



中国科学技术
经·典·文·库

群论及其在物理学中的应用

谢希德 蒋平 陆奋 编著

 科学出版社
www.sciencep.com

中国科学技术经典文库·物理卷

群论及其在物理学 中的应用

谢希德 蒋 平 陆 奋 编著

科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

群及其表示理论是处理具有一定对称性的物理体系的一种有力工具. 本书在论述群及其表示理论的基础上, 着重介绍群论在原子、分子和晶体等物理体系中的应用. 全书共分五章, 包括群和群表示的基本理论、群表示与薛定谔方程、完全转动群的不可约表示和角动量、群论在原子结构方面的应用及空间群的表示与应用.

本书可供大专院校物理系及有关专业的教师、研究生和高年级学生参考.

图书在版编目(CIP)数据

群论及其在物理学中的应用/谢希德, 蒋平, 陆奋编著. —北京: 科学出版社, 2010

(中国科学技术经典文库·物理卷)

ISBN 978-7-03-029022-9

I. 群… II. ①谢… ②蒋… ③陆… III. 群论-应用-物理学 IV. O411.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 183822 号

责任编辑: 钱 俊 鄢德平 / 责任校对: 陈玉凤

责任印制: 钱玉芬 / 封面设计: 王 浩

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

1986 年 8 月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2010 年 10 月第二次印刷 印张: 26 3/4

字数: 521 000

定价: **98.00 元**

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

群及其表示理论, 作为数学的一个分支, 是处理具有一定对称性的物理体系的一种有力工具. 利用群论方法, 可以直接对体系的许多性质作出定性的了解, 可以简化复杂的计算, 也可以预言物理过程的发展趋向. 作为一门课程, 《群论及其在物理学中的应用》也应是物理系研究生的必读课程或高年级大学生的选修课程. 本书正是为了适应这一需要而编写的.

本书是在历年复旦大学物理系部分研究生使用的讲义基础上经补充、修订而成的. 全书共分五章. 第一章从群的基本性质开始, 介绍了群的表示理论, 并且相当详细地介绍了三十二个晶体点群的对称操作. 第二章在了解不可约表示基矢性质的基础上, 主要分析薛定谔方程的对称性, 并且具体讨论了群论在矩阵元计算、组成杂化轨道以及分子正则振动等方面的应用. 此外, 作为微扰算符影响的具体例子, 介绍了完全转动群的不可约表示按点群的简约. 第三章在详细讨论完全转动群的不可约表示之后, 介绍了其在角动量耦合以及不可约张量算符方面的应用, 同时还介绍了双点群的性质和时间反演对称性. 第四章在微扰理论的体系中, 应用群论分别讨论计入电子间的库仑相互作用, 自旋-轨道耦合, 具有一定对称性的晶体场, 外磁场以及超精细结构等因素的影响后原子状态的变化, 集中介绍群论在原子体系中的应用. 最后一章则在详细讨论空间群及其不可约表示的基础上, 介绍群论在晶体能带理论和晶格振动方面的应用. 限于篇幅, 排列群在本书中只作为群的一个具体例子提及, 而并未作专门的详细讨论. 在每章正文后面均附有主要的参考资料目录以及一定数量的习题, 以便帮助读者比较深入地掌握有关内容.

作为一门研究生课程使用的教材, 本书的内容是建立在大学物理系毕业生的知识水平基础之上的. 因此, 对其他方面的读者, 在阅读本书时要求具有初等量子力学和固体物理学的知识基础.

在本书编写过程中, 得到了科学出版社的热情支持, 陆栋同志详细地阅读了全部书稿, 提出了许多宝贵的意见, 给编者以很大帮助, 曹佩芳同志草绘了全部插图, 在此一并致谢.

编 者

1984 年 7 月

目 录

前言

第一章 群和群表示	1
§1.1 群的定义和有限群的几个性质	1
1.1.1 群的定义	1
1.1.2 有限群的基本性质	2
§1.2 子群和商群	4
1.2.1 子群的定义	4
1.2.2 陪集的定义和有关的定理	4
1.2.3 内积与共轭子群	5
1.2.4 不变子群 (自轭子群或正则子群)	6
1.2.5 商群	7
§1.3 同构群与同态群, 核	9
1.3.1 同构群	9
1.3.2 同态群	9
1.3.3 核	9
§1.4 群的矩阵表示与有关的定理	10
1.4.1 群 G 的矩阵表示的定义	10
1.4.2 么正矩阵群	10
1.4.3 可约表示, 完全可约表示和不可约表示	10
1.4.4 等价的群表示	11
§1.5 有关不可约表示的几个定理	13
§1.6 不可约表示的特征标	22
1.6.1 特征标的定义	22
1.6.2 特征标的性质	22
1.6.3 类的和以及有关的性质	24
1.6.4 可约表示的简约	25
§1.7 规则表示	26
1.7.1 定义	26
1.7.2 规则表示的特性	28
§1.8 直接乘积	31
1.8.1 群的直接乘积的定义	31
1.8.2 矩阵的直接乘积	33

1.8.3 矩阵的直接乘积可做为群直接乘积的表示	34
1.8.4 直接乘积的表示的特征标是各表示特征标的乘积	34
§1.9 几种常见的群	34
1.9.1 阿贝尔群	35
1.9.2 循环群	35
1.9.3 排列群	36
1.9.4 对称性群	36
§1.10 晶体中对称操作的数学描述	37
1.10.1 主动型描述和被动型描述	37
1.10.2 矩阵 A 的并矢表示	39
§1.11 晶体中的基本对称操作	42
§1.12 32 个点群	45
1.12.1 生群元	45
1.12.2 32 个点群的符号	45
1.12.3 32 个点群	46
§1.13 32 个点群的特征标	63
第一章习题	73
参考文献	74
第二章 群表示与薛定谔方程	75
§2.1 函数与算符的对称变换	75
2.1.1 函数的变换	75
2.1.2 算符的变换	77
§2.2 哈密顿算符的变换性质	78
2.2.1 哈密顿算符的对称变换	78
2.2.2 使哈密顿算符不变的操作	78
2.2.3 两种常见的哈密顿算符所属的群	79
§2.3 群表示与函数空间的基矢	80
2.3.1 用以产生群表示的基矢	80
2.3.2 函数空间或矢量空间	84
2.3.3 可约函数空间与不可约函数空间	84
§2.4 不可约表示基矢的性质	92
2.4.1 么正算符和么正矩阵	92
2.4.2 不可约表示 $D^j(R)$ 的第 λ 列基矢所满足的充要条件	93
2.4.3 准投影算符 $\hat{\mathcal{P}}_\lambda^j$	94
2.4.4 属于第 j 个不可约表示的基矢 f^j	95
2.4.5 投影算符 $\hat{\mathcal{P}}^j$	95

2.4.6 定理	96
§2.5 薛定谔方程的解与哈密顿量的群	100
2.5.1 定理	100
2.5.2 正常简并和偶然简并	102
2.5.3 系一	102
§2.6 矩阵元的计算	104
§2.7 简并态的微扰理论	106
§2.8 轴转动群和完全转动群	109
2.8.1 轴转动群	109
2.8.2 完全转动群	111
§2.9 完全转动群的不可约表示按点群的简约	113
2.9.1 D^l 按 D_3 群的简约	113
2.9.2 D^l 按点群 O_h 的简约	114
2.9.3 D^l 按 T_d 群的简约	117
2.9.4 D^l 按照 D_{4h} 群的简约	117
§2.10 杂化轨道的组合	117
§2.11 分子轨道 (MO) 理论	123
§2.12 分子振动的简正模式与简正坐标	128
2.12.1 原子振动的描述	128
2.12.2 群论在求解简正坐标与振动方式中的应用	131
§2.13 振动谱的选择定则	144
2.13.1 红外活性和无红外活性	145
2.13.2 拉曼跃迁	146
§2.14 振动波函数的对称性	148
2.14.1 组频能态波函数的对称性	149
2.14.2 倍频能级波函数的对称性	150
2.14.3 一般振动态的对称性	154
2.14.4 非简谐项的影响	156
§2.15 原子振动-电子相互作用, 杨-特勒 (Jahn-Teller) 效应	156
2.15.1 电子-原子振动相互作用对电子跃迁的影响	156
2.15.2 杨-特勒 (Jahn-Teller) 效应	157
第二章习题	158
参考文献	160
第三章 完全转动群的不可约表示和角动量	161
§3.1 用欧拉角描述转动的完全转动群的不可约表示	161
§3.2 二维么正群	164

3.2.1 二维幺正么模矩阵	164
3.2.2 二维幺正么模矩阵和坐标变换的关系	165
3.2.3 $R(u)$ 与 $R(\alpha, \beta, \gamma)$ 的关系	167
3.2.4 与转动操作对应的二维幺正么模矩阵组成群	169
§3.3 由二维幺正群导出的完全转动群的不可约表示	169
§3.4 无穷小转动算符和角动量算符	174
3.4.1 绕 x 轴作角度为 $d\theta$ 的无穷小转动的算符及其不可约表示	174
3.4.2 绕 y 轴作角度为 $d\theta$ 的无穷小转动的算符 $\hat{P}_{Ry}$ 及其不可约表示	176
3.4.3 绕 z 轴作角度为 $d\theta$ 的无穷小转动的算符 $\hat{P}_{Rz}$ 及其不可约表示	178
3.4.4 转动算符的一般表示式	179
§3.5 角动量耦合与矢量耦合系数	180
3.5.1 耦合表象与非耦合表象	181
3.5.2 $A_{mm_1m_2}^{jj_1j_2}$ 的计算	181
3.5.3 $D^{j_1} \otimes D^{j_2}$ 在耦合表象中的简约	188
§3.6 矢量耦合系数的性质	189
3.6.1 j, m 为某些特殊值的矢量耦合系数	189
3.6.2 $A_{mm_1m_2}^{jj_1j_2}$ 的矩阵表示和正交关系	189
3.6.3 矢量耦合系数的对称性质	192
§3.7 Clebsch-Gordan 系列	193
3.7.1 Clebsch-Gordan 系列的定义	193
3.7.2 逆 Clebsch-Gordan 系列	194
3.7.3 球谐函数的某些性质	195
§3.8 张量算符	198
3.8.1 矢量算符	198
3.8.2 二级张量算符	199
3.8.3 其他的高级张量算符	201
3.8.4 不可约张量算符	201
3.8.5 不可约张量算符的乘积	203
§3.9 不可约张量算符矩阵元的简约, Wigner-Eckart 定理	205
§3.10 三个角动量的耦合, Racah 系数	209
3.10.1 Racah 系数的定义和推导	209
3.10.2 Racah 系数的性质	212
3.10.3 Racah 系数应用举例——矩阵元 $\langle j'm'j_1'j_2' \hat{T}^L(1)\hat{T}^L(2) jmj_1j_2\rangle$ 的 简约	213
§3.11 自旋角动量	217
§3.12 计入自旋转动耦合的哈密顿算符所属的群	219
§3.13 双点群的性质与特征标表	224

3.13.1 双点群的性质	224
3.13.2 双点群的不可约表示的特征标表	227
§3.14 时间反演对称算符	234
3.14.1 时间反演对称和时间反演算符	235
3.14.2 计入自旋后的时间反演算符的性质	237
3.14.3 Kramers 定理	240
3.14.4 对非简并的态, 磁矩的平均值为零	240
§3.15 计入时间反演后电子系能级的简并度	241
3.15.1 复表示的定义与性质	241
3.15.2 当 j 为整数时, 完全转动群的不可约表示 $D^j(R)$ 是实表示	244
3.15.3 时间反演附加简并	246
第三章习题	251
参考文献	251
第四章 群论在有关原子结构问题中的应用	252
§4.1 顺磁晶体中的晶体场	252
§4.2 晶体微扰势矩阵元的计算	256
§4.3 多电子体系的薛定谔方程	264
§4.4 Russel-Saunders 耦合能量的计算	269
4.4.1 根据角动量简化久期方程	270
4.4.2 Slater 求和定则	272
4.4.3 计入静电相互作用后能级的分裂	274
4.4.4 计入自旋-轨道耦合后能级的分裂	283
§4.5 在外加磁场下能级的分裂	291
§4.6 超精细结构	295
4.6.1 磁偶极矩相互作用	295
4.6.2 有外加磁场的情况	299
4.6.3 电-四极矩相互作用	300
第四章习题	302
参考文献	303
第五章 空间群表示	304
§5.1 描述转动及平移算符的性质	304
§5.2 空间群	306
§5.3 布喇菲格子	308
§5.4 纯平移群的不可约表示	311
§5.5 群的分导表示, Frobenius 定理	313

5.5.1 分导表示的定义	313
5.5.2 Frobenius 第一定理	314
5.5.3 Frobenius 第二定理	315
§5.6 群的诱导表示	316
5.6.1 定义	316
5.6.2 诱导表示 Δ_j^I 的矩阵元	316
§5.7 诱导表示的特征标, Frobenius 互易原理	321
5.7.1 诱导表示的特征标	321
5.7.2 Frobenius 互易原理	322
§5.8 诱导表示的不可约性	324
§5.9 正则子群的共轭表示	326
5.9.1 共轭表示的定义	326
5.9.2 轨道, 波矢星	326
5.9.3 共轭表示基矢之间的关系	332
5.9.4 正则子群与共轭表示的关系	333
§5.10 第二类小群	333
5.10.1 定义	333
5.10.2 空间群的第二类小群 —— 波矢群 G_k	335
5.10.3 同构共轭子群	335
5.10.4 可允许表示	337
§5.11 简单空间群的不可约表示的诱导	341
§5.12 简单空间群不可约表示与晶体能带结构	350
§5.13 自由电子近似计算立方晶体的能带结构	353
5.13.1 薛定谔方程及其解	353
5.13.2 能量 $E(k)$ 所属的不可约表示及有关的基矢	354
§5.14 非简单空间群不可约表示的诱导	357
5.14.1 表示的核	357
5.14.2 不变子群	358
5.14.3 表示的产生	359
5.14.4 用 $L^{\text{II}}(\Delta)/K$ 可产生 $L^{\text{II}}(\Delta)$ 的可允许表示	359
5.14.5 求非简单空间群不可约表示的步骤	360
§5.15 金刚石型晶体 (空间群 O_h^7) 波矢群的不可约表示的特征标	362
§5.16 空间群不可约表示直接乘积的简约	366
§5.17 晶体晶格振动的正则模式	374
5.17.1 运动方程及其解	374
5.17.2 本征矢的变换性质	377

5.17.3 本征矢的计算	381
5.17.4 金刚石的正则振动模式	385
§5.18 晶体红外吸收与拉曼散射的选择定则	387
5.18.1 振动波函数 $ n\rangle$ 的对称性	387
5.18.2 偶极矩算符的对称性和红外吸收选择定则	389
5.18.3 极化率算符的对称性与拉曼跃迁选择定则	394
第五章习题	395
参考文献	397
附录	398

第一章 群和群表示

本章将介绍群和群表示的基本定义、性质以及有关的基本定理. 先从抽象群的定义和性质出发, 逐步介绍同晶体性质有关的点群, 最后介绍有关群表示的重要的基本定理. 在叙述中对于线性代数中已介绍过的基本定理不再证明, 而只是引用其结果.

§1.1 群的定义和有限群的几个性质

1.1.1 群的定义

凡是满足下面几个条件的元素集合或操作集合均称为群, 常以 G 表示. 如果用 $A_1, A_2, \dots$ 表示群 G 中所包含的元素或操作, 即 $A_i \in G, i = 1, 2, \dots$, 或集合 $\{A_i\}$ 必须满足下述条件:

(1) 群中任何一对操作或元素 A_i 与 A_j 的乘积 A_k 是唯一的和单值的, A_k 仍是集合中的一个操作或元素,

$$A_i A_j = A_k, \quad i = j \text{ 或 } i \neq j. \quad (1.1-1)$$

(2) 群中的元素集合一定要包含不变元素 (或操作), 常以 E 表示, $E \in G$, E 具有下列特性:

$$E A_i = A_i E = A_i, \quad (1.1-2)$$

其中 $A_i \in G$ 是群 G 中的任何一个元素.

(3) 任意三个元素 (或操作) 的乘积满足组合定则

$$(A_i A_j) A_k = A_i (A_j A_k). \quad (1.1-3)$$

(4) 如果群中包含元素 A_i , 也一定包含 A_i 的逆元素 A_i^{-1} ,

$$A_i A_i^{-1} = A_i^{-1} A_i = E. \quad (1.1-4)$$

在这里应该指出, 条件 (1) 所得的乘积 A_k 与 A_i 及 A_j 的次序有关, $A_i A_j = A_k$ 意味着 A_j, A_i 依次作用的结果与 A_k 的作用相同, 如果 $A_i A_j = A_j A_i$, 则元素 A_i 与 A_j 是对易的. 在一般情况下, 群中的任何两个元素 A_i 与 A_j 不一定对易.

在本书中以 G 代表群, 属于群 G 的元素 (或操作) $A_i (i = 1, 2, \dots)$ 用 $A_i \in G$ 来标志.

如果群 G 的元素 (或操作) 的个数是有限的, 这个群称为有限群. 在本书中我们主要讨论有限群.

1.1.2 有限群的基本性质

(1) 群阶 有限群中各不相同元素的数目称为群阶, 用 g 表示.

(2) 乘积表 常用乘积表来记述群中所有元素 (或操作) 之间的乘积, 表 1.1-1 给出一个六阶群的乘积表.

表 1.1-1 六阶群的乘积表

	E	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5
E	E	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5
A_1	A_1	E	A_4	A_5	A_2	A_3
A_2	A_2	A_5	E	A_4	A_3	A_1
A_3	A_3	A_4	A_5	E	A_1	A_2
A_4	A_4	A_3	A_1	A_2	A_5	E
A_5	A_5	A_2	A_3	A_1	E	A_4

可以看出, 表中的每一行及每一列中, 各元素只出现一次. 这是一个很明显的定理, 可以很容易得到证明, 因为如果某个元素在表中出现两次,

$$A_i A_j = A_k$$

和

$$A_i A_l = A_k, \quad A_l \neq A_j,$$

则

$$A_i^{-1} A_i A_j = E A_j = A_j = A_i^{-1} A_k, \quad (1.1-5)$$

$$A_i^{-1} A_i A_l = E A_l = A_l = A_i^{-1} A_k. \quad (1.1-6)$$

由于 A_i^{-1} 也是群 G 中的元素, 以上两式表明两个元素的乘积不是单值的, 显然与群的定义 (1) 相违背.

(3) 元素的阶 如果 $A_i \in G$, 则满足 $A_i^\alpha = E$ 的最小正整数 α 称为元素 A_i 的阶. 在表 1.1-1 所示的六阶群中, 由于

$$A_1^2 = A_2^2 = A_3^2 = E,$$

所以 A_1, A_2, A_3 都是二阶的元素;

$$A_4^3 = A_5^3 = E,$$

A_4, A_5 都是三阶的元素.

(4)共轭元素 如果 A_i, A_j, X 都是群 G 的元素, 则 $A_i \in G, A_j \in G, X \in G$, 如果

$$XA_iX^{-1} = A_j, \quad (1.1-7)$$

则元素 A_i 称为 A_j 的共轭元素. 显然, 群的任一元素 A_i 是自身的共轭元素.

$$EA_iE^{-1} = A_i. \quad (1.1-8)$$

又如

$$A_i = X^{-1}A_jX. \quad (1.1-9)$$

设

$$X^{-1} = Y, \quad Y \in G, \quad X = Y^{-1},$$

则式 (1.1-9) 可写成

$$YA_jY^{-1} = A_i, \quad (1.1-10)$$

元素 A_j 也是 A_i 的共轭元素, 因此共轭关系是相互的.

如果 A_i 与 A_j 互为共轭, A_j 与 A_k 互为共轭, 则 A_i 也与 A_k 互为共轭. 这个性质可以证明如下: 因为

$$XA_iX^{-1} = A_j, \quad X \in G, \quad (1.1-11)$$

$$YA_jY^{-1} = A_k, \quad Y \in G, \quad (1.1-12)$$

$$YA_jY^{-1} = YXA_iX^{-1}Y^{-1} = YXA_i(YX)^{-1}. \quad (1.1-13)$$

令

$$YX = Z, \quad ZA_iZ^{-1} = A_k, \quad (1.1-14)$$

由 $Y \in G, X \in G$ 知 $Z \in G$, 因此 A_i 也与 A_k 互为共轭, 这个性质又称为共轭的传递性.

(5)类 群中彼此共轭的元素组成类, 仍以表 1.1-1 所示的六阶群为例, 根据乘积表, 可得到下面的结果:

$$\begin{aligned} EA_1E^{-1} &= A_1, & EA_4E^{-1} &= A_4, \\ A_1A_1A_1^{-1} &= A_1, & A_1A_4A_1^{-1} &= A_5, \\ A_2A_1A_2^{-1} &= A_3, & A_2A_4A_2^{-1} &= A_5, \\ A_3A_1A_3^{-1} &= A_2, & A_3A_4A_3^{-1} &= A_5, \\ A_4A_1A_4^{-1} &= A_2, & A_4A_4A_4^{-1} &= A_4, \\ A_5A_1A_5^{-1} &= A_3, & A_5A_4A_5^{-1} &= A_4. \end{aligned}$$

因此, 在这个六阶群中, $A_1A_2A_3$ 组成一类, A_4A_5 组成另一类, 不变元素 E 则自成一类, 可表示成

$$C_1 = E, \quad C_2 = \{A_1, A_2, A_3\}, \quad C_3 = \{A_4, A_5\}. \quad (1.1-15)$$

同类的元素有相同的阶. 因为

$$\begin{aligned} (XA_jX^{-1})^n &= XA_iX^{-1}(XA_iX^{-1}) \cdots (XA_iX^{-1}) \\ &= XA_i^nX^{-1} = XEX^{-1} = E, \end{aligned}$$

即如 $A_i^n = E$, 则 $(XA_iX^{-1})^n$ 也等于 E , 从而证明了 A_i 与其共轭元素 XA_iX^{-1} 有相同的阶.

§1.2 子群和商群

1.2.1 子群的定义

如果在群 G 的元素集合中找到某一部分元素, 则称为子集合 H , 用符号 $H \subset G$ 来表示, 而且子集合 H 的元素组成群, 则 H 称为 G 的子群. 如果子集合 H 是 G 的子群, H 的元素只要满足下面的两个条件:

(I) H 中的任何两个元素的乘积仍在 H 之中;

(II) H 中的每一个元素的逆元素仍在 H 之中.

由于 $H \in G$, G 中的元素的乘积满足组合定律, 因此 H 的元素必然满足 §1.1 所给的条件 (3), 在这里不必重复. 同时, 由于上述条件 (I)、(II) 以及逆元素的定义, 子集合也必包含不变元素 E . 如 G 是有限群, 对 G 中任何一个阶为 n 的元素 A_i , 下列关系就成立:

$$A_i^n = A_jA_i^{n-1} = E = A_j^{n-1}A_i,$$

即 A_i 的逆元素是 A_i^{n-1} , 因此子集合 H 的元素只要满足本节所述的条件 (I), 也必然满足条件 (II).

以表 1.1-1 的六阶群为例, 子集合 $\{E, A_1\}$ 、 $\{E, A_2\}$ 、 $\{E, A_3\}$ 及 $\{E, A_4, A_5\}$ 都是 G 的子群. 可以按照类的定义将子群的元素分类, 容易证明子群 $\{E, A_4, A_5\}$ 中的三个元素各成一类, 而在群 G 中 A_4, A_5 是同类的, 由此可知在群 G 中同属一类的元素, 在子群 H 中不一定再属同一类.

1.2.2 陪集的定义和有关的定理

(1) 定义 设子群 $H \subset G$, H 的元素集合是 $\{E, B_1, B_2, \cdots\}$ 如有 $N \in G$, 但不在 H 中, 则集合 $\{NE, NB_1, NB_2, \cdots\}$ 称为元素 N 所产生的子群 H 的左陪集, 而集合 $\{EN, B_1N, B_2N, \cdots\}$ 称为元素 N 所产生的子群 H 的右陪集.

(2) 有关陪集的几个定理

定理一 陪集中的元素互不相同, 也不同于子群的元素.

证 (i) 如果 $NB_i = NB_j$, 则 $B_i = B_j$ 与子群的定义不符合, 因此 $NB_i \neq NB_j$.

(ii) 如果 $NB_i = B_k$, $B_k \in H$, 则 $N = B_k B_i^{-1}$, 即 $N \in H$, 与陪集的定义不符, 因此 NB_i 不可能是 H 中的元素.

定理二 同一个子群的两个右陪集 (或左陪集) 的元素完全相同, 或完全不同.

证 设 $H \subset G$, H 的元素是 $\{E, B_1, B_2, \dots\}$. 如 $X \in G, Y \in G$, 由 X 产生的右陪集是 $\{EX, B_1X, B_2X, \dots\}$, 由 Y 产生的右陪集是 $\{EY, B_1Y, B_2Y, \dots\}$. 如果

$$B_kX = B_lY,$$

则 $B_l^{-1}B_k = YX^{-1}$, 由于 $B_l^{-1}B_k \in H$, 则 $YX^{-1} \in H$.

根据乘积表的性质 $\{EYX^{-1}, B_1YX^{-1}, B_2YX^{-1}, \dots\}$ 就是子群 H , 也就是说它的右陪集 $\{EYX^{-1}X, B_1YX^{-1}X, B_2YX^{-1}X, \dots\}$ 与子集合 $\{EX, B_1X, B_2X, \dots\}$ 完全相同, 只是元素的排列次序可能不相同. 这也就证明了如

$$B_kX = B_lY,$$

则两个右陪集的所有元素完全相同. 反之, 可以证明, 在两个陪集中如有一个元素不同, 则所有元素都是不同的.

定理三 子群 H 的阶 h 是群 G 阶 g 的因子, $l = g/h$, 整数 l 称为子群的指数.

在 G 中选元素 X , X 不在 H 中. 用 X 组成子群 H 的右陪集 $\{EX, B_1X, B_2X, \dots\}$, 我们用 HX 代表这个陪集. 在 G 中如再选一个元素 Y , Y 不在 H 也不在右陪集 HX 中, 则根据上述定理 HY 的元素集合与 H 和 HX 都完全不同, 因此可将群的元素集合写成

$$\{G\} = \{H\} + \{HX\} + \{HY\} + \{HZ\} + \dots,$$

即群的元素集合将在子群 $\{H\}$ 及其右陪集 $\{HX\}\{HY\}$ (或左陪集) $\dots$ 出现, 因此 G 的阶 g 是子群 H 的阶 h 的整数倍, $g = lh$.

例 对于表 1.1-1 所示的六阶群, 已经指出 $\{E, A_4, A_5\}$ 是一个子群, 取其右陪集 $\{EA_1, A_4A_1, A_5A_1\} = \{A_1, A_3, A_2\}$ 和左陪集 $\{A_1E, A_1A_4, A_1A_5\} = \{A_1, A_2, A_3\}$. 这里, 这两个陪集的元素集合是完全相同的.

1.2.3 内积与共轭子群

(1) 内积 如果群 G 中有两组元素集合

$$\{X, Y, \dots\}, \{X', Y', \dots\}.$$

$$\{X, Y, \dots\} \cdot \{X', Y', \dots\} = \{XX', XY', \dots, YX', YY', \dots\} \quad (1.2-1)$$

称为两个集合的内积 (又名正常乘积). 在式 (1.2-1) 右方的集合中只取不同的元素.

例一 表 1.1-1 的六阶群中 $\{A_1, A_2\}$ 和 $\{A_3, A_5\}$ 的内积为 $\{A_1, A_2\} \cdot \{A_3, A_5\} = \{A_5, A_3, A_2, A_1\}$.

(2)共轭子群 设子群 $H_1 \subset G$, $H_1 = \{E, B_1, B_2\}$. 如 $X \in G$, 取 $H_2 = XH_1X^{-1}$, 即元素集合 $\{XEX^{-1}, XB_1X^{-1}, XB_2X^{-1}\}$, 那么 H_2 也是 G 的子群, 并称之为 G 中 H_1 的共轭子群.

例二 令表 1.1-1 中的子群 $\{E, A_1\} = H_1$, 取 $X = A_4$,

$$A_4A_1A_4^{-1} = A_2, \quad A_4EA_4^{-1} = E,$$

即 $\{E, A_2\} = H_2$ 是 H_1 的共轭子群, 那么也可把 H_2 看成是 X 与 H_1X^{-1} 的内乘积,

$$H_2 = X \cdot H_1X^{-1}$$

1.2.4 不变子群 (自轭子群或正则子群)

如果对于所有在 G 中的元素 X , 元素集合 $X \cdot HX^{-1}$ 与 H 相同, 则 H 称为不变子群, 又名自轭子群或正则子群. 显然, 不变子群必包含 G 的一个或几个完全的类, 可以证明表 1.2-1 所示的六阶群的子群 $\{E, A_4, A_5\}$ 即不变子群, 下面证明几个与不变子群有关的重要定理.

定理一 不变子群的左陪集与右陪集相等.

证 这个定理也可看做是不变子群的定义. 如果 $H \cdot X = X \cdot H$, 则 $H = X \cdot HX^{-1}$, 这就是不变子群的定义. 反之, 由于 $H = X \cdot HX^{-1}$, 如

$$H = \{E, B_1, B_2, \dots, B_l\},$$

$$XH = \{XE, XB_1, XB_2, \dots, XB_l\},$$

$$XHX^{-1} = \{XEX^{-1}, XB_1X^{-1}, \dots, XB_lX^{-1}\}$$

$$= \{E, B_1, B_2, \dots, B_l\},$$

因此可将右陪集的元素集合写成

$$HX = \{EX, B_1X, B_2X, \dots, B_lX\}$$

$$\begin{aligned}
&= \{XEX^{-1}X, XB_1X^{-1}X, \dots, XB_lX^{-1}X\} \\
&= \{XE, XB_1, \dots, XB_l\} = XH,
\end{aligned}$$

即证明了不变子群左陪集与右陪集有相同的元素集合.

表 1.1-1 所示的六阶群的不变子群是 $\{E, A_4, A_5\}$, 取 $X = A_1$, 左陪集 A_1H 的元素集合是 $\{A_1E, A_1A_4, A_1A_5\} = \{A_1, A_2, A_3\}$.

右陪集 HA_1 的元素集合是 $\{EA_1, A_4A_1, A_5A_1\} = \{A_1, A_3, A_2\}$, 二者完全相同. 这个定理也意味着不变子群做为一个整体与 G 中的任何一个元素对易.

定理二 不变子群的两个左陪集的内乘积也是一个左陪集.

证 根据内积的定义, $H \cdot H = H$

令

$$XH \cdot YH = XYH \cdot H = (XY)H.$$

则

$$XY = Z, \quad Z \in G,$$

$$XH \cdot YH = ZH,$$

而 ZH 是 H 的左陪集.

定理三 不变子群与其任何陪集的内乘积仍是该陪集本身.

证 $H \cdot XH = XHX^{-1}XH = XH$, 因此在不变子群与其陪集的内乘积中, H 的作用有如群 G 中不变元素的作用.

常用 H_N 表示某个群的不变子群, 以区别于其他的子群.

1.2.5 商群

如将不变子群 H_N 及其所有不同的陪集 $H_NX_1, H_NX_2, \dots$ 等都看作元素, 则这些元素也构成群, 而元素之间的乘积则相应地为陪集之间的内乘积. 这一元素集合 $H_N, H_NX_1, \dots$ 称为商群. 由于 $G = H_N + H_NX_1 + \dots + H_NX_l$, 故常以 G/H_N 表示商群.

在表 1.1-1 的六阶群的情形下, $H_N = \{E, A_4, A_5\}$ 为不变子群. 取 $X = A_1$, $H_NA_1 = \{A_1, A_3, A_2\} \equiv C_N$, H_N 和 C_N 就是商群的元素, $G = H_N + G_N$. 可将此商群的乘积列表 1.2-1.

表 1.2-1 商群乘积表

	H_N	C_N
H_N	H_N	C_N
C_N	C_N	H_N

商群具有下列性质:

- (1) 商群的不变元素即不变子群 H_N ;
- (2) 如商群中有 $H_N U$, 也必有 $H_N U^{-1}$, 上例中

$$A_1 = A_1^{-1}, H_N U = H_N U^{-1};$$

- (3) 商群的阶等于不变子群的指数;
- (4) 商群的元素包含不变子群及其所有的不同陪集.

例 如有一个 24 阶的群, 乘积表如表 1.2-2 所示, 为节省篇幅, 表中只列出元素 A_i 的下标 i 的值, 而不写出 A .

表 1.2-2

	E	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
E	E	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
1	1	6	3	4	5	2	7	E	9	10	11	8	13	14	15	12	17	18	19	16	21	22	23	20
2	2	8	12	16	9	1	20	13	5	19	21	6	E	23	17	3	15	22	10	4	11	18	14	7
3	3	9	13	17	10	6	21	14	2	16	22	7	1	20	18	4	12	23	11	5	8	19	15	E
4	4	10	14	18	11	7	22	15	3	17	23	E	6	21	19	5	13	20	8	2	9	16	12	1
5	5	11	15	19	8	E	23	12	4	18	20	1	7	22	16	2	14	21	9	3	10	17	13	6
6	6	7	4	5	2	3	E	1	10	11	8	9	14	15	12	13	18	19	16	17	22	23	20	21
7	7	E	5	2	3	4	1	6	11	8	9	10	15	12	13	14	19	16	17	18	23	20	21	22
8	8	20	16	9	1	12	13	2	19	21	6	5	23	17	3	E	22	10	4	15	18	14	7	11
9	9	21	17	10	6	13	14	3	16	22	7	2	20	18	4	1	23	11	5	12	19	15	E	8
10	10	22	18	11	7	14	15	4	17	23	E	3	21	19	5	6	20	8	2	13	16	12	1	9
11	11	23	19	8	E	15	12	5	18	20	1	4	22	16	2	7	21	9	3	14	17	13	6	10
12	12	5	E	15	19	8	11	23	1	4	18	20	2	7	22	16	3	14	21	9	6	10	17	13
13	13	2	1	12	16	9	8	20	6	5	19	21	3	E	23	17	4	15	22	10	7	11	18	14
14	14	3	6	13	17	10	9	21	7	2	16	22	4	1	20	18	5	12	23	11	E	8	19	15
15	15	4	7	14	18	11	10	22	E	3	17	23	5	6	21	19	2	13	20	8	1	9	16	12
16	16	19	23	22	21	20	18	17	12	15	14	13	8	11	10	9	E	7	6	1	5	4	3	2
17	17	16	20	23	22	21	19	18	13	12	15	14	9	8	11	10	1	E	7	6	2	5	4	3
18	18	17	21	20	23	22	16	19	14	13	12	15	10	9	8	11	6	1	E	7	3	2	5	4
19	19	18	22	21	20	23	17	16	15	14	13	12	11	10	9	8	7	6	1	E	4	3	2	5
20	20	13	9	1	12	16	2	8	21	6	5	19	17	3	E	23	10	4	15	22	14	7	11	18
21	21	14	10	6	13	17	3	9	22	7	2	16	18	4	1	20	11	5	12	23	15	E	8	19
22	22	15	11	7	14	18	4	10	23	E	3	17	19	5	6	21	8	2	13	20	12	1	9	16
23	23	12	8	E	15	19	5	11	20	1	4	18	16	2	7	22	9	3	14	21	13	6	10	17

常把这个群称为 O 群. 由该表可以证明不变子群的元素集合为

$$\begin{aligned}
 H_N &= \{E, A_6, A_{17}, A_{19}\}, \\
 H_N A_1 &= \{A_1, A_7, A_{16}, A_{18}\} = A_N, \\
 H_N A_2 &= \{A_2, A_4, A_{20}, A_{22}\} = B_N, \\
 H_N A_3 &= \{A_3, A_5, A_{23}, A_{21}\} = C_N, \\
 H_N A_8 &= \{A_8, A_{10}, A_{13}, A_{15}\} = D_N, \\
 H_N A_9 &= \{A_9, A_{11}, A_{12}, A_{14}\} = E_N.
 \end{aligned}$$

商群的乘积表可以表示为表 1.2-3.

表 1.2-3 O 群的商群乘积表

	H_N	A_N	B_N	C_N	D_N	E_N
H_N	H_N	A_N	B_N	C_N	D_N	E_N
A_N	A_N	H_N	C_N	B_N	E_N	D_N
B_N	B_N	D_N	E_N	A_N	C_N	H_N
C_N	C_N	E_N	D_N	H_N	B_N	A_N
D_N	D_N	B_N	A_N	E_N	H_N	C_N
E_N	E_N	C_N	H_N	D_N	A_N	B_N

可以看出, 这个乘积表具有和一般的群相同的性质, 实际上也是一个六阶群的乘积表.

§1.3 同构群与同态群, 核

1.3.1 同构群

如有 G 和 G' 两个群, 二者的元素集合分别为

$$G = \{E, A_1, A_2, \dots, A_h\},$$

$$G' = \{E, A'_1, A'_2, \dots, A'_h\},$$

二者的阶相同, 而且在乘积表中元素之间保持一一对应的关系, 例如在 G 中有 $A_i A_j = A_k$, 则在 G' 中有 $A'_i A'_j = A'_k$. 具有以上性质的两个群是同构群.

1.3.2 同态群

如果群 G 的阶 g 不等于群 G' 的阶 g' , 设 $g < g'$, 且群 G 中的某个元素和 G' 的几个元素相对应, 则称 G 和 G' 为同态群. 例如表 1.1-1 的六阶群同态于表 1.2-2 所示的 O 群, 元素之间的对应关系如下:

$$E \leftrightarrow H_N = \{E, A_6, A_{17}, A_{19}\};$$

$$A_1 \leftrightarrow A_N = \{A_1, A_7, A_{16}, A_{18}\};$$

$$A_2 \leftrightarrow C_N = \{A_3, A_5, A_{23}, A_{21}\};$$

$$A_3 \leftrightarrow D_N = \{A_8, A_{10}, A_{13}, A_{15}\};$$

$$A_4 \leftrightarrow B_N = \{A_2, A_4, A_{20}, A_{22}\};$$

$$A_5 \leftrightarrow E_N = \{A_9, A_{11}, A_{12}, A_{14}\}.$$

1.3.3 核

群 G' 中与 G 的不变元素对应的元素集合是 G' 的不变子群, 又称为 G' 同态于 G 的核, 常用 K 表示. 商群 G'/K 与 G 同构, 上例中 H_N 即核 K .

§1.4 群的矩阵表示与有关的定理

在本书中我们将用到简单的矩阵理论, 所用的符号及简单的运算法则见本书的附录一.

1.4.1 群 G 的矩阵表示的定义

如果有一些 n 维的方矩阵 $D_1, D_2, \dots, D_g$, 其中包括单位矩阵 $D_1, D_1 = I$, 则 $(D_1)_{ij} = I_{ij} = \delta_{ij}$. 每个矩阵的行列式 $|D_k| \neq 0$, 矩阵之间彼此的乘积关系与群 G 的元素 $E, A_2, A_3, \dots$ 一一对应, 这样的一组矩阵称为矩阵群, 这个矩阵群与群 G 同构. 群 G 中的不变元素和矩阵群中的单位矩阵相对应, 与逆元素相对应的矩阵就是与该元素相对应的矩阵的逆矩阵. 既然这个矩阵群与群 G 同构, 就可以代表群 G 的性质, 该矩阵群就是群 G 的矩阵表示, 或简称为群 G 的表示.

1.4.2 么正矩阵群

如果 $\tilde{D}^* \equiv D^+, D^+ = D^{-1}$, 则根据矩阵的性质 (见附录一), 这样的矩阵称为么正矩阵. 如果矩阵群中的每个矩阵都是么正矩阵, 则它们组成的群称为么正矩阵群.

1.4.3 可约表示, 完全可约表示和不可约表示

令 $D(A_i)$ 代表与群 G 中元素 A_i 相对应的矩阵, 如 $D(A_i)$ 具有形式

$$D(A_i) = \begin{pmatrix} D_1(A_i) & D_{12}(A_i) \\ 0 & D_2(A_i) \end{pmatrix}, \quad (1.4-1)$$

$D_1(A_i)$ 是 m 维方矩阵, $D_2(A_i)$ 是 $n - m$ 维的方矩阵, 则

$$\begin{aligned} & D(A_1)D(A_2) \\ &= \begin{pmatrix} D_1(A_1) & D_{12}(A_1) \\ 0 & D_2(A_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_1(A_2) & D_{12}(A_2) \\ 0 & D_2(A_2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} D_1(A_1)D_1(A_2) & D_1(A_1)D_{12}(A_2) + D_{12}(A_1)D_2(A_2) \\ 0 & D_2(A_1)D_2(A_2) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.4-2)$$

如果

$$\left. \begin{aligned} D(A_1)D(A_2) &= D(A_3), \\ D_1(A_1)D_1(A_2) &= D_1(A_3), \\ D_2(A_1)D_2(A_2) &= D_2(A_3), \\ D_1(A_1)D_{12}(A_2) + D_{12}(A_1)D_2(A_2) &= D_{12}(A_3), \end{aligned} \right\} \quad (1.4-3)$$

则可将式 (1.4-2) 写成

$$D(A_3) = \begin{pmatrix} D_1(A_3) & D_{12}(A_3) \\ 0 & D_2(A_3) \end{pmatrix}. \quad (1.4-4)$$

从上式和式 (1.4-3) 可以看出, $D_1(A_1), D_1(A_2), \dots$ 可组成群 G 的 m 维表示, $D_2(A_1), D_2(A_2), \dots$ 组成群 G 的 $n - m$ 维表示. $D_1(A_i), D_2(A_i)$ 的维数小于 $D(A_i)$ 的维数. 具有形式 (1.4-1) 的矩阵群称为可约的矩阵群, 如 $D_{12}(A_i) = 0$, $i = 1, 2, \dots, g$, 则该矩阵群称为完全可约的. 如果不能找到使所有矩阵 $D(A_i)$ 同时变成式 (1.4-1) 的相似变换, 则 $D(A_i)$ 称为不可约的.

下面介绍有关可约的么正矩阵群的一个性质. 即可约的么正矩阵群必是完全可约的矩阵群.

因为如果么正矩阵群 $D(A_i)$ 是可约的, 则可将 $D(A_i)$ 写成

$$D(A_i) = \begin{pmatrix} D_1(A_i) & D_{12}(A_i) \\ 0 & D_2(A_i) \end{pmatrix}. \quad (1.4-5)$$

根据么正矩阵的性质,

$$\begin{aligned} D^+(A_i) &= D^{-1}(A_i) = D(A_i^{-1}) \\ &= \begin{pmatrix} D_1^+(A_i) & 0 \\ D_{12}^+(A_i) & D_2^+(A_i) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.4-6)$$

由于么正矩阵群是可约的, 式 (1.4-6) 应具有和式 (1.4-5) 相同的形式. 因此, $D_{12}^+(A_i) = 0$, $D_{12}(A_i) = 0$, 这意味着该么正矩阵群是完全可约的.

1.4.4 等价的群表示

如 $D(A_i)$ 及 $D'(A_i)$ 是群 G 的表示, 由 $D(A_i)$ 经相似变换后可得到 $D'(A_i)$, 即

$$D'(A_i) = X^{-1}D(A_i)X, \quad (1.4-7)$$

X 为与 $D(A_i)$ 同维的方阵, 则 $D'(A_i)$ 与 $D(A_i)$ 是等价的表示,

$$\begin{aligned} D'(A_1)D'(A_2) &= X^{-1}D(A_1)XX^{-1}D(A_2)X \\ &= X^{-1}D(A_1)D(A_2)X. \end{aligned}$$

定理 如群的矩阵表示的行列式不等于零, 则有一个么正矩阵群和这个矩阵表示等价.

证 如群 G 的阶是 g , 则矩阵表示是 $D(A_1), D(A_2), \dots, D(A_g)$, 在下面的证明中, 即要寻找能使 $D(A_i)$ 变成么正矩阵的相似变换. 为此, 令

$$H = \sum_{k=1}^g D(A_k) D^+(A_k), \quad (1.4-8)$$

$$H^+ = \sum_{k=1}^g [D(A_k) D^+(A_k)]^+ = H.$$

因此, H 是厄密矩阵, 可以通过么正变换使 H 对角化. 设 U 是所用的么正矩阵, 即

$$d = U^{-1} H U$$

为对角矩阵, 用式 (1.4-8) 代入得

$$d = \sum_{k=1}^g U^{-1} D(A_k) D^+(A_k) U$$

$$= \sum_{k=1}^g [U^{-1} D(A_k) U] [U^{-1} D^+(A_k) U]. \quad (1.4-9)$$

令

$$D'(A_k) = U^{-1} D(A_k) U, \quad (1.4-10)$$

则可将式 (1.4-9) 写成

$$d = U^{-1} H U = \sum_{k=1}^g D'(A_k) D'^+(A_k), \quad (1.4-11)$$

$$d_{mm} = \sum_j \sum_{k=1}^g D'(A_k)_{mj} D'^+(A_k)_{jm}$$

$$= \sum_k \sum_j |D'(A_k)_{mj}|^2, \quad (1.4-12)$$

上式中应用了 $D'_{jm}{}^+ = D'^*_{mj}$. 如果 $d_{mm} = 0$, 则对于任何 j 必须 $D'(A_k)_{mj} = 0$, 即 $D'(A_k)$ 的一列都为零, 行列式 $|D'(A_k)| = 0$. 由于行列式的值不因么正变换而改变, 故 $|D(A_k)| = 0$, 这显然与假设不符, 因此按照式 (1.4-12) 对角矩阵 d 的每一个对角元都是大于零的实数, 由 d 可求出 $d^{\frac{1}{2}}$ 及 $d^{-\frac{1}{2}}$. 下面将证明用 $d^{\frac{1}{2}}$ 作变换矩阵, 可使 $D'(A_k)$ 变成么正矩阵. $(d^{\frac{1}{2}})^+ = d^{\frac{1}{2}}, (d^{-\frac{1}{2}})^+ = d^{-\frac{1}{2}}$. 令

$$D''(A_k) = d^{-\frac{1}{2}} D'(A_k) d^{\frac{1}{2}} = d^{-\frac{1}{2}} U^{-1} D(A_k) U d^{\frac{1}{2}}. \quad (1.4-13)$$

由式 (1.4-11) 知

$$d^{-\frac{1}{2}} \sum_k D'(A_k) D'^+(A_k) d^{-\frac{1}{2}}$$

是单位矩阵 I , 故由式 (1.4-13) 可得

$$\begin{aligned} D''(A_\lambda) D''(A_\lambda)^+ &= D''(A_\lambda) I D''(A_\lambda)^+ \\ &= [d^{-\frac{1}{2}} U^{-1} D(A_\lambda) U d^{\frac{1}{2}}] \\ &\quad \cdot \left[d^{-\frac{1}{2}} \sum_k D'(A_k) D'^+(A_k) d^{-\frac{1}{2}} \right] \left[d^{\frac{1}{2}} D'^+(A_\lambda) d^{-\frac{1}{2}} \right] \\ &= d^{-\frac{1}{2}} \sum_k D'(A_\lambda) D'(A_k) D'^+(A_k) D'^+(A_\lambda) d^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (1.4-14)$$

由于 $D'(A_k)$ 具有群的性质, $D'(A_\lambda) D'(A_k) = D'(A_j)$, A_j 为群中的另一元素. 可将式 (1.4-14) 写成

$$D''(A_\lambda) D''(A_\lambda)^+ = d^{-\frac{1}{2}} \sum_j D'(A_j) D'^+(A_j) d^{-\frac{1}{2}} = I. \quad (1.4-15)$$

因此 $D''^+(A_j) = D''^{-1}(A_j)$, 即 $D''(A_j)$ 是么正矩阵, 从上面的讨论我们证明了

$$D''(A_k) = (U d^{\frac{1}{2}})^{-1} D(A_k) U d^{\frac{1}{2}} = S^{-1} D(A_k) S, \quad (1.4-16)$$

式中

$$S = U d^{\frac{1}{2}}.$$

即通过相似变换式 (1.4-16) 可使 $D(A_k)$ 变成么正矩阵 $D''(A_k)$. 也就是说, 总有一个么正矩阵群和一个行列式不等于零的矩阵群等价. 由于可做为群表示的矩阵, 其行列式都不等于零. 故在今后的讨论中, 将设所有的矩阵群都是么正矩阵群.

§1.5 有关不可约表示的几个定理

定理一 如群 G 的不可约表示是 $D(A_1), D(A_2), D(A_3), \dots, D(A_g)$, 而且矩阵 M 与每一个矩阵 $D(A_k)$ 对易, 则 M 必须是常数矩阵.

证 由于

$$M D(A_k) = D(A_k) M,$$

$$\begin{aligned}
[MD(A_k)]^+ &= [D(A_k)M]^+, \\
D^+(A_k)M^+ &= M^+D^+(A_k),
\end{aligned}
\tag{1.5-1}$$

上式两边的左方和右方都乘以 $D(A_k)$,

$$D(A_k)D^+(A_k)M^+D(A_k) = D(A_k)M^+D^+(A_k)D(A_k). \tag{1.5-2}$$

由于 $D(A_k)$ 是幺正矩阵,

$$D(A_k)D^+(A_k) = I = D^+(A_k)D(A_k). \tag{1.5-3}$$

可将 (1.5-2) 式写成

$$M^+D(A_k) = D(A_k)M^+, \tag{1.5-4}$$

即 M^+ 也与 $D(A_k)$ 对易. 于是, $M + M^+$ 和 $i(M - M^+)$ 也必与 $D(A_k)$ 对易. 由于 $M + M^+$ 和 $i(M - M^+)$ 都是厄密矩阵, 因此下面我们只需证明与任何不可约幺正矩阵对易的厄密矩阵是常数矩阵.

设 M 是厄密矩阵, 则可通过某幺正变换使 M 变成对角矩阵 d ,

$$d = V^{-1}MV. \tag{1.5-5}$$

令

$$D'(A_k) = V^{-1}D(A_k)V, \tag{1.5-6}$$

由于

$$\begin{aligned}
D(A_k)M &= MD(A_k), \\
V^{-1}D(A_k)VV^{-1}MV &= V^{-1}M V V^{-1}D(A_k)V.
\end{aligned}$$

由式 (1.5-5) 和 (1.5-6) 得

$$D'(A_k)d = dD'(A_k), \quad k = 1, 2, \dots, g. \tag{1.5-7}$$

下面我们将先证明 d 是常数矩阵. 由式 (1.5-7) 有,

$$\begin{aligned}
D'(A_k)_{mj}d_{jj} &= d_{mm}D'(A_k)_{mj}, \\
D'(A_k)_{mj}(d_{jj} - d_{mm}) &= 0.
\end{aligned}
\tag{1.5-8}$$

由式 (1.5-8) 对任何 m 与 j 可得 $D'(A_k)_{mj} = 0$,

$$\text{或 } d_{jj} - d_{mm} = 0 \text{ 即 } d_{jj} = d_{mm}.$$

如果 $d_{jj} \neq d_{mm}$ 则对所有 k , $D'(A_k)_{mj} = 0$, $m \neq j$; 则 $D'(A_k)$ 是可约的, 与假设不符合. 因此如果要式 (1.5-8) 成立, 必须 $D'(A_k)_{mj} \neq 0$ $d_{jj} = d_{mm}$. 即 d 是一个常数矩阵, 由式 (1.5-5) 知 M 也必然是一个常数矩阵. 上面证明了 $D(A_k)$ 只能同常数矩阵对易. 反之, 如有一非常数矩阵与群的某一个表示的所有矩阵 $D(A_k)$ 对易, 则该表示必是可约的. 设 M 不是常数矩阵, 而具有形式

$$M = \begin{pmatrix} aI & \\ & a'I' \end{pmatrix},$$

其中 $a \neq a'$, I 与 I' 均为单位矩阵, 但维数不一定相等, 则很容易验证与 M 对易的 $D(A_k)$ 必具有下述形式:

$$D(A_k) = \begin{pmatrix} D_1(A_k) & \\ & D_2(A_k) \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, \dots, g,$$

即 $D(A_k)$ 是可约的.

舒尔 (Schur) 引理 如果 G 有两个不可约表示 $D^i(A_1), D^i(A_2), \dots, D^i(A_g)$ 和 $D^j(A_1), D^j(A_2), \dots, D^j(A_g)$, 维数各为 d_i 和 d_j , 则存在一个 d_j 行与 d_i 列的矩阵 M ,

$$MD^i(A_k) = D^j(A_k)M \quad (k = 1, 2, \dots, g). \quad (1.5-9)$$

(i) 如 $d_i \neq d_j$, 则 M 的矩阵元都是零.

(ii) 如 $d_i = d_j$, M 的矩阵元可能都是零, 也可能是一个行列式不等于零的矩阵, 在这种情况下, M 具有逆矩阵, 而 $D^i(A_k)$ 与 $D^j(A_k)$ 是等价的,

$$M^{-1}D^j(A_k)M = D^i(A_k). \quad (1.5-10)$$

证 前已说明任何行列式不等于零的矩阵群, 都可以通过相似变换变成么正矩阵群. 因此, 为方便起见, 设 $D^i(A_k), D^j(A_k)$ 都是么正矩阵, 且设 $d_i \leq d_j$.

$$[D^i(A_k)]^+ = [D^i(A_k)]^{-1} = D^i(A_k^{-1}),$$

$$[D^j(A_k)]^+ = D^j(A_k^{-1}).$$

由式 (1.5-9) 有

$$\begin{aligned} [MD^i(A_k)]^+ &= D^i(A_k^{-1})M^+ = M^+D^j(A_k^{-1}), \\ MD^i(A_k^{-1})M^+ &= MM^+D^j(A_k^{-1}). \end{aligned} \quad (1.5-11)$$

根据式 (1.5-9),

$$MD^i(A_k^{-1}) = D^j(A_k^{-1})M,$$

代入式 (1.5-11) 后得到

$$D^j(A_k^{-1})MM^+ = MM^+D^j(A_k^{-1}). \quad (1.5-12)$$

由于 M 为 $d_j \times d_i$ 矩阵, 所以 MM^+ 乃为 $-d_j$ 维的方阵.

上式说明厄密矩阵 MM^+ 与不可约表示 $D^j(A_k^{-1})$ 对易, 根据本节的定理一, MM^+ 必须是一个常数矩阵,

$$MM^+ = CI. \quad (1.5-13)$$

下面将分两种情况来证明.

(i) $d_i = d_j = d$

如 $C = 0$, 则由式 (1.4-12) 可知 M 的元素全为 0. 否则, 如式 (1.5-13) 中的 $C \neq 0$, $|CI| = C^d$, 即 $|M| \neq 0$, 矩阵 M 有逆矩阵. 由式 (1.5-11) 有

$$MD^i(A_k^{-1})M^+ = CID^j(A_k^{-1}).$$

如取 $C = 1$, 则 $MM^+ = I$, $M^+ = M^{-1}$, 于是有

$$MD^i(A_k^{-1})M^{-1} = D^j(A_k^{-1}).$$

这就证明了 $D^i(A_k^{-1})$ 与 $D^j(A_k^{-1})$ 是等价的不可约表示.

(ii) 如 $d_i \neq d_j$ 且设 $d_i < d_j$, 则可将 M 的列由 d_i 增加到 d_j , 构成一个如下 d_j 维的方阵 N :

$$N = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \cdots M_{1d_i} & 0 & 0 \cdots 0 \\ M_{21} & M_{22} \cdots & & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \cdots \\ M_{d_j 1} & M_{d_j 2} \cdots M_{d_j d_i} & 0 & 0 \cdots 0 \end{pmatrix}. \quad (1.5-14)$$

显然 $MM^+ = NN^+$.

由于 $|N| = 0$, $|NN^+| = 0$, 因此 $|MM^+| = 0$. 前面已讲过, 在此情形 M 的每个矩阵元都是零.

以上证明了舒尔引理.

系 如 $D^i(A_1), D^i(A_2), \dots, D^i(A_g)$ 及 $D^j(A_1), D^j(A_2), \dots, D^j(A_g)$ 是群 G 的两个等价的幺正表示, 即 $MD^i(A_k)M^{-1} = D^j(A_k) (k = 1, 2, \dots, g)$, M 是一个非奇异的矩阵, $|M| \neq 0$, 求证可以找到一个幺正矩阵 U , 使 $UD^i(A_k)U^{-1} = D^j(A_k)$.

证 由假设有

$$MD^i(A_k) = D^j(A_k)M \quad (k = 1, 2, \dots, g)$$

由式 (1.5-12) 有

$$D^j(A_k)MM^+ = MM^+D^j(A_k),$$

即

$$D^j(A_k) = (MM^+)^{-1}D^j(A_k)MM^+. \quad (1.5-15)$$

上式表明, 用矩阵 (MM^+) 所做的相似变换, 可使 $D^j(A_k)$ 不变. 由于 (MM^+) 是厄密矩阵, 可通过么正变换使 MM^+ 对角化, 即

$$V^{-1}MM^+V = d. \quad (1.5-16)$$

由于 (MM^+) 的对角元是正实数, d 的对角元都是实数. 由上式得

$$MM^+ = VdV^{-1}, \quad (1.5-17)$$

$$D^j(A_k)MM^+ = D^j(A_k)VdV^{-1},$$

$$MM^+D^j(A_k) = VdV^{-1}D^j(A_k).$$

由于以上二式的左方相等, 右方也必定相等, 即

$$D^j(A_k)VdV^{-1} = VdV^{-1}D^j(A_k).$$

上式两边从左方乘以 V^{-1} , 右方乘以 V 得

$$V^{-1}D^j(A_k)Vd = dV^{-1}D^j(A_k)V, \quad (1.5-18)$$

即 d 与 $V^{-1}D^j(A_k)V$ 对易. 取式 (1.5-18) 两方的第 i 行 k 列矩阵元,

$$\sum_l [V^{-1}D^j(A_k)V]_{il}d_{lk}\delta_{lk} = \sum_m d_{im}\delta_{im}[V^{-1}D^j(A_k)V]_{mk},$$

$$[V^{-1}D^j(A_k)V]_{ik}d_{kk} = d_{ii}[V^{-1}D^j(A_k)V]_{ik}.$$

只有当 $d_{ii} = d_{kk}$ 时

$$[V^{-1}D^j(A_k)V]_{ik} \neq 0.$$

由于 $D^j(A_k)$ 是不可约的, $d_{ii} = d_{kk}$, 即 d 是常数矩阵. d 既然与 $V^{-1}D^j(A_k)V$ 对易, $d^{-\frac{1}{2}}$ 也必与 $V^{-1}D^j(A_k)V$ 对易,

$$d^{-\frac{1}{2}}V^{-1}D^j(A_k)V = V^{-1}D^j(A_k)Vd^{-\frac{1}{2}}.$$

双方从左方乘以 V , 右方乘以 V^{-1} , 得

$$Vd^{-\frac{1}{2}}V^{-1}D^j(A_k) = D^j(A_k)Vd^{-\frac{1}{2}}V^{-1}. \quad (1.5-19)$$

令 $K = Vd^{-\frac{1}{2}}V^{-1}$, 可将上式写成

$$D^j(A_k)K = KD^j(A_k), \quad (1.5-20)$$

说明 K 与 $D^j(A_k)$ 对易.

令

$$U = KM, \quad (1.5-21)$$

$$\begin{aligned} UU^+ &= KM(KM)^+ = KMM^+K^+ \\ &= Vd^{-\frac{1}{2}}V^{-1}MM^+(V^{-1})^+(d^{-\frac{1}{2}})^+V^+. \end{aligned} \quad (1.5-22)$$

由于 V 是幺正矩阵, 且 $d^{-\frac{1}{2}}$ 是实数对角矩阵, 即 $d^{-\frac{1}{2}}$ 是厄密矩阵,

$$(d^{-\frac{1}{2}})^+ = d^{-\frac{1}{2}}, \quad (V^{-1})^+ = (V^+)^+ = V, \quad V^+ = V^{-1}.$$

利用式 (1.5-16), 可将式 (1.5-22) 写式

$$UU^+ = Vd^{-\frac{1}{2}}dd^{-\frac{1}{2}}V^+ = VV^{-1} = I.$$

因此 U 是幺正矩阵, 由式 (1.5-20) 及假设 $MD^i(A_k) = D^j(A_k)M$ 有

$$\begin{aligned} KD^j(A_k)K^{-1} &= KMD^i(A_k)M^{-1}K^{-1} = UD^i(A_k)U^{-1}, \\ UD^i(A_k)U^{-1} &= D^j(A_k). \end{aligned} \quad (1.5-23)$$

U 就是要求的幺正矩阵, 通过幺正变换 (1.5-23) 可使 $D^i(A_k)$ 变换成 $D^j(A_k)$.

定理二 如 $D^i(A_1), \dots, D^i(A_g), D^j(A_1), \dots, D^j(A_g)$ 是群 G 的两个不等价的不可约的表示, 则

$$\sum_R D^{i*}(R)_{\mu\nu} D^j(R)_{\mu'\nu'} = \frac{g}{d_i} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \delta_{ij}, \quad (1.5-24)$$

式中 $\sum_R$ 代表对所有的群元求和, g 是群阶, d_i 是不可约表示的维数.

证 如有一个 d_j 行 d_i 列的矩阵 X , 则可建立矩阵 M , M 可表示为

$$\begin{aligned} M &= \sum_R D^j(R) X D^i(R^{-1}), \\ MD^i(A_k) &= \sum_R D^j(R) X D^i(R^{-1}) D^i(A_k) \\ &= \sum_R D^j(A_k) D^j(A_k^{-1}) D^j(R) X D^i(R^{-1}) D^i(A_k). \end{aligned} \quad (1.5-25)$$

由于

$$\begin{aligned} D^i(R^{-1}) D^i(A_k) &= D^i(R^{-1} A_k) = D^i(S^{-1}), \quad S = A_k^{-1} R, \\ D^j(A_k^{-1}) D^j(R) &= D^j(A_k^{-1} R) = D^j(S), \end{aligned}$$

可将式 (1.5-25) 改写成

$$MD^i(A_k) = \sum_S D^j(A_k) D^j(S) X D^i(S^{-1}) = D^j(A_k) M,$$

式中用 $\sum_S$ 代替了 $\sum_R$. 根据舒尔引理, 由于 D^i 与 D^j 不等价, M 的矩阵元是零,

$$M_{\alpha\mu} = \sum_k \sum_\lambda \sum_R D^j(R)_{\alpha k} X_{k\lambda} D^i(R^{-1})_{\lambda\mu} = 0.$$

选择 X , 使 $X_{\beta\nu}=1$, 其他矩阵元是零, $k=\beta$, $\lambda=\nu$ 则得到

$$\sum_R D^j(R)_{\alpha\beta} D^i(R^{-1})_{\nu\mu} = 0. \quad (1.5-26)$$

由于 D^i 和 D^j 都是幺正矩阵, 有

$$\begin{aligned} D^i(R^{-1}) &= [D^i(R)]^{-1} = D^i(R)^+, \\ D^i(R^{-1})_{\nu\mu} &= D^i(R)_{\mu\nu}^*. \end{aligned}$$

因此, 可将式 (1.5-26) 写成

$$\sum_R D^{i*}(R)_{\mu\nu} D^j(R)_{\alpha\beta} = 0,$$