第1章 群的基本知识

1.1 群的定义

在规定了两个元素之间的“乘积”法则后，满足以下四个条件的集合 G 称为群：

（1）封闭性

$$\forall f, g \in G, fg \in G$$

（2）结合律

$$\forall f, g, h \in G, (fg)h = f(gh)$$

（3）存在恒元

$$\exists e \in G, \forall f \in G, ef = fe = f$$

e 称为群 G 的恒元。

（4）存在逆元

$$\forall g \in G, \exists g^{-1} \in G, gg^{-1} = g^{-1}g = e$$

g^{-1} 称为元素 g 的逆元。

- 若集合 G 满足 (1)(2)(3) 但不满足 (4)，则称为“半群”。
- 群元可以是任何客体。
- “乘积”法则不局限于数乘。

5个结论

（1）恒元 e 是唯一的。

假设存在另一个恒元 e'，则：

$$e' = e'e = e$$

（2）$\forall g \in G$ 的逆元 g^{-1} 是唯一的。

假设 g' 也是 g 的逆元，则：

$$g' = g'e = g'(gg^{-1}) = (g'g)g^{-1} = g^{-1}$$

（3）恒元 e 的逆元是它本身。

$$e^{-1} = ee^{-1} = e$$

（4）$\left(g^{-1}\right)^{-1} = g$

$$\left(g^{-1}\right)^{-1} = \left(g^{-1}\right)^{-1} e = \left(g^{-1}\right)^{-1} \left(g^{-1}g\right) = \left(\left(g^{-1}\right)^{-1} g^{-1}\right) g = eg = g$$

（5）$(gf)^{-1} = f^{-1}g^{-1}; (g_1 g_2 \cdots g_N)^{-1} = g_N^{-1} \cdots g_2^{-1} g_1^{-1}$

$$(g_1g_2\cdots g_N)(g_1g_2\cdots g_N)^{-1}=e$$

等号两边依次左乘 $g^{-1},g_2^{-1},\cdots,g_N^{-1}$ 得：

$$(g_1g_2\cdots g_N)^{-1}=g_N^{-1}\cdots g_2^{-1}g_1^{-1}$$

7个概念

（1）群的元素的个数 n_G 可以是有限的，也可以是无限的。群元个数有限的群称为有限群。

（2）有限群的元素的个数 n_G 称为有限群的阶。

（3）群元个数无限的群称为无限群。无限群有群元素离散和连续两种情况。

（4）群元素离散的无限群称为离散无限群。

（5）群元素连续的无限群称为连续无限群。

（6）$\forall g\in G$，若 $g^m=e$，其中 m 是最小的正整数，则 m 称为群元 g 的阶。

（7）若 $\forall f,g\in G$，有 $fg=gf$，则称群 G 为可交换群，或 Abel 群。

7个例子

例1

$G=\{g_1,g_2,g_3,g_4\}=\{1,-1,\mathrm{i},-\mathrm{i}\}$，乘法定义为数乘。

例2

$G=\{g_1,g_2,g_3,g_4\}$

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

乘法定义为矩阵乘法。

例3

整数加法群 $\mathbb{Z}_+=(\mathbb{Z},+)$，群元为所有整数，乘法定义为数的加法。

例4

实数加法群 $\mathbb{R}_+=(\mathbb{R},+)$，群元为所有实数，乘法定义为数的加法。

例5

非零实数乘法群 $\overline{\mathbb{R}}_\times$，群元为所有非零实数，乘法定义为数的乘法。

例6

n 阶有限循环群 $\mathbf{C}_n=\{C_n^1,C_n^2,\cdots,C_n^{n-1},C_n^n=e\}$

乘法定义为：

$$C_n^p\cdot C_n^q=C_n^{p+q}$$

逆元：

$$C_n^p \cdot C_n^{n-p} = C_n^n = e \Longrightarrow (C_n^p)^{-1} = C_n^{n-p}$$

$$C_n^p \cdot C_n^q = C_n^{p+q} = C_n^q \cdot C_n^p$$

$\mathbf{C}_n$ 是 n 阶 Abel 群。

例 1 中提到的四阶群 $G = \{g_1, g_2, g_3, g_4\} = \{1, \mathrm{i}, -1, -\mathrm{i}\}$ 也是一个循环群，其中的群元可以表示为：

$$C_4^1 = \exp\left(\mathrm{i} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot 1\right) = \mathrm{i} = g_2$$

$$C_4^2 = \exp\left(\mathrm{i} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot 2\right) = -1 = g_3$$

$$C_4^3 = \exp\left(\mathrm{i} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot 3\right) = -\mathrm{i} = g_4$$

$$C_4^4 = \exp\left(\mathrm{i} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot 4\right) = 1 = g_1$$

群元可代表复平面内一个矢量逆时针转 $\dfrac{\pi}{2}, \pi, \dfrac{3\pi}{2}, 2\pi$

例7

$\mathrm{SO}(2)$ 群

二维平面中，将一个矢量逆时针旋转 α 角度可表示为：

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

其中，

$$g(\alpha) = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}$$

称为旋转矩阵，为集合 $\mathrm{SO}(2)$ 的元素，记为：

$$G = \mathrm{SO}(2) = \{g(\alpha) | \alpha \in [0, 2\pi]\}$$

乘法定义为矩阵乘法。

- 封闭性：$g(\alpha)g(\beta) = g(\alpha + \beta) \in G$
- 结合律：矩阵乘法满足结合律
- 存在恒元：$e = g(0) = I$
- 存在逆元：$g^{-1}(\alpha) = g(2\pi - \alpha)$

$\mathrm{SO}(2)$ 是 Abel 群，也是一个 1 阶李群。

代数上可借助复平面推导旋转矩阵的表达式：

设复数 z 逆时针旋转 α 角后得到 z'，则：

$$z' = \exp(\mathrm{i}\alpha) z$$

设 $z' = x' + \mathrm{i}y', z = x + \mathrm{i}y$，由欧拉公式可得：

$$x' + \mathrm{i}y' = [\cos\alpha + \mathrm{i}\sin\alpha][x + \mathrm{i}y]$$

整理得：

$$x'+\mathrm{i}y'=[(\cos\alpha)x-(\sin\alpha)y]+\mathrm{i}[(\sin\alpha)x+(\cos\alpha)y]$$

于是：

$$\begin{cases}x'=(\cos\alpha)x-(\sin\alpha)y\\ y'=(\sin\alpha)x+(\cos\alpha)y\end{cases}$$

写成矩阵乘法形式：

$$\begin{bmatrix}x'\\y'\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha\\ \sin\alpha & \cos\alpha\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix}$$

例8

正三角对称群 D_3

正三角形有三个对称轴和一个对称中心。

群元是一系列对称操作，操作保证**操作后的正三角形**与**操作前的正三角形**重合。

三角形 ABC，中心为 O，三条对称轴为 a,b,c

e：绕 O 转 360°，$e(ABC)=(ABC)$

d：绕 O 转 120°，$d(ABC)=(CAB)$

f：绕 O 转 240°，$f(ABC)=(BCA)$

a：绕对称轴 a 转 180°，$a(ABC)=(ACB)$

b：绕对称轴 b 转 180°，$b(ABC)=(CBA)$

c：绕对称轴 c 转 180°，$c(ABC)=(BAC)$

这些操作构成了 D_3 群：

$$\mathrm{D}_3=\{e,d,f,a,b,c\}$$

- 称两个操作 X,Y 相等，当且仅当 $X(ABC)=Y(ABC)$

$(ab)(ABC)=a(CBA)=(CAB)=d(ABC)\implies ab=d$

$(ba)(ABC)=b(ACB)=(BCA)=f(ABC)\implies ba=f$

$\{a,d\}$ 或 $\{a,f\}$ 或 $\{b,d\}$ 等为 D_3 群的生成元。

各群元的阶：

群元 g	e	d	f	a	b	c
阶数n_g	1	3	3	2	2	2

例9

一维空间连续平移群 T_1

一维空间连续平移群的群元是平移操作：

$$\mathrm{T}_1:\{T(a)|a\in\mathbb{R}\}$$

其中，群元 $T(a)$ 可以表示为：

$$T(a):x\mapsto x+a$$

或：

$$T(a)x=x+a$$

- 封闭性：$\forall a,b\in\mathbb{R},a+b\in\mathbb{R}\Longrightarrow T(a)T(b)=T(a+b)\in\mathrm{T}_1$
- 结合律：$T(a)[T(b)T(c)]x=T(a+b+c)x=[T(a)T(b)]T(c)x$
- 存在恒元：$T(0)=e$
- 存在逆元：$T^{-1}(a)=T(-a)$

一维空间平移群的群元可写成矩阵形式：

$$T(a)=\begin{bmatrix}1&a\\0&1\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}1&a\\0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x+a\\1\end{bmatrix}$$

推广到 n 维平移群 T_n：

$$T_n(a_1,a_2,\cdots,a_n)=\begin{bmatrix}1&&&a_1\\&\ddots&&\vdots\\&&1&a_n\\&&&1\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}1&&&a_1\\&\ddots&&\vdots\\&&1&a_n\\&&&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\\vdots\\x_n\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_1+a_1\\\vdots\\x_n+a_n\\1\end{bmatrix}$$

一阶平移群是一阶 Abel 群。

1.2 群的重排定理

设 $G=\{g_\alpha\}$ 为群，f 为 G 中一个确定的元素。当 α 取遍所有可能的取值时，fg_α 给出且仅仅一次给出 G 的所有元素。

$$G=\{g_\alpha\}=\{fg_\alpha\}$$

> 证明思路：先证明 $\{fg_\alpha\}$ 确实是一个集合（无重复元素），再证明 $\{fg_\alpha\}\subseteq G$，最后证明 $G\subseteq\{fg_\alpha\}$。

证明：

假设 fg_α 有重复元素，即 $\exists\alpha\neq\alpha',g_\alpha\neq g_{\alpha'}$，使得 $fg_\alpha=fg_{\alpha'}$，两边左乘 f^{-1} 得 $g_\alpha=g_{\alpha'}$，这与假设矛盾。故 $\{fg_\alpha\}$ 是一个集合。

$\forall fg_\alpha\in\{fg_\alpha\}$，由于 $f,g_\alpha\in G$，再结合群的封闭性可知 $fg_\alpha\in G$，于是 $\{fg_\alpha\}\subseteq G$

$\forall g_\beta \in G$，由于 $f \in G$，于是 $\exists f^{-1} \in G$，群的封闭性给出 $f^{-1}g_\beta = g_\alpha \in G$，两边左乘 f 得 $g_\beta = fg_\alpha \in \{fg_\alpha\}$，于是 $G \in \{fg_\alpha\}$

- 群乘法表中的每行、每列都是 G 的元素的重新排列。
- 乘法表每个元素在每行每列中只出现依次。
- 乘法表的任意两行、两列都不会相同。

1.3 子群和陪集

子群的定义

若群 G 的非空子集 H 也构成一个群（相同的乘法），则 H 称为群 G 的一个子群。

子集 H 为群 G 的子群的条件为：

（1）封闭性：$\forall h_\alpha, h_\beta \in H, h_\alpha h_\beta \in H$

（2）存在逆元：$\forall h_\alpha \in H, \exists h_\alpha^{-1} \in H$，使得 $h_\alpha h_\alpha^{-1} = h_\alpha^{-1} h_\alpha = e$

每一个非平庸群 G 最少有两个子群，一个是 $\{e\}$，另一个是它自身，这两个子群称为群 G 的平庸子群。除此之外的子群称为固有子群。

一些关于子群的结论

（1）子群 H 的恒元就是群 G 的恒元。

（2）$HH = H$

子群的陪集

设 H 为群 G 的一个子群，$f \in G, f \notin H$，则 $fH = \{fh_\alpha\}$ 称为子群 H 关于 f 的左陪集；$Hf = \{h_\alpha f\}$ 称为子群 H 关于 f 的右陪集。

若 H 为有限群，则 $n_{fH} = n_{Hf} = n_H$

- 由于 $e \notin fH$，于是陪集不是群。

证明：假设 $e \in fH$，则 $\exists h_\alpha \in H$，使得 $e = fh_\alpha$。又 H 是群 G 的子群，于是子群 H 存在逆元 $h_\alpha^{-1} \in H$，两边右乘 h_α^{-1} 得到 $h_\alpha^{-1} = f \in H$，这与陪集定义中 $f \notin H$ 矛盾，于是 $e \notin fH$

由于左陪集 fH 和右陪集 Hf 总有一个共同元素 $fe = ef = f$，于是同一个子群关于同一个元素的左右陪集总是有交集的。

- 子群 H 关于 $f \notin H, f \in G$ 的左陪集 fH 与子群 H 没有公共元素。

证明：

若子群 H 关于 $f \in G, f \notin H$ 的左陪集 fH 和 H 有公共元素，即存在 $h_\alpha, h_\beta \in H$ 使得 $fh_\alpha = h_\beta$，右乘 h_α^{-1} 得 $f = h_\beta h_\alpha^{-1} \in H$，这与 $f \notin H$ 矛盾。

陪集定理

子群 H 的两个左陪集（右陪集）要么完全重合，要么没有公共元素。

证明：

设 H 是群 G 的子群，设 $f_1, f_2 \in G, f_1, f_2 \notin H$，设 f_1H 和 f_2H 有一个共同元素，即 $\exists h_\alpha, h_\beta \in H$，使得：

$$f_1 h_\alpha = f_2 h_\beta$$

两边先左乘 f_2^{-1} 再右乘 h_α^{-1} 得：

$$f_2^{-1} f_1 = h_\beta h_\alpha^{-1}$$

于是：

$$f_2^{-1} f_1 H = h_\beta h_\alpha^{-1} H$$

子群的封闭性给出 $h_\beta h_\alpha^{-1} \in H$，于是群的重排定理给出：

$$h_\beta h_\alpha^{-1} H = H$$

对比得：

$$f_2^{-1} f_1 H = H$$

两边左乘 f_2 得：

$$f_1 H = f_2 H$$

这就是说，只要 f_1H 和 f_2H 有一个公共元素，则它们相等。

对于 D_3 群，其子群 $H_1 = \{e, d, f\}$ 有三个相同的左陪集：

$$aH_1 = \{a, b, c\},\ \ bH_1 = \{b, c, a\},\ \ cH_1 = \{c, a, b\}$$

子群 $H_2 = \{e, a\}$ 的左右陪集为：

$$dH_2 = \{d, c\},\ \ H_2 d = \{d, b\}$$

$$fH_2 = \{f, b\},\ \ H_2 f = \{f, c\}$$

拉格朗日定理

有限群的子群的阶等于群阶的因子。

证明：

设群 G 是 n_G 阶有限群，H 为 G 的 n_H 阶子群。取 $f_1 \in G$ 且 $f_1 \notin H$，则 f_1H 为子群 H 的一个左陪集，且 f_1H 与 H 无重复元素，$n_H = n_{f_1H}$

若 H 和 f_1H 没有穷尽 G，取 $f_2 \in G, f_2 \notin H, f_2 \notin f_1H$，构造左陪集 f_2H。由于 $f_2 \notin f_1H$，$f_2 \in f_2H$，则由陪集定理可知 f_1H 和 f_2H 没有公共元素。同样，由于 $f_2 \notin H$，于是 f_2H 与 H 没有公共元素。

重复上述方法，直到穷尽群 G 的所有元素。

最终得到包括 H 在内的集合串：

$$H, f_1H, f_2H, \cdots, f_{k-1}H$$

每一个集合都有 n_H 个元素，且集合串中任意两个集合没有重复元素，且集合串中的元素穷尽了 G，于是：

$$n_H k = n_G,\ \ k \in \mathbb{N}^+$$

拉格朗日定理的推论

- 阶为素数的群 G 没有非平庸子群，这种群只能是循环群。
- 循环群可能有非平庸子群。如 C_4 群有子群 C_2

若 n_G 是非素数，则 n_G 可以分解为：

$$n_G = n_1 \times n_2 = \cdots$$

设 $\forall g \neq e, g^m = e, m > 1$，由于群 G 为有限群，则

$$H_g = \{g, g^2, \cdots, g^m = e\}$$

构成 G 的一个 m 阶子群，拉格朗日定理给出 m 是 n_G 的因子。

若 $m = n_i < n_G$，则 H_g 为 G 的一个非平庸循环子群。

若 $m = n_G$，则 G 为非素数阶的循环群，它必有非平庸子群。

经典群

$\mathrm{GL}(n, \mathbb{C})$ 群和 $\mathrm{GL}(n, \mathbb{R})$ 群

General Linear Transformation，一般线性变换群。

$$\mathrm{GL}(n, \mathbb{C}) \equiv \{A|A\text{为}n \times n\text{的复矩阵}, \det(A) \neq 0\}$$

$$\mathrm{GL}(n, \mathbb{R}) \equiv \{A|A\text{为}n \times n\text{的实矩阵}, \det(A) \neq 0\}$$

乘积定义为矩阵乘法。

$\mathrm{SL}(n, \mathbb{C})$ 群和 $\mathrm{SL}(n, \mathbb{R})$ 群

$$\mathrm{SL}(n, \mathbb{C}) \equiv \{A|A\text{为}n \times n\text{的复矩阵}, \det(A) = 1\}$$

$$\mathrm{SL}(n, \mathbb{R}) \equiv \{A|A\text{为}n \times n\text{的实矩阵}, \det(A) = 1\}$$

乘积定义为矩阵乘法。

幺正群和正交群

幺正群：

$$\mathrm{U}(n) \equiv \{A|A \in \mathrm{GL}(m, \mathbb{C}), A^\dagger A = AA^\dagger = I\}$$

特殊幺正群：

$$\mathrm{SU}(n) \equiv \{A|A \in \mathrm{U}(n), \det(A) = 1\}$$

正交群：

$$\mathrm{O}(n) \equiv \{A|A \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{R}), A^\mathrm{T} A = AA^\mathrm{T} = I\}$$

特殊正交群：

$$\mathrm{SO}(n) = \{A|A \in \mathrm{O}(n), \det(A) = 1\}$$

以上几种经典群之间的关系可以用下图来说明：

$$\mathrm{SU}(n) \subset \left\{\begin{matrix} \mathrm{U}(n) \\ \mathrm{SL}(n,\mathbb{C}) \end{matrix}\right\} \subset \mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$$

$$\bigcup \qquad\qquad \bigcup \qquad\qquad \bigcup$$

$$\mathrm{SO}(n) \subset \left\{\begin{matrix} \mathrm{O}(n) \\ \mathrm{SL}(n,\mathbb{R}) \end{matrix}\right\} \subset \mathrm{GL}(n,\mathbb{R})$$

1.4 共轭元素和类

共轭元素的定义

设 $g_\alpha, g_\beta \in G$，若 $\exists f \in G$ 使得

$$g_\alpha = f g_\beta g^{-1}$$

则称 g_α 和 g_β 互为共轭元素，记为：

$$g_\alpha \sim g_\beta$$

共轭元素的性质

传染性：若 $g_\alpha \sim g_\gamma, g_\beta \sim g_\gamma$，则 $g_\alpha \sim g_\beta$

传递性：若 $g_\alpha \sim g_\beta, g_\beta \sim g_\gamma$，则 $g_\alpha \sim g_\gamma$

类的定义

$\forall a \in G$，G 中所有与 a 共轭的元素组成的集合 C_a 称为 a 的类：

$$C_a \equiv \{g_\alpha a g_\alpha^{-1} | g_\alpha \in G\}$$

由共轭的传染性可知，C_a 中的元素互相共轭。

对于 D_3 群，它的类有：

$$\{e\}，\{a,b,c\}，\{d,f\}$$

类的性质

- 对于任何群，恒元自成一类。（与恒元共轭的元素只有其自身）
- Abel 群的每个元素自成一类。（Abel 群的元素乘积可交换）特别地，n 阶循环群是 Abel 群，n 阶循环群的每一个元素自成一类，共 n 个类。
- $g_\alpha g_\beta \sim g_\beta g_\alpha$，即 $g_\alpha g_\beta$ 与 $g_\beta g_\alpha$ 在同一类中。

$$g_\alpha g_\beta = g_\alpha g_\beta e = g_\alpha (g_\beta g_\alpha) g_\alpha^{-1} \Longrightarrow g_\alpha g_\beta \sim g_\beta g_\alpha$$

- 同类元素的阶必然相同。

若 $a^m = e$，则

$$\left(g_\alpha a g_\alpha^{-1}\right)^m = g_\alpha a^m g_\alpha^{-1} = g_\alpha e g_\alpha^{-1} = e$$

- 两个不同的类没有公共元素。

- 有限群的类的元素个数为群阶的因子。

1.5 不变子群和商群

不变子群的定义

定义一

设 H 为 G 的一个子群，若 $\forall g_\alpha \in G$，都有

$$g_\alpha H = H g_\alpha$$

则称 H 为 G 的不变子群。

定义二

设 H 为 G 的一个子群，若 H 中任意元素的共轭元素还在 H 中，即 $\forall g_\alpha \in G, h_\beta \in H$ 都有

$$g_\alpha h_\beta g_\alpha^{-1} = h_\gamma \in H$$

则称 H 为 G 的不变子群。

- $\{e\}$ 和 G 本身都是 G 的不变子群。
- 若 G 的一个子群是 Abel 子群（子群中的任意元素与 G 中的元素都满足交换律），则它一定是 G 的不变子群。C_6 群是 Abel 群，它的两个非平庸子群 $\{C_6^3, C_6^6 = e\}$ 和 $\{C_6^2, C_6^4, C_6^6 = e\}$ 都是 C_6 群的不变子群。

不变子群的性质

- 不变子群的左右陪集相同（定义一）。
- 若子群 H 中的任意一个元素的共轭元素仍在 H 中，则 H 为不变子群。
- 不变子群由多个类构成；若一个子群由多个类构成，则其一定为不变子群。
- 指数为 2 的子群必为不变子群。（设有限群 G 的阶数为 n_G，其子群 H 的阶数为 n_H，n_G/n_H 称为子群 H 的阶数）

商群的定义

设 H 为群 G 的不变子群，则 H 及其陪集串

$$\{\phi_0 = H,\ \ \phi_1 = s_1 H, \cdots, \phi_{k-1} = s_{k-1} H\},\ \ s_i \in G$$

构成一个新的群，称为群 G 关于不变子群 H 的商群，记为

$$G/H$$

商群的乘法由群 G 的乘法来确定：

$$\phi_i \phi_j \equiv \{(s_i h_\alpha)(s_j h_\beta) | h_\alpha, h_\beta \in H\}$$

$$\phi_i \phi_j = s_i H s_j H = s_i s_j H H = s_i s_j H = g_\alpha H$$

验证商群满足群的定义：

- 封闭性：$\forall \phi_i, \phi_j \in G/H, \phi_i \phi_j = g_\alpha H = \phi_m \in G/H$
- 恒元：H

$$H(s_i H) = s_i H H = s_i H$$

- 逆元：

$$\forall s_i H \in G/H, (s_i H)(s_i^{-1} H) = s_i s_i^{-1} HH = H$$

- 结合律：

$$\begin{aligned}
(\phi_i \phi_j)\phi_k &= (s_i H s_j H) s_k H \\
&= \{[(s_i h_\alpha)(s_j h_\beta)]\,(s_k h_\gamma) | h_\alpha, h_\beta, h_\gamma \in H\} \\
&= \{(s_i h_\alpha)[(s_j h_\beta)(s_k h_\gamma)] | h_\alpha, h_\beta, h_\gamma \in H\} \\
&= s_i H (s_j H s_k H) \\
&= \phi_i(\phi_j \phi_k)
\end{aligned}$$

例子：C_6 群有两个非平庸不变子群 $\mathrm{C}_3 = \{e, C_6^2, C_6^4\}$ 和 $\mathrm{C}_2 = \{e, C_6^3\}$，因此有两个商群：

$$\mathrm{C}_6/\mathrm{C}_3 = \{\phi_0 = \mathrm{C}_3 = \{e, C_6^2, C_6^4\},\ \ \phi_1 = C_6^1 \mathrm{C}_3 = \{C_6^1, C_6^3, C_6^5\}\}$$

$$\mathrm{C}_6/\mathrm{C}_2 = \{\phi_0 = \mathrm{C}_2 = \{e, C_6^3\},\ \ \phi_1 = C_6^1 \mathrm{C}_2 = \{C_6^1, C_6^4\},\ \ \phi_2 = C_6^2 \mathrm{C}_2 = \{C_6^2, C_6^5\}\}$$

1.6 同态与同构

同构

设 $G = \{g_\alpha\}$ 和 $G = \{g'_\alpha\}$ 为两个群，群元之间存在一一对应关系 $g_\alpha \longleftrightarrow g'_\alpha$，并且为满射，且 G 中任意两个元素的乘积也按相同的对应关系对应于 G' 中相应两个元素的乘积，则称 G 和 G' 同构，记为 $G \cong G'$

符号语言表述：

$g_\alpha \longleftrightarrow g'_\alpha$

若 $g_\alpha \longleftrightarrow g'_\alpha, g_\beta \longleftrightarrow g'_\beta$，则 $g_\alpha g_\beta \longleftrightarrow g'_\alpha g'_\beta$

两个同构的群具有相同的乘法表。若两个群的乘法表相同，则它们一定同构。

- 阶为同一素数的两个群同构
- 无限群也存在同构，如 $\mathrm{SO}(2) \cong \mathrm{U}(1)$，$\mathrm{U}(1)$ 群的群元 $g'(\theta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ 可以作为 $\mathrm{SO}(2)$ 群的一维表示。

$$\mathrm{SO}(2) : g(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix},\ \ \mathrm{U}(1) : g'(\theta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$$

一一对应关系：

$$g(\theta) \longleftrightarrow g'(\theta) \Longrightarrow g(\theta_1)g(\theta_2) = g(\theta_1 + \theta_2) \longleftrightarrow g'(\theta_1 + \theta_2) = g'(\theta_1)g'(\theta_2)$$

于是 $\mathrm{SO}(2) \cong \mathrm{U}(1)$

D_3 关于其不变子群 $H = \{e, d, f\}$ 的商群 D_3/H 与 C_2 群同构。

$$\mathrm{D}_3/H = \{H = \{e, d, f\}, aH = \{a, b, c\}\}$$

一一对应关系：

$$H \longleftrightarrow e,\ \ aH \longleftrightarrow C_2^1$$

可以验证乘积的对应关系：

$$H\cdot aH=aH\longleftrightarrow C_2^1=e\cdot C_2^1$$

$$aH\cdot aH=H\longleftrightarrow C_2^1\cdot C_2^1=e$$

于是：

$$\mathrm{D}_3/H\cong\mathrm{C}_2$$

不满足同构条件的例子：

4 阶循环群 C_4 和时空反演群 $\mathrm{V}_4=\{e,\tau,\sigma,\rho\}$（$e$ 代表恒元，τ 代表时间反演，σ 代表空间反演，ρ 代表时空反演）

V_4 群可用四阶矩阵表示：

$$e=\begin{bmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&&1\end{bmatrix},\ \tau=\begin{bmatrix}-1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&&1\end{bmatrix},\ \sigma=\begin{bmatrix}1&&&\\&-1&&\\&&-1&\\&&&-1\end{bmatrix},\ \rho=\begin{bmatrix}-1&&&\\&-1&&\\&&-1&\\&&&-1\end{bmatrix}$$

从群元的阶就能看出二者不同构。

当群元的阶不同时，群的乘法表结构就不同，两个群就不可能同构。

同态

设 $G=\{g_{im}\}$ 与 $G'=\{g'_i\}$ 之间有多一对应关系，且为满射，且群 G 中任意两个元素的乘积也按相同的对应关系对应于 G' 中相应两个元素的乘积，即：

$g_{im}\longrightarrow g'_i$

若 $g_{im}\longrightarrow g'_i,g_{jn}\longrightarrow g'_j$，则 $g_{im}g_{jn}\longrightarrow g'_ig'_j$

则称 G 与 G' 同态，记为：

$$G\simeq G'$$

- 若 $G\simeq G'$，则 $e\mapsto e',g^{-1}\mapsto g'^{-1}$

证明恒元对应关系：

设 $g_{im}\mapsto g'_i,e\mapsto f'$

一方面，由 $G\simeq G'$ 有 $g_{im}e\mapsto g'_if'$

另一方面，$g_{im}e=g_{im}\mapsto g'_i$

于是：$g'_if'=g'_i\Longrightarrow f'=e$

证明逆元对应关系：

设 $G\simeq G',e\mapsto e',g\mapsto g',g^{-1}\mapsto h'$

一方面，$gg^{-1}\mapsto g'h'$

另一方面，$gg^{-1}=e\mapsto e'$

$$g'h'=e'\Longrightarrow h'=g'^{-1}$$

同态核

设 $G \simeq G'$，则 G 中所有与 e' 对应的元素的集合称为同态关系的同态核，记为：

$$I = \{i_l\}$$

同态核定理

若 $G \simeq G'$，I 为同态核，则 I 为 G 的不变子群。

证明：

先证 I 为子群：

封闭性：$\forall i_l, i_k \in I, i_l i_k \mapsto e'e' = e'$，于是 $i_l i_k \in I$

逆元在 I 中：$\forall i_l \in I, i_l^{-1} \mapsto e'^{-1} = e'$，于是 $i_l^{-1} \in I$

再证 I 为不变子群：

$i_l \mapsto e'$，设 $g_{im} \in G \mapsto g_i' \in G'$，则 $g_{im}^{-1} \mapsto g_i'^{-1}$

$$g_{im} i_l g_{im}^{-1} \mapsto g_i' e' g_i'^{-1} = e'$$

于是 $g_{im} i_l g_{im}^{-1} \in I$，因此 I 是 G 的不变子群。

定理1

若 H 为群 G 的不变子群，则 $G \simeq G/H$，其中 $G/H = \{s_0H = H, s_1H, s_2H, \cdots, s_{k-1}H\} = \{s_iH\}$

证明：

建立对应关系为：若 $g_{im} = s_i h_m \in s_iH$，则 $g_{im} \mapsto s_iH$

设 $g_{im} \in s_iH, g_{jm} \in s_jH$，则对应关系为：

$$g_{im} \mapsto s_iH, g_{jm} \mapsto s_jH$$

由于：

$$g_{im} g_{jn} \in (s_iH)(s_jH)$$

于是：

$$g_{im} g_{jn} \mapsto (s_iH)(s_jH)$$

定理2

若 $G \simeq G'$，则 $G/I \cong G'$，I 为同态核。

1.7 直积群

直积群的定义

设 $H = \{h_\alpha\}, F = \{f_\beta\}$ 是 G 的两个子群，且满足：

（1）除恒元以外 H 和 F 没有公共元素

（2）两个子群的元素可对易：$h_\alpha f_\beta = f_\beta h_\alpha$

则 $K=\{h_\alpha f_\beta | h_\alpha \in H, f_\beta \in F\}$ 构成一个群，称为 H 与 F 的直积群，记为：

$$K = H \otimes F$$

H 和 F 称为 K 的直积因子。

- K 中无重复元素
- 若 H 和 F 为有限群，则直积群 K 的阶 $n_K = n_H \times n_F$
- 不要求 H, F, G 中任何一个为 Abel 群。

几个直积群的例子

6 阶循环群 C_6 的两个子群

$$\mathrm{C}_2=\{e, C_6^3\},\ \ \mathrm{C}_3=\{e, C_6^2, C_6^4\}$$

除恒元 e 外无任何公共元素，且循环群的元素自动满足“两个子群的元素可对易”这一条件，于是它们可以构成一个直积群：

$$\mathrm{C}_2 \otimes \mathrm{C}_3 = \{e, C_6^1, C_6^2, C_6^3, C_6^4, C_6^5\} = \mathrm{C}_6$$

相关定理

- 若 $K = H \otimes F$，则 H 和 F 均为 K 的不变子群。

证明：

$\forall f_\beta \in F, h_\alpha f_\gamma \in K$，

$$\begin{aligned}(h_\alpha f_\gamma) f_\beta (h_\alpha f_\gamma)^{-1} &= h_\alpha f_\gamma f_\beta f_\gamma^{-1} h_\alpha^{-1} \\ &= f_\gamma f_\beta f_\gamma^{-1} h_\alpha h_\alpha^{-1} \\ &= f_\gamma f_\beta f_\gamma^{-1} \in F\end{aligned}$$

一些连续群的例子

三维正交变换群 $\mathrm{O}(3)$ 的两个子群：$\mathrm{SO}(3)$ 和 $\{E, I\}$，其中，

$$E=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix},\ \ I=\begin{bmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$$

这两个子群除了恒元外没有其他公共元素，且元素相互对易，因此可定义直积群：

$$\mathrm{O}(3) = \mathrm{SO}(3) \otimes \{E, I\}$$

直积群的类

设 $K = H \otimes F$，K 关于 hf 的类：

$$\begin{aligned}C_{hf} &= \{(h_\alpha f_\beta) hf (h_\alpha f_\beta)^{-1} | h_\alpha \in H, f_\beta \in F\} \\ &= \{(h_\alpha h g_\alpha^{-1})(f_\beta f f_\beta^{-1}) | h_\alpha \in H, f_\beta \in F\} \\ &= C_h^H \otimes C_f^F\end{aligned}$$

直积群的一般定义

对任意两个群 H, F，它们的外直积定义为：

$$G = H \otimes F = \{(h, f) | h \in H, f \in F\}$$

元素间的乘法定义为：

$$gg' = (h, f)(h', f') = (hh', ff')$$

可以证明，$G = H \otimes F$ 满足群的定义，称为 H 和 F 的外直积群。

若 e_H, e_F 分别为 H, F 的恒元，则 (e_H, e_F) 为 $G = H \otimes F$ 的恒元。

$(h, f) \in H \otimes F$ 的逆元为 (h^{-1}, f^{-1})

$$\bar{H} \equiv \{(h, e_F) | h \in H\}$$

$$\bar{F} \equiv \{(e_H, f) | f \in F\}$$

是外直积群 $H \otimes F$ 的两个不变子群。

$G = H \otimes F$ 关于 (h, f) 的类为：

$$\begin{aligned} C_{(h,f)} &= \{(h_\alpha, h_\beta)(h, f)(h_\alpha, f_\beta)^{-1} | h_\alpha \in H, h_\beta \in F\} \\ &= \{(h_\alpha h h_\alpha^{-1}, f_\beta f f_\beta^{-1}) | h_\alpha \in H, h_\beta \in F\} \\ &= C_h^H \otimes C_f^F \end{aligned}$$

更一般地，任意 n 个群 $H, F, \cdots, K$ 的外直积定义为：

$$G = H \otimes F \otimes \cdots \otimes K = \{(h, f, \cdots, k) | h \in H, f \in F, \cdots, k \in K\}$$

定义元素间的乘法：

$$gg' = (h, f, \cdots, k)(h', f', \cdots, k') = (hh', ff', \cdots, kk')$$

则 G 也是群，称为 $H, F, \cdots, K$ 的直积群。

$$\bar{H} \equiv \{(h, e_F, \cdots, e_K) | h \in H\}$$

$$\bar{F} \equiv \{(e_H, f, \cdots, e_K) | f \in F\}$$

$$\bar{K} \equiv \{(e_H, e_F, \cdots, k) | k \in H\}$$

是直积群的 n 个不变子群。

G 关于 $(h, f, \cdots, k)$ 的类为：

$$C_{(h,f,\cdots,k)} = C_h^H \otimes C_f^F \otimes \cdots \otimes C_k^K$$

第2章 群的线性表示理论

群的线性表示

群的线性表示的定义

设 $G=\{g_i\}$ 是一个抽象群，$D(G)$ 是一个矩阵群，群元为 m 阶方阵，且满足：

$$G \simeq D(G) \equiv \{D(g_i)\}$$

则称 $D(G)$ 为群 G 的一个 m 维线性表示，$D(g_i)$ 称为群元 g_i 在该表示中的表示矩阵。

若 $G \cong D(G)$，则这个表示称为群 G 的**真实表示**。

若群 G 与 $D(g)$ 非同构，则称 $D(G)$ 为**非真实表示**。

非真实表示描写了群 G 关于同态核的商群的性质：

$$G/I \cong D(G)$$

矩阵群是自身的一个表示，称为自身表示。

$D(G)=\{E\}$ 称为群的恒等表示。

以上两种表示称为群的平庸表示。

某一个群元的表示矩阵的迹 $\mathrm{Tr}D(g_i)$ 称为该群元在该表示中的特征标，记为：

$$\chi(g_i) \equiv \mathrm{Tr}D(G_i)$$

若 $\forall g_i \in G$，都有 $D^{\dagger}(g_i)D(g_i)=E$，则称这个表示为群 G 的**幺正表示**。

若 $\forall g_i \in G$，都有 $D^{\mathrm{T}}(g_i)D(g_i)=E$，则称这个表示为群 G 的**正交表示**。

线性表示的性质

恒元的表示矩阵是单位矩阵，即 $D(e)=E$

由同态的定义可得：

$$D(g_i)D(g_j)=D(g_ig_j)$$

群元 g 的逆元 g^{-1} 的表示矩阵是群元 g 的表示矩阵的逆矩阵，即：

$$D(g_i^{-1})=D^{-1}(g_i)$$

这容易证明：

$$D(g_i)D(g_i^{-1})=D(g_ig_i^{-1})=D(e)=E \Longrightarrow D(g_i^{-1})=D^{-1}(g_i)$$

等价表示

设 $D(G)$ 为群 G 的一个 m 维表示，设 X 为一个 $m\times m$ 的非奇异矩阵（$\det(X)\neq 0$），则

$$\bar{D}(G) \equiv \{X^{-1}D(g_i)X | g_i \in G\}$$

也构成一个群，且 $D(G) \cong \bar{D}(G)$

称 $\bar{D}(G)$ 和 $D(G)$ 为群 G 的等价表示，或者说这两个表示等价。

下面证明 $D(G) \cong \bar{D}(G)$

先证明 $D(G) \simeq \bar{D}(G)$:

定义对应关系如下:

设 $D(g_i) \in D(G), \bar{D}(g_i) \in \bar{D}(G)$，若 $X^{-1}D(g_i)X = \bar{D}(g_i)$ 则指定对应关系: $D(g_i) \mapsto \bar{D}(g_i)$

这样定义的对应关系是良定义的映射。且由 $\bar{D}(G)$ 的定义可知定义的对应关系是满射。

下面证明定义的对应关系是单射:

设 $X^{-1}D(g_i)X = \bar{D}(g_i), X^{-1}D(g_j)X = \bar{D}(g_j)$，则对应关系为:

$$D(g_i) \mapsto \bar{D}(g_i),\ \ D(g_j) \mapsto \bar{D}(g_j)$$

若 $\bar{D}(g_i) = \bar{D}(g_j)$，则:

$$X^{-1}D(g_i)X = X^{-1}D(g_j)X$$

可以得到:

$$D(g_i) = D(g_j)$$

因此定义的对应关系是单射。

最后证明定义的对应关系是群同态:

设 $X^{-1}D(g_i)X = \bar{D}(g_i), X^{-1}D(g_j)X = \bar{D}(g_j)$，则对应关系为:

$$D(g_i) \mapsto \bar{D}(g_i),\ \ D(g_j) \mapsto \bar{D}(g_j)$$

注意到:

$$X^{-1}D(g_i)D(g_j)X = X^{-1}D(g_i)XX^{-1}D(g_j)X = \bar{D}(g_i)\bar{D}(g_j)$$

于是:

$$D(g_i)D(g_j) \mapsto \bar{D}(g_i)\bar{D}(g_j)$$

因此，定义的对应关系是群同态。

可约表示和不可约表示

设 $D(G)$ 是群 G 的一个 m 维表示，若存在一个行列式不为零的矩阵 X ，使得 $\forall g_i \in G$ 都有:

$$\bar{D}(g_i) = X^{-1}D(g_i)X = \begin{bmatrix} D_1(g_i)_{k\times k} & M(g_i)_{k\times l} \\ \mathbf{0} & D_2(g_i)_{l\times l} \end{bmatrix}$$

则称 $D(G)$ 为群 G 的一个可约表示，否则称为不可约表示。

称一个群的表示矩阵是群的一个可约表示，即可以找到一个行列式不为零的矩阵，对群的表示矩阵进行相似变换后能够得到块状对角矩阵。

可以证明，准对角元 $D_\alpha(G)$ 的集合也分别构成群，且每一个 $D_\alpha(G) \equiv \{D_\alpha(g_i)|g_i \in G\}$ 都是群 G 的一个表示。

只要证明 $G \simeq D_1(G)$，就说明 $D_1(G)$ 是群 G 的一个表示。

建立如下的对应关系：

若

$$X^{-1}D(g_i)X = \begin{bmatrix} D_1(g_i) & M(g_i) \\ \mathbf{0} & D_2(g_i) \end{bmatrix}$$

则：

$$g_i \in G \mapsto D_1(g_i) \in D_1(G)$$

设

$$X^{-1}D(g_i)X = \begin{bmatrix} D_1(g_i) & M(g_i) \\ \mathbf{0} & D_2(g_i) \end{bmatrix}, \quad X^{-1}D(g_j)X = \begin{bmatrix} D_1(g_j) & M(g_j) \\ \mathbf{0} & D_2(g_j) \end{bmatrix}$$

则：

$$g_i \in G \mapsto D_1(g_i) \in D_1(G), \quad g_j \in G \mapsto D_1(g_j) \in D_1(G)$$

注意到：

$$\begin{aligned} X^{-1}D(g_ig_j)X &= X^{-1}D(g_i)D(g_j)X \\ &= X^{-1}D(g_i)XX^{-1}D(g_j)X \\ &= \begin{bmatrix} D_1(g_i) & M(g_i) \\ \mathbf{0} & D_2(g_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_1(g_j) & M(g_j) \\ \mathbf{0} & D_2(g_j) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} D_1(g_i)D_1(g_j) & D_1(g_i)M(g_j) + D_2(g_j)M(g_i) \\ \mathbf{0} & D_2(g_i)D_2(g_j) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是由定义的对应关系有：

$$g_ig_j \in G \mapsto D_1(g_i)D_1(g_j) \in D(G)$$

综上，约化后的准对角元构成的矩阵群都是群 G 的表示。

可约表示的约化

约化后的每个准对角元构成的矩阵群都分别构成群 G 的线性表示。若这些准对角元是可约表示，则可以继续约化，最后得到一个准对角元都是不可约表示的表示。

设 $\tilde{D}_k(G)$ 是 G 的第 k 个不等价、不可约表示（$k = 1, 2, \cdots, r$），将 $D(G)$ 的约化记为：

$$X^{-1}D(G)X = \bigoplus_{k=1}^{r} n_k \tilde{D}_k(G)$$

其中，

$$A \oplus B \equiv \begin{bmatrix} A & \\ & B \end{bmatrix}$$

写成矩阵的形式，即：

$$
X^{-1}D(G)X=\begin{bmatrix}\tilde{D}_1(G) & & & \\ & \ddots & & \\ & & \tilde{D}_1(G) & \\ & & & \ddots\end{bmatrix}
$$

$\mathrm{SO}(2)$ 群的表示

一维表示：

$$
D_1(g(\theta))\equiv D_1(\theta)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}
$$

这是一维表示，所以这是不可约表示。

二维表示：

$$
D_2(\theta)=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}
$$

三维表示：

$$
R_{\vec{\mathrm{k}}}(\theta)=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta & 0\\ \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}
$$

$$
R_{\vec{\mathrm{j}}}(\theta)=\begin{bmatrix}\cos\theta & 0 & \sin\theta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{bmatrix}
$$

$$
R_{\vec{\mathrm{i}}}(\theta)=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta\\ 0 & \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}
$$

这三个表示都是可约的。

平移群 $\mathrm{T}(a)$

一维表示：

$D_1(a)=1$

$D_2(a)=\mathrm{e}^{a}$

$D_3(a)=\mathrm{e}^{ca}$

二维表示：

$$
D_5(a)=\begin{bmatrix}1 & a\\ 0 & 1\end{bmatrix}
$$

n 维表示：

$$
D_6(a)
=\begin{bmatrix}

\end{bmatrix}
$$

n 阶循环群 $\mathrm{C}_n=\{a,a^2,\cdots,a^n=e\}$

一维表示：

$D_0(a)=1$，恒等表示

$D_1(a)=\exp(\mathrm{i}2\pi/n)$，真实表示

$D_k(a)=\exp(\mathrm{i}k(2\pi/n))$，一般表示

n 维表示：

循环群还可以对应到坐标的循环。

$$\begin{bmatrix} & & & 1 \\ 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_{n-1} \\ P_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} P_n \\ P_1 \\ \vdots \\ P_{n-2} \\ P_{n-1} \end{bmatrix}$$

表示1：

$$\bar{D}_1(a)=\begin{bmatrix} & & & 1 \\ 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\bar{D}_1(a^i)=\bar{D}_1^i(a)$$

表示2：

$$\bar{D}_2(a)=\bar{D}_1^2(a)$$

$$\bar{D}_2\left(a^i\right)=\bar{D}_2^i(a)$$

表示k：

$$\bar{D}_k(a)=\bar{D}_1^k(a)=\begin{bmatrix} \mathbf{0}_{k\times(n-k)} & E_{k\times k} \\ E_{(n-k)\times(n-k)} & \mathbf{0}_{(n-k)\times k} \end{bmatrix}$$

$D_k(\mathrm{C}_n)$ 与 $\bar{D}_k(\mathrm{C}_n)$ 同构，但不等价。

$D_k(\mathrm{C}_n)$ 是不可约表示，$\bar{D}_k(\mathrm{C}_n)$ 是可约表示。$D_1(\mathrm{C}_n),\cdots,D_n(\mathrm{C}_n)$ 是 C_n 群的所有（n）个不等价不可约表示。

标量函数的变换算符与表示的构造

标量函数

不随坐标的变换而改变。标量函数用于描述标量场。

- 它是空间坐标的函数。

- 在空间每一个坐标点处，标量函数 $\phi(x)$ 的值都是标量。

标量函数的变换算符

都物理系统（标量场）发生改变，有两种理解方式：

- 保持坐标轴不变而改变系统本身。
- 保持系统本身不变而改变坐标轴。

两种理解方式是等价的。

考虑标量函数的形式不随坐标的变换而改变，即：

$$\psi'\left(x'\right)=\psi(x)$$

从坐标 x 变换到 x' 的变换记为R，即：

$$R: x \mapsto x'$$

$$x'=Rx \ \text{ or } \ x=R^{-1}x'$$

P_R 是由 R 诱导出来的一个算符，其定义为：

$$\boxed{P_R\psi \equiv \psi'}$$

利用 P_R 可将 $\psi'(x')=\psi(x)$ 改写为：

$$\boxed{P_R\psi(Rx)=\psi(x)}$$

R 坐标变换；x 老坐标，ψ 老分布；Rx 新坐标，$P_R\psi$ 新分布。

将 Rx 视为老坐标，$P_R\psi$ 视为老分布，考虑坐标变换 R^{-1}，有：

$$P_{R^{-1}}P_R\psi(x)=P_R\psi(Rx)$$

两式对比可得：

$$\psi(x)=P_{R^{-1}}P_R\psi(x)$$

因此得到：

$$\boxed{P_{R^{-1}}=P_R^{-1}}$$

又 $\psi'(x')=\psi(x)=\psi(R^{-1}x')$

因此：

$$\psi'(x')=P_R\psi(x')=\psi(x)=\psi(R^{-1}x')$$

或：

$$\boxed{\psi'(x)=P_R\psi(x)=\psi\left(R^{-1}x\right)}$$

只要把原函数 $\psi(x)$ 的自变量 x 换成 $R^{-1}x$，再将 ψ 作用于 $R^{-1}x$ 就得到了 ψ 对 x 的作用。

例子：

$$\psi(\vec{r}) = xy$$

考虑如下的坐标变换:

$$R : x \mapsto x' = -x,\ \ y \mapsto y' = y,\ \ z \mapsto z' = z$$

容易求得其逆变换:

$$R : x \mapsto x' = -x,\ \ y \mapsto y' = y,\ \ z \mapsto z' = z$$

求 ψ':

$$\psi'(\vec{r}) = P_R\psi(\vec{r}) = P_{R^{-1}}P_R\psi(R^{-1}\vec{r}) = P_R^{-1}P_R\psi(R^{-1}\vec{r}) = \psi\left(R^{-1}\vec{r}\right) = -xy$$

$\{R\}$ 和 $\{P_R\}$ 同构

证明:

先证 P_R 是线性算符:

设

$$\eta(x) = a\psi(x) + b\phi(x)$$

则:

$$P_R\eta(x) = P_R\left[a\psi(x) + b\phi(x)\right]$$

$$P_R\eta(x) = \eta\left(R^{-1}x\right) = a\psi\left(R^{-1}x\right) + b\phi\left(R^{-1}x\right) = aP_R\psi(x) + bP_R\phi(x)$$

于是:

$$P_R\left[a\psi(x) + b\phi(x)\right] = aP_R\psi(x) + bP_R\phi(x)$$

再证 $P_{SR} = P_SP_R$:

$$\begin{aligned} P_{SR}\psi(x) &= \psi\left((SR)^{-1}x\right) \\ &= \psi\left(R^{-1}S^{-1}x\right) \\ &= P_R\psi\left(S^{-1}x\right) \\ &= P_SP_R\psi\left(x\right) \end{aligned}$$

对比可得:

$$P_{SR} = P_SP_R$$

再证 $\{R\} \simeq \{P_R\}$

建立对应关系: $R \mapsto P_R, \psi\left(R^{-1}x\right) = P_R\psi(x)$

设 $S \mapsto P_S, R \mapsto P_R$，则:

$$SR \mapsto P_{SR}$$

又 $P_{SR} = P_SP_R$，于是:

$$SR \mapsto P_SP_R$$

因此

$$\{R\} \simeq \{P_R\}$$

最后证这种对应关系是一一对应。

设 $R \neq S, R \mapsto P_R, S \mapsto P_S$，但 $P_R = P_S$

$$P_R\psi(x) = P_S\psi(x)$$

$$P_R\psi(x) = \psi\left(R^{-1}x\right), \quad P_S\psi(x) = \psi\left(S^{-1}x\right)$$

可得：

$$\psi\left(R^{-1}x\right) = \psi\left(S^{-1}x\right)$$

于是：

$$R = S$$

与假设矛盾，所以这种对应是一一对应。

线性表示的构造

可用一组完备的基矢 $\psi \equiv (\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n)$ 来展开一个函数空间中的任意函数。

考虑 P_R 对基矢 ψ_μ 的作用：

$$P_R\psi_\mu(x) = \sum_\nu \psi_\nu(x) D_{\nu\mu}(R)$$

矩阵形式：

$$P_R\begin{bmatrix}\psi_1 & \psi_2 & \cdots & \psi_n\end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix}P_R\psi_1 & P_R\psi_2 & \cdots & P_R\psi_n\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\psi_1 & \psi_2 & \cdots & \psi_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}D_{11}(R) & D_{12}(R) & \cdots & D_{1n}(R) \\ D_{21}(R) & D_2(R) & \cdots & D_{2n}(R) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{n1}(R) & D_{n2}(R) & \cdots & D_{nn}(R)\end{bmatrix}$$

可将上式简记为：

$$P_R\psi = \psi D(R)$$

可证明 $\{D(R)\}$ 是 $\{P_R\}$ 的一个 n 维线性表示，即：

$$\{P_R\} \simeq \{D(R)\}$$

证明：

- 表示的维数就是函数空间中完备基矢的个数。
- 函数空间满足 $P_R\psi_\mu \in$ 函数空间 ψ_μ，所以是不变空间。

对于这个函数空间的子空间：

若子空间及其补空间都是不变子空间，则对应的表示是完全可约表示。完全可约表示可以再约化。

若子空间是不变空间，其补空间不是不变空间，则对应的表示是不完全可约的。不完全可约可以华为准上三角阵的形式。

D_4 群的表示

表示空间为 $\mathbb{R}^3$

2.3 有限群表示理论的基本定理

定理1

有限群的线性表示等价于幺正表示。

设 $D(G)$ 是有限群 G 的一个线性表示，我们需要找出一个相似变换 X ，使得 $\forall g \in G$ 均有：

$$\bar{D}(g) \equiv X^{-1} D(g) X, \ \ \bar{D}^{\dagger}(g) \bar{D}(g) = E$$

把前式代入前后式得：

$$D^{\dagger}(g)\left(X X^{\dagger}\right)^{-1} D(g) = \left(X X^{\dagger}\right)^{-1}$$

定义如下的矩阵 H：

$$H \equiv \sum_{f \in G} D^{\dagger}(f) D(f)$$

显然 H 是一个厄米矩阵：

$$H^{\dagger} = H$$

由重排定理可知：

$$\begin{aligned} D^{\dagger}(g) H D(g) &= D^{\dagger}(g)\left(\sum_{f \in G} D^{\dagger}(f) D(f)\right) D(g) \\ &= \sum_{f \in G}[D(f) D(g)]^{\dagger}[D(f) D(g)] \\ &= \sum_{f \in G} D^{\dagger}(f g) D(f g) \\ &= \sum_{f \in G} D^{\dagger}(f) D(f) \\ &\equiv H \end{aligned}$$

因此只要找到 X 满足：

$$\left(X X^{\dagger}\right)^{-1} = H$$

若相似变换 X满足上式，则以 X 对线性表示 $D(g)$ 作相似变换得到的矩阵 $X^{-1} D(g) X$ 是幺正矩阵。

由于 H 是正定的厄米矩阵，因此可通过幺正的相似变换矩阵 U 把 H 对角化，对角元是正实数：

$$\Gamma \equiv U^{-1} H U = \operatorname{diag}\left(\Gamma_{11}, \Gamma_{22}, \cdots, \Gamma_{mm}\right)$$

定义：

$$\Gamma' \equiv \left[\operatorname{diag}\left(1/\sqrt{\Gamma_{11}}, 1/\sqrt{\Gamma_{22}}, \cdots, 1/\sqrt{\Gamma_{mm}}\right)\right]$$

可以证明，$X = U\Gamma' U^{-1}$ 满足 $\left(XX^\dagger\right)^{-1} = H$:

$$\begin{aligned}
\left(XX^\dagger\right)^{-1} &= \left(X^\dagger\right)^{-1} X^{-1} \\
&= \left(\left(U^{-1}\right)^\dagger \Gamma'^\dagger U^\dagger\right)^{-1} \left(U\Gamma'^{-1}U^{-1}\right) \\
&= \left(\left(U^\dagger\right)^{-1} \Gamma'^{-1} U^\dagger\right) \left(U\Gamma'^{-1}U^{-1}\right) \\
&= U\left(\Gamma'^{-1}\right)^2 U^{-1} \\
&= U\Gamma U^{-1} \\
&= H
\end{aligned}$$

综上，相似变换 $X = U\Gamma' U^{-1}$ 总可以把一个表示变换为幺正表示。

定理2

若 $D(G)$ 和 $\bar{D}(G)$ 为群 G 的等价和幺正表示，则一定存在一个幺正矩阵 U 使得:

$$\bar{D}(G) = U^{-1} D(G) U$$

定理3（舒尔定理）

舒尔定理一

设 $D(G)$ 为群 G 的不可约表示，且:

$$D(g)X = XD(g), \ \forall g \in G$$

则 M 为常数矩阵，即 $M = cE$

舒尔定理二

设 $D^{(1)}(G)$ 和 $D^{(2)}(G)$ 为群 G 的两个不等价不可约表示，维数分别为 m_1, m_2，设 X 为 $m_1 \times m_2$ 矩阵，若:

$$D_1(G)X = XD_2(G)$$

则:

$$X = \mathbf{0}$$

定理4：正交性定理

设群 G 有 r 个不等价不可约幺正表示 $D^{(u)}(G), u = 1, 2, \cdots, r$，则:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G} D_{\gamma\eta}^{(u)*}(g_\alpha) D_{\lambda\rho}^{(v)}(g_\alpha) = \frac{n_G}{n_u} \delta^{uv} \delta_{\gamma\lambda} \delta_{\eta\rho}$$

其中，n_G 为群 G 的阶，n_u 为第 u 个不可约表示 $D^{(u)}(G)$ 的维数。

定理5

有限群的不等价不可约表示的个数等于群的类的个数。

2.4 群的正则表示

群空间

若用有限群 G 的所有群元 $\{g_\alpha\}$ 作为基矢则由基矢

$$v=(g_1,g_2,\cdots,g_n)$$

所张成的线性空间称为群空间。

群空间内的矢量可以表达为这组基矢的线性叠加：

$$f=x_1g_1+x_2g_2+\cdots+x_ng_n=\begin{bmatrix}g_1 & g_2 & \cdots & g_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}\equiv vx$$

群的正则表示

以群空间为表示空间的表示称为正则表示。

群空间内任意矢量 f

$$g_\alpha:f\mapsto f'$$

$$\begin{aligned}f'&=g_\alpha f\\&=g_\alpha(x_1g_1+\cdots+x_ng_n)\\&=x_1g_\alpha g_1+\cdots+x_ng_\alpha g_n\\&=vD(g_\alpha)x\\&=v'x\\&=vx'\end{aligned}$$

两种理解：

（1）$v'=vD(g_\alpha)$，保持坐标不变而基矢变换；

（2）$x'=D(g_\alpha)x$，保持基矢不变而基矢变换。

例：求群 $G=\{g_1,g_2,g_3,g_4\}$ 的正则表示，乘法表如下：

	g_1	g_2	g_3	g_4
g_1	g_1	g_2	g_3	g_4
g_2	g_2	g_1	g_4	g_3
g_3	g_3	g_4	g_2	g_1
g_4	g_4	g_3	g_1	g_2

$$f = x_1 g_1 + x_2 g_2 + x_3 g_3 + x_4 g_4$$

以 g_2 为例，

$$\begin{aligned} f' &= g_2 f \\ &= x_1 g_2 g_1 + x_2 g_2 g_2 + x_3 g_2 g_3 + x_4 g_2 g_4 \\ &= x_1 g_2 + x_2 g_1 + x_3 g_4 + x_4 g_3 = v' x \\ &= x_2 g_1 + x_1 g_2 + x_4 g_3 + x_3 g_4 = v x' \\ &= v D(g_2) x \end{aligned}$$

从坐标变换的观点来看，

$$x' = \begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \\ x_4 \\ x_3 \end{bmatrix} = D(g_2) x$$

于是 g_2 的表示矩阵为：

$$D(g_2) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

从基矢变换的观点来看，

$$\begin{bmatrix} g_2 & g_1 & g_4 & g_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 & g_2 & g_3 & g_4 \end{bmatrix} D(g_2)$$

同样可得 g_2 的表示矩阵：

$$D(g_2) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

同理可得 g_1, g_3, g_4 的表示矩阵：

$$D(g_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad D(g_3) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad D(g_4) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

正则表示的特点

（1）除恒元外，其余群元的表示矩阵的对角元都为零

$$\chi(g_\alpha) = \begin{cases} n_G & , g_\alpha = e \\ 0 & , g_\alpha \neq e \end{cases}$$

（2）正则表示的维数为群 G 的阶数。

（3）$G \cong D(G)$

（4）任何有限群都有正则表示。

2.5 特征标相关理论

特征标

抽象群的线性表示建立了抽象群到矩阵群的一个同态关系。群元的特征标定义为该群元表示矩阵的迹:

$$\chi(g_\alpha) \equiv \mathrm{Tr} D(g_\alpha) = \sum_{i=1}^{n_D} D_{ii}(g_\alpha)$$

对于与 g_α 共轭的元素，他们的特征标为:

$$\begin{aligned}
\chi\left(f^{-1} g_\alpha f\right) &= \mathrm{Tr} D\left(f^{-1} g_\alpha f\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(D(f^{-1}) D\left(g_\alpha\right) D\left(f\right)\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(D(f) D(f^{-1}) D(g_\alpha)\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(D(f) D^{-1}(f) D(g_\alpha)\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(D(g_\alpha)\right)
\end{aligned}$$

这就是说，同类元素在表示 $D(G)$ 中的特征标相同，即特征标是类的函数。

定理1

若两个表示等价，则任意群元在两个表示下的特征标相同。

$$\bar{D}(g_\alpha) = X^{-1} D(g_\alpha) X$$

$$\begin{aligned}
\bar{\chi}(g_\alpha) &= \mathrm{Tr}\left(\bar{D}(g_\alpha)\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(X^{-1} D(g_\alpha) X\right) \\
&= \mathrm{Tr}\{D(g_\alpha)\} \\
&= \chi(g_\alpha)
\end{aligned}$$

定理2：特征标正交关系定理

若群 G 有 r 个不等价不可约表示 $D^{(u)}(G), u = 1, 2, \cdots, r$，则:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G} \chi^{(u)}(g_\alpha)^* \chi^{(v)}(g_\alpha) = n_G \delta^{uv}$$

其中，$\chi^{(u)}(g_\alpha)$ 为 g_α 在表示 $D^{(u)}(G)$ 中的特征标。

证明:

利用正交性定理:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G} D_{\sigma\delta}^{(u)*}(g_\alpha) D_{\lambda\rho}^{(v)}(g_\alpha) = \frac{n_G}{n_u} \delta^{uv} \delta_{\sigma\lambda} \delta_{\delta\rho}$$

令 $\delta = \sigma, \rho = \lambda$:

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G} D_{\sigma\sigma}^{(u)*}(g_\alpha) D_{\lambda\lambda}^{(v)}(g_\alpha) = \frac{n_G}{n_u}\delta^{uv}\delta_{\sigma\lambda}\delta_{\sigma\lambda}$$

对 σ, λ 求和：

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G}\left(\sum_\sigma D_{\sigma\sigma}^{(u)*}(g_\alpha)\right)\left(\sum_\lambda D_{\lambda\lambda}^{(v)}(g_\alpha)\right) = \frac{n_G}{n_u}\delta^{uv}\sum_{\sigma,\lambda}\delta_{\sigma\lambda}\delta_{\sigma\lambda}$$

由于 $\sum_{\sigma,\lambda}\delta_{\sigma\lambda}\delta_{\sigma\lambda} = \sum_\sigma \delta_\sigma\delta_\sigma = n_u$，因此：

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G}\chi^{(u)*}(g_\alpha)\chi^{(v)}(g_\alpha) = n_G\delta^{uv}$$

引入特征标表：

	g_1	g_2	$\cdots$	g_n
$D^{(1)}$	$\chi^{(1)}(g_1)$	$\chi^{(1)}(g_2)$	$\cdots$	$\chi^{(1)}(g_n)$
$D^{(2)}$	$\chi^{(2)}(g_1)$	$\chi^{(2)}(g_2)$	$\cdots$	$\chi^{(2)}(g_n)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$D^{(r)}$	$\chi^{(r)}(g_1)$	$\chi^{(r)}(g_2)$	$\cdots$	$\chi^{(r)}(g_n)$

特征标表的某一行元素为不同群元在某一不可约表示中的特征标，称为**特征标行矢量。**

特征标表的某一列元素为同一群元在各个不等价不可约表示中的特征标，称为**特征标列矢量。**

从特征标表来看，正交定理可以表述为：特征标表的任意不同两行正交，任意一行的模长为 n_G

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G}\chi^{(u)*}(g_\alpha)\chi^{(v)}(g_\alpha) = n_G\delta^{uv}$$

对于同一行，$u = v$，

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G}\left|\chi^{(u)}(g_\alpha)\right|^2 = n_G$$

也可以简记为：

$$\left|\chi^{(u)}(G)\right|^2 = n_G$$

这也是不可约表示必须满足的条件。

定理3：唯一分解定理

设 $D(G)$ 为 G 的一个表示，$D^{(u)}(G)$ 为 G 的所有 r 个不等价不可约表示，则由表示的约化知 $D(G)$ 可以约化为：

$$X^{-1}D(G)X = \bigoplus_{u=1}^{r} a_u D^{(u)}(G)$$

其中，a_u 是唯一确定的，由下式确定：

$$a_u = \frac{1}{n_G} \sum_{\alpha=1}^{n_G} \chi^*(g_\alpha)\chi^{(u)}(g_\alpha)$$

其中，$\chi(g_\alpha)$ 是群元 g_α 在表示 $D(G)$ 中的特征标，$\chi^{(u)}(g_\alpha)$ 是群元 g_α 在 G 的第 r 个不等价不可约表示 $D^{(u)}(G)$ 中的特征标，即：

$$\chi(g_\alpha) = \mathrm{Tr}\left(D(g_\alpha)\right), \ \ \chi^{(u)}(g_\alpha) = \mathrm{Tr}\left(D^{(u)}(g_\alpha)\right)$$

证明：

对 $X^{-1}D(G)X = \bigoplus_{u=1}^{r} a_u D^{(u)}(G)$ 两边同时求迹：

$$\chi(g_\alpha) = \sum_{u=1}^{r} a_u \chi^{(u)}(g_\alpha)$$

上式两边同乘 $\chi^{(v)*}(g_\alpha)$，再对 α 求和：

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G} \chi(g_\alpha)\chi^{(v)*}(g_\alpha) = \sum_{u=1}^{r} a_u \sum_{\alpha=1}^{n_G} \chi^{(u)}(g_\alpha)\chi^{(v)*}(g_\alpha) = \sum_{u=1}^{r} a_u n_G \delta_{uv} = n_G a_v$$

把下标 v 替换成 u 就得到：

$$a_u = \frac{1}{n_G} \sum_{\alpha=1}^{n_G} \chi^*(g_\alpha)\chi^{(u)}(g_\alpha)$$

练习：可约表示 $D(G)$ 的特征标行矢量的模方：

$$\sum_{\beta=1}^{n_G} \chi^*(g_\beta)\chi(g_\beta) \geqslant 2n_G$$

证明：

由唯一分解定理可知，可约表示 $D(G)$ 可以约化：

$$X^{-1}D(g_\beta)X = \bigoplus_{u=1}^{r} a_u D^{(u)}(g_\beta), \ \ a_u = \frac{1}{n_G} \sum_{\alpha=1}^{n_G} \chi^*(g_\alpha)\chi^{(u)}(g_\alpha)$$

两边同时求迹：

$$\chi(g_\beta) = \sum_{u=1}^{r} a_u \chi^{(u)}(g_\beta)$$

因此可约表示特征标矢量的模方为：

$$
\begin{aligned}
\sum_{\beta=1}^{n_G} \chi^*(g_\beta)\chi(g_\beta) &= \sum_{\beta=1}^{n_G} \left(\sum_{u=1}^{r} a_u \chi^{(u)*}(g_\beta) \right) \left(\sum_{v=1}^{r} a_v \chi^{(v)}(g_\beta) \right) \\
&= \sum_{u=1}^{r} \sum_{v=1}^{r} a_u a_v \sum_{\beta=1}^{n_G} \chi^{(u)*}(g_\beta)\chi^{(v)}(g_\beta) \\
&= \sum_{u=1}^{r} \sum_{v=1}^{r} a_u a_v \cdot n_G \delta_{uv} \\
&= n_G \sum_{u=1}^{r} a_u \sum_{v=1}^{r} a_v \delta_{uv} \\
&= n_G \sum_{u=1}^{r} a_u^2 \\
&\geqslant 2n_G
\end{aligned}
$$

唯一分解定理应用于正则表示：

正则表示中，恒元的表示矩阵为单位矩阵；非恒元的表示矩阵对角线元素全为零，因此特征标也为零。

$$
\begin{aligned}
a_u &= \frac{1}{n_G} \sum_{\alpha=1}^{n_G} \chi^*(g_\alpha)\chi^{(u)}(g_\alpha) \\
&= \frac{1}{n_G} \chi^*(e)\chi^{(u)}(e) \\
&= \frac{1}{n_G} n_G n_u \\
&= n_u
\end{aligned}
$$

其中，n_u 为第 u 个不可约表示的维数。

因此，由唯一分解定理：

$$
X^{-1} D_{\text{regular}}(g_\alpha) X = \bigoplus_{u=1}^{r} n_u D^{(u)}(g_\alpha)
$$

两边求迹：

$$
\chi(g_\alpha) = \sum_{u=1}^{r} n_u \chi^{(u)}(g_\alpha)
$$

对于 $g_\alpha = e$，

$$
n_G = \sum_{u=1}^{r} n_u^2
$$

这就是说，群的不等价不可约表示的维数的平方和等于群的阶。

比如，对于 D_3 群，$n_G = 6$，而：

$$
6 = 1^2 + 1^2 + 2^2
$$

因此 D_3 有 2 个一维不等价不可约表示和 1 个二维不等价不可约表示。

对于 D_4 群，$n_G = 8$，而：

$$8=1^2+1^2+1^2+1^2+2^2$$

因此 D_4 有 4 个一维不等价不可约表示和 1 个二维不等价不可约表示。

正则表示中，

$$\chi(g_\alpha)=\sum_{u=1}^{r}n_u\chi^{(u)}(g_\alpha)$$

正则表示中，恒元以外的群元的表示矩阵的对角元均为零，即当 $g_\alpha\neq e$ 时，有：

$$0=\chi(g_\alpha)=\sum_{u=1}^{r}n_u\chi^{(u)}(g_\alpha)=\sum_{u=1}^{r}n_u\chi^{(u)*}(g_\alpha),\quad g_\alpha\neq e$$

又因此 $n_u=\chi^{(u)}(e)$，于是：

$$\sum_{u=1}^{r}\chi^{(u)*}(e)\chi^{(u)}(g_\alpha)=0$$

即：特征表中，第一列与任意其他列正交。

由于同类群元的特征标相等，因此可把特征标表中同一类的元素合并。

	$C_1=\{e\}$	C_2	$\cdots$	C_n
$D^{(1)}$	1	1	$\cdots$	1
$D^{(2)}$	$\chi^{(2)}(C_1)=n_2$	$\chi^{(2)}(C_2)$	$\cdots$	$\chi^{(2)}(C_n)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$D^{(r)}$	$\chi^{(r)}(C_1)=n_r$	$\chi^{(r)}(C_2)$	$\cdots$	$\chi^{(r)}(C_n)$

约定：

- $D^{(1)}(G)$ 是一维恒等表示，所有元素在此表示下的特征标为 1
- $C_1=\{e\}$
- C_k 类也可以写成 n_kg_k，其中 $g_k\in C_k$，n_k 是 C_k 类中的群元的个数。

此时，对于特征标行矢量，特征标是类空间的矢量。

以 D_3 群为例：

	$\{e\}$	$\{d,f\}$	$\{a,b,c\}$
$D^{(1)}$	1	1	1
$D^{(2)}$	1	1	-1
$D^{(3)}$	2	x	y

由第一列与第二列正交：$x=-1$

由第一列与第三列正交：$y=0$

可以证明，以类为表头的特征标的任意两列正交：

$$\sum_{u=1}^{r} \chi^{(u)*}(C_\alpha)\chi^{(u)}(C_\beta) = \frac{n_G}{n_{C_\alpha}}\delta_{\alpha\beta}$$

其中，n_{C_α} 为 C_α 类中群元的个数。

特征标表的任意两行正交、任意两列正交：

$$\sum_{\alpha=1}^{n_G} \chi^{(u)*}(g_\alpha)\chi^{(v)}(g_\alpha) = n_G\delta_{uv}$$

$$\sum_{u=1}^{r} \chi^{(u)*}(g_\alpha)\chi^{(u)}(g_\beta) = \frac{n_G}{n_{C_\alpha}}\delta_{\alpha\beta}$$

任意两行正交也可以写为：

$$\sum_{\alpha=1}^{r} n_{C_\alpha}\chi^{(u)*}(C_\alpha)\chi^{(v)}(C_\alpha) = n_G\delta^{uv}$$

引入归一化的特征标行/列矢量：

$$\hat{\chi}^{(u)}(C_\alpha) \equiv \sqrt{\frac{n_{C_\alpha}}{n_G}}\chi^{(u)}(C_\alpha)$$

特征标正交定理可改写为：

$$\sum_{\alpha=1}^{r} \hat{\chi}^{(u)*}(C_\alpha)\hat{\chi}^{(v)}(C_\alpha) = \delta^{uv}$$

$$\sum_{u=1}^{r} \hat{\chi}^{(u)*}(C_\alpha)\hat{\chi}^{(u)}(C_\beta) = \delta_{\alpha\beta}$$

对于不可约表示，归一化特征标行、列矢量的模方为 1：

$$\sum_{\alpha=1}^{r} \left|\hat{\chi}^{(u)}(C_\alpha)\right|^2 = 1$$

$$\sum_{u=1}^{r} \left|\hat{\chi}^{(u)}(C_\alpha)\right|^2 = 1$$

对于可约表示，归一化的特征标行矢量的模方大于等于 2：

表示不可约的充要条件：

$$\sum_{u=1}^{r} \left|\hat{\chi}^{(u)}(C_\alpha)\right|^2 = 1$$

定理4

两个表示等价 $\Longleftrightarrow$ 特征标相同

证明：

充分性，即定理1，下面证明必要性：

设两个表示 $D, \bar{D}$ 的特征标相同，即：

$$\bar{\chi}(g_\alpha) = \chi(g_\alpha), \;\; g_\alpha \in G$$

唯一分解定理，$\forall g_\alpha \in G$，都有：

$$M^{-1}\bar{D}(g_\alpha)M = \bigoplus_{u=1}^{r} \bar{a}_u D^{(u)}(g_\alpha)$$

$$N^{-1}D(g_\alpha)N = \bigoplus_{u=1}^{r} a_u D^{(u)}(g_\alpha)$$

其中，

$$\bar{a}_u = \frac{1}{n_G}\sum_{\alpha=1}^{n_G} \bar{\chi}^*(g_\alpha)\chi^{(u)}(g_\alpha)$$

$$a_u = \frac{1}{n_G}\sum_{\alpha=1}^{n_G} \chi^*(g_\alpha)\chi^{(u)}(g_\alpha)$$

由于 $\bar{\chi}(g_\alpha) = \chi(g_\alpha)$，因此：

$$\bar{a}_u = a_u$$

于是：

$$M^{-1}\bar{D}(g_\alpha)M = N^{-1}D(g_\alpha)N$$

\$\$

\$\$

因此 $\bar{D}(g_\alpha)$ 和 $D(g_\alpha)$ 是等价表示。

特征标表的性质

（1）以类为表头的特征标表是个 $r \times r$ 方阵，r 为不等价不可约表示的个数，也等于类的个数。

（2）任意两行正交：

$$\sum_{\alpha=1}^{r} \hat{\chi}^{(u)*}(C_\alpha)\hat{\chi}^{(v)}(C_\alpha) = \delta^{uv}$$

（3）任意两列正交：

$$\sum_{u=1}^{r} \hat{\chi}^{(u)*}(C_\alpha)\hat{\chi}^{(u)}(C_\beta) = \delta_{\alpha\beta}$$

（4）特征标行/列矢量的模方为 1：

$$\sum_{\alpha=1}^{r}\left|\hat{\chi}^{(u)}(C_\alpha)\right|^2=1$$

$$\sum_{u=1}^{r}\left|\hat{\chi}^{(u)}(C_\alpha)\right|^2=1$$

（5）第一列：

$$\frac{1}{n_G}\sum_{u=1}^{r}n_u^2=1$$

其中 n_u 为 $D^{(u)}$ 的维数。

（6）商群的不可约表示也是原群的不可约表示。因此在寻找一个群的不可约表示时，可以先通过寻找不变子群来构建商群，然后找到商群的不可约表示，也就找到了原群的部分不可约表示。

（7）群 G 的一维非恒等表示和高维不可约表示相乘，还是 G 的不可约表示。

（8）设 $G=H_1\otimes H_2$，则群 G 的类的个数为其子群 H_1 和 H_2 的类的个数的乘积。

例1：

$\mathrm{C}_n=\left\{e,c_n,c_n^2,\cdots,c_n^{n-1}\right\}$

阿贝尔群，每个群元自成一类，共 n 个类，共 n 个不等价不可约表示。

$$\sum_{u=1}^{n}n_u^2=n$$

其中，n_u 是第 u 个不等价不可约表示的维数。

$$D^{(k)}(c_n)=\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{n}k\right),\ \ k=1,2,\cdots,n$$

$\mathrm{C}_6=\mathrm{C}_3\otimes\mathrm{C}_2$

例2：

D_n 群

$\mathrm{D}_2=\{e,c_2=\sigma_x,c_2'=\sigma_y,c_2''=\sigma_z\}$

$\mathrm{D}_3=\{e,d,f,a,b,c\}$

可以证明：$\mathrm{D}_{4n+2}=\mathrm{D}_{2n+1}\otimes\mathrm{C}_2$

第3章 点群

实正交群 $\mathrm{O}(3)$

$\mathbb{R}^3$ 空间中的矢量：

$$\vec{r}=x_1\vec{\mathrm{e}}_1+x_2\vec{\mathrm{e}}_2+x_3\vec{\mathrm{e}}_3$$

实正交变换：

$$g:\vec{r}\mapsto\vec{r}'$$

矩阵形式：

$$x\mapsto x'=gx$$

实正交变换前后，矢量模长不变：

$$|x'|=|x|$$

$$x'^{\mathrm{T}}x'=x^{\mathrm{T}}x$$

$$x'^{\mathrm{T}}x'=(gx)^{\mathrm{T}}(gx)=x^{\mathrm{T}}g^{\mathrm{T}}gx$$

$$g^{\mathrm{T}}g=E$$

两边取行列式：

$$|\det(g)|^2=1$$

实正交矩阵群 $\mathrm{O}(3)$

$$\mathrm{O}(3)\equiv\left\{g|g\text{为}3\times3\text{矩阵},g^{\mathrm{T}}g=E\right\}$$

实特殊（幺模）正交群 $\mathrm{SO}(3)$

$$\mathrm{SO}(3)\equiv\{g|g\in\mathrm{O}(3),\det(g)=1\}$$

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

$$\det\left(fgf^{-1}\right)=\det\left(f^{-1}fg\right)=\det(g)$$

因此：

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

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

$\mathrm{O}(3)$ 群的另一个不变子群是空间反演变换群 $\mathrm{V}_2=\{E,I\}$

$$E=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix},\quad I=\begin{bmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$$

以 $\mathrm{SO}(3)$ 为同态核构造商群：

$$\mathrm{O}(3)/\mathrm{SO}(3)=\{\mathrm{SO}(3),I\,\mathrm{SO}(3)\}\cong\{E,I\}$$

$$\mathrm{O}(3)=\mathrm{SO}(3)\cup I\,\mathrm{SO}(3)=\mathrm{SO}(3)\{E,I\}$$

$$\mathrm{O}(3)=\mathrm{SO}(3)\otimes\mathrm{V}_2$$

定理：$\forall g\in\mathrm{SO}(3)$，总存在一个非零矢量 $\vec{n}$ 使得：

$$g\vec{n}=\vec{n}$$

$$g\vec{n}=\vec{n}\Longleftrightarrow\det\left(g-E\right)=0$$

$$\begin{aligned}\det\left(g-E\right)&=\det\left(g-gg^{\mathrm{T}}\right)\\&=\det\left[g\left(E-g^{\mathrm{T}}\right)\right]\\&=\det\left(g\right)\det\left(E-g^{\mathrm{T}}\right)\\&=\det\left(E-g^{\mathrm{T}}\right)\\&=\det\left[\left(E-g^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\right]\\&=\left(-1\right)^{3}\det\left(g-E\right)\\&=-\det\left(g-E\right)\end{aligned}$$

因此：

$$\det\left(g-E\right)=0$$

此定理表明 $\mathrm{SO}(3)$ 的任一元素 g 可表达为绕某一转动轴 $\vec{n}$ 逆时针转动 ω 角度的操作：

$$g=C_{\vec{n}}(\omega)$$

标记一个转动的三个参数的取值为：

$$0\leqslant\theta\leqslant\pi,\ \ 0\leqslant\varphi\leqslant2\pi,\ \ 0\leqslant\omega\leqslant\pi$$

高维空间一般只讨论在哪一个平面内转动。

$\mathrm{SO}(3)$ 群的共轭类

$\forall f=C_{\vec{k}}(\omega)\in\mathrm{SO}(3)$，与 f 共轭的元素为：

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

注意到：

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

因此共轭元素 $gC_{\vec{k}}(\omega)g^{-1}$ 的转动轴为 $g\vec{k}$

因此可以把共轭元素记为：

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

可以证明（求迹），

$$\omega'=\omega$$

因此，$\mathrm{SO}(3)$ 群中转动角度相同的群元在同一类中。

$C_{g\vec{k}}(\omega)=gC_{\vec{k}}(\omega)g^{-1}$ 可以理解为：绕转动轴 $g\vec{k}$ 转动 ω 角度这一操作可以分解为：

（1）g^{-1}：g^{-1} 这一操作作用在 $g\vec{k}$ 上就得到 $\vec{k}$

（2）$C_{\vec{k}}(\omega)$：$C_{\vec{k}}(\omega)$ 这一操作就是绕 $\vec{k}$ 轴转动 ω

（3）g：g 这一操作作用在 $\vec{k}$ 上就得到 $g\vec{k}$

$\mathrm{SO}(3)$ 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）$\exists g \in G$ 使得 $\vec{k}_2 = g\vec{k}_1$

例1：

$\mathrm{C}_n = \left\{c_n, c_n^2, \cdots, c_n^n = e\right\}$

$$c_n = C_{\vec{k}}\left(\frac{2\pi}{n}\right)$$

$$c_n^{n-1} = C_{-\vec{k}}\left(\frac{2\pi}{n}\right)$$

但不存在一个群元能将 $\vec{k}$ 变换到 $-\vec{k}$，因此 C_n 群的每个群元自成一类。

例2：

D_3 群

$$d = C_{\vec{k}}\left(\frac{2\pi}{3}\right)$$

$$f = C_{\vec{k}}\left(\frac{4\pi}{3}\right) = C_{-\vec{k}}\left(\frac{2\pi}{3}\right)$$

注意到，a, b, c 作用在 $\vec{k}$ 上都将 $\vec{k}$ 变换为 $-\vec{k}$，因此 d, f 在同个类中。

例3：

D_4 群

D_n 群的类的个数，看 n 奇偶

三维欧式空间中绕任意轴的转动

可以找到一个变换 g 使得：

$$\hat{C}_{\hat{n}}(\theta, \varphi) = gC_{\vec{k}}(\omega)g^{-1} = C_{g\vec{k}}(\omega)$$

g 把 $\vec{k}$ 轴变换到 $\hat{n}$ 轴，该操作可分解为：

$$C_{\vec{j}}(\theta) : \vec{k} \to \hat{n}'$$

$$C_{\vec{k}}(\varphi) : \hat{n}' \to \hat{n}$$

因此：

$$g = C_{\vec{k}}(\varphi)C_{\vec{j}}(\varphi) \equiv S(\varphi, \theta) = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix}$$

$C_{\hat{n}}(\omega)$ 的指数表示

$$\sigma_1=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\ \sigma_2=\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix},\ \sigma_3=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix},\ E=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$

$$\mathrm{Tr}\sigma_i=0$$

$$\det\sigma_i=-1$$

$$\sigma_i\sigma_j=E\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

$$\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\sigma_j\right)=2\delta_{ij}$$

$$\mathrm{e}^A=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^n}{n!}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\sigma_2}&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\mathrm{i}\omega\sigma_2\right)^n\\ &=E\left(1-\frac{\omega^2}{2!}+\frac{\omega^4}{4!}+\cdots\right)-\mathrm{i}\sigma_2\left(\omega-\frac{\omega^3}{3!}+\frac{\omega^5}{5!}-\cdots\right)\\ &=E\cos\omega-\mathrm{i}\sigma_2\sin\omega\\ &=\begin{bmatrix}\cos\omega & -\sin\omega\\ \sin\omega & \cos\omega\end{bmatrix}\end{aligned}$$

三维：

$$T_3=\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i} & 0\\ \mathrm{i} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T_3}=\begin{bmatrix}\cos\omega & -\sin\omega & 0\\ \sin\omega & \cos\omega & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}=C_{\vec{k}}(\omega)$$

$$T_2=\begin{bmatrix}0 & 0 & \mathrm{i}\\ 0 & 0 & 0\\ -\mathrm{i} & 0 & 0\end{bmatrix}$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T_2}=\begin{bmatrix}\cos\omega & 0 & \sin\omega\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\omega & 0\cos\omega & \end{bmatrix}=C_{\vec{j}}(\omega)$$

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

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T_1}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\omega & -\sin\omega\\ 0 & \sin\omega & \cos\omega\end{bmatrix}=C_{\vec{i}}(\omega)$$

可以证明：

$$ST_3S^{-1}=n_1T_1+n_2T_2+n_3T_3$$

$$
\begin{aligned}
C_{\hat{n}(\theta,\varphi)}(\omega) &= S(\varphi,\theta)C_{\vec{k}}(\omega)S^{-1}(\varphi,\theta) \\
&= S\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T_3}S^{-1} \\
&= S\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i}\omega T_3)^n}{n!}\right)S^{-1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[S\left(-\mathrm{i}\omega T_3\right)S^{-1}\right]\left[S\left(-\mathrm{i}\omega T_3\right)S^{-1}\right]\cdots\left[S\left(-\mathrm{i}\omega T_3\right)S^{-1}\right] \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[S\left(-\mathrm{i}\omega T_3\right)S^{-1}\right]^n \\
&= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega S T_3 S^{-1}} \\
&= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega n_i T_i}
\end{aligned}
$$

令：

$$\omega_i = \omega n_i$$

则：

$$C_{\hat{n}(\theta,\varphi)}(\omega) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i T_i}$$

其中，

$$\begin{bmatrix}\omega_1\\ \omega_2\\ \omega_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\omega n_1\\ \omega n_2\\ \omega n_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\omega\sin\theta\cos\varphi\\ \omega\sin\theta\sin\varphi\\ \omega\cos\theta\end{bmatrix}$$

三个参数 的取值范围：

$$0 \leqslant \theta \leqslant \pi,\ \ 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi,\ \ 0 \leqslant \omega \leqslant \pi$$

球内不同的点代表不同的转动。

球面上关于球心对称的两个点对应同一个转动。

点群

点群的定义

$\mathrm{O}(3)$ 群的有限子群称为点群。

点群可分为两类：

第一类点群只包含转动元素，$\det(R) = 1$

第二类点群除了转动元素还包含反演元素，$\det(R) = \pm 1$

对称操作和对称元素

在 $\mathbb{R}^3$ 空间，对称操作指那些使系统保持不变的操作，

对称元素是与对称操作对应的三维空间的子集。

（1）反演操作

$$I = \begin{bmatrix} -1 & \end{bmatrix}$$

$$I\vec{r} = -\vec{r}$$

对称元素：反演中心 O

（2）关于某一平面进行反射操作

例如，$\mathbb{R}^3$ 空间，关于 xy 平面的反射操作为 $\sigma_{\vec{k}}$

反射操作 $\sigma_{\vec{k}}$ 的对称元素就是 xy 平面。

（3）转动操作 $C_{\hat{m}}\left(\frac{2\pi}{n}\right)$

对称元素为转动轴 $\hat{m}$

（4）转动反演操作 $IC_{\hat{m}}(\frac{2\pi}{n})$

对称元素为转动反演轴

第一类点群

（1）n 阶循环群 C_n

Abel 群，每个元素自成一类

有 n 个不等价不可约表示，第 k 个不等价不可约表示：

$$

$$

（2）二面体群 D_n

$\mathrm{D}_2 = \{e, c_{2z}, c_{2x}, c_{2y}\}$

$\mathrm{D}_6 = \{\}$

（3）正四面体对称群 T（12 阶群）

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

T 群共有四个类：

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

T 的非平庸不变子群：$\mathrm{D}_2 = \left\{e, c_2^{(2)}, c_2^{(3)}, c_2^{(4)}\right\}$（由两个类组成）

对应的商群：$\mathrm{T}/\mathrm{D}_2 = \left\{\mathrm{D}_2, c_{3(1)}\mathrm{D}_2, c_{3(1)}^2\mathrm{D}_2\right\}$

商群 T/D_2 的特征标表：

	D_2	$c_3^{(1)}\mathrm{D}_2$	$\left(c_3^{(1)}\right)^2\mathrm{D}_2$
E	1	1	1

	D_2	$c_3^{(1)}\mathrm{D}_2$	$\left(c_3^{(1)}\right)^2\mathrm{D}_2$
E'			
E''			

（4）正八面体对称群 O（24 阶群）

- 恒元自成一类：$\{e\}$
- 由 $c_{4(i)}$ 或 $c_{3(i)}$ 联系的 6 个 2 阶轴：$\left\{c_{2(i)}, i=1,2,\cdots,6\right\}$

有 5 个不等价不可约表示

$$24 = 1^2 + 1^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2$$

一个不变子群：T

另一个不变子群：D_2

（5）正十二面体（二十面）体对称群 Y（60 阶群）

- 对面的中心连线有 6 条，为五阶轴：
- 对顶角的连线有 10 条，为三阶轴：
- 对顶边的连线有 15 条，为二阶轴：

晶体点群

理想晶体与晶体点群

理想晶体指的是由全同的结构单元在空间中无限次重复构成，其结构用晶格来描述。

晶格中的点可以用三个线性无关的矢量构成的基矢来描述：

$$\vec{r} = x_1\vec{v}_1 + x_2\vec{v}_2 + x_3\vec{v}_3$$

晶体点群 G 就是把晶格 L 映射为自身的点群。

晶格在群元操作下的变换可看成基矢的变换：

$$g : \vec{v}_i \to \vec{v}_i' = \sum_{k=1}^{3} \vec{v}_k g_{ki}, \quad g \in G$$

其中，g_{ki} 必须为整数。

$$\vec{v}' = \vec{v} g$$

$$\begin{bmatrix}\vec{v}_1' & \vec{v}_2' & \vec{v}_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\vec{v}_1 & \vec{v}_2 & \vec{v}_3\end{bmatrix} g$$

晶体制约定理

设 L 为晶格，G 为 L 的晶体点群，则 G 的转动元素只能由 E, c_2, c_3, c_4, c_6 生成；转动反演元素只能由 $I, Ic_2, Ic_3, Ic_4, Ic_6$ 生成。

证明：

设 $g \in G$，则：

$$g : \vec{v} \mapsto \vec{v}' = \vec{v} g$$

$$\vec{v}_i \mapsto \vec{v}_i' = \vec{v}_k g_{ki}$$

其中，$g_{ki} = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$

$$\mathrm{Tr}\,(g) = \sum_{i=1}^{\infty} g_{ii} \in \mathbb{Z}$$

另一方面，$g \in \mathrm{O}(3)$，于是 g 可分解为：

$$g = f C_{\vec{k}}(\omega) f^{-1} \quad \text{or} \quad g = f I C_{\vec{k}}(\omega) f^{-1}$$

其中，

$$C_{\vec{k}}(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\omega & -\sin\omega & 0 \\ \sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{Tr}\,(g) = \mathrm{Tr}\left(C_{\vec{k}}(\omega)\right) \quad \text{or} \quad \mathrm{Tr}\,(g) = \mathrm{Tr}\left(I C_{\vec{k}}(\omega)\right)$$

$$\mathrm{Tr}\,(g) = \pm\left(2\cos\omega + 1\right) \in \mathbb{Z}$$

因此：

32 种晶体点群

第一类晶体点群有 11 种：

$$\mathrm{C}_1, \mathrm{C}_2, \mathrm{C}_3, \mathrm{C}_4, \mathrm{C}_6, \mathrm{C}_2, \mathrm{D}_3, \mathrm{D}_4, \mathrm{D}_6, \mathrm{T}, \mathrm{O}$$

第二类晶体点群有 21 种：

C_{nh} 群（$n = 1, 2, 3, 4, 6$）：由 c_n 和水平镜面 $\sigma_h = I c_2$ 生成，包含 n 个转动和 n 个转动反演，为 $2n$ 阶阿贝尔群。

$$\mathrm{C}_{1h} = \{E, \sigma_h\} = \{E, I c_2\}$$

$$\mathrm{C}_{2h} = \{E, c_2, \sigma_h, c_2\sigma_h\} = \{E, c_2\} \otimes \{E, \sigma_h\} = \mathrm{C}_2 \otimes \mathrm{C}_{1h} = \{E, c_2, I c_2, I\} = \{E, c_2\} \otimes \{E, I\} = \mathrm{C}_2 \otimes \mathrm{C}_i$$

$$\mathrm{C}_{3h} = \left\{E, c_3, c_3^2, \sigma_h, c_3\sigma_h, c_3^2\sigma_h\right\} = \mathrm{C}_3 \otimes \mathrm{C}_{1h}$$

$$\mathrm{C}_{4h} = \mathrm{C}_4 \otimes \mathrm{C}_{1h} = \mathrm{C}_4 \otimes \mathrm{C}_i$$

C_{nv} 群（$n = 2, 3, 4, 6$）：由 c_n 群与过此轴的垂直镜面 σ_v 生成，为 $2n$ 阶群。

$$\mathrm{C}_{2v} = \{E, c_2, \sigma_v, c_2\sigma_v\}$$

S_{2n} 群（$n = 1, 2, 3$）：仅包含偶数阶的转动反演，是 $2n$ 阶群。

m 阶转动反演定义为：

$$s_m \equiv s_k(2\pi/m) = \sigma_h c_m = \sigma_h c_{\vec{k}}(2\pi/m) = I c_2 c_{\vec{k}}(2\pi/m) = I c_{\vec{k}}(\pi + 2\pi/m)$$

$$s_{2n} = \sigma_h c_{2n} = I c_2 c_{2n} = I c_{2n}^{n+1}$$

S_2：

$$s_2 = Ic_2^2 = I$$

$$\mathrm{S}_2 = \{E, I\}$$

S_4:

$$s_4 = Ic_4^3$$

$$\mathrm{S}_4 = \left\{E, I, c_4^2, Ic_4^3\right\}$$

S_6:

$$s_6 = Ic_6^4 = Ic_3^2$$

$$\mathrm{S}_6 = \left\{E, c_3, c_3^2, I, Ic_4, Iv_3^2\right\} = \mathrm{C}_3 \otimes \mathrm{C_i}$$

D_{nh} 群（$n = 2, 3, 4, 6$）：由 D_n 和水平镜面 σ_h 构成，为 $4n$ 阶群。

$$\mathrm{D}_{nh} = \mathrm{D}_n \otimes \mathrm{C}_{1h} = \mathrm{D}_n \otimes \mathrm{C_i}$$

D_{nd} 群（$n = 2, 3$）：在 D_n 群的基础上加入了垂直反射镜面。

T_h 群：$n = 4, r = 8$

T_d 群：$n = 24, r = 5$

O_h 群：$n = 48, r = 10$

第4章 李群与李代数

4.1 李群的定义和线性表示

李群的定义

李群 G 是一种特殊的连续群，群元 $g \in G$ 可以用 r 个独立实参数 $\alpha \equiv (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r)$ 来标记：

$$g(\alpha) \equiv g(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_r)$$

参数 α 可在有限或无限范围内连续变化。α 的所有取值构成一个参数空间，称为群参数空间。

若 $g(\alpha)$ 满足以下 5 个条件，则称群 $G = \{g(\alpha)\}$ 为 r 阶李群：

（1）封闭性：对于任意给定的参数 α 和 β，总可以在群参数空间中找到 γ，使得：

$$g(\gamma) = g(\alpha)g(\beta)$$

参数 γ 为实参数 α, β 的实函数：

$$\gamma = f(\alpha, \beta)$$

即：

$$\gamma_i = f_i(\alpha_1, \cdots, \alpha_r; \beta_1, \cdots, \beta_r)$$

称为李群的结构函数。

（2）结合律：

$$[g(\alpha)g(\beta)]\,g(\gamma)=g(\alpha)\,[g(\beta)g(\gamma)]$$

也即：

$$f(f(\alpha,\beta),\gamma)=f(\alpha,f(\beta,\gamma))$$

（3）存在恒元 $g(\alpha_0)$：群参数空间中存在参数 α_0，使得对任意群参数 α 都有：

$$g(\alpha)=g(\alpha_0)g(\alpha)=g(\alpha)g(\alpha_0)$$

也即：

$$\alpha=f(\alpha_0,\alpha)=f(\alpha,\alpha_0)$$

（4）存在逆元：对任意群参数 α，存在群参数 $\bar{\alpha}$，使得：

$$g(\alpha)g(\bar{\alpha})=g(\bar{\alpha})g(\alpha)=g(\alpha_0)$$

也即：

$$\alpha_0=f(\alpha,\bar{\alpha})=f(\bar{\alpha},\alpha)$$

（5）结构函数 $\gamma=f(\alpha,\beta)$ 是解析函数。

- 通常选择 $\alpha_0=0$，即 $(\alpha_{01},\alpha_{02},\cdots,\alpha_{0r})=(0,0,\cdots,0)$ 作为恒元对应的群参数的取值。
- 若 α 的取值范围有界，则称李群 G 为紧致李群。
- 上面的描述中，所有的希腊字母均代表一组参数。
- 当 α,β 是小量时，$f(\alpha+\beta)=\alpha+\beta$
- 当 α 是小量时，$\bar{\alpha}=-\alpha$，其中 $g(\bar{\alpha})=g^{-1}(\alpha)$
- 连通性：一个李群如果具有如下性质，则称为单连通的：任意群元都能连续地变到恒元。/任意群元所对应地群参数都能连续地经过群参数允许区域变到零。

n 维空间中带 r 个实参数的线性坐标变换

$$x_i'=\varphi_i(x_1,x_2,\cdots,x_n;\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r),\ \ i=1,2,\cdots,n$$

简写为：

$$x_i'=\varphi_i(x;\alpha)$$

矩阵形式：

$$\begin{bmatrix}x_1'\\x_2'\\\vdots\\x_n'\end{bmatrix}=g(\alpha)\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}$$

满足前面 5 个条件的 $g(\alpha)$ 构成 r 阶李群 $G=\{g(\alpha)\}$

李群的线性表示

李群的线性表示是一种将群元映射到表示矩阵的同态关系：

$$G=\{g(\alpha)\}\to D(G)=\{D(g_\alpha)\equiv D(\alpha)\}$$

其中 $D(\alpha)$ 称为 α 的函数矩阵，满足李群的法则：

$$D(\alpha)D(\beta)=D(\gamma),\ \ \gamma=f(\alpha,\beta)$$

$$D(\alpha_0)D(\alpha)=ED(\alpha)=D(\alpha)$$

$$D(\alpha)D(\bar{\alpha})=D(\alpha_0)=E,\ \ D(\bar{\alpha})=D^{-1}(\alpha)$$

还要求 $D(\alpha)$ 是 2 阶光滑的。

结构函数不依赖于表示。只要两个群同构，它们的结构函数就是一致的。李群的结构函数只有李群的结构决定。

李群的线性表示的生成元

若在恒元附近（群参数 α 在 α_0 附近），α 与恒元附近的群元的矩阵表示存在一一对应关系，则可以将 $D(\alpha)$ 在 α_0 附近展开：

$$D(\alpha)=D(\alpha_0)+\left.\frac{\partial D(\alpha)}{\partial\alpha_k}\right|_{\alpha=\alpha_0}(\alpha_k-\alpha_{0k})=E+(\alpha_k-\alpha_{0k})I_k$$

其中，

$$I_k\equiv\left.\frac{\partial D(\alpha)}{\partial\alpha_k}\right|_{\alpha=\alpha_0}$$

为李群的线性表示的生成元。

若 $\alpha_0=0$，则上式化简为：

$$D(\alpha)=E+\left.\frac{\partial D(\alpha)}{\partial\alpha_k}\right|_{\alpha=0}\alpha_k\equiv E+\alpha_k I_k$$

引入：

$$\tilde{I}_k\equiv\mathrm{i}I_k$$

则：

$$D(\alpha)=E-\mathrm{i}\alpha_k\tilde{I}_k$$

生成元的线性无关性

r 阶李群的生成元是线性无关的。

证明：

假设 r 个 I_k 是线性相关的，则存在一组不全为零的系数 $\{C_k\}$ 使得：

$$C_kI_k=0$$

引入一个小量 $\lambda\ll 1$，有：

$$\lambda C_kI_k=0$$

记 $\alpha_k=\lambda C_k\ll 1$，即 $\alpha=\lambda C\neq 0$

$$D(\alpha)=D(\lambda C)=E+\lambda C_kI_k=E=D(0)$$

于是 $\alpha=0$，即 $\lambda C=0$，于是

$$C_k = 0$$

这与假设 C_k 不全为零矛盾。

几个例子

$\mathrm{SO}(2)$ 群

$\mathrm{SO}(2)$ 群只有一个独立的群参数，因此是**一阶**李群。

表示矩阵为：

$$D(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\omega & -\sin\omega \\ \sin\omega & \cos\omega \end{bmatrix}, \ \ \omega \in [0, 2\pi]$$

群参数 ω 有界，因此 $\mathrm{SO}(2)$ 是**紧致**的。

当 $\omega = 0$，$D(0) = E$，因此 $\omega_0 = 0$ 是恒元对应的群参数的取值。

生成元的定义：

$$I \equiv \frac{\partial D(\omega)}{\partial \omega}\bigg|_{\omega=0} = \begin{bmatrix} -\sin\omega & -\cos\omega \\ \cos\omega & -\sin\omega \end{bmatrix}\bigg|_{\omega=0} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

当 $\omega \ll 1$，

$$D(\omega) = E + \omega I = \begin{bmatrix} 1 & -\omega \\ \omega & 1 \end{bmatrix}$$

$\mathrm{GL}(2, \mathbb{R})$ 群：2 维空间实线性变换群

表示矩阵为：

$$D(\alpha) = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 \\ \alpha_3 & \alpha_4 \end{bmatrix}, \ \ \mathrm{det} D(\alpha) \neq 0$$

确定恒元对应的群参数 α_0 的取值：

$$\alpha_0 = (\alpha_{01}, \alpha_{02}, \alpha_{03}, \alpha_{04}) = (1, 0, 0, 1)$$

生成元：

$$I_k \equiv \frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_k}\bigg|_{\alpha=\alpha_0}$$

$$I_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \ \ I_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \ \ I_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \ \ I_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

当 α 接近 $\alpha_0 = (1, 0, 0, 1)$ 时，

$$D(\alpha) = E + (\alpha_k - \alpha_{0k}) I_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 \\ \alpha_3 & \alpha_4 \end{bmatrix}$$

$\mathrm{GL}(n, \mathbb{R})$：$n$ 维空间实线性变换群

表示矩阵为：

$$D(\alpha)=\begin{bmatrix}\alpha_{11} & \cdots & \alpha_{1n}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \alpha_{n1} & \cdots & \alpha_{nn}\end{bmatrix},\ \det D(\alpha)\neq 0$$

共 n^2 个群参数。

恒元对应的群参数的取值为：

$$\alpha_0=\begin{bmatrix}1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1\end{bmatrix}\text{或}\alpha_{0ij}=\delta_{ij}$$

生成元：

$$I_{ij}\equiv\left.\frac{\partial D(\alpha)}{\partial\alpha_{ij}}\right|_{\alpha=\alpha_0}$$

$$[I_{ij}]_{pq}=\delta_{ip}\delta_{jq}$$

生成元 I_{ij} 的 i 行 j 列矩阵元为 1，其他矩阵元为零。

生成元对易关系：

$$[I_{ij},I_{kl}]=I_{ij}I_{kl}-I_{kl}I_{ij}$$

$$\begin{aligned}[I_{ij},I_{kl}]_{pq}&=(I_{ij}I_{kl})_{pq}-(I_{kl}I_{ij})_{pq}\\&=\sum_m(I_{ij})_{pm}(I_{kl})_{mq}-\sum_n(I_{kl})_{pn}(I_{ij})_{nq}\\&=\sum_m\left(\delta_{ip}\delta_{jm}\cdot\delta_{km}\delta_{lq}\right)-\sum_n\left(\delta_{kp}\delta_{ln}\cdot\delta_{in}\delta_{jq}\right)\\&=\delta_{ip}\delta_{jk}\delta_{lq}-\delta_{kp}\delta_{li}\delta_{jq}\\&=\delta_{jk}(\delta_{ip}\delta_{lq})-\delta_{li}(\delta_{kp}\delta_{jq})\\&=\delta_{jk}(I_{il})_{pq}-\delta_{li}(I_{kj})_{pq}\end{aligned}$$

因此：

$$[I_{ij},I_{kl}]=\delta_{jk}I_{il}-\delta_{li}I_{kj}$$

二维实特殊线性变换群：$\mathrm{SL}(2,\mathbb{R})$（3 阶非紧致李群）

表示矩阵为：

$$D(\alpha)=\begin{bmatrix}\alpha_1 & \alpha_2\\ \alpha_3 & \alpha_4\end{bmatrix},\ \det D(\alpha)=1\Longrightarrow\alpha_4=\frac{1+\alpha_2\alpha_3}{\alpha_1}$$

$$D(\alpha)=\begin{bmatrix}\alpha_1 & \alpha_2\\ \alpha_3 & \frac{1+\alpha_2\alpha_3}{\alpha_1}\end{bmatrix}$$

恒元对应的群参数：

$$D(\alpha_0)=E=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\Longrightarrow\alpha_0=(\alpha_{01},\alpha_{02},\alpha_{03})=(1,0,0)$$

生成元：

$$I_1 \equiv \frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_1}\bigg|_{\alpha=\alpha_0} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{-(1+\alpha_2\alpha_3)}{\alpha_1^2} \end{bmatrix}\bigg|_{\alpha=\alpha_0} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$I_2 \equiv \frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_2}\bigg|_{\alpha=\alpha_0} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & \frac{\alpha_3}{\alpha_1} \end{bmatrix}\bigg|_{\alpha=\alpha_0} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$I_3 \equiv \frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_3}\bigg|_{\alpha=\alpha_0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & \frac{\alpha_2}{\alpha_1} \end{bmatrix}\bigg|_{\alpha=\alpha_0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

生成元对易关系：

$$\begin{aligned} [I_1, I_2] &= I_1 I_2 - I_2 I_2 \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= 2I_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [I_2, I_3] &= I_2 I_3 - I_3 I_2 \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ &= I_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [I_3, I_1] &= I_3 I_1 - I_1 I_3 \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \\ &= 2I_3 \end{aligned}$$

$\mathrm{SO}(3)$ 群（3 阶紧致李群）

$\mathrm{SO}(3)$ 群元可用三个参数 φ, θ, ω 表示：

$$C_{\hat{n}(\theta,\varphi)}(\omega) = S(\varphi,\theta) C_{\vec{k}}(\omega) S^{-1}(\varphi,\theta)$$

对于上式，当 $\omega = 0$，任意的 θ, φ 都对应着李群表示矩阵的恒元。也就是说，在恒元 E 附近，参数 $\alpha = (\theta, \varphi, \omega)$ 与群元不是一一对应的。因此，这组参数不能用于求李群线性表示的生成元。

指数表示：

$$D(\omega) = C_{\hat{n}(\theta,\varphi)}(\omega) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i T_i}$$

$$T_1=\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{bmatrix},\ T_2=\begin{bmatrix}0&0&\mathrm{i}\\0&0&0\\-\mathrm{i}&0&0\end{bmatrix},\ T_3=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&0\\0&0&0\end{bmatrix},$$

$$\begin{cases}\omega_1=\omega\sin\theta\cos\varphi\\\omega_2=\omega\sin\theta\sin\varphi\\\omega_3=\omega\cos\theta\end{cases}$$

只有当 $(\omega_1,\omega_2,\omega_3)=(0,0,0)$ 时，$D(\omega)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\mathrm{i}\mathrm{T}_\mathrm{i}}=E$。因此可选择群参数 $\omega=(\omega_1,\omega_2,\omega_3)$ 对应的指数表示来求生成元。

生成元：

$$I_1\equiv\left.\frac{\partial D(\omega)}{\partial\omega_1}\right|_{\omega=\omega_0}=-\mathrm{i}T_1=\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{bmatrix}$$

$$I_2\equiv\left.\frac{\partial D(\omega)}{\partial\omega_2}\right|_{\omega=\omega_0}=-\mathrm{i}T_2=\begin{bmatrix}0&0&1\\0&0&0\\-1&0&0\end{bmatrix}$$

$$I_3\equiv\left.\frac{\partial D(\omega)}{\partial\omega_3}\right|_{\omega=\omega_0}=-\mathrm{i}T_3=\begin{bmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}$$

对易关系：

$$[I_i,I_j]=\varepsilon_{ijk}I_k$$

二维特殊幺正变换群 $\mathrm{SU}(2)$ 群

$$D(\alpha)=\begin{bmatrix}a&b\\c&d\end{bmatrix},\ \ D^\dagger D=E,\ \ \mathrm{det}D(\alpha)=1$$

每个矩阵均有实部与虚部，共 8 个实参数。

幺正条件和行列式条件分别给出 2^2 和 1 个约束方程。

$\mathrm{SU}(2)$ 只有 3 个独立实参数，是三阶李群。

$$D^{-1}(\alpha)=\begin{bmatrix}d&-b\\-c&a\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a^*&c^*\\b^*&d^*\end{bmatrix}$$

$$D(\alpha)=\begin{bmatrix}a&b\\-b^*&a^*\end{bmatrix}$$

$$|a|^2+|b|^2=1$$

若令

$$a=\cos\alpha_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_2},\ \ b=\sin\alpha_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_3}$$

$$D(\alpha)=\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_2}\cos\alpha_1&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_3}\sin\alpha_1\\-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_3}\sin\alpha_1&\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_2}\cos\alpha_1\end{bmatrix}$$

然而，$\alpha_1=0,\alpha_2=0$ 时 $D(\alpha)=E$，而对 α_3 无任何要求。这样无法求生成元。

$$
\begin{aligned}
1 &= \cos^2\alpha_1 + \sin^2\alpha_1 \\
&= \cos^2\alpha_1\left(\cos^2\alpha_2 + \sin^2\alpha_2\right) + \sin^2\alpha_1\left(\cos^2\alpha_2 + \sin^2\alpha_2\right) \\
&= \left(\cos^2\alpha_1\cos^2\alpha_2 + \sin^2\alpha_1\sin^2\alpha_2\right) + \left(\cos^2\alpha_1\sin^2\alpha_2 + \sin^2\alpha_1\cos^2\alpha_2\right) \\
&= |a|^2 + |b|^2
\end{aligned}
$$

令：

$$
\begin{cases}
a = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_3}\left(\cos\alpha_1\cos\alpha_2 + \mathrm{i}\sin\alpha_1\sin\alpha_2\right) \\
b = \cos\alpha_1\sin\alpha_2 + \mathrm{i}\sin\alpha_1\cos\alpha_2
\end{cases}
$$

$$
D(\alpha) = \begin{bmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_3}\left(\cos\alpha_1\cos\alpha_2 + \mathrm{i}\sin\alpha_1\sin\alpha_2\right) & \cos\alpha_1\sin\alpha_2 + \mathrm{i}\sin\alpha_1\cos\alpha_2 \\ -\cos\alpha_1\sin\alpha_2 + \mathrm{i}\sin\alpha_1\cos\alpha_2 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_3}\left(\cos\alpha_1\cos\alpha_2 - \mathrm{i}\sin\alpha_1\sin\alpha_2\right) \end{bmatrix}
$$

这样定义下，只有当 $\alpha = (0,0,0)$ 时，$D(\alpha) = E$，因此这样定义的 $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ 可作为群参数。

生成元：

$$
I_1 = \left.\frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_1}\right|_{\alpha=\alpha_0} = \begin{bmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix} = \mathrm{i}\sigma_1
$$

$$
I_2 = \left.\frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_2}\right|_{\alpha=\alpha_0} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} = \mathrm{i}\sigma_2
$$

$$
I_3 = \left.\frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_3}\right|_{\alpha=\alpha_0} = \begin{bmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{bmatrix} = \mathrm{i}\sigma_3
$$

对易关系：

$$
[I_i, I_j] = -2\varepsilon_{ijk} I_k
$$

有限群元的生成

$\mathrm{SO}(2)$ 群

$\mathrm{SO}(2)$ 群只有一个独立的群参数 θ，与恒元对应的参数的取值为 $\theta = 0$

当 $\delta\theta \to 0$，

$$
D(\delta\theta) = E + I\delta\theta
$$

$$
\delta\theta = \frac{\theta}{N}, \quad N \gg 1
$$

$$
D(\theta) = D^N(\delta\theta) \approx (E + I\delta\theta)^N
$$

$$
D(\theta) = \lim_{N\to\infty}\left(E + \frac{\theta I}{N}\right)^N = \mathrm{e}^{\theta I}
$$

当李群有多个独立的群参数时，

$$
D(\alpha) = \mathrm{e}^{\alpha_i I_i}
$$

对于 $\mathrm{SO}(2)$ 群，有限转动 $D(\theta)$ 可由无穷小转动变换生成：

$$
D(\theta) = \mathrm{e}^{\theta I} = \exp\left(\theta \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}
$$

$\mathrm{SO}(3)$ 群

$$D(\omega_1,\omega_2,\omega_3)=\mathrm{e}^{\omega_1 I_1+\omega_2 I_2+\omega_3 I_3}$$

$\mathrm{O}(3)$ 群的生成元与 $\mathrm{SO}(3)$，只不过对 $\mathrm{O}(3)$ 群中行列式为 -1 的群元，还需要乘上空间反演矩阵：

$$D(\omega)=\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}\mathrm{e}^{\omega_i I_i}$$

4.2 李群三定理

定理一

李群的线性表示完全由生成元决定。

证明：

设李群的表示矩阵为 $D(\alpha)$，乘法法则：

$$D(\alpha)D(\beta)=D(\gamma),\ \ \gamma=f(\alpha,\beta)$$

上式两端右乘 $D^{-1}(\beta)$：

$$D(\alpha)=D(\gamma)D^{-1}(\beta)$$

上式两端对 α_i 求导：

$$\frac{\partial D(\alpha)}{\partial\alpha_i}=\frac{\partial D(\gamma)}{\partial\gamma_j}\frac{\partial f_j(\alpha,\beta)}{\partial a_i}D^{-1}(\beta)$$

取 $\beta=\bar{\alpha}$，此时 $\gamma=f(\alpha,\bar{\alpha})=\alpha_0, D^{-1}(\beta)=D^{-1}(\bar{\alpha})=D(\alpha)$

$$\frac{\partial D(\alpha)}{\partial\alpha_i}=\left.\frac{\partial D(\gamma)}{\partial\gamma_j}\right|_{\gamma=\alpha_0}\left.\frac{\partial f_j(\alpha,\beta)}{\partial a_i}\right|_{\beta=\bar{\alpha}}D(\alpha)$$

令：

$$S_{ji}(\alpha)=\left.\frac{\partial f_j(\alpha,\beta)}{\partial\alpha_i}\right|_{\beta=\bar{\alpha}}$$

则：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial D(\alpha)}{\partial\alpha_i}=I_j S_{ji}(\alpha)D(\alpha)\\ D(\alpha_0)=E\end{cases}$$

因此 $D(\alpha)$ 完全由生成元 I_j 决定。

若令 $\alpha=\alpha_0$，可得：

$$I_i=I_j S_{ji}(\alpha_0)E=I_j S_{ji}(\alpha_0)$$

另一方面，

$$I_i=I_j\delta_{ji}$$

对比可得：

$$S_{ji}(\alpha_0)=\delta_{ji}$$

定理二

李群的线性表示的生成元满足如下关系：

$$[I_j,I_k]=C^i_{jk}I_i$$

其中，C^i_{jk} 为结构常数：

$$C^i_{jk}\equiv\left(\frac{\partial S_{ik}(\alpha)}{\partial\alpha_j}-\frac{\partial S_{ij}(\alpha)}{\partial\alpha_k}\right)\bigg|_{\alpha=\alpha_0}$$

一种证明方法

$$\frac{\partial D(\alpha)}{\partial\alpha_i}=I_jS_{ji}(\alpha)D(\alpha)$$

上式两端对 α_k 求导，再令 $\alpha=\alpha_0$：

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2D(\alpha)}{\partial\alpha_k\partial\alpha_i}\bigg|_{\alpha=\alpha_0}&=I_j\frac{\partial S_{ji}}{\partial\alpha_k}\bigg|_{\alpha=\alpha_0}D(\alpha_0)+I_jS_{ji}(\alpha_0)\frac{\partial D(\alpha)}{\partial\alpha_k}\bigg|_{\alpha=\alpha_0}\\&=I_j\frac{\partial S_{ji}}{\partial\alpha_k}\bigg|_{\alpha=\alpha_0}+I_j\delta_{ji}I_k\\&=I_j\frac{\partial S_{ji}}{\partial\alpha_k}\bigg|_{\alpha=\alpha_0}+I_iI_k\end{aligned}$$

交换 i,k，得：

$$\frac{\partial^2D(\alpha)}{\partial\alpha_i\partial\alpha_k}\bigg|_{\alpha=\alpha_0}=I_j\frac{\partial S_{jk}}{\partial\alpha_i}\bigg|_{\alpha=\alpha_0}+I_kI_i$$

相减可得：

$$I_iI_k-I_kI_i=\left(\frac{\partial S_{jk}(\alpha)}{\partial\alpha_i}-\frac{\partial S_{ji}(\alpha)}{\partial\alpha_k}\right)\bigg|_{\alpha=\alpha_0}I_j$$

令：

$$C^j_{ik}=\left(\frac{\partial S_{jk}(\alpha)}{\partial\alpha_i}-\frac{\partial S_{ji}(\alpha)}{\partial\alpha_k}\right)\bigg|_{\alpha=\alpha_0}$$

则得到：

$$[I_i,I_k]=C^j_{ik}I_j$$

从上式可看出：

$$C^j_{ik}=-C^j_{ki}$$

定理3

李群的结构常数满足如下关系：

$$C_{ij}^{m}C_{km}^{n}+C_{jk}^{m}C_{im}^{n}+C_{ki}^{m}C_{jm}^{n}=0$$

也记为：

$$C_{\{ij}^{m}C_{k\}}^{n}=0$$

4.3 李群的无穷小算子

4.4 李代数