3

3.1

3.1-1

> 证明 $\mathrm{SO}(3)$ 群和空间反演群 $\mathrm{V}_2=\{E, I=-E\}$ 都是 $\mathrm{O}(3)$ 的不变子群。

$\forall g \in \mathrm{SO}(3), \forall f \in \mathrm{O}(3)$，有:

$$
\begin{aligned}
\det\left(f^{-1} g f\right) & =\det\left(f f^{-1} g\right) \quad=\det(g) \\
& =1
\end{aligned}
$$

因此:

$$
f^{-1} g f \in \mathrm{SO}(3)
$$

所以 $\mathrm{SO}(3)$ 是 $\mathrm{O}(3)$ 的不变子群。

$E \in \mathrm{V}_2, \forall f \in \mathrm{O}(3)$，有:

$$
f^{-1} E f=f^{-1} f=E \in \mathrm{V}_2
$$

$I=-E \in \mathrm{V}_2, \forall f \in \mathrm{O}(3)$，有:

$$
f^{-1} I f=-f^{-1} E f=-f^{-1} f=-E=I \in \mathrm{V}_2
$$

所以 V_2 是 $\mathrm{O}(3)$ 的不变子群。

3.1-2

> 证明 $\mathrm{SO}(3)$ 群中转动角度相同的群元在同一类中。

$C_{\vec{k}}(\omega) \in \mathrm{SO}(3), \forall g \in \mathrm{SO}(3)$，注意到:

$$
\left[g C_{\vec{k}}(\omega) g^{-1}\right]\left(g \vec{k}\right)=g\left(C_{\vec{k}}(\omega) \vec{k}\right)=g \vec{k}
$$

因此，$g C_{\vec{k}}(\omega) g^{-1} \in \mathrm{SO}(3)$ 的转轴为 $g \vec{k}$，于是其可表示为:

$$
g C_{\vec{k}}(\omega) g^{-1}=C_{g \vec{k}}\left(\omega^{\prime}\right)
$$

根据罗德里格旋转公式，一个绕单位向量 $\vec{k}=\left(k_x, k_y, k_z\right), k_x^2+k_y^2+k_z^2=1$ 选择 ω 角度的旋转矩阵 $C_{\vec{k}}(\omega)$ 可以表示为:

$$
C_{\vec{k}}(\omega)=I+\sin(\omega) K+[1-\cos \omega] K^2
$$

其中，

$$
K=\begin{bmatrix}
0 & -k_z & k_y \\
k_z & 0 & -k_x \\
-k_y & k_x & 0
\end{bmatrix}
$$

两边求迹可得:

$$
\operatorname{Tr}\left(C_{\vec{k}}(\omega)\right)=3-2[1-\cos \omega]=1+2 \cos \omega
$$

可见，迹仅与转动角度有关，与转动轴无关。

因此，对方程 $g C_{\vec{k}}(\omega) g^{-1}=C_{g \vec{k}}\left(\omega^{\prime}\right)$ 两边求迹可得:

$$
1+2 \cos \omega=1+2 \cos \omega^{\prime}
$$

由于当 $\omega, \omega^{\prime} \in[0, \pi]$ 时，$1+2 \cos \omega$ 和 $1+2 \cos \omega^{\prime}$ 均为单调递减函数，因此得到:

$$
\omega=\omega^{\prime}
$$

于是有：

$$gC_{\vec{k}}(\omega)g^{-1}=C_{g\vec{k}}(\omega)$$

即 $\mathrm{SO}(3)$ 群中转动角度相同的群元在同一类中。

3.1-3

> 求 D_n 群的类的个数。（要求有中间过程）

$\mathrm{SO}(3)$ 群的有限子群 G 中两个群元 $C_{\vec{k}_1}(\omega_1)$ 和 $C_{\vec{k}_2}(\omega_2)$ 共轭的条件是：

（1）$\omega_1=\omega_2$

（2）$\exists g\in G$ 使得 $\vec{k}_2=g\vec{k}_1$

D_n 群是 $\mathrm{SO}(3)$ 群的有限子群。

n 为偶数

当 n 为偶数，

$$\mathrm{D}_n=\left\{e,C_n^1,C_n^2,\cdots,C_n^{n-1},\sigma_1,\cdots,\sigma_n\right\}$$

恒元 e 自成一类。

由于 $C_n^i=C_{\vec{k}}\left(\frac{2\pi i}{n}\right)$ 和 $C_n^{n-i}=C_{-\vec{k}}\left(\frac{2\pi i}{n}\right)$，二者转动的角度相同，且 $\sigma_i\vec{k}=-\vec{k}$，因此 C_n^i 和 C_n^{n-i} 共轭。

由于 $\forall\sigma_i$ 转动的角度均为 π，且通过 C_n^1 可将 σ_1 的转动轴依次变换为 $\sigma_3,\sigma_5,\cdots\sigma_{n-1}$ 的转动轴，将 σ_2 的转动轴依次变换为 $\sigma_4,\sigma_6,\cdots,\sigma_n$ 的转动轴，因此 $\{\sigma_1,\sigma_3,\cdots\sigma_{n-1}\}$ 为一类，$\{\sigma_2,\sigma_4,\cdots\sigma_n\}$ 为一类。

$C_n^{n/2}$ 自成一类。

综上，当 n 为偶数，D_n 群的类的个数为 $(n+6)/2$

n 为奇数

当 n 为奇数，

$$\mathrm{D}_n=\left\{e,C_n^1,C_n^2,\cdots,C_n^{n-1},\sigma_1,\cdots,\sigma_n\right\}$$

恒元 e 自成一类。

由于 $C_n^i=C_{\vec{k}}\left(\frac{2\pi i}{n}\right)$ 和 $C_n^{n-i}=C_{-\vec{k}}\left(\frac{2\pi i}{n}\right)$，二者转动的角度相同，且 $\sigma_i\vec{k}=-\vec{k}$，因此 C_n^i 和 C_n^{n-i} 共轭。

由于 $\forall\sigma_i$ 转动的角度均为 π，且通过 C_n^1 可将 σ_1 的转动轴依次变换为 $\sigma_2,\sigma_3,\cdots\sigma_n$ 的转动轴，因此 $\{\sigma_1,\sigma_2,\cdots\sigma_n\}$ 为一类。

综上，当 n 为奇数，D_n 群的类的个数为 $(n+3)/2$

3.1-4

> 证明 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T_1}=C_{\vec{i}}(\omega)$

$$T_1=\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\sigma_2\end{bmatrix}$$

$$T_1^2=\begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\sigma_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\sigma_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&E\end{bmatrix}$$

$$T_1^3=T_1^2T_1=\begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&E\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\sigma_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\sigma_2\end{bmatrix}=T_1$$

以此类推。

$$
\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T_1} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\mathrm{i}\omega T_1\right)^n \\
&= E + \frac{1}{1!}\left(-\mathrm{i}\omega\right)T_1 + \frac{1}{2!}\left(-\mathrm{i}\omega\right)^2\begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&E\end{bmatrix} + \frac{1}{3!}\left(-\mathrm{i}\omega\right)^3 T_1+\cdots \\
&= \begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&E\end{bmatrix}\left[1-\frac{\omega^2}{2!}+\cdots\right] - \mathrm{i}T_1\left[\frac{\omega}{1!}-\frac{\omega^3}{3!}+\cdots\right] \\
&= \begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&E\end{bmatrix}\cos\omega - \mathrm{i}T_1\sin\omega \\
&= \begin{bmatrix}1&0&0\\0&\cos\omega&-\sin\omega\\0&\sin\omega&\cos\omega\end{bmatrix} \\
&= C_{\vec{i}}(\omega)
\end{aligned}
$$

3.1-5

> 证明 $ST_3S^{-1}=n_1T_1+n_2T_2+n_3T_3=\vec{n}\cdot\vec{T}$

$$
S(\theta,\varphi)=\begin{bmatrix}\cos\varphi\cos\theta & -\sin\varphi & \cos\varphi\sin\theta\\ \sin\varphi\cos\theta & \cos\varphi & \sin\varphi\sin\theta\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{bmatrix}
$$

要证明 $ST_3S^{-1}=n_1T_1+n_2T_2+n_3T_3$，只要需要证明：

$$
ST_3=\left(\sin\theta\cos\varphi T_1+\sin\theta\sin\varphi T_2+\cos\theta T_3\right)S
$$

左边：

$$
\begin{aligned}
ST_3 &= \begin{bmatrix}\cos\varphi\cos\theta & -\sin\varphi & \cos\varphi\sin\theta\\ \sin\varphi\cos\theta & \cos\varphi & \sin\varphi\sin\theta\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\ \mathrm{i}&0&0\\0&0&0\end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix}-\mathrm{i}\sin\varphi & -\mathrm{i}\cos\varphi\cos\theta & 0\\ \mathrm{i}\cos\varphi & -\mathrm{i}\sin\varphi\cos\theta & 0\\ 0 & \mathrm{i}\sin\theta & 0\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

右边：

$$
\begin{aligned}
&\left(\sin\theta\cos\varphi T_1+\sin\theta\sin\varphi T_2+\cos\theta T_3\right)S \\
=&\left\{\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&-\mathrm{i}\sin\theta\cos\varphi\\0&\mathrm{i}\sin\theta\cos\varphi&0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0&0&\mathrm{i}\sin\theta\sin\varphi\\0&0&0\\-\mathrm{i}\sin\theta\sin\varphi&0&0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\cos\theta&0\\ \mathrm{i}\cos\theta&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}\right\}\begin{bmatrix}\cos\varphi\cos\theta & -\sin\varphi & \cos\varphi\sin\theta\\ \sin\varphi\cos\theta & \cos\varphi & \sin\varphi\sin\theta\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{bmatrix} \\
=&\mathrm{i}\begin{bmatrix}0&-\cos\theta&\sin\theta\sin\varphi\\ \cos\theta&0&-\sin\theta\cos\varphi\\ -\sin\theta\sin\varphi&\sin\theta\cos\varphi&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\varphi\cos\theta & -\sin\varphi & \cos\varphi\sin\theta\\ \sin\varphi\cos\theta & \cos\varphi & \sin\varphi\sin\theta\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{bmatrix} \\
=&\begin{bmatrix}-\mathrm{i}\sin\varphi & -\mathrm{i}\cos\varphi\cos\theta & 0\\ \mathrm{i}\cos\varphi & -\mathrm{i}\sin\varphi\cos\theta & 0\\ 0 & \mathrm{i}\sin\theta & 0\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

对比可得左边等于右边，因此：

$$
ST_3S^{-1}=n_1T_1+n_2T_2+n_3T_3=\vec{n}\cdot\vec{T}
$$

3.2

3.2-1

> 求 D_6 群的类、不变子群和特征标表。

由 3.1-3 可知，D_6 群的类为：

$$\{e\},\left\{C_6^1,C_6^5\right\},\left\{C_6^2,C_6^4\right\},\left\{C_6^3\right\},\left\{\sigma_1,\sigma_3,\sigma_5\right\},\left\{\sigma_2,\sigma_4,\sigma_6\right\}$$

不变子群：

$$\{e\},\mathrm{D}_6,\left\{e,C_6^1,C_6^2,C_6^3,C_6^4,C_6^5\right\},\left\{e,C_6^3\right\},\left\{e,C_6^2,C_6^4\right\},\left\{e,C_6^2,C_6^4,\sigma_1,\sigma_3,\sigma_5\right\},\left\{e,C_6^2,C_6^4,\sigma_2,\sigma_4,\sigma_6\right\},$$

有 6 个类，因此有 6 个不等价不可约表示。

$$n_G=12=1^2+1^2+1^2+1^2+2^2+2^2$$

因此共有 4 个不等价不可约一维表示，2个不等价不可约二维表示。

特征标表：

	$1e$	$2C_6^1$	$2C_6^2$	$1C_6^3$	$3\sigma_1$	$3\sigma_2$
$D^{(1)}$	1	1	1	1	1	1
$D^{(2)}$	1	1	1	1	-1	-1
$D^{(3)}$	1	-1	1	-1	1	-1
$D^{(4)}$	1	-1	1	-1	-1	1
$D^{(5)}$	2	1	-1	-2	0	0
$D^{(6)}$	2	-1	-1	2	0	0

3.2-2

> 求正四面体对称群 T 的类、不变子群、商群和特征标表。

对称轴有四种：3 个 c_2 轴；4 个 c_3 轴；4 个 c_3^2 轴

只有转动角度相同的群元才可能为一类。

T 群共有四个类：

$$\{e\},\left\{c_2^{(2)},c_2^{(3)},c_2^{(4)}\right\},\left\{c_3^{(1)},c_3^{(2)},c_3^{(3)},c_3^{(4)}\right\},\left\{\left(c_3^{(1)}\right)^2,\left(c_3^{(2)}\right)^2,\left(c_3^{(3)}\right),\left(c_3^{(4)}\right)^2\right\}$$

不变子群应由类组成，而 $n_G=12=1\times 12=2\times 6=3\times 4$

因此子群的阶数只可能为 $1,2,3,4,6$

因此，唯一一个非平庸不变子群为：

$$\mathrm{D}_2=\left\{e,c_2^{(2)},c_2^{(3)},c_2^{(4)}\right\}$$

对应的商群：

$$\mathrm{T}/\mathrm{D}_2=\left\{\mathrm{D}_2,c_3^{(1)}\mathrm{D}_2,\left(c_3^{(1)}\right)^2\mathrm{D}_2\right\}$$

T 群的特征标表：

	e	$3c_2^{(2)}$	$4c_3^{(1)}$	$4\left(c_3^{(1)}\right)^2$
D_1	1	1	1	1
D_2	1	1	$\exp(\mathrm{i}2\pi/3)$	$\exp(-\mathrm{i}2\pi/3)$
D_3	1	1	$\exp(-\mathrm{i}2\pi/3)$	$\exp(\mathrm{i}2\pi/3)$
D_4	3	-1	0	0

3.2-3

> 第一类点群分哪几类?

第一类晶体点群有 11 种:

$$\mathrm{C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, C_2, D_3, D_4, D_6, T, O}$$