

4.4 分子的偶极矩和极化率

◆ 偶极矩：电偶极矩，是矢量。

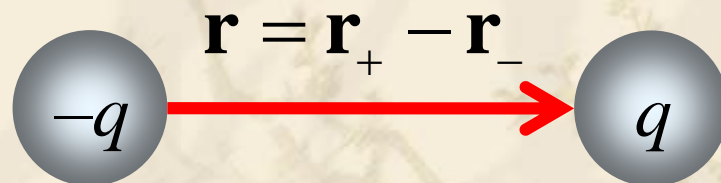
偶极矩的普遍定义：

$$\boldsymbol{\mu} = \sum_i q_i \mathbf{r}_i$$

\mathbf{r}_i : 电荷 q_i 的位置向量

若只有正负两个电荷，且 $q_- = -q_+$ ，记 q_+ 为 q ，代入偶极矩的普遍定义，得偶极矩的狭义定义：

$$\boldsymbol{\mu} = q(\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-) = q\mathbf{r}$$



偶极矩方向：从负电荷指向正电荷。书写错了！

4.4.1 分子的偶极矩和分子的结构

分子含有多个电荷，其偶极矩必须由**偶极矩的普遍定义**导出！

原子核带正电，电子带负电，原子核和电子时刻在运动，分子的瞬时偶极矩为：

$$\mu_{\text{瞬时}} = \sum_k q_{\text{核},k} \mathbf{r}_{\text{核},k} + \sum_i (-e) \mathbf{r}_{\text{电子},i} \quad \text{电子电荷: } -e$$

原子核和电子的运动必须用量子力学描写，从量子观点看，上式各项应看作算符，分子的偶极矩应是偶极矩算符的平均值（用波函数计算）：

$$\mu = \langle \hat{\mu} \rangle = \sum_k q_{\text{核},k} \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{核},k} \rangle + \sum_i (-e) \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{电子},i} \rangle$$

定义正、负电荷中心 $\mathbf{r}_+, \mathbf{r}_-$ ，并用其表示出偶极矩：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu} = \langle \hat{\boldsymbol{\mu}} \rangle &= \underbrace{\sum_k q_{\text{核},k} \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{核},k} \rangle}_{\mathbf{r}_+ \sum_k q_{\text{核},k}} + \underbrace{\sum_i (-e) \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{电子},i} \rangle}_{-\mathbf{r}_- e \cdot \text{电子数}} \\ &= \mathbf{r}_+ \sum_k q_{\text{核},k} - \mathbf{r}_- e \cdot \text{电子数}\end{aligned}$$

分子是电中性的，记正电荷总量为 q ，则

$$q = \sum_k q_{\text{核},k} = e \cdot \text{电子数}$$

最终，分子的偶极矩表示为：

$$\boldsymbol{\mu} = q(\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-) = q\mathbf{r}$$

\mathbf{r}_{\pm} 是分子的正负电荷中心，不是单个电荷的位置。

分子偶极矩另外一种算法：

原子的内层轨道全充满且受外界影响小，则内层电子云近似是球对称的。球对称电子云的平均位置与原子核重叠，相当于抵消了原子核的部分正电荷：

$$\begin{aligned}\mu &= \langle \hat{\mu} \rangle = \sum_k q_{\text{核},k} \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{核},k} \rangle + \boxed{\sum_i (-e) \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{电子},i} \rangle} \text{从中抽出内层电子} \\ &= \sum_k (q_{\text{核},k} - n_{k\text{内层电子}} e) \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{核},k} \rangle + \sum_i (-e) \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{剩余电子}i} \rangle \\ &\quad \text{内层电子抵消部分正电荷} \\ &= \sum_k q_{\text{离子实},k} \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{核},k} \rangle - e \sum_i \langle \hat{\mathbf{r}}_{\text{剩余电子},i} \rangle \\ &= \mathbf{r}_{+, \text{离子实}} \sum_k q_{\text{离子实},k} - \mathbf{r}_{-, \text{剩余电子}} e \cdot \text{剩余电子数} \\ &= (\hat{\mathbf{r}}_{+, \text{离子实}} - \hat{\mathbf{r}}_{-, \text{剩余电子}}) \sum_k q_{\text{离子实},k}\end{aligned}$$

两种方法得到的偶极矩表达式分别为：

$$\begin{aligned}\mu &= (\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-) \sum_k q_{\text{核},k} \\ &= (\mathbf{r}_{+, \text{离子实}} - \mathbf{r}_{-, \text{剩余电子}}) \sum_k q_{\text{离子实},k}\end{aligned}$$

$$\mathbf{r}_+ \neq \mathbf{r}_{+, \text{离子实}}, \quad \mathbf{r}_- \neq \mathbf{r}_{-, \text{剩余电子}}, \quad \sum_k q_{\text{核},k} \neq \sum_k q_{\text{离子实},k}$$

正负电荷中心与电荷衡算对象的选取有关，只有指明衡算对象才有意义；偶极矩与电荷衡算对象的选取无关，是物体固有的，因此我们只讨论后者。

分子偶极矩是偶极矩算符的量子平均，是分子的固有属性：

$$\boldsymbol{\mu} = \left\langle \sum_i q_i \hat{\mathbf{r}}_i \right\rangle = \langle \hat{\boldsymbol{\mu}} \rangle$$

偶极矩的大小： $\mu = |\boldsymbol{\mu}|$ ； 国际单位： C·m

偶极矩常用单位： debye

$$1 \text{ debye} = 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{cm} = 3.335641 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

esu： 静电单位制中的电量单位

用静电单位制，一个质子的电量约 $4.8 \times 10^{-10} \text{ esu}$ ，分子大小以 10^{-8} cm 计，则偶极矩量级在 $10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{cm}$ 左右，因此引入单位 debye，使偶极矩量级在 1 左右。

静电单位制

库仑定律

$$F = k \frac{q^2}{r^2}$$

SI制中，取力的单位为N，电量单位C，长度单位m，则实验测得比例常数 $k = 8.987552 \times 10^9$ 。

如果力的单位取dyn (1N = 10⁵ dyn)，长度单位取cm，即cgs制，再强制令比例常数 $k = 1$ ，则由于比例常数已取定，电量的单位只能由前三者导出。这是cgs制往电磁现象推广的方式之一，称为静电单位制，由此导出的电量单位称为静电单位，记为esu。请与2.4节课件中的原子单位制比较。

分别用两种单位写出库仑定律，并无因次化：

$$F/\text{N} = 8.987552 \times 10^9 \frac{(q/\text{C})^2}{(r/\text{m})^2} \quad F/\text{dyn} = \frac{(q/\text{esu})^2}{(r/\text{cm})^2}$$

两式相除得：

$$\frac{F/\text{N}}{F/\text{dyn}} = 8.987552 \times 10^9 \left(\frac{q/\text{C}}{q/\text{esu}} \right)^2 \left(\frac{r/\text{cm}}{r/\text{m}} \right)^2$$

代入已知的单位换算关系：

$$\frac{F/\text{N}}{F/\text{dyn}} = 10^{-5} \quad \frac{r/\text{m}}{r/\text{cm}} = 10^{-2}$$

立得：

$$\frac{q/\text{C}}{q/\text{esu}} = 3.335641 \times 10^{-10}$$

即：

$$1 \text{ esu} = 3.335641 \times 10^{-10} \text{ C}$$

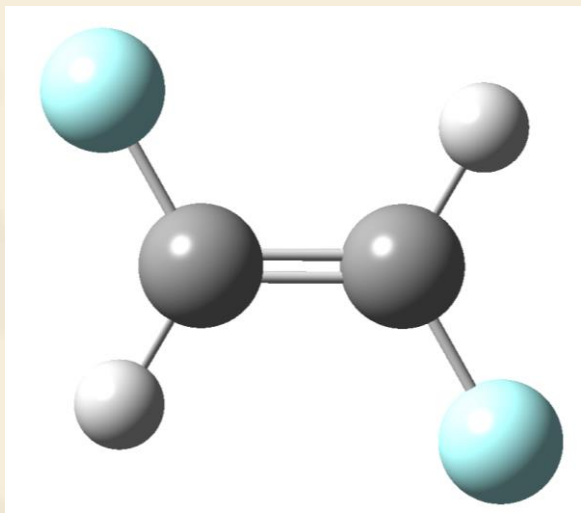
$$1 \text{ debye} = 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{cm} = 3.335641 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

分子有无偶极矩的判据:

对称元素是否有且仅有一个交点, 或者对称操作的不动点是否只有一点:

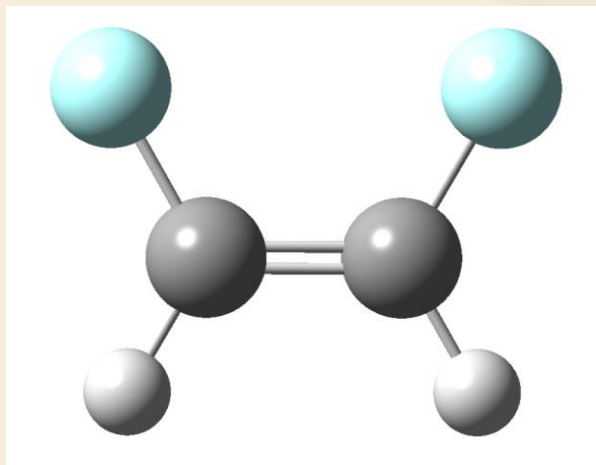
- 是: 无论如何选取电荷衡算对象, 正负电荷中心就落在此点上, $\mu = 0$ 非极性分子
- 否: 无论如何选取电荷衡算对象, 正负电荷中心不重合, $\mu \neq 0$ 极性分子

只有属于 C_n 、 C_{nv} 、 C_s 点群的分子才具有偶极矩



$$C_{2h} \quad \mu=0$$

C_2 与 σ_h 交于唯一点



$$C_{2v} \quad \mu \neq 0$$

σ_v 通过 C_2 , 交于无数多点

了解一下：极化率

4.4.2 分子的诱导偶极矩和极化率

若将分子放入电场中，原子核和电子云将偏离原平衡位置，由这种偏离产生的偶极矩就是诱导偶极矩。外场不强时，诱导偶极矩 $\mu_{\text{诱}}$ 与电场 \mathbf{E} 成线性关系：

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{诱}} = \begin{pmatrix} \mu_{x,\text{诱}} \\ \mu_{y,\text{诱}} \\ \mu_{z,\text{诱}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & \alpha_{xz} \\ \alpha_{xy} & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ \alpha_{xz} & \alpha_{yz} & \alpha_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{E}$$

其中三阶对称矩阵 $\boldsymbol{\alpha}$ 称为分子的极化率，是张量；各向同性时（原子和球对称陀螺分子），张量等价于标量。**Raman**光谱选律与分子极化率有关。

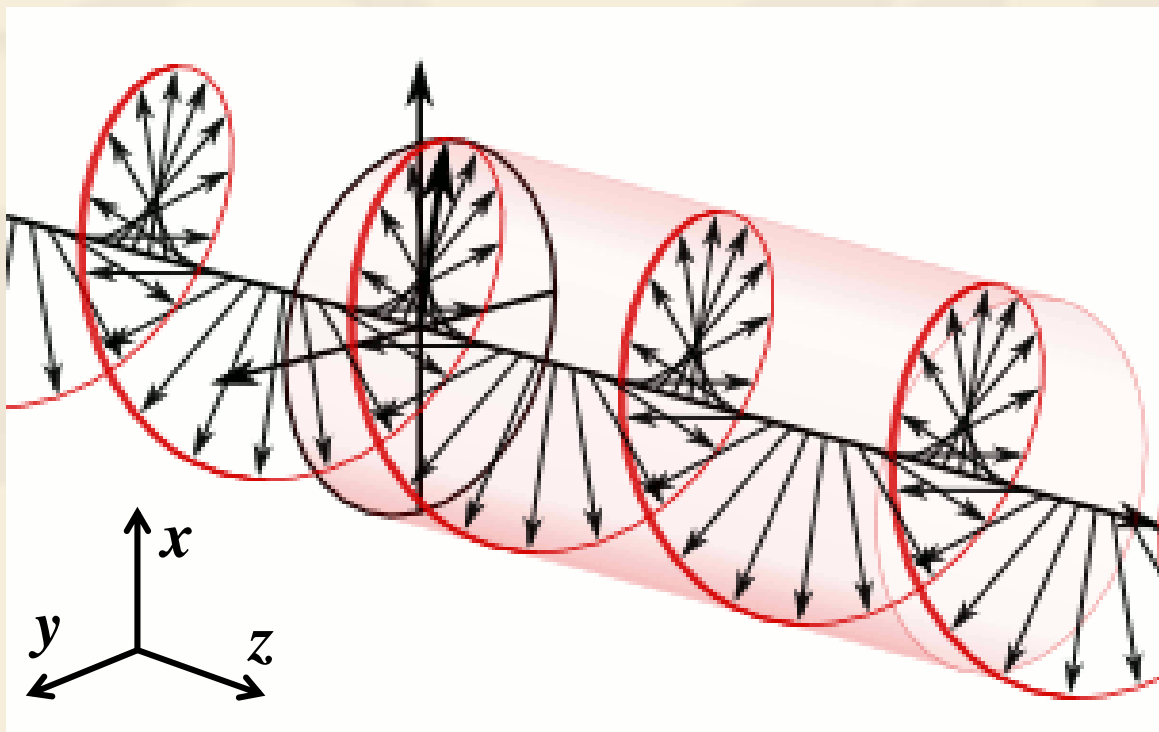
4.5 分子的手性和旋光性

横波：振动方向与波的传播方向垂直。

电磁波：以波动方式传播的电磁场，是横波。将 z 轴与传播方向重合，则电磁场只有 x 和 y 方向分量，其中电场和磁场不是互相独立的，取其一即可。

$$\begin{cases} E_x = A_x \cos[2\pi(\lambda^{-1}z - \nu t)] \\ E_y = A_y \cos[2\pi(\lambda^{-1}z - \nu t) + \delta] \end{cases} \quad \mathbf{B} = \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{E}}{c}$$

根据振幅 A_x 、 A_y 和相位差 δ 的大小， $\mathbf{E} = \mathbf{i}E_x + \mathbf{j}E_y$ 矢量的端点在 xy 平面的投影随着时间勾勒出直线、椭圆或圆，分别称为线偏振、椭圆偏振和圆偏振。自然光包含了各种偏振光。



迎着光线方向，电矢量顺时针转，称为右旋。

圆偏振光： $A_x = A_y = A$ ， $\delta = -\pi/2$

$$\begin{cases} E_x = A \cos[2\pi(\lambda^{-1}z - vt)] \\ E_y = A \cos[2\pi(\lambda^{-1}z - vt) - \pi/2] \end{cases} \longrightarrow E_x^2 + E_y^2 = A^2, \text{ 圆}$$

旋光性：将线偏振光射入透光物质，出射光的偏振方向发生了旋转。若迎着光线，偏振面顺时针偏转，则称分子是右旋的，记为D；逆时针偏转则称分子是左旋的，记为L。

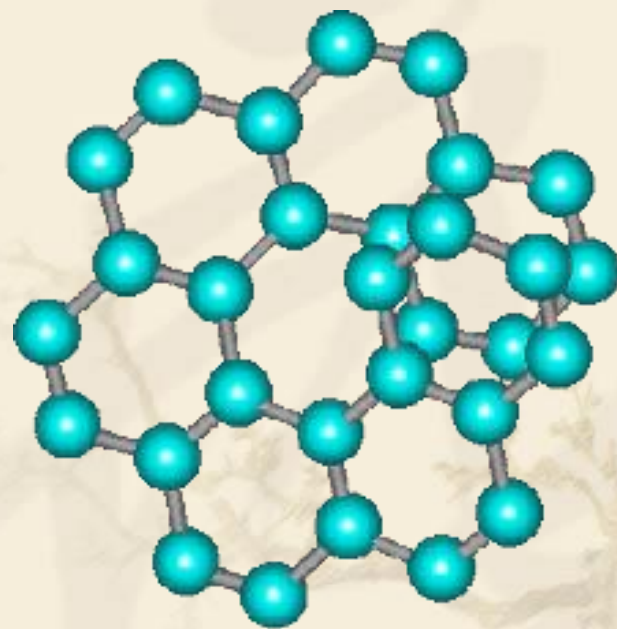
分子具有旋光性的充要条件是其自身不能和镜象重合，即手性分子，正如人的左右手，两只手互为镜象，但不能通过旋转或平移（实操作）使两只手重合。

分子有无旋光性的判据：有 σ 平面，或者有对称中心 i ，或者有 S_n 象转轴（ I_n 反轴）的分子没有旋光性；没有 σ 、 i 和 S_n （ I_n ）的分子才有旋光性。



螺旋形分子

螺旋型分子都是手性分子，
旋光方向与螺旋方向一致；匝数
越多旋光度越大；螺距小者旋光
度大；分子旋光度是螺旋旋光度
的代数和。



4.6 群的代表

群是抽象的数学概念，**群的代表**把抽象的群用“不抽象”的矩阵表示出来以方便应用，分两步进行：

1. 在群元与某些“不很抽象”的线性算符间建立对应关系：群元 \rightarrow 线性算符，要求“两个群元的乘积”也能按照这个对应关系与“相应的两个线性算符的乘积”对应，这样线性算符也构成了群，而且体现了抽象群的部分性质；
2. 线性算符的所有作用对象构成线性空间，则算符可以表示为矩阵，这些矩阵也构成群，它们经由线性算符与抽象群相对应——抽象群的矩阵表示。

了解一下：群的表示

群与群的两种对应关系：同构和同态

同构：有两个群 G 和 G' ，如果两者的元素按照某种规则存在一一对应关系，并且元素的乘积也按照这种规则一一对应，则称两个群同构，记为 $G \approx G'$ 。

$$G = \{E, A_1, A_2, \cdots, A_n, \cdots\}$$

$$G' = \{E', A'_1, A'_2, \cdots, A'_n, \cdots\}$$

$$E \leftrightarrow E', \quad A_i \leftrightarrow A'_i, \quad A_i A_j = A_k \leftrightarrow A'_k = A'_i A'_j$$

互相同构的两个群，具有相同的性质，研究清楚一个，等于知道了另外一个。

例：对称操作群与4.1节的表示矩阵构成的群同构，两者具有相同性质，可直接用矩阵代替操作。

了解一下：群的代表

同态：有两个群 H 和 G ，如果每个 G 中的元素按照某种对应规则与 H 中唯一元素对应，并且元素的乘积也保持这种对应关系，则称这种对应关系为同态关系，或 H 是 G 的同态，记为 $H \leftarrow G$ 或 $G \rightarrow H$ 。

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

$$H = \{E', B_1, B_2, \dots, B_m, \dots\}$$

$$\{A_i, A_j, \dots\} \rightarrow B_k, \quad \{A_m, A_n, \dots\} \rightarrow B_l, \dots$$

$$\{A_i A_m, A_i A_n, A_j A_m, A_j A_n, \dots\} \rightarrow B_k B_l, \dots$$

同态关系 $G \rightarrow H$ 是多对一的关系，群 H 只反映了群 G 的部分性质。

例如： C_2 群和 C_{2h} 群存在如下同态关系： $C_2 \leftarrow C_{2h}$ ，即 $E \leftarrow \{E, \sigma_h\}$ ， $C_2 \leftarrow \{C_2, \sigma_h C_2\}$ 。

了解一下：群的表示

线性空间： V 是一个集合， F 是数域，规定了 V 中元素的加法以及 V 中元素和 F 中数的乘法（数乘）。若满足下面条件，则集合 V 称为数域 F 上的线性空间， V 中的元素称为**向量**：

- I. 加法封闭性：** $\forall a, b \in V, a+b \in V$ 。
- II. 加法对易：** $\forall a, b \in V, a+b = b+a$ 。
- III. 加法结合律：** $\forall a, b, c \in V, a+(b+c) = (a+b)+c$ 。
- IV. 数乘封闭性和相容性：** $\forall a \in V, \forall \mu, \lambda \in F$ ，满足 $\lambda a \in V$ 且 $\mu(\lambda a) = (\mu\lambda)a$ 。
- V. 零向量：** 存在唯一零向量 0 （此 0 不是数域 F 中的数 0 ）， $\forall a \in V$ ，满足 $a+0 = 0+a = a$ 。
- VI. 逆向量：** $\forall a \in V$ ，存在唯一逆向量，记为 $-a$ ，使得 $a+(-a) = (-a)+a = 0$ 。

了解一下：群的表示

基：线性空间的一个子集，基中的向量称为**基矢**，
满足：1. 各基矢线性无关；2. 任意一个向量可以表示为基矢的线性组合，或者说基矢**张成**了线性空间。
线性组合中的系数称为**坐标**。**书写错了！**

例：三维空间中的所有向量构成一个线性空间，常用的基是直角坐标系三个坐标轴方向的单位向量。

$$\text{基： } \{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}\} \quad \mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$$

在这个线性空间中，我们还定义了向量的长度和两个向量的内积，这样的线性空间称为**Hilbert空间**。

$$|\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$$

如此就能定义两个向量间夹角： $\cos \theta = \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1||\mathbf{r}_2|}$

了解一下：群的表示

例：根据态叠加原理容易证明：氢原子波函数全体构成线性空间，因此波函数也可称为向量；又根据厄密算符正交归一本征函数集的性质，氢原子的1s, 2s, 2px, ...等轨道全体构成基，氢原子任意波函数 Ψ 可表示为基矢的线性组合：

$$\Psi = c_{1s}\psi_{1s} + c_{2s}\psi_{2s} + c_{2px}\psi_{2px} + \cdots$$

如下定义波函数长度和内积后，氢原子波函数全体构成的线性空间成为Hilbert空间：

$$\|\Psi\| = \sqrt{\int \Psi^* \Psi d\tau} \quad (\Psi_1, \Psi_2) = \int \Psi_1^* \Psi_2 d\tau$$

由此引出波函数归一（长度为1）和正交（内积为零）的概念。基矢1s, 2s, 2px, ...等轨道是归一且互相正交的，这样的基矢称为**单位正交基矢**。

了解一下：群的表示

前几章遇到的线性算符都是对波函数进行某种数学运算，这些只是线性算符的一类。将线性算符抽象化以推广，我们仍采用第1.2节线性算符的定义式，但不指明作用对象的类型，只要求对象全体构成线性空间，作用后的结果仍在此线性空间中。

线性算符： V 是一个线性空间， F 是全体实数或全体复数，算符 A 作用在 V 上，若满足如下关系，则算符 A 称为线性算符：

$$\forall f, g \in V, \forall a, b \in F, \hat{A}(af + bg) = a\hat{A}f + b\hat{A}g \in V$$

在这个定义下，线性算符及其作用对象都是抽象的，因而可以应用于许多场合。

了解一下：群的表示

线性空间中的任意向量可以表示为列矩阵。

线性空间中总可以找到一组基矢，使得其它向量可以表示为基矢的线性组合。

$\{\phi_i, i = 1, 2, \dots\}$ 是一组基矢

任意向量 ψ 总可以表示为基矢线性组合

$$\psi = \sum_k \phi_k c_k = \underbrace{(\phi_1 \quad \phi_2 \quad \phi_3 \quad \dots)}_{\text{基}} \underbrace{\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}}_{\text{向量 } \psi \text{ 的矩阵表示}}$$

基总是写成行矩阵。 由于基已取定，是定值，在写向量时可不将基写出，直接用列矩阵代表向量。

了解一下：群的表示

例：在通常的三维空间中建立直角坐标系，基矢就是坐标轴方向的三个单位向量，则三维空间任意向量可以表示为基矢的线性组合：

$$\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k} = \underbrace{(\mathbf{i} \quad \mathbf{j} \quad \mathbf{k})}_{\text{基}} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

向量 \mathbf{r} 的
矩阵表示

由于基已取定，是定值，在写向量时可不将基写出，直接用列矩阵代表向量。

了解一下：群的表示

例：氢原子全体波函数构成线性空间，其1s, 2s, 2px, ...等轨道全体构成基，则氢原子任意波函数可以表示为基矢的线性组合，由此化为列向量：

$$\Psi = c_{1s}\psi_{1s} + c_{2s}\psi_{2s} + c_{2px}\psi_{2px} + \cdots$$

$$= \underbrace{(\psi_{1s}, \quad \psi_{2s}, \quad \psi_{2px}, \quad \cdots)}_{\text{基}} \begin{pmatrix} c_{1s} \\ c_{2s} \\ c_{2px} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

向量 Ψ 的
矩阵表示

基已取定，不会再变化，可以不将基写出，而直接用列矩阵表示波函数。

了解一下：群的表示

定义在线性空间上的线性算符可以表示为矩阵。

$\{\phi_i, i=1, 2, \dots\}$ 是线性空间的一组基矢，将线性算符 A 作用在基矢 ϕ_i 上，记结果为 g_i ，由于 g_i 仍是线性空间中一个向量，因此可以表示为基矢的线性组合：

$$\hat{A}\phi_i = g_i = \sum_k \phi_k a_{ki} = (\phi_1 \quad \phi_2 \quad \cdots) \begin{pmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

将 A 作用在整个基上：

$$\hat{A}(\phi_1 \quad \phi_2 \quad \cdots) = (\hat{A}\phi_1 \quad \hat{A}\phi_2 \quad \cdots) = (g_1 \quad g_2 \quad \cdots)$$

A 作用在基上

$$= \underbrace{(\phi_1 \quad \phi_2 \quad \cdots)}_{\text{基}} \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & a_{21} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{\text{表示矩阵}}$$

← 算符 A 的表示矩阵

了解一下：群的表示

用前页得到的结果，可将线性算符作用在任意向量上用矩阵形式表示出来：

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i = (\phi_1 \quad \phi_2 \quad \cdots) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\hat{A}\psi = \hat{A}(\phi_1 \quad \phi_2 \quad \cdots) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

A作用在基上

$$= \underbrace{(\phi_1 \quad \phi_2 \quad \cdots)}_{\text{基}} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & a_{21} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$A\psi$ 的矩阵表示

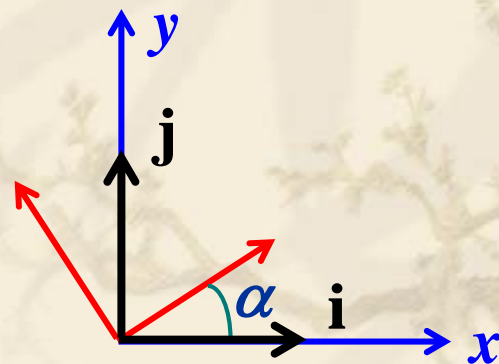
了解一下：群的表示

例：绕一根轴转动 α 角的矩阵。首先指明转动的对象，这里取三维空间的位置向量，其次，建立坐标系，取 z 轴与转轴重合且同方向，取基为：

$\{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}\}$ 是一组基矢

记转动操作为 $\hat{C}(\alpha)$ ，显然这个操作是线性的，是线性算符，将其分别作用在三个基矢上，注意转动后得到的向量不是基矢：

$$\begin{cases} \hat{C}(\alpha)\mathbf{i} = \cos(\alpha)\mathbf{i} + \sin(\alpha)\mathbf{j} \\ \hat{C}(\alpha)\mathbf{j} = -\sin(\alpha)\mathbf{i} + \cos(\alpha)\mathbf{j} \\ \hat{C}(\alpha)\mathbf{k} = \mathbf{k} \end{cases}$$



了解一下：群的表示

接上页。转动操作作用在基上可用矩阵表示为：

$$\begin{aligned}\hat{C}(\alpha)(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) &= (\hat{C}(\alpha)\mathbf{i}, \hat{C}(\alpha)\mathbf{j}, \hat{C}(\alpha)\mathbf{k}) \\ &= (\cos(\alpha)\mathbf{i} + \sin(\alpha)\mathbf{j}, \quad -\sin(\alpha)\mathbf{i} + \cos(\alpha)\mathbf{j}, \quad \mathbf{k}) \\ &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) & 0 \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

由此立得转动操作在三维向量空间中的矩阵表示：

$$D(\hat{C}(\alpha)) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) & 0 \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

接上页。现在看转动操作作用在任意向量上的矩阵。

$$\hat{C}(\alpha)\vec{r} = \hat{C}(\alpha)(x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k})$$

$$= \hat{C}(\alpha)(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \left(\hat{C}(\alpha)\mathbf{i}, \hat{C}(\alpha)\mathbf{j}, \hat{C}(\alpha)\mathbf{k} \right) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})}_{\text{基}} \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) & 0 \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})}_{\text{基}} D(\hat{C}(\alpha)) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

基已取定，不再变化，
可不将基写出。

了解一下：群的表示

群的表示：对于群 G ，如果存在一个线性算符构成的群 U ，且 U 是 G 的同态： $U \leftarrow G$ ，则称 U 是 G 的一个表示。

当 U 与 G 同构时， U 称为 G 的**忠实表示**。

由于 U 中的元素是作用在线性空间上的线性算符，在选定基矢后，每个线性算符都可以用矩阵表示，这些矩阵的集合就称为 U 的一个实现，它们既是群 U 的**表示矩阵**也是群 G 的**表示矩阵**。

抽象群 \rightarrow 线性算符群 \rightarrow 矩阵群