操作中都是固定不动的。所有这些操作构成群，即点群。

如果绕一个轴转动 $2\pi/n$ 角度后保持体系不变，则这个轴称之为 n 度轴，记为 C_n。绕 C_n 轴转动 $2\pi k/n\,(k = 1, 2, \cdots, n)$ 角的对称操作则记为 c_n^k，其中 $c_n^n = e$ 即为单位操作。反射面记为 σ，中心反演记为 i。

如果反射面与 C_n 轴垂直，则称之为 σ_h 面。如果反射面包含 C_n 轴，则称之为 σ_v 面。如果反射面平分两个对称轴之间的夹角，则称之为 σ_d 面。

n 度轴和与其垂直的反射面的组合称为 n 度像转轴，记为 $S_n = C_n\sigma_h$，即转动和反演操作的组合。

点群实际上是三维空间的线性变换群，如果将变换前后点的坐标记为 (x, y, z) 和 (x', y', z')，如图 4.3 所示，则有

$$x_i \to x_i' = R_{ij}x_j。$$

由于对称操作保持长度不变，故 $\boldsymbol{R}$ 必定是 3×3 的正交矩阵。当 $\det \boldsymbol{R}=1$ 时为纯转动，当 $\det \boldsymbol{R}=-1$ 时包括反演。

取 z 轴为 C_n 轴，xy 平面为 σ_h 面，则绕 z 轴转动 θ 角的操作可以写成

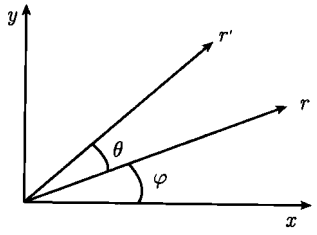


图 4.3　位矢的转动

$$\begin{cases} x'=x\cos\theta-y\sin\theta, \\ y'=x\sin\theta+y\cos\theta, \\ z'=z。 \end{cases}$$

因此可以将转动操作 c_n^k 用矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} \cos\dfrac{2\pi k}{n} & -\sin\dfrac{2\pi k}{n} & 0 \\ \sin\dfrac{2\pi k}{n} & \cos\dfrac{2\pi k}{n} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}。$$

σ_h 是对 xy 平面的反演，故有

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}\to\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}。$$

由此得到 σ_h 对应的矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}。$$

利用这些矩阵表示容易证明

$$c_n^k\sigma_h=\sigma_h c_n^k。$$

当 $n=2$ 时有

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

即

$$c_2\sigma_h=i,$$

其中 $c_2\equiv c_2^1$。进一步有

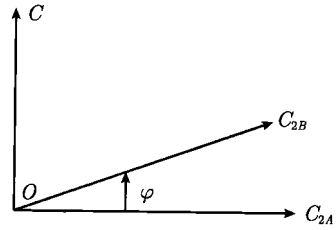


图 4.4　C_2 轴与 C_n 轴的组合

$$c_2\sigma_h=\sigma_h c_2=i,\ c_2 i=ic_2=\sigma_h,\ \sigma_h i=i\sigma_h=c_2。$$

现在假定有两个 2 度轴 C_{2A},C_{2B} 相交于 O 点，它们之间的夹角为 φ。另一个轴 C 与平面 $C_{2A}\times C_{2B}$ 垂直，如图 4.4 所示，则可证明

$$c_{2B}c_{2A}=c(2\varphi)。\tag{4.2}$$

即先绕 C_{2A} 轴转动 π 然后再绕 C_{2B} 轴转动 π 等价于绕 C 轴转动 2φ 角度。这一公式可以证明如下。绕 C_{2B} 的转动操作可以看成一些操作的组合，即先绕 C 轴转动 $-\varphi$ 角，将 C_{2B} 轴转动到 C_{2A} 轴的位置，然后绕 C_{2A} 轴转动 π，最后再绕 C 轴转动 φ 回到原处。因而有

$$c_{2B} = c(\varphi)c_{2A}c(-\varphi),$$

对应矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 \\ \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}。$$

由此得到

$$\begin{pmatrix} \cos 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 \\ \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & -\sin 2\varphi & 0 \\ \sin 2\varphi & \cos 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

即

$$c_{2B}c_{2A} = c(2\varphi)。$$

上式两边乘以 c_{2A} 后可以写成

$$c_{2B} = c(2\varphi)c_{2A}。$$

这意味着 $c(2\varphi)$ 和 c_{2A} 的组合操作将产生另一个 2 度轴操作 c_{2B}。所以，如果有一个 C_n 轴和一个与之垂直的 C_2 轴，则 c_n^k 和 c_2 的组合操作将产生另外 $n-1$ 个与 C_n 轴垂直的 C_2 轴，其中任意两个相邻的 C_2 轴夹角为 π/n。

类似地有

$$c_{2A}c_{2B} = c(-2\varphi), \tag{4.3}$$

消去 c_{2B} 得

$$c_{2A}c(2\varphi)c_{2A} = c(-2\varphi)。$$

一般来说，这两个操作不可对易，即

$$c_{2A}c_{2B} \neq c_{2B}c_{2A}。$$

当 $\varphi = \pi/2$ 时，两个 2 度轴是垂直的，因为

$$c(\pi) = c(-\pi),$$

故此时有

$$c_{2A}c_{2B} = c_{2B}c_{2A} \quad (\text{当 } C_{2A} \perp C_{2B} \text{时})。$$

现在考虑反射面。设 σ_v, σ_v' 为两个相交的反射面，其交线为 z 轴，其夹角为 φ，如图 4.5 所示。取两个与 σ_v, σ_v' 面垂直的 C_2 轴，由方程 (4.2) 可得

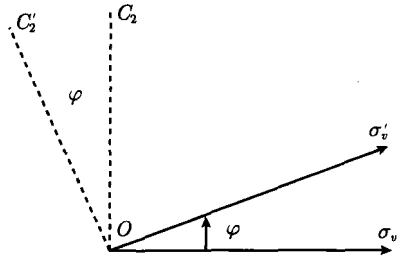


图 4.5 σ_v 面与 C_n 轴的组合

$$\sigma_v'\sigma_v = c_2' i i c_2 = c_2' c_2 = c(2\varphi),$$

其中 C 轴在 z 轴方向。类似可得

$$\sigma_v\sigma_v' = c_2 c_2' = c(-2\varphi)。$$

也可以写成

$$\sigma_v' = c(2\varphi)\sigma_v,$$

或

$$\sigma_v = \sigma_v' c(2\varphi)。$$

上式表明，如果 $\sigma_v, c(2\phi)$ 是对称操作，则 σ_v' 也是对称操作。如果有一个 C_n 轴和一个包含 C_n 轴的 σ_v 面，则组合操作将产生另外 $n-1$ 个 σ_v' 面，这就和 C_n 轴与 C_2 轴的情况一样了。

如果一个 C_n 轴和一个 C_m 轴相交于 O 点，两轴夹角为 φ，如图 4.6 所示，则 C_m 轴的对称操作将产生 m 个 C_n 轴，同样 C_n 轴的对称操作将产生 n 个 C_m 轴。

设 C_{mj} 轴是 C_m 轴绕 C_n 轴转动 $2\pi j/n$ 后产生的一个新的 C_m 轴。则绕 C_{mj} 轴转动 $2\pi i/m$ 角的对称操作可以分解为先绕 C_n 轴转动 $-2\pi j/n$，将 C_{mj} 轴转到 C_m 轴位置；然后绕 C_m 轴转动 $2\pi i/m$ 角，最后再绕 C_n 轴转动 $2\pi j/n$ 回到原来位置。即

$$c_n^j c_m^i (c_n^j)^{-1} = c_n^j c_m^i c_n^{-j} = c_{mj}^i \in G。$$

将这些通过 C_n 轴的对称操作得到的所有 C_m 轴统称为等价轴。同理，通过 C_m 轴的对称操作得到的所有 C_n 轴也是彼此等价的。

从上面的对称操作分解表达式中可以看到，凡是绕等价轴转动相同角度的对称操作都属于同一类，即 c_m^i, c_{mj}^i 属于同一类。类似地，c_n^i, c_{nj}^i 也属于同一类。

如果同时考虑 C_n 轴和 σ 面的情形，σ 面的反射将产生另一个 C_n 轴，记为 C_n'，如图 4.7 所示。同样，绕 C_n' 轴的转动操作可以看成是先通过 σ 面将 C_n' 轴反射到 C_n 轴位置，然后绕 C_n 轴完成转动后再通过 σ 面反射回去。由于镜面反射使左右手互换，C_n 轴的正

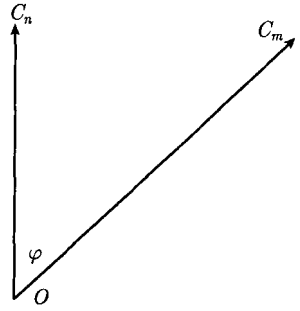


图 4.6 多个高阶轴的情况

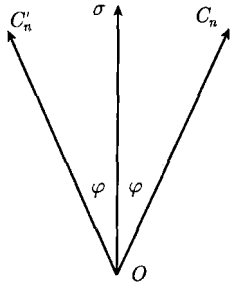


图 4.7 C_n 轴和反射面的组合

转变成 C_n' 轴的反转，即

$$c'^{-k}_n = \sigma c^k_n \sigma。$$

故分别绕这两个 C_n 轴正转和反转相同角度的对称操作属于同一类。

类似地，由 C_n 轴的对称操作产生的一组反射面

$$\sigma' = c^k_n \sigma c^{-k}_n$$

也是等价的。这些反射面的对称操作属于同一类。

如果一个 C_n 轴有一个与之垂直的 σ_h 面，则由

$$c^k_n \sigma_h = \sigma_h c^k_n,$$

可得

$$c^k_n = \sigma_h c^k_n \sigma_h。$$

即如果存在 σ_h 面，则操作 c^k_n 自成一类。

如果有一个与 C_n 轴垂直的 C_2 轴，则有

$$c^{-k}_n = c_2 c^k_n c_2。$$

所以一个与 C_n 轴垂直的 C_2 轴将使操作 c^k_n, c^{-k}_n 成为同一类。

类似地，如果有一个包含 C_n 轴的 σ_v 面，则

$$\sigma_v c^k_n \sigma_v = i c_2 c^k_n i c_2 = c_2 c^k_n c_2 = c^{-k}_n。$$

因此操作 c^k_n, c^{-k}_n 属于同一类。

上述所有证明都取了特殊坐标系，但可以证明，通过相似变换，上述证明在一般坐标系下也成立。如对等式

$$\sigma_h c^k_n = c^k_n \sigma_h$$

作相似变换后有

$$U\sigma_h U^{-1} U c^k_n U^{-1} = U c^k_n U^{-1} U \sigma_h U^{-1},$$

其中 $U\sigma_h U^{-1}$, $U c^k_n U^{-1}$ 是 σ_h, c^k_n 在任意坐标系下的表示形式。

4.3 第一类点群

只包含纯转动操作的点群称为第一类点群，可以分为以下几种类型。

1. 单轴点群

如果只有一个对称轴，则称之为单轴点群，记为 C_n $(n = 1, 2, \cdots)$。其中 $C_1 = \{e\}$ 是只包含单位元的平凡群。C_∞ 实际上是连续群 SO(2)，这将在第 6 章讨论。

由于所有对称操作 c^k_n $(k = 1, 2, \cdots, n)$ 都是对易的，故 C_n 群是 n 阶的 Abel 群，具有 n 个一维不可约表示。

在分子物理中，对 n 没有限制。如果讨论晶格点群，则 n 只能取 $1,2,3,4,6$ 这几个值，不存在 $n=5$ 和 $n>7$ 的对称轴。

下面来进行证明。设 T 为平移群，若 $\boldsymbol{r}_n \in T$，则要求

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{r}_n = \boldsymbol{r}'_n \in T。$$

记

$$\boldsymbol{r}_n = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3,$$

及

$$\boldsymbol{r}'_n = n'_1\boldsymbol{a}_1 + n'_2\boldsymbol{a}_2 + n'_3\boldsymbol{a}_3,$$

则有

$$\boldsymbol{n}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{n},$$

其中 $\boldsymbol{n}' = (n'_1, n'_2, n'_3)$ 和 $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2, n_3)$ 的诸分量都是整数。

如果取 $\boldsymbol{n}$ 的值为 $(1,0,0),(0,1,0),(0,0,1)$，则转动矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的矩阵元也必须是整数。由于 $\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{R}$ 在相似变换下不变，并与基的选择无关，因而不妨取 z 轴为对称轴，考虑绕 z 轴转动 φ 角的对称操作，则

$$\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{R} = 2\cos\varphi \pm 1$$

必须是整数。这给出

$$\varphi = k\left(\pm 2\pi, \pm\pi, \pm\frac{2\pi}{3}, \pm\frac{\pi}{2}, \pm\frac{2\pi}{6}\right), \quad k = 1,2,\cdots。$$

因此，我们得到包含一个 C_n 轴的晶格点群

$$C_1,\ C_2,\ C_3,\ C_4,\ C_6。$$

C_n 群是 n 阶的 Abel 群，其不可约表示都是一维的。如果是讨论分子对称性，则任意的 C_n 群都可能存在。

2. 不包含或只包含一个高阶对称轴的点群

$n \geqslant 3$ 的对称轴 C_n 称为高阶轴。如果没有高阶轴，则所有对称轴都是 2 度轴。

假设有两个 2 度轴，C_2, C'_2，相交于 O 点。则由前面的讨论可知，C_2, C'_2 必须互相垂直，否则的话将产生高阶轴。两个互相垂直的 2 度轴 C_2, C'_2 将产生与之垂直的第三个 2 度轴 C''_2。这样得到的是点群

$$D_2 = \{e, c_2, c'_2, c''_2\},$$

它是 4 阶的 Abel 群，有 4 个一维不可约表示。

如果有一个 $n \geqslant 3$ 的高阶轴 C_n，另外有一个 C_2 轴与之垂直 (如果不是垂直的，则 C_2 的作用将产生一个新的 n 度轴)，则 C_n 轴的对称操作将产生其余 $n-1$ 个与 C_n 轴垂直的 2 度轴。相邻两个 C_2 轴的夹角为 π/n。

这样得到的点群称为 D_n 群，这是 $2n$ 阶的群。由关系式

$$c'_2 = c_n^1 c_2 c_n^{-1}$$

可以看到，如果两个 C_2 轴等价，则它们之间的最小夹角为 $2\pi/n$。

因此，如果 n 是偶数，则 n 个 2 度轴将分为两个等价类。如果 n 是奇数，则所有 2 度轴都是等价的。由于有 C_2 轴与 C_n 轴垂直，故对称操作 c_n^k, c_n^{-k} 属于同一类。因此有

$$D_n = \begin{cases} \{e, nc_2, (c_n^1, c_n^{n-1}), \cdots, (c_n^{(n-1)/2}, c_n^{(n+1)/2})\}, & n \text{ 为奇数}, \\ \left\{e, \dfrac{n}{2}c_2, \dfrac{n}{2}c_2', (c_n^1, c_n^{n-1}), \cdots, (c_n^{n/2-1}, c_n^{n/2+1}), c_n^{n/2}\right\}, & n \text{ 为偶数}。 \end{cases}$$

故 D_n 群有 $(n+3)/2$ (n 为奇数) 或 $n/2+3$(n 为偶数) 个类。

如果讨论晶格点群，则只有 D_2, D_3, D_4, D_6 这几个 ($D_1 = C_2$)，即

D_2: 4 阶群，4 类，$1^2+1^2+1^2+1^2=4$;

D_3: 6 阶群，3 类，$1^2+1^2+2^2=6$;

D_4: 8 阶群，5 类，$1^2+1^2+1^2+1^2+2^2=8$;

D_6: 12 阶群，6 类，$1^2+1^2+1^2+1^2+2^2+2^2=12$。

3. 包含多个高阶轴的点群 — 多面体点群 T, O, I

现在假定有一个 C_n 轴和一些 m 度轴相交于 O 点，设其中 C_m 是与 C_n 夹角最小的轴。然后以 O 点为球心作一个球面，则所有的对称轴都将相交于一点 O 并与球面相交。由

$$c_{mk}^i = c_n^k c_m^i c_n^{-k}, \quad k = 1, 2, \cdots, n,$$

可得 n 个围绕 C_n 轴的 m 度轴 C_m，即每当 C_m 轴围绕 C_n 轴转动 $2\pi/n$ 角度就产生一个新的 C_m 轴。连接这些 C_m 轴与球面的交点就得到一个 n 边形，在这个 n 边形内没有其他的 C_m 轴，如图 4.8 所示。

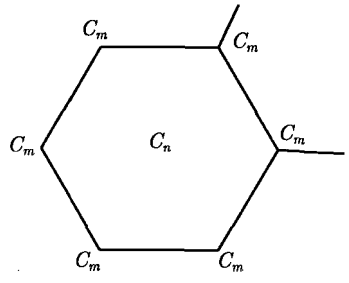


图 4.8 多个高阶轴的情况

类似地，C_n 轴绕 C_m 轴的转动操作将产生 m 个 C_n 轴。因此，每个 C_m 轴周围都围绕着 m 个 C_n 轴，而每个 C_n 轴周围也围绕着 n 个 C_m 轴。连接所有对称轴与球面的交点，就得到一个正多面体。因此，如果体系具有多个高阶对称轴，则一定是正多面体对称。现在来看允许的正多面体有几种。

正多边形的内角和为 $(n-2)\pi$，每个内角为 $(n-2)\pi/n = (1-2/n)\pi$，每个顶点有 m 个多边形围绕，因此每个顶点的内角和为

$$\varphi = m(1-2/n)\pi。$$

如果要求构成多面体，则这个内角和必须小于 2π。即

$$0 < \varphi = m(1-2/n)\pi < 2\pi。$$

最后得下列 5 种正多面体：

(1) $n=3, m=3, \varphi=\pi<2\pi$，四面体，$T$ 群;

(2) $n=4, m=3, \varphi=3\pi/2<2\pi$，立方体，$O$ 群;

(3) $n=3, m=4, \varphi=4\pi/3<2\pi$，正八面体，$O$ 群;

(4) $n=5, m=3, \varphi=9\pi/5<2\pi$，正十二面体，$I$ 群;

(5) $n=3, m=5, \varphi=5\pi/3<2\pi$，正二十面体，$I$ 群。

只存在 5 种正多面体，而对称群只有 3 种。因为立方体和正八面体的对称群是相同的，正十二面体和正二十面体的对称群也是相同的。I 群有 5 度对称轴，因此在晶格点群中只存在 T 群和 O 群这两种。

T 群。有 4 个 3 度轴 $C_{3\alpha}, C_{3\beta}, C_{3\gamma}, C_{3\delta}$，3 个 2 度轴 C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}。容易看到这些 3 度轴彼此等价，2 度轴也彼此等价，因此转动相同角度属于同一类。T 群为 12 阶群，有 4 个类：

$$T=\{e, 4c_3^1, 4c_3^2, 3c_2\},\ 1^2+1^2+1^2+3^2=12。$$

O 群。有 3 个 4 度轴 C_{4x}, C_{4y}, C_{4z}，4 个 3 度轴 $C_{3\alpha}, C_{3\beta}, C_{3\gamma}, C_{3\delta}$，6 个 2 度轴 $C_{2a}, C_{2b}, C_{2c}, C_{2d}, C_{2e}, C_{2f}$。容易看到这些 4 度轴彼此等价，3 度轴和 2 度轴也彼此等价。每个 4 度轴和 3 度轴都有与之垂直的 2 度轴，因此不仅转动相同角度属于同一类，正转和反转相同角度也属于同一类。O 群为 24 阶，有 5 个类：

$$O=\{e, 3(c_4^1, c_4^3), 3c_4^2, 6c_2, 4(c_3^1, c_3^2)\},\quad 1^2+1^2+2^2+3^2+3^2=24。$$

立方体与正八面体对偶，即连接立方体的 6 个面心就得到正八面体；而连接正八面体的 8 个面心就得到立方体，如图 4.9 所示，这种性质称为对偶。因此立方体和正八面体具有相同的对称群，即 O 点群。

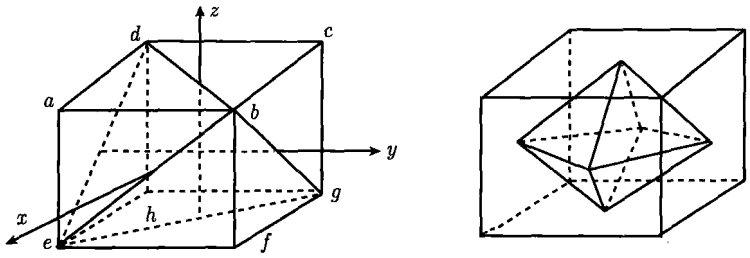


图 4.9 正多面体的对称

I 群。有 6 个 5 度轴，10 个 3 度轴，15 个 2 度轴。这些轴也都是彼此等价的，并且都有与之垂直的 2 度轴。同样，转动相同角度属于同一类，正转和反转相同角度也属于同一类。I 群是 60 阶群，有 5 个类：

$$I=\{e, 6(c_5^1, c_5^4), 6(c_5^2, c_5^3), 10(c_3^1, c_3^2), 15c_2\},\quad 1^2+3^2+3^2+4^2+5^2=60。$$

易见正十二面体和正二十面体也是对偶的，对称群相同。

最后得到 11 种第一类晶格点群：

$$C_1,\ C_2,\ C_3,\ C_4,\ C_6,\ D_2,\ D_3,\ D_4,\ D_6,\ T,\ O。$$

4.4 第二类点群

第二类点群包括反演操作。最简单的包含反演操作的群为

$$C_s = \{e, \sigma\}$$

和

$$C_i = \{e, i\}。$$

它们都是二阶群，有 2 个一维不可约表示

$$\Gamma^{(1)} = \{1, 1\}, \quad \Gamma^{(2)} = \{1, -1\}。$$

现在考虑具有一个 C_n 对称轴的群。引入 σ 反射面，由

$$C'_n = \sigma C_n \sigma$$

可以看到，一般情况下 σ 面的反射将产生新的 C_n 轴。除非 σ 面与 C_n 轴垂直或包含 C_n 轴。因此，从 C_n 群出发加入反射面，将得到 C_{nh} 和 C_{nv} 群。

1. C_{nh} 群，即引入 $\sigma = \sigma_h$ 面与 C_n 轴垂直。由

$$\sigma_h c_n^k = c_n^k \sigma_h$$

可知，C_{nh} 群是 $2n$ 阶的 Abel 群。

$$C_{nh} = \{e, c_n^1, \cdots, c_n^{n-1}, \sigma_h, c_n^1\sigma_h, \cdots, c_n^{n-1}\sigma_h\} = C_n \otimes C_s。$$

特别地，有

$$C_{1h} = \{e, \sigma_h\} = C_s,$$
$$C_{2h} = \{e, c_2, \sigma_h, c_2\sigma_h = i\} = C_2 \otimes C_i。$$

2. C_{nv} 群，即引入 $\sigma = \sigma_v$ 面使其包含 C_n 轴。c_n^k 的作用将产生其余 $n-1$ 个 σ_v 面，如果作对应 $\sigma_v \to C_2$，则容易看到 C_{nv} 群与 D_n 群同构，记为

$$C_{nv} \cong D_n。$$

容易将 C_{nv} 群的分类情况表示为

$$C_{nv} = \begin{cases} \{e, n\sigma_v, (c_n^1, c_n^{n-1}), \cdots, (c_n^{(n-1)/2}, c_n^{(n+1)/2})\}, & n \text{ 为奇数}, \\ \left\{e, \dfrac{n}{2}\sigma_v, \dfrac{n}{2}\sigma'_v, (c_n^1, c_n^{n-1}), \cdots, (c_n^{n/2-1}, c_n^{n/2+1}), c_n^{n/2}\right\}, & n \text{ 为偶数}。 \end{cases}$$

特别地，有

$$C_{1v} = \{e, \sigma_v\} = C_s。$$

3. 现在考虑 S_n 群，这是包含像转轴 $S_n = C_n\sigma_h$ 的群。由于

$$s_1 = c_1\sigma_h = \sigma_h, \quad s_2 = c_2\sigma_h = i,$$

因此

$$S_1 = \{e, \sigma_h\} = C_s, \quad S_2 = \{e, i\} = C_i$$

都是已经讨论过的群。而又由

$$s_3^3 = (c_3\sigma_h)^3 = \sigma_h \in S_3, \quad s_3^1 = c_3^1\sigma_h \in S_3,$$

可知 $c_3^1 \in S_3$。故 S_3 群实际上就是 C_{3h} 群。下面只需要考虑 S_4, S_6。由

$$s_{2n}^2 = (c_{2n}^1\sigma_h)^2 = c_{2n}^2 = c_n^1 \in S_{2n},$$

可见 S_{2n} 轴同时也是 C_n 轴。因此得

$$S_4 = \{e, s_4^1, s_4^3, c_2\},$$

$$S_6 = \{e, s_6^1, s_6^5, c_3^1, c_3^2, i\},$$

其中 S_4, S_6 都是 Abel 群，且

$$s_6^3 = (c_6^1\sigma_h)^3 = c_2\sigma_h = i。$$

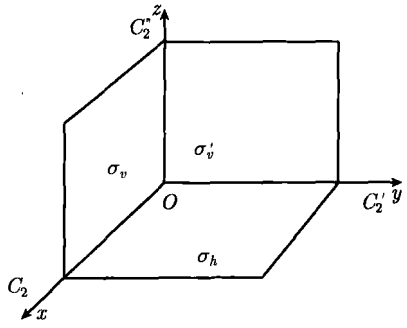


图 4.10 σ_h 面的引入

如果从 D_n 群出发加入反射面，将得到 D_{nh} 和 D_{nd} 群。

4. D_{nh} 群。对 D_n 群引入 σ_h 面。令 $\sigma_h \perp C_n$，则 σ_h 面和 n 个 C_2 轴的组合操作将产生 n 个 σ_v 面，如图 4.10 所示。根据前面的讨论可知，当 n 是偶数时，这些 σ_v 面将分成两组等价面，当 n 是奇数时，所有的 σ_v 面都是等价的。σ_h 与 C_n 轴对易，自成一类。由 σ_h 和 C_n 的联合操作可得像转轴 $S_n = C_n\sigma_h$。如果 n 是偶数，则有

$$c_n^{n/2} = c_2 \in D_{nh}, \quad \sigma_h \in D_{nh} \to c_2\sigma_h = i \in D_{nh}。$$

中心反演 i 也自成一类。最后，当 n 是奇数时，可得

$$D_{nh} = \{e, (c_n^1, c_n^{n-1}), \cdots, (c_n^{(n-1)/2}, c_n^{(n+1)/2}), nc_2,$$
$$\sigma_h, n\sigma_v, (s_n^1, s_n^{n-1}), \cdots, (s_n^{(n-1)/2}, s_n^{(n+1)/2})\}。$$

共有 $n+3$ 类。当 n 是偶数时，可得

$$D_{nh} = \Big\{e, (c_n^1, c_n^{n-1}), \cdots, (c_n^{n/2-1}, c_n^{n/2+1}), c_2, \frac{n}{2}c_2', \frac{n}{2}c_2'',$$
$$\sigma_h, i, \frac{n}{2}\sigma_v, \frac{n}{2}\sigma_v', (s_n^1, s_n^{n-1}), \cdots, (s_n^{n/2-1}, s_n^{n/2+1})\Big\}。$$

共有 $n+6$ 类。如果 n 是偶数，由于 i 与 D_n 的所有元素对易，可得

$$D_{nh} \cong D_n \otimes C_i。$$

如果 n 是奇数，σ_h 与 D_n 的所有元素对易，则有

$$D_{nh} \cong D_n \otimes C_s。$$

特别地，有

$$D_{1h} = C_{2v}。$$

5. D_{nd} 群。由 D_n 群出发，如果通过 C_2 轴引入 σ_v 面，则将得到 D_{nh} 群。因此将 σ_d 面按图 4.11 所示方式加入，即加入的 σ_d 面正好平分两个 C_2 轴之间的夹角。则 C_n 轴的作用将产生 n 个 σ_d 面，位于每两个 C_2 轴之间。可以证明，由于 σ_d 面和 C_2 轴的作用，将使 C_n 轴变成 S_{2n} 轴。由于对晶体点群，不存在 S_5 和 $S_{n\geqslant 7}$ 的像转轴，因而可能的晶格点群只有 D_{2d}, D_{3d}。由于 C_2 轴的存在，使得绕 S_{2n} 轴的正转和反转相同角度属于同一类，所有的 σ_d 面都为等价面。而 σ_d 面的存在使得所有的 C_2 轴变成等价轴。因此有

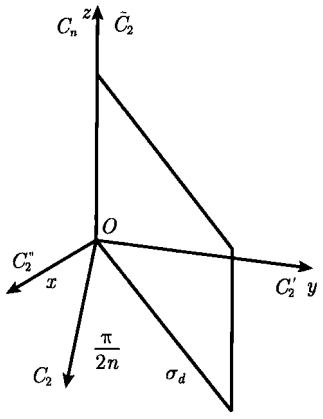


图 4.11 σ_d 面的引入

$$D_{2d} = \{e, (s_4^1, s_4^3), c_2, 2c_2', 2\sigma_d\}, \quad 1^2+1^2+1^2+1^2+2^2 = 8,$$

$$D_{3d} = \{e, (s_6^1, s_6^5), (c_3^1, c_3^2), i, 3c_2', 3\sigma_d\}, \quad 1^2+1^2+1^2+1^2+2^2+2^2 = 12。$$

我们可以将上述过程的证明简单描述如下。由于 $\sigma_d \in G, c_2 \in G$，故有

$$\begin{aligned}\sigma_d c_2 &= ic_2'' c_2 = ic_n\left(-\pi + \frac{\pi}{n}\right) = \sigma_h \tilde{c}_2 c_n\left(-\pi + \frac{\pi}{n}\right)\\ &= \sigma_h c_n\left(\frac{\pi}{n}\right) = \sigma_h c_{2n}^1 = s_{2n}^1 \in G。\end{aligned}$$

这一过程中首先将 σ_d 面的操作分解为中心反演和与之垂直的 C_2'' 轴的转动之积，然后利用公式 (4.3) 并将中心反演重新写成 σ_h 面与沿 C_n 轴方向的 $\tilde{C}_2$ 轴的乘积。

最后考虑多面体群引入反射面的方式。

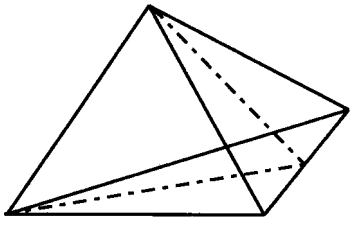


图 4.12 正四面体引入反射面的方式

6. T_d 群，由 T 群出发加反射面。σ_d 面可以按如图 4.12 所示方式引入，即通过两个 3 度轴并平分另外两个3度轴之间的夹角。σ_d 面和 C_3 轴的作用将产生其余 5 个 σ_d 面，这些面都是等价面。由于 σ_d 面也正好平分两个 C_2 轴之间的夹角，和 D_{nd} 群的情况类似，这将使第三个 C_2 轴变成 S_4 轴。另外，因为 C_3 轴有 σ_d 面通过，

正转反转相同角度变成同一类。因此得

$$T_d = \{e, 4(c_3^1, c_3^2), 3(s_4^1, s_4^3), 3s_4^2 = 3c_2, 6\sigma_d\},$$

$$1^2 + 1^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 = 24。$$

容易看到 T_d 群和 O 群是同构的，即 $T_d \cong O$。

7. T_h 群。另一种引入 σ_h 面的方式是包含两个 C_2 轴并垂直于第三个 C_2 轴。这样的 σ_h 面一共有 3 个，都是等价面。即图 4.13 中的 xy, yz, zx 平面。注意 T_h 实际上并不是正四面体的对称群。由于 σ_h 面的引入，则有

$$\sigma_h c_2 = i \in T_h,$$

即存在反演中心。进一步有

$$c_3^1 i = c_3^1 c_2 \sigma_h = c_6^5 \sigma_h = s_6^5, \quad c_3^2 i = s_6^1。$$

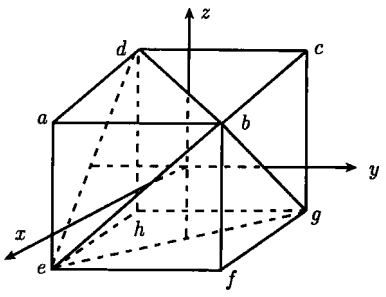


图 4.13 立方体的反射对称

最后得

$$T_h = \{e, 3c_2, 4c_3^1, 4c_3^2, i, 3\sigma_h, 4s_6^1, 4s_6^5\} \cong T \otimes C_i,$$

$$1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 3^2 + 3^2 = 24。$$

8. O_h 群。由 O 群出发加反射面，如图 4.13 所示。如果引入 σ_h 面 (比如 xy 平面)，则 C_4 轴的作用将产生另外两个等价的 σ_h 面，即 yz, zx 平面。因为 yz 面对 z 轴而言是 σ_v 面，在 $C_4(z)$ 轴的作用下除产生 zx 面外还将产生 2 个等价的 σ_d 面 (即 $bdhf$ 面等)。这样一共将产生 6 个 σ_d 面，它们都是等价面。由于 σ_d 面的存在，使 3 个 C_2 轴变成 S_4 轴，而由 $\sigma_h c_2 = i$ 知存在反射中心。因此最后得到

$$\begin{aligned} O_h &= \{e, 3(c_4^1, c_4^3), 3c_2, 4(c_3^1, c_3^2), 6c_2', 3(s_4^1, s_4^3), 4(s_6^1, s_6^5), i, 3\sigma_h, 6\sigma_d\} \\ &= \{e, 3(c_4^1, c_4^3), 3c_2, 4(c_3^1, c_3^2), 6c_2'\} \otimes \{e, i\} \cong O \otimes C_i, \end{aligned}$$

$$1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 + 3^2 + 3^2 = 48,$$

其中已经用到了

$$c_3^1 i = c_3^1 c_2 \sigma_h = c_6^5 \sigma_h = s_6^5, \quad c_3^2 i = s_6^1,$$

$$c_4^1 i = c_4^1 c_2 \sigma_h = c_4^3 \sigma_h = s_4^3, \quad c_4^3 i = s_4^1。$$

9. I_h 群。类似地从 I 群出发，加入 σ_h 面后得到

$$\begin{aligned} I_h &= \{e, 12(c_5^1, c_5^4), 12(c_5^2, c_5^3), 15c_2', 10(c_3^1, c_3^2), i, 12(s_{10}^1, s_{10}^9), 12(s_{10}^3, s_{10}^7), 10(s_6^1, s_6^5), 15\sigma_h\} \\ &\cong I \otimes C_i, \end{aligned}$$

$$1^2 + 1^2 + 3^2 + 3^2 + 3^2 + 3^2 + 4^2 + 4^2 + 5^2 + 5^2 = 120。$$

I_h 群因为有 5 度对称轴而不属于晶格点群。这样一共得到 21 种第二类晶格点群。所以总共只有 32 种晶格点群。即

$$C_1,\ C_2,\ C_3,\ C_4,\ C_6,\ D_2,\ D_3,\ D_4,\ D_6,\ T,\ O,$$
$$C_i,\ C_s,\ C_{2h},\ C_{3h},\ C_{4h},\ C_{6h},\ C_{2v},\ C_{3v},\ C_{4v},\ C_{6v},$$
$$S_4,\ S_6,\ D_{2h},\ D_{3h},\ D_{4h},\ D_{6h},\ D_{2d},\ D_{3d},\ T_d,\ T_h,\ O_h。$$

如果不是限于讨论晶格点群的话，则点群的种类可以有无穷多个，如 C_{60} 的对称群为 I_h，具有 5 度对称。对于各种分子和聚合物，我们也可以有 C_{5h}, D_{5d} 之类的点群，甚至可以有 $C_{\infty v}, D_{\infty h}$ 之类的点群。

4.5 Bravais 格子和空间群

我们已经看到，空间群的元素可以写成

$$G = \{\{\alpha|\boldsymbol{r}_n + \boldsymbol{\tau}_i\}\}。$$

对称性要求将对转动操作 α 和平移操作 $\boldsymbol{r}_n$ 的形式加上一定的限制。即对空间群 G 的任意群元 $\{\alpha|\boldsymbol{r}\}$，如果 $\boldsymbol{r}_n \in T$ 是格点向量，则要求 $\alpha\boldsymbol{r}_n \in T$ 也是格点向量。这是因为由群的封闭性可得

$$\{\alpha|\boldsymbol{r}\}\{I|\boldsymbol{r}_n\}\{\alpha|\boldsymbol{r}\}^{-1} = \{\alpha|\boldsymbol{r} + \alpha\boldsymbol{r}_n\}\{\alpha^{-1}| - \alpha^{-1}\boldsymbol{r}\} = \{I|\alpha\boldsymbol{r}_n\} \in G。$$

因此，转动轴包括像转轴只能是 $1, 2, 3, 4, 6$ 度轴。

反过来，这些被限制的转动操作也将对平移群的形式加以限制，并且会进一步将格点的形式限制为 14 种，称之为 Bravais 格子，分属 7 大晶系。

定义平移群的对称点群

$$P = \{\alpha|\,\alpha\boldsymbol{r}_n = \boldsymbol{r}'_n \in T\},$$

其中可能 $\{\alpha|\boldsymbol{0}\} \notin G$。显然 P 点群应当是 32 个点群之一。可以证明，P 点群有下列性质。

1. $i \in P$，即 P 一定包含中心反演。

2. 如果 $C_n \in P\ (n > 2)$，则有 $\sigma_v \in P$。因此 $C_{nv} \subset P$，即 C_{nv} 一定是 P 的子群。

证明 如果 $\boldsymbol{r}_n \in T$，由于

$$\{I|\boldsymbol{r}_n\}^{-1} = \{I| - \boldsymbol{r}_n\} \in G \to -\boldsymbol{r}_n \in T,$$

因此有 $i \in P$。

下面来证明当 $C_n \in P\ (n > 2)$ 时有 $\sigma_v \in P$。取一个与 C_n 轴垂直的平面 S，令 $\boldsymbol{a}_1$ 为平面 S 上的最短向量，而 $\boldsymbol{a}_2 = c_n^1\boldsymbol{a}_1$，则 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ 可以取为 S 上的基向量。第三个基向量可以写成

$$\boldsymbol{a}_3 = \boldsymbol{u} + \boldsymbol{v},$$

其中 $\boldsymbol{u}$ 沿 C_n 轴方向，$\boldsymbol{v}$ 则与 C_n 轴垂直。然后有

$$c_n^1\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_3=c_n^1\boldsymbol{u}+c_n^1\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}=c_n^1\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}\in T。$$

由于 $c_n^1\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}$ 位于平面 S 上，因而可以用基向量 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2$ 的线性组合表示为

$$c_n^1\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2,\quad n_1,n_2\in\mathbf{R}。$$

由此可得

$$c_n^{-1}\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}=-n_1c_n^{-1}\boldsymbol{a}_1-n_2\boldsymbol{a}_1。$$

相加后得

$$c_n^1\boldsymbol{v}+c_n^{-1}\boldsymbol{v}-2\boldsymbol{v}=n_2\boldsymbol{a}_2-n_1c_n^{-1}\boldsymbol{a}_1+(n_1-n_2)\boldsymbol{a}_1。$$

由于

$$c_n^1\boldsymbol{v}+c_n^{-1}\boldsymbol{v}=2\cos\frac{2\pi}{n}\boldsymbol{v},\quad c_n^1\boldsymbol{a}_1+c_n^{-1}\boldsymbol{a}_1=2\cos\frac{2\pi}{n}\boldsymbol{a}_1,$$

代入上式后得

$$2\left(\cos\frac{2\pi}{n}-1\right)\boldsymbol{v}=(n_1+n_2)\boldsymbol{a}_2+\left(n_1-n_2-2n_1\cos\frac{2\pi}{n}\right)\boldsymbol{a}_1。$$

现在令 σ_v 与 S 面相交并与 $\boldsymbol{a}_1$ 垂直 (见图 4.14)，则

$$\sigma_v\boldsymbol{a}_1=-\boldsymbol{a}_1,\quad \sigma_v\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}。$$

当 $n=3$ 时，有

$$\sigma_v\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_1\in T;$$

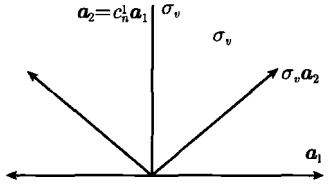


图 4.14 反射面对基向量的作用

当 $n=4$ 时，有

$$\sigma_v\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{a}_2;$$

当 $n=6$ 时，有

$$\sigma_v\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_1\in T;$$

及当 $n=3,4,6$ 时，有

$$\begin{aligned}\sigma_v\boldsymbol{a}_3&=\sigma_v\boldsymbol{u}+\sigma_v\boldsymbol{v}=\boldsymbol{u}+\sigma_v\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}_3+\sigma_v\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}\\&=\boldsymbol{a}_3+\frac{[(n_1+n_2)(\sigma_v\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_2)-2(n_1-n_2-2n_1\cos(2\pi/n))\boldsymbol{a}_1]}{2[\cos(2\pi/n)-1]}\\&=\boldsymbol{a}_3+(n_1-n_2)\boldsymbol{a}_1\in T。\end{aligned}$$

因此对任意 $\boldsymbol{r}_n\in T$，有

$$\sigma_v\boldsymbol{r}_n\in T\rightarrow\sigma_v\in P,$$

即

$$C_{nv}\subset P\ (n\geqslant 3)。$$

因为 P 点群必须是 32 个点群之一，而上述性质则将其限制为下列 7 个点群之一：

$$C_i,\ C_{2h}=C_2\otimes C_i,\ D_{2h}=D_2\otimes C_i,\ D_{3d}=D_3\otimes C_i,$$

$$D_{4h}=D_4\otimes C_i,\ D_{6h}=D_6\otimes C_i,\ O_h=O\otimes C_i。$$

这 7 个点群都有中心反演 i，对每个高阶轴 $(n\geqslant 3)$ 都有一个 σ_v 包含该轴。这称为 7 大晶系。即

C_i，三斜系；C_{2h}，单斜系；D_{2h}，正交系；D_{4h}，四角系；

D_{3d}，三角系；D_{6h}，六角系；O_h，立方系。

空间群的元素

$$g=\{\alpha_s|\boldsymbol{r}_n\}\quad 或\quad g'=\{\alpha_p|\boldsymbol{\tau}_p\}$$

中的所有点操作构成群，称为空间群的点群，记为 K。

K 点群不一定是空间群的子群，因为 $g_0'=\{\alpha_p|\boldsymbol{0}\}\notin G$。但 $K\subset P$，即 K 点群一定是 P 点群的子群。因此，32 个点群按照子群关系分属于这 7 大晶系，叫做 32 个晶类。由于某个 K 点群可能是多个 P 点群的子群，因此在划分时按照最低对称的原则，即将 K 点群归于包含 K 的对称性最低的一个 P 点群。最后可以得到

$$(C_1,C_i),\ (C_s,C_2,C_{2h}),\ (C_{2v},D_2,D_{2h}),\ (S_4,C_4,D_{2d},D_4,C_{4v},C_{4h},D_{4h}),$$

$$(C_3,S_6,C_{3v},D_3,D_{3d}),\ (C_{3h},D_{3h},C_6,C_{6h},C_{6v},D_6,D_{6h}),\ (T,T_h,T_d,O,O_h)。$$

这 7 大晶系可以进一步分为 14 种不同的晶格，称为 14 种 Bravais 格子。如果两种格子的 P 点群不同，就认为是两种不同的格子，尽管一种格子可能是另一种格子的特殊情况。要定义一种 Bravais 格子，也就是要定义一组基向量的配置。下面不加证明给出 14 种 Bravais 格子的基向量配置。

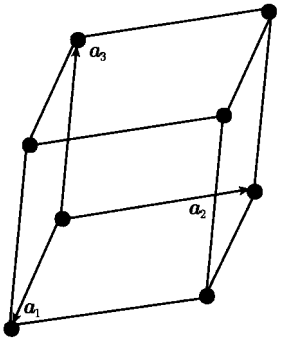


图 4.15 三斜系简单格子

1. 三斜系 $(P=C_i)$

(1) 简单三斜格子 (见图 4.15)

$$\Gamma_t:\ \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3\quad (任意非共面向量)。$$

2. 单斜系 $(P=C_{2h})$(见图 4.16)

(1) 简单单斜格子

$$\Gamma_m:\ C_2\parallel\boldsymbol{a}_3,\quad \boldsymbol{a}_3\perp\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_3\perp\boldsymbol{a}_2。$$

(2) 底心单斜格子

$$\Gamma_m^b:C_2\parallel 2\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_2,\quad 2\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_2\perp\boldsymbol{a}_1,2\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_2\perp\boldsymbol{a}_2。$$

3. 正交系 $(P=D_{2h})$(见图 4.17)

(1) 简单正交格子

$$\Gamma_o:\ \boldsymbol{a}_1\perp\boldsymbol{a}_2\perp\boldsymbol{a}_3\perp\boldsymbol{a}_1。$$

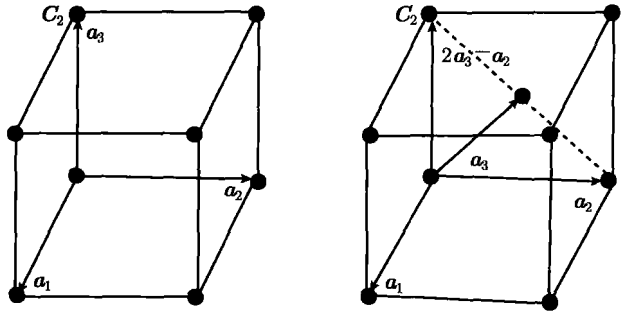


图 4.16 单斜系简单格子和底心格子

(2) 底心正交格子

$$\Gamma_o^b:\ \boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_2,\quad 2\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_1,\quad \boldsymbol{a}_2。$$

(3) 面心正交格子

$$\Gamma_o^f:\ \boldsymbol{a}_3+\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_3+\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{a}_1。$$

(4) 体心正交格子

$$\Gamma_o^v:\ \boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_2,\quad 2\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_1,\quad \boldsymbol{a}_2。$$

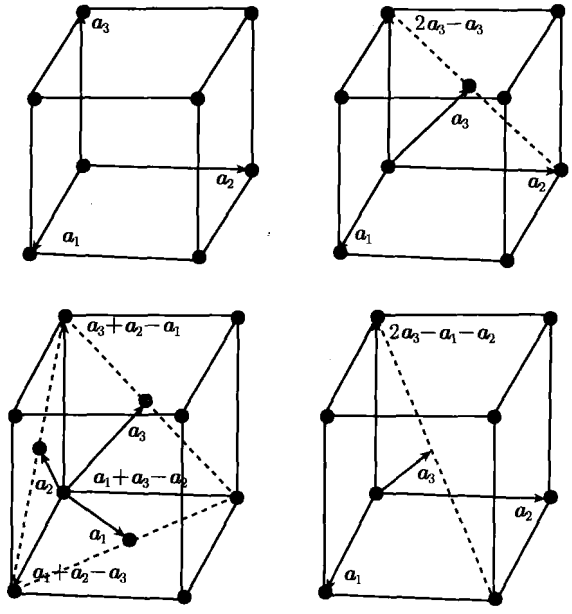


图 4.17 正交系简单格子、底心格子、面心格子与体心格子

4. 四角系 ($P=D_{4h}$)(见图 4.18)

(1) 简单四角格子

$$\Gamma_q:\ \boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_1,\quad |\boldsymbol{a}_1|=|\boldsymbol{a}_2|。$$

(2) 体心四角格子

$$\Gamma_q^v:\ \boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_2 \perp 2\boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_1,\quad |\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2|。$$

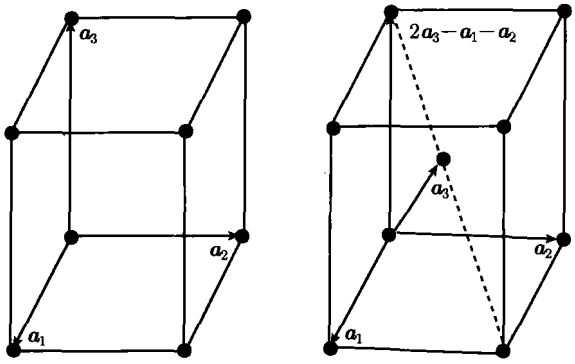


图 4.18 四角系简单格子与体心格子

5. 立方系 ($P = O_h$)(见图 4.19)

(1) 简单立方格子

$$\Gamma_c:\ \boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_1,\quad |\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2| = |\boldsymbol{a}_3|。$$

(2) 面心立方格子

$$\Gamma_c^f:\ \boldsymbol{a}_3 + \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_3 + \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_1,$$

$$|\boldsymbol{a}_3 + \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{a}_2| = |\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_3|。$$

(3) 体心立方格子

$$\Gamma_c^v:\ 2\boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2 \perp \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2,\quad |\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2| = |2\boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2|。$$

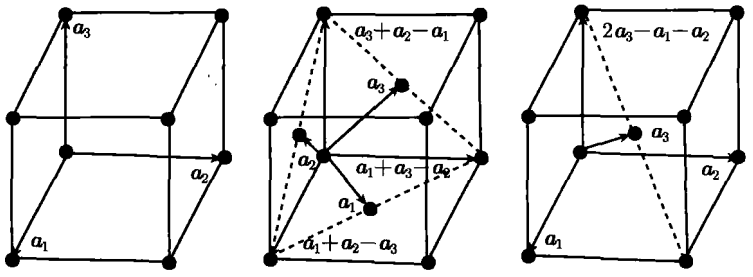


图 4.19 立方系简单格子、面心格子与体心格子

6. 三角系 ($P = D_{3d}$)

(1) 简单三角格子 (见图 4.20)

$$\Gamma_{rh}:\ |\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2| = |\boldsymbol{a}_3|,\quad \theta(\boldsymbol{a}_1\boldsymbol{a}_2) = \theta(\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{a}_3) = \theta(\boldsymbol{a}_3\boldsymbol{a}_1)。$$

(2) 简单六角格子 (见图 4.20)

$$\Gamma_h : \boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, |\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2|, \theta(\boldsymbol{a}_1\boldsymbol{a}_2) = 2\pi/3 \text{ 或 } 4\pi/3。$$

7. 六角系 ($P = D_{6h}$)

简单六角格子 (见图 4.20)

$$\Gamma_h : \boldsymbol{a}_3 \perp \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, |\boldsymbol{a}_1| = |\boldsymbol{a}_2|, \quad \theta(\boldsymbol{a}_1\boldsymbol{a}_2) = 2\pi/3 \text{ 或 } \pi/3。$$

总共得到 14 种 Bravais 格子。

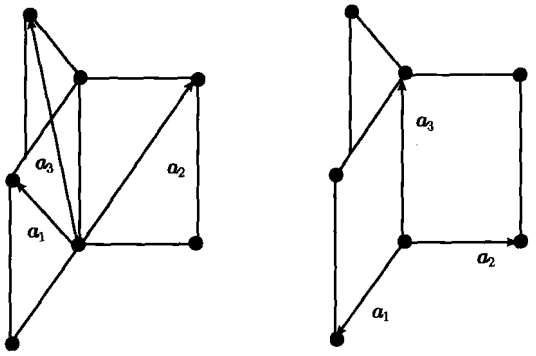


图 4.20 三角系和六角系简单格子

由于平移群 T 是空间群 G 的不变子群，所以空间群可以按平移群 T 作陪集分解，即

$$G = T \oplus \{\alpha_2|\boldsymbol{\tau}_2\}T \oplus \cdots \oplus \{\alpha_n|\boldsymbol{\tau}_n\}T = \sum_{i=1}^{n} \{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}T, \quad \alpha_i \in K,$$

其中

$$\{\alpha_1|\boldsymbol{\tau}_1\} = \{I|\boldsymbol{0}\}$$

为单位元，而 $\boldsymbol{\tau}_i$ 可以写成

$$\boldsymbol{\tau}_i = x_1\boldsymbol{a}_1 + x_2\boldsymbol{a}_2 + x_3\boldsymbol{a}_3,$$

其中 $|x_i| < 1$。这是因为若令 $\boldsymbol{\tau}_i \to \boldsymbol{\tau}_i + \boldsymbol{r}_n$，则有

$$\{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i + \boldsymbol{r}_n\}T = \{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}\{I|\alpha_i^{-1}\boldsymbol{r}_n\}T = \{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}T,$$

其中已经用到当 $\boldsymbol{r}_n \in T$ 时有 $\alpha^{-1}\boldsymbol{r}_n \in T$。因此

$$\{I|\alpha_i^{-1}\boldsymbol{r}_n\}T = T。$$

进一步可以证明，每个 α_i 将对应唯一的分数平移 $\boldsymbol{\tau}_i$。因为若

$$\{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}T = \{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i'\}T,$$

则有

$$\{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i\}\{I|\boldsymbol{r}_n\} = \{\alpha_i|\boldsymbol{\tau}_i'\}\{I|\boldsymbol{r}_n'\},$$

即

$$\boldsymbol{\tau}_i + \alpha_i\boldsymbol{r}_n = \boldsymbol{\tau}_i' + \alpha_i\boldsymbol{r}'_n。$$

由此推得

$$\boldsymbol{\tau}_i - \boldsymbol{\tau}_i' = \alpha_i(\boldsymbol{r}_n' - \boldsymbol{r}_n) \in T。$$

由于 $\boldsymbol{\tau}_i, \boldsymbol{\tau}_i'$ 是非整数向量，如果

$$\boldsymbol{\tau}_i - \boldsymbol{\tau}_i' \in T,$$

则唯一可能是

$$\boldsymbol{\tau}_i - \boldsymbol{\tau}_i' = 0,$$

或

$$\boldsymbol{\tau}_i = \boldsymbol{\tau}_i'。$$

下面来看非整数平移向量 $\boldsymbol{\tau}$ 的可能形式。考虑群元 $\{c_n^1|\boldsymbol{\tau}\}$，令

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_{/\!/} + \boldsymbol{\tau}_\perp,$$

其中 $\boldsymbol{\tau}_{/\!/}$ 与 C_n 轴平行，故有

$$\begin{aligned}\{c_n^1|\boldsymbol{\tau}\}^n &= \{c_n^1|\boldsymbol{\tau}_{/\!/} + \boldsymbol{\tau}_\perp\}\{c_n^1|\boldsymbol{\tau}_{/\!/} + \boldsymbol{\tau}_\perp\}\cdots\{c_n^1|\boldsymbol{\tau}_{/\!/} + \boldsymbol{\tau}_\perp\} \\ &= \{c_n^n|\, n\boldsymbol{\tau}_{/\!/} + (c_n^1 + c_n^2 + \cdots + c_n^{n-1} + \boldsymbol{I})\boldsymbol{\tau}_\perp\} \\ &= \{I|\, n\boldsymbol{\tau}_{/\!/}\} \in G,\end{aligned}$$

即

$$n\boldsymbol{\tau}_{/\!/} \in T,$$

为平移群的元。所以有

$$n\boldsymbol{\tau}_{/\!/} = m\boldsymbol{R}_n,$$

或

$$\boldsymbol{\tau}_{/\!/} = \frac{m}{n}\boldsymbol{R}_n, \quad m = 0, 1, 2, \cdots, n-1,$$

其中 $\boldsymbol{R}_n$ 为沿 C_n 方向的最短向量，m 是整数。

对于群元 $\{\sigma|\boldsymbol{\tau}\}$，令 $\boldsymbol{\tau}_{/\!/} \parallel \sigma$，$\boldsymbol{\tau}_\perp \perp \sigma$，由

$$\begin{aligned}\{\sigma|\boldsymbol{\tau}_{/\!/} + \boldsymbol{\tau}_\perp\}^2 &= \{I|\sigma(\boldsymbol{\tau}_{/\!/} + \boldsymbol{\tau}_\perp) + \boldsymbol{\tau}_{/\!/} + \boldsymbol{\tau}_\perp\} \\ &= \{I|\boldsymbol{\tau}_{/\!/} - \boldsymbol{\tau}_\perp + \boldsymbol{\tau}_{/\!/} + \boldsymbol{\tau}_\perp\} \\ &= \{I|2\boldsymbol{\tau}_{/\!/}\} \in G,\end{aligned}$$

可得

$$2\boldsymbol{\tau}_{/\!/} \in T,$$

即

$$\boldsymbol{\tau}_{/\!/} = 0 \text{ 或 } \frac{1}{2}\boldsymbol{R}_n。$$

空间群可以用 Schönfliess 符号或国际符号表示，比如 C_2^1, C_2^2 等。

$$C_2^1 = T \oplus \{c_2|\boldsymbol{0}\}T, \quad C_2^2 = T \oplus \{c_2|\boldsymbol{\tau}\}T = T \oplus \left\{c_2\middle|00\frac{1}{2}\right\}T,$$

其中已经取了 $\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{a}_3/2$，$\boldsymbol{a}_3$ 取 C_2 轴方向。$\boldsymbol{\tau}=0$ 的空间群，如上面的 C_2^1 等称为简单空间群。共有 73 种简单空间群。

总共有 230 种空间群。但在二维空间只有 17 种空间群，四维空间则有高达 4783 种空间群。五维以上空间的空间群数目虽然没有明确的结论，但 Bieberbach 在 1910 年证明，任意维空间的空间群数目都是有限的。下面给出几个推演空间群的简单例子。

C_1 晶类。没有任何点对称操作，因此实际上只有平移群，记为 $C_1^1=T$。

C_i 晶类。对应的空间群可以写成

$$C_i^1=T\oplus\{i|\boldsymbol{\tau}\}T。$$

由于

$$\{i|\boldsymbol{\tau}\}^2=\{I|-\boldsymbol{\tau}+\boldsymbol{\tau}\}=\{I|\boldsymbol{0}\},$$

可以选择适当的坐标使得 $\boldsymbol{\tau}=0$。所以 C_i 晶类只有一种空间群：

$$C_i^1=T\oplus\{i|\boldsymbol{0}\}T。$$

C_s 晶类。C_s 晶类有两种格子。对 Γ_m，可以取 $\boldsymbol{a}_3\perp\sigma_h$ 且 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2$ 位于 σ_h 平面内。则由

$$\boldsymbol{\tau}_{/\!/}=0\quad\text{或}\quad\boldsymbol{\tau}=\frac{1}{2}\boldsymbol{R}_n,$$

可得空间群

$$C_s^1=T\oplus\{\sigma_h|000\}T,$$

$$C_s^2=T\oplus\left\{\sigma_h\middle|\frac{1}{2}00\right\}T。$$

对 Γ_m^b 格子，有类似的两种空间群

$$C_s^3=T\oplus\{\sigma_h|000\}T,$$

$$C_s^4=T\oplus\left\{\sigma_h\middle|\frac{1}{2}00\right\}T。$$

C_2 晶类。对 Γ_m 格子，可令 $\boldsymbol{a}_3$ 沿 C_2 方向，则得到以下两种空间群

$$C_2^1=T\oplus\{c_2|000\}T,$$

$$C_2^2=T\oplus\{c_2|\boldsymbol{\tau}\}T=T\oplus\left\{c_2\middle|00\frac{1}{2}\right\}T。$$

而 Γ_m^b 格子只有一种空间群

$$C_2^3=T\oplus\{c_2|000\}T。$$

类似前面的讨论似乎可以得到另一个空间群

$$\begin{aligned}T\oplus\left\{c_2\middle|\frac{1}{2}(2\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{a}_2)\right\}T&=T\oplus\left\{c_2\middle|-\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2\right\}T\\&=T\oplus\left\{c_2\middle|\frac{1}{2}\boldsymbol{a}_2\right\}T=T\oplus\left\{c_2\middle|0\frac{1}{2}0\right\}T。\end{aligned}$$

但实际上它和空间群

$$C_2^3 = T \oplus \{c_2|000\}T。$$

是同构的。因为如果取 $g = \left\{c_2\middle|0\frac{1}{4}0\right\}$，则有

$$g^{-1}Tg = T, \quad g^{-1}\left\{c_2\middle|0\frac{1}{2}0\right\}g = \{c_2|000\}。$$

C_{2h} 晶类。对 Γ_m 格子，类似对 C_2 晶类的讨论，有代表元

$$\{c_2|000\}, \left\{c_2\middle|00\frac{1}{2}\right\}。$$

按照对 C_s 晶类的类似讨论，将得到代表元

$$\{\sigma_h|000\}, \left\{\sigma_h\middle|\frac{1}{2}00\right\}。$$

组合后得到如下的空间群：

$$C_{2h}^1 = T \oplus \{c_2|000\}T \oplus \{\sigma_h|000\}T \oplus \{i|000\}T,$$

$$C_{2h}^2 = T \oplus \left\{c_2\middle|00\frac{1}{2}\right\}T \oplus \{\sigma_h|000\}T \oplus \left\{i\middle|00\frac{1}{2}\right\}T,$$

$$C_{2h}^4 = T \oplus \{c_2|000\}T \oplus \left\{\sigma_h\middle|\frac{1}{2}00\right\}T \oplus \left\{i\middle|\frac{1}{2}00\right\}T,$$

$$C_{2h}^5 = T \oplus \left\{c_2\middle|00\frac{1}{2}\right\}T \oplus \left\{\sigma_h\middle|\frac{1}{2}00\right\}T \oplus \left\{i\middle|\frac{1}{2}0\frac{1}{2}\right\}T。$$

而对 Γ_m^b 格子，则对应 σ_h 有两种情况，对 C_2 有一种情况。因此得到

$$C_{2h}^3 = T \oplus \{c_2|000\}T \oplus \{\sigma_h|000\}T \oplus \{i|000\}T,$$

$$C_{2h}^6 = T \oplus \{c_2|000\}T \oplus \left\{\sigma_h\middle|\frac{1}{2}00\right\}T \oplus \left\{i\middle|\frac{1}{2}00\right\}T。$$

按照同样的方法，可以推演出所有的空间群。最后总共可以得到包括 73 种简单空间群在内的 230 种空间群。下表给出每个晶系对应的 Bravais 格子数和相应的空间群个数。

晶系	点群个数	Bravais 格子数	空间群个数
三斜系	2	1	2
单斜系	3	2	13
正交系	3	4	59
四角系	7	2	68
三角系	5	1	25
六角系	7	1	27
立方系	5	3	36
总计	32	14	230

这 230 个空间群描述了所有可能的晶体结构的对称，如氯化钠结构的空间群为 O_h^5，金刚石结构的空间群为 O_h^7，闪锌矿结构的空间群为 T_d^2，六角密积结构的空间群为 D_{6h}^4

等。如果晶体仅由单一原子构成，并且每个原子的平衡位置都在 Bravais 格子的格点上，或者虽然是由两种原子构成，但每种原子各自构成一个 Bravais 格子，则对应的空间群就是简单空间群。如果每个格点上的原子不止一个，则对应的空间群就是非简单空间群。详情可参阅固体物理的有关著作。

4.6 平移群的不可约表示

本节先来讨论平移群的不可约表示。平移群 T 是空间群的不变子群，是一个无限群。平移群 T 的任意群元可以写成

$$T=\{I|\boldsymbol{r}_n\},\quad \boldsymbol{r}_n=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3,\quad n_i=0,\pm1,\pm2,\cdots。$$

因为 T 是 Abel 群，故可以将其写成

$$T=\{I|\boldsymbol{r}_n\}=\{I|\boldsymbol{a}_1\}^{n_1}\{I|\boldsymbol{a}_2\}^{n_2}\{I|\boldsymbol{a}_3\}^{n_3}。$$

实际的晶体总是有限的，而有限大小的物体是不具有空间平移对称性的。但是当我们讨论大块晶体的内部性质时，边界效应往往可以忽略，因而对有限大小的晶体内部性质的讨论可以等同于对一个无限大晶体的讨论。由于无限大晶体对应的对称群是无限群，讨论不是很方便。通过选择所谓的 Born 周期性边界条件，就可以把无限群变成阶数很大的有限群。

如果选取周期性边界条件，即令

$$\{I|\boldsymbol{a}_1\}^{N_1}=\{I|\boldsymbol{0}\},\ \{I|\boldsymbol{a}_2\}^{N_2}=\{I|\boldsymbol{0}\},\ \{I|\boldsymbol{a}_3\}^{N_3}=\{I|\boldsymbol{0}\},$$

其中 N_1,N_2,N_3 是很大的正数，为晶格沿 3 个基向量 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$ 方向的格点数。这样平移群 T 就变成阶为 $N=N_1N_2N_3$ 的有限群了，可以写成 3 个阶数分别为 N_1,N_2,N_3 的有限循环群的直积，即

$$T=T_1\otimes T_2\otimes T_3,$$

其中

$$T_1=\{\{I|\boldsymbol{a}_1\},\{I|\boldsymbol{a}_1\}^2,\cdots,\{I|\boldsymbol{a}_1\}^{N_1-1},\ \{I|\boldsymbol{a}_1\}^{N_1}=\{I|\boldsymbol{0}\}\},$$

$$T_2=\{\{I|\boldsymbol{a}_2\},\{I|\boldsymbol{a}_2\}^2,\cdots,\{I|\boldsymbol{a}_2\}^{N_2-1},\ \{I|\boldsymbol{a}_2\}^{N_2}=\{I|\boldsymbol{0}\}\},$$

$$T_3=\{\{I|\boldsymbol{a}_3\},\{I|\boldsymbol{a}_3\}^2,\cdots,\{I|\boldsymbol{a}_3\}^{N_3-1},\ \{I|\boldsymbol{a}_3\}^{N_3}=\{I|\boldsymbol{0}\}\}。$$

由于现在 T_1,T_2,T_3 都是有限的 Abel 循环群，故相应的不可约表示都是一维的，可以很容易作出。

如果 $\boldsymbol{D}^{(p_i)}$ 是 T_i 的第 p 个不可约表示，则有

$$\boldsymbol{D}^{(p_i)}(\{I|\boldsymbol{a}_i\})=\lambda_{p_i},\quad i=1,2,3。$$

由

$$\boldsymbol{D}^{(p_i)}(\{I|\boldsymbol{0}\})=\boldsymbol{D}^{(p_i)}(\{I|\boldsymbol{a}_i\}^{N_i})=[\boldsymbol{D}^{(p_i)}(\{I|\boldsymbol{a}_i\})]^{N_i}=\lambda_{p_i}^{N_i}=1,$$

可得

$$\lambda_{p_i}=\exp\left(-\mathrm{i}\frac{2\pi p_i}{N_i}\right),\quad p_i=0,1,\cdots,N_i-1,\quad i=1,2,3。$$

定义倒格子空间的基向量 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{b}_3$ 为

$$\boldsymbol{b}_1=\frac{2\pi(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)},\ \boldsymbol{b}_2=\frac{2\pi(\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1)}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)},\ \boldsymbol{b}_3=\frac{2\pi(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2)}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)},$$

容易证明

$$\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{b}_j=2\pi\delta_{ij},\quad i,j=1,2,3。$$

定义倒格子空间的向量

$$\boldsymbol{k}=k_1\boldsymbol{b}_1+k_2\boldsymbol{b}_2+k_3\boldsymbol{b}_3,$$

其中 $0\leqslant k_i=p_i/N_i<1$，则有

$$\boldsymbol{D}^{(p_i)}(\{I|\boldsymbol{a}_i\})=\exp(-2\pi\,\mathrm{i}\,k_i)=\exp(-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_i)。$$

因此平移群 T 的不可约表示可以用 $\boldsymbol{k}$ 来标记为

$$\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}(\{I|\boldsymbol{r}_n\})=\exp(-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_n)。$$

显然这是幺正表示，不同的 $\boldsymbol{k}$ 值将给出不同的不可约表示。一共将得到 $N=N_1N_2N_3$ 个不等价的不可约表示，每个不可约表示就对应一个 $\boldsymbol{k}$ 值。我们有不可约表示的正交关系

$$\sum_{\boldsymbol{r}_n}\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})*}(\{I|\boldsymbol{r}_n\})\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k}')}(\{I|\boldsymbol{r}_n\})=\prod_{i=1}^{3}\sum_{n_i=1}^{N_i}\exp[2\pi\,\mathrm{i}\,n_i(k_i-k_i')]=N_1N_2N_3\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}=N\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'},$$

以及完备性关系

$$\sum_{\boldsymbol{k}}\left|\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}(\{I|\boldsymbol{r}_n\})\right|^2=N_1N_2N_3=N,$$

求和对所有允许的 $\boldsymbol{k}$ 值进行。由基向量 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{b}_3$ 张成的空间称为 $\boldsymbol{k}$ 空间，允许的 $\boldsymbol{k}$ 向量位于由 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{b}_3$ 张成的平行六面体内部和 3 个表面上 (除了 $k_1=k_2=k_3=1$ 的面之外)。

定义倒格子向量

$$\boldsymbol{K}_m=m_1\boldsymbol{b}_1+m_2\boldsymbol{b}_2+m_3\boldsymbol{b}_3,$$

其中 m_1,m_2,m_3 为整数。这个向量具有性质

$$\exp(\mathrm{i}\,\boldsymbol{K}_m\cdot\boldsymbol{r}_n)=\exp(\mathrm{i}\,n_im_j\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{b}_j)=\exp(2\pi\,\mathrm{i}\,n_im_i)=1。$$

因此，如果 $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m$，则 $\boldsymbol{k}'$ 和 $\boldsymbol{k}$ 将对应同一个不可约表示。$\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}$ 称为是等价的。

由 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{b}_3$ 张成的平行六面体称为 $\boldsymbol{k}$ 空间的原胞。更方便的做法是取对称化的原胞，即所谓的 Brillouin 区或者第一 Brillouin 区。

Brillouin 区可以按如下方式定义，在 $\boldsymbol{k}$ 空间中作从 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ 到最近邻和次近邻倒格点 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{K}_m$ 连线的垂直平分面，由这些边界面包围起来的封闭区域即为第一 Brillouin 区。这些边界面满足方程

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{K}_m=\frac{1}{2}|\boldsymbol{K}_m|^2。$$

如对于二维简单矩形格子，图 4.21 分别给出了原胞和相应的 Brillouin 区，其中以 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2$ 为边长的矩形即为二维 $\boldsymbol{k}$ 空间的原胞，而 Brillouin 区则是从 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ 到最近邻倒格点 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,-\boldsymbol{b}_1,-\boldsymbol{b}_2$ 连线的垂直平分线所围成的对称化的区域。显然，原胞中的点和 Brillouin 区中的对应点相差一个倒格子向量 $\boldsymbol{K}_m$，因而是等价的。

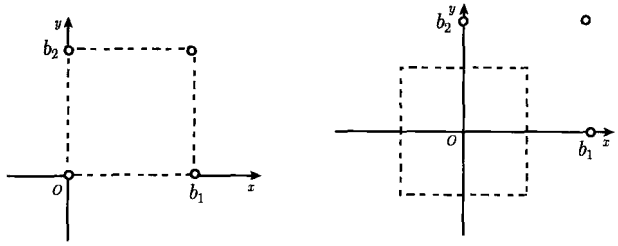


图 4.21 二维简单矩形格子的原胞和 Brillouin 区

下面给出了几种简单情况的 Brillouin 区，如简单立方格子 Γ_c，面心立方格子 Γ_c^f 和简单六角格子 Γ_h，如图 4.22～ 图 4.24 所示。

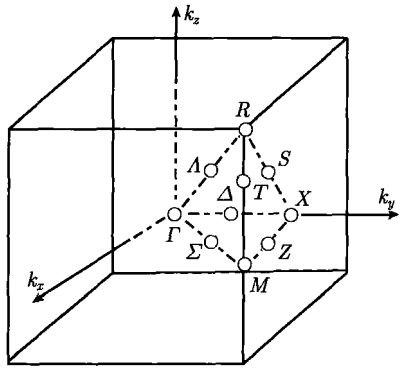


图 4.22 简单立方格子 Γ_c 的 Brillouin 区

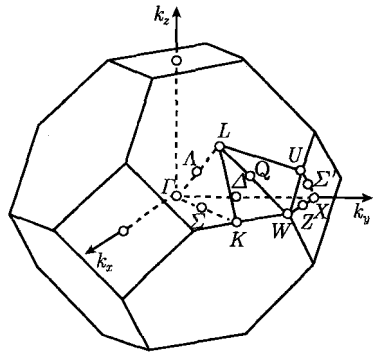


图 4.23 面心立方格子 Γ_c^f 的 Brillouin 区

对一些格子，如体心立方格子，在构造 Brillouin 区时只需要考虑最近邻的倒格点，但对于有些格子如面心立方格子，不仅要考虑最近邻倒格点，还要考虑次近邻倒格点才能构造出 Brillouin 区。

Brillouin 区内部及一半的边界面上的任意一点就代表了一个允许的 $\boldsymbol{k}$ 值，也就对应了一个平移群的不可约表示。

Brillouin 区内有一些特殊的点如 Γ,X,L,W,K,U 等，称为对称点。还有一些特殊的线和面，称为对称线和对称面。这些对称点、对称线和对称面在点群的作用下具有不同的对称性。如对于简单立方格子 Γ_c，有

$$\boldsymbol{b}_1=\frac{2\pi}{a}(1,0,0),\quad \boldsymbol{b}_2=\frac{2\pi}{a}(0,1,0),\quad \boldsymbol{b}_3=\frac{2\pi}{a}(0,0,1),$$

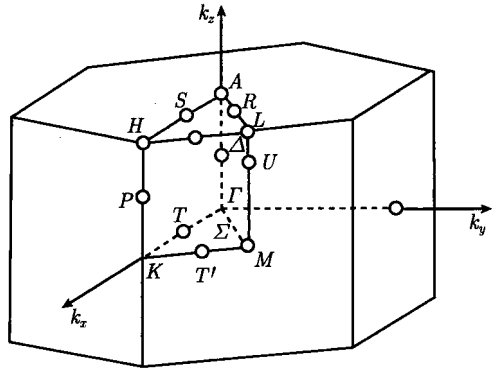


图 4.24 简单六角格子 Γ_h 的 Brillouin 区

对称点的位置是

$$\Gamma : \boldsymbol{k} = (0,0,0), \quad X : \boldsymbol{k} = \frac{\pi}{a}(0,1,0), \quad M : \boldsymbol{k} = \frac{\pi}{a}(1,1,0), \quad R : \boldsymbol{k} = \frac{\pi}{a}(1,1,1)。$$

关于 Brillouin 区的更多讨论可以参阅有关专著。

假定 $\phi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r})$ 是表示 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}$ 的基函数，则有

$$\Gamma_{\{I|\boldsymbol{r}_n\}}\phi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}(\{I|\boldsymbol{r}_n\})\phi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = \exp(-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_n)\phi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r})。$$

但算符对标量函数的作用给出了

$$\Gamma_{\{I|\boldsymbol{r}_n\}}\phi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = \phi^{(\boldsymbol{k})}(\{I|\boldsymbol{r}_n\}^{-1}\boldsymbol{r}) = \phi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_n)。$$

两式比较，即可得到

$$\phi^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{r}) = \phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \exp(\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \quad u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}_n) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}),$$

其中 $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ 是以晶格长度为周期的周期函数，这个函数称为 Bloch 波函数。

在晶格中运动的电子，其 Hamilton 量具有平移对称性，因此相应的波函数可以作为负载平移群 T 的不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}$ 的基，即一定具有 Bloch 波函数的形式。这称为 Bloch 定理。如果相应的能量本征值记为 $\varepsilon(\boldsymbol{k})$，则有

$$H(\boldsymbol{r})\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon(\boldsymbol{k})\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})。$$

由此出发，可以得到电子的能带结构，此处不再赘述。

4.7 空间群的不可约表示

我们利用诱导表示的方法来构造空间群的不可约表示。

对空间群 G 的一个任意群元 $\{\alpha|\boldsymbol{r}\}$，如果

$$\alpha\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{K}_m,$$

其中 $\boldsymbol{K}_m$ 是倒格子空间的倒格点向量，则称 $\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}$ 是等价的。容易证明，集合

$$G_{\boldsymbol{k}} = \{\{\alpha|\boldsymbol{r}\}|\alpha\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{K}_m\}$$

构成群，称为波矢 $\boldsymbol{k}$ 的对称群或波矢群，也称之为小群。这是空间群 G 的子群。易见平移群 T 也是波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的不变子群。而相应的点操作集合

$$G_{\boldsymbol{k}}^{(0)} = \{\alpha | \alpha \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{K}_m\}$$

则是空间群的点群 K 的子群，也是 32 个晶格点群之一。因此点群 K 可以按子群 $G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$ 作陪集分解得到

$$K = G_{\boldsymbol{k}}^{(0)} \oplus \alpha_2 G_{\boldsymbol{k}}^{(0)} \oplus \cdots = \sum_{i=1}^{M(\boldsymbol{k})} \alpha_i G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}, \tag{4.4}$$

其中 $\alpha_1 = I$, $M(\boldsymbol{k}) = |K|/|G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}|$。将 $M(\boldsymbol{k})$ 个波矢的集合

$$\boldsymbol{k}_i = \alpha_i \boldsymbol{k}, \quad i = 1, 2, \cdots, M(\boldsymbol{k})$$

称为 $\boldsymbol{k}$ 的波矢星，记为 $\{\boldsymbol{k}^*\}$。以上已经取了

$$\alpha_1 = I, \quad \boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k}。$$

显然这些波矢彼此都是不等价的，并且两个波矢星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 和 $\{\boldsymbol{k}'^*\}$ 要么完全重合，要么完全不同。因此有

$$\sum_{\{\boldsymbol{k}^*\}} M(\boldsymbol{k}) = N。 \tag{4.5}$$

上述求和表示对不同的波矢星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 进行，因为每个波矢星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 包含了 $M(\boldsymbol{k})$ 个不等价的 $\boldsymbol{k}$，即对应了平移群 T 的 $M(\boldsymbol{k})$ 个不等价的不可约表示，故上式的和正好是平移群 T 的不可约表示的总数，即为 N。

对于简单空间群而言，因为所有的非整数平移 $\boldsymbol{\tau}$ 都为零，故空间群的点群 K 是空间群 G 的子群。此时空间群 G 按波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的陪集分解有类似方程 (4.4) 的形式，即

$$G = G_{\boldsymbol{k}} \oplus \{\alpha_2 | \boldsymbol{0}\} G_{\boldsymbol{k}} \oplus \cdots = \sum_{i=1}^{M(\boldsymbol{k})} \{\alpha_i | \boldsymbol{0}\} G_{\boldsymbol{k}}, \tag{4.6}$$

其中 $\alpha_1 = I$, $M(\boldsymbol{k}) = |G|/|G_{\boldsymbol{k}}| = |K|/|G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}|$。如果将空间群 G 按平移群 T 作陪集展开，即

$$G = \sum_{\mu=1}^{|K|} \{\alpha_\mu | \boldsymbol{0}\} T,$$

则易见商群 G/T 与空间群点群 K 同构，且有 $|K| = |G|/N$。

由 $G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$ 的 d_p 维不可约幺正表示 $\boldsymbol{D}_{G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}}^{(p)}$ 即可诱导出空间群 G 的维数为 $d_p M(\boldsymbol{k})$ 维的不可约幺正表示，记为 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k}p)}$，其形式可写为

$$\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k}p)}(\{\alpha | \boldsymbol{r}_n\})_{\gamma r,\, \beta s} = \begin{cases} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha_\gamma \boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{r}_n} \left(D_{G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}}^{(p)} (\alpha_\gamma^{-1} \alpha \alpha_\beta) \right)_{rs}, & \text{若 } \alpha_\gamma^{-1} \alpha \alpha_\beta \in G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}, \\ 0, & \text{其他。} \end{cases} \tag{4.7}$$

其中

$$\gamma,\beta=1,2,\cdots,M(\boldsymbol{k}),\quad r,s=1,2,\cdots,d_p。$$

相应的特征标为

$$\begin{aligned}\chi^{(\boldsymbol{k}p)}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n\})&=\sum_{\beta,s}D^{(\boldsymbol{k}p)}_{\beta s,\,\beta s}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n\})\\&=\sum_{\beta,s}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha_\beta\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_n}\left(D^{(p)}_{G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\beta^{-1}\alpha\alpha_\beta)\right)_{ss}=\sum_{\beta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha_\beta\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_n}\chi^{(p)}_{G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\beta^{-1}\alpha\alpha_\beta),\end{aligned}$$

其中 $\chi^{(p)}_{G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}$ 为 $G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$ 的第 p 个不可约表示的特征标，求和对满足条件 $\alpha_\beta^{-1}\alpha\alpha_\beta\in G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$ 的群元进行。以上用到了性质

$$\{\alpha|\boldsymbol{r}_n\}=\{\alpha|\boldsymbol{0}\}\{I|\alpha^{-1}\boldsymbol{r}_n\},$$

以及

$$\boldsymbol{k}\cdot(\alpha^{-1}\boldsymbol{r}_n)=k_i\alpha^{-1}_{ij}(\boldsymbol{r}_n)_j=k_i\alpha^{\mathrm{T}}_{ij}(\boldsymbol{r}_n)_j=k_i\alpha_{ji}(\boldsymbol{r}_n)_j=(\alpha\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_n,$$

其中 $\alpha_{ij},\alpha^{-1}_{ij}$ 和 α^{T}_{ij} 分别是 α 对应的矩阵、逆矩阵和转置矩阵中的第 i,j 位置的元素。这是由于转动操作对应的矩阵是正交矩阵，故满足

$$\alpha^{-1}=\alpha^{\mathrm{T}}。$$

可以证明，取遍 $G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$ 的所有不可约表示和所有允许的波矢星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$，就可以得到简单空间群 G 的所有不等价不可约幺正表示。我们来计算特征标的绝对值平方和

$$\sum_{\alpha,\boldsymbol{r}_n}\chi^{(\boldsymbol{k}p)*}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n\})\chi^{(\boldsymbol{k}p)}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n\})=\sum_{\alpha,\boldsymbol{r}_n}\sum_{\beta,\gamma}\chi^{(p)*}_{G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\beta^{-1}\alpha\alpha_\beta)\chi^{(p)}_{G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\gamma^{-1}\alpha\alpha_\gamma)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha_\beta\boldsymbol{k}-\alpha_\gamma\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_n}。\tag{4.8}$$

当 $\alpha_\beta^{-1}\alpha\alpha_\beta,\ \alpha_\gamma^{-1}\alpha\alpha_\gamma\in G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$ 时，我们有

$$\sum_{\boldsymbol{r}_n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha_\beta\boldsymbol{k}-\alpha_\gamma\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_n}=N\delta_{\beta\gamma}。$$

陪集代表元 α_β 一共有 $M(\boldsymbol{k})$ 个，即

$$\sum_{\beta}\chi^{(p)}_{G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\beta^{-1}\alpha\alpha_\beta)=M(\boldsymbol{k})\,\chi^{(p)}_{G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\beta^{-1}\alpha\alpha_\beta)。$$

于是方程 (4.8) 变成

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha,\boldsymbol{r}_n}\chi^{(\boldsymbol{k}p)*}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n\})\chi^{(\boldsymbol{k}p)}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n\})&=N\sum_{\alpha,\beta}|\chi^{(p)}_{G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\beta^{-1}\alpha\alpha_\beta)|^2\\&=NM(\boldsymbol{k})\sum_{\alpha}|\chi^{(p)}_{G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\beta^{-1}\alpha\alpha_\beta)|^2\\&=NM(\boldsymbol{k})\left|G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}\right|=M(\boldsymbol{k})|G_{\boldsymbol{k}}|=|G|。\end{aligned}$$

因此，由此得到的 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k}p)}$ 的确是空间群 G 的不可约表示。进一步有

$$\sum_{\{\boldsymbol{k}^*\},p}d_p^2M^2(\boldsymbol{k})=\sum_{\{\boldsymbol{k}^*\}}M^2(\boldsymbol{k})\left|G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}\right|=\sum_{\{\boldsymbol{k}^*\}}M(\boldsymbol{k})|K|=N|K|=|G|,$$

即 $\boldsymbol{D}^{(kp)}$ 是空间群 G 的所有不可约表示。以上最后一步利用了方程 (4.5)。由于 $G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$ 是点群，容易得到其所有的不可约幺正表示，因此也就可以得到简单空间群的所有不可约幺正表示。

对于非简单空间群，情况将比较复杂。由于波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 包含所有的平移操作，因此有子群链

$$T \subset G_{\boldsymbol{k}} \subset G。$$

首先从平移群 T 的不可约表示诱导出波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的表示。将波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 按平移群 T 作陪集分解得

$$G_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\lambda=1}^{|G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}|} \{\alpha_\lambda|\boldsymbol{\tau}_\lambda\}T, \tag{4.9}$$

则由定义，可以从平移群 T 的不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}(\{I|\boldsymbol{r}_n\})$ 诱导出波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的表示

$$D_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha|\boldsymbol{r}\})_{\lambda\lambda'} = \sum_{\boldsymbol{r}_{n'}\in T} \exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_{n'})\,\delta(\boldsymbol{r}_{n'}, \{\alpha_\lambda|\boldsymbol{\tau}_\lambda\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{r}\}\{\alpha_{\lambda'}|\boldsymbol{\tau}_{\lambda'}\})。$$

上述求和对满足条件 $\boldsymbol{r}_{n'} = \{\alpha_\lambda|\boldsymbol{\tau}_\lambda\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{r}\}\{\alpha_{\lambda'}|\boldsymbol{\tau}_{\lambda'}\}$ 的格点向量 $\boldsymbol{r}_{n'}$ 进行。如果将其应用于平移群，即当 $\{\alpha|\boldsymbol{r}\} = \{I|\boldsymbol{r}_n\}$ 时，考虑到群元

$$\{\alpha_\lambda|\boldsymbol{\tau}_\lambda\}^{-1}\{I|\boldsymbol{r}_n\}\{\alpha_{\lambda'}|\boldsymbol{\tau}_{\lambda'}\} = \{\alpha_\lambda^{-1}|-\alpha_\lambda^{-1}\boldsymbol{\tau}_\lambda\}\{\alpha_{\lambda'}|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_{\lambda'}\} = \{\alpha_\lambda^{-1}\alpha_{\lambda'}|\alpha_\lambda^{-1}(\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_{\lambda'}-\boldsymbol{\tau}_\lambda)\},$$

属于平移群的条件为 $\lambda = \lambda'$，此时有

$$\{\alpha_\lambda|\boldsymbol{\tau}_\lambda\}^{-1}\{I|\boldsymbol{r}_n\}\{\alpha_\lambda|\boldsymbol{\tau}_\lambda\} = \{I|\alpha_\lambda^{-1}\boldsymbol{r}_n\}。$$

而

$$\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\alpha_\lambda^{-1}\boldsymbol{r}_n) = \exp(-\mathrm{i}\,\alpha_\lambda\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_n)。$$

由波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的定义，当 $\alpha_\lambda \in G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$ 时，有 $\alpha_\lambda\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{K}_m$，因此有

$$\exp(-\mathrm{i}\,\alpha_\lambda\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_n) = \exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_n)。$$

综合上述结果，我们得到

$$\boldsymbol{D}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{I|\boldsymbol{r}_n\})_{\lambda\lambda'} = \exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_n)\delta_{\lambda\lambda'}。$$

写成矩阵形式，即

$$\boldsymbol{D}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{I|\boldsymbol{r}_n\}) = \exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_n)I_{\boldsymbol{k}} = f_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}(\{I|\boldsymbol{r}_n\}),$$

其中 $I_{\boldsymbol{k}}$ 是维数为 $\left|G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}\right|$ 的单位矩阵，最后一步表示直和，其中 $f_{\boldsymbol{k}} = |G_{\boldsymbol{k}}|/N = \left|G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}\right|$。诱导表示 $D_{G_{\boldsymbol{k}}}$ 一般是可约表示，可以约化为不可约表示的直和

$$\boldsymbol{D}_{G_{\boldsymbol{k}}} = \sum_p a_{\boldsymbol{k}}^{(p)}\boldsymbol{D}_{G_{\boldsymbol{k}}}^{(p)}, \tag{4.10}$$

其中 $\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}$ 是波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的不可约表示，维数为 d_p，称为 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的小表示。类似地有

$$\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{I|\boldsymbol{r}_n\}) = f^{(p)}_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}(\{I|\boldsymbol{r}_n\}),$$

其中 $f^{(p)}_{\boldsymbol{k}} = d_p$。根据 Frobenius 倒易定理，有

$$a^{(p)}_{\boldsymbol{k}} = f^{(p)}_{\boldsymbol{k}}。$$

波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的所有小表示的维数平方和为

$$\sum_p d_p^2 = \sum_p (f^{(p)}_{\boldsymbol{k}})^2。$$

比较方程 (4.10) 两边的维数，即得

$$\sum_p a^{(p)}_{\boldsymbol{k}} d_p = \sum_p (f^{(p)}_{\boldsymbol{k}})^2 = |G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}|。$$

由波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的小表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}$ 出发，即可诱导出空间群 G 的所有不可约表示。

一般来说，从诱导表示 $\boldsymbol{D}_{G_{\boldsymbol{k}}}$ 得到小表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}$ 并不是一件容易的事。由于平移群的不可约表示是一维表示，利用投影表示的方法，就可以得到波矢群的小表示。由陪集分解 (4.9) 看到，两个陪集代表元的乘积可以写成

$$\{\alpha_1|\boldsymbol{\tau}_1\}\{\alpha_2|\boldsymbol{\tau}_2\} = \{I|\boldsymbol{r}_{12}\}\{\alpha_3|\boldsymbol{\tau}_3\}, \tag{4.11}$$

其中 $\alpha_3 = \alpha_1\alpha_2$，而 $\boldsymbol{r}_{12} \in T$ 是格点向量，定义为

$$\boldsymbol{r}_{12} = \alpha_1\boldsymbol{\tau}_2 + \boldsymbol{\tau}_1 - \boldsymbol{\tau}_3。$$

将小表示用于方程 (4.11) 两边，注意到 $\boldsymbol{r}_{12}$ 是平移群的群元，可得

$$\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_1|\boldsymbol{\tau}_1\})\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_2|\boldsymbol{\tau}_2\}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_{12}}\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_3|\boldsymbol{\tau}_3\})。 \tag{4.12}$$

注意到商群 $G_{\boldsymbol{k}}/T$ 和波矢群的点操作构成的群 $G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$ 同构，$G_{\boldsymbol{k}}/T \cong G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$，可以令

$$\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_\lambda|\boldsymbol{\tau}_\lambda\}) \equiv \check{\boldsymbol{D}}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\lambda), \quad \forall\alpha_\lambda \in G^{(0)}_{\boldsymbol{k}},$$

则方程 (4.12) 变成

$$\check{\boldsymbol{D}}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_1)\check{\boldsymbol{D}}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_2) = \lambda_{\boldsymbol{k}}(\alpha_1,\alpha_2)\check{\boldsymbol{D}}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_3), \tag{4.13}$$

其中因子 $\lambda_{\boldsymbol{k}}(\alpha_1,\alpha_2)$ 定义为

$$\lambda_{\boldsymbol{k}}(\alpha_1,\alpha_2) = \exp(-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_{12}) = \exp(-\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot(\alpha_1\boldsymbol{\tau}_2 + \boldsymbol{\tau}_1 - \boldsymbol{\tau}_3))。$$

将满足关系 (4.13) 的 $\check{\boldsymbol{D}}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\lambda)$ 称为投影表示。这说明小表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_\lambda|\boldsymbol{\tau}_\lambda\})$ 可以看成商群 $G_{\boldsymbol{k}}/T$ 或点群 $G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$ 的投影表示 $\check{\boldsymbol{D}}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\lambda)$。因此，只要知道了 $G^{(0)}_{\boldsymbol{k}}$ 的投影表示，也就知道了小表示。而由定义可见，如果投影表示是不可约的，则相应的小表示也一定是不可约的。所有晶格点群的投影表示都已经求出，有兴趣的读者可参阅有关专著。

对于 Brillouin 区内部的点，任意的 $\{\alpha_\lambda|\boldsymbol{\tau}_\lambda\}\in G_{\boldsymbol{k}}$ 都有 $\alpha_\lambda\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}$。因此有

$$\lambda_{\boldsymbol{k}}(\alpha_1,\alpha_2)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{\tau}_1+\boldsymbol{\tau}_2-\boldsymbol{\tau}_3)}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_3}\text{。}$$

于是，只要令

$$\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_\lambda}\check{\boldsymbol{D}}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\lambda),\quad \forall\alpha_\lambda\in G^{(0)}_{\boldsymbol{k}},$$

投影表示就变成了通常的表示。

最后来求空间群 G 的不可约表示。我们有如下定理。

定理 4.1 设 $\boldsymbol{k}$ 是 Brillouin 区的一个允许的 $\boldsymbol{k}$ 向量，令

$$\{\alpha_\gamma|\boldsymbol{\tau}_\gamma\},\quad \gamma=1,2,\cdots,M(\boldsymbol{k})$$

为空间群 G 按波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的陪集分解的代表元集合。$\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}$ 是波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的小表示，维数为 d_p，则存在空间群 G 的维数为 $d_pM(\boldsymbol{k})$ 的不可约表示，记为 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k}p)}$，可以将其写成

$$D^{(\boldsymbol{k}p)}_{\gamma r,\,\beta s}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\})$$
$$=\begin{cases}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha_\gamma\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_n}\Big(\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_\gamma|\boldsymbol{\tau}_\gamma\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\})\Big)_{rs}, & \text{若 }\{\alpha_\gamma|\boldsymbol{\tau}_\gamma\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}\in G_{\boldsymbol{k}},\\ 0, & \text{其他。}\end{cases}$$

其中指标取

$$\gamma,\beta=1,2,\cdots,M(\boldsymbol{k}),\quad r,s=1,2,\cdots,d_p\text{。}$$

以上用到了性质

$$\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\}=\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{I|\alpha^{-1}\boldsymbol{r}_n\}\text{。}$$

相应的特征标为

$$\begin{aligned}\chi^{(\boldsymbol{k}p)}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\})&=\sum_{\beta,s}\Big(\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k}p)}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\})\Big)_{\beta s,\,\beta s}\\&=\sum_{\beta,s}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha_\beta\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_n}\Big(\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\})\Big)_{ss}\\&=\sum_{\beta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha_\beta\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_n}\,\chi^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}),\end{aligned}$$

其中 $\chi^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}$ 为波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的小表示的特征标，求和对满足条件 $\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}\in G_{\boldsymbol{k}}$ 的群元进行。不难证明，特征标满足

$$\begin{aligned}&\frac{1}{|G|}\sum_{\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\in G}\chi^{(\boldsymbol{k}p)*}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\})\chi^{(\boldsymbol{k}'q)}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\})\\&=\frac{1}{|G|}\sum_{\alpha,\boldsymbol{r}_n}\sum_{\beta,\gamma}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha_\beta\boldsymbol{k}-\alpha_\gamma\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_n}\chi^{(p)*}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\})\chi^{(q)}_{G_{\boldsymbol{k}'}}(\{\alpha_\gamma|\boldsymbol{\tau}_\gamma\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\gamma|\boldsymbol{\tau}_\gamma\})\\&=\frac{N}{|G|}\sum_{\alpha}\sum_{\beta,\gamma}\chi^{(p)*}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\})\chi^{(q)}_{G_{\boldsymbol{k}'}}(\{\alpha_\gamma|\boldsymbol{\tau}_\gamma\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\gamma|\boldsymbol{\tau}_\gamma\})\delta(\alpha_\beta\boldsymbol{k},\alpha_\gamma\boldsymbol{k}')\text{。}\end{aligned}$$

对于两个波矢星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 和 $\{\boldsymbol{k}'^*\}$，如果其中有两个向量是相等的，即 $\alpha_\beta \boldsymbol{k} = \alpha_\gamma \boldsymbol{k}'$，则这两个波矢星就是完全相同的。因此上式中的 δ 符号可以改成 $\delta_{\{\boldsymbol{k}^*\}\{\boldsymbol{k}'^*\}}$，于是上式可写成

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{|G|}\sum_{\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\in G}\chi^{(\boldsymbol{k}p)*}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\})\chi^{(\boldsymbol{k}'q)}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\})\\
&=\frac{N}{|G|}\sum_\beta\sum_\alpha \chi^{(p)*}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\})\chi^{(q)}_{G_{\boldsymbol{k}'}}(\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{\tau}_\alpha\}\{\alpha_\beta|\boldsymbol{\tau}_\beta\})\,\delta_{\{\boldsymbol{k}^*\}\{\boldsymbol{k}'^*\}}\\
&=\frac{N}{|G|}M(\boldsymbol{k})\frac{|G_{\boldsymbol{k}}|}{N}\,\delta_{pq}\,\delta_{\{\boldsymbol{k}^*\}\{\boldsymbol{k}'^*\}}=\delta_{pq}\delta_{\{\boldsymbol{k}^*\}\{\boldsymbol{k}'^*\}}。
\end{aligned}$$

因此，空间群 G 的不可约表示可以用波矢星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 来标记，显然由同一个波矢星的不同波矢 $\boldsymbol{k}$ 得到的表示是等价的。类似可以证明，取遍波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的所有小表示和所有允许的波矢星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$，就可以得到空间群 G 的所有不等价不可约幺正表示。即

$$\sum_{\{\boldsymbol{k}^*\},p} d_p^2 M^2(\boldsymbol{k})=\sum_{\{\boldsymbol{k}^*\}}M^2(\boldsymbol{k})\frac{|G_{\boldsymbol{k}}|}{N}=\sum_{\{\boldsymbol{k}^*\}}M(\boldsymbol{k})\frac{|G|}{N}=|G|。$$

空间群 G 不可约表示的构造过程可以总结如下。

1. 根据平移群 T 建立相应的 Brillouin 区，写出平移群 T 的不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}(\{I|\boldsymbol{r}_n\})$。

2. 选定 Brillouin 区内的一个波矢 $\boldsymbol{k}$，作波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$，分别将 G 按 $G_{\boldsymbol{k}}$，$G_{\boldsymbol{k}}$ 按 T 作陪集展开。

3. 由波矢 $\boldsymbol{k}$ 得到波矢星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$，Brillouin 区内的所有波矢都属于某一个波矢星。

4. 建立商群 $G_{\boldsymbol{k}}/T\approx G_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$ 的所有投影表示 $\check{\boldsymbol{D}}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\alpha_\lambda)$。

5. 由投影表示得到波矢群 $G_{\boldsymbol{k}}$ 的小表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}_{G_{\boldsymbol{k}}}(\{\alpha|\boldsymbol{r}\})$。

6. 由小表示诱导出空间群 G 的不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k}p)}(\{\alpha|\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{\tau}_\alpha\})$。

7. 选取另一个波矢星 $\{\boldsymbol{k}'^*\}$，重复上述过程，得到空间群 G 的另一个不等价的不可约表示。

取遍所有的波矢星 $\{\boldsymbol{k}^*\}$ 和所有的小表示，就得到了空间群 G 的所有不等价的不可约表示。

习 题 4

4.1 找出彼此不正交的 S_4 轴和 S_6 轴所形成的晶格点群。

4.2 把 T 点群看成是三维空间的转动，试求其表示矩阵。并说明是可约表示还是不可约表示。可取 4 个 3 度轴为 $\alpha:(11\bar{1}),\beta:(1\bar{1}1),\gamma:(\bar{1}11),\delta:(111)$，3 个 2 度轴为 x,y,z 轴。

4.3 求点群 C_{2v} 在基 $\{xy,xz,yz\}$ 下的表示矩阵。这是可约表示还是不可约表示？如果是可约表示，将其约化。

4.4 分别以 $(2xy,x^2-y^2)$ 和 $(R_x=yp_z-zp_y,R_y=zp_x-xp_z)$ 为基求点群 D_3 的表示矩阵。

4.5 三维 Euclid 空间的三阶张量 $\{F_{ijk}\}$ 可以负载点群 C_{4v} 的一个表示，求出这个表示的特征标并将其约化。

4.6 推演出 C_3 类的所有空间群。

4.7 空间群 $C_{2h}^2 = T \oplus \left\{c_2 \middle| 00\frac{1}{2}\right\} T \oplus \{\sigma_h|000\}T \oplus \{\sigma|\boldsymbol{\tau}\}T$，确定操作 $\{\sigma|\boldsymbol{\tau}\}$ 的形式。

4.8 二维空间有五种 Bravais 格子，即倾斜格子，矩形格子，有心矩形格子，正方格子，六角格子。考虑正方格子，其中基向量满足 $\boldsymbol{a}\perp\boldsymbol{b}, \|\boldsymbol{a}\| = \|\boldsymbol{b}\|$，试推出对应点群 C_4, C_{4v} 的二维空间群。为何没有正方有心格子？

4.9 证明方程 (4.7) 给出的矩阵 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{kp})}$ 是简单空间群的表示。

第5章 置 换 群

置换群及其表示是群论中的重要内容。由全同粒子组成的体系具有置换对称性，可以用置换群来描述。

任意一个 n 阶有限群和置换群 S_n 的一个子群同构。置换群的不可约表示可以用图形方法作出，因此有限群的不可约表示可以通过置换群得到。置换群还为 Lie 群的不可约表示提供了很多有用的工具。

前面几章已经介绍了一些简单的置换群，如 3 个符号的置换群 S_3 等。本章将对置换群做详细讨论。

5.1 置 换

第 1 章已经介绍过置换的概念。n 个符号的一个置换定义为

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

即作置换

$$1\to p_1,\ 2\to p_2,\ \cdots,\ n\to p_n。$$

n 个符号的所有可能置换构成群，称为置换群，记为 S_n，这是 $n!$ 阶的群。

定义 S_n 群中的 m 个符号的循环

$$(a_1a_2\cdots a_m)=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & p & a_1 & a_2 & \cdots & a_m & a_{m+1} & \cdots & n\\ 1 & 2 & \cdots & p & a_2 & a_3 & \cdots & a_1 & a_{m+1} & \cdots & n\end{pmatrix},$$

即只有 m 个符号参与置换，分别为

$$a_1\to a_2, a_2\to a_3,\cdots, a_{m-1}\to a_m, a_m\to a_1,$$

其余符号不作置换，m 称为循环长度。

例如，有

$$\begin{pmatrix}1234567\\ 1374562\end{pmatrix}=(237),\ \begin{pmatrix}1234567\\ 3715642\end{pmatrix}=(13)(27)(456)$$

等。容易看到，有

$$(a_1a_2\cdots a_m)^m=e。$$

当 $m=2$ 时，称为对换。

S_n 的任何置换都可以分解成一些不同长度的循环的乘积。如果两个循环中的符号都不相同，则称这两个循环是独立的，如 S_5 中的 $(13)(245)$。

独立循环是可以交换的，如

$$(13)(245)=(245)(13)。$$

但 (13) 和 (345) 不是独立的，因而不可交换，即

$$(13)(345)=(1345)\neq(345)(13)=(453)(31)=(4531),$$

其中用到了循环不变的性质

$$(a_1a_2\cdots a_m)=(a_2\cdots a_ma_1)=\cdots=(a_ma_1a_2\cdots a_{m-1})。$$

容易证明，任何循环都可以进一步写成一些对换的乘积，如

$$(a_1a_2\cdots a_m)=(a_1a_m)(a_1a_{m-1})\cdots(a_1a_2)。$$

对换具有性质

$$(a_ma_n)=(a_na_m),\quad (a_pa_ma_n)(a_na_m)=(a_pa_m),$$

两个有共同符号的循环之积可以合并为一个循环，即

$$(a_p\cdots a_ma_n)(a_na_r\cdots a_q)=(a_p\cdots a_ma_na_r\cdots a_q)。$$

反之，一个循环也可以拆成两个较短的循环之积，即

$$(a_p\cdots a_ma_na_r\cdots a_q)=(a_p\cdots a_ma_n)(a_na_r\cdots a_q)。$$

对换可以进一步写成

$$(mn)=(1m)(1n)(1m)=(1n)(1m)(1n)。$$

因此，S_n 群中的任意置换都可以写成一些如 $(12),(13),\cdots,(1n)$ 这样的基本对换的乘积。对换 $(1k)\,(k=2,3,\cdots,n)$ 称为 S_n 群的生成元。

一个置换可以唯一地写成一些独立循环的乘积，其中有 ν_1 个 1- 循环，ν_2 个 2- 循环，$\cdots\cdots$ ν_n 个 n- 循环。这个循环结构可以写成

$$(1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n})。$$

每个置换都有确定的循环结构。显然有

$$\nu_1+2\nu_2+\cdots+n\nu_n=n。$$

将一个置换写成一些对换的乘积时，其中包含的对换数不是唯一的，如

$$\begin{aligned}(2345)&=(25)(24)(23)=(12)(15)(12)(24)(23)\\&=(12)(15)(12)(12)(14)(12)(23)=(12)(15)(14)(12)(23)=\cdots。\end{aligned}$$

但奇偶性是确定的。偶数个符号的置换一定分解为奇数个对换的乘积，而奇数个符号的置换一定分解成偶数个对换的乘积。

偶数个符号的置换称为奇置换，而奇数个符号的置换则称为偶置换。我们有如下性质：

偶置换 × 偶置换 = 偶置换，
奇置换 × 奇置换 = 偶置换，
奇置换 × 偶置换 = 奇置换，
偶置换 × 奇置换 = 奇置换。

S_n 中的每一个置换或者是偶置换，或者是奇置换。如果 A_n 是 S_n 中所有偶置换的集合，则 A_n 构成 $n!/2$ 阶的群，称为交错群，是 S_n 群的不变子群。

可以构造一个 2 阶的商群 S_n/A_n，由此可以得到两个一维的不可约表示，其中的非恒等表示为

$$\{\text{偶置换} \to 1, \quad \text{奇置换} \to -1\}。$$

5.2 共轭类，配分和 Young 图

每个置换都有确定的循环结构。比如，S_8 群中的循环 (125)(37)(48)(6) 具有结构 (12^23)，而循环 (1245)(36)(78) 具有结构 (2^24) 等。

关于置换的循环结构，我们有如下定理。

定理 5.1 置换群中元素属于同一类的充要条件是具有相同的循环结构。

证明 设置换 P 可以分解为 r 个独立循环的乘积

$$P = P_1P_2\cdots P_r,$$

其中 P_i 是第 i 个独立循环。下面分必要性和充分性分别证明。

必要性。令 $Q \in S_n$，且 P,Q 属于同一类，则按类的定义，一定可以找到 $X \in S_n$ 使得

$$Q = XPX^{-1} = XP_1X^{-1}XP_2X^{-1}\cdots XP_rX^{-1}。$$

可以证明，XP_iX^{-1} 具有和 P_i 完全相同的结构。如令

$$P_i = (a_1a_2\cdots a_{l_i}) = \begin{pmatrix} a_1a_2\cdots a_{l_i}a_{l_i+1}\cdots a_n \\ a_2a_3\cdots a_1a_{l_i+1}\cdots a_n \end{pmatrix},$$

则有

$$\begin{aligned} & X\begin{pmatrix} a_1a_2\cdots a_{l_i}a_{l_i+1}\cdots a_n \\ a_2a_3\cdots a_1a_{l_i+1}\cdots a_n \end{pmatrix}X^{-1} \\ = & \begin{pmatrix} a_1\cdots a_n \\ b_1\cdots b_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1a_2\cdots a_{l_i}a_{l_i+1}\cdots a_n \\ a_2a_3\cdots a_1a_{l_i+1}\cdots a_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1\cdots b_n \\ a_1\cdots a_n \end{pmatrix} \\ = & (b_1\cdots b_{l_i})。 \end{aligned}$$

因此，如果 P,Q 属于同一类，则具有完全相同的循环结构。

充分性。令 P,Q 具有相同的循环结构，则置换 P 的每一个独立循环 $P_i = (a_1^ia_2^i\cdots a_{l_i}^i)$ 都与置换 Q 中的一个相同长度的循环 $Q_i = (b_1^ib_2^i\cdots b_{l_i}^i)$ 对应，并且是一一对应。

从上面的讨论可知，可以找到群元 $X \in S_n$，使得 $XP_iX^{-1} = Q_i$。对于 $P = P_1P_2\cdots P_r$ 和 $Q = Q_1Q_2\cdots Q_r$，可以取 $X \in S_n$，且有如下形式：

$$X = \begin{pmatrix} a_1^1a_2^1\cdots a_{l_1}^1\cdots a_1^ia_2^i\cdots a_{l_i}^i\cdots a_1^ra_2^r\cdots a_{l_r}^r \\ b_1^1b_2^1\cdots b_{l_1}^1\cdots b_1^ib_2^i\cdots b_{l_i}^i\cdots b_1^rb_2^r\cdots b_{l_r}^r \end{pmatrix},$$

则得

$$XP_iX^{-1}=Q_i=(b_1^ib_2^i\cdots b_{l_i}^i)。$$

因而可以使

$$XPX^{-1}=XP_1X^{-1}XP_2X^{-1}\cdots XP_rX^{-1}=Q_1Q_2\cdots Q_r=Q。$$

因此，S_n 的每一个循环结构就决定了一个共轭类。

满足方程

$$\nu_1+2\nu_2+\cdots+n\nu_n=n$$

的一个解 $(\nu_1,\nu_2,\cdots,\nu_n)$ 就决定了 S_n 的一个循环结构，因而给出了 S_n 的一个类。我们将类记为

$$(l)=(1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n})。$$

例如，S_7 中的类 (1^34) 有 3 个 1 循环和一个 4 循环。令

$$\begin{aligned}\nu_1+\nu_2+\cdots+\nu_n&=\lambda_1,\\ \nu_2+\cdots+\nu_n&=\lambda_2,\\ &\vdots\\ \nu_n&=\lambda_n,\end{aligned}$$

可以看到

$$\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_n=\nu_1+2\nu_2+\cdots+n\nu_n=n,\ \ \lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n。$$

这样我们建立了 $\{\lambda_i\}$ 和 $\{\nu_i\}$ 之间的一个对应。

记

$$[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$$

为满足上述方程的一个解。则由 $\{\lambda_i\}$ 和 $\{\nu_i\}$ 之间的一一对应可知，$[\lambda]$ 解的个数正好是 S_n 的类数，即 S_n 所有可能的循环结构的数目。

每个解 $[\lambda]$ 称为是 n 的一个配分。因此，配分的数目也就是类的数目，因而也就是 S_n 群的不等价不可约表示的数目。

S_n 群的类数难以用一个公式表示，但对于某些 n 可以给出如下一些结果：

$$k_1=1,\ k_2=2,\ k_3=3,\ k_4=5,\ k_5=7,\ k_6=11,\ k_7=15,\ k_8=22,\ k_9=30,$$

$$k_{10}=42,\ k_{20}=627,\ k_{50}=204226,\ k_{100}=190569292,\ k_{200}=3972999029388。$$

现在用记号

$$(l)=(1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n})$$

来标记类，而用记号

$$[\lambda]=[\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n]$$

来标记不可约表示。n 的每个配分，即 S_n 群的每个不可约表示可以用一个图来表示，称为 Young 图。

用一个方格图来表示某个配分，其中第一行有 λ_1 个方格，第二行有 λ_2 个方格，$\cdots\cdots$ 第 n 行有 λ_n 个方格。对于 $n=3$ 的情况，有 3 种可能的配分：

$$[3],\ [2,1],\ [1^3]。$$

对应的 Young 图如图 5.1 所示。对于 $n=4$，有五种可能的配分：

$$[4],\ [3,1],\ [2^2],\ [2,1^2],\ [1^4]。$$

对应的 Young 图如图 5.2 所示。由

$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$$

可知，Young 图的方格数是从上到下递减的，即上一行的方格数要大于或等于下一行的方格数。

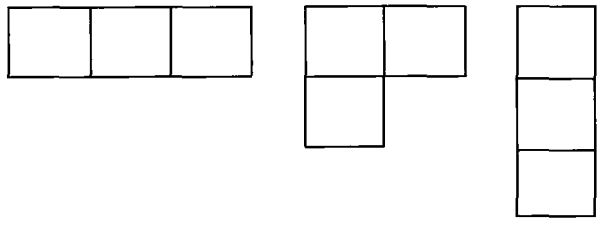


图 5.1 S_3 的 Young 图

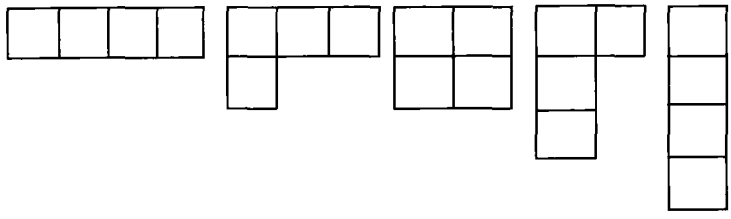
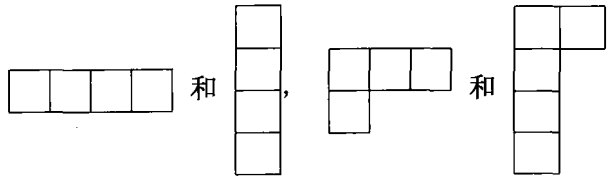


图 5.2 S_4 的 Young 图

n 的每个配分对应 S_n 群的一个不可约表示。因此，S_n 群的每个不可约表示都可以用一个 Young 图来表示。

不同的不可约表示对应不同的 Young 图。由 S_4 群的 Young 图



可以看到，如果将其中一个 Young 图绕第一个方格的对角线旋转 π 角 (即将 Young 图的行列互换)，则得到另外一个 Young 图。

这样的两个 Young 图称为是对偶的，对应的不可约表示称为对偶表示。对偶表示具有相同的维数。

例如，[4], $[1^4]$ 是对偶的，$[2^2]$ 与自身对偶，而 [3,1], $[21^2]$ 也是对偶的。

S_4 群是 24 阶的，具有 5 个类：

$$(1^4),\ (1^22),\ (13),\ (2^2),\ (4),$$

因此有 5 个不可约表示。各类的元素为

$$(1^4)=\{e\},$$

$$(1^22)=\{(12),(13),(14),(23),(24),(34)\},$$

$$(13)=\{(123),(132),(124),(142),(134),(143),(234),(243)\},$$

$$(2^2)=\{(12)(34),(13)(24),(14)(23)\},$$

$$(4)=\{(1234),(1423),(1324),(1243),(1432),(1342)\}。$$

关于每个类的元素数，我们有如下定理。

定理 5.2 S_n 群中的类

$$(l)=(1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n})$$

所包含的元素数可以用下列公式表示：

$$n_{(l)}=\frac{n!}{1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n}\nu_1!\nu_2!\cdots\nu_n!}。$$

证明 n 个符号的所有可能置换数为 $n!$。而 S_n 群的类由循环结构决定。

对一个确定的循环结构，独立循环是可以交换的。如

$$(1)(2)\cdots=(2)(1)\cdots,\quad (12)(34)\cdots=(34)(12)\cdots$$

等。这样就会有重复计数。为了去掉重复计数，就必须除以因子

$$\nu_1!\nu_2!\cdots\nu_n!。$$

进一步，由于循环不变性，即

$$(12)=(21),\ (123)=(231)=(312),\cdots,$$

故若有 ν_2 个 2- 循环，就应当除以因子 $2^{\nu_2},\cdots\cdots$ 有 ν_n 个 n- 循环，就应当除以因子 n^{ν_n}。因此，要除去的总的因子为

$$1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n}\nu_1!\nu_2!\cdots\nu_n!。$$

因此，具有结构 $(l)=(1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n})$ 的置换数正好是 $n_{(l)}$。

5.3 Frobenius 公式和图形方法

Frobenius 公式 令

$$(l) = (1^{\nu_1} 2^{\nu_2} \cdots n^{\nu_n})$$

为 S_n 群的一个类，定义函数

$$f_{(l)}(z_1, z_2, \cdots, z_n) = \left(\sum_{i=1}^{n} z_i\right)^{\nu_1} \left(\sum_{i=1}^{n} z_i^2\right)^{\nu_2} \cdots \left(\sum_{i=1}^{n} z_i^n\right)^{\nu_n},$$

以及

$$D(z_1, z_2, \cdots, z_n) = -\begin{vmatrix} 1 & z_1 & z_1^2 & \cdots & z_1^{n-1} \\ 1 & z_2 & z_2^2 & \cdots & z_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & z_n & z_n^2 & \cdots & z_n^{n-1} \end{vmatrix} = \prod_{i<j} (z_i - z_j),$$

其中 $z_1, z_2, \cdots, z_n$ 是 n 个独立变量。函数

$$F_{(l)}(z_1, z_2, \cdots, z_n) = f_{(l)}(z_1, z_2, \cdots, z_n) D(z_1, z_2, \cdots, z_n)$$

称为 Frobenius 生成函数。它可以展开为

$$F_{(l)}(z_1, z_2, \cdots, z_n) = \sum_{[\lambda]} \chi_{(l)}^{[\lambda]} \sum_{P} (-)^P P z_1^{\lambda_1 + n - 1} z_2^{\lambda_2 + n - 2} \cdots z_n^{\lambda_n}。$$

上式称为 Frobenius 公式，其中

$$[\lambda] = [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$$

是 n 的一个配分。求和 $\sum_{[\lambda]}$ 对所有配分进行。P 是 $z_1, z_2, \cdots, z_n$ 的一个置换，求和 $\sum_{P}$ 表示对所有可能置换进行，其中对偶置换 $(-)^P = 1$ 而对奇置换 $(-)^P = -1$。

展开式中的系数 $\chi_{(l)}^{[\lambda]}$ 正是类 (l) 在不可约表示 $[\lambda]$ 中的特征标。因此，Frobenius 公式给出了所有类在所有不可约表示中的特征标。

Frobenius 公式的证明可以参考 M. Hamermesh 的书，此处不再证明。

不可约表示 $[\lambda]$ 的维数 $d_{[\lambda]}$ 就是单位元 (1^n) 的特征标，即

$$d_{[\lambda]} = \chi_{(1^n)}^{[\lambda]}。$$

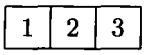
尽管在理论上可以用 Frobenius 公式来计算 S_n 的特征标，但这一过程往往是相当复杂的。下面将介绍如何使用图形方法来进行计算，首先定义 Young 盘。

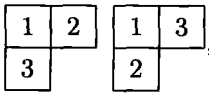
定义 5.1 Young 盘是用数字 $1, 2, \cdots, n$ 填充后的 Young 图，其中每个数字只使用一次。

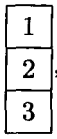
标准 Young 盘是按从左到右，从上到下数字增加的方式来填充的。关于标准 Young 盘有如下定理。

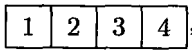
定理 5.3 S_n 群的不可约表示 $[\lambda]$ 的维数等于相应的标准 Young 盘的数目。

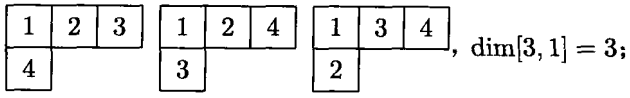
下面给出一些具体例子来说明这个定理。

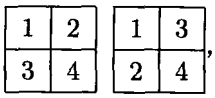
例 5.1 S_3, $[3]$, , $\dim[3]=1$;

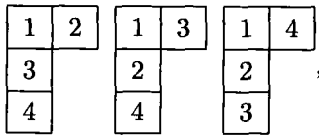
$[2,1]$, , $\dim[2,1]=2$;

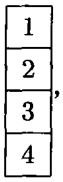
$[1^3]$, , $\dim[1^3]=1$。

例 5.2 S_4, $[4]$, , $\dim[4]=1$;

$[3,1]$, , $\dim[3,1]=3$;

$[2^2]$, , $\dim[2^2]=2$;

$[2,1^2]$, , $\dim[2,1^2]=3$;

$[1^4]$, , $\dim[1^4]=1$。

从这两个例子可以看到，互为对偶的表示具有相同的维数。利用这一方法可以得到任何一个不可约表示的维数。

还可以证明，标准 Young 盘的数目，即不可约表示的维数可以表示为

$$d_{[\lambda]}(S_n)=\frac{n!}{r_1!r_2!\cdots r_m!}\prod_{i<j}^{m}(r_i-r_j),$$

其中 m 是 Young 图的行数，而

$$r_i=\lambda_i+m-i。$$

例如，有

$$\begin{aligned}d_{[3,2,1,1]}(S_7)&=\frac{n!}{r_1!r_2!\cdots r_m!}\prod_{i<j}^{m}(r_i-r_j)\\&=\frac{7!}{6!4!2!1!}\times 2\times 4\times 5\times 2\times 3\times 1=35,\end{aligned}$$

其中

$$m=4,\quad r_1=6,\quad r_2=4,\quad r_3=2,\quad r_4=1。$$

还有一个简单方法，称为钩形规则，可以用来计算不可约表示的维数 $d_{[\lambda]}$。

首先对 Young 图的每个方格给出一个钩形数 h_{ij}，即从该方格分别往右和往下画两条直线，这两条直线所占据的方格数即为该方格的钩形数。

例如，Young 图 $[3,2,1^2]$ 的钩形数如图 5.3 所示。则不可约表示的维数 $d_{[\lambda]}$ 即为 $n!$ 除以所有钩形数的乘积。因此有

$$d_{[3,2,1,1]}(S_7)=\frac{n!}{\prod\limits_{i,j}h_{ij}}=\frac{7!}{6\times4\times3\times2}=35。$$

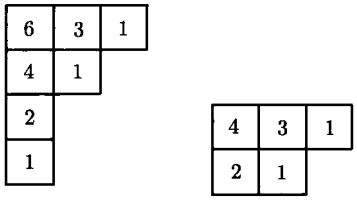


图 5.3 Young 图的钩形数

类似地有

$$d_{[3,2]}(S_5)=\frac{5!}{4\times3\times2}=5。$$

图形方法不仅可以计算不可约表示的维数，也可以计算任何一个类在任何一个不可约表示中的特征标。下面不加证明地给出用图形方法计算特征标的规则。

1. 根据配分得到 $[\lambda]$，画出 Young 图；

2. 按照类

$$(l)=(1^{\nu_1}2^{\nu_2}\cdots n^{\nu_n})$$

的结构填充数字，其中对每个 1- 循环，使用一个数字填充，对每个 2- 循环使用两个相同数字填充，$\cdots\cdots$ 对 n- 循环则使用 n 个相同数字填充。填充时按数字顺序依次填充，在填充某一组相同数字时，可以从任意一行开始，但每当填充到比上一行多填充一格时，必须移到上一行继续填充。每次填充完一组数后都必须是允许的 Young 盘，即从上到下，从左到右数字必须是相等或增加的；

3. 如果相同的数字占据了偶数行，则给出一个负号；

4. 所有可能填充方式得到的 Young 盘的代数和即为所求的特征标。

下面将给出一些例子。

例 5.3 $\chi^{[3,2,1]}_{(1^42)}$，有 4 个 1- 循环，1 个 2- 循环，可以用数字序列 $1,2,2,3,4,5$ 来依次填充 Young 图，用图 5.4 所示方式进行填充。一共有 4 种填充方式，故

$$\chi^{[3,2,1]}_{(1^42)}=1+1-1-1=0。$$

显然，也可以使用序列 $1,2,3,4,5,5$ 或 $1,1,2,3,4,5$ 来填充 Young 图。不同的序列得到的可能填充方式可能是不同的，但最后的代数和 (即特征标) 一定是相同的。

例 5.4 $\chi^{[7,3^2]}_{(1^256)}$，可以使用序列 $1,1,1,1,1,1,2,2,2,2,2,3,4$ 来填充 Young 图。容易看到没有允许的填充方式，故

$$\chi^{[7,3^2]}_{(1^256)}=0。$$

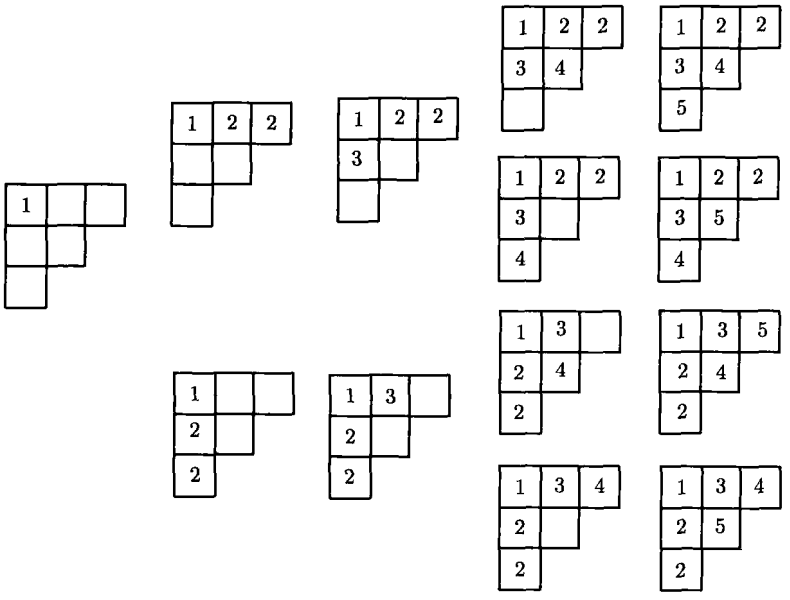


图 5.4 Young 图 $[3,2,1]$ 的填充

例 5.5 $\chi^{[15,3^2]}_{(1,3,17)}$，用序列 $1,2,2,2,\underbrace{3,\cdots,3}_{17}$ 来填充 Young 图。只有一种允许的填充方式。如图 5.5 所示，由于数字 2 占据了两行，故

$$\chi^{[15,3^2]}_{(1,3,17)} = -1。$$

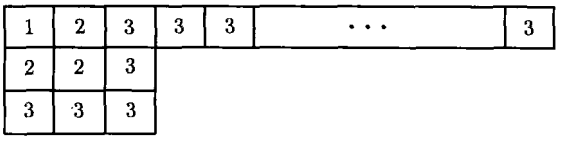


图 5.5 Young 图 $[15,3^2]$ 的填充

例 5.6 $\chi^{[1^n]}_{(l)}$，对于 Young 图 $[1^n]$ 只有一种填充方式。如果 (l) 是奇置换，则其一定包含奇数个奇循环，而每个奇循环填充时一定占据 Young 图的偶数行，因而出现负号。即对奇置换有

$$\chi^{[1^n]}_{(l)} = -1。$$

类似地，对偶置换有

$$\chi^{[1^n]}_{(l)} = 1。$$

例 5.7 证明对偶图的特征标满足关系

$$\chi^{[\tilde{\lambda}]}_{(l)} = \chi^{[\lambda]}_{(l)}\chi^{[1^n]}_{(l)}, \tag{5.1}$$

其中 $[\tilde{\lambda}]$ 是 $[\lambda]$ 的对偶图。

证明 因为当行列互换时，就从 Young 图 $[\lambda]$ 得到 Young 图 $[\tilde{\lambda}]$。所以 $[\lambda]$ 的一个允许填充就对应 $[\tilde{\lambda}]$ 的一个允许填充。如果在某次填充时需要填充 r 个相同的数字，则这 r 个数字占据的行列总数为 $r+1$。若 r 是奇数，则 $r+1$ 是偶数。这样，占据的行和列的奇偶性是相同的。这表示对偶图的符号是相同的。

类似地，如果 r 是偶数，则 $r+1$ 是奇数。占据的行和列的奇偶性正好相反。于是对偶图的符号相反。

容易看到，偶 (奇) 置换包含偶 (奇) 数个奇循环，因此

$$\chi_{(l)}^{[\tilde{\lambda}]}=\begin{cases}\chi_{(l)}^{[\lambda]}, & \text{对偶置换 } (\chi_{(l)}^{[1^n]}=1\,),\\ -\chi_{(l)}^{[\lambda]}, & \text{对奇置换 } (\chi_{(l)}^{[1^n]}=-1\,)。\end{cases}$$

由此证明了公式 (5.1)。

5.4 Young 算符

S_n 群有两个一维不可约表示，其中一个是恒等表示 $[n]$，这是对称表示，即

$$\text{所有置换}\mapsto 1;$$

另一个是反对称表示 $[1^n]$，即

$$\text{偶置换}\mapsto 1,\quad \text{奇置换}\mapsto -1。$$

由 n 个变量的任意函数

$$f(x_1,x_2,\cdots,x_n)=f(1,2,\cdots,n)$$

可以构造对称函数和全反对称函数

$$\psi^{[n]}=\hat{S}f(1,2,\cdots,n)=\sum_P Pf(1,2,\cdots,n),$$

$$\psi^{[1^n]}=\hat{A}f(1,2,\cdots,n)=\sum_P(-1)^P Pf(1,2,\cdots,n),$$

其中 P 是 n 个符号的置换，求和对所有可能的置换进行。

容易看到，对称函数 $\psi^{[n]}$ 可以负载对称表示 $[n]$，而反对称函数 $\psi^{[1^n]}$ 可以负载反对称表示 $[1^n]$，即有

$$P\psi^{[n]}=\psi^{[n]},\quad P\psi^{[1^n]}=(-1)^P\psi^{[1^n]}。$$

S_n 群的其余不可约表示既不是对称的，也不是反对称的，是混合表示。

S_n 群的每个不可约表示 $[\lambda]$ 都对应一个 Young 图，不可约表示 $[\lambda]$ 的基的数目 (即表示维数) 正好是标准 Young 盘的数目。因此，在表示的基和标准 Young 盘之间存在一种对应关系。

现在定义两个置换算符，一个是水平置换算符 $\hat{S}$，即对 Young 盘同一行进行的所有可能置换。另一个是垂直置换算符 $\hat{A}$，即对 Young 盘同一列进行的所有可能置换。

对每个标准 Young 盘 T_k，定义 Young 算符

$$\hat{Y}_k^{[\lambda]} = \hat{A}\hat{S} = \prod_i \sum_{P_i} (-1)^{P_i} P_i \prod_j \sum_{P'_j} P'_j,$$

其中求和对所有可能置换进行，乘积是对所有行列进行。

例如，考虑 S_3 群的不可约表示 $[2,1]$，有两个标准 Young 盘

$$T_1 = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}, \quad T_2 = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array}。$$

这里已经取了字典序。相应的 Young 算符为

$$\hat{Y}_1^{[2,1]} = [e-(13)][e+(12)] = e+(12)-(13)-(123),$$
$$\hat{Y}_2^{[2,1]} = [e-(12)][e+(13)] = e-(12)+(13)-(132),$$

其中 e 为单位元。不可约表示 $[\lambda]$ 一共有 $d_{[\lambda]}$ 个标准 Young 盘，对每个标准 Young 盘 T_i 指定一个函数

$$\phi_i(1,2,\cdots,n)。$$

如果令

$$\phi_1(1,2,\cdots,n) = \phi(1,2,\cdots,n),$$

则其余函数可以通过适当的置换得到，即

$$\phi_i(1,2,\cdots,n) = P_i\phi(1,2,\cdots,n), \quad i=1,2,\cdots,d_{[\lambda]},$$

其中 P_i 是从 Young 盘 T_1 到 T_i 的置换。如果定义

$$\psi_i(1,2,\cdots,n) = \hat{Y}_i^{[\lambda]}\phi_i(1,2,\cdots,n), \quad i=1,2,\cdots,d_{[\lambda]},$$

则可以证明，这 $d_{[\lambda]}$ 个函数将张成 S_n 的不变子空间，因而可以负载 S_n 群的不可约表示 $[\lambda]$。

例如，令

$$\phi_1(1,2,3) = \phi(1,2,3),\ \phi_2(1,2,3) = (23)\phi(1,2,3) = \phi(1,3,2),$$

则有

$$\begin{aligned}\psi_1(1,2,3) &= \hat{Y}_1^{[2,1]}\phi_1(1,2,3) = [e+(12)-(13)-(123)]\phi(1,2,3)\\ &= \phi(1,2,3)+\phi(2,1,3)-\phi(3,2,1)-\phi(2,3,1),\\ \psi_2(1,2,3) &= \hat{Y}_2^{[2,1]}\phi_2(1,2,3) = [e-(12)+(13)-(132)]\phi(1,3,2)\\ &= \phi(1,3,2)-\phi(2,3,1)+\phi(3,1,2)-\phi(3,2,1)。\end{aligned}$$

由此可以计算表示矩阵

$$\begin{aligned}(12)\psi_1 &= (12)[\phi(1,2,3)+\phi(2,1,3)-\phi(3,2,1)-\phi(2,3,1)]\\ &= \phi(1,2,3)+\phi(2,1,3)-\phi(3,1,2)-\phi(1,3,2)=\psi_1-\psi_2,\\ (12)\psi_2 &= (12)[\phi(1,3,2)-\phi(2,3,1)+\phi(3,1,2)-\phi(3,2,1)]\\ &= \phi(2,3,1)-\phi(1,3,2)+\phi(3,2,1)-\phi(3,1,2)=-\psi_2。\end{aligned}$$

最后得到

$$(12)(\psi_1,\psi_2)=(\psi_1,\psi_2)\begin{pmatrix}1&0\\-1&-1\end{pmatrix}\mapsto(12)=\begin{pmatrix}1&0\\-1&-1\end{pmatrix}。$$

类似地有

$$(13)(\psi_1,\psi_2)=(\psi_1,\psi_2)\begin{pmatrix}-1&-1\\0&1\end{pmatrix}\mapsto(13)=\begin{pmatrix}-1&-1\\0&1\end{pmatrix}。$$

其他所有群元的表示矩阵都可以通过下述方式得到：

$$\begin{aligned}(132)=(12)(13)&=\begin{pmatrix}1&0\\-1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&-1\\0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&-1\\1&0\end{pmatrix},\\ (123)=(13)(12)&=\begin{pmatrix}-1&-1\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\-1&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1\\-1&-1\end{pmatrix},\\ (23)=(13)(12)(13)&=\begin{pmatrix}-1&-1\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\-1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&-1\\0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}。\end{aligned}$$

容易证明，这是不可约表示，且有

$$\sum_{g\in S_3}|\chi(g)|^2=2^2+1^2+1^2=6。$$

下面考虑 S_4 群的不可约表示 $[2,1^2]$。三个标准 Young 盘取为

$$T_1=\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}4\\\cline{1-1}\end{array}\ ,\quad T_2=\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}4\\\cline{1-1}\end{array}\ ,\quad T_3=\begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2\\\cline{1-1}3\\\cline{1-1}\end{array}\ 。$$

Young 算符为

$$\begin{aligned}\hat{Y}_1^{[2,1^2]}&=[e-(13)-(14)-(34)+(134)+(143)][e+(12)],\\ \hat{Y}_2^{[2,1^2]}&=[e-(12)-(14)-(24)+(124)+(142)][e+(13)],\\ \hat{Y}_3^{[2,1^2]}&=[e-(12)-(13)-(23)+(123)+(132)][e+(14)],\end{aligned}$$

由此可以得到 Young 基

$$\begin{aligned}\psi_1&=\hat{Y}_1^{[2,1^2]}\phi(1,2,3,4),\\ \psi_2&=\hat{Y}_2^{[2,1^2]}\phi(1,3,2,4),\\ \psi_3&=\hat{Y}_3^{[2,1^2]}\phi(1,4,2,3)。\end{aligned}$$

直接计算即可以得出由基 (ψ_1, ψ_2, ψ_3) 负载的表示矩阵

$$(12)=\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&-1&0\\1&0&-1\end{pmatrix},\ (13)=\begin{pmatrix}-1&-1&0\\0&1&0\\1&0&-1\end{pmatrix},\ (14)=\begin{pmatrix}-1&0&1\\0&-1&-1\\0&0&1\end{pmatrix}。$$

其他表示矩阵可以通过下列方式得到：

$$(132)=(12)(13),\quad (1423)=(13)(12)(14),\quad (23)=(12)(13)(12),\ \cdots。$$

这也是不可约表示。

从这些例子可以看到，Young 基 $\{\psi_i\}$ 的确负载了 S_n 群的不可约表示。这些表示矩阵容易构造，但得到的表示不是幺正的。不过，我们总可以找到适当的相似变换，将其变成幺正表示。

5.5 外 积

前几章讨论了两个群的直积和两个表示的直积。群 G 的两个不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(p)}, \boldsymbol{D}^{(q)}$ 的直积 $\boldsymbol{D}^{(p)}\otimes\boldsymbol{D}^{(q)}$ 也是群 G 的表示，但一般是可约表示，可以约化为不可约表示的直和。

实际上，对置换群还可以定义另一种直积，称为外积。令 S_{n+m} 为 $n+m$ 个符号的置换群，对应的不可约表示为 $[\lambda]$，其维数为 $d_{[\lambda]}$。

易见前 n 个符号的所有置换构成群 S_n，而其余的 m 个符号的所有置换则构成群 S_m。设相应的不可约表示分别为 $[\mu]$ 和 $[\nu]$，维数分别为 $d_{[\mu]}$ 和 $d_{[\nu]}$。

由于前 n 个符号和后 m 个符号之间没有置换，因此这些置换构成直积群 $S_n\otimes S_m$，维数为 $n!m!$。而 $[\mu]\otimes[\nu]$ 则是 $S_n\otimes S_m$ 的不可约表示。

显然，直积群 $S_n\otimes S_m$ 是 S_{n+m} 群的子群，其指数为 $(n+m)!/(n!\,m!)$。现在将 S_{n+m} 群按子群 $S_n\otimes S_m$ 作陪集分解得到

$$S_{n+m}=\sum_{\alpha=1}^{N}p_aS_n\otimes S_m,\quad p_1=e,\ N=\frac{(n+m)!}{n!\,m!},$$

其中 $p_a\in S_{n+m}$ $(a=1,2,\cdots,N)$ 是相应陪集的代表元，其本身也是一个置换，这些代表元可以用来构造 S_{n+m} 群的表示的基。

S_{n+m} 群的不可约表示 $[\lambda]$ 对子群 $S_n\otimes S_m$ 而言则是可约表示，且有

$$[\lambda]=\sum_{\mu,\nu}a^{\lambda}_{\mu\nu}[\mu]\otimes[\nu],$$

相应的特征标为

$$\chi^{[\lambda]}=\sum_{\mu,\nu}a^{\lambda}_{\mu\nu}\chi^{[\mu]}\chi^{[\nu]},$$

其中系数 $a_{\mu\nu}^{\lambda}$ 可以通过特征标正交关系确定，即

$$a_{\mu\nu}^{\lambda}=\frac{1}{n!m!}\sum_{g\in S_n\otimes S_m}\chi^{[\mu]}(g)\chi^{[\nu]}(g)\chi^{[\lambda]}(g)。$$

反之，由子群 $S_n\otimes S_m$ 的表示可以构造 S_{n+m} 群的表示，即诱导表示。

从子群 $S_n\otimes S_m$ 的不可约表示诱导出的 S_{n+m} 群的表示，称为 S_n 和 S_m 的外积，用 $[\mu]\times[\nu]$ 表示。从负载 S_n 群和 S_m 群不可约表示的基出发，利用 S_{n+m} 群按子群 $S_n\otimes S_m$ 进行陪集分解的代表元，可以得到负载 S_{n+m} 群表示的基。由这组基负载的表示一般是可约表示，可以按照 S_{n+m} 的不可约表示 $[\lambda]$ 进行约化。下面给出这一约化的图形方法。令

$$[\mu]\times[\nu]=\sum_{\lambda}a_{\mu\nu}^{\lambda}[\lambda],$$

则系数可由特征标正交关系确定，即

$$a_{\mu\nu}^{\lambda}=\frac{1}{(n+m)!}\sum_{g\in S_{n+m}}\chi^{[\mu]\times[\nu]}(g)\chi^{[\lambda]}(g)。$$

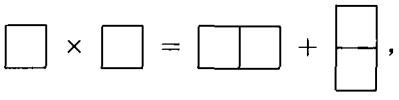
外积的维数可以这样来计算，不可约表示 $[\mu]$ 和 $[\nu]$ 的维数分别是 $d_{[\mu]}$ 和 $d_{[\nu]}$，而代表元的个数为 $(n+m)!/(n!m!)$，因此这样构造的基的数目为

$$d_{[\mu]\times[\nu]}=\frac{(n+m)!}{n!m!}d_{[\mu]}d_{[\nu]},$$

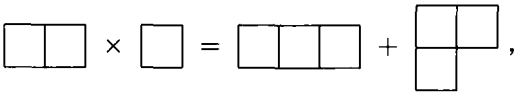
由此得到维数公式

$$\frac{(n+m)!}{n!m!}d_{[\mu]}d_{[\nu]}=\sum_{\lambda}a_{\mu\nu}^{\lambda}d_{[\lambda]}。$$

外积可以用图形方法约化。例如，我们有



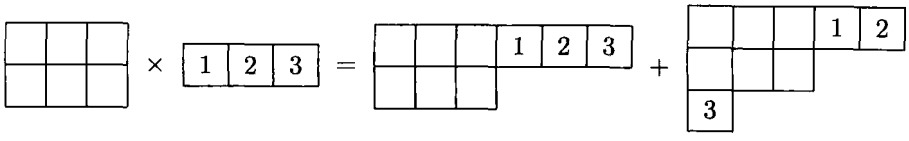
$$[1]\times[1]=[2]\oplus[1^2]。$$

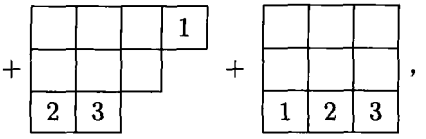


$$[2]\times[1]=[3]\oplus[2,1]。$$

下面不加证明地给出外积分解的图形规则。

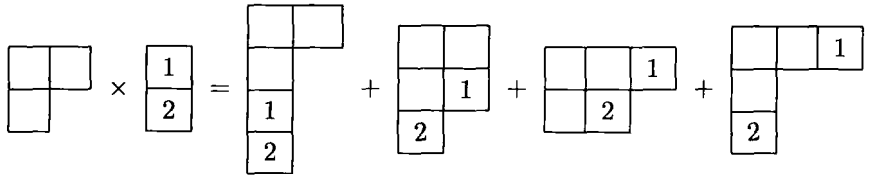
1. $[\mu]\times[n]$: 用各种可能的方式将表示 $[n]$ 的 n 个方格加到表示 $[\mu]$ 上，使得最后的 Young 图是允许的 Young 图，但是要去掉那些新加方格处在同一列的图。如





$$[3^2]\times[3]=[6,3]\oplus[5,3,1]\oplus[4,3,2]\oplus[3^3]。$$

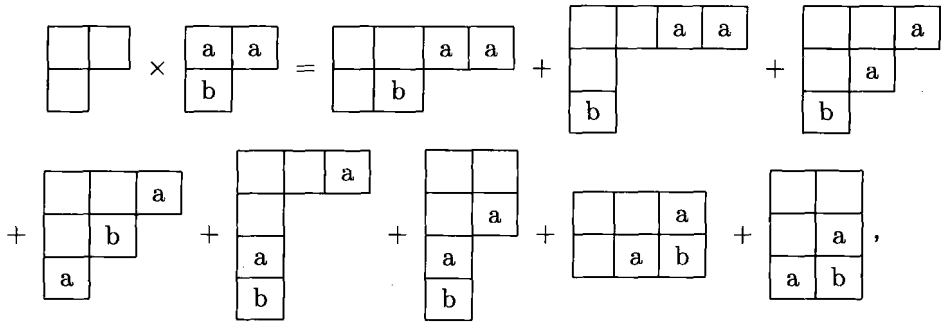
2. $[\mu]\times[1^n]$: 以各种可能的方式将表示 $[1^n]$ 的 n 个方格加到表示 $[\mu]$ 上，使得最后的 Young 图是允许的 Young 图，但是要去掉那些新加方格处在同一行的图。如



$$[2,1]\times[1^2]=[2,1^3]\oplus[2^2,1]\oplus[3,2]\oplus[3,1^2]。$$

3. $[\mu]\times[\nu]$: 用 a 标记 Young 图 $[\nu]$ 的第一行，然后用 b 标记第二行，用 c 标记第三行 $\cdots\cdots$。然后以各种可能的方式按照规则 1 将方格 a 加到 Young 图 $[\mu]$ 上，然后加方格 b，方格 $c\cdots\cdots$。在每一步都保证得到的是一个允许的 Young 图。

最后得到的 Young 图必须满足这样的条件，从右往左读图时应当有 a 方格数 $\geqslant b$ 方格数 $\geqslant c$ 方格数 $\geqslant\cdots$。如



$$[2,1]\times[2,1]=[4,2]\oplus[4,1^2]\oplus[3,2,1]\oplus[3,2,1]\oplus[3,1^3]\oplus[2^2,1^2]\oplus[3^2]\oplus[2^3]。$$

相应的表示维数为

$$d_{[2,1]\times[2,1]}=\frac{(3+3)!}{3!3!}\times 2\times 2=80=9+10+16+16+10+9+5+5。$$

显然外积是可以交换的，即有

$$[\mu]\times[\nu]=[\nu]\times[\mu]。$$

习 题 5

5.1 找出 S_5 的所有循环结构。哪些是偶置换？哪些是奇置换？

5.2 证明：S_n 的所有偶置换集合 A_n 构成群，阶为 $n!/2$。

5.3 证明：S_n 的所有元素都可以用下列元素生成:

$$a = (12), b = (123\cdots n)。$$

5.4 给出 S_5 的所有不可约表示的 Young 图，并计算相应的表示维数。

5.5 用图形方法计算 S_5 在表示 $[3,2]$ 中的特征标。

5.6 计算 S_4 群的直积分解 $[3,1]\otimes[3,1]$。

5.7 求直积分解 $[2,1]\otimes[2,1]\otimes[2,1]$。

5.8 求外积 $[3,2]\times[2,1]$ 的分解，并计算相应的维数。

5.9 求 S_4 在表示 $[3,1]$ 中的 Young 基，并得出相应的表示矩阵。

5.10 证明 S_4 与点群 T_d 同构。

第6章 Lie 群

到目前为止讨论的都是有限群或者分立群。本章开始讨论另一类在物理上有广泛应用的连续群，即 Lie 群。本书将主要讨论紧致 Lie 群。

Lie 群的一般理论涉及拓扑和微分几何，超出了本书的范围，因此这里将不作过多的讨论，有兴趣的读者可以参阅有关专著。

通常物理上感兴趣的连续群都是矩阵群，可以将矩阵群看成是某个向量空间上的线性变换群。这些连续群常常称为线性 Lie 群或经典 Lie 群。

6.1 Lie 群的定义

Lie 群 G 具有三种数学结构：

1. G 是群，所以群的四个公理都必须满足，这是 Lie 群的代数性质；
2. G 是拓扑空间，因而具有连续性、连通性和紧致性等拓扑性质；
3. G 是解析流形，因此群的操作都是解析的。

根据强调的侧重点不同，Lie 群可以用不同的方式等价地定义。两个 Lie 群可以具有不同的拓扑性质，即使它们具有相同的代数性质。我们不仅需要讨论 Lie 群的局部性质，也需要讨论 Lie 群的整体性质。本书将主要讨论 Lie 群的代数性质，对 Lie 群的拓扑性质和解析性质不作过多的讨论。

物理上比较感兴趣的重要 Lie 群是所谓的线性 Lie 群，它可以用向量空间的线性变换或非奇异矩阵来定义。

Lie 群的群元可以用一个或多个连续参数来表征，如 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r$，这些参数都有确定的定义区间。我们有如下定义。

定义 6.1 设 G 是群，并存在映射

$$g: K \times K \times \cdots \times K = K^r \to G,$$

使得

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r) = g(\boldsymbol{\alpha}) \in G,$$

其中 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r) \in K \times K \times \cdots \times K = K^r$，而 $K = \mathbf{R}$ (或 $K = \mathbf{C}$) 为实数域 (或复数域)。如果群的操作，如映射

$$g, g' \in G \mapsto gg' \in G, \quad g \in G \mapsto g^{-1} \in G$$

等都是解析的，则 G 是一个 Lie 群。

Lie 群独立参数的数目称为 Lie 群的维数。可以选择参数使得 $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{0}$ 对应 Lie 群的单位元，$g(\mathbf{0}) = e$。

由于 G 是群，因此在乘法下封闭，即

$$g(\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\beta}) = g(\boldsymbol{\gamma}) = g[f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})],$$

其中 $\boldsymbol{\gamma} = f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ 是 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$ 的连续可微函数，它由 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$ 及群的乘法决定。

群的乘法一般不可交换，故

$$f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \neq f(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha})。$$

由 $g(\mathbf{0}) = e$ 及

$$g(\boldsymbol{\alpha})g(\mathbf{0}) = g(\mathbf{0})g(\boldsymbol{\alpha}) = g(\boldsymbol{\alpha}),$$

可得

$$f(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{0}) = f(\mathbf{0}, \boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\alpha}。$$

记 $g(\alpha)^{-1} = g(\alpha^{-1})$，则进一步由

$$g(\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\alpha})^{-1} = g(\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\alpha}^{-1}) = g(\boldsymbol{\alpha}^{-1})g(\boldsymbol{\alpha}) = e = g(\mathbf{0}),$$

可得

$$f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}^{-1}) = f(\boldsymbol{\alpha}^{-1}, \boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{0}。$$

再由结合律

$$g(\boldsymbol{\alpha})[g(\boldsymbol{\beta})g(\boldsymbol{\gamma})] = [g(\boldsymbol{\alpha})g(\boldsymbol{\beta})]g(\boldsymbol{\gamma}),$$

可得

$$f[\boldsymbol{\alpha}, f(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma})] = f[f(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}), \boldsymbol{\gamma})]。$$

通常 Lie 群可以用具有 r 个参数的 $n \times n$ 矩阵表示，这些矩阵可以看成是 n 维空间的线性变换。

下面将给出一些具体例子来说明什么是 Lie 群。

例 6.1 实一维空间的标度变换

$$x' = \alpha x,\ \alpha \neq 0。$$

显然，变换的全体构成群，这是单参数 Lie 群，单位元为 $\alpha = 1$，逆元为 $\alpha^{-1} = 1/\alpha$，由连续变换

$$x' = \beta x,\ x'' = \alpha x' = \alpha\beta x = \gamma x,$$

可得群的乘法

$$\gamma = f(\alpha, \beta) = \alpha\beta = \beta\alpha。$$

因此 γ 是 α, β 的解析函数。易见这是 Abel 群，这实际上就是第 1 章讨论的非零实数乘法群。

例 6.2 实一维空间非齐次线性变换

$$x' = \alpha_1 x + \alpha_2,\ \alpha_1 \neq 0。$$

这是两个参数的 Lie 群，其单位元为

$$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2) = (1, 0),$$

逆元为

$$\alpha^{-1}=(\alpha_1,\alpha_2)^{-1}=\left(\frac{1}{\alpha_1},-\frac{\alpha_2}{\alpha_1}\right)。$$

由连续变换

$$x'=\beta_1 x+\beta_2, x''=\alpha_1 x'+\alpha_2=\ \alpha_1\beta_1 x+\alpha_1\beta_2+\alpha_2,$$

可得群的乘法

$$\gamma=(\gamma_1,\gamma_2)=f(\alpha,\beta)=(\alpha_1\beta_1,\alpha_1\beta_2+\alpha_2)。$$

可见，γ 也是 α,β 的解析函数。易见这是非 Abel 群。这个变换也可以写成 2×2 的矩阵形式

$$\begin{pmatrix}x\\1\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}x'\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha_1&\alpha_2\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\1\end{pmatrix}。$$

例 6.3 二维实空间一般线性变换群定义为

$$\begin{cases}x_1'=\alpha_{11}x_1+\alpha_{12}x_2,\\x_2'=\alpha_{21}x_1+\alpha_{22}x_2,\end{cases}$$

其中

$$\det\begin{pmatrix}\alpha_{11}&\alpha_{12}\\\alpha_{21}&\alpha_{22}\end{pmatrix}\neq 0。$$

用 $\mathrm{GL}(2,\mathbf{R})$ 表示，这是 4 参数 Lie 群。如果记

$$\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}\alpha_{11}&\alpha_{12}\\\alpha_{21}&\alpha_{22}\end{pmatrix},$$

则可将变换写成 2×2 矩阵形式

$$\boldsymbol{X}'=\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{X},\quad \det\boldsymbol{\alpha}\neq 0,$$

其中单位元 $e=\boldsymbol{I}$，即为单位矩阵，逆元即为相应的逆矩阵。群的乘法正是通常的矩阵乘法。由

$$\boldsymbol{X}'=\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{X}''=\boldsymbol{\alpha}X'=\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{\gamma}\boldsymbol{X},$$

可得

$$\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}。$$

由于矩阵乘法一般不可对易，故 $\mathrm{GL}(2,\mathbf{R})$ 是非 Abel 群。这一过程很容易推广到 n 维空间。

例 6.4 类似地可定义 n 维空间的一般线性变换群。令

$$\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_n\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}\alpha_{11}&\alpha_{12}&\cdots&\alpha_{1n}\\\alpha_{21}&\alpha_{22}&\cdots&\alpha_{2n}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\\alpha_{n1}&\alpha_{n2}&\cdots&\alpha_{nn}\end{pmatrix},$$

则一般线性变换可以写成 $n\times n$ 矩阵形式

$$\boldsymbol{X}' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{X}, \quad \det\boldsymbol{\alpha} \neq 0。$$

一般将其记为 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 或 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{R})$，显然，这是非 Abel 群，单位元为 $n\times n$ 单位阵，逆元即为相应的逆矩阵。$n\times n$ 矩阵一共有 n^2 个矩阵元。所以 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 具有 $2n^2$ 个实参数，而 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{R})$ 具有 n^2 个实参数。

例 6.5 n 维空间的特殊线性变换群定义为

$$\boldsymbol{X}' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{X}, \quad \det\boldsymbol{\alpha} = 1。$$

由 $\det(\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}) = \det\boldsymbol{\alpha}\det\boldsymbol{\beta}$，可知行列式为 1 的变换全体构成群，记为 $\mathrm{SL}(n,\mathbf{C})$ 或 $\mathrm{SL}(n,\mathbf{R})$，如果 $\boldsymbol{\alpha}$ 是复矩阵，则条件 $\det\boldsymbol{\alpha} = 1$ 给出两个方程，因此 $\mathrm{SL}(n,\mathbf{C})$ 具有 $2n^2-2$ 个实参数。类似地，$\mathrm{SL}(n,\mathbf{R})$ 具有 n^2-1 个实参数。显然有子群关系

$$\mathrm{SL}(n,\mathbf{R}) \subset \mathrm{SL}(n,\mathbf{C}) \subset \mathrm{GL}(n,\mathbf{C}),$$

$$\mathrm{SL}(n,\mathbf{R}) \subset \mathrm{GL}(n,\mathbf{R}) \subset \mathrm{GL}(n,\mathbf{C})。$$

$\mathrm{SL}(2,\mathbf{C})$ 群和 Lorentz 群有密切关系。

例 6.6 幺正群。定义复空间的幺正变换

$$\boldsymbol{Z}' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{Z}, \quad \boldsymbol{\alpha}^\dagger\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{I}, \tag{6.1}$$

其中

$$\boldsymbol{Z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}$$

为复 n 维空间位矢。由

$$\boldsymbol{\alpha}^\dagger\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{I}, \quad \boldsymbol{\beta}^\dagger\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{I},$$

可得

$$(\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta})^\dagger(\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\beta}^\dagger\boldsymbol{\alpha}^\dagger\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}^\dagger\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{I}。$$

因此，幺正变换 (或幺正矩阵) 的全体构成群，称为幺正群，记为 $\mathrm{U}(n,\mathbf{C}) = \mathrm{U}(n)$。由幺正条件可得

$$(\boldsymbol{\alpha}^\dagger\boldsymbol{\alpha})_{ii} = \sum_{j=1}^{n}\alpha_{ij}^\dagger\alpha_{ji} = \sum_{j=1}^{n}\alpha_{ji}^*\alpha_{ji} = \sum_{j=1}^{n}|\alpha_{ji}|^2 = 1, \quad i = 1,2,\cdots,n, \tag{6.2}$$

$$(\boldsymbol{\alpha}^\dagger\boldsymbol{\alpha})_{ij} = \sum_{k=1}^{n}\alpha_{ik}^\dagger\alpha_{kj} = \sum_{k=1}^{n}\alpha_{ki}^*\alpha_{kj} = 0, \quad i,j = 1,2,\cdots,n,\ i \neq j。 \tag{6.3}$$

一共有 n^2 个约束方程，因此独立参数的个数为

$$2n^2 - n^2 = n^2。$$

由幺正条件 $\boldsymbol{\alpha}^\dagger\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{I}$，可得幺正矩阵的行列式为

$$\det(\boldsymbol{\alpha}^\dagger\boldsymbol{\alpha}) = |\det\boldsymbol{\alpha}|^2 = 1,$$

即

$$\det \boldsymbol{\alpha} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}。$$

进一步由约束条件 (6.2) 可得

$$|\alpha_{ij}|^2 \leqslant 1, \quad i,j = 1,2,\cdots,n。$$

上式表明，群参数是在一个有限的闭区间内取值。具有这一性质的群称为紧致群。因此 U(n) 群是紧致的，但 SL($n,\mathbf{C}$) 和 SL($n,\mathbf{R}$) 是非紧致的。

取变换 (6.1) 的 Hermite 共轭，得

$$\boldsymbol{Z}'^{\dagger} = \boldsymbol{Z}^{\dagger}\boldsymbol{\alpha}^{\dagger},$$

两式相乘后得

$$\boldsymbol{Z}'^{\dagger}\boldsymbol{Z}' = \boldsymbol{Z}^{\dagger}\boldsymbol{\alpha}^{\dagger}\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{Z}^{\dagger}\boldsymbol{Z},$$

展开后即

$$|z'_1|^2 + |z'_2|^2 + \cdots + |z'_n|^2 = |z_1|^2 + |z_2|^2 + \cdots + |z_n|^2。$$

因此，幺正群 U(n) 是保持复 n 维空间向量模长平方不变的变换群。

U(n) 群的独立参数为 n^2 个。如果加上行列式为 1 的条件，则得到特殊幺正群 SU(n)，条件

$$\det \boldsymbol{\alpha} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} = 1$$

给出了一个约束 $\delta = 0$，使其独立参数减少为 $n^2 - 1$ 个。

U(1), SU(2), SU(3) 群等都是粒子物理中最常见的 Lie 群。其中 U(1) 群是电磁相互作用理论的对称群，SU(2) × U(1) 群是弱电统一理论的对称群，而 SU(3) 群则是强相互作用理论的对称群。

例 6.7 定义 n 维复空间中向量长度的平方为

$$\|\boldsymbol{z}\|^2 = |z_1|^2 + \cdots + |z_p|^2 - |z_{p+1}|^2 - \cdots - |z_{p+q}|^2 = \sum_{i,j=1}^{n=p+q} g_{ij} z_i^* z_j,$$

其中引进了度规张量 g_{ij}，其定义为

$$g_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j = 1,2,\cdots,p, \\ -1, & i = j = p+1, p+2, \cdots, p+q = n, \\ 0, & i \neq j。 \end{cases}$$

则所有保持 $\|\boldsymbol{z}\|^2$ 不变的变换全体构成群，称为 U(p,q) 群。由

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{z}'\|^2 &= \sum_{i,j=1}^{n} g_{ij} z'^*_i z'_j = \sum_{i,j} g_{ij} \sum_{l,m} \alpha^*_{il} z^*_l \alpha_{jm} z_m \\ &= \sum_{i,j,l,m} \alpha^{\dagger}_{li} g_{ij} \alpha_{jm} z^*_l z_m = \sum_{l,m} (\boldsymbol{\alpha}^{\dagger}\boldsymbol{g}\boldsymbol{\alpha})_{lm} z^*_l z_m \end{aligned}$$

$$= \sum_{l,m} g_{lm} z_l^* z_m = \|\boldsymbol{z}\|^2,$$

可得约束条件

$$\boldsymbol{\alpha}^\dagger \boldsymbol{g} \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{g}。$$

容易证明满足这一条件的变换矩阵

$$\boldsymbol{Z}' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{Z},\ \boldsymbol{\alpha}^\dagger \boldsymbol{g} \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{g}$$

的全体构成群，且有

$$(\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta})^\dagger \boldsymbol{g} (\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\beta}^\dagger \boldsymbol{\alpha}^\dagger \boldsymbol{g} \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}^\dagger \boldsymbol{g} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{g}。$$

如果再附加条件 $\det \boldsymbol{\alpha} = 1$，就得到 $\mathrm{SU}(p,q)$。

例 6.8 实正交群 $\mathrm{O}(n,\mathbf{R}) = \mathrm{O}(n)$。这是所有 $n \times n$ 实正交矩阵构成的群，即

$$\boldsymbol{X}' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{X},\quad \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{I}。$$

由此可以得到

$$(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha})_{ii} = \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{\alpha}_{ij}^{\mathrm{T}} \alpha_{ji} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_{ji}^2 = 1,\ \ i = 1, 2, \cdots, n,$$

$$(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha})_{ij} = \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{\alpha}_{ik}^{\mathrm{T}} \alpha_{kj} = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ki} \alpha_{kj} = 0,\ \ i, j = 1, 2, \cdots, n, i \neq j。$$

由于 $\boldsymbol{\alpha}$ 具有 n^2 个矩阵元，上述方程给出 $n + n(n-1)/2 = n(n+1)/2$ 个约束条件，故独立参数的个数为

$$n^2 - \frac{1}{2} n(n+1) = \frac{1}{2} n(n-1)。$$

容易证明实正交矩阵的全体构成群，即

$$(\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta})^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{I}。$$

对正交条件 $\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{I}$，取行列式后得

$$\det(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha}) = (\det \boldsymbol{\alpha})^2 = 1,$$

即

$$\det \boldsymbol{\alpha} = \pm 1。$$

因此正交群 $\mathrm{O}(n)$ 有两个不连通的分支，一个分支满足 $\det \boldsymbol{\alpha} = 1$，另一个分支满足 $\det \boldsymbol{\alpha} = -1$。将满足条件 $\det \boldsymbol{\alpha} = 1$ 的分支记为 $\mathrm{SO}(n)$，这是 $\mathrm{O}(n)$ 群的子群。注意 $\mathrm{SO}(n)$ 群的独立参数个数和 $\mathrm{O}(n)$ 群是相同的，行列式等于 1 并没有给出新的约束条件。$\mathrm{SO}(3)$ 群实际上就是我们熟悉的三维空间转动群。

由 $\boldsymbol{X}' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{X}$，可得

$$\boldsymbol{X}'^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}' = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X},$$

即

$$x'^2_1+x'^2_2+\cdots+x'^2_n=x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2。$$

因此，正交群 $\mathrm{O}(n)$ 是保持实 n 维空间向量模长平方不变的变换群。

类似地，保持

$$x_1^2+\cdots+x_p^2-x_{p+1}^2-\cdots-x_{p+q}^2$$

不变的变换构成群 $\mathrm{O}(p,q)$。Lorentz 群即为 $\mathrm{O}(3,1)$ 群。如果要求 $\det\boldsymbol{\alpha}=1$，则得 $\mathrm{SO}(p,q)$ 群。容易看到，$\mathrm{O}(n)$ 群是紧致的，而 $\mathrm{O}(p,q)$ 群是非紧致的。

例 6.9 辛群 $\mathrm{Sp}(2n,\mathbf{C})$。定义一个 $2n$ 维空间中的 $2n\times 2n$ 反对称非奇异度规张量

$$\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{g},\quad \det\boldsymbol{g}=1,$$

取

$$\boldsymbol{g}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{0} & \boldsymbol{I}_n\\ -\boldsymbol{I}_n & \boldsymbol{0}\end{pmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{I}_n$ 为 $n\times n$ 单位阵，则保持双线性形式

$$\sum_{i,j=1}^{2n}g_{ij}x^iy^j=\sum_{i,j=1}^{2n}g_{ij}x'^iy'^j$$

不变的变换全体构成群，称为辛群，记为 $\mathrm{Sp}\,(2n,\mathbf{C})$。由

$$\sum_{i,j=1}^{2n}g_{ij}x^iy^j=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{X}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{Y}'=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{Y},$$

得约束条件

$$\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{g}。\tag{6.4}$$

取行列式后得

$$\det\boldsymbol{\alpha}=\pm 1。$$

可以证明，实际上有

$$\det\boldsymbol{\alpha}=1。$$

为此，构造一个在 $\mathrm{Sp}\,(2n,\mathbf{C})$ 作用下不变的量

$$\begin{aligned}T&=\varepsilon_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_{2n}}\boldsymbol{X}^{\mu_1\,\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}^{\mu_2}\cdots\boldsymbol{X}^{\mu_{2n-1}\,\mathrm{T}}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}^{\mu_{2n}}\\&=\varepsilon_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_{2n}}g_{\nu_1\nu_2}x^{\mu_1\nu_1}x^{\mu_2\nu_2}\cdots g_{\nu_{2n-1}\nu_{2n}}x^{\mu_{2n-1}\nu_{2n-1}}x^{\mu_{2n}\nu_{2n}}\\&=g_{\nu_1\nu_2}\cdots g_{\nu_{2n-1}\nu_{2n}}\varepsilon_{\mu_1\mu_2\cdots\mu_{2n}}x^{\mu_1\nu_1}x^{\mu_2\nu_2}\cdots x^{\mu_{2n-1}\nu_{2n-1}}x^{\mu_{2n}\nu_{2n}},\end{aligned}$$

其中 $x^{\mu_j\nu_j}$ 表示向量 $\boldsymbol{X}^{\mu_j}$ 的第 ν_j 个分量。注意到上式右边实际上是行列式

$$T=g_{\nu_1\nu_2}\cdots g_{\nu_{2n-1}\nu_{2n}}\varepsilon^{\nu_1\nu_2\cdots\nu_{2n}}\det\boldsymbol{X}=2^n n!\det\boldsymbol{X},$$

其中 $\boldsymbol{X}$ 是由向量 $\boldsymbol{X}^{\mu_i}$ 排成的矩阵。因为 T 在 $\mathrm{Sp}\,(2n,\mathbf{C})$ 群的变换下不变，即

$$T = 2^n n! \det \boldsymbol{X} = 2^n n! \det(\alpha \boldsymbol{X}),$$

故得到

$$\det \boldsymbol{\alpha} = 1。$$

由于 $\boldsymbol{g}$ 反对称，因而 $\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} g \boldsymbol{\alpha}$ 也反对称，即

$$(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g} \boldsymbol{\alpha})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g} \boldsymbol{\alpha}。$$

故由方程 (6.4) 可得 $2n(2n-1)/2$ 个复方程，或 $2n(2n-1)$ 个实约束方程。矩阵 $\boldsymbol{\alpha}$ 是 $2n \times 2n$ 复矩阵，因此独立实参数的个数为

$$2(2n)^2 - 2n(2n-1) = 2n(2n+1)。$$

容易看到，如果是实辛群 $\mathrm{Sp}(2n, \mathbf{R})$，则独立参数的个数为

$$(2n)^2 - n(2n-1) = n(2n+1)。$$

显然 $\mathrm{Sp}(2n, \mathbf{C})$ 群是紧致的。如果我们同时还要求是幺正变换，即要求

$$\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g} \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{g}, \quad \boldsymbol{\alpha}^{\dagger} \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{I},$$

则得到的群称为幺正辛群，记为 $\mathrm{USp}(2n)$。它也是紧致 Lie 群，易见 $\mathrm{USp}(2) = \mathrm{SU}(2)$。

以上所介绍的群 $\mathrm{SO}(n), \mathrm{SU}(n), \mathrm{Sp}(2n)$ 等，都是所谓的经典 Lie 群。其他的 G_2, F_4, E_6, E_7, E_8 则称为例外群，它们的定义可参考相关书籍。例外群在粒子物理中同样有广泛的应用。

6.2 SO(3) 群和 SU(2) 群

首先考虑二维空间的转动群 SO(2)。二维空间的转动变换可以写成

$$\begin{cases} x_1' = x_1 \cos\phi - x_2 \sin\phi, \\ x_2' = x_1 \sin\phi + x_2 \cos\phi。 \end{cases}$$

化为矩阵形式，有

$$\boldsymbol{X}' = \begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{R}(\phi) \boldsymbol{X}。$$

变换的全体构成了最简单的 Lie 群，即 SO(2) 群。显然这一变换保持向量长度平方不变，即有

$$x_1'^2 + x_2'^2 = (x_1 \cos\phi - x_2 \sin\phi)^2 + (x_1 \sin\phi + x_2 \cos\phi)^2 = x_1^2 + x_2^2。$$

这个变换实际上是 x_1, x_2 平面上的一个转动。容易验证

$$\boldsymbol{R}(\phi_1)\boldsymbol{R}(\phi_2) = \begin{pmatrix} \cos\phi_1 & -\sin\phi_1 \\ \sin\phi_1 & \cos\phi_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\phi_2 & -\sin\phi_2 \\ \sin\phi_2 & \cos\phi_2 \end{pmatrix}$$

$$
\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} \cos(\phi_1+\phi_2) & -\sin(\phi_1+\phi_2) \\ \sin(\phi_1+\phi_2) & \cos(\phi_1+\phi_2) \end{pmatrix} \\
&= \boldsymbol{R}(\phi_1+\phi_2),
\end{aligned}
$$

并有

$$
\boldsymbol{R}^{-1}(\phi) = \boldsymbol{R}(-\phi),\quad \boldsymbol{R}(0) = \boldsymbol{I},\quad \det \boldsymbol{R}(\phi) = 1。
$$

因此 SO(2) 群是 Abel 群。由于 $\boldsymbol{R}(\phi) = \boldsymbol{R}(\phi + 2\pi)$，故可以将群参数取值范围限制为

$$
0 \leqslant \phi < 2\pi,
$$

这与单位圆周 S^1 上的点一一对应，因此，SO(2) 群的群流形为 S^1。

现在将讨论推广到三维空间。考虑变换

$$
\boldsymbol{X}' = \begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{X},
$$

分量形式为

$$
x_i' = a_{ij}x_j。
$$

条件

$$
x_1'^2 + x_2'^2 + x_3'^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2
$$

给出了 $\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{I}$。对纯转动有 $\det \boldsymbol{R} = 1$。如果包括空间反演，则有 $\det \boldsymbol{R} = -1$。

所有变换全体构成正交群 O(3)，纯转动构成特殊正交群 SO(3)。SO(3) 有 3 个独立参数。

可以用不同的方式来对 SO(3) 群参数化。例如，可以将一个转动按如下方式分解，先绕 x 轴转动 α_1 角，然后绕 y 轴转动 α_2 角，最后绕 z 轴转动 α_3 角。因此有

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{R}(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3) \\
&= \boldsymbol{R}_z(\alpha_3)\boldsymbol{R}_y(\alpha_2)\boldsymbol{R}_x(\alpha_1) \\
&= \begin{pmatrix} \cos\alpha_3 & -\sin\alpha_3 & 0 \\ \sin\alpha_3 & \cos\alpha_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\alpha_2 & 0 & \sin\alpha_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\alpha_2 & 0 & \cos\alpha_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha_1 & -\sin\alpha_1 \\ 0 & \sin\alpha_1 & \cos\alpha_1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\alpha_2\cos\alpha_3 & -\cos\alpha_1\sin\alpha_3+\sin\alpha_1\sin\alpha_2\cos\alpha_3 & \sin\alpha_1\sin\alpha_3+\cos\alpha_1\sin\alpha_2\cos\alpha_3 \\ \cos\alpha_2\sin\alpha_3 & \cos\alpha_1\cos\alpha_3+\sin\alpha_1\sin\alpha_2\sin\alpha_3 & -\sin\alpha_1\cos\alpha_3+\cos\alpha_1\sin\alpha_2\sin\alpha_3 \\ -\sin\alpha_2 & \sin\alpha_1\cos\alpha_2 & \cos\alpha_1\cos\alpha_2 \end{pmatrix},
\end{aligned}
$$

其中 $-\pi \leqslant \alpha_1, \alpha_2 < \pi$, $-\pi/2 \leqslant \alpha_3 < \pi/2$。

还可以用 3 个 Euler 角 α, β, γ 来参数化 SO(3) 群，这可以用如下方式进行。

首先绕 z 轴转动 α 角，将 (x, y, z) 转到 (x', y', z')，然后绕 y' 轴转动 β 角，将 (x', y', z') 转到 (x'', y'', z'')，最后绕 z'' 轴转动 γ 角将 (x'', y'', z'') 转到最终位置完成转动。因此有

$$\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\boldsymbol{R}_{z''}(\gamma)\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)\boldsymbol{R}_z(\alpha),$$

其中 $\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)$ 可以表示为

$$\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)=\boldsymbol{R}_z(\alpha)\boldsymbol{R}_y(\beta)\boldsymbol{R}_z(\alpha)^{-1},$$

而 $\boldsymbol{R}_{z''}(\gamma)$ 又可以表示为

$$\boldsymbol{R}_{z''}(\gamma)=\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)\boldsymbol{R}_z(\gamma)\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)^{-1}。$$

合并上述表达式后得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)&=\boldsymbol{R}_{z''}(\gamma)\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)\boldsymbol{R}_z(\alpha)\\&=\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)\boldsymbol{R}_z(\gamma)\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)^{-1}\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)\boldsymbol{R}_z(\alpha)=\boldsymbol{R}_{y'}(\beta)\boldsymbol{R}_z(\gamma)\boldsymbol{R}_z(\alpha)\\&=\boldsymbol{R}_z(\alpha)\boldsymbol{R}_y(\beta)\boldsymbol{R}_z(\alpha)^{-1}\boldsymbol{R}_z(\gamma)\boldsymbol{R}_z(\alpha)=\boldsymbol{R}_z(\alpha)\boldsymbol{R}_y(\beta)\boldsymbol{R}_z(\gamma)。\end{aligned}\tag{6.5}$$

以上用到了 $\boldsymbol{R}_z(\gamma)$ 和 $\boldsymbol{R}_z(\alpha)$ 对易的事实。因此，利用 Euler 角可以将转动表示为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)&=\boldsymbol{R}_z(\alpha)\boldsymbol{R}_y(\beta)\boldsymbol{R}_z(\gamma)\\&=\begin{pmatrix}\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma-\sin\alpha\cos\gamma & \cos\alpha\sin\beta\\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma+\cos\alpha\sin\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma+\cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta\\ -\sin\alpha\cos\gamma & \sin\beta\sin\gamma & \cos\beta\end{pmatrix},\end{aligned}$$

其中 $0\leqslant\alpha,\gamma<2\pi,0\leqslant\beta<\pi$。

一个转动也可以用转轴 $\boldsymbol{n}$ 及绕转轴转过的角度 ϕ 来描写，而转轴 $\boldsymbol{n}$ 可以用两个方向角如极角和方位角 (θ,ψ) 来确定，因此一个转动也可以用参数 (θ,ψ,ϕ) 来描写，可以表示为 $\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)$。

如果 $\boldsymbol{R}$ 是将转轴 $\boldsymbol{n}$ 转到 $\boldsymbol{n}'$ 的一个转动，即

$$\boldsymbol{n}'=\boldsymbol{R}\boldsymbol{n},$$

则有

$$\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{n}'}(\phi)=\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)\boldsymbol{R}^{-1}。$$

这意味着 SO(3) 群中凡是绕某一轴转动相同角度 ϕ 的操作都属于同一类，这为计算 SO(3) 群的特征标提供了很大的方便。

下面来讨论 SU(2) 群。群元的一般形式可以写成

$$\boldsymbol{g}=\begin{pmatrix}a & b\\ -b^* & a^*\end{pmatrix},\quad |a|^2+|b|^2=1,$$

其中 a,b 是复数。约束条件使独立实参数的个数减少为 3 个。

SU(2) 群可以看成二维复空间的幺正变换

$$\boldsymbol{U}'=\boldsymbol{g}\boldsymbol{U}\mapsto\begin{pmatrix}u_1'\\ u_2'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a & b\\ -b^* & a^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}au_1+bu_2\\ -b^*u_1+a^*u_2\end{pmatrix},\quad \det\boldsymbol{g}=1。$$

由幺正条件 $\boldsymbol{g}^{\dagger}\boldsymbol{g}=\boldsymbol{I}$，可得

$$|u_1'|^2+|u_2'|^2=|u_1|^2+|u_2|^2。$$

如果令

$$\boldsymbol{g}=\begin{pmatrix} x_0-\mathrm{i}x_3 & x_1+\mathrm{i}x_2 \\ -x_1+\mathrm{i}x_2 & x_0+\mathrm{i}x_3 \end{pmatrix},$$

则条件 $\det\boldsymbol{g}=1$ 给出

$$x_0^2+x_1^2+x_2^2+x_3^2=1。$$

这是四维空间单位球的表面，即三维球面 S^3。这是 SU(2) 群的群流形。

容易看到，SU(1) 群是平凡的，而 U(1) 群实际上就是模为 1 的复数集合。

6.3 无穷小生成元和无穷小算符

设 G 是一个 r 参数 Lie 群，群元可以写成

$$g(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r)=g(\boldsymbol{\alpha})\in G,\quad \boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r)\in\mathbf{R}^r\text{(或 }\mathbf{C}^r)。$$

由于群元 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 是 $\boldsymbol{\alpha}$ 的解析函数，因而可以在 $\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{0}$ 附近展开成 Taylor 级数 (已经取参数使 $g(\mathbf{0})=e=\boldsymbol{I}$)，有

$$g(\boldsymbol{\alpha})=g(\mathbf{0})+\sum_{i=1}^{r}\alpha_i\frac{\partial g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial\alpha_i}\bigg|_{\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{0}}+\frac{1}{2!}\sum_{i,j=1}^{r}\alpha_i\alpha_j\frac{\partial^2 g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial\alpha_i\partial\alpha_j}\bigg|_{\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{0}}+\cdots$$

$$=\boldsymbol{I}+\alpha_i\boldsymbol{X}_i+\frac{1}{2}\alpha_i\alpha_j\boldsymbol{X}_{ij}+\cdots,$$

其中

$$\boldsymbol{X}_i=\frac{\partial g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial\alpha_i}\bigg|_{\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{0}},$$

称为 Lie 群的无穷小生成元，这是一个非常重要的量。而

$$\boldsymbol{X}_{ij}=\frac{\partial^2 g(\boldsymbol{\alpha})}{\partial\alpha_i\partial\alpha_j}\bigg|_{\boldsymbol{\alpha}=\mathbf{0}}。$$

由此可得逆元的展开

$$g(\boldsymbol{\alpha})^{-1}=\boldsymbol{I}-\alpha_i\boldsymbol{X}_i+\alpha_i\alpha_j\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_j-\frac{1}{2}\alpha_i\alpha_j\boldsymbol{X}_{ij}+\cdots。$$

考虑下列乘积并保留到参数的平方项，得到

$$g(\boldsymbol{\beta})^{-1}g(\boldsymbol{\gamma})^{-1}g(\boldsymbol{\beta})g(\boldsymbol{\gamma})$$

$$=\left[\boldsymbol{I}-\beta_i\boldsymbol{X}_i+\beta_i\beta_j\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_j-\frac{1}{2}\beta_i\beta_j\boldsymbol{X}_{ij}+\cdots\right]\left[\boldsymbol{I}-\gamma_k\boldsymbol{X}_k+\gamma_k\gamma_l\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{X}_l-\frac{1}{2}\gamma_k\gamma_l\boldsymbol{X}_{kl}+\cdots\right]$$

$$\cdot\left[\boldsymbol{I}+\beta_m\boldsymbol{X}_m+\frac{1}{2}\beta_m\beta_n\boldsymbol{X}_{mn}+\cdots\right]\left[\boldsymbol{I}+\gamma_p\boldsymbol{X}_p+\frac{1}{2}\gamma_p\gamma_q\boldsymbol{X}_{pq}+\cdots\right]$$

$$=\left[\boldsymbol{I}-\beta_i\boldsymbol{X}_i-\gamma_j\boldsymbol{X}_j+(\beta_i\beta_j+\beta_i\gamma_j+\gamma_i\gamma_j)\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_j-\frac{1}{2}(\beta_i\beta_j+\gamma_i\gamma_j)\boldsymbol{X}_{ij}+\cdots\right]$$

$$\cdot\left[\boldsymbol{I}+\beta_k\boldsymbol{X}_k+\gamma_l\boldsymbol{X}_l+\beta_k\gamma_l\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{X}_l+\frac{1}{2}(\beta_k\beta_l+\gamma_k\gamma_l)\boldsymbol{X}_{kl}+\cdots\right]$$

$$=\boldsymbol{I}+\beta_i\gamma_j\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_j+\beta_k\gamma_l\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{X}_l-\beta_i\gamma_l\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_l-\beta_k\gamma_j\boldsymbol{X}_j\boldsymbol{X}_k+\cdots$$

$$=\boldsymbol{I}+\beta_i\gamma_j\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_j-\beta_i\gamma_j\boldsymbol{X}_j\boldsymbol{X}_i+\cdots$$

$$=\boldsymbol{I}+\beta_i\gamma_j[\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_j]+\cdots。$$

由封闭性，上式必须等于某个群元 $g(\boldsymbol{\alpha})$，即

$$g(\boldsymbol{\beta})^{-1}g(\boldsymbol{\gamma})^{-1}g(\boldsymbol{\beta})g(\boldsymbol{\gamma})=\boldsymbol{I}+\beta_i\gamma_j[\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_j]+\cdots=g(\boldsymbol{\alpha})=\boldsymbol{I}+\alpha_i\boldsymbol{X}_i+\cdots。$$

于是要求

$$[\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_j]=c_{ij}^k\boldsymbol{X}_k,\quad \alpha_k=c_{ij}^k\,\beta_i\gamma_j,$$

这里的 c_{ij}^k 称为 Lie 群的结构常数。

由无穷小生成元可以得到与单位元连通的群元一般表达式。首先考虑 SO(2) 的情形。由

$$\boldsymbol{g}(\phi)=\begin{pmatrix}\cos\phi & -\sin\phi\\ \sin\phi & \cos\phi\end{pmatrix},$$

可得无穷小生成元

$$\boldsymbol{X}=\left.\frac{\partial\boldsymbol{g}(\phi)}{\partial\phi}\right|_{\phi=0}=\begin{pmatrix}-\sin\phi & -\cos\phi\\ \cos\phi & -\sin\phi\end{pmatrix}_{\phi=0}=\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}。$$

当绕 z 轴转动一个很小的角度 $\delta\phi$ 时，有

$$\boldsymbol{g}(\delta\phi)\approx\boldsymbol{I}+\delta\phi\boldsymbol{X}+\cdots=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}+\delta\phi\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}+\cdots。$$

令

$$\delta\phi=\phi/N,\quad N\gg 1,$$

则有

$$\boldsymbol{g}(\phi)=\boldsymbol{g}\left(N\cdot\frac{\phi}{N}\right)=\boldsymbol{g}\left(\frac{\phi}{N}+\cdots+\frac{\phi}{N}\right)$$

$$=\boldsymbol{g}\left(\frac{\phi}{N}\right)\boldsymbol{g}\left(\frac{\phi}{N}\right)\cdots\boldsymbol{g}\left(\frac{\phi}{N}\right)\approx\left(\boldsymbol{I}+\frac{1}{N}\phi\boldsymbol{X}\right)^N。$$

取极限 $N\to\infty$，得

$$\boldsymbol{g}(\phi)=\lim_{N\to\infty}\left(\boldsymbol{I}+\frac{1}{N}\phi\boldsymbol{X}\right)^N=\exp(\phi\boldsymbol{X})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\phi\boldsymbol{X})^n。$$

由于

$$\boldsymbol{X}^2=\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}^2=-\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}=-\boldsymbol{I},\quad \boldsymbol{X}^3=-\boldsymbol{X},$$

故有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{g}(\phi)&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\phi\boldsymbol{X})^n=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(\phi\boldsymbol{X})^{2m}}{(2m)!}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\phi\boldsymbol{X})^{2m+1}}{(2m+1)!}\\&=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m\phi^{2m}}{(2m)!}\boldsymbol{I}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^m\phi^{2m+1}}{(2m+1)!}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{I}\cos\phi+\boldsymbol{X}\sin\phi\\&=\begin{pmatrix}\cos\phi&-\sin\phi\\\sin\phi&\cos\phi\end{pmatrix}。\end{aligned}$$

因此由无穷小生成元可以得到与单位元连通的群元的一般表达式。

实际上无穷小生成元可以用比较简单的方法得到。对于无穷小转动，可以将相应的群元展开到一阶小量，即

$$\boldsymbol{g}=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon},$$

其中 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为小量。由正交条件 $\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}=\boldsymbol{I}$，可得

$$(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon})=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{I}。$$

因此有

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{\varepsilon},$$

即矩阵 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 是反对称的。由于 SO(2) 是单参数 Lie 群，因此可以将矩阵 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 写成

$$\boldsymbol{\varepsilon}=\begin{pmatrix}0&-\alpha\\\alpha&0\end{pmatrix}=\alpha\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}。$$

因为只展开到参数的一阶项，只要将 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 写成

$$\boldsymbol{\varepsilon}=\alpha\boldsymbol{X},$$

就可以得到无穷小生成元

$$\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}。$$

一般地，对于一个 r 参数 Lie 群 G，当参数 $\delta\alpha=\alpha/N$ 很小时，有

$$\boldsymbol{g}(\delta\alpha)=\boldsymbol{I}+\sum_{i=1}^{r}\delta\alpha_i\boldsymbol{X}_i=\boldsymbol{I}+\frac{1}{N}\alpha_i\boldsymbol{X}_i,$$

取极限 $N\to\infty$，可得

$$\boldsymbol{g}(\alpha)=\lim_{N\to\infty}\left[\boldsymbol{g}\left(\frac{\alpha}{N}\right)\right]^N=\lim_{N\to\infty}\left(\boldsymbol{I}+\frac{1}{N}\alpha_i\boldsymbol{X}_i\right)^N=\exp(\alpha_i\boldsymbol{X}_i)。$$

取行列式后得

$$\det\boldsymbol{g}(\alpha)=\det[\exp(\alpha_i\boldsymbol{X}_i)]=\exp[\mathrm{Tr}\,(\alpha_i\boldsymbol{X}_i)]=\exp(\alpha_i\,\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{X}_i)。$$

因此条件 $\det\boldsymbol{g}=1$ 给出

$$\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{X}_i=0,\quad i=1,2,\cdots,r。$$

所以，幺模群的无穷小生成元都是无迹的。

对于 SO(3) 群，可以将无穷小形式写成

$$\boldsymbol{g}=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon},$$

由正交条件 $\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}=\boldsymbol{I}$ 即得

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{\varepsilon},$$

其中 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 是 3×3 的 3 参数反对称矩阵，因而可以写成

$$\boldsymbol{\varepsilon}=\begin{pmatrix}0&-\alpha_3&\alpha_2\\\alpha_3&0&-\alpha_1\\-\alpha_2&\alpha_1&0\end{pmatrix}=\alpha_1\boldsymbol{X}_1+\alpha_2\boldsymbol{X}_2+\alpha_3\boldsymbol{X}_3。$$

由此可得无穷小生成元

$$\boldsymbol{X}_1=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad\boldsymbol{X}_2=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\-1&0&0\end{pmatrix},\quad\boldsymbol{X}_3=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}。$$

直接计算给出对易关系

$$[\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2]=\boldsymbol{X}_1\boldsymbol{X}_2-\boldsymbol{X}_2\boldsymbol{X}_1=\boldsymbol{X}_3,\quad[\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{X}_3]=\boldsymbol{X}_1,\ [\boldsymbol{X}_3,\boldsymbol{X}_1]=\boldsymbol{X}_2。$$

上式可以统一写成

$$[\boldsymbol{X}_i,\boldsymbol{X}_j]=\varepsilon_{ijk}\boldsymbol{X}_k,$$

其中 ε_{ijk} 是三阶全反对称张量，满足

$$\varepsilon_{123}=1。$$

SO(3) 群的一般群元可以表示为

$$\boldsymbol{g}(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)=\exp\left(\alpha_1\boldsymbol{X}_1+\alpha_2\boldsymbol{X}_2+\alpha_3\boldsymbol{X}_3\right)。$$

现在考虑特殊幺正群 SU(2)，这也是 3 参数 Lie 群。如果令

$$\boldsymbol{g}=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon},$$

则由

$$g^\dagger = g^{-1} = I - \varepsilon, \quad g^\dagger g = I,$$

可得

$$\varepsilon^\dagger = -\varepsilon。$$

可以看到，ε 是 2×2 的 3 参数反 Hermite 矩阵，因此可以写成

$$\varepsilon = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{i}\alpha_3 & -\alpha_2 + \mathrm{i}\alpha_1 \\ \alpha_2 + \mathrm{i}\alpha_1 & -\mathrm{i}\alpha_3 \end{pmatrix} = \alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_2 + \alpha_3 X_3。$$

由此可以得到无穷小生成元

$$X_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_1,$$

$$X_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_2,$$

$$X_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_3,$$

其中 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 是前面定义的 3 个 Pauli 矩阵，满足

$$[\sigma_i, \sigma_j] = \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}。$$

容易验证下列对易关系：

$$[X_1, X_2] = X_1X_2 - X_2X_1 = \frac{1}{4}(\sigma_1\sigma_2 - \sigma_2\sigma_1) = \frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_3 = X_3,$$

$$[X_2, X_3] = X_1, \quad [X_3, X_1] = X_2。$$

上式可以统一写成

$$[X_i, X_j] = \varepsilon_{ijk}X_k。$$

与 SO(3) 群的无穷小生成元对易关系比较，可以看到 SO(3) 群和 SU(2) 群的无穷小生成元满足完全相同的对易关系，于是 SO(3) 群和 SU(2) 群对应的 Lie 代数是同构的。

最后，将 SU(2) 群的一般群元写成

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \exp(\alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_2 + \alpha_3 X_3) = \exp\left(\alpha_1'\sigma_1 + \alpha_2'\sigma_2 + \alpha_3'\sigma_3\right)。$$

对于 SU(3) 群，有 $n^2 - 1 = 3^2 - 1 = 8$ 个参数。由

$$g = I + \varepsilon, \quad g^\dagger = g^{-1} = I - \varepsilon,$$

以及

$$g^\dagger g = I,$$

可得

$$\varepsilon^{\dagger}=-\varepsilon。$$

可以将反 Hermite 矩阵 ε 写成

$$\varepsilon=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}\alpha_3+\alpha_8/\sqrt{3} & \alpha_1-\mathrm{i}\alpha_2 & \alpha_4-\mathrm{i}\alpha_5\\ \alpha_1+\mathrm{i}\alpha_2 & -\alpha_3+\alpha_8/\sqrt{3} & \alpha_6-\mathrm{i}\alpha_7\\ \alpha_4+\mathrm{i}\alpha_5 & \alpha_6+\mathrm{i}\alpha_7 & -2\alpha_8/\sqrt{3}\end{pmatrix}。$$

直接计算得

$$\boldsymbol{X}_1=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\lambda}_1,\quad \boldsymbol{X}_2=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\lambda}_2,$$

$$\boldsymbol{X}_3=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\lambda}_3,\quad \boldsymbol{X}_4=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\lambda}_4,$$

$$\boldsymbol{X}_5=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}0&0&-\mathrm{i}\\0&0&0\\\mathrm{i}&0&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\lambda}_5,\quad \boldsymbol{X}_6=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\lambda}_6,$$

$$\boldsymbol{X}_7=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\lambda}_7,\quad \boldsymbol{X}_8=\frac{\mathrm{i}}{2\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-2\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\lambda}_8,$$

这里的 $\boldsymbol{\lambda}_i(i=1,2,\cdots,8)$ 称为 Gell-Mann 矩阵，满足对易关系

$$[\boldsymbol{\lambda}_i,\boldsymbol{\lambda}_j]=2\mathrm{i}f_{ijk}\boldsymbol{\lambda}_k。$$

其中 f_{ijk} 称为 Gell-Mann 系数。可以将一般群元表示为

$$\boldsymbol{g}(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_8)=\exp(\alpha_1\boldsymbol{X}_1+\cdots+\alpha_8\boldsymbol{X}_8)=\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_1\boldsymbol{\lambda}_1+\cdots+\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_8\boldsymbol{\lambda}_8\right)。$$

现在考虑对空间坐标函数的变换。映射

$$g:\ \boldsymbol{r}\mapsto\boldsymbol{r}',\quad g\in G$$

将 n 维空间向量 $\boldsymbol{r}$ 变为 $\boldsymbol{r}'$。对无穷小变换 $\boldsymbol{g}=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon}$，有

$$\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{g}\boldsymbol{r}=(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon})\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{r},$$

其中 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 是具有 r 个小参数的 $n\times n$ 矩阵。上式可以写成

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}=\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{r},$$

或写成分量形式

$$\mathrm{d}x_i = \varepsilon_{ij}x_j。$$

将上式用小参数重新展开，改写成下述形式：

$$\mathrm{d}x_i = \varepsilon_{ij}x_j = \sum_{\lambda=1}^{r} U_{\lambda,i}(x)\delta\alpha_\lambda = U_{\lambda,i}(x)\delta\alpha_\lambda。 \tag{6.6}$$

定义算符

$$\hat{\boldsymbol{X}}_\lambda = \sum_{i=1}^{n} U_{\lambda,i}(x)\frac{\partial}{\partial x_i} = U_{\lambda,i}(x)\frac{\partial}{\partial x_i},$$

$\hat{\boldsymbol{X}}_\lambda$ 称为无穷小算符。可以证明无穷小算符满足下列对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{X}}_\mu, \hat{\boldsymbol{X}}_\nu] = c_{\mu\nu}^{\lambda}\hat{\boldsymbol{X}}_\lambda。$$

由定义得

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{X}}_\mu, \hat{\boldsymbol{X}}_\nu] &= \hat{\boldsymbol{X}}_\mu\hat{\boldsymbol{X}}_\nu - \hat{\boldsymbol{X}}_\nu\hat{\boldsymbol{X}}_\mu \\ &= U_{\mu,j}(x)\frac{\partial}{\partial x_j}\left(U_{\nu,i}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}\right) - U_{\nu,j}(x)\frac{\partial}{\partial x_j}\left(U_{\mu,i}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}\right) \\ &= \left(U_{\mu,j}(x)\frac{\partial U_{\nu,i}(x)}{\partial x_j} - U_{\nu,j}(x)\frac{\partial U_{\mu,i}(x)}{\partial x_j}\right)\frac{\partial}{\partial x_i}。\end{aligned} \tag{6.7}$$

将方程 (6.6) 写成

$$\mathrm{d}x_i = \varepsilon_{ij}x_j = U_{\lambda,i}(x)\delta\alpha_\lambda = U_{\lambda,i}(x)V_{\lambda\tau}(\alpha)\mathrm{d}\alpha_\tau, \tag{6.8}$$

微分后得

$$\frac{\partial x_i}{\partial \alpha_\tau} = U_{\lambda,i}(x)V_{\lambda\tau}(\alpha)。 \tag{6.9}$$

由可积条件

$$\frac{\partial^2 x_i}{\partial\alpha_\tau\partial\alpha_\rho} = \frac{\partial^2 x_i}{\partial\alpha_\rho\partial\alpha_\tau}, \tag{6.10}$$

即

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_\rho}[U_{\kappa,i}(x)V_{\kappa\tau}(\alpha)] = \frac{\partial}{\partial\alpha_\tau}[U_{\lambda,i}(x)V_{\lambda\rho}(\alpha)],$$

可得

$$\frac{\partial U_{\kappa,i}}{\partial x_j}\frac{\partial x_j}{\partial\alpha_\rho}V_{\kappa\tau}(\alpha) + U_{\kappa,i}\frac{\partial V_{\kappa\tau}(\alpha)}{\partial\alpha_\rho} = \frac{\partial U_{\lambda,i}}{\partial x_j}\frac{\partial x_j}{\partial\alpha_\tau}V_{\lambda\rho}(\alpha) + U_{\lambda,i}\frac{\partial V_{\lambda\rho}(\alpha)}{\partial\alpha_\tau}。$$

将方程 (6.9) 代入并整理后得

$$\left(\frac{\partial U_{\kappa,i}}{\partial x_j}U_{\lambda,j} - \frac{\partial U_{\lambda,i}}{\partial x_j}U_{\kappa,j}\right)V_{\lambda\rho}(\alpha)V_{\kappa\tau}(\alpha) = U_{\lambda,i}\left(\frac{\partial V_{\lambda\rho}(\alpha)}{\partial\alpha_\tau} - \frac{\partial V_{\lambda\tau}(\alpha)}{\partial\alpha_\rho}\right)。$$

两边乘以 $(\boldsymbol{V}^{-1}(\alpha))_{\rho\mu}(\boldsymbol{V}^{-1}(\alpha))_{\tau\nu}$，得

$$\left(\frac{\partial U_{\nu,i}}{\partial x_j}U_{\mu,j}-\frac{\partial U_{\mu,i}}{\partial x_j}U_{\nu,j}\right)=U_{\lambda,i}\left(\frac{\partial V_{\lambda\rho}(\alpha)}{\partial\alpha_\tau}-\frac{\partial V_{\lambda\tau}(\alpha)}{\partial\alpha_\rho}\right)(\boldsymbol{V}^{-1}(\alpha))_{\rho\mu}(\boldsymbol{V}^{-1}(\alpha))_{\tau\nu}=C^{\lambda}_{\mu\nu}U_{\lambda,i},\tag{6.11}$$

其中

$$C^{\lambda}_{\mu\nu}=\left(\frac{\partial V(\alpha)_{\lambda\rho}}{\partial\alpha_\tau}-\frac{\partial V(\alpha)_{\lambda\tau}}{\partial\alpha_\rho}\right)(\boldsymbol{V}^{-1}(\alpha))_{\rho\mu}(\boldsymbol{V}^{-1}(\alpha))_{\tau\nu}$$

为 Lie 群的结构常数。将上式代回方程 (6.7) 即得

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{X}}_\mu,\hat{\boldsymbol{X}}_\nu]&=\left(U_{\mu,j}(x)\frac{\partial U_{\nu,i}(x)}{\partial x_j}-U_{\nu,j}(x)\frac{\partial U_{\mu,i}(x)}{\partial x_j}\right)\frac{\partial}{\partial x_i}\\&=C^{\lambda}_{\mu\nu}U_{\lambda,i}\frac{\partial}{\partial x_i}=C^{\lambda}_{\mu\nu}\hat{\boldsymbol{X}}_\lambda。\end{aligned}$$

这个结果称为 Lie 定理。可以证明，$C^{\lambda}_{\mu\nu}$ 是常数，与参数 α 无关。因为方程 (6.11) 左边只与 x 有关，故

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_\tau}(C^{\lambda}_{\mu\nu}U_{\lambda,i})=\frac{\partial}{\partial\alpha_\tau}\left(\frac{\partial U_{\nu,i}}{\partial x_j}U_{\mu,j}-\frac{\partial U_{\mu,i}}{\partial x_j}U_{\nu,j}\right)=0,$$

此即

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_\tau}C^{\lambda}_{\mu\nu}=0。$$

给定函数 $F(\boldsymbol{r})$，设当进行坐标变换

$$\boldsymbol{r}\mapsto\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

时，有

$$F(\boldsymbol{r})\mapsto F(\boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{r})=F(\boldsymbol{r})+\mathrm{d}F(\boldsymbol{r}),$$

其中

$$\mathrm{d}F(\boldsymbol{r})=F(\boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{r})-F(\boldsymbol{r})=\frac{\partial F(\boldsymbol{r})}{\partial x_i}\mathrm{d}x_i=\frac{\partial F(\boldsymbol{r})}{\partial x_i}U_{\lambda,i}(x)\alpha_\lambda。$$

则利用无穷小算符的定义，得

$$\mathrm{d}F(\boldsymbol{r})=\alpha_\lambda U_{\lambda,i}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}F(\boldsymbol{r})=\alpha_\lambda\hat{\boldsymbol{X}}_\lambda F(\boldsymbol{r})。$$

因此有

$$F(\boldsymbol{r}')=F(\boldsymbol{r})+\mathrm{d}F(\boldsymbol{r})=(1+\alpha_\lambda\hat{\boldsymbol{X}}_\lambda)F(\boldsymbol{r})。$$

对于有限变换，则有

$$F(\boldsymbol{r}')=\exp(\alpha_\lambda\hat{\boldsymbol{X}}_\lambda)F(\boldsymbol{r})。$$

下面举例说明上述结论。

对 SO(2) 群，有

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}=\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{r}\to\mathrm{d}x_i=\varepsilon_{ij}x_j,$$

其中 ε 是单参数 2×2 反对称矩阵，具体表为

$$\varepsilon=\begin{pmatrix}0 & -\alpha\\ \alpha & 0\end{pmatrix}。$$

因此有

$$\begin{cases}\mathrm{d}x_1=-\alpha x_2=U_1(x)\alpha,\\ \mathrm{d}x_2=\alpha x_1=U_2(x)\alpha,\end{cases}$$

此即

$$U_1(x)=-x_2,\quad U_2(x)=x_1。$$

由此可得无穷小算符

$$\hat{\boldsymbol{X}}=U_i(x)\partial_i=x_1\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_1}=\mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{L}}_3。$$

算符 $\hat{\boldsymbol{L}}_3$ 正是角动量算符的第三分量。因此，平面上绕 z 轴的转动和角动量的 z 分量密切相关。事实上，如果体系具有平面转动不变，则体系角动量的 z 分量一定守恒。

对 SO(3) 群，由

$$\varepsilon=\begin{pmatrix}0 & -\alpha_3 & \alpha_2\\ \alpha_3 & 0 & -\alpha_1\\ -\alpha_2 & \alpha_1 & 0\end{pmatrix},$$

可得

$$\begin{cases}\mathrm{d}x_1=-\alpha_3x_2+\alpha_2x_3=U_{\lambda,1}(x)\alpha_\lambda,\\ \mathrm{d}x_2=\alpha_3x_1-\alpha_1x_3=U_{\lambda,2}(x)\alpha_\lambda,\\ \mathrm{d}x_3=-\alpha_2x_1+\alpha_1x_2=U_{\lambda,3}(x)\alpha_\lambda。\end{cases}$$

进一步可得

$$\begin{cases}U_{1,1}(x)=0,U_{2,1}(x)=x_3,U_{3,1}(x)=-x_2,\\ U_{1,2}(x)=-x_3,U_{2,2}(x)=0,U_{3,2}(x)=x_1,\\ U_{1,3}(x)=x_2,U_{2,3}(x)=-x_1,U_{3,3}(x)=0。\end{cases}$$

容易得到无穷小算符

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1=U_{1,i}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}=x_2\frac{\partial}{\partial x_3}-x_3\frac{\partial}{\partial x_2}=\mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{L}}_1,$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_2=U_{2,i}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}=x_3\frac{\partial}{\partial x_1}-x_1\frac{\partial}{\partial x_3}=\mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{L}}_2,$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_3=U_{3,i}(x)\frac{\partial}{\partial x_i}=x_1\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_1}=\mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{L}}_3,$$

满足对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{X}}_1,\hat{\boldsymbol{X}}_2]=-\hat{\boldsymbol{X}}_3,\quad[\hat{\boldsymbol{X}}_2,\hat{\boldsymbol{X}}_3]=-\hat{\boldsymbol{X}}_1,\quad[\hat{\boldsymbol{X}}_3,\hat{\boldsymbol{X}}_1]=-\hat{\boldsymbol{X}}_2。$$

算符 $\hat{\boldsymbol{L}}_i$ 正是角动量算符，满足

$$[\hat{\boldsymbol{L}}_i, \hat{\boldsymbol{L}}_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{L}}_k。$$

这意味着 SO(3) 群与体系的角动量密切相关。如果体系具有 SO(3) 对称，即转动不变，则体系的角动量一定是守恒的。

如果考虑平移对称，无穷小变换为

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r} = \boldsymbol{\alpha},$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}$ 的各分量 α_i 是常数。写成分量形式为

$$\mathrm{d}x_i = \alpha_i = U_{\lambda,i}(x)\alpha_\lambda, \quad U_{\lambda,i}(x) = \delta_{\lambda,i}。$$

因此有无穷小算符

$$\hat{X}_\lambda = U_{\lambda,i}(x)\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_\lambda} = \mathrm{i}\hat{p}_\lambda,$$

其中

$$\hat{p}_\lambda = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x_\lambda}$$

正是动量算符。因此，体系的平移对称与体系的动量密切相关。如果体系具有平移对称，则体系的动量一定守恒。这是对称性与守恒量之间意义深远的关系，通常称之为 Noether 定理。

对 SU(2) 群，由参数化

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{i}\alpha_3 & -\alpha_2 + \mathrm{i}\alpha_1 \\ \alpha_2 + \mathrm{i}\alpha_1 & -\mathrm{i}\alpha_3 \end{pmatrix},$$

可得无穷小变换

$$\begin{cases} \mathrm{d}u_1 = \dfrac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_3 u_1 + \dfrac{1}{2}(\mathrm{i}\alpha_1 - \alpha_2)u_2 = U_{\lambda,u_1}(x)\alpha_\lambda, \\ \mathrm{d}u_2 = \dfrac{1}{2}(\mathrm{i}\alpha_1 + \alpha_2)u_1 - \dfrac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_3 u_2 = U_{\lambda,u_2}(x)\alpha_\lambda。 \end{cases}$$

由此得

$$\begin{cases} U_{1,u_1}(x) = \dfrac{1}{2}\mathrm{i}u_2, U_{2,u_1}(x) = -\dfrac{1}{2}u_2, U_{3,u_1}(x) = \dfrac{1}{2}\mathrm{i}u_1, \\ U_{1,u_2}(x) = \dfrac{1}{2}\mathrm{i}u_1, U_{2,u_2}(x) = \dfrac{1}{2}u_1, U_{3,u_2}(x) = -\dfrac{1}{2}\mathrm{i}u_2。 \end{cases}$$

无穷小算符为

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1 = U_{1,i}(x)\partial_i = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_2} + u_2\frac{\partial}{\partial u_1}\right) = \mathrm{i}\hat{\boldsymbol{S}}_1,$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_2 = \frac{1}{2}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_2} - u_2\frac{\partial}{\partial u_1}\right) = \mathrm{i}\hat{\boldsymbol{S}}_2,$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_3 = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_1} - u_2\frac{\partial}{\partial u_2}\right) = \mathrm{i}\hat{\boldsymbol{S}}_3,$$

其中算符 $\hat{\boldsymbol{S}}_i(i=1,2,3)$ 满足对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{S}}_i,\hat{\boldsymbol{S}}_j]=\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{S}}_k。$$

与 SO(3) 群的无穷小算符对易关系比较，可以看到 SU(2) 群和 SO(3) 群的无穷小算符满足完全相同的对易关系。

通常将 SU(2) 群看成是内部空间的一个转动，相应的无穷小算符正是自旋角动量算符。

对 SU(3) 群，类似的做法，由

$$\begin{pmatrix}\mathrm{d}u_1\\ \mathrm{d}u_2\\ \mathrm{d}u_3\end{pmatrix}=\boldsymbol{\varepsilon}\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\\ u_3\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{pmatrix}\alpha_3+\dfrac{\alpha_8}{\sqrt{3}} & \alpha_1-\mathrm{i}\alpha_2 & \alpha_4-\mathrm{i}\alpha_5\\ \alpha_1+\mathrm{i}\alpha_2 & -\alpha_3+\dfrac{\alpha_8}{\sqrt{3}} & \alpha_6-\mathrm{i}\alpha_7\\ \alpha_4+\mathrm{i}\alpha_5 & \alpha_6+\mathrm{i}\alpha_7 & -\dfrac{2\alpha_8}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\\ u_3\end{pmatrix},$$

可得

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_2}+u_2\frac{\partial}{\partial u_1}\right),\quad \hat{\boldsymbol{X}}_2=\frac{1}{2}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_2}-u_2\frac{\partial}{\partial u_1}\right),$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_3=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_1}-u_2\frac{\partial}{\partial u_2}\right),\quad \hat{\boldsymbol{X}}_4=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(u_3\frac{\partial}{\partial u_1}+u_1\frac{\partial}{\partial u_3}\right),$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_5=\frac{1}{2}\left(u_3\frac{\partial}{\partial u_1}-u_1\frac{\partial}{\partial u_3}\right),\quad \hat{\boldsymbol{X}}_6=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(u_3\frac{\partial}{\partial u_2}+u_2\frac{\partial}{\partial u_3}\right),$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_7=\frac{1}{2}\left(u_3\frac{\partial}{\partial u_2}-u_2\frac{\partial}{\partial u_3}\right),\quad \hat{\boldsymbol{X}}_8=\frac{\mathrm{i}}{2\sqrt{3}}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_1}+u_2\frac{\partial}{\partial u_2}-2u_3\frac{\partial}{\partial u_3}\right)。$$

容易得出所有的对易关系。

对 SO(4) 群，有 $n(n-1)/2=2\times3=6$ 个参数，如果将无穷小变换写成

$$\begin{pmatrix}\mathrm{d}x_1\\ \mathrm{d}x_2\\ \mathrm{d}x_3\\ \mathrm{d}x_4\end{pmatrix}=\boldsymbol{\varepsilon}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\\ x_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -\alpha_3 & \alpha_2 & \alpha_4\\ \alpha_3 & 0 & -\alpha_1 & \alpha_5\\ -\alpha_2 & \alpha_1 & 0 & \alpha_6\\ -\alpha_4 & -\alpha_5 & -\alpha_6 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\\ x_4\end{pmatrix},$$

则有

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1=\hat{\boldsymbol{A}}_1=x_2\frac{\partial}{\partial x_3}-x_3\frac{\partial}{\partial x_2},\quad \hat{\boldsymbol{X}}_4=\hat{\boldsymbol{B}}_1=x_4\frac{\partial}{\partial x_1}-x_1\frac{\partial}{\partial x_4},$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_2=\hat{\boldsymbol{A}}_2=x_3\frac{\partial}{\partial x_1}-x_1\frac{\partial}{\partial x_3},\quad \hat{\boldsymbol{X}}_5=\hat{\boldsymbol{B}}_2=x_4\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_4},$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_3=\hat{\boldsymbol{A}}_3=x_1\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_1},\quad \hat{\boldsymbol{X}}_6=\hat{\boldsymbol{B}}_3=x_4\frac{\partial}{\partial x_3}-x_3\frac{\partial}{\partial x_4}。$$

这些算符满足如下的对易关系：

$$[\hat{\boldsymbol{A}}_i,\hat{\boldsymbol{A}}_j]=-\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{A}}_k,\quad [\hat{\boldsymbol{B}}_i,\hat{\boldsymbol{B}}_j]=-\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{A}}_k,\quad [\hat{\boldsymbol{A}}_i,\hat{\boldsymbol{B}}_j]=-\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{B}}_k,\ [\hat{\boldsymbol{A}}_i,\hat{\boldsymbol{B}}_i]=\boldsymbol{0}。$$

令

$$\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{L}}_m=\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{A}}_m+\hat{\boldsymbol{B}}_m),\ \mathrm{i}\hat{\boldsymbol{K}}_m=\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{A}}_m-\hat{\boldsymbol{B}}_m),\ m=1,2,3,$$

则有

$$[\hat{\boldsymbol{L}}_i,\hat{\boldsymbol{L}}_j]=\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{L}}_k,\ [\hat{\boldsymbol{K}}_i,\hat{\boldsymbol{K}}_j]=\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{K}}_k,\ [\hat{\boldsymbol{L}}_i,\hat{\boldsymbol{K}}_j]=\boldsymbol{0},\ i,j,k=1,2,3。$$

因此 SO(4) 群的无穷小算符可以分解成两组互相对易的 SO(3) 群无穷小算符。我们说这两个对应的 Lie 代数是同构的，即

$$\mathrm{so}(4)\cong\mathrm{so}(3)\oplus\mathrm{so}(3)。$$

对 SO(2,1) 群，它是保持量 $x_1^2+x_2^2-x_3^2$ 不变的变换群。引入度规

$$\boldsymbol{\eta}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},$$

将变换写成

$$\boldsymbol{X}'=\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}=(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon})\boldsymbol{X},$$

由条件

$$x_1'^2+x_2'^2-x_3'^2=\boldsymbol{X}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{X}'=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{g}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=x_1^2+x_2^2-x_3^2,$$

可得

$$\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{g}=\boldsymbol{\eta}。$$

无穷小形式为

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{\varepsilon}=(\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{\varepsilon})^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{0},$$

即矩阵 $\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{\varepsilon}$ 是反对称的。可以取

$$\boldsymbol{\varepsilon}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-\alpha_3&\alpha_2\\\alpha_3&0&\alpha_1\\-\alpha_2&-\alpha_1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-\alpha_3&\alpha_2\\\alpha_3&0&\alpha_1\\\alpha_2&\alpha_1&0\end{pmatrix},$$

则可以得到无穷小算符

$$\hat{\boldsymbol{X}}_1=x_3\frac{\partial}{\partial x_2}+x_2\frac{\partial}{\partial x_3},$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_2=x_3\frac{\partial}{\partial x_1}+x_1\frac{\partial}{\partial x_3},$$

$$\hat{\boldsymbol{X}}_3=x_1\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_1}。$$

满足对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{X}}_1,\hat{\boldsymbol{X}}_2]=-\hat{\boldsymbol{X}}_3,\quad[\hat{\boldsymbol{X}}_2,\hat{\boldsymbol{X}}_3]=\hat{\boldsymbol{X}}_1,\quad[\hat{\boldsymbol{X}}_3,\hat{\boldsymbol{X}}_1]=\hat{\boldsymbol{X}}_2。$$

6.4 SU(2) 群的不可约表示

SU(2) 群的基本表示是 2×2 的幺正幺模矩阵

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{g})=\boldsymbol{g}=\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}。$$

显然这是不可约表示。

现在来构造 SU(2) 群的一般表示。算符对函数 $f(u_1,u_2)$ 的作用定义为

$$\Gamma_{\boldsymbol{g}^{-1}}f(u_1,u_2)=f(\boldsymbol{g}\boldsymbol{u})=f(u_1',u_2')=f(\boldsymbol{u}'),$$

其中

$$\boldsymbol{u}'=\boldsymbol{g}\boldsymbol{u}=\begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} au_1+bu_2 \\ -b^*u_1+a^*u_2 \end{pmatrix}。$$

考虑函数族 $\{f_m(u_1,u_2)\}$，如果对任意 $\boldsymbol{g}\in \mathrm{SU}(2)$，有

$$\Gamma_{\boldsymbol{g}^{-1}}f_m(u_1,u_2)=f_m(\boldsymbol{g}\boldsymbol{u})=f_m(u_1',u_2')=\sum_{m'=-l}^{l}f_{m'}(u_1,u_2)(\boldsymbol{D}(\boldsymbol{g}^{-1}))_{m'm},$$

则函数族 $\{f_m(u_1,u_2)\}$ 负载了 SU(2) 群的一个表示。令

$$f_m^{(l)}(u_1,u_2)=\frac{u_1^{l+m}u_2^{l-m}}{[(l+m)!(l-m)!]^{1/2}},\quad m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l,$$

其中 $l\pm m$ 为整数，l 可以是半整数。当 l 一定时，函数族 $f_m^{(l)}(u_1,u_2)$ 一共有 $2l+1$ 个函数，满足

$$\begin{aligned}\Gamma_{\boldsymbol{g}^{-1}}f_m^{(l)}(u_1,u_2)&=f_m^{(l)}(\boldsymbol{g}\boldsymbol{u})=f_m^{(l)}(u'_1,u'_2)=\frac{u'^{l+m}_1u'^{l-m}_2}{[(l+m)!(l-m)!]^{1/2}}\\&=[(l+m)!(l-m)!]^{-1/2}(au_1+bu_2)^{l+m}(-b^*u_1+a^*u_2)^{l-m}\\&=\sum_{\mu,\nu}\frac{(l+m)!(l-m)!a^{l+m-\mu}a^{*\nu}b^{\mu}(-b^*)^{l-m-\nu}u_1^{2l-\mu-\nu}u_2^{\mu+\nu}}{[(l+m)!(l-m)!]^{1/2}(l+m-\mu)!\mu!(l-m-\nu)!\nu!}。\end{aligned}$$

如果定义 $(-n)!=\infty(n>0)$，则对 μ,ν 的求和可以扩展到无穷大。令

$$2l-\mu-\nu=l+m',$$

则有

$$
\begin{aligned}
\Gamma_{g^{-1}} f_m^{(l)}(u_1,u_2) &= \sum_{\mu,\nu} \frac{(l+m)!(l-m)!a^{l+m-\mu}(a^*)^{\nu}b^{\mu}(-b^*)^{l-m-\nu}u_1^{2l-\mu-\nu}u_2^{\mu+\nu}}{[(l+m)!(l-m)!]^{1/2}(l+m-\mu)!\mu!(l-m-\nu)!\nu!} \\
&= \sum_{m',\mu} \frac{[(l+m)!(l-m)!(l+m')!(l-m')!]^{1/2}}{(l+m-\mu)!\mu!(l-m'-\mu)!(m'-m+\mu)!} \\
&\quad \cdot a^{l+m-\mu}(a^*)^{l-m'-\mu}b^{\mu}(-b^*)^{m'-m+\mu}\frac{u_1^{l+m'}u_2^{l-m'}}{[(l+m')!(l-m')!]^{1/2}} \\
&= \sum_{m'=-l}^{l} f_{m'}^{(l)}(u_1,u_2)D_{m'm}^{(l)}(g^{-1}),
\end{aligned}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
D_{m'm}^{(l)}(g^{-1}) &= D_{m'm}^{(l)}(a,b) \\
&= \sum_{\mu} \frac{[(l+m)!(l-m)!(l+m')!(l-m')!]^{1/2}}{(l+m-\mu)!(l-m'-\mu)!(m'-m+\mu)!\mu!} a^{l+m-\mu}(a^*)^{l-m'-\mu}b^{\mu}(-b^*)^{m'-m+\mu}。
\end{aligned} \tag{6.12}
$$

矩阵 $\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b)$ 是 SU(2) 群的 $2l+1$ 维表示。容易证明，它是幺正表示。因为

$$
\sum_{m=-l}^{l} \left|f_m^{(l)}(u_1,u_2)\right|^2 = \sum_{m=-l}^{l} \frac{\left|u_1^{l+m}u_2^{l-m}\right|^2}{(l+m)!(l-m)!} = \frac{1}{(2l)!}\sum_{k=0}^{2l} \frac{\left|u_1^2\right|^{2l-k}\left|u_2^2\right|^k}{(2l-k)!k!} = \frac{\left(\left|u_1^2\right|+\left|u_2^2\right|\right)^{2l}}{(2l)!},
$$

由于 $\left|u_1^2\right|+\left|u_2^2\right|$ 在 SU(2) 群作用下不变，即

$$
\left|u_1^2\right|+\left|u_2^2\right| = \left|u_1'^2\right|+\left|u_2'^2\right|,
$$

因此

$$
\sum_{m=-l}^{l} \left|f_m^{(l)}(u_1,u_2)\right|^2 = \sum_{m=-l}^{l} \left|f_m^{(l)}(u_1',u_2')\right|^2。
$$

由此可得

$$
\begin{aligned}
\sum_{m=-l}^{l} \left|f_m^{(l)}(u_1,u_2)\right|^2 &= \sum_{m=-l}^{l} \left|f_m^{(l)}(u_1',u_2')\right|^2 = \sum_{m=-l}^{l} f_m^{(l)}(u_1',u_2')f_m^{(l)*}(u_1',u_2') \\
&= \sum_{m,m'} f_{m'}^{(l)}(u_1,u_2)D_{m'm}^{(l)}(a,b)\sum_{m''} f_{m''}^{(l)*}(u_1,u_2)D_{m''m}^{(l)*}(a,b) \\
&= \sum_{m',m''} f_{m'}^{(l)}(u_1,u_2)f_{m''}^{(l)*}(u_1,u_2)\sum_{m} D_{m'm}^{(l)}(a,b)D_{mm''}^{(l)\dagger}(a,b) \\
&= \sum_{m=-l}^{l} \left|f_m^{(l)}(u_1,u_2)\right|^2。
\end{aligned}
$$

上式要求

$$
\sum_{m=-l}^{l} D_{m'm}^{(l)}(a,b)D_{mm''}^{(l)\dagger}(a,b) = \delta_{m'm''},
$$

写成矩阵形式为

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b)\boldsymbol{D}^{(l)\dagger}(a,b)=\boldsymbol{I},$$

此即

$$\boldsymbol{D}^{(l)\dagger}(a,b)=[\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b)]^{-1}。$$

这就证明了由 $\{f_m^{(l)}(u_1,u_2)\}$ 负载的表示是幺正的。

进一步可以证明这是不可约表示。在不可约表示 (6.12) 中令 $m'=l$，则求和只剩下一项 ($\mu=0$)

$$D_{lm}^{(l)}(a,b)=\left[\frac{2l}{(l+m)!(l-m)!}\right]^{1/2}a^{l+m}(-b^*)^{l-m}。$$

如果令 $a=\exp(-\mathrm{i}\alpha/2),b=0$，则有 (因为 $\mu=0$，由于 $(-b^*)^{m'-m}$ 项的存在，求和非零要求 $m'=m$)

$$D_{m'm}^{(l)}(a,b)=D_{m'm}^{(l)}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2},0)=\delta_{m'm}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}。\tag{6.13}$$

现在假定有一个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和表示 $\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b)$ 对易，即

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b)=\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b)\boldsymbol{A},$$

令 $a=\exp(-\mathrm{i}\alpha/2),b=0$，得

$$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{(l)}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2},0))_{m'm}=(\boldsymbol{D}^{(l)}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2},0)\boldsymbol{A})_{m'm}。$$

将方程 (6.13) 代入，则有

$$A_{m'm}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\alpha}\,A_{m'm},$$

移项后得

$$A_{m'm}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\alpha})=0。$$

因此矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是对角的，有

$$A_{m'm}=a_m\delta_{m'm}。\tag{6.14}$$

进一步取 $m'=l$，有

$$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b))_{lm}=(\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b)\boldsymbol{A})_{lm},$$

即

$$A_{lm'}D_{m'm}^{(l)}(a,b)=D_{lm'}^{(l)}(a,b)A_{m'm}。$$

将方程 (6.14) 代入，得

$$A_{ll}D_{lm}^{(l)}(a,b)=D_{lm}^{(l)}(a,b)A_{mm}。$$

因为 $D_{lm}^{(l)}(a,b)\neq 0$，最后得

$$A_{ll}=A_{mm}\rightarrow\boldsymbol{A}=\lambda\boldsymbol{I}。$$

因此 $\boldsymbol{A}$ 一定是单位矩阵乘以常数。这就证明了，如果有矩阵和 $\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b)$ 对易，则这个矩阵只能是单位阵乘以常数。由 Schur 引理，$\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b)$ 是 SU(2) 群的不可约表示。

取不同的 $l=0,1/2,1,3/2,2,\cdots$，就得到不同的不可约表示。

与有限群的情况不同，SU(2) 群的不等价不可约表示的数目是无穷多的。可以证明，集合

$$\{\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b), l=0,1/2,1,\cdots\}$$

作为 SU(2) 群的不可约表示是完备的。

6.5 群上的不变积分

对于一个定义在有限群 G 上的函数 $f(g)$ $(g\in G)$，由于重排定理，下列求和具有不变性：

$$\sum_{g\in G} f(g)=\sum_{g\in G} f(g'g)=\sum_{g\in G} f(gg'),\quad \forall g'\in G。$$

现在需要将上式推广到连续群的情况。显然，在连续群的情况下，求和应该推广为积分。对 $g\in G$，如果积分测度记为 $d\tau_g$，则群上积分可以定义为

$$\int_G f(g)\,\mathrm{d}\tau_g=\int f[g(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r)]\,\rho(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r)\,\mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2\cdots\mathrm{d}\alpha_r,$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r)$ 是与群元 g 对应的参数，函数 $\rho(\boldsymbol{\alpha})$ 称为权函数或密度函数。如果

$$\int_G f(g'g)\,\mathrm{d}_L\tau_g=\int_G f(g)\,\mathrm{d}_L\tau_g,\quad \forall g'\in G,$$

则称之为左不变积分。如果

$$\int_G f(gg')\,\mathrm{d}_R\tau_g=\int_G f(g)\,\mathrm{d}_R\tau_g,\quad \forall g'\in G,$$

则称之为右不变积分。相应地，函数 $\rho_L(\boldsymbol{\alpha})$ 和 $\rho_R(\boldsymbol{\alpha})$ 分别称为左不变权函数和右不变权函数。如果积分既是左不变的，又是右不变的，则可以写成

$$\rho_L(\boldsymbol{\alpha})=\rho_R(\boldsymbol{\alpha})=\rho(\boldsymbol{\alpha}),$$

及

$$\mathrm{d}_L\tau_g=\mathrm{d}_R\tau_g=\mathrm{d}\tau_g。$$

容易证明，积分的不变性要求

$$\mathrm{d}\tau_g=\mathrm{d}\tau_{gg'}=\mathrm{d}\tau_{g''}。$$

这要求权函数满足

$$\rho(\boldsymbol{\alpha})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}=\rho(\boldsymbol{\beta})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\beta}=\rho(\boldsymbol{\gamma})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\gamma},$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r)$, $\boldsymbol{\beta}=(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_r)$ 分别是对应群元 g,g' 的参数，$\boldsymbol{\gamma}=(\gamma_1,\gamma_2,\cdots,\gamma_r)$ 是对应群元 $g''=gg'$ 的参数。由此可以确定函数

$$\boldsymbol{\gamma}=f(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})。$$

进一步可以导出

$$\rho(\boldsymbol{\gamma})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\gamma}=\rho(\boldsymbol{\gamma})\left|\frac{\partial(\gamma_1,\gamma_2,\cdots,\gamma_r)}{\partial(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r)}\right|\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}=\rho(\boldsymbol{\gamma})\,J\,\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}=\rho(\boldsymbol{\alpha})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha},$$

其中 J 是坐标变换 $(\alpha_1,\alpha_2,,\cdots,\alpha_r)\mapsto(\gamma_1,\gamma_2,\cdots,\gamma_r)$ 的 Jacobi 因子。这给出

$$\rho(\boldsymbol{\gamma})=\frac{1}{J}\,\rho(\boldsymbol{\alpha})。$$

可以取 $g'=e$ 为单位元，则由 $g=eg$ 可得

$$\rho(\boldsymbol{\alpha})=\frac{1}{J}\,\rho(\mathbf{0})=\left|\frac{\partial(\gamma_1,\gamma_2,\cdots,\gamma_r)}{\partial(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r)}\right|_{\boldsymbol{\gamma}=\mathbf{0}}\rho(\mathbf{0}),$$

其中 $\boldsymbol{\gamma}=\mathbf{0}$ 对应单位元。可以证明对紧致 Lie 群，左不变和右不变权函数相等，积分是有限的。进一步可以选 $\rho(\mathbf{0})$ 为群体积的倒数，即要求

$$\int_G \mathrm{d}\tau_g=\int_G \rho(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r)\,\mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2\cdots\mathrm{d}\alpha_r=1。$$

但对于非紧致 Lie 群，只能定义左不变或右不变积分，且积分不一定是有限的。

现在可以将 Lie 群的正交归一关系推广为

$$\int_G D^{(l)*}_{mn}(g)D^{(l')}_{m'n'}(g)\,\mathrm{d}\tau_g=\frac{1}{d_l}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{nn'},\tag{6.15}$$

取迹后得

$$\int_G \chi^{(l)*}(g)\chi^{(l')}(g)\,\mathrm{d}\tau_g=\delta_{ll'}。$$

对于 SO(2) 群，参数就是转角 θ，满足群的乘法

$$\theta''=\theta+\theta'。$$

因此 Jacobi 因子是 1，$J=1$。由于 $0\leqslant\theta<2\pi$，可以取 $\rho(\mathbf{0})=1/2\pi$，即

$$\mathrm{d}\tau_g=\frac{1}{2\pi}\mathrm{d}\theta,\quad g\in\mathrm{SO}(2)。$$

可以证明，不变测度也可以按如下方式得到。首先计算 $g^{-1}\partial g/\partial\alpha_i$，将其按无穷小生成元展开

$$g^{-1}\frac{\partial g}{\partial\alpha_i}=\sum_k \boldsymbol{X}_k A_{ki}(\boldsymbol{\alpha}),$$

则权函数 $\rho(\boldsymbol{\alpha})$ 可以表示为

$$\rho(\boldsymbol{\alpha})=\det\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha})。$$

证明 令 $\boldsymbol{\beta}=(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_r)$ 是群元 g 的另一组参数，则有

$$g^{-1}\frac{\partial g}{\partial\beta_i}=\sum_j g^{-1}\frac{\partial g}{\partial\alpha_j}\frac{\partial\alpha_j}{\partial\beta_i}=\sum_{k,j}\boldsymbol{X}_k A_{kj}(\boldsymbol{\alpha})\frac{\partial\alpha_j}{\partial\beta_i}=\sum_k\boldsymbol{X}_k A_{ki}(\boldsymbol{\beta}),$$

这给出

$$\det\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\beta})=\det\left(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha})\frac{\partial\boldsymbol{\alpha}}{\partial\boldsymbol{\beta}}\right)=\det\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha})\det\frac{\partial\boldsymbol{\alpha}}{\partial\boldsymbol{\beta}}=\det\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha})J^{-1}。$$

由此可得

$$\rho(\boldsymbol{\beta})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\beta}=\det\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\beta})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\beta}=\det\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha})J^{-1}J\,\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}=\det\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}=\rho(\boldsymbol{\alpha})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}。$$

利用这个公式可得

$$\mathrm{d}\tau_{\boldsymbol{g}}=\frac{1}{16\pi^2}\sin\beta\,\mathrm{d}\alpha\,\mathrm{d}\beta\,\mathrm{d}\gamma,\qquad \boldsymbol{g}\in\mathrm{SU}(2),$$

及

$$\mathrm{d}\tau_{\boldsymbol{g}}=\frac{1}{8\pi^2}\sin\beta\,\mathrm{d}\alpha\,\mathrm{d}\beta\,\mathrm{d}\gamma,\qquad \boldsymbol{g}\in\mathrm{SO}(3),$$

这里 α,β,γ 是 3 个 Euler 角。

6.6 SU(2) 群和 SO(3) 群的同态映射

前面已经看到，SU(2) 群和 SO(3) 群对应的 Lie 代数是同构的。本节就来讨论 SU(2) 群和 SO(3) 群之间的映射。由 Pauli 矩阵，可以定义

$$\hat{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma}=x_1\boldsymbol{\sigma}_1+x_2\boldsymbol{\sigma}_2+x_3\boldsymbol{\sigma}_3=\begin{pmatrix}x_3 & x_1-\mathrm{i}x_2\\ x_1+\mathrm{i}x_2 & -x_3\end{pmatrix}。$$

由

$$\boldsymbol{g}=\begin{pmatrix}a & b\\ -b^* & a^*\end{pmatrix}\in\mathrm{SU}(2),$$

定义变换

$$\hat{\boldsymbol{r}}\mapsto\hat{\boldsymbol{r}}'=\Gamma_{\boldsymbol{g}}\hat{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{g}\hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{g}^{-1}$$

$$=\begin{pmatrix}a & b\\ -b^* & a^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_3 & x_1-\mathrm{i}x_2\\ x_1+\mathrm{i}x_2 & -x_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a^* & -b\\ b^* & a\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x_3' & x_1'-\mathrm{i}x_2'\\ x_1'+\mathrm{i}x_2' & -x_3'\end{pmatrix},$$

相乘后得

$$\hat{\boldsymbol{r}}'=\begin{pmatrix}(a^*b+ab^*)x_1+\mathrm{i}(a^*b-ab^*)x_2+(|a|^2-|b|^2)x_3 & (a^2-b^2)x_1-\mathrm{i}(a^2+b^2)x_2-2abx_3\\ (a^{*2}-b^{*2})x_1+\mathrm{i}(a^{*2}+b^{*2})x_2-2a^*b^*x_3 & -(a^*b+ab^*)x_1-\mathrm{i}(a^*b-ab^*)x_2-(|a|^2-|b|^2)x_3\end{pmatrix}。\tag{6.16}$$

容易证明，这个映射是一个同态，即

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{r}}' &= \Gamma_{\boldsymbol{g}}\hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{g}\hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{g}^{-1},\\ \hat{\boldsymbol{r}}'' &= \Gamma_{\boldsymbol{g}'}\hat{\boldsymbol{r}}' = \Gamma_{\boldsymbol{g}'}\Gamma_{\boldsymbol{g}}\hat{\boldsymbol{r}} = \Gamma_{\boldsymbol{g}'\boldsymbol{g}}\hat{\boldsymbol{r}}\\ &= \boldsymbol{g}'\hat{\boldsymbol{r}}'\boldsymbol{g}'^{-1} = \boldsymbol{g}'\boldsymbol{g}\hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{g}^{-1}\boldsymbol{g}'^{-1} = (\boldsymbol{g}'\boldsymbol{g})\hat{\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{g}'\boldsymbol{g})^{-1}。\end{aligned}$$

取行列式后得

$$\det\hat{\boldsymbol{r}}' = \det(\boldsymbol{g}\hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{g}^{-1}) = \det\hat{\boldsymbol{r}},$$

展开后即

$$x'^2_1 + x'^2_2 + x'^2_3 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2。$$

因此，变换 $\hat{\boldsymbol{r}}' = \boldsymbol{g}\hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{g}^{-1}$ 保持三维向量长度平方 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ 不变。事实上这是 SO(3) 变换。

按照这样的方式，由 SU(2) 群的一个群元 $\boldsymbol{g} \in \mathrm{SU}(2)$，可以对应到 SO(3) 群的一个群元 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{g}) \in \mathrm{SO}(3)$。因此，SO(3) 群和 SU(2) 群是同态的。

将方程 (6.16) 写成三维坐标变换形式，得

$$\begin{pmatrix} x'_1\\ x'_2\\ x'_3\end{pmatrix} = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{g})\begin{pmatrix} x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2}) & \frac{\mathrm{i}}{2}(a^{*2} - a^2 + b^{*2} - b^2) & -(ab + a^*b^*)\\ \frac{\mathrm{i}}{2}(a^2 - a^{*2} - b^2 + b^{*2}) & \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2}) & -\mathrm{i}(ab - a^*b^*)\\ (ab^* + a^*b) & \mathrm{i}(a^*b - ab^*) & (aa^* - bb^*)\end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{g})$ 满足 (注意 $|a|^2 + |b|^2 = 1$)

$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{g}) = \boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{g}),\quad \det\boldsymbol{R}(\boldsymbol{g}) = 1。$$

对任意的 $\boldsymbol{g}, \boldsymbol{g}' \in \mathrm{SU}(2)$，有

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{g})\boldsymbol{R}(\boldsymbol{g}') = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{g}\boldsymbol{g}') \in \mathrm{SO}(3)。$$

进一步可以看到，对

$$\boldsymbol{g} \in \mathrm{SU}(2) \mapsto \boldsymbol{R}(\boldsymbol{g}) \in \mathrm{SO}(3),$$

有

$$-\boldsymbol{g} \in \mathrm{SU}(2) \mapsto \boldsymbol{R}(-\boldsymbol{g}) = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{g}) \in \mathrm{SO}(3)。$$

因此这个同态是 $2-1$ 对应。

如果令 $a = \exp(-\mathrm{i}\gamma/2), b = 0$，则有

$$\boldsymbol{D}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma/2},0)=\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\boldsymbol{R}_z(\gamma)。$$

这正是三维空间中绕 z 轴转动 γ 角的转动矩阵。

类似地，有

$$\boldsymbol{D}\left(\cos\frac{\beta}{2},-\sin\frac{\beta}{2}\right)=\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}=\boldsymbol{R}_y(\beta)。$$

如果令

$$\boldsymbol{g}_1(\gamma)=\boldsymbol{g}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma/2},0)=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma/2} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma/2}\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{g}_2(\beta)=\boldsymbol{g}\left(\cos\frac{\beta}{2},-\sin\frac{\beta}{2}\right)=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\beta}{2} & -\sin\dfrac{\beta}{2}\\ \sin\dfrac{\beta}{2} & \cos\dfrac{\beta}{2}\end{pmatrix},$$

则对于

$$\boldsymbol{g}=\boldsymbol{g}_1(\alpha)\boldsymbol{g}_2(\beta)\boldsymbol{g}_1(\gamma)=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha+\gamma)/2}\cos\dfrac{\beta}{2} & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\gamma)/2}\sin\dfrac{\beta}{2}\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha-\gamma)/2}\sin\dfrac{\beta}{2} & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha+\gamma)/2}\cos\dfrac{\beta}{2}\end{pmatrix},$$

有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)&=\boldsymbol{R}_z(\alpha)\boldsymbol{R}_y(\beta)\boldsymbol{R}_z(\gamma)\\ &=\begin{pmatrix}\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma-\sin\alpha\cos\gamma & \cos\alpha\sin\beta\\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma+\cos\alpha\sin\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma+\cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta\\ -\sin\alpha\cos\gamma & \sin\beta\sin\gamma & \cos\beta\end{pmatrix}。\end{aligned}$$

这是用 3 个 Euler 角 α,β,γ 参数化的三维转动矩阵。

取 $\alpha=\beta=\gamma=0$ 时，$\boldsymbol{g}=\boldsymbol{I}_2$ 是单位元。如果取 $\alpha=2\pi,\beta=\gamma=0$，得到 $\boldsymbol{g}=-\boldsymbol{I}_2$。但都有

$$\boldsymbol{R}(0,0,0)=\boldsymbol{R}(2\pi,0,0)=\boldsymbol{I}_3=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}。$$

因此

$$(\boldsymbol{I}_2,-\boldsymbol{I}_2)\in\mathrm{SU}(2)\to\boldsymbol{I}_3\in\mathrm{SO}(3)。$$

同态的核

$$\mathbf{Z}_2=\{\boldsymbol{I}_2,-\boldsymbol{I}_2\}。$$

是一个二阶群，它是 SU(2) 群的不变子群，因此 SO(3) 群与商群 $\mathrm{SU}(2)/\mathbf{Z}_2$ 同构。对任意的 $\boldsymbol{g}\in\mathrm{SU}(2)$，有

$$(\boldsymbol{I}_2\boldsymbol{g},-\boldsymbol{I}_2\boldsymbol{g})\mapsto\boldsymbol{R}(\boldsymbol{g})\in\mathrm{SO}(3)。$$

由于 $(-\boldsymbol{I}_2)^2=\boldsymbol{I}_2$，根据

$$[\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2)]^2=\boldsymbol{D}^{(l)}[(-\boldsymbol{I}_2)^2]=\boldsymbol{D}^{(l)}(I_2)=\boldsymbol{I}_{2l+1},$$

可得

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2)=\pm\boldsymbol{I}_{2l+1}。$$

对满足条件 $\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2)=\boldsymbol{I}_{2l+1}$ 的表示，有

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2\boldsymbol{g})=\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2)\boldsymbol{D}^{(l)}(\boldsymbol{g})=\boldsymbol{D}^{(l)}(\boldsymbol{g}),\quad\forall\boldsymbol{g}\in\mathrm{SU}(2)。$$

对于满足条件 $\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2)=-\boldsymbol{I}_{2l+1}$ 的表示，则有

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2\boldsymbol{g})=\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2)\boldsymbol{D}^{(l)}(\boldsymbol{g})=-\boldsymbol{D}^{(l)}(\boldsymbol{g}),\quad\forall\boldsymbol{g}\in\mathrm{SU}(2)。$$

把满足条件

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2\boldsymbol{g})=\boldsymbol{D}^{(l)}(\boldsymbol{g})$$

的表示称为单值表示。而把满足

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I}_2\boldsymbol{g})=-\boldsymbol{D}^{(l)}(\boldsymbol{g})$$

的表示称为双值表示。

显然，因为 SU(2) 群的两个群元 $(\boldsymbol{I}_2\boldsymbol{g},-\boldsymbol{I}_2\boldsymbol{g})$ 对应 SO(3) 群的同一个群元，所以 SU(2) 群的单值表示同时也是 SO(3) 群的表示。可以写出表示的显式

$$(\boldsymbol{D}^{(l)}(a,b))_{m'm}=(\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma))_{m'm}=\left(\boldsymbol{D}^{(l)}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha+\gamma)/2}\cos\frac{\beta}{2},-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\gamma)/2}\sin\frac{\beta}{2}\right)\right)_{m'm}$$

$$=\sum_{\mu}\frac{(-1)^{m'-m+\mu}[(l+m)!(l-m)!(l+m')!(l-m')!]^{1/2}}{(l+m-\mu)!(l-m'-\mu)!(m'-m+\mu)!\mu!}$$

$$\cdot\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2l+m-m'-2\mu}\left(-\sin\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m+2\mu}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\gamma},$$

其中 l 是整数。此时有

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(0,0,0)=\boldsymbol{D}^{(l)}(2\pi,0,0)=\boldsymbol{I}_{2l+1}。$$

因此，当 l 是整数时，$\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 是 SO(3) 群的不可约表示。

可以证明，集合

$$\{\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma),\ l=0,1,2,\cdots\}$$

作为 SO(3) 群的不可约表示是完备的。

当 $l=$ 半整数时，有

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(0,0,0)=\boldsymbol{I}_{2l+1},\ \boldsymbol{D}^{(l)}(2\pi,0,0)=-\boldsymbol{I}_{2l+1}。$$

但 $(\alpha,\beta,\gamma)=(0,0,0)$ 或 $(\alpha,\beta,\gamma)=(2\pi,0,0)$ 对应的是 SO(3) 群的同一个群元，即单位元。因此，当 $l=$ 半整数时，$\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 不是 SO(3) 群的不可约表示。

由于 SU(2) 群和 SO(3) 群之间的同态是 $2-1$ 对应，所以 SU(2) 群称为是 SO(3) 群的覆盖群。

前面已经讨论过，所有绕某一轴转过相同角度的转动操作都属于同一类，而同类元素的特征标相同。所以只需计算绕 z 轴转动的元素特征标即可。而这容易计算得到

$$\begin{aligned}\chi^{(l)}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2},0)&=\sum_{m=-l}^{l}D^{(l)}_{mm}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2},0)=\sum_{m=-l}^{l}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}\\&=2\left(\frac{1}{2}+\cos\alpha+\cdots+\cos l\alpha\right)=\frac{\sin[(l+1/2)\alpha]}{\sin(\alpha/2)}。\end{aligned}$$

如果除 $\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 之外还存在别的不等价的不可约表示 $\boldsymbol{D}$，其特征标为 $f(\alpha)$，则按照特征标正交关系，有

$$\int_0^{2\pi}f(\alpha)\frac{\sin[(l+1/2)\alpha]}{\sin(\alpha/2)}\rho(\alpha)\mathrm{d}\alpha=0,$$

将上式的 l 换成 $l-1$ 并相减后得

$$\int_0^{2\pi}f(\alpha)\cos(l\alpha)\rho(\alpha)\mathrm{d}\alpha=0。$$

由于 $\{1,\cos\alpha,\cos 2\alpha,\cdots,\cos(l\alpha),\cdots\}$ 是 $(0,2\pi)$ 上的完备系，如果上式为零，则 $f(\alpha)\rho(\alpha)$ 在 $(0,2\pi)$ 上处处为零。但 $\rho(\alpha)\neq 0$，因此只能是 $f(\alpha)$ 处处为零。由此证明了，和 $\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 不等价的不可约表示是不存在的。即集合

$$\{\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma),\ l=0,1,2,\cdots\}$$

作为 SO(3) 群的不可约表示是完备的。

下面给出一些特殊值的结果：

$$\chi^{(1/2)}=\frac{\sin\alpha}{\sin\alpha/2}=2\cos\frac{\alpha}{2},$$

$$\chi^{(1)}=\frac{\sin 3\alpha/2}{\sin\alpha/2}=2\cos\alpha+1,$$

$$\chi^{(3/2)}=\frac{\sin 2\alpha}{\sin\alpha/2}=4\cos\frac{\alpha}{2}\cos\alpha。$$

在 $l=$ 整数的情形下，即限于讨论 SO(3) 群的特征标时，则有

$$\chi^{(l)}(0)=\chi^{(l)}(2\pi)=\chi^{(l)}(e)=2l+1,$$

$$\chi^{(l)}(\pi)=\chi^{(l)}(c_2)=(-1)^l,$$

$$\chi^{(l)}\left(\frac{\pi}{2}\right)=\chi^{(l)}(c_4^1)=\begin{cases}(-1)^{(l-1)/2}, & l\text{ 奇},\\ (-1)^{l/2}, & l\text{ 偶},\end{cases}$$

$$\chi^{(l)}\left(\frac{2\pi}{3}\right)=\chi^{(l)}(c_3^1)=\chi^{(l)}\left(\frac{4\pi}{3}\right)=\begin{cases}1, & l=3m,\\ 0, & l=3m+1,\\ -1, & l=3m+2,\end{cases}$$

$$\chi^{(l)}\left(\frac{\pi}{3}\right)=\chi^{(l)}(c_6^1)=\begin{cases}(-1)^m, & l=3m,\\ 2(-1)^m, & l=3m+1,\\ (-1)^m, & l=3m+2。\end{cases}$$

第一类点群是 SO(3) 群的子群，SO(3) 群的不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 对点群而言不再是不可约表示。由表示的约化

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)=\sum_{p=1}a_p\boldsymbol{D}^{(p)}$$

可得特征标的约化

$$\chi^{(l)}=\sum_{p=1}a_p\chi^{(p)},$$

约化系数为

$$a_p=\frac{1}{n}\sum_{g\in G}\chi^{(p)*}(g)\chi^{(l)}。$$

因而得到 SO(3) 群的表示按点群的不可约表示的分解。如果原有系统具有球对称，当加入一个具有点群对称性的微扰后，通过不可约表示的分解，就可以知道原来简并的能级是如何分裂的。

例如，原来球对称的势加上一个具有 D_3 点群对称的微扰，D_3 群是六阶群，有两个一维表示 A_1，A_2 和一个二维表示 E，元素 (a,b,c) 是转动 π 角，(d,f) 是转动 $2\pi/3,4\pi/3$ 角。因此特征标为

$$\chi^{(l)}(e)=2l+1,\quad \chi^{(l)}(a)=(-1)^l,\quad \chi^{(l)}(d)=\begin{cases}1, & l=3m,\\ 0, & l=3m+1,\\ -1, & l=3m+2。\end{cases}$$

$l=1,2,3,4,5$ 的结果列在下表中。

D_3	e	$3a$	$2d$
A_1	1	1	1
A_2	1	−1	1
E	2	0	−1

$\boldsymbol{D}^{(l)}$	l	e	$3a$	$2d$
	1	3	−1	0
	2	5	1	−1
	3	7	−1	1
	4	9	1	0
	5	11	−1	−1

由此可以计算 $\boldsymbol{D}^{(l)}$ 按 D_3 群的不可约表示的约化：

$$\boldsymbol{D}^{(0)} = A_1,\ \boldsymbol{D}^{(1)} = A_2 \oplus E,\ \boldsymbol{D}^{(2)} = A_1 \oplus 2E,$$
$$\boldsymbol{D}^{(3)} = A_1 \oplus 2A_2 \oplus 2E,\ \boldsymbol{D}^{(4)} = 2A_1 \oplus A_2 \oplus 3E,$$
$$\boldsymbol{D}^{(5)} = A_1 \oplus 2A_2 \oplus 4E,\ \cdots。$$

由 $\boldsymbol{D}^{(4)}$ 标记的能级是 $2l+1=9$ 重简并的。加入微扰后，原有的简并能级就分裂成由不可约表示 A_1, A_2, E 标记的几条能级，其中由 E 标记的能级是二重简并的。这些能级也可能会有偶然简并存在。

用类似的方法，可以讨论如果有其他类型的微扰加入后能级的分裂情况。

O 群是 24 阶群，有 2 个一维表示，1 个二维表示，2 个三维表示。$\boldsymbol{D}^{(l)}$ 按照 O 群不可约表示的约化总结在下表中。

l	e	$8c_3^{1,2}$	$3c_4^2$	$6c_2$	$6c_4^{1,3}$	$\boldsymbol{D}^{(l)} = \sum_p a_p \boldsymbol{D}^{(p)}$
0	1	1	1	1	1	A_1
1	3	0	−1	−1	1	T_1
2	5	−1	1	1	−1	$E \oplus T_2$
3	7	1	−1	−1	−1	$A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$
4	9	0	1	1	1	$A_1 \oplus E \oplus T_1 \oplus T_2$
5	11	−1	−1	−1	1	$E \oplus 2T_1 \oplus T_2$
6	13	1	1	1	−1	$A_1 \oplus A_2 \oplus E \oplus T_1 \oplus 2T_2$
12	25	1	1	1	1	$2A_1 \oplus A_2 \oplus 2E \oplus 3T_1 \oplus 3T_2$

6.7 角动量及其耦合

我们知道 SO(3) 群的无穷小算符就是三个轨道角动量算符

$$\hat{\boldsymbol{L}}_1 = -\mathrm{i}\left(x_2\frac{\partial}{\partial x_3} - x_3\frac{\partial}{\partial x_2}\right),\ \hat{\boldsymbol{L}}_2 = -\mathrm{i}\left(x_3\frac{\partial}{\partial x_1} - x_1\frac{\partial}{\partial x_3}\right),\ \hat{\boldsymbol{L}}_3 = -\mathrm{i}\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right),$$

可以将其写成向量形式

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = \boldsymbol{r} \times (-\mathrm{i}\nabla)。$$

角动量算符满足如下对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{L}}_i, \hat{\boldsymbol{L}}_j] = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{L}}_k,\quad [\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{\boldsymbol{L}}_i] = \boldsymbol{0},\quad i,j,k = 1,2,3,$$

其中

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{\boldsymbol{L}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{L}}_2^2 + \hat{\boldsymbol{L}}_3^2。$$

对任意函数的变换为

$$F(\boldsymbol{r}) \to F(\boldsymbol{r}') = \exp(\mathrm{i}\,\alpha_i\hat{\boldsymbol{L}}_i)F(\boldsymbol{r}) = \exp(\mathrm{i}\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{L}})F(\boldsymbol{r})。$$

类似地，SU(2) 群的无穷小算符就是三个自旋角动量算符

$$\hat{\boldsymbol{S}}_1=\frac{1}{2}\left(u\frac{\partial}{\partial v}+v\frac{\partial}{\partial u}\right),\quad \hat{\boldsymbol{S}}_2=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(v\frac{\partial}{\partial u}-u\frac{\partial}{\partial v}\right),\quad \hat{\boldsymbol{S}}_3=\frac{1}{2}\left(u\frac{\partial}{\partial u}-v\frac{\partial}{\partial v}\right),$$

满足与轨道角动量 $\hat{\boldsymbol{L}}_i$ 相同的对易关系。内部空间的转动导致

$$F(\boldsymbol{u})\to F(\boldsymbol{u}')=\exp(\mathrm{i}\alpha_i\hat{\boldsymbol{S}}_i)F(\boldsymbol{u})=\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{S}})F(\boldsymbol{u})。$$

一般地，有

$$\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u})\to\psi(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{u}')=\exp(\mathrm{i}\alpha_i(\hat{\boldsymbol{S}}_i+\hat{\boldsymbol{L}}_i))\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u})=\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{J}})\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u}),$$

其中

$$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{S}}+\hat{\boldsymbol{L}},$$

为体系的总角动量。

设函数族

$$\{\psi_{jm}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{u})\}=\{\psi_{jm}\}\equiv\{|jm\rangle\}$$

负载了 SU(2) 群的第 j 个不可约表示，即有

$$\Gamma_{\boldsymbol{g}^{-1}}|jm\rangle=\sum_{m'=-l}^{l}D^{(j)}_{m'm}(\boldsymbol{g}^{-1})|jm'\rangle=\sum_{m'=-l}^{l}D^{(j)}_{m'm}(a,b)|jm'\rangle,\quad \boldsymbol{g}\in\mathrm{SU}(2),$$

其中

$$\boldsymbol{D}^{(j)}(\boldsymbol{g}^{-1})=\boldsymbol{D}^{(j)}(a,b),$$

为 6.4 节中方程 (6.12) 给出的不可约表示矩阵。考虑无穷小变换

$$\boldsymbol{g}=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{I}-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\mathrm{i}\alpha_3 & -\alpha_2+\mathrm{i}\alpha_1\\ \alpha_2+\mathrm{i}\alpha_1 & -\mathrm{i}\alpha_3\end{pmatrix},$$

如果取

$$a=\exp(-\mathrm{i}\alpha_3/2)\approx 1-\mathrm{i}\alpha_3/2, b=0,\alpha_3\approx 0,$$

由

$$D^{(j)}_{m'm}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_3/2},0)=\delta_{m'm}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha_3}\approx\delta_{m'm}(1-\mathrm{i}m\alpha_3)$$

及对函数的作用得

$$\Gamma_{\boldsymbol{g}^{-1}}|jm\rangle=\exp(-\mathrm{i}\alpha_3\hat{J}_3)|jm\rangle=\sum_{m'=-l}^{l}D^{(j)}_{m'm}(a,b)|jm'\rangle。$$

展开后保留到 α_3 的一次项

$$(1-\mathrm{i}\alpha_3\hat{J}_3)|jm\rangle=\sum_{m'=-l}^{l}\delta_{m'm}(1-\mathrm{i}m\alpha_3)|jm'\rangle,$$

此即

$$\hat{J}_3 |jm\rangle = m |jm\rangle \text{。} \tag{6.17}$$

如果取

$$a = 1, \quad b = -\frac{\mathrm{i}\alpha_1}{2}, \quad \alpha_1 \approx 0,$$

保留到 α_1 的线性项有

$$\boldsymbol{D}^{(j)}\left(1, -\frac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_1\right)_{m'm}$$

$$= \delta_{m'm} - \frac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_1\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\delta_{m',m+1} - \frac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_1\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m',m-1},$$

以及

$$\Gamma_{\boldsymbol{g}^{-1}} |jm\rangle = \exp(-\mathrm{i}\alpha_1\hat{J}_1) |jm\rangle \approx (1 - \mathrm{i}\alpha_1\hat{J}_1) |jm\rangle ,$$

于是可以得到

$$\hat{J}_1 |jm\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)} |jm+1\rangle + \frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} |jm-1\rangle \text{。}$$

类似地，取

$$a = 1, \quad b = \frac{\alpha_2}{2}, \quad \alpha_2 \approx 0,$$

则得

$$D^{(j)}_{m'm}\left(1, \frac{1}{2}\alpha_2\right) = \delta_{m'm}$$

$$-\frac{1}{2}\alpha_2\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\delta_{m',m+1} + \frac{1}{2}\alpha_2\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m',m-1},$$

以及

$$\Gamma_{\boldsymbol{g}^{-1}} |jm\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_2\hat{J}_2} |jm\rangle \approx (1 - \mathrm{i}\alpha_2\hat{J}_2) |jm\rangle \text{。}$$

最后得到

$$\hat{J}_2 |jm\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}|jm+1\rangle + \frac{\mathrm{i}}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|jm-1\rangle \text{。}$$

引入

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm \mathrm{i}\hat{J}_2,$$

则得

$$\hat{J}_+ |jm\rangle = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}|jm+1\rangle,$$

$$\hat{J}_- |jm\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|jm-1\rangle \text{。}$$

$\hat{J}_+(\hat{J}_-)$ 称为上升 (下降) 算符，满足对易关系

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm,\ [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_3,$$

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 = \hat{J}_3^2 - \hat{J}_3 + \hat{J}_+\hat{J}_-。$$

由这些对易关系及方程 (6.17) 容易证明

$$\hat{J}_3\hat{J}_\pm |jm\rangle = \sqrt{(j \pm m+1)(j \mp m)}\hat{J}_3|jm\pm1\rangle = (m\pm1)\hat{J}_\pm |jm\rangle 。$$

所以 $\hat{J}_+(\hat{J}_-)$ 的作用是将本征值 m 增加 (减少) 1。算符 $\hat{J}^2$ 的作用给出

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 |jm\rangle &= (\hat{J}_3^2 - \hat{J}_3 + \hat{J}_+\hat{J}_-) |jm\rangle \\ &= [m^2 - m + (j+m)(j-m+1)] |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle 。\end{aligned}$$

由于不可约表示的维数是有限的，基的数目也是有限的，因此存在一个最大值 $m = j$，使得

$$\hat{J}_+ |jj\rangle = 0。$$

而 $\hat{J}_-$ 的作用给出

$$\hat{J}_3\hat{J}_- |jj\rangle = (j-1)\hat{J}_- |jj\rangle = \sqrt{2j}\,(j-1) |j, j-1\rangle, \cdots 。$$

类似地，存在一个最小值 $m = -j'$ 使得

$$\hat{J}_- |j, -j'\rangle = 0。$$

利用

$$\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 + \hat{J}_3,$$

可得

$$0 = \langle j, -j'| \hat{J}_+\hat{J}_- |j, -j'\rangle = \langle j, -j'| \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 + \hat{J}_3 |j, -j'\rangle = j(j+1) - j'^2 - j'。$$

由此得

$$j' = j。$$

因此，对固定的 j, m 可以取 $2j+1$ 个值：

$$m = j, j-1, \cdots, -j+1, -j。$$

因为态 $|j, -j\rangle$ 是算符 $\hat{J}_-$ 作用在态 $|jj\rangle$ 上 $2j$ 次后得到的，故有

$$2j = n = 0, 1, 2, \cdots,$$

或

$$j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2 \cdots。$$

因此，态 $|jm\rangle$ 是算符 $(\hat{J}^2, \hat{J}_3)$ 的共同本征态，本征值分别为 $j(j+1)$ 和 m。SU(2) 群不可约表示的基可以用角动量算符 $(\hat{J}^2, \hat{J}_3)$ 的本征值 j, m 来标记。

如果限于讨论轨道角动量，则可将基取为熟悉的球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$，有性质

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\phi), \quad \hat{L}_3 Y_{lm}(\theta,\phi) = mY_{lm}(\theta,\phi)。$$

设 $\boldsymbol{D}^{(j_1)}$ 和 $\boldsymbol{D}^{(j_2)}$ 是 SU(2) 群的两个不可约表示，相应的基为 $\{|j_1 m_1\rangle\}$ 和 $\{|j_2 m_2\rangle\}$，这些基都是角动量算符 $(\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z})$ 和 $(\hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z})$ 的本征态。按照表示的定义，有

$$\Gamma_{\boldsymbol{g}} |j_1 m_1\rangle = \sum_{m_1'=-j_1}^{j_1} D^{(j_1)}_{m_1' m_1}(g) |j_1 m_1'\rangle,$$

$$\Gamma_{\boldsymbol{g}} |j_2 m_2\rangle = \sum_{m_2'=-j_2}^{j_2} D^{(j_2)}_{m_2' m_2}(g) |j_2 m_2'\rangle,$$

其中 $\boldsymbol{g} \in \mathrm{SU}(2)$ 是 SU(2) 群的一个任意群元。考虑不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(j_1)}$ 和 $\boldsymbol{D}^{(j_2)}$ 的直积，令

$$\{|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle\},\ m_1 = -j_1, -j_1+1, \cdots, j_1-1, j_1, m_2 = -j_2, -j_2+1, \cdots, j_2-1, j_2$$

为直积空间的基，则可得

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\boldsymbol{g}}(|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle) &\equiv (\Gamma_{\boldsymbol{g}} |j_1 m_1\rangle) \otimes (\Gamma_{\boldsymbol{g}} |j_2 m_2\rangle) \\
&= \sum_{m_1'=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2'=-j_2}^{j_2} D^{(j_1)}_{m_1' m_1}(g) D^{(j_2)}_{m_2' m_2}(g) |j_1 m_1'\rangle \otimes |j_2 m_2'\rangle \\
&= \sum_{m_1'=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2'=-j_2}^{j_2} (\boldsymbol{D}^{(j_1)}(g) \otimes \boldsymbol{D}^{(j_2)}(g))_{m_1' m_2', m_1 m_2} |j_1 m_1'\rangle \otimes |j_2 m_2'\rangle,
\end{aligned}$$

一共有 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 个基，所以这个直积表示是 SU(2) 群的 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 维表示。一般来说这是一个可约表示，可以约化为不可约表示的直和

$$\boldsymbol{D}^{(j_1)} \otimes \boldsymbol{D}^{(j_2)} = \sum_j c^j_{j_1 j_2} \boldsymbol{D}^{(j)},$$

相应的特征标为

$$\chi^{(j_1)} \chi^{(j_2)} = \sum_j c^j_{j_1 j_2} \chi^{(j)}。 \tag{6.18}$$

为了计算约化系数 $c^j_{j_1 j_2}$，首先考虑不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(j)}$ 的特征标。因为任何幺正矩阵都可以通过适当的幺正变换对角化，因此有

$$\boldsymbol{g} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \to \boldsymbol{s}\boldsymbol{g}\boldsymbol{s}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha/2} \end{pmatrix},$$

由此得

$$\mathrm{Tr}(\boldsymbol{s}\boldsymbol{g}\boldsymbol{s}^{-1}) = 2\cos\frac{\alpha}{2} = \frac{\sin\alpha}{\sin\alpha/2}, \quad \boldsymbol{s}, \boldsymbol{g} \in \mathrm{SU}(2)。$$

由于 $\boldsymbol{D}^{(j)}$ 是同态，故有

$$\boldsymbol{D}^{(j)}(\boldsymbol{sgs}^{-1})=\boldsymbol{D}^{(j)}(\boldsymbol{s})\boldsymbol{D}^{(j)}(\boldsymbol{g})\boldsymbol{D}^{(j)}(\boldsymbol{s}^{-1})=\boldsymbol{D}^{(j)}(\boldsymbol{s})\boldsymbol{D}^{(j)}(\boldsymbol{g})\boldsymbol{D}^{(j)-1}(\boldsymbol{s})。$$

因而特征标为

$$\chi^{(j)}(\boldsymbol{g})=\operatorname{Tr}\boldsymbol{D}^{(j)}(\boldsymbol{g})=\operatorname{Tr}\boldsymbol{D}^{(j)}(\boldsymbol{sgs}^{-1})=\chi^{(j)}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2},0)=\sum_{m=-l}^{l}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}。$$

直积表示的特征标为

$$\begin{aligned}\chi^{(j_1)}\chi^{(j_2)}&=\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(m_1+m_2)\alpha}\\&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j_1+j_2)\alpha}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j_1+j_2-1)\alpha}\\&\quad+\cdots+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j_1-j_2)\alpha}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j_1+j_2-1)\alpha}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j_1+j_2-2)\alpha}+\cdots+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j_1-j_2-1)\alpha}\\&\quad+\cdots+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-j_1+j_2)\alpha}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-j_1+j_2-1)\alpha}+\cdots+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-j_1-j_2)\alpha}\\&=\sum_{m=-(j_1+j_2)}^{j_1+j_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}+\sum_{m=-(j_1+j_2-1)}^{j_1+j_2-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}+\cdots+\sum_{m=-|j_1-j_2|}^{|j_1-j_2|}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\alpha}\\&=\chi^{(j_1+j_2)}+\chi^{(j_1+j_2-1)}+\cdots+\chi^{(|j_1-j_2|)}。\end{aligned}$$

与方程 (6.18) 比较后就可以得到约化系数

$$c_{j_1j_2}^{j}=\begin{cases}1, & j=j_1+j_2,j_1+j_2-1,\cdots|j_1-j_2|,\\0, & \text{其他}。\end{cases}$$

因此得

$$\boldsymbol{D}^{(j_1)}\otimes\boldsymbol{D}^{(j_2)}=\boldsymbol{D}^{(j_1+j_2)}+\boldsymbol{D}^{(j_1+j_2-1)}+\cdots+\boldsymbol{D}^{(|j_1-j_2|)}=\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\boldsymbol{D}^{(j)}。$$

可以验证等式两边的维数为

$$2(j_1+j_2)+1+2(j_1+j_2-1)+1\cdots+2(|j_1-j_2|)+1=(2j_1+1)(2j_2+1)。$$

这正是两个角动量耦合的可能方式。从群论的角度来看，这只是两个不可约表示的直积约化方式。

设不可约表示 $\boldsymbol{D}^{(j)}$ 的基为 $|jm\rangle$，则有

$$|jm\rangle=\sum_{m_1,m_2}\left\langle\begin{array}{cc|c}j_1 & j_2 & j\\ m_1 & m_2 & m\end{array}\right\rangle|j_1m_1\rangle\otimes|j_2m_2\rangle,$$

其中

$$\left\langle\begin{array}{cc|c}j_1 & j_2 & j\\ m_1 & m_2 & m\end{array}\right\rangle$$

为 Clebsch-Gordan 系数，$|jm\rangle$ 是总角动量算符

$$\hat{J}^2=(\hat{J}_1+\hat{J}_2)^2,\quad \hat{J}_z=\hat{J}_{1z}+\hat{J}_{2z}$$

的本征态。上式两边用算符作用后得

$$\hat{J}_3|jm\rangle=m|jm\rangle=(\hat{J}_{1z}+\hat{J}_{2z})\sum_{m_1,m_2}\left\langle\begin{array}{ccc|c} j_1 & j_2 & & j \\ m_1 & m_2 & & m\end{array}\right\rangle|j_1m_1\rangle\otimes|j_2m_2\rangle$$

$$=m\sum_{m_1,m_2}\left\langle\begin{array}{ccc|c} j_1 & j_2 & & j \\ m_1 & m_2 & & m\end{array}\right\rangle|j_1m_1\rangle\otimes|j_2m_2\rangle$$

$$=\sum_{m_1,m_2}(m_1+m_2)\left\langle\begin{array}{ccc|c} j_1 & j_2 & & j \\ m_1 & m_2 & & m\end{array}\right\rangle|j_1m_1\rangle\otimes|j_2m_2\rangle,$$

可得

$$\left\langle\begin{array}{ccc|c} j_1 & j_2 & & j \\ m_1 & m_2 & & m\end{array}\right\rangle=0,\quad m\neq m_1+m_2。$$

从上面的讨论可知

$$\left\langle\begin{array}{ccc|c} j_1 & j_2 & & j \\ m_1 & m_2 & & m\end{array}\right\rangle\neq 0,\quad j=j_1+j_2,j_1+j_2-1,\cdots,|j_1-j_2|,$$

如果基是归一化的，即

$$\langle jm|jm\rangle=1,$$

则 C-G 系数满足

$$\langle jm|jm\rangle=\sum_{\substack{m_1,m_2\\m_1',m_2'}}\left\langle\begin{array}{ccc|c} j_1 & j_2 & & j \\ m_1 & m_2 & & m\end{array}\right\rangle\left\langle\begin{array}{ccc|c} j & & & j_1 & j_2 \\ m & & & m_1' & m_2'\end{array}\right\rangle\langle j_1m_1'|j_1m_1\rangle\otimes\langle j_2m_2'|j_2m_2\rangle$$

$$=\sum_{\substack{m_1,m_2,\\m_1',m_2'}}\left\langle\begin{array}{ccc|c} j_1 & j_2 & & j \\ m_1 & m_2 & & m\end{array}\right\rangle\left\langle\begin{array}{ccc|c} j & & & j_1 & j_2 \\ m & & & m_1' & m_2'\end{array}\right\rangle\delta_{m_1'm_1}\delta_{m_2'm_2}$$

$$=\sum_{m_1,m_2}\left|\left\langle\begin{array}{ccc|c} j_1 & j_2 & & j \\ m_1 & m_2 & & m\end{array}\right\rangle\right|^2=1。$$

由

$$\langle jm|j'm'\rangle=\delta_{jj'}\delta_{mm'},$$

以及

$$\langle j'm'|jm\rangle=\sum_{\substack{m_1,m_2\\m_1',m_2'}}\left\langle\begin{array}{ccc|c} j' & & & j_1' & j_2' \\ m' & & & m_1' & m_2'\end{array}\right\rangle\left\langle\begin{array}{ccc|c} j_1 & j_2 & & j \\ m_1 & m_2 & & m\end{array}\right\rangle\langle j_1'm_1'|j_1m_1\rangle\otimes\langle j_2'm_2'|j_2m_2\rangle,$$

可得

$$\langle j'm' \,|jm\rangle = \sum_{m_1,m_2} \left\langle \begin{matrix} j' \\ m' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \right\rangle \left\langle \begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix} \right\rangle$$

$$= \sum_{m_1,m_2} \left\langle \begin{matrix} j' \\ m' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \right\rangle \left\langle \begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix} \right\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}。$$

类似地有

$$\sum_j \left\langle \begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix} \right\rangle \left\langle \begin{matrix} j \\ m' \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1' & m_2' \end{matrix} \right\rangle \delta_{mm'} = \delta_{m_1'm_1}\delta_{m_2'm_2}。$$

C-G 系数有个不确定的相因子，通常要求

$$\left\langle \begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix} \right\rangle = \left\langle \begin{matrix} j_1 & j_2 \\ j_1 & -j_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ j_1-j_2 \end{matrix} \right\rangle = \text{正实数}$$

来确定相因子。

SU(2) 群的 C-G 系数有一个一般公式

$$\left\langle \begin{matrix} j_1 & j_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix} \right\rangle = \left[\frac{(2j+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!}{(j_1+j_2+j+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\cdot \sum_\mu \frac{(-1)^\mu[(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j+m)!(j-m)!]^{1/2}}{\mu!(j_1+j_2-j-\mu)!(j_1-m_1-\mu)!(j_2+m_2-\mu)!(j-j_2+m_1+\mu)!(j-j_1+m_2+\mu)!}。$$

下面给出一些约化的具体例子。

$$\boldsymbol{D}^{(1/2)} \otimes \boldsymbol{D}^{(1/2)} = \boldsymbol{D}^{(1)} + \boldsymbol{D}^{(0)},$$

$$|11\rangle = \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\right],$$

$$|1-1\rangle = \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle - \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle\right];$$

$$\boldsymbol{D}^{(1)} \otimes \boldsymbol{D}^{(1/2)} = \boldsymbol{D}^{(3/2)} + \boldsymbol{D}^{(1/2)},$$

$$\left|\frac{3}{2}\frac{3}{2}\right\rangle = |11\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left|11\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|10\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$\left|\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\left|10\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|1-1\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$\left|\frac{3}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle = |1-1\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|11\right\rangle\otimes\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|10\right\rangle\otimes\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|10\right\rangle\otimes\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|1-1\right\rangle\otimes\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle;$$

以及

$$\boldsymbol{D}^{(l)}\otimes\boldsymbol{D}^{(1/2)}=\boldsymbol{D}^{(l+1/2)}+\boldsymbol{D}^{(l-1/2)},$$

$$\boldsymbol{D}^{(l)}\otimes\boldsymbol{D}^{(1)}=\boldsymbol{D}^{(l+1)}+\boldsymbol{D}^{(l)}+\boldsymbol{D}^{(l-1)},$$

$$\boldsymbol{D}^{(l)}\otimes\boldsymbol{D}^{(2)}=\boldsymbol{D}^{(l+2)}+\boldsymbol{D}^{(l+1)}+\boldsymbol{D}^{(l)}+\boldsymbol{D}^{(l-1)}+\boldsymbol{D}^{(l-2)}$$

等。

6.8 转动矩阵 $\boldsymbol{D}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的一些性质

由上节导出的表达式 (6.5) 可见，利用 Euler 角，任意转动可以写成

$$\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\boldsymbol{R}_z(\alpha)\boldsymbol{R}_y(\beta)\boldsymbol{R}_z(\gamma)。$$

利用 SO(3) 群的无穷小生成元，可以将其写成

$$\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathrm{e}^{\alpha\boldsymbol{X}_3}\mathrm{e}^{\beta\boldsymbol{X}_2}\mathrm{e}^{\gamma\boldsymbol{X}_3}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{J}_3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\boldsymbol{J}_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3},$$

其中 $\boldsymbol{J}_k=\mathrm{i}\boldsymbol{X}_k$ 满足对易关系

$$[\boldsymbol{J}_k,\boldsymbol{J}_l]=\mathrm{i}\varepsilon_{klm}\boldsymbol{J}_m。$$

将 $\boldsymbol{R}$ 对参数 (α,β,γ) 微分，给出

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\alpha}\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\boldsymbol{J}_3\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\boldsymbol{R}(\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{J}_3\boldsymbol{R}),\tag{6.19}$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\beta}\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{J}_3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\boldsymbol{J}_2}\boldsymbol{J}_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}=\boldsymbol{R}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}\boldsymbol{J}_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}),\tag{6.20}$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\gamma}\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\boldsymbol{R}\boldsymbol{J}_3。\tag{6.21}$$

利用 Baker-Campbell-Hausdorff 公式，可以计算出前两个方程右边的方括号内的部分，利用公式

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{B}\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{B}+[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]+\frac{1}{2!}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]+\frac{1}{3!}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]]+\cdots,$$

可得

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}\boldsymbol{J}_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}&=\boldsymbol{J}_2+[\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3,\boldsymbol{J}_2]+\frac{1}{2!}[\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3,[\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3.\boldsymbol{J}_2]]+\cdots\\&=\boldsymbol{J}_2+\gamma\boldsymbol{J}_1-\frac{1}{2!}\gamma^2\boldsymbol{J}_2+\cdots+\frac{(-1)^n\gamma^{2n}}{(2n)!}\boldsymbol{J}_2+\frac{(-1)^n\gamma^{2n+1}}{(2n+1)!}\boldsymbol{J}_1+\cdots\end{aligned}$$

$$= \boldsymbol{J}_1 \sin\gamma + \boldsymbol{J}_2 \cos\gamma = \frac{\mathrm{i}}{2}(-\boldsymbol{J}_+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma} + \boldsymbol{J}_- \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}),$$

其中 $\boldsymbol{J}_\pm = \boldsymbol{J}_1 \pm \mathrm{i}\boldsymbol{J}_2$，而

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{J}_3\boldsymbol{R} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\boldsymbol{J}_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{J}_3}\boldsymbol{J}_3\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{J}_3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\boldsymbol{J}_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\boldsymbol{J}_2}\boldsymbol{J}_3\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\boldsymbol{J}_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3} \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}\left(\boldsymbol{J}_3 + [\mathrm{i}\beta\boldsymbol{J}_2, \boldsymbol{J}_3] + \frac{1}{2!}[\mathrm{i}\beta\boldsymbol{J}_2, [\mathrm{i}\beta\boldsymbol{J}_2, \boldsymbol{J}_3]] + \cdots\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3} \\
&= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}\left(\boldsymbol{J}_3 - \beta\boldsymbol{J}_1 - \frac{1}{2!}\beta^2\boldsymbol{J}_3 + \cdots + \frac{(-1)^n\beta^{2n}}{(2n)!}\boldsymbol{J}_3 + \frac{(-1)^n\beta^{2n+1}}{(2n+1)!}\boldsymbol{J}_1 + \cdots\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3} \\
&= \boldsymbol{J}_3\cos\beta - \sin\beta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3}\boldsymbol{J}_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{J}_3} = \boldsymbol{J}_3\cos\beta - \sin\beta(\boldsymbol{J}_1\cos\gamma - \boldsymbol{J}_2\sin\gamma) \\
&= -\frac{1}{2}\sin\beta(\boldsymbol{J}_+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma} + \boldsymbol{J}_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}) + \boldsymbol{J}_3\cos\beta。
\end{aligned}$$

由这些可以得到

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}\left[-\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\mathrm{i}}{\sin\beta}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha} - \cos\beta\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)\right]\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{J}_+, \tag{6.22}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}\left[\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\mathrm{i}}{\sin\beta}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha} - \cos\beta\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)\right]\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{J}_-, \tag{6.23}$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\gamma}\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma) = \boldsymbol{R}\boldsymbol{J}_3。 \tag{6.24}$$

再由 $\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{J}_1^2 + \boldsymbol{J}_2^2 + \boldsymbol{J}_3^2 = \boldsymbol{J}_+\boldsymbol{J}_- + \boldsymbol{J}_3^2 - \boldsymbol{J}_3$，可得

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{R}\boldsymbol{J}^2 &= \boldsymbol{R}[\boldsymbol{J}_+\boldsymbol{J}_- + \boldsymbol{J}_3^2 - \boldsymbol{J}_3] \\
&= \left\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}\left[-\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\mathrm{i}}{\sin\beta}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha} - \cos\beta\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)\right]\right. \\
&\quad \left.\cdot\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}\left[\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{\mathrm{i}}{\sin\beta}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha} - \cos\beta\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)\right] - \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} - \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right\}\boldsymbol{R} \\
&= -\left[\frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\right) + \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} - 2\cos\beta\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma}\right)\right]\boldsymbol{R},
\end{aligned}$$

与转动 $\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma)$ 对应的算符 $\Gamma_{\boldsymbol{R}^{-1}}$ 作用在表示空间后得

$$\Gamma_{\boldsymbol{R}^{-1}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\hat{\boldsymbol{J}}_3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\hat{\boldsymbol{J}}_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\hat{\boldsymbol{J}}_3},$$

其中 $\hat{\boldsymbol{J}}_k$ 为角动量算符。所以算符 $\Gamma_{\boldsymbol{R}^{-1}}$ 满足同样的方程

$$\Gamma_{\boldsymbol{R}^{-1}}\hat{\boldsymbol{J}}^2 = -\left[\frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\right) + \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} - 2\cos\beta\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma}\right)\right]\Gamma_{\boldsymbol{R}^{-1}}。$$

将上式夹在态 $|jm\rangle$ 和 $\langle jm'|$ 之间后得

$$\left[\frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\right)+\frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}+\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}-2\cos\beta\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma}\right)+j(j+1)\right] \tag{6.25}$$
$$(\boldsymbol{D}^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma))_{m'm}=0,$$

其中利用了

$$\Gamma_{\boldsymbol{R}^{-1}}|jm\rangle=\sum_{m'}D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)|jm'\rangle,\qquad \hat{J}^2|jm\rangle=j(j+1)|jm\rangle。$$

考虑 $m=0$ 的情形，并将记号 (jm') 改为 (lm)，将变量 (β,α) 改为 (θ,ϕ)，则由方程 (6.25) 可以得到

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+l(l+1)\right]D^{(l)}_{m0}(\phi,\theta,0)=0。$$

这正是熟悉的球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ 所满足的微分方程，考虑到归一化因子，可以令

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{1/2}D^{(l)*}_{m0}(\phi,\theta,0)。$$

如果取球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ 作为表示空间的基，则有

$$\Gamma_{\boldsymbol{R}^{-1}}Y_{lm}(\theta,\phi)=Y_{lm}(R(\theta,\phi))=Y_{lm}(\theta',\phi')=\sum_{m'}D^{(l)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)Y_{lm'}(\theta,\phi)。$$

考虑特殊情况 $m=0$，就得到熟悉的球谐函数加法定理

$$Y_{l0}(\theta',\phi')=\sum_{m'}D^{(l)}_{m'0}(\alpha,\beta,\gamma)Y_{lm'}(\theta,\phi)=\sum_{m'}\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{1/2}Y^*_{lm'}(\beta,\alpha)Y_{lm'}(\theta,\phi),$$

即

$$P_l(\cos\theta')=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m'}Y^*_{lm'}(\beta,\alpha)Y_{lm'}(\theta,\phi)。$$

将公式 (6.15) 用于 SO(3) 群，得到

$$\frac{2l+1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\alpha\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\cos\beta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\gamma D^{(l)*}_{mn}(\alpha,\beta,\gamma)D^{(l')}_{m'n'}(\alpha,\beta,\gamma)=\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}。$$

这意味着不可约表示 $D^{(l')}_{m'n'}(\alpha,\beta,\gamma)$ 在群流形上构成完备集合，定义在群流形上的任意函数 $f(\alpha,\beta,\gamma)$ 都可以用这组完备基展开为

$$f(\alpha,\beta,\gamma)=\sum_{l,m,n}f^l_{mn}D^{(l)}_{mn}(\alpha,\beta,\gamma),$$

其中

$$f^l_{mn}=\frac{2l+1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\alpha\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\cos\beta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\gamma D^{(l)*}_{mn}(\alpha,\beta,\gamma)f(\alpha,\beta,\gamma),$$

由此可以得到完备性关系

$$\frac{2l+1}{8\pi^2}\sum_{l,m,n} D^{(l)*}_{mn}(\alpha',\beta',\gamma')D^{(l)}_{mn}(\alpha,\beta,\gamma)=\delta(\alpha-\alpha')\delta(\cos\beta-\cos\beta')\delta(\gamma-\gamma')。$$

最后简单讨论下 O(3) 群的不可约表示。如果用 i 表示空间反演，即

$$\boldsymbol{X}\to\boldsymbol{X}'=i\boldsymbol{X}=-\boldsymbol{X}\to i=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}=-\boldsymbol{I},$$

则 O(3) 群的群元可以分为两类，即 $\{\boldsymbol{R}|\boldsymbol{R}\in \mathrm{SO}(3)\}$ 及 $\{-\boldsymbol{I}\boldsymbol{R}|\boldsymbol{R}\in \mathrm{SO}(3)\}$。因此只要知道了空间反演操作的表示，也就知道了 O(3) 群的不可约表示。我们知道，球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ 可以作为负载 SO(3) 群不可约表示的基。在空间反演下，$\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}$，或 $\theta\to\pi-\theta,\phi\to\phi+\pi$。因此有

$$Y_{lm}(\theta,\phi)\to\hat{I}_iY_{lm}(\theta,\phi)=Y_{lm}(\pi-\theta,\pi+\phi)=(-1)^lY_{lm}(\theta,\phi)。$$

即空间反演操作的表示矩阵为

$$\boldsymbol{D}^{(l)}(-\boldsymbol{I})=(-1)^l\boldsymbol{I}_{2l+1}。$$

6.9 Lorentz 群及其表示

Einstein 的狭义相对论将时间和空间统一起来，提出了四维时空的概念。三维空间的对称群是 Euclid 群 E_3，其中包括三维空间的转动和平移。四维时空的对称群则是 Poincaré 群，其中包括 Lorentz 变换和四维时空的平移。Lorentz 变换的全体构成群，即 Lorentz 群 L，或 O(3,1) 群。

四维时空的坐标向量可以表示为

$$x^\mu=(x^0,\boldsymbol{x})=(ct,\boldsymbol{x}),$$

其中 $\boldsymbol{x}$ 是三维空间的位矢。四维向量的长度平方定义为

$$x^2=x^\mu x_\mu=g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu=\boldsymbol{x}^2-(x^0)^2=\boldsymbol{x}^2-c^2t^2,$$

其中 $g_{\mu\nu}$ 为四维时空的度规张量，通常可取为

$$\boldsymbol{g}=(g_{\mu\nu})=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}。$$

一般的 Lorentz 变换

$$x^\mu\to x'^\mu=\Lambda^\mu_\nu x^\nu,\quad \mu,\nu=0,1,2,3$$

保持四维时空向量的长度平方不变，即

$$x^2 = g_{\alpha\beta}x^\alpha x^\beta = x'^2 = g_{\mu\nu}\Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta x^\alpha x^\beta。$$

由此即得

$$g_{\alpha\beta} = g_{\mu\nu}\Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta, \tag{6.26}$$

或

$$\Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta g^{\alpha\beta} = g^{\mu\nu}, \tag{6.27}$$

其中 $g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$。Lorentz 变换矩阵 (Λ^μ_ν) 有 16 个分量，方程 (6.26) 给出 10 个约束条件，因此 Lorentz 群有 6 个独立参数。将方程 (6.27) 写成矩阵形式，有

$$\boldsymbol{\Lambda g \Lambda}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{g}。 \tag{6.28}$$

两边乘 $\boldsymbol{g}$ 并利用 $\boldsymbol{gg} = \boldsymbol{I}$ 后得

$$\boldsymbol{\Lambda g \Lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{I},$$

即

$$\boldsymbol{g\Lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{\Lambda}^{-1}。$$

对方程 (6.28) 取行列式后得

$$(\det \boldsymbol{\Lambda})^2 = 1。$$

由此得

$$\det \boldsymbol{\Lambda} = \pm 1。$$

与单位元连通的变换必须满足行列式为 1 的条件，即

$$\det \boldsymbol{\Lambda} = \Lambda^0_\mu \Lambda^1_\nu \Lambda^2_\alpha \Lambda^3_\beta \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} = 1,$$

其中 $\varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta}$ 是四维时空的全反对称张量，且 $\varepsilon^{0123} = 1$。上式可以推广为

$$\Lambda^\lambda_\mu \Lambda^\sigma_\nu \Lambda^\gamma_\alpha \Lambda^\kappa_\beta \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} = \varepsilon^{\lambda\sigma\gamma\kappa}。$$

在方程 (6.26) 中，令 $\alpha = \beta = 0$，得

$$(\Lambda^0_0)^2 - \sum_i (\Lambda^i_0)^2 = 1。$$

上式给出约束 $(\Lambda^0_0)^2 \geqslant 1$。因此有

$$\Lambda^0_0 \geqslant 1 \quad 或 \quad \Lambda^0_0 \leqslant -1。$$

由于恒等变换有 $\Lambda^0_0 = 1$，因此与单位元连通的变换必须有

$$\Lambda^0_0 \geqslant 1。$$

综上所述，一般 Lorentz 群按 $\det \boldsymbol{\Lambda} = \pm 1$ 和 $\Lambda_0^0 \geqslant 1$ 或 $\Lambda_0^0 \leqslant -1$ 分为 4 个不连通的分支。其中满足 $\det \boldsymbol{\Lambda} = 1$, $\Lambda_0^0 \geqslant 1$ 的分支包含单位元，本身构成群，且是一般 Lorentz 群的不变子群，称为真 Lorentz 群，或固有 Lorentz 群，用 $L_+^\uparrow$ 表示。其余分支则包括了时间反演和空间反演，分别用 $L_+^\downarrow, L_-^\uparrow, L_-^\downarrow$ 表示。可以将一般 Lorentz 群按其不变子群分解为

$$L = L_+^\uparrow \oplus \boldsymbol{g} L_+^\uparrow \oplus (-\boldsymbol{g}) L_+^\uparrow \oplus (-\boldsymbol{I}) L_+^\uparrow,$$

其中 $\boldsymbol{I}$ 为 4×4 单位矩阵。商群

$$L / L_+^\uparrow = \{\boldsymbol{I}, \boldsymbol{g}, -\boldsymbol{g}, -\boldsymbol{I}\}$$

是一个四阶群。

显然，三维空间的转动是一般 Lorentz 变换的特殊情况，可以写成

$$(\Lambda_\nu^\mu) = \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & R_1^1 & R_2^1 & R_3^1 \\ 0 & R_1^2 & R_2^2 & R_3^2 \\ 0 & R_1^3 & R_2^3 & R_3^3 \end{pmatrix},$$

其中 (R_j^i) 是 3×3 的三维转动矩阵。沿 x_1 方向的特殊 Lorentz 变换则可以写成

$$(\Lambda_\nu^\mu) = \boldsymbol{L}(\xi_1) = \begin{pmatrix} \cosh \xi_1 & \sinh \xi_1 & 0 & 0 \\ \sinh \xi_1 & \cosh \xi_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

其中

$$\cosh \xi_1 = \gamma = \frac{1}{\sqrt{(1 - v_1^2/c^2)}}, \quad \sinh \xi_1 = \gamma \frac{v_1}{c}。$$

由于 Lorentz 群的参数不是在一个有限范围内取值，因此，Lorentz 群是非紧致群。此外，与 SO(3) 群和 SU(2) 群不同，Lorentz 变换矩阵不是幺正的。

考虑无穷小变换，令

$$\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

代入方程 (6.28) 后得

$$\boldsymbol{\varepsilon g} + \boldsymbol{g \varepsilon}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{0}。$$

如果将矩阵 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的元素写成 $\omega_{\mu\nu}$，则将度规张量 $\boldsymbol{g}$ 代入上式后得

$$\omega_{00} = \omega_{ii} = 0, \ \omega_{0i} = \omega_{i0} = \xi_i, \ \omega_{ij} = -\omega_{ji} = -\varepsilon_{ijk} \alpha_k,$$

即

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 0 & \xi_1 & \xi_2 & \xi_3 \\ \xi_1 & 0 & -\alpha_3 & \alpha_2 \\ \xi_2 & \alpha_3 & 0 & -\alpha_1 \\ \xi_3 & -\alpha_2 & \alpha_1 & 0 \end{pmatrix} = \xi_i \boldsymbol{K}_i + \alpha_i \boldsymbol{J}_i, \tag{6.29}$$

其中 $\boldsymbol{K}_i(i=1,2,3)$ 和 $\boldsymbol{J}_i(i=1,2,3)$ 是分别对应纯 Lorentz 变换和空间转动的无穷小生成元，满足对易关系

$$[\boldsymbol{K}_i,\boldsymbol{K}_j]=-\varepsilon_{ijk}\boldsymbol{J}_k,\quad [\boldsymbol{J}_i,\boldsymbol{J}_j]=\varepsilon_{ijk}\boldsymbol{J}_k,\quad [\boldsymbol{J}_i,\boldsymbol{K}_j]=\varepsilon_{ijk}\boldsymbol{K}_k。$$

一般的 Lorentz 变换可以表示为

$$\boldsymbol{\Lambda}=\exp(\xi_i\boldsymbol{K}_i+\alpha_i\boldsymbol{J}_i)。$$

由方程 (6.29) 可以得到 Lorentz 群的六个无穷小算符

$$\hat{\boldsymbol{K}}_1=x_1\frac{\partial}{c\partial t}+ct\frac{\partial}{\partial x_1},\quad \hat{\boldsymbol{K}}_2=x_2\frac{\partial}{c\partial t}+ct\frac{\partial}{\partial x_2},\quad \hat{\boldsymbol{K}}_3=x_3\frac{\partial}{c\partial t}+ct\frac{\partial}{\partial x_3},\tag{6.30}$$

$$\hat{\boldsymbol{J}}_1=x_2\frac{\partial}{\partial x_3}-x_3\frac{\partial}{\partial x_2},\quad \hat{\boldsymbol{J}}_2=x_3\frac{\partial}{\partial x_1}-x_1\frac{\partial}{\partial x_3},\quad \hat{\boldsymbol{J}}_3=x_1\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_1},\tag{6.31}$$

满足对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{K}}_i,\hat{\boldsymbol{K}}_j]=\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{J}}_k,\quad [\hat{\boldsymbol{J}}_i,\hat{\boldsymbol{J}}_j]=-\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{J}}_k,\quad [\hat{\boldsymbol{J}}_i,\hat{\boldsymbol{K}}_j]=-\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{K}}_k。$$

引入

$$\hat{\boldsymbol{L}}_i=-\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{J}}_i+\mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{K}}_i),\quad \hat{\boldsymbol{M}}_i=-\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{J}}_i-\mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{K}}_i),\quad i=1,2,3,$$

可得对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{L}}_i,\hat{\boldsymbol{L}}_j]=\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{L}}_k,\quad [\hat{\boldsymbol{M}}_i,\hat{\boldsymbol{M}}_j]=\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{M}}_k,\ [\hat{\boldsymbol{L}}_i,\hat{\boldsymbol{M}}_j]=\boldsymbol{0},\quad i,j,k=1,2,3。$$

因此，Lorentz 群的六个无穷小算符可以重新组合为两组互相对易的算符，也就是说，Lorentz 群的 Lie 代数可以和 SU(2) × SU(2) 群的 Lie 代数建立同构关系。因而可以由 SU(2) × SU(2) Lie 代数的不可约表示得到 Lorentz 群的不可约表示。

类似于 SO(3) 群的做法，利用 3 个 Pauli 矩阵和 2×2 的单位矩阵定义

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{\sigma}_\mu x^\mu=\begin{pmatrix}x^0+x^3 & x^1-\mathrm{i}\,x^2\\ x^1+\mathrm{i}\,x^2 & x^0-x^3\end{pmatrix},$$

考虑变换

$$\boldsymbol{X}\to\boldsymbol{X}'=\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}^\dagger,\tag{6.32}$$

其中 $\boldsymbol{A}\in\mathrm{SL}(2,\mathbf{C})$ 是 2×2 的幺模复矩阵，$\det\boldsymbol{A}=1$。上式取行列式后得

$$-x'^2=\det\boldsymbol{X}'=\det(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}^\dagger)=|\det\boldsymbol{A}|^2\det\boldsymbol{X}=\det\boldsymbol{X}=-x^2。$$

即变换 (6.32) 保持四维向量长度平方不变。因此，由 $\mathrm{SL}(2,\mathbf{C})$ 的一个元 $\boldsymbol{A}$ 就诱导出 Lorentz 群 $L_+^\uparrow$ 的一个元。容易看到，$\mathrm{SL}(2,\mathbf{C})$ 群的独立参数也是 6 个。由于变换 (6.32) 是 $\boldsymbol{A}$ 的二次形式，$\boldsymbol{A}$ 和 $-\boldsymbol{A}$ 给出的是相同的 Lorentz 变换，因此这是一个 $2-1$ 对应。这和 SU(2) 群与 SO(3) 群之间的同态关系完全是类似的。

容易看到，$\mathrm{SL}(2,\mathbf{C})$ 的元

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \qquad (ad-bc=1)$$

及其复共轭

$$\boldsymbol{A}^*=\begin{pmatrix} a^* & b^* \\ c^* & d^* \end{pmatrix} \qquad (a^*d^*-b^*c^*=1)$$

都是 $\mathrm{SL}(2,\mathbf{C})$ 的不可约表示，称为基本表示，分别记为 $(0,1/2)$ 和 $(1/2,0)$。一般的不可约表示记为 (l_1,l_2)，它可以通过基本表示的直积约化得到。当 $l_1+l_2=$ 整数时，就给出 Lorentz 群的不可约表示。与前面讨论的情况不同，由于 Lorentz 群不是紧致 Lie 群，这样得到的不可约表示不是幺正的，也不能证明这些表示是完全的。但 Lorentz 群可以存在无限维的幺正表示。

可以证明，Lorentz 标量按不可约表示 $(0,0)$ 变换，向量按 $(1/2,1/2)$ 变换，无迹对称张量则按 $(1,1)$ 变换。

6.10 经典 Lie 群的张量表示

容易证明，如果 $\boldsymbol{D}(g)(g\in G)$ 是群 G 的一个表示，则

$$(\boldsymbol{D}^{-1}(g))^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{D}^*(g),\ (\boldsymbol{D}^{-1}(g))^{\dagger}, \qquad g\in G \tag{6.33}$$

也是群 G 的表示。这是因为有

$$(\boldsymbol{D}^{-1}(g_1))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{D}^{-1}(g_2))^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{D}^{-1}(g_2)\boldsymbol{D}^{-1}(g_1))^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{D}^{-1}(g_1g_2))^{\mathrm{T}}$$

等。对一般线性 Lie 群 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 而言，其群元 $\boldsymbol{g}\in\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 本身是 $n\times n$ 的矩阵，因而是其自身的一个 n 维不可约表示，即基本表示。显然，如果令 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{g})=\boldsymbol{g}$，则表示 (6.33) 都是和 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{g})=\boldsymbol{g}$ 不等价的不可约表示。比如说，要是 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{g})=\boldsymbol{g}$ 与 $\boldsymbol{D}^*(\boldsymbol{g})=\boldsymbol{g}^*$ 等价，则意味着存在一个 $n\times n$ 的非奇异矩阵 $\boldsymbol{S}$，满足

$$\boldsymbol{g}^*=\boldsymbol{S}\boldsymbol{g}\boldsymbol{S}^{-1},\quad \boldsymbol{g}\in\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})。$$

但上式不可能成立，因为 $\boldsymbol{g}\in\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 是任意的非奇异 $n\times n$ 复矩阵，不存在任何其他的约束条件。

由这四个基本表示出发，通过矩阵直积的方式，就可以得到 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 的所有有限维不可约表示。

如果负载表示 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{g})=\boldsymbol{g}$ 的向量空间是 V，则 V 中向量 $\boldsymbol{x}\in V$ 为逆变向量，按如下方式变换

$$x'^a=g^a{}_bx^b,$$

而负载表示 $(\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{g}))^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{g}^{-1})^{\mathrm{T}}$ 的向量空间就是 V 的对偶空间 $\tilde{V}$，其中向量 $\boldsymbol{y}\in\tilde{V}$ 为协变向量，按如下方式变换：

$$y'_a=[(\boldsymbol{g}^{-1})^{\mathrm{T}}]_a{}^by_b=y_b(\boldsymbol{g}^{-1})^b{}_a。$$

逆变向量和协变向量的内积

$$(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})=y_a x^a=y'_a x'^a$$

在 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的变换下是不变量。类似地，负载表示 $\boldsymbol{D}^*(\boldsymbol{g})=\boldsymbol{g}^*$ 和 $(\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{g}))^\dagger=(\boldsymbol{g}^{-1})^\dagger$ 的向量空间可分别记为 V^* 和 $\tilde{V}^*$，其中的向量称为带点的协变向量和带点的逆变向量，其变换规律分别为

$$z'_{\dot{a}}=(\boldsymbol{g}^*)_{\dot{a}}{}^{\dot{b}}z_{\dot{b}}=z_{\dot{b}}(\boldsymbol{g}^\dagger)^{\dot{b}}{}_{\dot{a}},$$

及

$$w'^{\dot{a}}=((\boldsymbol{g}^{-1})^\dagger)^{\dot{a}}{}_{\dot{b}}w^{\dot{b}}。$$

同样，内积

$$(w,z)=w^{\dot{a}}z_{\dot{a}}=w'^{\dot{a}}z'_{\dot{a}}$$

也是 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的不变量。

将这 4 个基本向量空间作任意次的张量积，就得到一个一般的张量空间。这个张量空间可以负载 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的表示，即张量表示。

考虑向量空间 V 和 $\tilde{V}$ 的直积 $V\otimes\tilde{V}$，即一阶逆变和一阶协变张量空间，其中的元称为 $(1,1)$ 型张量，其变换关系为

$$T'^a{}_b=g^a{}_c T^c{}_d(g^{-1})^d{}_b。$$

容易看到 δ 符号在 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群变换下不变：

$$\delta'^a{}_b=g^a{}_c\delta^c{}_d(g^{-1})^d{}_b=g^a{}_c(g^{-1})^c{}_b=\delta^a{}_b。$$

易证 δ 符号是唯一在 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群变换下不变的 $(1,1)$ 型张量。如果存在其他的不变 $(1,1)$ 型张量，就会给矩阵 $\boldsymbol{g}$ 加上额外的约束条件。张量 $T^a{}_b$ 的迹也是 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群变换下的不变量，即

$$\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{T}'=T'^a{}_a=g^a{}_c T^c{}_d(\boldsymbol{g}^{-1})^d{}_a=\delta^d{}_c T^c{}_d=T^c{}_c=\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{T}。$$

张量 $T^a{}_b$ 负载的表示即为两个基本表示的直积 $\boldsymbol{g}\otimes(\boldsymbol{g}^{-1})^{\mathrm{T}}$，这是一个 n^2 维的可约表示。但张量 $T^a{}_b$ 可以分解为

$$T^a{}_b=\hat{T}^a{}_b+\delta^a{}_b\left(\frac{1}{n}\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{T}\right),$$

其中张量的迹负载了 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的恒等表示，无迹张量

$$\hat{T}^a{}_b=T^a{}_b-\delta^a{}_b\left(\frac{1}{n}\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{T}\right)$$

负载了 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的 n^2-1 维不可约表示。这是因为取迹是 $(1,1)$ 型张量唯一与 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群对易的操作，无迹张量 $\hat{T}^a{}_b$ 不可能再作进一步的约化，因而是不可约的。

$(1,1)$ 型张量可以推广为 (i,j) 型张量，即由 i 个 V 和 j 个 $\tilde{V}$ 直积而成的张量空间，其中的张量变换关系为

$$T'^{a_1a_2\cdots a_i}{}_{b_1b_2\cdots b_j}=g^{a_1}{}_{c_1}g^{a_2}{}_{c_2}\cdots g^{a_i}{}_{c_i}T^{c_1c_2\cdots c_i}{}_{d_1d_2\cdots d_j}(\boldsymbol{g}^{-1})^{d_1}{}_{b_1}(\boldsymbol{g}^{-1})^{d_2}{}_{b_2}\cdots(\boldsymbol{g}^{-1})^{d_j}{}_{b_j},$$

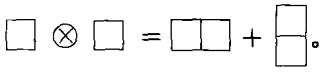
其中 $(0,0)$ 型张量即为标量或不变量，负载的是恒等表示，$(1,0)$ 型张量即为逆变向量，负载的是基本表示 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{g})=\boldsymbol{g}$，而 $(0,1)$ 型张量即为协变向量，负载的是基本表示 $(\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{g}))^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{g}^{-1})^{\mathrm{T}}$。

考虑 $(2,0)$ 型张量，可以将任意的二阶逆变张量 T^{ab} 分解为对称张量与反对称张量之和，即

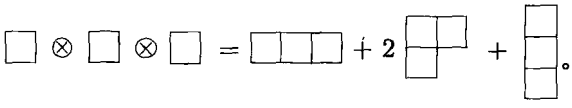
$$T^{ab}=\frac{1}{2}(T^{ab}+T^{ba})+\frac{1}{2}(T^{ab}-T^{ba})=T^{(ab)}+T^{[ab]}。$$

它们分别都是 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的不变子空间，因而负载了 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的不可约表示，其中对称表示的维数为 $\frac{1}{2}n(n+1)$，反对称表示的维数为 $\frac{1}{2}n(n-1)$。

这样一种约化方式，也可以看成是逆变张量 T^{ab} 的两个指标在置换群 S_2 作用下的所有可能对称化方式。这个约化可以用 S_n 群的外积约化方式进行，常常用 Young 图表示为



因此对三阶张量 T^{abc} 而言，用置换群 S_3 对指标 a,b,c 进行所有可能的对称化分解，就给出了三阶张量空间所有不变子空间的约化，也就给出了三阶逆变张量 T^{abc} 负载的所有不可约表示。可以用 Young 图表示为



相应的维数分别为

$$d_{[3]}=\frac{1}{3!}n(n+1)(n+2),\ d_{[2,1]}=\frac{1}{3}n(n-1)(n+1),\ d_{[1^3]}=\frac{1}{3!}n(n-1)(n-2)。$$

一般地，对 $(i,0)$ 型张量，则用置换群 S_i 来进行对称化分解。而对 $(0,j)$ 型张量，则用置换群 S_j 来进行对称化分解。这样即给出了相应张量空间的不变子空间。这个约化过程也可以类似地用 Young 图表示。

对于混合型的 (i,j) 型张量，由于迹是不变量，除了对逆变指标和协变指标分别进行对称化分解外，还应对任意一对上下指标进行无迹化。可以证明，一个任意的 (i,j) 型张量可以按下列方式唯一分解为无迹张量之和 (假定 $i<j$)：

$$\begin{aligned}T^{a_1,a_2,\cdots,a_i}_{\ \ b_1,b_2,\cdots,b_j}=&\hat{T}^{a_1,a_2,\cdots,a_i}_{\ \ b_1,b_2,\cdots,b_j}\\&+\delta^{a_1}_{b_1}\hat{T}_1{}^{a_2,\cdots,a_i}_{\ \ b_2,\cdots,b_j}+\{\text{指标轮换}\}\\&+\delta^{a_1}_{b_1}\delta^{a_2}_{b_2}\hat{T}_2{}^{a_3,\cdots,a_i}_{\ \ b_3,\cdots,b_j}+\{\text{指标轮换}\}+\cdots\\&+\delta^{a_1}_{b_1}\delta^{a_2}_{b_2}\cdots\delta^{a_i}_{b_i}U_{b_{i+1},\cdots,b_j}+\{\text{指标轮换}\},\end{aligned}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{T}},\hat{\boldsymbol{T}}_1,\hat{\boldsymbol{T}}_2,\cdots$ 等是阶数依次降低的无迹张量。这样就可以约化出不变子空间，得到相应的不可约表示。

类似地，(i,j) 型张量可以进一步推广为 $(i,j;k,l)$ 型张量，即由 i 个 V，j 个 $\tilde{V}$，k 个 V^*，l 个 $\tilde{V}^*$ 直积而成的张量空间，容易写出相应张量的变换关系。由此可以得到 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的最一般的张量表示，其中包含了 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的所有有限维不可约表示。

$\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群是一般线性变换群，物理上常用的 $\mathrm{SU}(n)$, $\mathrm{SO}(n)$，Lorentz 群等都是 $\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的子群，因此，$\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的不可约表示也一定是这些子群的表示。可以证明，$\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的不可约表示应用到 $\mathrm{SU}(n)$, $\mathrm{SO}(n)$，Lorentz 群等时也是不可约的。只是原来彼此不等价的不可约表示现在可能是等价的表示。

对于 $\mathrm{U}(n)$ 群或 $\mathrm{U}(p,q)$ 群，因为是幺正群，$\boldsymbol{g}^\dagger=\boldsymbol{g}^{-1}$，故有

$$(\boldsymbol{g}^{-1})^\dagger=\boldsymbol{g},\ \ (\boldsymbol{g}^{-1})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{g}^*。$$

因此只有两个基本表示是独立的，在构造 $\mathrm{U}(n)$ 群或 $\mathrm{U}(p,q)$ 群的不可约表示时，只需考虑 (i,j) 型张量。按照前面所说的方法就可以得到 $\mathrm{U}(n)$ 群或 $\mathrm{U}(p,q)$ 群的有限维不可约表示。由于 $\mathrm{U}(n)$ 群是紧致的，其不可约表示都是有限维的。由此可以得到 $\mathrm{U}(n)$ 群的所有不可约表示。而 $\mathrm{U}(p,q)$ 群是非紧致的，除这些有限维不可约表示外还存在无限维的不可约表示。

如果是幺模群，行列式为 1，$\det\boldsymbol{g}=1$，写成分量形式为

$$g^{a_1}{}_{b_1}g^{a_2}{}_{b_2}\cdots g^{a_n}{}_{b_n}\varepsilon^{b_1b_2\cdots b_n}=\varepsilon^{a_1a_2\cdots a_n},$$

即 n 阶全反对称张量 $\varepsilon^{a_1a_2\cdots a_n}$ 在幺模群变换下是不变的。可以证明，在一般情况下，$\mathrm{GL}(n,\mathbf{C})$ 群的不可约表示应用到 $\mathrm{SL}(n,\mathbf{C})$ 群时仍是不可约的，但由于全反对称张量 $\varepsilon^{a_1a_2\cdots a_n}$ 的不变性，有可能使原来不等价的不可约表示在应用于 $\mathrm{SL}(n,\mathbf{C})$ 群时变成等价表示。在 $n=2$ 的情况下，由于

$$g^a{}_cg^b{}_d\varepsilon^{cd}=\varepsilon^{ab}。$$

写成矩阵形式，即

$$\boldsymbol{g}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{\varepsilon}。$$

上式即

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{-1}\boldsymbol{g}\boldsymbol{\varepsilon}=(\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}})^{-1}=(\boldsymbol{g}^{-1})^{\mathrm{T}}。$$

因此，对 $\mathrm{SL}(2,\mathbf{C})$ 群而言，基本表示 $\boldsymbol{g}$ 和 $(\boldsymbol{g}^{-1})^{\mathrm{T}}$ 是等价的。同理，基本表示 $\boldsymbol{g}^*$ 和 $(\boldsymbol{g}^{-1})^\dagger$ 也是等价的。这样，在构造 $\mathrm{SL}(2,\mathbf{C})$ 群的有限维不可约表示时，只需要考虑 $(i,0;k,0)$ 型张量就可以了。实际上，由于 ε^{ab} 的不变性，可以把反对称张量去掉。如考虑一个三阶张量 $T^{[ab]c}$，其中指标 a,b 是反对称的，与 ε_{ab} 缩并后得

$$\varepsilon_{ab}T^{[ab]c}=\boldsymbol{T}^c。$$

这是一个向量。这意味着在构造 $\mathrm{SL}(2,\mathbf{C})$ 群的有限维不可约表示时，只需考虑完全对称的张量和带点张量，即只有一行的 Young 图即可。

类似地，$\mathrm{U}(n)$ 群或 $\mathrm{U}(p,q)$ 群的不可约表示应用于 $\mathrm{SU}(n)$ 群或 $\mathrm{SU}(p,q)$ 群时仍是不可约。但由于全反对称张量的不变性，使得原来不等价的不可约表示在应用于 $\mathrm{SU}(n)$ 群

或 SU(p,q) 群时可能变成等价表示。对于 SU(2) 群，根据以上讨论，不仅不需要引入协变张量，也不需要引入带点张量，即只需由一个基本表示 $\boldsymbol{g}$ 得到的完全对称化的张量空间就可以构造出 SU(2) 群的所有不可约表示。这正是 6.4 节导出的结果。

对于实数域上的一般线性变换群 GL$(n,\mathbf{R})$，因为 $\boldsymbol{g}^*=\boldsymbol{g}$，显然不需要引入带点张量，即只需考虑 (i,j) 型张量。根据前面的讨论，利用无迹的 (i,j) 型张量即可得到 GL$(n,\mathbf{R})$ 的不可约表示。而对于 O(n) 群或 O(p,q) 群，由于存在不变的度规张量 η_{ab}：

$$\eta_{ab}\mapsto\eta'_{ab}=\eta_{cd}(\boldsymbol{g}^{-1})^c{}_a(\boldsymbol{g}^{-1})^d{}_b=((\boldsymbol{g}^{-1})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{g}^{-1}))_{ab}=\eta_{ab},$$

其逆定义为

$$\eta^{ab}\eta_{bc}=\delta^a_c。$$

可以利用度规张量 η_{ab} 及其逆 η^{ab} 来升降指标，将逆变张量变成协变张量，或将协变张量变成逆变张量。因此，只需用 $(i,0)$ 型无迹张量即可构造出 $O(n)$ 群或 $O(p,q)$ 群的不可约表示。注意此时张量的迹是用度规张量定义的，即

$$\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{T}=\eta_{ab}T^{ab}。$$

对于特殊正交群 SO(n) 群或 SO(p,q) 群，全反对称张量 $\varepsilon^{a_1a_2\cdots a_n}$ 或 $\varepsilon_{a_1a_2\cdots a_n}$ 也是不变量，这将会使原来不等价的表示变成等价表示。如对于 SO(3) 群，向量 $\boldsymbol{V}^a$ 和二阶反对称张量 $T^{[ab]}$ 都负载了 SO(3) 群的三维不可约表示。但对于 O(3) 群而言，这两个三维不可约表示是不等价的，因为它们在空间反演下的行为是不同的。我们将向量 $\boldsymbol{A}_a=\varepsilon_{abc}T^{[bc]}$ 称为赝矢或轴向量。同样，张量迹 $\eta_{ab}T^{ab}$ 和标量 $\varepsilon_{abc}T^{abc}$ 都是 SO(3) 群的不变量，但在空间反演下的行为是不同的，即量 $\varepsilon_{abc}T^{abc}$ 不是 O(3) 群的不变量，通常称其为赝标。

习 题 6

6.1 对一维线性非齐次变换 $x'=ax+b$，求无穷小算符及相应的对易关系。

6.2 证明群 SO(2,1) 保持量 $x_1^2+x_2^2-x_3^2$ 不变。求无穷小算符及相应的对易关系。

6.3 求 SU(1,1) 群的无穷小算符及相应的对易关系。

6.4 证明：幺正表示的无穷小生成元是反 Hermite 的。

6.5 求不可约表示直积 $\boldsymbol{D}^{(7/2)}\otimes\boldsymbol{D}^{(3)}$ 的约化。

6.6 计算 $\boldsymbol{D}^{(6)}$ 在 O 群不可约表示下的约化。

6.7 证明 SO(3) 群的无穷小算符 $\boldsymbol{J}_1,\boldsymbol{J}_2,\boldsymbol{J}_3$ 满足对易关系

$$[\boldsymbol{J}_k,\boldsymbol{J}^2]=\boldsymbol{0},\quad k=1,2,3;\ \boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{J}_1^2+\boldsymbol{J}_2^2+\boldsymbol{J}_3^2。$$

6.8 如果 $\{T_{ij}|i,j=1,2,3\}$ 是一个二阶张量的分量，证明：

(1) $\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{T}=T_{ij}\delta_{ij}=T_{ii}$ 在 SO(3) 群作用下不变；

(2) $\boldsymbol{A}_k=\varepsilon_{ijk}T_{ij}$ 按向量变换；

(3) 无迹对称张量 $S_{ij}=\dfrac{1}{2}(T_{ij}+T_{ji})-\dfrac{1}{3}\delta_{ij}\,\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{T}$ 在 SO(3) 群作用下按 $\boldsymbol{D}^{(2)}$ 变换。

6.9 求出 SO(n) 群的所有无穷小算符。

6.10 当 $l=0,1/2,1$ 时给出表示矩阵 $D^{(l)}_{m'm}(a,b)$。

6.11 利用 SO(3) 群的无穷小算符证明，向量 $\boldsymbol{r}$ 的一个转动 $\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)$ 可以写成

$$\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}\cos\phi+\boldsymbol{n}(1-\cos\phi)(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n})+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})\sin\phi,$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 是转轴，ϕ 是绕这个转轴转过的角度。（提示：一般转动可以表示为

$$\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{n}}(\phi)=\exp[\phi(n_1\boldsymbol{X}_1+n_2\boldsymbol{X}_2+n_3\boldsymbol{X}_3)]=\exp(\phi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})。）$$

6.12 对 SO(3) 群分别计算 $\exp(\alpha_1\boldsymbol{X}_1),\exp(\alpha_2\boldsymbol{X}_2),\exp(\alpha_3\boldsymbol{X}_3)$。

6.13 证明，转动矩阵 $\boldsymbol{R}$ 满足

$$\varepsilon_{ijk}R_{im}R_{jn}R_{kl}=\varepsilon_{mnl}。$$

6.14 证明所有形如

$$\boldsymbol{H}=\begin{pmatrix}1&a&b\\0&1&c\\0&0&1\end{pmatrix}$$

的 3×3 的矩阵构成群，其中 a,b,c 是任意实数。这称为 Heisenberg 群。求相应的无穷小算符及其对易关系。

6.15 设 $|m\rangle$ 是角动量算符 $\hat{\boldsymbol{J}}_z$ 的本征态，$\hat{\boldsymbol{J}}_z|m\rangle=m|m\rangle$，求绕 z 轴转动的 SO(2) 群的不可约表示。

6.16 设 $|\boldsymbol{p}\rangle$ 是动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的本征态，$\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{p}\rangle=\boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}\rangle$，求平移群的不可约表示。

6.17 将 Poincaré 群的群元记为 $g(\boldsymbol{\Lambda},a^\mu)$，对四维时空坐标的变换为

$$x^\mu\to x'^\mu=g(\boldsymbol{\Lambda},a^\mu)x^\mu=\Lambda^\mu_\nu x^\nu+a^\mu,$$

证明平移群 $T(a)$ 是 Poincaré 群的不变子群。其中平移变换可以写成

$$T(a)x^\mu=x^\mu+a^\mu。$$

6.18 求 Poincaré 群的无穷小算符及相应的对易关系。

6.19 设 $Y_{lm}(\theta,\phi)=\sqrt{\dfrac{2l+1}{4\pi}}D^{(l)*}_{m0}(\phi,\theta,0)$ 为球谐函数，其中 $D^{(l)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ 是 SO(3) 群的不可约表示，证明：

$$Y_{l_1m_1}(\theta,\phi)Y_{l_2m_2}(\theta,\phi)=\sum_l\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}}\left\langle\begin{matrix}l_1&l_2\\m_1&m_2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}l\\m\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}l\\0\end{matrix}\middle|\begin{matrix}l_1&l_2\\0&0\end{matrix}\right\rangle Y_{lm}(\theta,\phi)。$$

6.20 设 $|lm\rangle=Y_{lm}(\theta,\phi)$ 是 SO(3) 群不可约表示的基，证明：

$$\sum_m Y^*_{lm}(\theta_1,\phi_1)Y_{lm}(\theta_2,\phi_2)=\sum_m Y^*_{lm}(\theta'_1,\phi'_1)Y_{lm}(\theta'_2,\phi'_2),$$

其中 $\Gamma_{\boldsymbol{R}}Y_{lm}(\theta',\phi')=Y_{lm}[\boldsymbol{R}^{-1}(\theta',\phi')]=Y_{lm}(\theta,\phi)$。

第7章　Lie 代数

每个 Lie 群都对应一个 Lie 代数，而 Lie 代数则决定了 Lie 群单位元附近的局部性质。因此，研究 Lie 代数的结构及其表示对研究 Lie 群的结构及表示是非常重要的。本章将对 Lie 代数及其表示理论作一个初步的讨论。

7.1　Lie 代数

定义 7.1　设 $\mathcal{L}$ 是域 K(实数域 $\mathbf{R}$ 或复数域 $\mathbf{C}$) 上的有限维线性向量空间，定义映射

$$\mathcal{L}\times\mathcal{L}\to\mathcal{L},$$
$$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\mapsto[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}],$$

其中方括号运算 $[\cdot,\cdot]$ 称为 Lie 括号或 Lie 乘积，它满足下列条件：

1. 封闭性　在向量空间中取定一组基 $\{\boldsymbol{x}_i,\ i=1,2,\cdots\}$，对任意的 $\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j\in\mathcal{L}$，有

$$[\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j]=c_{ij}^k\boldsymbol{x}_k\in\mathcal{L},$$

其中 $c_{ij}^k\in K$ 称为结构常数；

2. 线性　对任意向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2\in\mathcal{L}$，$\lambda_1,\lambda_2\in K$，有

$$[\boldsymbol{x},\lambda_1\boldsymbol{y}_1+\lambda_2\boldsymbol{y}_2]=\lambda_1[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}_1]+\lambda_2[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}_2];$$

3. 反对称　对任意向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{L}$，有

$$[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]=-[\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}];$$

4. Jacobi 恒等式　对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\in\mathcal{L}$，有

$$[\boldsymbol{x},[\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}]]+[\boldsymbol{y},[\boldsymbol{z},\boldsymbol{x}]]+[\boldsymbol{z},[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]]=\boldsymbol{0},$$

则称 $\mathcal{L}$ 是一个 Lie 代数。$\mathcal{L}$ 的维数就称为 Lie 代数的维数，记为 $\dim\mathcal{L}$。若 $\mathcal{L}$ 定义在实数域 $\mathbf{R}$ 上，则称为实 Lie 代数；若 $\mathcal{L}$ 定义在复数域 $\mathbf{C}$ 上，则称为复 Lie 代数。

将基向量 $\{\boldsymbol{x}_i,\ i=1,2,\cdots\}$ 代入条件 3 和条件 4 后分别可得

$$c_{ij}^k=-c_{ji}^k,\tag{7.1}$$

$$c_{ij}^lc_{lk}^m+c_{jk}^lc_{li}^m+c_{ki}^lc_{lj}^m=0。\tag{7.2}$$

这两个方程是 Lie 代数的结构常数所必须满足的基本方程。给定了这两个方程，实际上也就给定了一个 Lie 代数。

需要指出，这里的 Lie 括号是一个很一般的二元运算，可以用多种方式定义。例如对易子

$$[\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j] = \boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_j\boldsymbol{x}_i$$

以及三维空间向量的矢积

$$[\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j] = \boldsymbol{x}_i \times \boldsymbol{x}_j$$

等。本书所讨论的 Lie 代数都采用对易子的定义。对于由线性算符 $\{\Gamma_a,\ a = 1, 2, \cdots\}$ 构成的 Lie 代数，对易子定义为

$$[\Gamma_a, \Gamma_b]\phi = \Gamma_a(\Gamma_b\phi) - \Gamma_b(\Gamma_a\phi),$$

其中 ϕ 是算符 Γ_a 的作用空间上的任意函数。

如果对任意的 $\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j \in \mathcal{L}$，都有

$$[\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j] = \boldsymbol{0},$$

则称 $\mathcal{L}$ 为 Abel 的 Lie 代数或交换 Lie 代数。

按照定义，容易看到，SO (3) 群的三个无穷小生成元 (为了方便，我们对标准形式作了变换 $\boldsymbol{X}_i \mapsto -\boldsymbol{x}_i$)

$$\boldsymbol{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},\ \boldsymbol{x}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},\ \boldsymbol{x}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

在对易子的运算下构成 Lie 代数：

$$[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2] = -\boldsymbol{x}_3, \quad [\boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3] = -\boldsymbol{x}_1, \quad [\boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_1] = -\boldsymbol{x}_2。$$

这个 Lie 代数记为 so (3)，其结构常数为

$$c_{ij}^k = -\varepsilon_{ijk}, \quad \varepsilon_{123} = 1。 \tag{7.3}$$

这些生成元 (即 so (3) 的基) 都是无迹反对称的 3×3 矩阵，而实 Lie 代数 so (3) 的任意元素可以表示为这些生成元的实系数线性组合。因此，实 Lie 代数 so (3) 是所有无迹反对称 3×3 实矩阵的集合。

同理，SO (3) 群的三个无穷小算符

$$\boldsymbol{x}_1 = x_2\frac{\partial}{\partial x_3} - x_3\frac{\partial}{\partial x_2}, \quad \boldsymbol{x}_2 = x_3\frac{\partial}{\partial x_1} - x_1\frac{\partial}{\partial x_3}, \quad \boldsymbol{x}_3 = x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1}$$

也构成实 Lie 代数 so (3)。

类似地，SU (2) 群的三个无穷小生成元

$$\boldsymbol{x}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} \tag{7.4}$$

构成实 Lie 代数 su (2)，显然，su (2) 是所有无迹反 Hermite 的 2×2 矩阵的集合。

SU (2) 群的三个无穷小算符

$$\boldsymbol{x}_1=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_2}+u_2\frac{\partial}{\partial u_1}\right),\quad \boldsymbol{x}_2=\frac{1}{2}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_2}-u_2\frac{\partial}{\partial u_1}\right),\quad \boldsymbol{x}_3=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(u_1\frac{\partial}{\partial u_1}-u_2\frac{\partial}{\partial u_2}\right) \tag{7.5}$$

也构成实 Lie 代数 su (2)。

由于 su (2) 和 so (3) 满足的对易关系是完全相同的，因此这两个 Lie 代数是同构的，即 so (3) $\cong$ su (2)。

实际上，每个线性 Lie 群 G 都对应一个实 Lie 代数 $\mathcal{L}$。例如

$$\mathrm{SU}(n)\to\mathrm{su}(n),\ \mathrm{SO}(n)\to\mathrm{so}(n),\ \mathrm{SO}(p,q)\to\mathrm{so}(p,q),\ \mathrm{Sp}(2n)\to\mathrm{sp}(2n)。$$

从这些例子可以看到，$\mathcal{L}$ 是实 Lie 代数并不意味着 $\mathcal{L}$ 的元素一定是实的。比如 su (2) 三个基的表达式 (7.4) 或 (7.5) 就不全是实的。实际上，所谓实 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 只是要求 $\mathcal{L}$ 的任意元素是基 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_l$ 的实系数线性组合。

如果将实系数扩充为复系数，则称为实 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的复化，用 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 表示。此时实 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 称为复化 Lie 代数 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 的实形。由于 $\mathcal{L}$ 和其复化 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 的基是相同的，因此 $\mathcal{L}$ 和 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 具有相同的维数和相同的结构常数。

复 Lie 代数的分类比实 Lie 代数情形更为简单，所以我们总是先讨论实 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的复化 $\widetilde{\mathcal{L}}$。但对于不同的实 Lie 代数，其复化形式可能是相同的，也就是说，同一复 Lie 代数可以有不同的实形。如 su (2) 和 su (1, 1) 的复化形式都是 A_1，so (3) 和 so (1, 2) 的复化形式都是 B_1 等。

如果 $\mathcal{U}$ 是 $\mathcal{L}$ 的一个子空间，且当 $\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j\in\mathcal{U}$ 时有

$$[\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j]\in\mathcal{U},$$

则称 $\mathcal{U}$ 为 $\mathcal{L}$ 的子代数。如果

$$[\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j]=\boldsymbol{0},\quad \forall\,\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j\in\mathcal{U},$$

则称 $\mathcal{U}$ 为 $\mathcal{L}$ 的 Abel 子代数。

定义 7.2 给定 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的子代数 $\mathcal{U}$，如果对任意的 $\boldsymbol{x}\in\mathcal{U}$ 和 $\boldsymbol{y}\in\mathcal{L}$，都满足

$$[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]\in\mathcal{U},$$

则称 $\mathcal{U}$ 为 $\mathcal{L}$ 的不变子代数。不变子代数也称理想。不变子代数对应 Lie 群的不变子群。

定义 7.3 设 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 有两个子代数 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$，如果 $\mathcal{L}$ 对应的向量空间是 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 对应的向量空间的直和，且对任意的 $\boldsymbol{x}_1\in\mathcal{L}_1,\boldsymbol{x}_2\in\mathcal{L}_2$，都有 $[\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2]=\boldsymbol{0}$，则称 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 是其子代数 $\mathcal{L}_1$ 和 $\mathcal{L}_2$ 的直和，记作

$$\mathcal{L}=\mathcal{L}_1\oplus\mathcal{L}_2。$$

显然，如果 Lie 群 G_1 的 Lie 代数为 $\mathcal{L}_1$，G_2 的 Lie 代数为 $\mathcal{L}_2$，则 Lie 群 $G_1\otimes G_2$ 的 Lie 代数与 $\mathcal{L}_1\oplus\mathcal{L}_2$ 同构。

定义 7.4 对于 Lie 代数 $\mathcal{L}$，如果除 $\mathcal{L}$ 本身和 $\{\mathbf{0}\}$ 外没有非平凡的不变子代数，则称之为单 Lie 代数；如果除 $\{\mathbf{0}\}$ 外没有 Abel 不变子代数，则称之为半单 Lie 代数。

如果 $\mathcal{L}$ 是 Abel 的，因为任何 Abel 的 Lie 代数一定是其自身的 Abel 不变子代数，于是按定义 $\mathcal{L}$ 不是半单的。当 $\dim\mathcal{L}>1$ 时，由于 Abel 的 Lie 代数一定存在非平凡的不变子代数，因而 $\mathcal{L}$ 也不是单的。

一维 Lie 代数一定是 Abel 的，而其显然不是半单的。尽管一维 Lie 代数不可能有非平凡的不变子代数，但通常并不把一维 Lie 代数看成是单 Lie 代数，而是作为一个例外。因此，Abel 的 Lie 代数既不是单的，也不是半单的。

由此可见，单 Lie 代数或半单 Lie 代数的维数一定大于 1。如果 $\mathcal{L}$ 是单的，则它一定是半单的。但反之则不一定成立。单 Lie 代数对应的 Lie 群是单群，半单 Lie 代数对应的 Lie 群是半单群。

可以证明，如果 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 是单的，则 $\mathcal{L}$ 也是单的。数学上已经给出所有复单 Lie 代数的分类，一共有 4 个无穷序列的复单 Lie 代数：

$$\begin{aligned}
&\widetilde{\mathcal{L}}=A_l, \quad \mathcal{L}=\mathrm{su}\,(l+1), \quad l=1,2,\cdots,\\
&\widetilde{\mathcal{L}}=B_l, \quad \mathcal{L}=\mathrm{so}\,(2l+1), \quad l=1,2,\cdots,\\
&\widetilde{\mathcal{L}}=C_l, \quad \mathcal{L}=\mathrm{sp}\,(l), \quad l=1,2,\cdots,\\
&\widetilde{\mathcal{L}}=D_l, \quad \mathcal{L}=\mathrm{so}\,(2l), \quad l=3,4,\cdots。
\end{aligned}$$

它们统称为经典单 Lie 代数。对于 D_l 序列，由于 D_1 对应的实 Lie 代数 so (2) 是 Abel 的 Lie 代数，D_2 对应的实 Lie 代数 so (4) 是半单 Lie 代数，故这两个都不是单 Lie 代数。而其余 5 个单 Lie 代数

$$G_2,\ F_4,\ E_6,\ E_7,\ E_8,$$

则称为例外单 Lie 代数。

关于半单 Lie 代数，我们有如下定理。

定理 7.1 每个半单 Lie 代数或者是单的，或者是一些单 Lie 代数的直和。即当 $\mathcal{L}$ 是半单的时，存在一些单 Lie 代数 $\mathcal{L}_k$ $(k=1,2,\cdots,m)$，使得

$$\mathcal{L}=\mathcal{L}_1\oplus\mathcal{L}_2\oplus\cdots\oplus\mathcal{L}_m,$$

其中 $\mathcal{L}_k$ 都是 $\mathcal{L}$ 的不变子代数，并且这个分解是唯一的。

定理的证明请参阅有关专著。

定义 7.5 设 $\mathcal{L}$ 和 $\mathcal{L}'$ 是两个 Lie 代数，如果存在映射 $f:\mathcal{L}\to\mathcal{L}'$，使得

$$f([\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}])=[f(\boldsymbol{x}),f(\boldsymbol{y})]=[\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'],$$

其中 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{L}$, $\boldsymbol{x}'=f(\boldsymbol{x})\in\mathcal{L}',\boldsymbol{y}'=f(\boldsymbol{y})\in\mathcal{L}'$，则称 f 为从 $\mathcal{L}$ 到 $\mathcal{L}'$ 的同态。如果 f 是一一对应的，则称为同构。我们很容易建立从 su (2) 到 so (3) 的同构。

定义 7.6 对于任意的 $\boldsymbol{x}\in\mathcal{L}$，如果存在一个 $d\times d$ 的矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{x})$ 使得

1. 对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{L}$，有

$$\boldsymbol{\Gamma}(\lambda_1\boldsymbol{x}+\lambda_2\boldsymbol{y})=\lambda_1\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{x})+\lambda_2\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{y}),$$

其中 λ_1, λ_2 是常数；

2. 对任意的 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathcal{L}$，有

$$\boldsymbol{\Gamma}([\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}]) = [\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{y})],$$

则称这些矩阵构成 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的 d 维表示。显然，在构造 Lie 代数的表示时，只需要对每个基 $\boldsymbol{x}_i$ 写出其表示矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{x}_i)$ 就够了：

$$\hat{\Gamma}_{\boldsymbol{x}_i}\phi_j = \sum_{k=1}^{d}(\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{x}_i))_{kj}\phi_k, \quad i = 1, 2, \cdots,$$

其中 $\hat{\Gamma}_{\boldsymbol{x}_i}$ 是对应 $\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{L}$ 的算符，$\{\phi_j\}$ 是表示空间的一组基。

对 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的表示，同样可以引入等价表示、不可约表示等概念，也有类似的 Schur 引理。同样可以证明，半单 Lie 代数的表示如果是可约的，则一定是完全可约的。

可以证明，对于单连通 Lie 群 G，由 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的表示 $\Gamma_{\boldsymbol{x}}$ 可以得到相应 Lie 群的一个表示

$$\Gamma(g) = \Gamma(\mathrm{e}^{\boldsymbol{x}}) = \mathrm{e}^{\Gamma(\boldsymbol{x})}。$$

但对于非单连通 Lie 群，则 Lie 代数的一个表示不一定有对应的 Lie 群的表示存在。而 Lie 群的每一个表示则一定对应唯一的相应 Lie 代数的一个表示。

7.2 伴随表示

利用结构常数可以构造 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的一个表示，即伴随表示。定义

$$(\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_k))_{ij} = c_{kj}^{i}, \tag{7.6}$$

将 Jacobi 恒等式改写为

$$c_{ij}^{l}c_{lk}^{m} + c_{jk}^{l}c_{li}^{m} + c_{ki}^{l}c_{lj}^{m} = c_{kl}^{m}c_{ji}^{l} + c_{jk}^{l}c_{li}^{m} - c_{jl}^{m}c_{ki}^{l} = 0,$$

将方程 (7.6) 代入，得

$$(\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_k))_{ml}(\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_j))_{li} + (\mathbf{ad}([\boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x}_k]))_{mi} - (\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_j))_{ml}(\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_k))_{li} = 0,$$

其中第二项用到了等式

$$(\mathbf{ad}([\boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x}_k]))_{mi} = (\mathbf{ad}(c_{jk}^{l}\boldsymbol{x}_l))_{mi} = c_{jk}^{l}(\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_l))_{mi} = c_{jk}^{l}c_{li}^{m}。$$

写成矩阵形式，即得

$$\mathbf{ad}([\boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x}_k]) = [\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_j), \mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_k)]。$$

因此，$\mathbf{ad}(\boldsymbol{x})$ 构成了 Lie 代数的一个表示，即伴随表示。

如果考虑 Lie 代数 so (3)，则由公式 (7.3) 可得

$$(\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_k))_{ij} = c_{kj}^{i} = -\varepsilon_{kji}。 \tag{7.7}$$

写成矩阵形式，有

$$\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_1)=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix},\ \mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_2)=\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix},\ \mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_3)=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}。\tag{7.8}$$

7.3 Killing 形式

定义 7.7 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的任意两个元素 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathcal{L}$ 的 Killing 形式 $g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 定义为

$$g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\mathrm{Tr}[\mathbf{ad}(\boldsymbol{x})\ \mathbf{ad}(\boldsymbol{y})],$$

其中 $\mathbf{ad}(\boldsymbol{x})$ 为 $\boldsymbol{x}\in\mathcal{L}$ 的伴随表示矩阵。取定一组基 $\{\boldsymbol{x}_i\}$ 后，可得

$$g_{ij}=g(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)=(\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_i))_{kl}\ (\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_j))_{lk}=c_{il}^{k}c_{jk}^{l}。$$

g_{ij} 称为 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的度规张量。

根据定义 7.7，我们将 so (3) Lie 代数的伴随表示 (7.8) 代入上式可得

$$g_{ij}=-2\delta_{ij}。$$

易证 Killing 形式 $g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 是对称的，即

$$g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\mathrm{Tr}[\mathbf{ad}(\boldsymbol{x})\ \mathbf{ad}(\boldsymbol{y})]=\mathrm{Tr}[\mathbf{ad}(\boldsymbol{y})\ \mathbf{ad}(\boldsymbol{x})]=g(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})。$$

关于半单 Lie 代数，我们有如下重要定理。

定理 7.2 Lie 代数$\mathcal{L}$是半单的，当且仅当其 Killing 形式为非退化的，即$\det(g_{ij})\neq 0$。

这个定理也称为 Cartan 判据。定理的证明请参阅有关书籍。从前面的例子可以看到，Lie 代数 su (2) 和 so (3) 都是半单的。因为不可能再进一步分解，所以 su (2) 和 so (3) 实际上也是单 Lie 代数。

进一步还可以看到，su (2) 和 so (3) 的 Killing 形式是负定的，即

$$g_{ii}=g(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_i)<0,\quad i=1,2,3,$$

即对任意的 $\boldsymbol{x}\in\mathcal{L}$，有

$$g(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})<0。$$

满足这一条件的半单 Lie 代数称为紧致的。因此 su (2) 和 so (3) 都是紧致 Lie 代数，紧致半单 Lie 代数对应的是紧致半单 Lie 群。

7.4 单根与 Dynkin 图

为了给出半单 Lie 代数的标准形式，考虑本征方程

$$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{X}]=\rho\boldsymbol{X},\tag{7.9}$$

其中 ρ 为相应的本征值。而 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{X}$ 都是 Lie 代数基 $\{\boldsymbol{x}_i\}$ 的线性组合，具体表为

$$\boldsymbol{A}=a^i\boldsymbol{x}_i,\quad \boldsymbol{X}=b^i\boldsymbol{x}_i。$$

将上式代入本征方程 (7.9) 后得

$$a^ib^jc_{ij}^k\boldsymbol{x}_k=\rho b^k\boldsymbol{x}_k。$$

由于基 $\{\boldsymbol{x}_i\}$ 是一组线性无关的向量，因此得

$$(a^ic_{ij}^k-\rho\delta_j^k)b^j=0。$$

这一方程有非零解的条件为

$$\det(|a^ic_{ij}^k-\rho\delta_j^k|)=0。\tag{7.10}$$

对 r 维 Lie 代数 $\mathcal{L}$，久期方程 (7.10) 是 ρ 的 r 次方程，在复数域上有 r 个解，每个解称为 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的一个根。因此 r 维 Lie 代数有 r 个根。但可能有重根。

Cartan 证明，可以选择 $\boldsymbol{A}$，使重根数最少，并且对半单 Lie 代数来说，重根只发生在 $\rho=0$ 情形。

如果 $\rho=0$ 的根是 l 重简并的，则 l 称为半单 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的秩。

对应根 $\rho=0$，有 l 个线性无关的本征向量 $\boldsymbol{H}_i$，满足

$$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{H}_i]=\boldsymbol{0},\quad i=1,2,\cdots,l,\tag{7.11}$$

其余的 $r-l$ 个向量 $\boldsymbol{E}_\alpha$ 都对应不同的根，即

$$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{E}_\alpha]=\alpha\boldsymbol{E}_\alpha。\tag{7.12}$$

由于 $\boldsymbol{H}_i$ 彼此对易，即

$$[\boldsymbol{H}_i,\boldsymbol{H}_j]=\boldsymbol{0},\quad i,j=1,2,\cdots,l,$$

则集合 $\{\boldsymbol{H}_i,i=1,2,\cdots,l\}$ 构成 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的一个 l 维 Abel 子代数，通常称为 $\mathcal{L}$ 的 Cartan 子代数，记为 $\mathcal{H}$。

因为 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{H}_i$ 对易，故 $\boldsymbol{A}$ 一定是 $\boldsymbol{H}_i$ 的线性组合，即

$$\boldsymbol{A}=\lambda^i\boldsymbol{H}_i。\tag{7.13}$$

考虑

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{A},[\boldsymbol{H}_i,\boldsymbol{E}_\alpha]]&=[\boldsymbol{A},\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{E}_\alpha]-[\boldsymbol{A},\boldsymbol{E}_\alpha\boldsymbol{H}_i]\\&=\boldsymbol{H}_i[\boldsymbol{A},\boldsymbol{E}_\alpha]+[\boldsymbol{A},\boldsymbol{H}_i]\boldsymbol{E}_\alpha-\boldsymbol{E}_\alpha[\boldsymbol{A},\boldsymbol{H}_i]-[\boldsymbol{A},\boldsymbol{E}_\alpha]\boldsymbol{H}_i\\&=\alpha(\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{E}_\alpha-\boldsymbol{E}_\alpha\boldsymbol{H}_i)=\alpha[\boldsymbol{H}_i,\boldsymbol{E}_\alpha],\end{aligned}$$

即 $[\boldsymbol{H}_i,\boldsymbol{E}_\alpha]$ 也是根为 α 的本征向量。但 α 是非简并的，故本征向量 $[\boldsymbol{H}_i,\boldsymbol{E}_\alpha]$ 一定与 $\boldsymbol{E}_\alpha$ 成正比，即

$$[\boldsymbol{H}_i,\boldsymbol{E}_\alpha]=\alpha_i\boldsymbol{E}_\alpha,\tag{7.14}$$

即相应的结构常数为

$$c_{i\alpha}^\beta=\alpha_i\delta_\alpha^\beta。\tag{7.15}$$

利用方程 (7.12)，(7.13) 和方程 (7.14) 可得

$$\alpha = \lambda^i \alpha_i 。$$

由上式，可以将 α_i 看成是 l 维空间的向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的协变分量。$\boldsymbol{\alpha}$ 称为根向量，简称根。由 Jacobi 恒等式

$$[\boldsymbol{A}, [\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_\beta]] + [\boldsymbol{E}_\alpha, [\boldsymbol{E}_\beta, \boldsymbol{A}]] + [\boldsymbol{E}_\beta, [\boldsymbol{A}, \boldsymbol{E}_\alpha]] = \boldsymbol{0},$$

可得

$$[\boldsymbol{A}, [\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_\beta]] = (\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta})[\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_\beta] 。$$

上式表明，如果 $\alpha + \beta$ 不等于零，则 $[\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_\beta]$ 是对应根 $\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}$ 的本征向量，即

$$[\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_\beta] = N_{\alpha,\beta} \boldsymbol{E}_{\alpha+\beta} 。$$

如果 $\beta = -\alpha$，则 $[\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_\beta]$ 是 $\boldsymbol{H}_i$ 的线性组合，即

$$[\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_{-\alpha}] = c^i_{\alpha,-\alpha} \boldsymbol{H}_i, \tag{7.16}$$

即结构常数为

$$c^\lambda_{\alpha\beta} = \begin{cases} N_{\alpha,\beta}, & \text{若 } \lambda = \alpha + \beta \neq 0 \text{ 是根}, \\ 0, & \text{若 } \lambda = \alpha + \beta \neq 0 \text{ 不是根}。 \end{cases}$$

定理 7.3 如果 $\boldsymbol{\alpha}$ 是半单 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的一个非零根，则 $-\boldsymbol{\alpha}$ 也是 $\mathcal{L}$ 的根。

证明 考虑度规张量

$$g_{\alpha\lambda} = \sum_{\mu\nu} c^\nu_{\alpha\mu} c^\mu_{\lambda\nu},$$

将零根和非零根分开，考虑到方程 (7.15) 和方程 (7.16)，有

$$g_{\alpha\lambda} = \sum_i c^\alpha_{\alpha i} c^i_{\lambda\alpha} + \sum_i c^i_{\alpha,-\alpha} c^{-\alpha}_{\lambda i} + \sum_{\beta \neq -\alpha} c^{\alpha+\beta}_{\alpha\beta} c^\beta_{\lambda\alpha+\beta} 。$$

容易看到，上式中的每一项都仅当 $\lambda = -\alpha$ 时才不为零，即

$$g_{\alpha\lambda} = 0, \quad \text{当 } \lambda \neq -\alpha \text{ 时}。$$

因此，如果 $-\boldsymbol{\alpha}$ 不是 $\mathcal{L}$ 的根，则

$$\det(g_{\alpha\lambda}) = 0,$$

即 Killing 形式退化，不满足 Cartan 关于半单 Lie 代数的判据。因此，$-\boldsymbol{\alpha}$ 是 $\mathcal{L}$ 的根。

由方程 (7.12)，可以取 $\boldsymbol{E}_\alpha$ 适当的归一化因子，使

$$g_{\alpha,-\alpha} = 1。$$

这样，半单 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的度规张量就可以写成

$$g_{\alpha\lambda}=\begin{pmatrix} g_{ij} & & & & & \\ & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

其中

$$g_{ij}=\sum_{\mu,\nu}c_{i\mu}^{\nu}c_{j\nu}^{\mu}=\sum_{\alpha}\alpha_i\alpha_j,$$

可以看成是根向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 张成的 l 维空间中的度规张量。利用度规张量可以定义全反对称张量

$$c_{\alpha\mu\nu}=g_{\alpha\beta}c_{\mu\nu}^{\beta},$$

利用结构常数的性质不难证明

$$c_{\alpha\mu\nu}=g_{\alpha\beta}c_{\mu\nu}^{\beta}=c_{\alpha\lambda}^{\gamma}c_{\beta\gamma}^{\lambda}c_{\mu\nu}^{\beta}=-c_{\alpha\lambda}^{\gamma}c_{\beta\mu}^{\lambda}c_{\nu\gamma}^{\beta}-c_{\alpha\lambda}^{\gamma}c_{\beta\nu}^{\lambda}c_{\gamma\mu}^{\beta}$$

$$=c_{\alpha\lambda}^{\gamma}c_{\mu\beta}^{\lambda}c_{\nu\gamma}^{\beta}-c_{\mu\gamma}^{\beta}c_{\alpha\lambda}^{\gamma}c_{\nu\beta}^{\lambda}=c_{\alpha\lambda}^{\gamma}c_{\mu\beta}^{\lambda}c_{\nu\gamma}^{\beta}-c_{\mu\lambda}^{\gamma}c_{\alpha\beta}^{\lambda}c_{\nu\gamma}^{\beta}=-c_{\mu\alpha\nu},$$

其中用到了结构常数的 Jacobi 恒等式并在最后一步对求和指标作了代换。由此可以将结构常数 $c_{\alpha,-\alpha}^{i}$ 写成

$$c_{\alpha,-\alpha}^{i}=g^{ik}c_{k\alpha,-\alpha}=g^{ik}c_{\alpha,-\alpha k}=g^{ik}g_{\alpha\beta}c_{-\alpha k}^{\beta}=g^{ik}g_{\alpha-\alpha}\alpha_k=g^{ik}\alpha_k=\alpha^i,$$

其中 g^{ik} 是 g_{ik} 的逆，α^i 是根向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的逆变分量。现在可以将半单 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的对易关系写成如下标准形式：

$$\begin{cases} [\boldsymbol{H}_i,\boldsymbol{H}_j]=0, \quad i,j=1,2,\cdots,l, \\ [\boldsymbol{H}_i,\boldsymbol{E}_{\alpha}]=\alpha_i\boldsymbol{E}_{\alpha}, \\ [\boldsymbol{E}_{\alpha},\boldsymbol{E}_{\beta}]=N_{\alpha,\beta}\boldsymbol{E}_{\alpha+\beta}, \quad \alpha+\beta\neq 0, \\ [\boldsymbol{E}_{\alpha},\boldsymbol{E}_{-\alpha}]=\alpha^i\boldsymbol{H}_i。 \end{cases} \tag{7.17}$$

这组基通常称为 Cartan-Weyl 基，或称正则基，是物理上最常用的基。

定理 7.4 如果 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 是半单 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的非零根，则 $\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})/(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})$ 也是根，并且 $2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})/(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})$ 是整数。其中记号 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ 表示根向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 之间的标积，即

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\beta}=\alpha^i\beta_i=g^{ij}\alpha_i\,\beta_j。$$

证明 设 $\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\beta}+q\boldsymbol{\alpha}$ 是根，但 $\boldsymbol{\gamma}+\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\beta}+(q+1)\boldsymbol{\alpha}$ 不是根。则根据方程 (7.17)，有

$$[\boldsymbol{E}_{-\alpha},\boldsymbol{E}_{\gamma}]=N_{-\alpha,\gamma}\boldsymbol{E}_{\gamma-\alpha},$$

$$[\boldsymbol{E}_{-\alpha},\boldsymbol{E}_{\gamma-\alpha}]=N_{-\alpha,\gamma-\alpha}\boldsymbol{E}_{\gamma-2\alpha},$$

经过第 i 次之后，得到

$$[\boldsymbol{E}_{-\alpha}, \boldsymbol{E}_{\gamma-i\alpha}] = N_{-\alpha,\gamma-i\alpha}\boldsymbol{E}_{\gamma-(i+1)\alpha}。$$

由于 $\boldsymbol{E}_\alpha$ 的个数有限，因此上式计算 m 次后必然为零，即

$$[\boldsymbol{E}_{-\alpha}, \boldsymbol{E}_{\gamma-m\alpha}] = N_{-\alpha,\gamma-m\alpha}\boldsymbol{E}_{\gamma-(m+1)\alpha} = \boldsymbol{0}。 \tag{7.18}$$

类似地有

$$[\boldsymbol{E}_{\alpha}, \boldsymbol{E}_{\gamma-(n+1)\alpha}] = N_{\alpha,\gamma-(n+1)\alpha}\boldsymbol{E}_{\gamma-n\alpha}。$$

为了消去 $\boldsymbol{E}_{\gamma-(n+1)\alpha}$，利用 Jacobi 恒等式可得

$$\begin{aligned}
N_{\alpha,\gamma-(n+1)\alpha}\boldsymbol{E}_{\gamma-n\alpha} &= [\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_{\gamma-(n+1)\alpha}] = N^{-1}_{-\alpha,\gamma-n\alpha}[\boldsymbol{E}_\alpha, [\boldsymbol{E}_{-\alpha}, \boldsymbol{E}_{\gamma-n\alpha}]] \\
&= N^{-1}_{-\alpha,\gamma-n\alpha}\{-[\boldsymbol{E}_{\gamma-n\alpha}, [\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_{-\alpha}]] - [\boldsymbol{E}_{-\alpha}, [\boldsymbol{E}_{\gamma-n\alpha}, \boldsymbol{E}_\alpha]]\} \\
&= N^{-1}_{-\alpha,\gamma-n\alpha}\{\alpha^i[\boldsymbol{H}_i, \boldsymbol{E}_{\gamma-n\alpha}] + N_{\alpha,\gamma-n\alpha}[\boldsymbol{E}_{-\alpha}, \boldsymbol{E}_{\gamma-(n-1)\alpha}]\} \\
&= N^{-1}_{-\alpha,\gamma-n\alpha}\{\alpha^i(\gamma_i - n\alpha_i)\boldsymbol{E}_{\gamma-n\alpha} + N_{\alpha,\gamma-n\alpha}N_{-\alpha,\gamma-(n-1)\alpha}\boldsymbol{E}_{\gamma-n\alpha}\}。
\end{aligned}$$

如果记

$$\mu_{n+1} = N_{\alpha,\gamma-(n+1)\alpha}N_{-\alpha,\gamma-n\alpha},$$

则得到递推关系

$$\mu_{n+1} = (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\gamma}) - n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}) + \mu_n, \quad n \geqslant 1。$$

由于 $\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\alpha}$ 不是根，有

$$[\boldsymbol{E}_\alpha, \boldsymbol{E}_\gamma] = N_{\alpha,\gamma}\boldsymbol{E}_{\gamma+\alpha} = \boldsymbol{0}。$$

因此可以令

$$\mu_0 = N_{\alpha,\gamma}N_{-\alpha,\gamma+\alpha} = 0,$$

由此解得

$$\mu_n = n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\gamma}) - \frac{n(n-1)}{2}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})。 \tag{7.19}$$

由方程 (7.18) 得

$$\mu_{m+1} = N_{\alpha,\gamma-(m+1)\alpha}N_{-\alpha,\gamma-m\alpha} = 0,$$

因此有

$$2(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\gamma}) = m(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})。 \tag{7.20}$$

进一步得到

$$\mu_n = N_{\alpha,\gamma-n\alpha}N_{-\alpha,\gamma-(n-1)\alpha} = \frac{n(m-n+1)}{2}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha})。 \tag{7.21}$$

如果 $\boldsymbol{\beta}$ 是任意根，则存在正整数 $q, m \geqslant 0$，使得

$$\boldsymbol{\beta} + q\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\beta} + (q-1)\boldsymbol{\alpha},\ \cdots,\boldsymbol{\beta} + (q-m)\boldsymbol{\alpha}$$

是根，但 $\boldsymbol{\beta}+(q+1)\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}+(q-m-1)\boldsymbol{\alpha}$ 不是根。将 $\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\beta}+q\boldsymbol{\alpha}$ 代入方程 (7.20)，并令 $m=p+q$，可得

$$2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=(p-q)(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}),$$

即

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=p-q \tag{7.22}$$

是整数。因此，对于根 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$，存在包含 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 根链

$$\boldsymbol{\beta}+q\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\beta}+(q-1)\boldsymbol{\alpha},\ \cdots,\ \boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\beta},\ \boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha},\ \cdots,\ \boldsymbol{\beta}-p\boldsymbol{\alpha}。 \tag{7.23}$$

但 $\boldsymbol{\beta}+(q+1)\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}-(p+1)\boldsymbol{\alpha}$ 都不是根。显然

$$\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\alpha}\frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=\boldsymbol{\beta}+(q-p)\boldsymbol{\alpha}$$

是上述根链中的一个，因而也是根。如果令 $\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\alpha}$，则由方程 (7.20) 可得 $m=2$，相应的根链为

$$\boldsymbol{\alpha},\ \mathbf{0},\ -\boldsymbol{\alpha}。$$

而 $\boldsymbol{\gamma}+\boldsymbol{\alpha}=2\boldsymbol{\alpha}$ 不是根。这也可以从

$$[\boldsymbol{E}_{\alpha},\boldsymbol{E}_{\alpha}]=\mathbf{0},$$

得出。令 $n=q$，则方程 (7.21) 可以改写为

$$N_{\alpha,\beta}N_{-\alpha,\alpha+\beta}=\frac{q(p+1)}{2}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})。 \tag{7.24}$$

为了确定 $N_{\alpha,\beta}$，可以将相因子取为

$$N_{-\alpha,-\beta}=-N_{\alpha,\beta}。$$

如果三个根 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$, $\boldsymbol{\gamma}$ 之和为零，$\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\gamma}=\mathbf{0}$，则由 Jacobi 恒等式

$$[\boldsymbol{E}_{\alpha},[\boldsymbol{E}_{\beta},\boldsymbol{E}_{\gamma}]]+[\boldsymbol{E}_{\beta},[\boldsymbol{E}_{\gamma},\boldsymbol{E}_{\alpha}]]+[\boldsymbol{E}_{\gamma},[\boldsymbol{E}_{\alpha},\boldsymbol{E}_{\beta}]]=N_{\beta,\gamma}\alpha^{i}\boldsymbol{H}_{i}+\boldsymbol{N}_{\gamma,\alpha}\beta^{i}\boldsymbol{H}_{i}+N_{\alpha,\beta}\gamma^{i}\boldsymbol{H}_{i}=\mathbf{0},$$

以及 $\boldsymbol{\gamma}=-\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$，即得

$$N_{\alpha,\beta}=N_{\beta,\gamma}=N_{\gamma,\alpha}=-N_{\alpha,\gamma}=N_{-\alpha,-\gamma}。$$

因此，方程 (7.24) 可以写成

$$[N_{\alpha,\beta}]^{2}=\frac{q(p+1)}{2}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})。$$

两个根向量 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 之间的夹角定义为

$$\cos\theta=\frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\sqrt{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}}。$$

根据 Schwarz 不等式，可得

$$|(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})|^2 \leqslant (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta}),$$

即

$$\left|\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}\right| \cdot \left|\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}\right| \leqslant 4。 \tag{7.25}$$

等号仅在 $\boldsymbol{\beta} = \pm\boldsymbol{\alpha}$ 时成立。考虑到方程 (7.22)，如果假定 $\boldsymbol{\beta} \neq \pm\boldsymbol{\alpha}$，则上式左边的每个因子只能取 $0,1,2,3$ 这几个值，即

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})} = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \tag{7.26}$$

而当 $\boldsymbol{\beta} = \pm\boldsymbol{\alpha}$ 时，有

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})} = \pm 2。$$

因此方程 (7.26) 对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 都成立。考虑到方程 (7.25) 和方程 (7.26)，则两根夹角的余弦平方 $\cos^2\theta$ 只能取

$$0,\ \frac{1}{4},\ \frac{1}{2},\ \frac{3}{4},\ 1。 \tag{7.27}$$

当 $\boldsymbol{\alpha}$ 是根时，$-\boldsymbol{\alpha}$ 也是根。因此可能的夹角为

$$\theta = 0 \text{ 或 } \pi,\quad \frac{\pi}{6} \text{ 或 } \frac{5\pi}{6},\quad \frac{\pi}{4} \text{ 或 } \frac{3\pi}{4},\quad \frac{\pi}{3} \text{ 或 } \frac{2\pi}{3},\quad \frac{\pi}{2}。 \tag{7.28}$$

当 $\theta = 0$ 或 π 时，有 $\cos^2\theta = 1$，即

$$|(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})| = \sqrt{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})},$$

这只有在 $\boldsymbol{\beta} = \pm\boldsymbol{\alpha}$ 时才成立。因此这种情况不需要考虑。

当 $\theta = \pi/6$ 或 $5\pi/6$ 时，有

$$\cos^2\theta = \frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}\frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})} = \frac{3}{4} = \frac{3}{2}\times\frac{1}{2}。$$

由此可得根向量的长度之比为

$$k = \sqrt{\frac{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}} = \sqrt{3},$$

其中已经取 $\boldsymbol{\beta}$ 为较长的根。类似地，当 $\theta = \pi/4$ 或 $3\pi/4$ 时，有

$$\cos^2\theta = \frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}\frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})} = \frac{1}{2} = \frac{1}{2}\times 1,$$

此时可得根向量的长度之比为 $k = \sqrt{2}$。当 $\theta = \pi/3$ 或 $2\pi/3$ 时，有

$$\cos^2\theta = \frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}\frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})} = \frac{1}{4} = \frac{1}{2}\times\frac{1}{2},$$

此时可得根向量的长度之比为 $k = 1$。而当 $\theta = \pi/2$ 时，$\cos\theta = 0$，这种情况根向量的长度之比是不确定的。

根 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_l)$ 的第一个不为零的分量如果是正的，则称这个根是正根。如果一个正根不能分解为两个正根之和，则称之为单根。对于秩为 l 的半单 Lie 代数来说，正好有 l 个单根，这 l 个单根是线性无关的，可以构成 l 维根向量空间的基。

定理 7.5 如果 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 是两个单根，且 $\boldsymbol{\alpha}\neq\boldsymbol{\beta}$，则 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 之差不是单根，并有

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=-q,$$

其中 q 是正整数。

证明 显然两单根之差 $\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\gamma}$ 不可能是单根，否则，$\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\gamma}$ 不是单根。实际上，两个单根之差不可能是根。因为若 $\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\gamma}$ 是正根，则 $\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\gamma}$ 就不是单根了。若 $\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}$ 是正根，则 $\boldsymbol{\alpha}=(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})+\boldsymbol{\beta}$ 不是单根。由方程 (7.23)，存在包含 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $\boldsymbol{\alpha}$ 根链

$$\boldsymbol{\beta}+q\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\beta}+(q-1)\boldsymbol{\alpha},\ \cdots,\ \boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\alpha},\ \boldsymbol{\beta},\ \boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha},\ \cdots,\ \boldsymbol{\beta}-p\boldsymbol{\alpha},$$

但 $\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}$ 不可能是根，因此必须有 $p=0$。由方程 (7.22) 即得

$$\frac{2(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=-q。$$

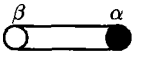
定理 7.6 如果 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 是两个单根，则 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 的夹角和长度平方之比为

$$k^2=\frac{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}=\begin{cases}3, & \theta=\dfrac{5\pi}{6},\\ 2, & \theta=\dfrac{3\pi}{4},\\ 1, & \theta=\dfrac{2\pi}{3},\\ \text{任意}, & \theta=\dfrac{\pi}{2}。\end{cases}$$

证明 由定理 7.5 可知，$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})<0$，因此两个单根之间的夹角为钝角。只需要考虑方程 (7.28) 中钝角的情况就可以了。根据前面的讨论即得定理结果。

对任意单 Lie 代数，其单根最多只有两种不同的长度。因此可以按如下方式将单 Lie 代数的所有单根表示出来。其中较短的单根用实心圆 • 表示，较长的单根用空心圆 ∘ 表示。根据两个单根之间的夹角为 $2\pi/3$，$3\pi/4$，$5\pi/6$，将相应的两个圆分别用单线、双线和三线连接起来，夹角为 $\pi/2$ 的两个单根则不加连线。这种图形表示方式称为 Dynkin 图。

Dynkin 证明，对于每一个单 Lie 代数，都有唯一的 Dynkin 图与之对应。如对于单 Lie 代数 B_2，即 so (5) 的复化形式，其 Dynkin 图为



由单 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的 l 个单根 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_l$，可以构造一个 $l\times l$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}$，称之为 Cartan 矩阵，其定义为

$$A_{ij}=\frac{2(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)}{(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_i)},\quad i,j=1,2,\cdots,l。$$

由定义可知，Cartan 矩阵的对角元恒为 2，而非对角元只能取 $0,-1,-2,-3$ 这几个值，且当 $A_{ij}=0$ 时，有 $A_{ji}=0$。如 B_2 的 Cartan 矩阵为

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}。$$

su (3) 的复化形式 A_2 的 Cartan 矩阵为

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}。 \tag{7.29}$$

由复单 Lie 代数 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 根的信息 (即 Dynkin 图) 可以导出 Cartan 矩阵，而由 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 的 Cartan 矩阵也可以推得所有根的信息。两种描述方式是等价的。附录 G 给出了所有经典与例外单 Lie 代数的 Dynkin 图和相应的 Cartan 矩阵。

7.5 权与 Lie 代数的表示

Cartan 子代数 $\mathcal{H}$ 的 l 个基 $\boldsymbol{H}_i$ $(i=1,2,\cdots,l)$ 是彼此对易的，因而可以有共同的本征态，满足

$$\boldsymbol{H}_i|\boldsymbol{\Lambda}\rangle=\Lambda_i|\boldsymbol{\Lambda}\rangle,\quad i=1,2,\cdots,l,$$

其中 $\boldsymbol{\Lambda}=\{\Lambda_1,\Lambda_2,\cdots,\Lambda_l\}$ 称为权向量，简称权。将 $|\boldsymbol{\Lambda}\rangle$ 称为属于权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的本征态。后文在不引起混淆的情况下，也用 $\boldsymbol{\Lambda}_1,\boldsymbol{\Lambda}_2,\cdots$ 表示不同的权，而不是权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的不同分量。

容易证明，如果 $|\boldsymbol{\Lambda}\rangle$ 是属于权为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的本征态，则 $\boldsymbol{E}_\alpha|\boldsymbol{\Lambda}\rangle$ 是属于权为 $\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{\alpha}$ 的本征态，即

$$\boldsymbol{H}_i\boldsymbol{E}_\alpha|\boldsymbol{\Lambda}\rangle=([\boldsymbol{H}_i,\boldsymbol{E}_\alpha]+\boldsymbol{E}_\alpha\boldsymbol{H}_i)|\boldsymbol{\Lambda}\rangle=(\alpha_i+\Lambda_i)\boldsymbol{E}_\alpha|\boldsymbol{\Lambda}\rangle。$$

可以证明，属于不同权的本征态是线性独立的，在 d 维表示空间中最多只有 d 个权。如果一个权对应的独立本征态有 m 个，则称这个权是 m 重简并的。如果一个权对应的独立本征态只有一个，则称其为单权。

如果权 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的第一个不为零的分量是正的，则称该权是正的。如果权 $\boldsymbol{\Lambda}_1$ 与 $\boldsymbol{\Lambda}_2$ 的差是正的，则称权 $\boldsymbol{\Lambda}_1$ 高于 $\boldsymbol{\Lambda}_2$。如果权 $\boldsymbol{\Lambda}_1$ 比任何其他权都高，则称为最高权。复半单 Lie 代数 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 的每个不可约表示都由其最高权唯一确定。

Dynkin 给出了如下定理。

定理 7.7 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是复半单 Lie 代数 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 不可约表示最高权的充要条件是

$$\lambda_\alpha=\frac{2(\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}$$

为非负整数。其中 $\boldsymbol{\alpha}$ 是单根。

可以这样来标记 Lie 代数 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 的不可约表示，将非负整数 λ_α 标在 Dynkin 图中相应的单根上，$\lambda_\alpha=0$ 时则省略不写。秩为 l 的复 Lie 代数 $\widetilde{\mathcal{L}}$ 正好有 l 个单根，因而共有 l 个非负整数 $\lambda_{\alpha_1},\lambda_{\alpha_2},\cdots,\lambda_{\alpha_l}$。

不可约表示的任意权都可以写成单根的线性组合，即

$$\boldsymbol{\Lambda}_i = \sum_{i=1}^{l} (\boldsymbol{A}^{-1})_{ji} \boldsymbol{\alpha}_j,$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 是 Cartan 矩阵。易见

$$\frac{2(\boldsymbol{\Lambda}_i, \boldsymbol{\alpha}_k)}{(\boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\alpha}_k)} = \sum_{j=1}^{l} 2(\boldsymbol{A}^{-1})_{ji} \frac{2(\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_k)}{(\boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\alpha}_k)} = (\boldsymbol{A}^{-1})_{ji} \boldsymbol{A}_{kj} = \delta_{ik}。$$

最高权可以表示为

$$\boldsymbol{\Lambda} = \sum_{k=1}^{l} n_k \boldsymbol{\Lambda}_k,$$

其中 $n_1, n_2, \cdots, n_l$ 是非负整数。可以证明，对每一组非负整数 $n_1, n_2, \cdots, n_l$，半单复 Lie 代数 $\tilde{\mathcal{L}}$ 存在由上式给出的最高权为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的不可约表示。这个表示是唯一确定的，记为 $\Gamma(\{n_1, n_2, \cdots, n_l\})$。

对于 Lie 代数 A_1，即 Lie 代数 su (2) 的复化，只有一个单根 $\boldsymbol{\alpha}_1$，因此有 $\boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{2}$，权为 $\boldsymbol{\Lambda}_1 = \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}_1$，不可约表示可以用 $\Gamma(\{n_1\})$ 表示。

对于 Lie 代数 A_2，由方程 (7.29) 可得

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 2/3 & 1/3 \\ 1/3 & 2/3 \end{pmatrix},$$

可得权

$$\boldsymbol{\Lambda}_1 = \frac{2}{3}\boldsymbol{\alpha}_1 + \frac{1}{3}\boldsymbol{\alpha}_2,$$

$$\boldsymbol{\Lambda}_2 = \frac{1}{3}\boldsymbol{\alpha}_1 + \frac{2}{3}\boldsymbol{\alpha}_2。$$

取不同的 n_1, n_2，就可以得到不可约表示

$$\Gamma(\{0,0\}),\ \Gamma(\{1,0\}),\ \Gamma(\{0,1\}),\ \Gamma(\{1,1\}),\ \Gamma(\{2,0\}),\ \Gamma(\{0,2\}),\ \cdots。$$

不可约表示的维数由 Weyl 维数公式给出，即

$$d = \prod_{\alpha \in \Delta_+} \frac{(\boldsymbol{\Lambda} + \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\alpha})},$$

其中 Δ_+ 为正根集合，而

$$\boldsymbol{\delta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \in \Delta_+} \boldsymbol{\alpha}。$$

对于 Lie 代数 A_1(即 su (2) 的复化)，只有一个正根 $\boldsymbol{\alpha}_1$，因此不可约表示 $\Gamma(\{n_1\})$ 的维数为

$$d = \prod_{\alpha \in \Delta_+} \frac{(\boldsymbol{\Lambda} + \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\alpha})} = \frac{(n_1 \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1)}{(\frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1)} = n_1 + 1。$$

在前面的讨论中，我们通常记 $n_1 = 2j,\ j = 0, 1/2, 1, 3/2, \cdots$。

对于 Lie 代数 A_2(即 su (3) 的复化)，正根集合为

$$\Delta_+ = \{\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2\},$$

因此 $\Gamma(\{n_1, n_2\})$ 的维数为

$$d = (n_1 + 1)(n_2 + 1)[(n_1 + n_2)/2 + 1]。$$

由于 $\Gamma(\{n_1, n_2\})$ 和 $\Gamma(\{n_2, n_1\})$ 的维数相同，通常将 $\Gamma(\{n_1, n_2\})$ 记为

$$\Gamma(\{n_1, n_2\}) = \begin{cases} \{d\}, & n_1 > n_2, \\ \{d^*\}, & n_1 < n_2。 \end{cases}$$

如

$$\Gamma(\{0,0\}) \to \{1\},\ \Gamma(\{1,0\}) \to \{3\},\ \Gamma(\{0,1\}) \to \{3^*\},\ \Gamma(\{1,1\}) \to \{8\}$$

等。

关于不可约表示的权，我们有如下定理。

定理 7.8 如果 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是半单复 Lie 代数 $\tilde{\mathcal{L}}$ 的不可约表示的最高权，则 $\boldsymbol{\Lambda}$ 一定是单权，且不可约表示的其他权可以表示为

$$\boldsymbol{\Lambda}' = \boldsymbol{\Lambda} - \sum_{i=1}^{l} q_i \boldsymbol{\alpha}_i,$$

其中 q_i 为非负整数。

定理的证明可参阅有关专著。

由这个定理，从最高权出发，我们就可以求出不可约表示所有的权和权对应的本征向量，然后通过对易关系，即可得到半单复 Lie 代数 $\tilde{\mathcal{L}}$ 的不可约表示矩阵。

如对于 Lie 代数 A_1，三个基为 $\{\boldsymbol{H}_{\alpha_1}, \boldsymbol{E}_{\alpha_1}, \boldsymbol{E}_{-\alpha_1}\}$，满足对易关系

$$[\boldsymbol{H}_{\alpha_1}, \boldsymbol{E}_{\alpha_1}] = \boldsymbol{E}_{\alpha_1},\quad [\boldsymbol{H}_{\alpha_1}, \boldsymbol{E}_{-\alpha_1}] = -\boldsymbol{E}_{-\alpha_1},\quad [\boldsymbol{E}_{\alpha_1}, \boldsymbol{E}_{-\alpha_1}] = 2\boldsymbol{H}_{\alpha_1}。$$

不可约表示 $\Gamma(\{n_1\})$ 的最高权为 $\boldsymbol{\Lambda} = \dfrac{1}{2} n_1 \boldsymbol{\alpha}_1 = j\boldsymbol{\alpha}_1$，相应的权系为

$$j\boldsymbol{\alpha}_1, (j-1)\boldsymbol{\alpha}_1, \cdots, -j\boldsymbol{\alpha}_1。$$

一共有 $2j+1$ 个权，都是单权，可以取本征向量

$$\begin{cases} |j, j\rangle = |\boldsymbol{\Lambda}\rangle, \\ |j, m\rangle = \boldsymbol{E}_{-\alpha_1} |j, m+1\rangle, \quad m = j-1, j-2, \cdots, -j。 \end{cases}$$

不难得到

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{H}_{\alpha_1} |j, m\rangle = m\, |j, m\rangle, \\ &\boldsymbol{E}_{\alpha_1} |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\, \Big| j, m+1\rangle, \\ &\boldsymbol{E}_{-\alpha_1} |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\, \Big| j, m-1\rangle, \end{aligned}$$

其中 $m = j, j-1, \cdots, -j$。这实际上就是我们在 6.7 节中导出的结果。

7.6 Casimir 算符

对半单 Lie 代数，有 $\det(g_{ij}) \neq 0$，因而度规张量 g_{ij} 的逆满足

$$g_{ij}g^{jk} = \delta_i^k。$$

定义 Casimir 算符

$$\boldsymbol{C} = g^{ij}\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_j,$$

可以证明算符 $\boldsymbol{C}$ 与所有无穷小算符 $\boldsymbol{X}_i$ 对易，即

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{C}, \boldsymbol{X}_m] &= g^{ij}[\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_j, \boldsymbol{X}_m] = g^{ij}\boldsymbol{X}_i[\boldsymbol{X}_j, \boldsymbol{X}_m] + g^{ij}[\boldsymbol{X}_i, \boldsymbol{X}_m]\boldsymbol{X}_j \\ &= g^{ij}c_{jm}^k\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_k + g^{ij}c_{im}^k\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{X}_j = g^{ij}c_{jm}^k(\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_k + \boldsymbol{X}_k\boldsymbol{X}_i) \\ &= g^{ij}g^{kl}c_{ljm}(\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_k + \boldsymbol{X}_k\boldsymbol{X}_i)。\end{aligned}$$

因为

$$g^{ij}g^{kl}(\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_k + \boldsymbol{X}_k\boldsymbol{X}_i)$$

关于指标 j, l 是对称的，但 c_{ljm} 关于指标 j, l 是反对称的，$c_{ljm} = -c_{jlm}$，因此得到

$$[\boldsymbol{C}, \boldsymbol{X}_m] = 0, \quad m = 1, 2, \cdots。$$

对 Lie 代数 so(3)，可知

$$c_{ij}^k = -\varepsilon_{ijk},$$

则有

$$g_{ij} = c_{ik}^m c_{jm}^k = \varepsilon_{ikm}\varepsilon_{jmk} = -\varepsilon_{ikm}\varepsilon_{jkm} = -2\delta_{ij},$$

其逆为

$$g^{ij} = -\frac{1}{2}\delta^{ij},$$

相应的 Casimir 算符为

$$\boldsymbol{C} = g^{ij}\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{X}_j = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{X}_1^2 + \boldsymbol{X}_2^2 + \boldsymbol{X}_3^2) = \frac{1}{2}(L_1^2 + L_2^2 + L_3^2) = \frac{1}{2}\boldsymbol{L}^2。$$

可见，Lie 代数 so(3) 的 Casimir 算符正是体系的总角动量平方的一半。

一般地，可以构造一系列的 Casimir 算符

$$\boldsymbol{I}_n = c_{\mu_1\nu_1}^{\nu_2} c_{\mu_2\nu_2}^{\nu_3} \cdots c_{\mu_n\nu_n}^{\nu_1} \boldsymbol{X}^{\mu_1}\boldsymbol{X}^{\mu_2}\cdots\boldsymbol{X}^{\mu_n}, \quad n \geqslant 2,$$

其中 $\boldsymbol{I}_2 = \boldsymbol{C}$，逆变形式定义为

$$\boldsymbol{X}^\mu = g^{\mu\nu}\boldsymbol{X}_\nu。$$

可以证明，这些 Casimir 算符与所有无穷小算符对易，即

$$[\boldsymbol{I}_n, \boldsymbol{X}_m] = 0, \quad n = 2, 3, \cdots, \ m = 1, 2, \cdots。$$

实际上并不是所有的 $\boldsymbol{I}_n$ 都独立，对 so(3) 而言，实际上只有 $\boldsymbol{I}_2$ 是独立的。

一般地，秩为 l 的 Lie 代数可以构造出 l 个独立的 Casimir 算符。如对下列经典 Lie 代数，独立的 Casimir 算符为

$$\begin{aligned}
&\mathrm{su}\,(l+1) \quad (A_l) \longrightarrow \boldsymbol{I}_2, \boldsymbol{I}_3, \cdots, \boldsymbol{I}_{l+1};\\
&\mathrm{so}\,(2l+1) \quad (B_l) \longrightarrow \boldsymbol{I}_2, \boldsymbol{I}_4, \cdots, \boldsymbol{I}_{2l};\\
&\mathrm{sp}\,(2l) \quad (C_l) \longrightarrow \boldsymbol{I}_2, \boldsymbol{I}_4, \cdots, \boldsymbol{I}_{2l};\\
&\mathrm{so}\,(2l) \quad (D_l) \longrightarrow \boldsymbol{I}_2, \boldsymbol{I}_4, \cdots, \boldsymbol{I}_{2l-2}, \boldsymbol{I}_l。
\end{aligned}$$

Casimir 算符的本征值可以用来标记不可约表示。

习 题 7

7.1 证明：Abel 的 Lie 代数一定存在非平凡的不变子代数。

7.2 试问如果 Lie 代数 $\mathcal{L}$ 的基作线性变换 $\boldsymbol{x}'_i = a_i^j \boldsymbol{x}_j$，$a_i^j$ 非奇异，则结构常数 c_{ij}^k 将如何变换？

7.3 求 Lie 代数 su (3) 的伴随表示。

7.4 证明 su (2) 和 so(3) 是单 Lie 代数。

7.5 证明三维转动对称的无穷小算符 $\{\boldsymbol{L}_k = x_i\,\partial/\partial x_j - x_j\,\partial/\partial x_i,\ i,j,k=1,2,3\}$ 和平移对称的无穷小算符 $\{P_i = \partial/\partial x_i,\ i=1,2,3\}$ 构成 6 维 Lie 代数，即三维空间 Euclid Lie 代数 $e(3)$。求相应的结构常数和不变子代数。

7.6 求 Lie 代数 $e(3)$ 的度规张量。

7.7 证明 so (4) 的 Casimir 算符为 $\boldsymbol{C}_1 = \boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{K}^2$，$\boldsymbol{C}_2 = \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{K}^2$。

习题答案与提示

第 1 章

1.1 提示：对非循环结构，除单位元外的其他群元都是二阶的，$a^2=b^2=c^2=e$。

1.2 提示：六阶群的群元只能是 $2,3,6$ 阶的，6 阶群元给出循环群结构，3 阶群元 d 给出不变子群 $H=\{d,d^2=f,d^3=e\}$，可证其余群元为二阶群元 $a^2=b^2=c^2=e$。由此可得另一结构。

1.3 提示：九阶群的群元只能是 $3,9$ 阶的，9 阶群元给出循环群结构，若无 9 阶群元，则除单位元外其余群元都是 3 阶的。由此给出另一种结构，且是 Abel 群。

1.4 提示：十阶群的群元只能是 $2,5,10$ 阶的，10 阶群元给出循环群结构，5 阶群元 a 给出不变子群 $H=\{a,a^2,a^3,a^4,a^5=e\}$，可证其余群元均为二阶的。由此可得第二种结构。

1.5 $D_4=\{e,c_{4z}^1,c_{4z}^2,c_{4z}^3,c_{2x},c_{2y},c_{2c},c_{2d}\}$，$c,d$ 为正方形的两个对角线。

1.6 子群 $H_1=\{e,(12)\}$, $H_2=\{e,(13)\}$, $H_3=\{e,(23)\}$，不变子群 $H=\{e,(123),(132)\}$。商群 $S_3/H=\{H,(12)H\}$。

1.7 提示：考虑子群 $Z(a)=\{g:gag^{-1}=a|g\in G\}$，将群 G 按子群 $Z(a)$ 作陪集展开，则 a 所在的类和陪集之间有一一对应的映射。

1.8 素数 p 阶的群不可能有真子群，因此群元只能是 p 阶的，即只有循环群结构。

1.9 $HK=KH$ 意味着对 $h_i,h_j\in H,k_l,k_m\in K$，有 $k_lh_i=h_jk_m\in HK$，由此可证 HK 是子群。

1.10 易证 H 是子群，由 $gq_ig^{-1}=gg_i^{-1}g^{-1}gg_i'^{-1}g^{-1}gg_ig^{-1}gg_i'g^{-1}=q_i'$，可证 H 是不变子群。

1.11 由 $eg=g=ge'$，左乘 g^{-1} 得到 $g^{-1}eg=g^{-1}g=e=g^{-1}ge'=ee'=e'$。

1.12 由 $gg'^{-1}=e$ 得 $g^{-1}gg'^{-1}=eg'^{-1}=g'^{-1}=g^{-1}e=g^{-1}$。

1.13 无理数集合在普通加法或乘法下都不构成群，因为没有单位元。

1.14 提示：指数为 2 的群有陪集分解 $G=H\oplus aH=H\oplus Ha\to aH=Ha$。

1.15 令 $h_i=h_j$，则 $h_ih_i^{-1}=e\in H$，令 $h_i=e$，则 $h_j^{-1}\in H$。

1.16 提示：若 C_a 是完整的类，则对任意的 $g\in G$, 有 $gC_ag^{-1}=C_a$。如果 C_a' 不是完整的类，则对任意的 $g\in G$，一般情况下 $gC_a'g^{-1}\neq C_a'$。而 $gC_aC_bg^{-1}=gC_ag^{-1}gC_bg^{-1}=C_aC_b$。

1.17 若记 $g=(g_1,g_2)$，则有单位元 $e=(e_1,e_2)$，逆元 $g^{-1}=(g_1^{-1},g_2^{-1})$，因此群的公理都满足。

第 2 章

2.1 $\boldsymbol{D}(g_1)^{-1}\boldsymbol{D}(g_2)^{-1}=[\boldsymbol{D}(g_2)\boldsymbol{D}(g_1)]^{-1}=(\boldsymbol{D}(g_2g_1))^{-1}\neq(\boldsymbol{D}(g_1g_2))^{-1}$，因而不是表示。同理，$\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{D}^{\dagger},\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{D}$ 不是表示，$\boldsymbol{D}^{*},(\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}})^{-1},(\boldsymbol{D}^{\dagger})^{-1},\det\boldsymbol{D},\boldsymbol{S}\boldsymbol{D}\boldsymbol{S}^{-1}$ 是表示。

2.2 提示：先构造 $g\sim g^{-1}$ 的乘法表。$\boldsymbol{D}^{(c)}(e)=\boldsymbol{I}$，

$$\boldsymbol{D}^{(c)}(a)=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1\\0&0&1&0&0&0\\0&0&0&1&0&0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{D}^{(c)}(b)=\begin{pmatrix}0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&1\\1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&1&0&0\\0&1&0&0&0&0\end{pmatrix},$$

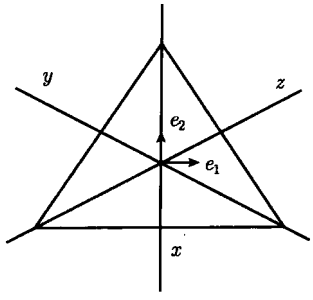
$$\boldsymbol{D}^{(c)}(c)=\begin{pmatrix}0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1\\1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{D}^{(c)}(d)=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&1\\0&0&1&0&0&0\\0&0&0&1&0&0\\0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{D}^{(c)}(f)=\begin{pmatrix}0&0&0&0&1&0\\0&0&0&1&0&0\\0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&1\\1&0&0&0&0&0\end{pmatrix}。$$

2.3 S_4 群是 24 阶群，有 5 个类，$1^2+1^2+2^2+3^2+3^2=24$。先构造 6 阶商群的特征标。结果可见附录 D。

2.4 $\Gamma^{(3)}\otimes\Gamma^{(3)}\otimes\Gamma^{(3)}=\Gamma^{(1)}\oplus\Gamma^{(2)}\oplus3\Gamma^{(3)}$。

2.5 $\boldsymbol{D}(e)=\boldsymbol{I}$，$\boldsymbol{D}(c_{2x})=\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{D}(c_{2y})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&-1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{D}(c_{2z})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&\sqrt{3}\\\sqrt{3}&-1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{D}(c_3^1)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&-1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{D}(c_3^2)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&-\sqrt{3}\\\sqrt{3}&-1\end{pmatrix}$。



2.6 Abel 群的每个群元都自成一类，故类数就是群的阶数，$1^2+1^2+\cdots+1^2=n$。

2.7 提示：根据定义，当 $g_\beta^{-1}gg_\alpha\in H$ 时，基础表示 $D^{(d)}_{\beta\alpha}(g)=1$，而取子群表示为正则表示，即当 $g_\beta^{-1}gg_\alpha h_i=h_j$ 时，有 $D^{(H)}_{ji}(g_\beta^{-1}gg_\alpha)=1$，即当 $g(g_\alpha h_i)=(g_\beta h_j)$ 时，$D^{(I)}_{\beta j,\alpha i}(g)=1$。

2.8 由特征标可得约化 $\Gamma^{(3)}\otimes\Gamma^{(3)}=\Gamma^{(1)}\oplus\Gamma^{(2)}\oplus\Gamma^{(3)}$。利用公式 (2.20)，取

$$\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 1 & 1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(1)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}。$$

其余结果为

$$\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 2 & 2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(1)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}},\quad \left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 1 & 2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(1)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 2 & 1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(1)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=0,$$

$$\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 1 & 1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(2)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 2 & 2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(2)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=0,$$

$$\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 1 & 2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(2)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=-\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 2 & 1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(2)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 1 & 1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(3)}\\ 2\end{matrix}\right\rangle=-\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 2 & 2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(3)}\\ 2\end{matrix}\right\rangle=\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 2 & 1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(3)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle$$
$$=\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 1 & 2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(3)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 1 & 1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(3)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 2 & 2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(3)}\\ 1\end{matrix}\right\rangle=\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 1 & 2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(3)}\\ 2\end{matrix}\right\rangle$$
$$=\left\langle\begin{matrix}\Gamma^{(3)} & \Gamma^{(3)}\\ 2 & 1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}\Gamma^{(3)}\\ 2\end{matrix}\right\rangle=0。$$

2.9 因为表示的直和还是表示，故存在 n 维恒等表示。但不再是不可约表示，故不满足广义正交定理。

2.10 提示：在特征标正交关系 (2.11) 中，取其中一个为恒等表示。

2.11 提示：在特征标按类正交的关系 (2.16) 中，取其中一个类为单位元。

第 3 章

3.1 考虑算符 Γ_g 对 $J_\nu\phi_\lambda$ 的作用，其中 ϕ_λ 是负载表示 $\boldsymbol{D}'(g)$ 的基，则由 1)$\Gamma_gJ_\nu\phi_\lambda=\Gamma_gJ_\nu\Gamma_g^{-1}\Gamma_g\phi_\lambda=J_\mu D^*_{\mu\nu}D'_{\kappa\lambda}\phi_\kappa$，4) $\Gamma_gJ_\nu\phi_\lambda=\Gamma_gJ_\nu\Gamma_g^{-1}\Gamma_g\phi_\lambda=D^{\mathrm{T}}_{\nu\mu}J_\mu D'_{\kappa\lambda}\phi_\kappa=J_\mu D_{\mu\nu}D'_{\kappa\lambda}\phi_\kappa$，5) $\Gamma_gJ_\nu\phi_\lambda=\Gamma_gJ_\nu\Gamma_g^{-1}\Gamma_g\phi_\lambda=D_{\nu\mu}(g^{-1})J_\mu D'_{\kappa\lambda}\phi_\kappa=J_\mu(\boldsymbol{D}^{-1})^{\mathrm{T}}_{\mu\nu}D'_{\kappa\lambda}\phi_\kappa$，6) $\Gamma_gJ_\nu\phi_\lambda=\Gamma_gJ_\nu\Gamma_g^{-1}\Gamma_g\phi_\lambda=D^\dagger_{\nu\mu}J_\mu D'_{\kappa\lambda}\phi_\kappa=J_\mu D^*_{\mu\nu}D'_{\kappa\lambda}\phi_\kappa$ 可以看到，情况 1) 和 6) 相同，给出与原来类似的定义，情况 4) 给出和原来完全相同的定义，情况 5) 则给出另一个类似定义，这里用到了 $\boldsymbol{D}^*,(\boldsymbol{D}^{-1})^{\mathrm{T}}$ 也都是群 G 的表示。情况 2) 和 3) 则不能给出正确定义。如果表示 $\boldsymbol{D}$ 幺正，则 5) 和 1) 等价。如果表示 $\boldsymbol{D}$ 与 $\boldsymbol{D}^*$ 等价，则情况 1) 和情况 6) 与原来定义等价。如果表示 $\boldsymbol{D}$ 幺正且与 $\boldsymbol{D}^*$ 等价，则所有定义都是等价的。

3.2 提示：利用题 2.8 的结果，$R=\dfrac{|(\psi_2,F_2\psi_1)|^2}{|(\psi_1,F_2\psi_1)|^2}=\dfrac{\left|\left\langle\begin{matrix}E&E&E\\2&1&2\end{matrix}\right\rangle\right|^2}{\left|\left\langle\begin{matrix}E&E&E\\2&1&1\end{matrix}\right\rangle\right|^2}=\dfrac{0}{1/2}=0$。

3.3 提示：因为直积表示 $T_1\otimes E$ 中不含恒等表示 A_1。

3.4 由 G_6^2 群的特征标表可得，$C_p=\sum\chi^{(p)}(g^2)=\chi^{(p)}(e^2)+3\chi^{(p)}(a^2)+2\chi^{(p)}(d^2)=4\chi^{(p)}(e)+2\chi^{(p)}(f)=6\ (p=1,2,3)$。

第 4 章

4.1 提示：多个不正交的高阶轴必然形成多面体晶格点群，由于存在反射操作，只能是 T_h,T_d,O_h 之一。而 S_6 轴同时也是 C_3 轴，故有 $s_6^1c_3^1=c_6^1\sigma_hc_3^1=c_2\sigma_h=i\in G$。$S_4$ 轴同时是 C_2 轴，而 $c_2i=\sigma_h$，因此 S_4 轴实际上是 C_4 轴。即得到的是 O_h 群。

4.2 将 T 群 12 个操作写成 $e=(x,y,z),c_{2x}=(x,-y,-z),c_{2y}=(-x,y,-z),c_{2z}=(-x,-y,z),c_{3\alpha}^1=(y,-z,-x),c_{3\beta}^1=(-y,-z,x),c_{3\gamma}^1=(-y,z,-x),c_{3\delta}^1=(z,z,y),c_{3\alpha}^{-1}=(-z,x,-y),c_{3\beta}^{-1}=(z,-x,-y),c_{3\gamma}^{-1}=(-z,-x,y),c_{3\delta}^{-1}=(y,z,x),$，表示矩阵为

$$\boldsymbol{D}(e)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{2x})=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{2y})=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{D}(c_{2z})=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{3\alpha}^1)=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&-1\\-1&0&0\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{3\beta}^1)=\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&-1\\1&0&0\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{D}(c_{3\gamma}^1)=\begin{pmatrix}0&-1&0\\0&0&1\\-1&0&0\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{3\delta}^1)=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{3\alpha}^{-1})=\begin{pmatrix}0&0&-1\\1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{D}(c_{3\beta}^{-1})=\begin{pmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&-1&0\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{3\gamma}^{-1})=\begin{pmatrix}0&0&-1\\-1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{3\delta}^{-1})=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix}。$$

是不可约表示。

4.3

$$\boldsymbol{D}(e)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{D}(c_2)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{D}(\sigma_{xz})=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{D}(\sigma_{yz})=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}。$$

约化结果为 $\boldsymbol{D}=\Gamma^{(2)}\oplus\Gamma^{(3)}\oplus\Gamma^{(4)}$。

4.4 两组基给出相同的表示：

$$\boldsymbol{D}(e)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{2x})=\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_{2y})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&\sqrt{3}\\\sqrt{3}&-1\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{D}(c_{2z})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&-1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_3^1)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&-1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}(c_3^2)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&-\sqrt{3}\\\sqrt{3}&-1\end{pmatrix}。$$

4.5 提示：张量的变换规律为 $F'_{ijk}=R_{il}R_{jm}R_{kn}F_{lmn}=(R\otimes R\otimes R)_{ijk,lmn}F_{lmn}$，特征标为 $\chi(e)=27,\chi(c_2)=-1,\chi(c_4)=\chi(\sigma)=\chi(\sigma')=1$。约化为 $\boldsymbol{D}=\boldsymbol{R}\otimes\boldsymbol{R}\otimes\boldsymbol{R}=4\Gamma^{(1)}\oplus3\Gamma^{(2)}\oplus3\Gamma^{(3)}\oplus3\Gamma^{(4)}\oplus7\Gamma^{(5)}$。

4.6 Γ_h 格子，$C_3\|\boldsymbol{a}_3$，$\boldsymbol{a}_3=2\boldsymbol{\tau}_z$：$C_3^1=T\oplus\{c_3^1|\boldsymbol{0}\}T\oplus\{c_3^2|\boldsymbol{0}\}T$，$C_3^2=T\oplus\left\{c_3^1\middle|\frac{2}{3}\boldsymbol{\tau}_z\right\}T\oplus\left\{c_3^2\middle|\frac{4}{3}\boldsymbol{\tau}_z\right\}T$，$C_3^3=T\oplus\left\{c_3^1\middle|\frac{4}{3}\boldsymbol{\tau}_z\right\}T\oplus\left\{c_3^2\middle|\frac{2}{3}\boldsymbol{\tau}_z\right\}T$。$\Gamma_{rh}$ 格子：$C_3^4=T\oplus\{c_3^1|\boldsymbol{0}\}T\oplus\{c_3^2|\boldsymbol{0}\}T$。

4.7 $\{\sigma|\boldsymbol{\tau}\}=\left\{i\middle|00\frac{1}{2}\right\}$。

4.8 由于是平面空间群，平移向量一定和转轴垂直，对于 C_n 操作，不会产生分数平移，故对 C_4 点群，只有一种简单空间群，记为 P_4。对 C_{4v} 点群，有反射操作，相应的分数平移可以取为 $\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{0},\frac{1}{2}\boldsymbol{a}$，因此得简单空间群 P_{4m} 和非简单空间群 P_{4g}。重新选取基向量，正方有心格子就变成正方格子。

4.9 提示：需要证明 $\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{kp})}(\{\alpha|\boldsymbol{t}_n\})\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{kp})}(\{\beta|\boldsymbol{t}_m\})=\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{kp})}(\{\alpha|\boldsymbol{t}_n\}\{\beta|\boldsymbol{t}_m\})=\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{kp})}(\{\alpha\beta|\alpha\boldsymbol{t}_m+\boldsymbol{t}_n\})$。

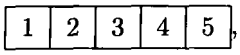
第 5 章

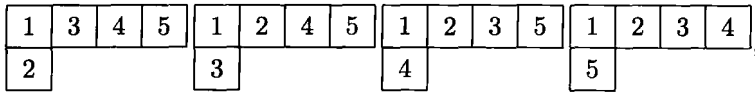
5.1 偶置换：$(1^5),(1^23),(12^2),(5)$，奇置换：$(1^32),(14),(23)$。

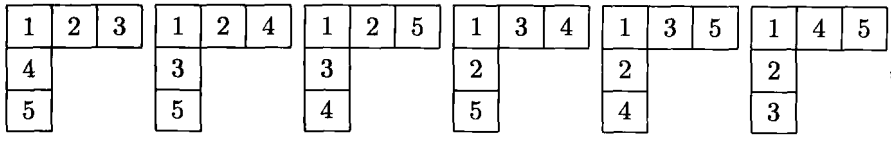
5.2 提示：偶置换集合在群的乘法下封闭，且偶置换乘奇置换等于奇置换，因此 S_n 群中偶置换的数目正好是总数的一半，即 $n!/2$ 个。

5.3 利用关系 $a^2=e,b^n=e,b^{n-1}=(n\cdots21)$，及 $(12\cdots n)(12)(n\cdots21)=(23)$，$(12\cdots n)(23)(n\cdots21)=(34),\cdots,(12\cdots n)(n-2\ n-1)(n\cdots21)=(n-1\ n)$，即所有对换都可以用 a,b 表示：$((k-1)\ k)=b^{k-2}ab^{n-(k-2)}$。

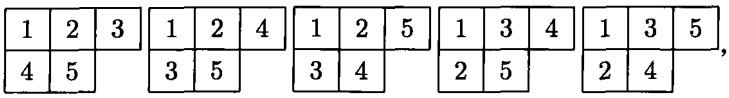
5.4 S_5 群共有 7 个不可约表示，分别是 $[5],[4,1],[3,1^2],[3,2],[2^2,1],[2,1^3],[1^5]$。Young 图及相应的维数为

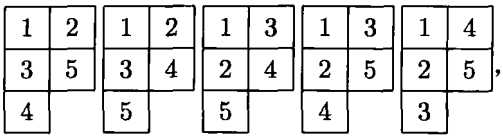
$[5]$，，$\dim[5]=1$，

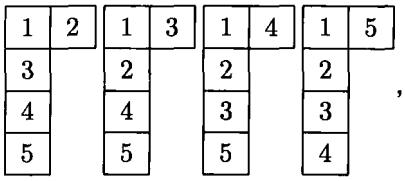
$[4,1]$，，$\dim[4,1]=4$，

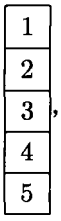
$[3,1^2]$，，

$\dim[3,1^2]=6$，

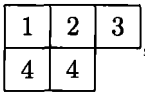
$[3,2]$，，$\dim[3,2]=5$，

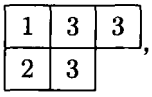
$[2^2,1]$，，$\dim[2^2,1]=5$，

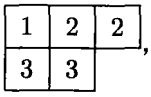
$[2,1^3]$，，$\dim[2,1^3]=4$，

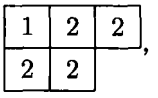
$[1^5]$，，$\dim[1^5]=1$。

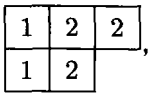
5.5 S_5 群有 7 个类，$(1^5),(1^3,2),(1^2,3),(1,2^2),(1,4),(2,3),(5)$，Young 图及填充方式如下：

$(1^3,2)$ 使用 $1,2,3,4,4$ 填充，只有一种方式，，$\chi^{[3,2]}(1^3,2)=1$，

$(1^2,3)$ $1,2,3,3,3$，一种方式，数字 3 占据两行，，$\chi^{[3,2]}(1^2,3)=-1$，

$(1,2^2)$ $1,2,2,3,3$，一种方式，，$\chi^{[3,2]}(1,2^2)=1$，

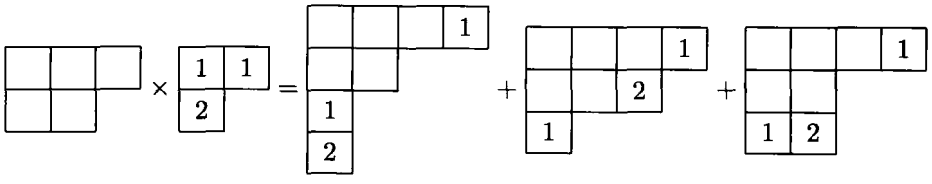
$(1,4)$ $1,2,2,2,2$，一种方式，数字 2 占据两行，，$\chi^{[3,2]}(1,4)=-1$，

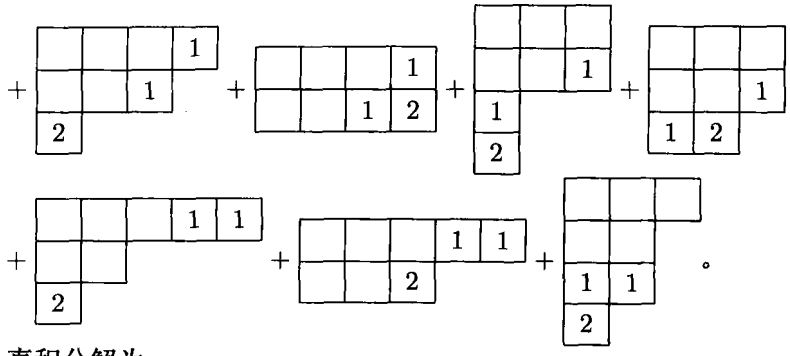
$(2,3)$ $1,1,2,2,2$，一种方式，，$\chi^{[3,2]}(2,3)=1$，

(5) $1,1,1,1,1$，没有允许的填充，$\chi^{[3,2]}(5)=0$。

5.6 $[3,1]\otimes[3,1]=[4]\oplus[3,1]\oplus[2^2]\oplus[2,1^2]$。

5.7 $[2,1]\otimes[2,1]\otimes[2,1]=[3]\oplus 3[2,1]\oplus[1^3]$。

5.8 



直积分解为

$$[3,2]\times[2,1]=[4,2,1^2]\oplus[4,3,1]\oplus[4,2^2]\oplus[4,3,1]$$
$$\oplus[4^2]\oplus[3^2,1^2]\oplus[3^2,2]\oplus[5,2,1]\oplus[5,3]\oplus[3,2^2,1],$$

维数为

$$\frac{(5+3)!}{5!\,3!}\cdot 5\cdot 2=560=90+70+56+70+14+56+42+64+28+70。$$

5.9 $T_1=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}$, $T_2=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$, $T_3=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$, Young 基为 $\psi_1=[e-(14)][e+(12)+(13)+(23)+(123)+(132)]\phi(1234),\psi_2=[e-(13)][e+(12)+(14)+(24)+(124)+(142)]\phi(1243),\psi_3=[e-(12)][e+(13)+(14)+(34)+(134)+(143)]\phi(1342)$,

$(12)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\-1&-1&-1\end{pmatrix},(13)=\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&-1&-1\\0&0&1\end{pmatrix},(14)=\begin{pmatrix}-1&-1&-1\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$。其余可用这些表示，如 $(23)=(12)(13)(12),(123)=(13)(12),\cdots$。

5.10 容易建立映射 $(123)\mapsto c_3^1$, $(12)(34)\mapsto c_2$, $(12)\mapsto\sigma_d$, $(1234)\mapsto s_4^1$。

第 6 章

6.1 无穷小算符 $\boldsymbol{X}_a=x\dfrac{\partial}{\partial x},\boldsymbol{X}_b=\dfrac{\partial}{\partial x}$，对易关系 $[\boldsymbol{X}_a,\boldsymbol{X}_b]=-\boldsymbol{X}_b$。

6.2 SO (2, 1) 群的变换矩阵满足关系 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{\eta}$，其中度规张量为 $\boldsymbol{\eta}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$，则有 $x_1^2+x_2^2-x_3^2=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{X}$，将变换 $\boldsymbol{X}'=\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}$ 代入后即得证。无穷小算符 $\hat{\boldsymbol{X}}_1=z\dfrac{\partial}{\partial y}+y\dfrac{\partial}{\partial z},\hat{\boldsymbol{X}}_2=z\dfrac{\partial}{\partial x}+x\dfrac{\partial}{\partial z},\hat{\boldsymbol{X}}_3=y\dfrac{\partial}{\partial x}-x\dfrac{\partial}{\partial y}$，对易关系 $[\hat{\boldsymbol{X}}_1,\hat{\boldsymbol{X}}_2]=\hat{\boldsymbol{X}}_3,[\hat{\boldsymbol{X}}_2,\hat{\boldsymbol{X}}_3]=-\hat{\boldsymbol{X}}_1,[\hat{\boldsymbol{X}}_3,\hat{\boldsymbol{X}}_1]=-\hat{\boldsymbol{X}}_2$。

6.3 类似地，$\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{\eta}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\eta}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\hat{\boldsymbol{X}}_a=\dfrac{\mathrm{i}}{2}\left(u\dfrac{\partial}{\partial u}-v\dfrac{\partial}{\partial v}\right),\hat{\boldsymbol{X}}_b=\dfrac{1}{2}\left(v\dfrac{\partial}{\partial u}+u\dfrac{\partial}{\partial v}\right)$,

$\hat{\boldsymbol{X}}_c=\dfrac{\mathrm{i}}{2}\left(v\dfrac{\partial}{\partial u}-u\dfrac{\partial}{\partial v}\right)$，$[\hat{\boldsymbol{X}}_a,\hat{\boldsymbol{X}}_b]=-\hat{\boldsymbol{X}}_c,[\hat{\boldsymbol{X}}_b,\hat{\boldsymbol{X}}_c]=\hat{\boldsymbol{X}}_a,[\hat{\boldsymbol{X}}_c,\hat{\boldsymbol{X}}_a]=-\hat{\boldsymbol{X}}_b$。

6.4 提示：$\boldsymbol{D}^{\dagger}(g)=\exp(\sum\alpha_k\boldsymbol{X}_k^{\dagger})=\boldsymbol{D}^{-1}(g)=\exp(-\sum\alpha_k\boldsymbol{X}_k)$。

6.5 $\boldsymbol{D}^{(7/2)}\otimes\boldsymbol{D}^{(3)}=\boldsymbol{D}^{(13/2)}\oplus\boldsymbol{D}^{(11/2)}\oplus\cdots\oplus\boldsymbol{D}^{(1/2)}$。

6.6 $\boldsymbol{D}^{(6)}=A_1\oplus A_2\oplus E\oplus T_1\oplus 2T_2$。

6.7 $[\boldsymbol{J}_k,\boldsymbol{J}^2]=[\boldsymbol{J}_k,\boldsymbol{J}_i\boldsymbol{J}_i]=\boldsymbol{J}_i[\boldsymbol{J}_k,\boldsymbol{J}_i]+[\boldsymbol{J}_k,\boldsymbol{J}_i]\boldsymbol{J}_i=\mathrm{i}\varepsilon_{kij}(\boldsymbol{J}_i\boldsymbol{J}_j+\boldsymbol{J}_j\boldsymbol{J}_i)=0$。

6.8 提示：张量的变换可以写成 $T'_{ij}=R_{ik}R_{jl}T_{kl}=(\boldsymbol{R}\otimes\boldsymbol{R})_{ij,kl}T_{kl}$，则张量的迹不变：$T'_{ii}=R_{ik}R_{il}T_{kl}=R^{\mathrm{T}}_{ki}R_{il}T_{kl}=(\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R})_{kl}T_{kl}=T_{kk}$，反对称部分按向量变换：$A'_k=\varepsilon_{ijk}T'_{ij}=\varepsilon_{ijk}R_{il}R_{jm}T_{lm}=R_{kn}A_n$，进一步有 $\boldsymbol{R}\otimes\boldsymbol{R}\sim\boldsymbol{D}^{(1)}\otimes\boldsymbol{D}^{(1)}=\boldsymbol{D}^{(2)}\oplus\boldsymbol{D}^{(1)}\oplus\boldsymbol{D}^{(0)}$。

6.9 $\mathrm{d}x_i=\alpha_{ij}x_j,\alpha_{ij}=-\alpha_{ji}$，$\hat{\boldsymbol{X}}_{ij}=x_j\dfrac{\partial}{\partial x_i}-x_i\dfrac{\partial}{\partial x_j}$，$[\hat{\boldsymbol{X}}_{ij},\hat{\boldsymbol{X}}_{kl}]=\delta_{ik}\hat{\boldsymbol{X}}_{jl}+\delta_{jl}\hat{\boldsymbol{X}}_{ik}-\delta_{jk}\hat{\boldsymbol{X}}_{il}-\delta_{il}\hat{\boldsymbol{X}}_{jk}$。

6.10 $\boldsymbol{D}^{(0)}(a,b)=1$，$\boldsymbol{D}^{(1/2)}(a,b)=\boldsymbol{D}^{(1/2)}(g^{-1})=\begin{pmatrix}a&-b^*\\b&a^*\end{pmatrix}$（注意：$\boldsymbol{g}=\begin{pmatrix}a&b\\-b^*&a^*\end{pmatrix}\to\boldsymbol{g}^{-1}=\boldsymbol{g}^{\dagger}=\begin{pmatrix}a^*&-b\\b^*&a\end{pmatrix}$），$\boldsymbol{D}^{(1)}(a,b)=\begin{pmatrix}a^2&-\sqrt{2}ab^*&b^{*2}\\\sqrt{2}ab&|a|^2-|b|^2&-\sqrt{2}a^*b^*\\b^2&\sqrt{2}a^*b&a^{*2}\end{pmatrix}$。

6.11 提示：三维空间的一般转动可以写成 $\boldsymbol{R}=\exp(\alpha_i\boldsymbol{X}_i)=\exp(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{X})$。记 $\boldsymbol{\alpha}=\phi\boldsymbol{n}$，则有 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}0&-n_3&n_2\\n_3&0&-n_1\\-n_2&n_1&0\end{pmatrix}$，$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})^2=\begin{pmatrix}n_1^2-1&n_1n_2&n_1n_3\\n_1n_2&n_2^2-1&n_2n_3\\n_1n_3&n_2n_3&n_3^2-1\end{pmatrix}$，$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})^3=-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X}\to(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})^{2n+1}=(-1)(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})^{2n-1}=\cdots=(-1)^n\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X}$，$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})^{2n}=(-1)(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})^{2n-2}=\cdots=(-1)^{n-1}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})^2$，$R_{\boldsymbol{n}}(\phi)=1+(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})^2+(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})\sin\phi-(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{X})^2\cos\phi$。将其作用在位矢 $\boldsymbol{r}$ 上即可证明。

6.12 $\exp(\alpha_1\boldsymbol{X}_1)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos\alpha_1&-\sin\alpha_1\\0&\sin\alpha_1&\cos\alpha_1\end{pmatrix}$，$\exp(\alpha_2\boldsymbol{X}_2)=\begin{pmatrix}\cos\alpha_2&0&\sin\alpha_2\\0&1&0\\-\sin\alpha_2&0&\cos\alpha_2\end{pmatrix}$，

$\exp(\alpha_3\boldsymbol{X}_3)=\begin{pmatrix}\cos\alpha_3&-\sin\alpha_3&0\\\sin\alpha_3&\cos\alpha_3&0\\0&0&1\end{pmatrix}$。

6.13 提示：$\varepsilon_{ijk}R_{i1}R_{j2}R_{k3}=\det\boldsymbol{R}$。

6.14 易见两矩阵相乘不改变形式，单位元存在，且 $\boldsymbol{H}^{-1}=\begin{pmatrix}1&-a&ac-b\\0&1&-c\\0&0&1\end{pmatrix}$。

无穷小算符 $\hat{\boldsymbol{X}}_a=x_2\dfrac{\partial}{\partial x_1},\hat{\boldsymbol{X}}_b=x_3\dfrac{\partial}{\partial x_1},\hat{\boldsymbol{X}}_c=x_3\dfrac{\partial}{\partial x_2}$。对易关系 $[\hat{\boldsymbol{X}}_a,\hat{\boldsymbol{X}}_c]=-\hat{\boldsymbol{X}}_b$，其余都对易。

6.15 提示：SO(2) 是 Abel 群，故不可约表示是一维的。$\boldsymbol{D}^{(m)}(\phi)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\phi}$，其中 m

为整数。

6.16 提示：平移群是 Abel 群，故不可约表示是一维的。$\boldsymbol{D}^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{p})=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}}$。

6.17 略去指标，可得乘法 $g(\boldsymbol{\Lambda}_1,a_1)g(\boldsymbol{\Lambda}_2,a_2)=g(\boldsymbol{\Lambda}_1\boldsymbol{\Lambda}_2,\boldsymbol{\Lambda}_1a_2+a_1)$，逆元 $g^{-1}(\boldsymbol{\Lambda},a)=g(\boldsymbol{\Lambda}^{-1},-\boldsymbol{\Lambda}^{-1}a)$，因此得：$g(\boldsymbol{\Lambda},a)T(b)g^{-1}(\boldsymbol{\Lambda},a)=T(\boldsymbol{\Lambda}b)$。

6.18 按本书第 6 章的参数化方式，可得无穷小算符 $\hat{\boldsymbol{K}}_1=x_1\dfrac{\partial}{c\partial t}+ct\dfrac{\partial}{\partial x_1}$，$\hat{\boldsymbol{K}}_2=x_2\dfrac{\partial}{c\partial t}+ct\dfrac{\partial}{\partial x_2}$，$\hat{\boldsymbol{K}}_3=x_3\dfrac{\partial}{c\partial t}+ct\dfrac{\partial}{\partial x_3}$，$\hat{\boldsymbol{J}}_1=x_2\dfrac{\partial}{\partial x_3}-x_3\dfrac{\partial}{\partial x_2}$，$\hat{\boldsymbol{J}}_2=x_3\dfrac{\partial}{\partial x_1}-x_1\dfrac{\partial}{\partial x_3}$，$\hat{\boldsymbol{J}}_3=x_1\dfrac{\partial}{\partial x_2}-x_2\dfrac{\partial}{\partial x_1}$，$\hat{\boldsymbol{P}}_0=\dfrac{\partial}{c\partial t}$，$\hat{\boldsymbol{P}}_1=\dfrac{\partial}{\partial x_1}$，$\hat{\boldsymbol{P}}_2=\dfrac{\partial}{\partial x_2}$，$\hat{\boldsymbol{P}}_3=\dfrac{\partial}{\partial x_3}$。对易关系 $[\hat{\boldsymbol{K}}_i,\hat{\boldsymbol{K}}_j]=\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{J}}_k$，$[\hat{\boldsymbol{J}}_i,\hat{\boldsymbol{J}}_j]=-\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{J}}_k$，$[\hat{\boldsymbol{J}}_i,\hat{\boldsymbol{K}}_j]=-\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{K}}_k$，$[\hat{\boldsymbol{P}}_0,\hat{K}_i]=\hat{\boldsymbol{P}}_i,[\hat{\boldsymbol{P}}_0,\hat{\boldsymbol{J}}_i]=\boldsymbol{0},[\hat{\boldsymbol{P}}_i,\hat{\boldsymbol{K}}_j]=\delta_{ij}\hat{\boldsymbol{P}}_0,[\hat{\boldsymbol{P}}_i,\hat{\boldsymbol{J}}_j]=-\varepsilon_{ijk}\hat{\boldsymbol{P}}_k,[\hat{\boldsymbol{P}}_0,\hat{\boldsymbol{P}}_i]=[\hat{\boldsymbol{P}}_i,\hat{\boldsymbol{P}}_j]=\boldsymbol{0}$。

6.19 提示：利用 $\Gamma_{\boldsymbol{R}^{-1}}|l_1m_1\rangle\otimes l_2m_2\rangle=\sum\limits_l\left\langle\begin{matrix}l\\m\end{matrix}\middle|\begin{matrix}l_1&l_2\\m_1&m_2\end{matrix}\right\rangle\Gamma_{\boldsymbol{R}^{-1}}|lm\rangle$，则可得 $D^{(l_1)}_{m_1'm_1}(\alpha,\beta,\gamma)D^{(l_2)}_{m_2'm_2}(\alpha,\beta,\gamma)=\sum\limits_{l,m,m'}\left\langle\begin{matrix}l_1&l_2\\m_1'&m_2'\end{matrix}\middle|\begin{matrix}l\\m'\end{matrix}\right\rangle D^{(l)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)\left\langle\begin{matrix}l\\m\end{matrix}\middle|\begin{matrix}l_1&l_2\\m_1&m_2\end{matrix}\right\rangle$。

6.20 提示：利用算符 $\Gamma_{\boldsymbol{R}}$ 的幺正性，$\sum\limits_m Y^*_{lm}(\theta_1',\phi_1')Y_{lm}(\theta_2',\phi_2')=\sum\limits_m[\Gamma_{\boldsymbol{R}}Y_{lm}(\theta_1',\phi_1')]^*\Gamma_{\boldsymbol{R}}Y_{lm}(\theta_2',\phi_2')=\sum\limits_{m,m',m''}(\boldsymbol{D}^{(l)})^*_{m'm}Y^*_{lm'}(\theta_1',\phi_1')D^{(l)}_{m''m}Y_{lm''}(\theta_2',\phi_2')$。

第 7 章

7.1 提示：因为是 Abel 代数，故任何子集都是子代数，且是不变子代数。

7.2 $c'^k_{ij}=a^l_ia^m_j(\boldsymbol{a}^{-1})^n_kc^n_{lm}$。

7.3 $\mathbf{ad}(\boldsymbol{x}_k)_{ij}=c^i_{kj}=-f_{kji}=f_{ijk}$，其中 f_{ijk} 为 Gell-Mann 系数。$f_{123}=1,f_{147}=f_{246}=f_{257}=f_{345}=f_{516}=f_{637}=\dfrac{1}{2},f_{458}=f_{678}=\dfrac{\sqrt{3}}{2}$。

7.4 so (3) 的 Killing 形式是非退化的，$\det\boldsymbol{g}=-8\neq0$，故 so (3) 是半单的。由于单 Lie 代数的维数必须大于等于 2，so (3) 不可能分解为两个单 Lie 代数的直和，因此是单的。su (2) 和 so (3) 是同构的，故也是单的。

7.5 $[P_i,P_j]=0$，$[L_i,L_j]=-\varepsilon_{ijk}L_k$，$[P_i,L_j]=-\varepsilon_{ijk}P_k$。集合 $\{P_i\}$ 构成不变子代数。

7.6 $g_{ij}=c^k_{il}c^l_{jk}$，由上题得，$g_{P_iP_j}=0,g_{L_iL_j}=-4\delta_{ij},g_{P_iL_j}=0$。

7.7 因为 $[L_i,K_j]=0$，而 $[L_i,\boldsymbol{L}^2]=[L_i,L_jL_j]=L_j[L_i,L_j]+[L_i,L_j]L_j=i\varepsilon_{ijk}(L_jL_k+L_kL_j)=0$，因此，$[C_1,L_i]=[C_2,L_i]=0$。同理，$[C_1,K_i]=[C_2,K_i]=0$。

附　录

附录 A　线性代数

一个 $m \times n$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以写成

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \tag{A.1}$$

如果 $m = n$，则称 $\boldsymbol{A}$ 是**方阵**，本书所遇到的绝大部分矩阵都是方阵。两个矩阵的乘积定义为

$$(\boldsymbol{AB})_{ij} = \sum_{k=1} A_{ik} B_{kj} \equiv A_{ik} B_{kj}。 \tag{A.2}$$

显然，一般 $\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA}$。一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式可以写成

$$\det \boldsymbol{A} = \sum_{p_1 p_2 \cdots p_n} \varepsilon_{p_1 p_2 \cdots p_n} a_{1 p_1} a_{2 p_2} \cdots a_{n p_n}, \tag{A.3}$$

其中 $\varepsilon_{p_1 p_2 \cdots p_n}$ 是 n 阶全反对称张量，并取 $\varepsilon_{12 \cdots n} = 1$。矩阵的迹即为矩阵对角元的和：

$$\operatorname{Tr} \boldsymbol{A} = \sum_{k=1}^{n} A_{kk}。 \tag{A.4}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的转置定义为 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})_{ij} = A_{ji}$，$\boldsymbol{A}$ 的 Hermite 共轭定义为 $(\boldsymbol{A}^{\dagger})_{ij} = (\boldsymbol{A}^{*})_{ji}$。我们可以推出矩阵的如下性质：

$$\begin{aligned} &\det(\boldsymbol{AB}) = \det \boldsymbol{A} \det \boldsymbol{B}, \\ &\det \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \det \boldsymbol{A}, \\ &\operatorname{Tr}(\boldsymbol{ABC}) = \operatorname{Tr}(\boldsymbol{BCA}) = \operatorname{Tr}(\boldsymbol{CAB}), \\ &\operatorname{Tr} \boldsymbol{A} = \operatorname{Tr}(\boldsymbol{S}^{-1} \boldsymbol{AS}), \end{aligned} \tag{A.5}$$

其中 $\boldsymbol{S}$ 是一个任意的 $n \times n$ 非奇异矩阵。如果一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以写成方块对角的形式，如

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mm} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & c_{p1} & c_{p2} & \cdots & c_{pp} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1q} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2q} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & d_{q1} & d_{q2} & \cdots & d_{qq} \end{pmatrix}, \tag{A.6}$$

则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是矩阵 $\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 的直和, 记作

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}\oplus\boldsymbol{C}\oplus\boldsymbol{D}, \tag{A.7}$$

其中 $\boldsymbol{B},\boldsymbol{C},\boldsymbol{D}$ 定义为

$$\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mm} \end{pmatrix},\ \boldsymbol{C}=\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{p1} & c_{p2} & \cdots & c_{pp} \end{pmatrix},\ \boldsymbol{D}=\begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1q} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & b_{2q} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ d_{q1} & d_{q2} & \cdots & b_{qq} \end{pmatrix}。 \tag{A.8}$$

矩阵的直和具有如下性质:

$$\det(\boldsymbol{B}\oplus\boldsymbol{C}\oplus\boldsymbol{D})=\det\boldsymbol{B}\det\boldsymbol{C}\det\boldsymbol{D},\ \operatorname{Tr}(\boldsymbol{B}\oplus\boldsymbol{C}\oplus\boldsymbol{D})=\operatorname{Tr}\boldsymbol{B}+\operatorname{Tr}\boldsymbol{C}+\operatorname{Tr}\boldsymbol{D}。 \tag{A.9}$$

一个 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和一个 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的直积 (或称 Kronecker 乘积) 是一个 $nm\times nm$ 的矩阵, 记为 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$, 其行、列都用一对指标来标记, 定义为

$$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{ij,kl}=A_{ik}B_{jl}。 \tag{A.10}$$

如果 $n=3,m=2$, 则有

$$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})=\begin{pmatrix} (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{11,11} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{11,12} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{11,21} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{11,22} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{11,31} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{11,32} \\ (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{12,11} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{12,12} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{12,21} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{12,22} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{12,31} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{12,32} \\ (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{21,11} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{21,12} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{21,21} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{21,22} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{21,31} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{21,32} \\ (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{22,11} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{22,12} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{22,21} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{22,22} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{22,31} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{22,32} \\ (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{31,11} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{31,12} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{31,21} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{31,22} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{31,31} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{31,32} \\ (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{32,11} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{32,12} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{32,21} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{32,22} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{32,31} & (\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{32,32} \end{pmatrix}$$

$$
\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix}
a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} & a_{13}b_{11} & a_{13}b_{12} \\
a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} & a_{13}b_{21} & a_{13}b_{22} \\
a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} & a_{23}b_{11} & a_{23}b_{12} \\
a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} & a_{23}b_{21} & a_{23}b_{22} \\
a_{31}b_{11} & a_{31}b_{12} & a_{32}b_{11} & a_{32}b_{12} & a_{33}b_{11} & a_{33}b_{12} \\
a_{31}b_{21} & a_{31}b_{22} & a_{32}b_{21} & a_{32}b_{22} & a_{33}b_{21} & a_{33}b_{22}
\end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix}
a_{11}\boldsymbol{B} & a_{12}\boldsymbol{B} & a_{13}\boldsymbol{B} \\
a_{21}\boldsymbol{B} & a_{22}\boldsymbol{B} & a_{23}\boldsymbol{B} \\
a_{31}\boldsymbol{B} & a_{32}\boldsymbol{B} & a_{33}\boldsymbol{B}
\end{pmatrix}。
\end{aligned}
\tag{A.11}
$$

矩阵直积有如下性质：

$$
\begin{aligned}
&(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}'\otimes\boldsymbol{B}') = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}')\otimes(\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}'), \\
&\mathrm{Tr}(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}) = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{A}\,\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{B}, \\
&(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1}\otimes\boldsymbol{B}^{-1}, \\
&(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})^{\dagger} = \boldsymbol{A}^{\dagger}\otimes\boldsymbol{B}^{\dagger}, \\
&\det(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}) = (\det\boldsymbol{A})^{m}(\det\boldsymbol{B})^{n}。
\end{aligned}
\tag{A.12}
$$

对于一个 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，方程

$$
\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}, \tag{A.13}
$$

称为本征值方程，其中 λ 称为本征值，它可以是实数或复数，列向量 $\boldsymbol{v}$ 称为对应本征值 λ 的本征向量。方程 (A.13) 当且仅当下列方程满足时有非平凡解：

$$
\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}) = 0。 \tag{A.14}
$$

在数学物理中，这个方程常称为久期方程。本征值由方程

$$
P(\lambda) = 0 \tag{A.15}
$$

给出，其中 $P(\lambda)$ 是 λ 的 n 阶多项式。如果 $\boldsymbol{A}'$ 是另一个 $n\times n$ 的矩阵，通过相似变换 $\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 相联系，其中 $\boldsymbol{S}$ 是一个 $n\times n$ 的非奇异矩阵，则方程 (A.13) 可以写成

$$
\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{v}) = \lambda(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{v})。 \tag{A.16}
$$

这意味着 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}'$ 具有相同的本征值。如果 $\boldsymbol{v}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 对应本征值 λ 的本征向量，则 $\boldsymbol{v}' = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{v}$ 是 $\boldsymbol{A}'$ 对应相同本征值 λ 的本征向量，反之亦然。对于 Hermite 矩阵或幺正矩阵 $\boldsymbol{A}$，可以通过适当的变换 (即选择适当的 $\boldsymbol{S}$) 使得 $\boldsymbol{A}'$ 对角化。把 n 个本征值 $\lambda_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ 代入方程 (A.13) 我们得到 n 个线性独立的本征向量

$$
\boldsymbol{v}^1,\boldsymbol{v}^2,\cdots,\boldsymbol{v}^n \tag{A.17}
$$

满足

$$
\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}^i = \lambda_i\boldsymbol{v}^i。
$$

将这些本征向量简单地排列起来就得到 $n\times n$ 的相似变换矩阵

$$\boldsymbol{S}=\left(\boldsymbol{v}^1,\ \boldsymbol{v}^2,\ \cdots,\ \boldsymbol{v}^n\right)。\tag{A.18}$$

事实上，如果 $\boldsymbol{v}^1,\boldsymbol{v}^2,\cdots,\boldsymbol{v}^n$ 是线性独立的向量，则有

$$\boldsymbol{v}^i\cdot\boldsymbol{v}^j=\delta_{ij}\quad 或\quad v_k^iv_k^j=\delta_{ij}。\tag{A.19}$$

完备性给出

$$v_k^iv_l^i=\delta_{kl}。\tag{A.20}$$

容易推得

$$(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S})_{ij}=(\boldsymbol{S}^{-1})_{ik}A_{kl}S_{lj}=v_k^iA_{kl}v_l^j=\lambda_jv_k^iv_k^j=\lambda_j\delta_{ij}。\tag{A.21}$$

这是对角矩阵，其中我们已经利用了公式 (A.17) 和 (A.19)。

矩阵的指数函数定义为

$$\exp\boldsymbol{A}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\boldsymbol{A}^n。\tag{A.22}$$

不难证明

$$(\exp\boldsymbol{A})^*=\exp\boldsymbol{A}^*,\quad(\exp\boldsymbol{A})^{\mathrm{T}}=\exp\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}},\quad(\exp\boldsymbol{A})^{\dagger}=\exp\boldsymbol{A}^{\dagger},\tag{A.23}$$

以及

$$(\exp\boldsymbol{A})^{-1}=\exp(-\boldsymbol{A}),\boldsymbol{S}\exp(\boldsymbol{A})\boldsymbol{S}^{-1}=\exp(\boldsymbol{S}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}^{-1}),\det(\exp\boldsymbol{A})=\exp(\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{A})。\tag{A.24}$$

关于矩阵的指数函数有 Campbell-Baker-Hausdorff 公式

$$\exp\boldsymbol{A}\exp\boldsymbol{B}=\exp\boldsymbol{C},\tag{A.25}$$

其中

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}+\frac{1}{2}[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]+\frac{1}{12}([\boldsymbol{A},[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]]+[\boldsymbol{B},[\boldsymbol{B},\boldsymbol{A}]])+\cdots。\tag{A.26}$$

附录 B　点群操作的矩阵表示

这里给出了点群对称操作的矩阵表示形式，图 B1(a) 中 x, y, z 为 3 个 4 度轴，$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ 为 4 个 3 度轴，a, b, c, d, e, f 为 6 个 2 度轴。图 B1(b) 中 z 轴 (未画出) 为 6 度轴，x, y, A, B, C, D 为 6 个 2 度轴。对称操作可以用矩阵表示为

$$\boldsymbol{r} \mapsto \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{r},$$

且

$$\boldsymbol{R}(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(i) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{2x}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{2y}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{2z}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{4x}^1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{4x}^3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{4y}^1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{4y}^3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{4z}^1) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{4z}^3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{2a}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{2b}) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{2c}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{2d}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{2e}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{2f}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{3\alpha}^1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{3\alpha}^2) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{3\beta}^1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{3\beta}^2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

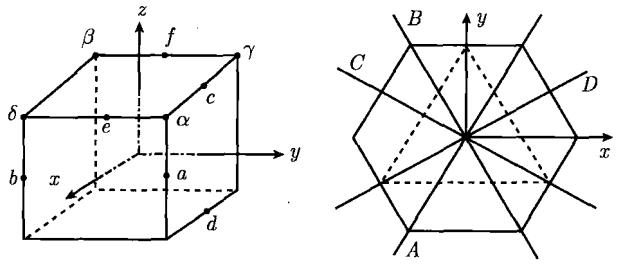
$$\boldsymbol{R}(c_{3\gamma}^1) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{3\gamma}^2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{3\delta}^1) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{3\delta}^2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{R}(c_{3z}^1) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R}(c_{3z}^2) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{6z}^1)=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{R}(c_{6z}^5)=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{2A})=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{R}(c_{2B})=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R}(c_{2C})=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{R}(c_{2D})=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}。$$



(a) (b)

图 B1 点群的对称轴

附录 C　点群的特征标表

在下面的表格里，我们使用了记号

$$\varepsilon_3 = \exp(2\pi \mathrm{i}/3) = -\frac{1}{2} + \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2},$$
$$\varepsilon_6 = \exp(2\pi \mathrm{i}/6) = \exp(\pi \mathrm{i}/3) = \frac{1}{2} + \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}。$$

C_1	e
A	1

C_2	e	c_2
A	1	1
B	1	-1

C_s	e	σ
A'	1	1
A''	1	-1

C_i	e	i
A_g	1	1
A_u	1	-1

C_3	e	c_3^1	c_3^2
A	1	1	1
E	1	ε_3	ε_3^*
E	1	ε_3^*	ε_3

C_4	e	c_4^1	$c_4^2 = c_2$	c_4^3
A	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1
E	1	i	-1	$-\mathrm{i}$
E	1	$-\mathrm{i}$	-1	i

S_4	e	s_4^1	c_2	s_4^3
A	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1
E	1	i	-1	$-\mathrm{i}$
E	1	$-\mathrm{i}$	-1	i

C_{2h}	e	c_2	i	σ_h
A_g	1	1	1	1
A_u	1	1	-1	-1
B_g	1	-1	1	-1
B_u	1	-1	-1	1

C_{2v}	e	c_2	σ_v	σ_v'
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

D_2	e	c_{2x}	c_{2y}	c_{2z}
A_1	1	1	1	1
B_1	1	1	-1	-1
B_2	1	-1	1	-1
B_3	1	-1	-1	1

C_6	e	c_6^1	c_3^1	c_2	c_3^2	c_6^5
A	1	1	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1	1	-1
E_1	1	ε_6	$-\varepsilon_6^*$	-1	$-\varepsilon_6$	ε_6^*
E_1	1	ε_6^*	$-\varepsilon_6$	-1	$-\varepsilon_6^*$	ε_6
E_2	1	$-\varepsilon_6^*$	$-\varepsilon_6$	1	$-\varepsilon_6^*$	$-\varepsilon_6$
E_2	1	$-\varepsilon_6$	$-\varepsilon_6^*$	1	$-\varepsilon_6$	$-\varepsilon_6^*$

S_6	e	c_3^1	c_3^2	i	s_6^1	s_6^5
A_u	1	1	1	1	1	1
A_g	1	1	1	-1	-1	-1
E_u	1	ε_3	ε_3^*	1	ε_3^*	ε_3
E_u	1	ε_3^*	ε_3	1	ε_3	ε_3^*
E_g	1	ε_3	ε_3^*	-1	$-\varepsilon_3^*$	$-\varepsilon_3$
E_g	1	ε_3^*	ε_3	-1	$-\varepsilon_3$	$-\varepsilon_3^*$

C_{3h}	e	c_3^1	c_3^2	σ_h	s_3^1	s_3^2
A'	1	1	1	1	1	1
A''	1	1	1	-1	-1	-1
E'	1	ε_3	ε_3^*	1	ε_3	ε_3^*
E'	1	ε_3^*	ε_2	1	ε_3^*	ε_3
E''	1	ε_3	ε_3^*	-1	$-\varepsilon_3$	$-\varepsilon_3^*$
E''	1	ε_3^*	ε_3	-1	$-\varepsilon_3^*$	$-\varepsilon_3$

C_{3v}	e	$2c_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

D_3	e	$2c_3$	$3c_2$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0

C_{4h}	e	c_4^1	c_2	c_4^3	i	σ_h	s_4^1	s_4^3
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
B_g	1	−1	1	−1	1	1	−1	−1
E_g	1	i	−1	−i	1	−1	−i	i
E_g	1	−i	−1	i	1	−1	i	−i
A_u	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1
B_u	1	−1	1	−1	−1	−1	1	1
E_u	1	i	−1	−i	−1	1	i	−i
E_u	1	−i	−1	i	−1	1	−i	i

C_{4v}	e	$2c_4$	c_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	1	−1
B_2	1	−1	1	−1	1
E	2	0	−2	0	0

D_4	e	$2c_4$	c_4^2	$2c_2$	$2c_2'$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	1	−1
B_2	1	−1	1	−1	1
E	2	0	−2	0	0

D_{2d}	e	$2s_4$	c_2	$2c_2'$	$2\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	1	−1
B_2	1	−1	1	−1	1
E	2	0	−2	0	0

D_{2h}	e	c_{2x}	c_{2y}	c_{2z}	i	σ_{xy}	σ_{xz}	σ_{yz}
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{1g}	1	1	−1	−1	1	1	−1	−1
B_{2g}	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1
B_{3g}	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1
A_u	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1
B_{1u}	1	1	−1	−1	−1	−1	1	1
B_{2u}	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1
B_{3u}	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1

C_{6h}	e	c_6^1	c_3^1	c_2	c_3^2	c_6^5	i	s_6^1	s_3^1	σ_h	s_3^2	s_6^5
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
E_g'	1	ε_6	$-\varepsilon_6^*$	−1	$-\varepsilon_6$	ε_6^*	1	$-\varepsilon_6$	ε_6^*	−1	ε_6	$-\varepsilon_6^*$
E_g'	1	ε_6^*	$-\varepsilon_6$	−1	$-\varepsilon_6^*$	ε_6	1	$-\varepsilon_6^*$	ε_6	−1	ε_6^*	$-\varepsilon_6$
E_g''	1	$-\varepsilon_6^*$	$-\varepsilon_6$	1	$-\varepsilon_6^*$	$-\varepsilon_6$	1	$-\varepsilon_6^*$	$-\varepsilon_6$	1	$-\varepsilon_6^*$	$-\varepsilon_6$
E_g''	1	$-\varepsilon_6$	$-\varepsilon_6^*$	1	$-\varepsilon_6$	$-\varepsilon_6^*$	1	$-\varepsilon_6$	$-\varepsilon_6^*$	1	$-\varepsilon_6$	$-\varepsilon_6^*$
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
E_u'	1	ε_6	$-\varepsilon_6^*$	−1	$-\varepsilon_6$	ε_6^*	−1	ε_6	$-\varepsilon_6^*$	1	$-\varepsilon_6$	ε_6^*
E_u'	1	ε_6^*	$-\varepsilon_6$	−1	$-\varepsilon_6^*$	ε_6	−1	ε_6^*	$-\varepsilon_6$	1	$-\varepsilon_6^*$	ε_6
E_u''	1	$-\varepsilon_6^*$	$-\varepsilon_6$	1	$-\varepsilon_6^*$	$-\varepsilon_6$	−1	ε_6^*	ε_6	−1	ε_6^*	ε_6
E_u''	1	$-\varepsilon_6$	$-\varepsilon_6^*$	1	$-\varepsilon_6$	$-\varepsilon_6^*$	−1	ε_6	ε_6^*	−1	ε_6	ε_6^*

C_{6v}	e	$2c_6$	$2c_3$	c_2	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	−1	1	−1
B_2	1	−1	1	−1	−1	1
E_1	2	1	−1	−2	0	0
E_2	2	−1	−1	2	0	0

D_6	e	$2c_6$	$2c_3$	c_2	$3c_2'$	$3c_2''$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	−1	−1
B_1	1	−1	1	−1	1	−1
B_2	1	−1	1	−1	−1	1
E_1	2	1	−1	−2	0	0
E_2	2	−1	−1	2	0	0

D_{3h}	e	$2c_3$	$3c_2$	σ_h	$2s_3$	$3\sigma_v$
A_1'	1	1	1	1	1	1
A_2'	1	1	−1	1	1	−1
A_1''	1	1	1	−1	−1	−1
A_2''	1	1	−1	−1	−1	1
E'	2	−1	0	−2	1	0
E''	2	−1	0	2	−1	0

D_{3d}	e	$2c_3$	$3c_2$	i	$2s_6$	$3\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	−1	1	1	−1
A_{1u}	1	1	1	−1	−1	−1
A_{2u}	1	1	−1	−1	−1	1
E_g	2	−1	0	2	−1	0
E_u	2	1	0	−2	1	0

T	e	$4c_3^1$	$4c_3^2$	$3c_2$
A	1	1	1	1
E	1	ε_3	ε_3^*	1
E	1	ε_3^*	ε_3	1
T	3	0	0	−1

D_{4h}	e	$2c_4$	c_2	$2c_2'$	$2c_2''$	i	$2s_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	−1	−1	1	1	1	−1	−1
B_{1g}	1	−1	1	1	−1	1	−1	1	1	−1
B_{2g}	1	−1	1	−1	1	1	−1	1	−1	1
E_g	2	0	−2	0	0	2	0	−2	0	0
A_{1u}	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
A_{2u}	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	1	1
B_{1u}	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	−1	1
B_{2u}	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1
E_u	2	0	−2	0	0	−2	0	2	0	0

O	e	$6c_4$	$3c_4^2$	$8c_3$	$6c_2$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	−1	1	1	−1
E	2	0	2	−1	0
T_1	3	1	−1	0	−1
T_2	3	−1	−1	0	1

T_d	e	$8c_3$	$3c_2$	$6s_4$	$6\sigma_d$
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

T_h	e	$4c_3^1$	$4c_3^2$	$3c_2$	i	$4s_6^1$	$4s_6^5$	$3\sigma_h$
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
A_u	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1
E_g	1	ε_3	ε_3^*	1	1	ε_3	ε_3^*	1
E_g	1	ε_3^*	ε_3	1	1	ε_3^*	ε_3	1
E_u	1	ε_3	ε_3^*	1	−1	$-\varepsilon_3$	$-\varepsilon_3^*$	−1
E_u	1	ε_3^*	ε_3	1	−1	$-\varepsilon_3^*$	$-\varepsilon_3$	−1
T_g	3	0	0	−1	3	0	0	−1
T_u	3	0	0	−1	−3	0	0	1

D_{6h}	e	$2c_6$	$2c_3$	c_2	$3c_2'$	$3c_2''$	i	$2s_3$	$2s_6$	σ_h	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
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
E_{1g}	2	1	−1	−2	0	0	2	1	−1	−2	0	0
E_{2g}	2	−1	−1	2	0	0	2	−1	−1	2	0	0
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
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
E_{1u}	2	1	−1	−2	0	0	−2	−1	1	2	0	0
E_{2u}	2	−1	−1	2	0	0	−2	1	1	−2	0	0

O_h	e	$8c_3$	$6c_2$	$6c_4$	$3c_4^2$	i	$6s_4$	$8s_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	−1	−1	1	1	−1	1	1	−1
E_g	2	−1	0	0	2	2	0	−1	2	0
T_{1g}	3	0	−1	1	−1	3	1	0	−1	−1
T_{2g}	3	0	1	−1	−1	3	−1	0	−1	1
A_{1u}	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
A_{2u}	1	1	−1	−1	1	−1	1	−1	−1	1
E_u	2	−1	0	0	2	−2	0	1	−2	0
T_{1u}	3	0	−1	1	−1	−3	−1	0	1	1
T_{2u}	3	0	1	−1	−1	−3	1	0	1	−1

Schöenflies	C_1	C_i	C_2	C_s	C_{2h}	C_{2v}	D_2	D_{2h}
国际符号	1	$\bar{1}$	2	m	$2/m$	$2mm$	222	mmm
Schöenflies	C_3	C_{3h}	C_{3v}	S_6	D_3	D_{3h}	D_{3d}	C_4
国际符号	3	$\bar{6}$	$3m$	$\bar{3}$	32	$\bar{6}2m$	$\bar{3}m$	4
Schöenflies	S_4	C_{4h}	C_{4v}	D_4	D_{4h}	D_{2d}	C_6	C_{6h}
国际符号	$\bar{4}$	$4/m$	$4mm$	422	$4/mmm$	$\bar{4}2m$	6	$6/m$
Schöenflies	C_{6v}	D_6	D_{6h}	T	T_h	T_d	O	O_h
国际符号	$6mm$	622	$6/mmm$	23	$m3$	$\bar{4}3m$	432	$m3m$

附录 D　置换群的特征标表

S_1	(1)
[1]	1

S_2	(1^2)	(2)
[2]	1	1
$[1^2]$	1	−1

S_3	(1^3)	3(12)	2(3)
[3]	1	1	1
[2, 1]	2	0	−1
$[1^3]$	1	−1	1

S_4	(1^4)	$6(1^2, 2)$	8(1, 3)	$3(2^2)$	6(4)
[4]	1	1	1	1	1
[3, 1]	3	1	0	−1	−1
$[2^2]$	2	0	−1	2	0
$[2, 1^2]$	3	−1	0	−1	1
$[1^4]$	1	−1	1	1	−1

S_5	(1^5)	$10(1^3, 2)$	$20(1^2, 3)$	$15(1^2, 2)$	30(1, 4)	20(2, 3)	24(5)
[5]	1	1	1	1	1	1	1
[4, 1]	4	2	1	0	0	−1	−1
[3, 2]	5	1	−1	1	−1	1	0
$[3, 1^2]$	6	0	0	−2	0	0	1
$[2^2, 1]$	5	−1	−1	1	1	−1	0
$[2, 1^3]$	4	−2	1	0	0	1	−1
$[1^5]$	1	−1	1	1	−1	−1	1

S_6	1 (1^6)	15 $(1^4, 2)$	40 $(1^3, 3)$	45 $(1^2, 2^2)$	90 $(1^2, 4)$	120 (1, 2, 3)	144 (1, 5)	15 (2^3)	90 (2, 4)	40 (3^2)	120 (6)
[6]	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
[5, 1]	5	3	2	1	1	0	0	−1	−1	−1	−1
[4, 2]	9	3	0	1	−1	0	−1	3	1	0	0
$[4, 1^2]$	10	2	1	−2	0	−1	0	−2	0	1	1
$[3^2]$	5	1	−1	1	−1	1	0	−3	−1	2	0
[3, 2, 1]	16	0	−2	0	0	0	1	0	0	−2	0
$[2^3]$	5	−1	−1	1	1	−1	0	3	−1	2	0
$[3, 1^2]$	10	−2	1	−2	0	1	0	2	0	1	−1
$[2^2, 1^2]$	9	−4	0	1	1	0	−1	−3	1	0	0
$[2, 1^4]$	5	−3	2	1	−1	0	0	1	−1	−1	1
$[1^6]$	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1

S_7	1 (1^7)	21 $(1^5,2)$	70 $(1^4,3)$	105 $(1^3,2^2)$	210 $(1^3,4)$	420 $(1^2,2,3)$	504 $(1^2,5)$	105 $(1,2^3)$	630 $(1,2,4)$	280 $(1,3^2)$	840 $(1,6)$	210 $(2^2,3)$	504 $(2,5)$	420 $(3,4)$	720 (7)
$[7]$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$[61]$	6	4	3	2	2	1	1	0	0	0	0	−1	−1	−1	−1
$[52]$	14	6	2	2	0	0	−1	2	0	−1	−1	2	1	0	0
$[51^2]$	15	5	3	−1	1	−1	0	−3	−1	0	0	−1	0	1	1
$[43]$	14	4	−1	2	−2	1	−1	0	0	2	0	−1	−1	1	0
$[421]$	35	5	−1	−1	−1	−1	0	1	1	−1	1	−1	0	−1	0
$[3^21]$	21	1	−3	1	−1	1	1	−3	−1	0	0	1	1	−1	0
$[41^3]$	20	0	2	−4	0	0	0	0	0	2	0	2	0	0	−1
$[32^2]$	21	−1	−3	1	1	−1	1	3	−1	0	0	1	−1	1	0
$[321^2]$	35	−5	−1	−1	1	1	0	−1	1	−1	−1	−1	0	1	0
$[2^31]$	14	−4	−1	2	2	−1	−1	0	0	2	0	−1	1	−1	0
$[31^4]$	15	−5	3	−1	−1	1	0	3	−1	0	0	−1	0	−1	1
$[2^21^3]$	14	−6	2	2	0	0	−1	−2	0	−1	1	2	−1	0	0
$[21^5]$	6	−4	3	2	−2	−1	1	0	0	0	0	−1	1	1	−1
$[1^7]$	1	−1	1	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1	1	−1	−1	1

置换群 $S_1 \sim S_8$ 的不可约表示的维数满足下表。

S_n	类数	群阶	不可约表示的维数平方和
S_1	1	$1!=1$	$1^2=1$
S_2	2	$2!=2$	$1^2+1^2=2$
S_3	3	$3!=6$	$1^2+1^2+2^2=6$
S_4	5	$4!=24$	$1^2+1^2+2^2+3^2+3^2=24$
S_5	7	$5!=120$	$1^2+1^2+4^2+4^2+5^2+5^2+6^2=120$
S_6	11	$6!=720$	$1^2+1^2+5^2+5^2+5^2+5^2+9^2$ $+9^2+10^2+10^2+16^2=720$
S_7	15	$7!=5040$	$1^2+1^2+6^2+6^2+14^2+14^2+14^2+14^2+15^2$ $+15^2+21^2+21^2+35^2+35^2+20^2=5040$
S_8	22	$8!=40320$	$1^2+1^2+7^2+7^2+14^2+14^2+20^2+20^2+21^2$ $+21^2+28^2+28^2+35^2+35^2+56^2+56^2+64^2$ $+64^2+70^2+70^2+42^2+90^2=40320$

附录 E　230 个空间群

在下面的空间群表里，简单空间群用星号标记。国际符号中简单型、面心型和体心型格子分别用 P, F, I 表示 (三角系简单型格子用 R 表示)。三种底心型情况分别用 A, B 和 C 表示。表示格子型式的字母后面是点群记号，螺旋轴用 $2_1, 4_3$ 等表示，即沿某一轴的分数平移。滑移面按照平移轴的方向分别用 a, b, c, n, d 表示，其中 a 表示沿 a 轴的平移 $\frac{1}{2}a_0$，b, c 的意义同上。n 表示平移 $\frac{1}{2}(a_0+b_0)$ 等，d 表示平移 $\frac{1}{4}(a_0+b_0)$ 等。

1. 三斜系

序号	Schönflies 符号	国际符号	序号	Schönflies 符号	国际符号
1*	C_1^1	$P1$	2*	C_i^1	$P\bar{1}$

2. 单斜系

序号	Schönflies 符号	国际符号	序号	Schönflies 符号	国际符号	序号	Schönflies 符号	国际符号
3*	C_2^1	$P2$	8*	C_s^3	Bm	13	C_{2h}^4	$P2/b$
4	C_2^2	$P2_1$	9	C_s^4	Bb	14	C_{2h}^5	$P2_1/b$
5*	C_2^3	$B2$	10*	C_{2h}^1	$P2/m$	15	C_{2h}^6	$B2/b$
6*	C_s^1	Pm	11	C_{2h}^2	$P2_1/m$			
7	C_s^2	Pb	12*	C_{2h}^3	$B2/m$			

3. 正交系

序号	Schönflies 符号	国际符号	序号	Schönflies 符号	国际符号	序号	Schönflies 符号	国际符号
16*	D_2^1	$P222$	36	C_{2v}^{12}	$Cmc2_1$	56	D_{2h}^{10}	$Pccn$
17	D_2^2	$P222_1$	37	C_{2v}^{13}	$Ccc2$	57	D_{2h}^{11}	$Pbcm$
18	D_2^3	$P2_12_12$	38*	C_{2v}^{14}	$Amm2$	58	D_{2h}^{12}	$Pnnm$
19	D_2^4	$P2_12_12_1$	39	C_{2v}^{15}	$Abm2$	59	D_{2h}^{13}	$Pmmn$
20	D_2^5	$C222_1$	40	C_{2v}^{16}	$Ama2$	60	D_{2h}^{14}	$Pbcn$
21*	D_2^6	$C222$	41	C_{2v}^{17}	$Aba2$	61	D_{2h}^{15}	$Pbca$
22*	D_2^7	$F222$	42*	C_{2v}^{18}	$Fmm2$	62	D_{2h}^{16}	$Pnma$
23*	D_2^8	$I222$	43	C_{2v}^{19}	$Fdd2$	63	D_{2h}^{17}	$Cmcm$
24	D_2^9	$I2_12_12_1$	44*	C_{2v}^{20}	$Imm2$	64	D_{2h}^{18}	$Cmca$
25*	C_{2v}^1	$Pmm2$	45	C_{2v}^{21}	$Iba2$	65*	D_{2h}^{19}	$Cmmm$
26	C_{2v}^2	$Pmc2_1$	46	C_{2v}^{22}	$Ima2$	66	D_{2h}^{20}	$Cccm$
27	C_{2v}^3	$Pcc2$	47*	D_{2h}^1	$Pmmm$	67	D_{2h}^{21}	$Cmma$
28	C_{2v}^4	$Pma2$	48	D_{2h}^2	$Pnnn$	68	D_{2h}^{22}	$Ccca$
29	C_{2v}^5	$Pca2_1$	49	D_{2h}^3	$Pccm$	69*	D_{2h}^{23}	$Fmmm$
30	C_{2v}^6	$Pnc2$	50	D_{2h}^4	$Pbam$	70	D_{2h}^{24}	$Fddd$
31	C_{2v}^7	$Pmn2_1$	51	D_{2h}^5	$Pmma$	71*	D_{2h}^{25}	$Immm$
32	C_{2v}^8	$Pba2$	52	D_{2h}^6	$Pnna$	72	D_{2h}^{26}	$Ibam$
33	C_{2v}^9	$Pna2_1$	53	D_{2h}^7	$Pmna$	73	D_{2h}^{27}	$Ibca$

续表

序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号
34	C_{2v}^{10}	$Pnn2$	54	D_{2h}^{8}	$Pcca$	74	D_{2h}^{28}	$Imma$
35*	C_{2v}^{11}	$Cmm2$	55	D_{2h}^{9}	$Pbam$			

4. 四角系

序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号
75*	C_4^1	$P4$	98	D_4^{10}	$I4_122$	121*	D_{2d}^{11}	$I\bar{4}2m$
76	C_4^2	$P4_1$	99*	C_{4v}^1	$P4mm$	122	D_{2d}^{12}	$I\bar{4}2d$
77	C_4^3	$P4_2$	100	C_{4v}^2	$P4bm$	123*	D_{4h}^1	$P4/mmm$
78	C_4^4	$P4_3$	101	C_{4v}^3	$P4_2cm$	124	D_{4h}^2	$P4/mcc$
79*	C_4^5	$I4$	102	C_{3v}^4	$P4_2nm$	125	D_{4h}^3	$P4/nbm$
80	C_4^6	$I4_1$	103	C_{4v}^5	$P4cc$	126	D_{4h}^4	$P4/nnc$
81*	S_4^1	$P\bar{4}$	104	C_{4v}^6	$P4nc$	127	D_{4h}^5	$P4/mbm$
82*	S_4^2	$I\bar{4}$	105	C_{4v}^7	$P4_2mc$	128	D_{4h}^6	$P4/mnc$
83*	C_{4h}^1	$P4/m$	106	C_{4v}^8	$P4_2bc$	129	D_{4h}^7	$P4/nmm$
84	C_{4h}^2	$P4_2/m$	107*	C_{4v}^9	$I4mm$	130	D_{4h}^8	$P4/ncc$
85	C_{4h}^3	$P4/n$	108	C_{4v}^{10}	$I4cm$	131	D_{4h}^9	$P4_2/mmc$
86	C_{4h}^4	$P4_2/n$	109	C_{4v}^{11}	$I4_1md$	132	D_{4h}^{10}	$P4_2/mcm$
87*	C_{4h}^5	$I4/m$	110	C_{4v}^{12}	$I4_1cd$	133	D_{4h}^{11}	$P4_2/nbc$
88	C_{4h}^6	$I4_1/a$	111*	D_{2d}^1	$P\bar{4}2m$	134	D_{4h}^{12}	$P4_2/nnm$
89*	D_4^1	$P422$	112	D_{2d}^2	$P\bar{4}2c$	135	D_{4h}^{13}	$P4_2/mbc$
90	D_4^2	$P42_12$	113	D_{2d}^3	$P\bar{4}2_1m$	136	D_{4h}^{14}	$P4_2/mnm$
91	D_4^3	$P4_122$	114	D_{2d}^4	$P\bar{4}2_1c$	137	D_{4h}^{15}	$P4_2/nmc$
92	D_4^4	$P4_12_12$	115*	D_{2d}^5	$P\bar{4}m2$	138	D_{4h}^{16}	$P4_2/ncm$
93	D_4^5	$P4_222$	116	D_{2d}^6	$P\bar{4}c2$	139*	D_{4h}^{17}	$I4/mmm$
94	D_4^6	$P4_22_12$	117	D_{2d}^7	$P\bar{4}b2$	140	D_{4h}^{18}	$I4/mcm$
95	D_4^7	$P4_322$	118	D_{2d}^8	$P\bar{4}n2$	141	D_{4h}^{19}	$I4_1/amd$
96	D_4^8	$P4_32_12$	119*	D_{2d}^9	$I\bar{4}m2$	142	D_{4h}^{20}	$I4_1/acd$
97*	D_4^9	$I422$	120	D_{2d}^{10}	$I\bar{4}c2$			

5. 三角系

序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号
143*	C_3^1	$P3$	152	D_3^4	$P3_121$	161	C_{3v}^6	$R3c$
144	C_3^2	$P31$	153	D_3^5	$P3_212$	162*	D_{3d}^1	$P\bar{3}1m$
145	C_3^3	$P32$	154	D_3^6	$P3_221$	163	D_{3d}^2	$P\bar{3}1c$
146*	C_3^4	$R3$	155*	D_3^7	$R32$	164*	D_{3d}^3	$P\bar{3}m1$
147*	S_6^1	$P\bar{3}$	156*	C_{3v}^1	$P3m1$	165	D_{3d}^4	$P\bar{3}c1$
148*	S_6^2	$R\bar{3}$	157*	C_{3v}^2	$P31m$	166	D_{3d}^5	$R\bar{3}m$
149*	D_3^1	$P312$	158	C_{3v}^3	$P3c1$	167	D_{3d}^6	$R\bar{3}c$
150*	D_3^2	$P321$	159	C_{3v}^4	$P31c$			
151	D_3^3	$P3_112$	160*	C_{3v}^5	$R3m$			

6. 六角系

序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号
168*	C_6^1	$P6$	177*	D_6^1	$P622$	186	C_{6v}^4	$P6_3mc$
169	C_6^2	$P6_1$	178	D_6^2	$P6_122$	187*	D_{3h}^1	$P\bar{6}m2$
170	C_6^3	$P6_5$	179	D_6^3	$P6_522$	188	D_{3h}^2	$P\bar{6}c2$
171	C_6^4	$P6_2$	180	D_6^4	$P6_222$	189*	D_{3h}^3	$P\bar{6}2m$
172	C_6^5	$P6_4$	181	D_6^5	$P6_422$	190	D_{3h}^4	$P\bar{6}2c$
173	C_6^6	$P6_3$	182	D_6^6	$P6_322$	191*	D_{6h}^1	$P6/mmm$
174*	C_{3h}^1	$P\bar{6}$	183*	C_{6v}^1	$P6mm$	192	D_{6h}^2	$P6/mcc$
175*	C_{6h}^1	$P6/m$	184	C_{6v}^2	$P6cc$	193	D_{6h}^3	$P6_3/mcm$
176	C_{6h}^2	$P6_3/m$	185	C_{6v}^3	$P6_3cm$	194	D_{6h}^4	$P6_3/mmc$

7. 立方系

序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号	序号	Schönflies 符号	国际 符号
195*	T^1	$P23$	207*	O^1	$P432$	219	T_d^5	$F\bar{4}3c$
196*	T^2	$F23$	108	O^2	$P4_232$	220	T_d^6	$I\bar{4}3d$
197*	T^3	$I23$	209*	O^3	$F432$	221*	O_h^1	$Pm3m$
198	T^4	$P2_13$	210	O^4	$F4_132$	222	O_h^2	$Pn3n$
199	T^5	$I2_13$	211*	O^5	$I432$	223	O_h^3	$Pm3n$
200*	T_h^1	$Pm3$	212	O^6	$P4_332$	224	O_h^4	$Pn3m$
201	T_h^2	$Pn3$	213	O^7	$P4_132$	225*	O_h^5	$Fm3m$
202*	T_h^3	$Fm3$	214	O^8	$I4_132$	226	O_h^6	$Fm3c$
203	T_h^4	$Fd3$	215*	T_d^1	$P\bar{4}3m$	227	O_h^7	$Fd3m$
204*	T_h^5	$Im3$	216*	T_d^2	$F\bar{4}3m$	228	O_h^8	$Fd3c$
205	T_h^6	$Pa3$	217*	T_d^3	$I\bar{4}3m$	229*	O_h^9	$Im3m$
206	T_h^7	$Ia3$	218	T_d^4	$P\bar{4}3n$	230	O_h^{10}	$Ia3d$

附录 F Clebsch-Gordon 系数

1. Clebsch-Gordon 系数 $\left\langle \begin{matrix} j_1 & \frac{1}{2} \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix} \right\rangle$，其中 $m = m_1 + m_2$。

j	$m_2 = \frac{1}{2}$	$m_2 = -\frac{1}{2}$
$j_1 + \frac{1}{2}$	$\left[\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}\right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}\right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 - \frac{1}{2}$	$-\left[\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}\right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}\right]^{\frac{1}{2}}$

2. Clebsch-Gordon 系数 $\left\langle \begin{matrix} j_1 & 1 \\ m_1 & m_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} j \\ m \end{matrix} \right\rangle$，其中 $m = m_1 + m_2$。

$j =$	$m_2 = 1$	$m_2 = 0$	$m_2 = -1$
$j_1 + 1$	$\left[\frac{(j_1+m)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{(j_1-m+1)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{\frac{1}{2}}$
j_1	$-\left[\frac{(j_1+m)(j_1-m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$	$\frac{m}{[j_1(j_1+1)]^{\frac{1}{2}}}$	$\left[\frac{(j_1-m)(j_1+m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$
$j_1 - 1$	$\left[\frac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$	$-\left[\frac{(j_1-m)(j_1+m)}{j_1(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$	$\left[\frac{(j_1+m)(j_1+m+1)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{\frac{1}{2}}$

3. 部分 Clebsch-Gordon 系数

$\boxed{\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}}$ j			1	1	1	0
m_1	m_2	m	1	0	-1	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		1			
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$			$\frac{1}{\sqrt{2}}$		$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			$\frac{1}{\sqrt{2}}$		$-\frac{1}{\sqrt{2}}$
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$				1	

$\boxed{1 \times \frac{1}{2}}$ j			$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
m_1	m_2	m	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
1	$\frac{1}{2}$		1					
1	$-\frac{1}{2}$			$\frac{1}{\sqrt{3}}$			$\sqrt{\frac{2}{3}}$	
0	$\frac{1}{2}$			$\sqrt{\frac{2}{3}}$			$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	
0	$-\frac{1}{2}$				$\sqrt{\frac{2}{3}}$			$\frac{1}{\sqrt{3}}$
-1	$\frac{1}{2}$				$\frac{1}{\sqrt{3}}$			$-\sqrt{\frac{2}{3}}$
-1	$-\frac{1}{2}$					1		

1×1	j	2	2	2	2	2	1	1	1	0
m_1 m_2	m	2	1	0	−1	−2	1	0	−1	0
1 1		1								
1 0			$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$\frac{1}{\sqrt{2}}$			
1 −1				$\sqrt{\frac{1}{6}}$				$\frac{1}{\sqrt{2}}$		$\frac{1}{\sqrt{3}}$
0 1			$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$-\frac{1}{\sqrt{2}}$			
0 0				$\sqrt{\frac{2}{3}}$				0		$-\frac{1}{\sqrt{3}}$
0 −1					$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$\frac{1}{\sqrt{2}}$	
−1 1				$\sqrt{\frac{1}{6}}$				$-\frac{1}{\sqrt{2}}$		$\frac{1}{\sqrt{3}}$
−1 0					$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	
−1 −1						1				

$\frac{3}{2}\times\frac{1}{2}$	j	2	2	2	2	2	1	1	1
m_1 m_2	m	2	1	0	−1	−2	1	0	−1
$\frac{3}{2}$ $\frac{1}{2}$		1							
$\frac{3}{2}$ $-\frac{1}{2}$			$\frac{1}{2}$				$\frac{\sqrt{3}}{2}$		
$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$			$\frac{\sqrt{3}}{2}$				$-\frac{1}{2}$		
$\frac{1}{2}$ $-\frac{1}{2}$				$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$\frac{1}{\sqrt{2}}$	
$-\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$				$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	
$-\frac{1}{2}$ $-\frac{1}{2}$					$\frac{\sqrt{3}}{2}$				$\frac{1}{2}$
$-\frac{3}{2}$ $\frac{1}{2}$					$\frac{1}{2}$				$-\frac{\sqrt{3}}{2}$
$-\frac{3}{2}$ $-\frac{1}{2}$						1			

$2\times\frac{1}{2}$	j	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$
m_1 m_2	m	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$
2 $\frac{1}{2}$		1									
2 $-\frac{1}{2}$			$\frac{1}{\sqrt{5}}$				$\frac{2}{\sqrt{5}}$				
1 $\frac{1}{2}$			$\frac{2}{\sqrt{5}}$				$\frac{-1}{\sqrt{5}}$				
1 $-\frac{1}{2}$				$\sqrt{\frac{2}{5}}$					$\sqrt{\frac{3}{5}}$		
0 $\frac{1}{2}$				$\sqrt{\frac{3}{5}}$					$-\sqrt{\frac{2}{5}}$		
0 $-\frac{1}{2}$					$\sqrt{\frac{3}{5}}$					$\sqrt{\frac{2}{5}}$	
−1 $\frac{1}{2}$					$\sqrt{\frac{2}{5}}$					$-\sqrt{\frac{3}{5}}$	
−1 $-\frac{1}{2}$						$\frac{2}{\sqrt{5}}$					$\frac{1}{\sqrt{5}}$
−2 $\frac{1}{2}$						$\frac{1}{\sqrt{5}}$					$\frac{-2}{\sqrt{5}}$
−2 $-\frac{1}{2}$							1				

$\boxed{\frac{3}{2}\times 1}$ j			$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
m_1	m_2	m	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{3}{2}$	1		1											
$\frac{3}{2}$	0			$\sqrt{\frac{2}{5}}$					$\sqrt{\frac{3}{5}}$					
$\frac{3}{2}$	-1				$\frac{1}{\sqrt{10}}$					$\sqrt{\frac{2}{5}}$			$\frac{1}{\sqrt{2}}$	
$\frac{1}{2}$	1			$\sqrt{\frac{3}{5}}$					$-\sqrt{\frac{2}{5}}$					
$\frac{1}{2}$	0				$\sqrt{\frac{3}{5}}$					$\frac{1}{\sqrt{15}}$			$\frac{-1}{\sqrt{3}}$	
$\frac{1}{2}$	-1					$\sqrt{\frac{3}{10}}$					$\sqrt{\frac{8}{15}}$			$\frac{1}{\sqrt{6}}$
$-\frac{1}{2}$	1				$\sqrt{\frac{3}{10}}$					$-\sqrt{\frac{8}{15}}$			$\frac{1}{\sqrt{6}}$	
$-\frac{1}{2}$	0					$\sqrt{\frac{3}{5}}$					$\frac{-1}{\sqrt{15}}$			$\frac{1}{\sqrt{3}}$
$-\frac{1}{2}$	-1						$\sqrt{\frac{3}{5}}$					$\sqrt{\frac{2}{5}}$		
$-\frac{3}{2}$	1					$\frac{1}{\sqrt{10}}$					$-\sqrt{\frac{2}{5}}$			$\frac{1}{\sqrt{2}}$
$-\frac{3}{2}$	0						$\sqrt{\frac{2}{5}}$					$-\sqrt{\frac{3}{5}}$		
$-\frac{3}{2}$	-1							1						

2×1 j	3	3	3	3	3	3	3	2	2	2	2	2	1	1	1
m_1 m_2 m	3	2	1	0	−1	−2	−3	2	1	0	−1	−2	1	0	−1
2 1	1														
2 0		$\frac{1}{\sqrt{3}}$						$\sqrt{\frac{2}{3}}$							
2 −1			$\frac{1}{\sqrt{15}}$						$\frac{1}{\sqrt{3}}$				$\sqrt{\frac{3}{5}}$		
1 1		$\sqrt{\frac{2}{3}}$						$\frac{-1}{\sqrt{3}}$							
1 0			$\sqrt{\frac{8}{15}}$						$\frac{-1}{\sqrt{6}}$				$-\sqrt{\frac{3}{10}}$		
1 −1				$\frac{1}{\sqrt{5}}$						$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$\sqrt{\frac{3}{10}}$	
0 1			$\frac{6}{\sqrt{15}}$						$\frac{-1}{\sqrt{2}}$				$\frac{1}{\sqrt{10}}$		
0 0				$\sqrt{\frac{3}{5}}$						0				$-\sqrt{\frac{2}{5}}$	
0 −1					$\frac{6}{\sqrt{15}}$						$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$\frac{1}{\sqrt{10}}$
−1 1				$\frac{1}{\sqrt{5}}$						$\frac{-1}{\sqrt{2}}$				$\sqrt{\frac{3}{10}}$	
−1 0					$\sqrt{\frac{8}{15}}$						$\frac{-1}{\sqrt{6}}$				$-\sqrt{\frac{3}{10}}$
−1 −1						$\sqrt{\frac{2}{3}}$						$\frac{1}{\sqrt{3}}$			
−2 1					$\frac{1}{\sqrt{15}}$						$\frac{-1}{\sqrt{3}}$				$\sqrt{\frac{3}{5}}$
−2 0						$1/\sqrt{3}$						$-\sqrt{2/3}$			
−2 −1							1								

附录 G 经典 Lie 代数的 Dynkin 图

下面是一些经典 Lie 代数的 Dynkin 图和 Cartan 矩阵。

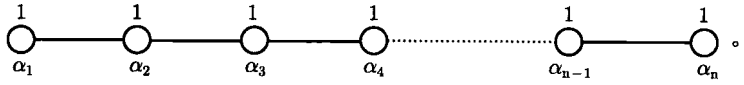
1. $A_n = \mathrm{su}(n+1)$, $n \geqslant 1$，对应矩阵

$$\boldsymbol{A}_n = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

特别地，对于 $n=2$ 和 $n=3$，分别有

$$\boldsymbol{A}_2 = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{A}_3 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}。$$

Dynkin 图为



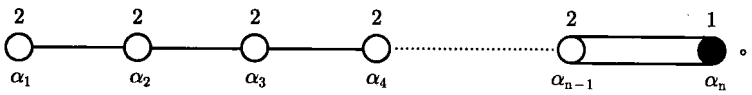
2. $B_n = \mathrm{so}(2n+1)$, $n \geqslant 1$，对应矩阵

$$\boldsymbol{B}_n = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -2 & 2 \end{pmatrix},$$

特别地，对于 $n=2$ 和 $n=3$，分别有

$$\boldsymbol{B}_2 = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{B}_3 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}。$$

Dynkin 图为



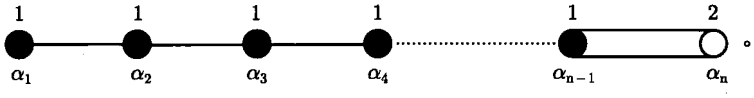
3. $C_n = \mathrm{sp}\,(2n)$, $n \geqslant 1$，对应矩阵

$$\boldsymbol{C}_n = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

特别地，对于 $n = 2$ 和 $n = 3$，分别有

$$\boldsymbol{C}_2 = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{C}_3 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}。$$

Dynkin 图为



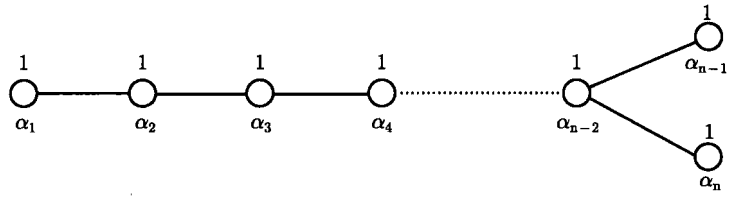
4. $D_n = \mathrm{so}\,(2n)$, $n \geqslant 3$，对应矩阵

$$\boldsymbol{D}_n = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

特别地，对于 $n = 2$ 和 $n = 3, 4$，分别有

$$\boldsymbol{D}_2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{D}_3 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{D}_4 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}。$$

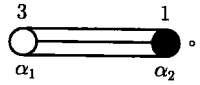
Dynkin 图为



5. G_2 对应矩阵

$$\boldsymbol{G}_2=\begin{pmatrix}2&-1\\-3&2\end{pmatrix}。$$

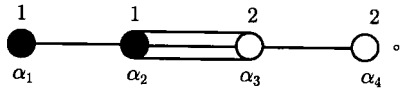
Dynkin 图为



6. F_4 对应矩阵

$$\boldsymbol{F}_4=\begin{pmatrix}2&-1&0&0\\-1&2&-2&0\\0&-1&2&-1\\0&0&-1&2\end{pmatrix}。$$

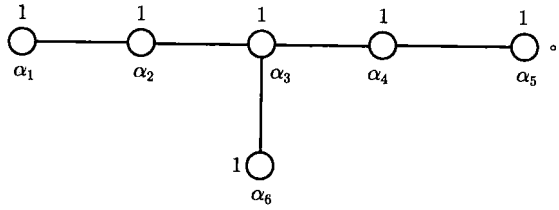
Dynkin 图为



7. E_6 对应矩阵

$$\boldsymbol{E}_6=\begin{pmatrix}2&-1&0&0&0&0\\-1&2&-1&0&0&0\\0&-1&2&-1&0&-1\\0&0&-1&2&-1&0\\0&0&0&-1&2&0\\0&0&-1&0&0&2\end{pmatrix}。$$

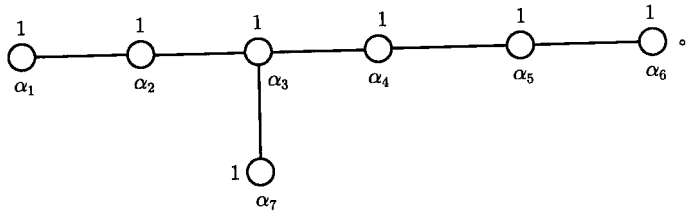
Dynkin 图为



8. E_7 对应矩阵

$$\boldsymbol{E}_7=\begin{pmatrix}2&-1&0&0&0&0&0\\-1&2&-2&0&0&0&0\\0&-1&2&-1&0&0&-1\\0&0&-1&2&-1&0&0\\0&0&0&-1&2&-1&0\\0&0&0&0&-1&2&0\\0&0&-1&0&0&0&2\end{pmatrix}。$$

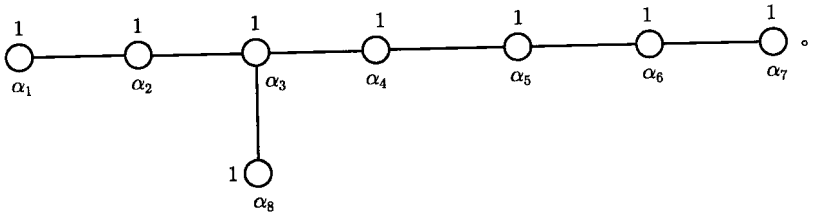
Dynkin 图为



9. E_8 对应矩阵

$$\boldsymbol{E}_8 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}。$$

Dynkin 图为



索　引

B

伴随表示, 176
半单 Lie 代数, 175
半直积, 18
标准 Young 盘, 108
表示, 20
表示的维数, 20
波矢群, 95
波矢星, 95
不变子群, 13
不可约表示, 23
不可约张量算符, 58

C

乘法, 5
乘法表, 9

D

带点的逆变向量, 167
带点的协变向量, 167
单根, 184
单值表示, 148
单 Lie 代数, 175
倒格子空间基向量, 92
倒格子向量, 92
等价表示, 22
第二类点群, 78
第一类点群, 74
点群, 68, 70
动量, 137
度规张量, 162
对换, 102
对偶表示, 107

F

反射面, 70
非 Abel 群, 6, 7

G

根, 178
根向量, 179
共轭类, 10
共轭子群, 13
钩形规则, 110
广义正交定理, 30

H

恒等表示, 21

J

基, 20
基础表示, 38
简并, 54
阶, 6
结构常数, 129
晶格点群, 68
晶格空间群, 68
经典 Lie 群, 125
矩阵表示, 21

K

可约表示, 23
空间群, 68

L

类, 10
理想, 174
例外群, 125

M

密度函数, 143

N

逆变向量, 166

O

偶置换, 103

P

陪集, 10
配分, 105
平移对称, 137
平移群, 9, 69

Q

奇置换, 103
球谐函数, 155
权, 185
权函数, 143
群的公理, 5
群

S

商群, 14
生成元, 103
时间反演对称, 63
实表示, 60
双值表示, 148
四维时空, 162

T

特征标, 23
特征标正交定理, 33
同构, 15
同态, 15
投影算符, 51

W

外积, 115
无迹张量, 167
无穷小生成元, 128
无穷小算符, 134

X

小表示, 98
小群, 95
协变向量, 166
辛群
循环, 17, 102
循环群, 6

Y

映射, 5
右不变积分, 143
诱导表示, 39
赝标, 170
赝矢, 170
幺正表示, 24, 26
幺正辛群, 125

Z

张量表示, 166
张量空间, 167
真 Lorentz 群, 164
正根, 184
正规子群, 13
正则表示, 36
正则基, 180
直积, 17
指数, 12
置换, 6, 8, 9, 102
置换群, 8, 102
秩, 178
中心反演, 70
忠实表示, 20
重排定理, 8
子代数, 174
子空间, 174
子群, 8
自旋角动量, 138
最高权, 185
左不变积分, 143

其他

Abel 群, 6
Abel 的 Lie 代数, 173
angular momentum, 136
Baker-Campbell-Hausdorff 公式, 159
Bloch 波函数, 94

Bloch 定理, 94
Bravais 格子, 82
Brillouin 区, 92
Burnside 定理, 32
Cartan-Weyl 基, 180
Cartan 矩阵, 185
Cartan 判据, 177
Cartan 子代数, 178
Casimir 算符, 189
Cayley 定理, 16
Clebsch-Gordan 系数, 47, 157
Dynkin 图, 184
Euclid 群, 68
Euler 角, 126
Frobenius 倒易定理, 41
Frobenius 公式, 108
Frobenius 生成函数, 108
Gell-Mann 矩阵, 133
Gell-Mann 系数, 133
Kiuing 形式
Lagrange 定理, 12
Lie 代数, 139, 172
Lie 定理, 135
Lie 群, 118
Lie 群的维数, 118
Lorentz 变换, 162
Lorentz 群, 162
Noether 定理, 137
Pauli 矩阵, 145
Poincaré 群, 162
Schönfliess 符号, 88
Schur 引理, 27
Weyl 维数公式, 186
Wigner-Eckart 定理, 59
Young 盘, 108
Young 算符, 113
Young 图, 106
7 大晶系, 84
GL $(2, \mathbf{R})$, 120
O (n), 123
SL $(2, \mathbf{C})$, 121
SO (2), 125
SO (3), 123
SO (p, q), 124
SU (2), 127
SU (p, q), 123
n 度轴 C_n, 70
$\boldsymbol{D}^{(l)}(a, b)$, 141
$\boldsymbol{k}$ 空间, 92
GL $(n, \mathbf{C})$, 121
GL $(n, \mathbf{R})$, 121
O (p, q), 124
SL $(n, \mathbf{C})$, 121
SL $(n, \mathbf{R})$, 121
SO (n), 123
SU (2) × U (1), 122
SU (3), 122
SU (n), 122
Sp $(2n, \mathbf{C})$, 124
USp $(2n)$, 125
U (1), 122
U (n), 121
U (p, q), 122

参 考 文 献

[1] 马中骐. 物理学中的群论 (第二版). 北京: 科学出版社, 2006

[2] Wu-Ki Tung. *Group theory in physics.* World Scientific, 1985

[3] J. F. Cornwell. *Group theory in physics: An Introduction.* Academic Press & World Scientific, 2006

[4] 陶瑞宝. 物理学中的群论. 上海: 上海科学技术出版社, 1986

[5] 张瑞明, 钟志成. 应用群论导引. 武汉: 华中科技大学出版社, 2001

[6] 韩其智, 孙洪洲, 群论. 北京: 北京大学出版社, 1987

[7] 孙洪洲, 韩其智. 李代数李超代数及在物理中的应用. 北京: 北京大学出版社, 1999

[8] 陈金全. 群表示论的新途径. 上海: 上海科学技术出版社, 1984

[9] Chen Jin Quan, Ping Jialun, Wang Fan. *Group Representation Theory for Physicists.* 2nd Ed. World Scientific, 2002

[10] B. G. Wybourne. *Classical Groups for Physicists.* John Wiley & Sons Inc., 1974. 中译本: 典型群及其在物理学上的应用. 冯承天, 金元望, 张民生, 栾德怀译. 北京: 科学出版社, 1982

[11] 徐婉棠, 喀兴林. 群论及其在固体物理中的应用. 北京: 高等教育出版社, 1999

[12] 高崇寿. 群论及其在粒子物理学中的应用. 北京: 高等教育出版社, 1992

[13] 谢希德, 蒋平, 陆奋. 群论及其在物理学中的应用. 北京: 科学出版社, 1986

[14] J. P. Elliott, P. G. Dawber. *Symmetry in Physics.* McMillan Press, 1979. 中译本: 物理学中的对称性. 仝道荣译. 北京: 科学出版社, 1986

[15] Harry J. Lipkin. *Lie Groups for Pedestrians.* Dover Publications, 2002

[16] 马中骐. 群论习题精解. 北京: 科学出版社, 2002

[17] Howard Georgi. *Lie Algebras In Particle Physics: from Isospin To Unified Theories (Frontiers in Physics).* Westview Press, 1999

[18] Robert Gilmore. *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications.* Dover Publications, 2006

[19] Francesco Iachello. *Lie Algebras and Applications.* Springer, 2006

[20] Anthony W. Knapp. *Lie Groups: Beyond an Introduction.* Birkhäuser Boston; 2nd Edition, 2002

[21] L. O'Raifeartaigh. *Group Structure of Gauge Theories.* Cambridge University Press, 1986

[22] D. H. Sattinger, O. L. Weaver. *Lie Groups and Algebras with Applications to Physics, Geometry, and Mechnics.* Springer-Verlag, 1986

[23] M. Hamermesh. *Group theory and its applications to physical problems.* Dover, New York, 1989

[24] S. Sternberg. *Group Theory and Physics.* Cambridge University Press, 1995

[25] M. Aivazis. *Group Theory in Physics: Problems and Solutions.* World Scientific, 1991

[26] M. Flato, P. Sally, G. Zuckerman. *Applications of Group Theory in Physics and Mathematical Physics.* Amer Mathematical Society, 1985

[27] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio. *Group Theory: Application to the Physics of*

Condensed Matter, Springer, 2008

[28] Predrag Cvitanovic. *Group Theory: Birdtracks, Lie's, and Exceptional Groups*, Princeton University Press, 2008

[29] H. F. Jones. *Groups, Representations and Physics*, Taylor & Francis, 1998

[30] W. Ludwig, C. Falter, *Symmetries in Physics: Group Theory Applied to Physical Problems.* Springer-Verlag, 1996

[31] Fl. Stancu. *Group Theory in Subnuclear Physics*, Oxford University Press, 1996

[32] Y. S. Kim, M. Noz. *Theory and Applications of the Poincaré Group*, Springer, 1986

[33] Petre P. Teodorescu, Nicolae-A. P. Nicorovici, *Applications of the Theory of Groups in Mechanics and Physics.* Springer, 2004

[34] J. F. Cornwell. *Group Theory in Physics, Volume* 1: *An Introduction(Techniques of Physics).* Academic Press, 1997

[35] J. F. Cornwell. *Group Theory in Physics, Volume* 2. Academic Press, 1986

[36] J. F. Cornwell. *Group Theory in Physics, Volume* 3: *Supersymmetries and Infinite-Dimensional Algebras.* Academic Press, 1992

[37] Volker Heine. *Group Theory in Quantum Mechanics.* Dover Publications, 1993

[38] A. A. Komar. *Group Theory, Gravitation and Elementary Particle Physics.* Nova Science Pub Inc., 1987

[39] E. P. Wigner. *Group Theory and its Applications to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra.* Academic Press, 1959

[40] Joseph J. Rotman. *An Introdution to the Theory of Groups.* Springer-Verlag, 4th Edition, 1995

[41] Shoon K. Kim. *Group Theoretical Methods and Applications to Molecules and Crystals.* Cambridge University Press, 1999