#### ▼ 第1章 群的基本知识

- ▼ 基本概念
  - 群的定义
  - 7个概念
  - 群的重排定理
  - 子群的定义
  - 子群的陪集
  - 陪集定理
  - 拉格朗日定理
  - ▼ 经典群
    - $\operatorname{GL}(n,\mathbb{C})$  群和  $\operatorname{GL}(n,\mathbb{R})$  群
    - $SL(n,\mathbb{C})$  群和  $SL(n,\mathbb{R})$  群
    - 幺正群和正交群
  - 共轭元素的定义
  - 共轭元素的性质
  - 类的定义
  - 类的性质
  - ▼ 不变子群的定义
    - 定义一
    - 定义二
  - 不变子群的性质
  - 商群的定义
  - 同构
  - 同态
  - ▼ 同态核
    - 同态核定理
    - 定理1
    - 定理2
  - 直积群的定义
  - 直积群的类
  - 直积群的一般定义

#### ▼ 2 群的线性表示理论

- ▼ 基本概念
  - 群的线性表示的定义
  - 线性表示的性质
  - 等价表示
  - 可约表示和不可约表示
  - 可约表示的约化
  - 标量函数
  - 由线性坐标变换诱导的标量函数的变换算符
  - ▼ 有限群表示理论的基本定理
    - 定理1
    - 定理2
    - 定理3 (舒尔定理)

- 定理4: 正交性定理
- 定理5
- 群空间
- 群的正则表示
- 正则表示的特点
- 特征标
- 定理1
- 定理2: 特征标正交关系定理
- 定理3: 唯一分解定理
- 类为表头的特征标表
- 特征标表的性质
- 定理4

#### ▼ 例题

- 例1
- **(1)**
- ▼ (2)
  - 所有共轭类
  - 所有非平庸不变子群
- **▼** (3)
  - 商群
  - 特征标表
- **4**

#### ▼ 3 点群

- ▼ 基本概念
  - 实正交矩阵群 O(3)
  - 实特殊 (幺模) 正交群 SO(3)
  - SO(3) 群的共轭类
  - 三维欧式空间中绕任意轴的转动
  - $C_{\hat{n}(\theta,\varphi)}(\omega)$  的指数表示
  - 点群的定义
  - 对称操作和对称元素
  - 第一类点群
  - 理想晶体与晶体点群
  - 晶体制约定理
  - 32 种晶体点群

#### **V** 4

#### ▼ 基本概念

- 李群的定义
- *n* 维空间中带 *r* 个实参数的线性坐标变换
- 李群的线性表示
- 李群的线性表示的生成元
- 生成元的线性无关性
- ▼ 有限群元的生成
  - SO(2) 群

- SO(3) 群
- ▼ 李群三定理
  - 定理一
  - 定理二
  - 定理三
- 李群的无穷小算子
- 李代数
- 李群对应的李代数
- 子代数
- 不变子代数 (理想)
- 中心
- ▼ 直和
  - 直和的性质
- 半直和
- ▼ 单纯李代数和半单纯李代数
  - 单纯李代数
  - 半单纯李代数
- 度规
- Carton 准则 (判据定理)
- Casmir 算子 C

#### ▼ 例题

- ▼ 例1
  - 生成元
  - 生成元对易关系
  - 无穷小算子
  - 无穷小算子对易关系
  - 李代数
  - 度规
  - Casmir 算子
- ▼ 例2
  - 生成元
  - 无穷小算子
  - 李代数

# 第1章 群的基本知识

# 基本概念

## 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

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

(2) 结合律

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

(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。

## 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。

## 群的重排定理

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

$$G=\{g_lpha\}=\{fg_lpha\}$$

## 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。

# 子群的陪集

设 H 为群 G 的一个子群, $f\in G, f\notin H$ ,则  $fH=\{fh_{\alpha}|h_{\alpha}\in H\}$  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。

## 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。

# 拉格朗日定理

有限群的子群的阶等于群阶的因子。

## 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。

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

$$GL(n,\mathbb{R}) \equiv \{A|A \ni n \times n$$
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

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

$$SL(n,\mathbb{R}) \equiv \{A|A 为 n \times n$$
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:

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

特殊幺正群:

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

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:

# 共轭元素的定义

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

$$g_lpha = f g_eta f^{-1}$$

则称  $g_{\alpha}$  和  $g_{\beta}$  互为共轭元素,记为:

$$g_{lpha} \sim g_{eta}$$

# 共轭元素的性质

传染性:若 $g_{lpha}\sim g_{\gamma},g_{eta}\sim g_{\gamma}$ ,则 $g_{lpha}\sim g_{eta}$ 

传递性: 若  $g_{lpha} \sim g_{eta}, g_{eta} \sim g_{\gamma}$ ,则  $g_{lpha} \sim g_{\gamma}$ 

## 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:

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

## 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。

$$g_{lpha}g_{eta}=g_{lpha}g_{eta}e=g_{lpha}(g_{eta}g_{lpha})g_{lpha}^{-1}\Longrightarrow g_{lpha}g_{eta}\sim g_{eta}g_{lpha}$$

• 同类元素的阶必然相同。

若 $a^m = e$ ,则

$$\left(g_{lpha}ag_{lpha}^{-1}
ight)^m=g_{lpha}a^mg_{lpha}^{-1}=g_{lpha}eg_{lpha}^{-1}=e$$

• 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。

## 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

$$g_{\alpha}H = Hg_{\alpha}$$

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

$$g_{lpha}h_{eta}g_{lpha}^{-1}=h_{\gamma}\in H$$

则称 H 为 G 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

商群的乘法由群 G 的乘法来确定:

$$egin{aligned} \phi_i\phi_j&\equiv\{(s_ih_lpha)(s_jh_eta)|h_lpha,h_eta\in H\}\ \ \phi_i\phi_j&=s_iHs_jH=s_is_jHH=s_is_jH=g_lpha H \end{aligned}$$

## 同构

设  $G=\{g_{\alpha}\}$  和  $G'=\{g'_{\alpha}\}$  为两个群,群元之间存在——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:

$$g_{lpha} \longleftrightarrow g'_{lpha}$$

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

## 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  $g_{im}g_{jn} \longrightarrow g_i'g_j'$ 

则称 G = G' 同态,记为:

$$G\simeq G'$$

# 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:

$$I = \{i_l \in G | i_l \mapsto e'\}$$

#### 同态核定理

若  $G \simeq G'$ , I 为同态核, 则 I 为 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  $G/H=\{s_0H=H,s_1H,s_2H,\cdots,s_{k-1}H\}=\{s_iH\}$ 

## 定理2

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

## 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:  $h_{lpha}f_{eta}=f_{eta}h_{lpha}$

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。

## 直积群的类

设  $K = H \otimes F$ , K 关于 hf 的类:

$$egin{aligned} C_{hf} &= \{(h_lpha f_eta) hf(h_lpha f_eta)^{-1} | h_lpha \in H, f_eta \in F\} \ &= \{(h_lpha hg_lpha^{-1})(f_eta ff_eta^{-1}) | h_lpha \in H, f_eta \in F\} \ &= C_h^H \otimes C_f^F \end{aligned}$$

## 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  $(h^{-1},f^{-1})$ 

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

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

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:

$$egin{aligned} C_{(h,f)} &= \{(h_{lpha},h_{eta})(h,f)(h_{lpha},f_{eta})^{-1}|h_{lpha} \in H, h_{eta} \in F\} \ &= \{(h_{lpha}hh_{lpha}^{-1},f_{eta}ff_{eta}^{-1})|h_{lpha} \in H, h_{eta} \in F\} \ &= C_h^H \otimes C_f^F \end{aligned}$$

更一般地,任意 n 个群  $H, F, \dots, K$  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  $H, F, \dots, K$  的直积群。

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

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

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

是直积群的 n 个不变子群。

G关于  $(h, f, \dots, k)$  的类为:

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

# 2 群的线性表示理论

# 基本概念

## 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  $G \supset D(g)$  非同构,则称 D(G) 为**非真实表示**。

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:

$$\chi(g_i) \equiv {
m Tr} D(g_i)$$

若 $orall g_i \in G$ ,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 $\, orall g_i \in G$ ,都有 $\, D^{
m T}(g_i) D(g_i) = E$ ,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:

$$D\left(g_i^{-1}\right) = D^{-1}(g_i)$$

# 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。

## 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:

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

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。

# 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  $ilde{D}_k(G)$  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:

$$X^{-1}D(G)X=igoplus_{k=1}^r n_k ilde{D}_k(G)$$

其中,

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

写成矩阵的形式,即:

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

## 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。

## 由线性坐标变换诱导的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:

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

从坐标 x 变换到 x' 的变换记为R, 即:

$$R: x \mapsto x'$$

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

 $P_R$  是由线性坐标变换 R 诱导出来的一个算符, 其定义为:

$$P_R\psi\equiv\psi'$$

利用  $P_R$  可将  $\psi'(x') = \psi(x)$  改写为:

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

将上式 x 替换为  $R^{-1}x$  则得:

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

 $\{R\}$  和  $\{P_R\}$  同构

## 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。

#### 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:

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

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:

$$\sum_{lpha=1}^{n_G} D_{\gamma\eta}^{(u)*}(g_lpha) D_{\lambda
ho}^{(v)}(g_lpha) = rac{n_G}{n_u} \delta^{uv} \delta_{\gamma\lambda} \delta_{\eta
ho}$$

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。

## 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:

$$egin{aligned} f = x_1 g_1 + x_2 g_2 + \cdots + x_n g_n = egin{bmatrix} g_1 & g_2 & \cdots & g_n \end{bmatrix} egin{bmatrix} x_1 \ x_2 \ dots \ x_n \end{bmatrix} \equiv v x \end{aligned}$$

## 群的正则表示

以群空间为表示空间的表示称为正则表示。

$$egin{aligned} g_lpha: f \mapsto f' \ f' &= g_lpha f \ &= g_lpha(x_1g_1 + \dots + x_ng_n) \ &= x_1g_lpha g_1 + \dots + x_ng_lpha g_n \ &= vD(g_lpha)x \ &= v'x \ &= vx' \end{aligned}$$

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。

## 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

$$\chi(g_lpha) = egin{cases} n_G &, g_lpha = e \ 0 &, g_lpha 
eq e \end{cases}$$

- (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。

## 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:

$$\chi(g_lpha)\equiv {
m Tr} D(g_lpha)=\sum_{i=1}^{n_D} D_{ii}(g_lpha)$$

对于与  $g_{\alpha}$  共轭的元素,他们的特征标为:

$$\chi\left(f^{-1}g_{\alpha}f\right) = \operatorname{Tr}D\left(f^{-1}g_{\alpha}f\right)$$

$$= \operatorname{Tr}\left(D(f^{-1})D\left(g_{\alpha}\right)D\left(f\right)\right)$$

$$= \operatorname{Tr}\left(D(f)D(f^{-1})D(g_{\alpha})\right)$$

$$= \operatorname{Tr}\left(D(f)D^{-1}(f)D(g_{\alpha})\right)$$

$$= \operatorname{Tr}\left(D(g_{\alpha})\right)$$

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。

## 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:

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

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

#### 引入特征标表:

	$g_1$	$g_2$	•••	$g_n$
$D^{(1)}$	$\chi^{(1)}(g_1)$	$\chi^{(1)}(g_2)$	• • •	$\chi^{(1)}(g_n)$
$D^{(2)}$	$\chi^{(2)}(g_1)$	$\chi^{(2)}(g_2)$	• • •	$\chi^{(2)}(g_n)$
:	:	:	٠٠.	:
$D^{(r)}$	$\chi^{(r)}(g_1)$	$\chi^{(r)}(g_2)$	•••	$\chi^{(r)}(g_n)$

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  $n_C$ 

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

对于同一行, u=v,

$$\sum_{n=1}^{n_G} \left| \chi^{(u)}(g_lpha) 
ight|^2 = n_G$$

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:

$$X^{-1}D(g_lpha)X=igoplus_{u=1}^r a_u D^{(u)}(g_lpha), \quad orall g_lpha\in G$$

其中,  $a_u$  是唯一确定的, 由下式确定:

$$a_u = rac{1}{n_G} \sum_{lpha=1}^{n_G} \chi^*(g_lpha) \chi^{(u)}(g_lpha)$$

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

$$\chi(g_lpha) = \mathrm{Tr}\left(D(g_lpha)
ight), \ \ \chi^{(u)}(g_lpha) = \mathrm{Tr}\left(D^{(u)}(g_lpha)
ight)$$

# 类为表头的特征标表

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。

	$C_1=\{e\}$	$C_2$	•••	$C_n$
$D^{(1)}$	1	1	• • •	1
$D^{(2)}$	$\chi^{(2)}(C_1)=n_2$	$\chi^{(2)}(C_2)$	•••	$\chi^{(2)}(C_n)$
:	<b>:</b>	:	·	:
$D^{(r)}$	$\chi^{(r)}(C_1)=n_r$	$\chi^{(r)}(C_2)$	• • •	$\chi^{(r)}(C_n)$

#### 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  $n_k g_k$ ,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。

可以证明, 以类为表头的特征标的任意两列正交:

$$\sum_{u=1}^r \chi^{(u)*}(C_lpha) \chi^{(u)}(C_eta) = rac{n_G}{n_{C_lpha}} \delta_{lphaeta}$$

其中, $n_{C_{\alpha}}$ 为  $C_{\alpha}$  类中群元的个数。

任意两行正交也可以写为:

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

引入归一化的特征标行/列矢量:

$$\hat{\chi}^{(u)}(C_lpha) \equiv \sqrt{rac{n_{C_lpha}}{n_G}} \chi^{(u)}(C_lpha)$$

特征标正交定理可改写为:

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

$$\sum_{u=1}^r \hat{\chi}^{(u)*}(C_lpha)\hat{\chi}^{(u)}(C_eta) = \delta_{lphaeta}$$

对于不可约表示, 归一化特征标行、列矢量的模方为 1:

$$\sum_{lpha=1}^r \left|\hat{\chi}^{(u)}(C_lpha)
ight|^2 = 1$$

$$\sum_{u=1}^r \left|\hat{\chi}^{(u)}(C_lpha)
ight|^2 = 1$$

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:

$$\sum_{u=1}^r \left|\hat{\chi}^{(u)}(C_lpha)
ight|^2 = 1$$

# 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:

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

(3) 任意两列正交:

$$\sum_{u=1}^r \hat{\chi}^{(u)*}(C_lpha)\hat{\chi}^{(u)}(C_eta) = \delta_{lphaeta}$$

(4) 特征标行/列矢量的模方为 1:

$$\sum_{lpha=1}^r \left|\hat{\chi}^{(u)}(C_lpha)
ight|^2 = 1$$

$$\sum_{u=1}^r \left|\hat{\chi}^{(u)}(C_lpha)
ight|^2 = 1$$

(5) 第一列:

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

其中  $n_u$  为  $D^{(u)}$  的维数。

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

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。

- (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。

## 定理4

两个表示等价 ←→ 特征标相同

# 例题

## 例1

已知  $D_2$  群为正 n 边形对称群,求: (1) 该群的乘法表; (2) 所有共轭类与非平庸不变子群; (3) 商群与特征标表; (4) 以标量函数  $\psi_1=x^2, \psi_2=xy, \psi_3=y^2$  为基底写出  $D_2$  群的一个三维表示。

**(1)** 

$$D_2 = \{e, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$$

乘法表:

	e	$\sigma_x$	$\sigma_y$	$\sigma_z$
e	e	$\sigma_x$	$\sigma_y$	$\sigma_z$
$\sigma_x$	$\sigma_x$	e	$\sigma_z$	$\sigma_y$
$\sigma_y$	$\sigma_y$	$\sigma_z$	e	$\sigma_x$
$\sigma_z$	$\sigma_z$	$\sigma_y$	$\sigma_x$	e

**(2)** 

## 所有共轭类

由于:

$$\sigma_i \sigma_j = \sigma_j \sigma_i$$

于是:

$$\sigma_j \sigma_i \sigma_j^{-1} = \sigma_i \sigma_j \sigma_j^{-1} = \sigma_i, \quad orall \sigma_j$$

因此  $D_2$  群中每个群元自成一类。所有共轭类为:

$$\{e\}$$
,  $\{\sigma_x\}$ ,  $\{\sigma_y\}$ ,  $\{\sigma_z\}$ 

#### 所有非平庸不变子群

$$A_{x}=\left\{ e,\sigma_{x}
ight\} ,A_{y}=\left\{ e,\sigma_{y}
ight\} ,A_{z}=\left\{ e,\sigma_{z}
ight\}$$

(3)

商群

$$egin{aligned} \mathrm{D}_2/A_x &= \left\{ \left\{ e, \sigma_x 
ight\}, \left\{ \sigma_y, \sigma_z 
ight\} 
ight\} \ & \mathrm{D}_2/A_y &= \left\{ \left\{ e, \sigma_y 
ight\}, \left\{ \sigma_x, \sigma_z 
ight\} 
ight\} \ & \mathrm{D}_2/A_z &= \left\{ \left\{ e, \sigma_z 
ight\}, \left\{ \sigma_x, \sigma_y 
ight\} 
ight\} \end{aligned}$$

#### 特征标表

 $D_2$  群阶数 n=4

$$n = 4 = 1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2$$

除一维恒等表示外, $D_2$  群有 3 三个指数为 2 的不变子群,于是容易得到四个一维不等价不可约表示:

	e	$\sigma_x$	$\sigma_y$	$\sigma_z$
$D^{(1)}$	1	1	1	1
$D^{(2)}$	1	1	-1	-1
$D^{(3)}$	1	-1	1	-1
$D^{(4)}$	1	-1	-1	1

## **(4)**

 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$  可看成  $\mathbb{R}^3$  空间中的线性变换。

由  $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$  诱导出的标量函数变换算符分别记为  $P_{\sigma_x},P_{\sigma_y},P_{\sigma_z}$ 

注意到:

$$\sigma_x^{-1}=\sigma_x,\quad \sigma_y^{-1}=\sigma_y,\quad \sigma_z^{-1}=\sigma_z$$
  $\psi_1(x,y,z)=x^2,\quad \psi_2(x,y,z)=xy,\quad \psi_3(x,y,z)=y^2$ 

于是:

$$egin{split} P_{\sigma_x} \psi_1(ec{r}) &= \psi_1 \left( \sigma_x^{-1} ec{r} 
ight) = \psi_1 \left( \sigma_x ec{r} 
ight) = \psi_1(x, -y, -z) = x^2 = \psi_1(ec{r}) \ &P_{\sigma_x} \psi_2(ec{r}) = \psi_2 \left( \sigma_x^{-1} ec{r} 
ight) = \psi_2 \left( \sigma_x ec{r} 
ight) = \psi_2(x, -y, -z) = -xy = -\psi_2(ec{r}) \end{split}$$

$$P_{\sigma_x}\psi_3(\vec{r}) = \psi_3\left(\sigma_x^{-1}\vec{r}\right) = \psi_3\left(\sigma_x\vec{r}\right) = \psi_3(x, -y, -z) = y^2 = \psi_3(\vec{r})$$

可以合写为:

$$P_{\sigma_x}egin{bmatrix} \psi_1(ec r) & \psi_2(ec r) & \psi_3(ec r) \end{bmatrix} = egin{bmatrix} \psi_1(ec r) & \psi_2(ec r) & \psi_3(ec r) \end{bmatrix} egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & -1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

因此,  $\sigma_x$  的一个三维表示为:

$$D(\sigma_x) = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & -1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$egin{aligned} P_{\sigma_y} \psi_1(ec{r}) &= \psi_1 \left( \sigma_y^{-1} ec{r} 
ight) = \psi_1 \left( \sigma_y ec{r} 
ight) = \psi_1(-x,y,-z) = x^2 = \psi_1(ec{r}) \ P_{\sigma_y} \psi_2(ec{r}) &= \psi_2 \left( \sigma_y^{-1} ec{r} 
ight) = \psi_2 \left( \sigma_y ec{r} 
ight) = \psi_2(-x,y,-z) = -xy = -\psi_2(ec{r}) \ P_{\sigma_y} \psi_3(ec{r}) &= \psi_3 \left( \sigma_y^{-1} ec{r} 
ight) = \psi_3 \left( \sigma_y ec{r} 
ight) = \psi_3(-x,y,-z) = y^2 = \psi_3(ec{r}) \end{aligned}$$

可以合写为:

$$P_{\sigma_y}egin{bmatrix} \psi_1(ec r) & \psi_2(ec r) & \psi_3(ec r) \end{bmatrix} = egin{bmatrix} \psi_1(ec r) & \psi_2(ec r) & \psi_3(ec r) \end{bmatrix} egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & -1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

因此, $\sigma_y$  的一个三维表示为:

$$D(\sigma_y) = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & -1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$egin{aligned} P_{\sigma_z} \psi_1(ec{r}) &= \psi_1 \left( \sigma_z^{-1} ec{r} 
ight) = \psi_1 \left( \sigma_z ec{r} 
ight) = \psi_1(-x,-y,z) = x^2 = \psi_1(ec{r}) \ P_{\sigma_z} \psi_2(ec{r}) &= \psi_2 \left( \sigma_z^{-1} ec{r} 
ight) = \psi_2 \left( \sigma_z ec{r} 
ight) = \psi_2(-x,-y,z) = xy = \psi_2(ec{r}) \ P_{\sigma_z} \psi_3(ec{r}) &= \psi_3 \left( \sigma_z^{-1} ec{r} 
ight) = \psi_3 \left( \sigma_z ec{r} 
ight) = \psi_3(-x,-y,z) = y^2 = \psi_3(ec{r}) \end{aligned}$$

可以合写为:

$$P_{\sigma_z}egin{bmatrix} \psi_1(ec{r}) & \psi_2(ec{r}) & \psi_3(ec{r}) \end{bmatrix} = egin{bmatrix} \psi_1(ec{r}) & \psi_2(ec{r}) & \psi_3(ec{r}) \end{bmatrix} egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

因此,  $\sigma_z$  的一个三维表示为:

$$D(\sigma_y) = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

综上,  $D_2$  的一个三维表示为:

$$D(e) = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad D(\sigma_x) = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & -1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad D(\sigma_y) = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & -1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad D(\sigma_z) = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

# 3 点群

# 基本概念

# 实正交矩阵群 O(3)

$$O(3) \equiv \{g|g ext{为} 3 imes 3$$
矩阵,  $g^{\mathrm{T}}g = E\}$ 

# 实特殊 (幺模) 正交群 SO(3)

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

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

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

因此:

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

所以 SO(3) 是 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  $\mathrm{V}_2=\{E,I\}$ 

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

以 SO(3) 为同态核构造商群:

$$egin{aligned} {
m O(3)/SO(3)} &= \{{
m SO(3)}, I\ {
m SO(3)}\} \cong \{E,I\} \ \\ {
m O(3)} &= {
m SO(3)} \cup I\ {
m SO(3)} = {
m SO(3)}\, \{E,I\} \ \\ {
m O(3)} &= {
m SO(3)} \otimes {
m V}_2 \end{aligned}$$

# SO(3) 群的共轭类

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

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

注意到:

$$\left(gC_{ec{k}}(\omega)g^{-1}
ight)\left(gec{k}
ight)=gec{k}$$

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

因此可以把共轭元素记为:

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

可以证明(求迹),

$$\omega' = \omega$$

因此,SO(3) 群中转动角度相同的群元在同一类中。

 $C_{gec{k}}(\omega)=gC_{ec{k}}(\omega)g^{-1}$  可以理解为:绕转动轴  $gec{k}$  转动  $\omega$  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)  $C_{ec{k}}(\omega)$ :  $C_{ec{k}}(\omega)$  这一操作就是绕  $ec{k}$  轴转动  $\omega$
- (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  $C_{ec{k}_1}(\omega_1)$  和  $C_{ec{k}_2}(\omega_2)$  共轭的条件是:

- (1)  $\omega_1 = \omega_2$
- (2)  $\exists g \in G$  使得  $ec{k}_2 = gec{k}_1$

## 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:

$$\hat{C}_{\hat{n}}( heta,arphi)=gC_{ec{k}}(\omega)g^{-1}=C_{qec{k}}(\omega)$$

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

$$C_{ec{i}}( heta):ec{k}
ightarrow\hat{n}'$$

$$C_{ec{\iota}}(arphi):\hat{n}' o\hat{n}$$

因此:

$$g = C_{ec{k}}(arphi)C_{ec{j}}(arphi) \equiv S(arphi, heta) = egin{bmatrix} \cosarphi & -\sinarphi & 0 \ \sinarphi & \cosarphi & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} egin{bmatrix} \cos heta & 0 & \sin heta \ 0 & 1 & 0 \ -\sin heta & 0 & \cos heta \end{bmatrix}$$

从而 
$$C_{\hat{n}( heta,arphi)}(\omega) = S(arphi, heta)C_{ec{k}}(\omega)S^{-1}(arphi, heta)$$

# $C_{\hat{n}( heta,arphi)}(\omega)$ 的指数表示

$$T_1 = egin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \ 0 & 0 & -\mathrm{i} \ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \quad T_2 = egin{bmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i} \ 0 & 0 & 0 \ -\mathrm{i} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad T_3 = egin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \ \mathrm{i} & 0 & 0 \ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \ C_{\hat{n}( heta,arphi)}(\omega) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i T_i} \ \end{pmatrix}$$

其中,

$$egin{bmatrix} \omega_1 \ \omega_2 \ \omega_3 \end{bmatrix} = egin{bmatrix} \omega n_1 \ \omega n_2 \ \omega n_3 \end{bmatrix} = egin{bmatrix} \omega \sin heta \cos arphi \ \omega \sin heta \sin arphi \ \omega \cos heta \end{bmatrix}$$

# 点群的定义

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

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

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

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  $IC_{\hat{m}}(\frac{2\pi}{n})$ 

## 第一类点群

- (1) n 阶循环群  $C_n$
- (2) 二面体群  $D_n$
- (3) 正四面体对称群 T (12 阶群)
- (4) 正八面体对称群 O (24 阶群)
- (5) 正十二面体 (二十面体) 对称群 Y (60 阶群)

## 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:

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

其中,  $g_{ki}$  必须为整数。

$$ec{v}' = ec{v}g$$
  $egin{bmatrix} ec{v}_1' & ec{v}_2' & ec{v}_3 \end{bmatrix} = egin{bmatrix} ec{v}_1 & ec{v}_2 & ec{v}_3 \end{bmatrix} g$ 

# 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。

## 32 种晶体点群

第一类晶体点群有 11 种:

$$C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, C_2, D_3, D_4, D_6, T, O$$

第二类晶体点群有 21 种:

 $\mathrm{C}_{nh}$  群(n=1,2,3,4,6):由  $c_n$  和水平镜面  $\sigma_h=Ic_2$  生成,包含 n 个转动和 n 个转动反演,为 2n 阶阿贝尔群。

$$C_{1h} = \{E, \sigma_h\} = \{E, Ic_2\}$$

$$egin{aligned} {
m C}_{2h} &= \{E, c_2, \sigma_h, c_2 \sigma_h\} = \{E, c_2\} \otimes \{E, \sigma_h\} = {
m C}_2 \otimes {
m C}_{1h} = \{E, c_2, I c_2, I\} = \{E, c_2\} \otimes \{E, I\} = {
m C}_2 \otimes {
m C}_i \ \\ {
m C}_{3h} &= \left\{E, c_3, c_3^2, \sigma_h, c_3 \sigma_h, c_3^2 \sigma_h\right\} = {
m C}_3 \otimes {
m C}_{1h} \ \\ {
m C}_{4h} &= {
m C}_4 \otimes {
m C}_{1h} = {
m C}_4 \otimes {
m C}_i \end{aligned}$$

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

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

 $\mathrm{S}_{2n}$  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:

$$egin{split} s_m & \equiv s_k(2\pi/m) = \sigma_h c_m = \sigma_h c_{ec{k}}(2\pi/m) = I c_2 c_{ec{k}}(2\pi/m) = I c_{ec{k}}(\pi + 2\pi/m) \ & s_{2n} = \sigma_h c_{2n} = I c_2 c_{2n} = I c_{2n}^{n+1} \end{split}$$

 $S_2$ :

$$s_2 = Ic_2^2 = I$$

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

 $S_4$ :

$$s_4=Ic_4^3$$

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

 $S_6$ :

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

$$S_6 = \{E, c_3, c_3^2, I, Ic_4, Iv_3^2\} = C_3 \otimes C_i$$

 $\mathrm{D}_{nh}$  群(n=2,3,4,6):由  $\mathrm{D}_n$  和水平镜面  $\sigma_h$  构成,为 4n 阶群。

$$D_{nh} = D_n \otimes C_{1h} = D_n \otimes C_i$$

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

 $T_n$  群: n = 4, r = 8

 $T_d$  群: n=24, r=5

 $O_h$  群: n = 48, r = 10

# 基本概念

# 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  $lpha\equiv(lpha_1,lpha_2,\cdots,lpha_r)$  来标记:

$$g(lpha)\equiv g(lpha_1,lpha_2,\cdots,lpha_r)$$

参数  $\alpha$  可在有限或无限范围内连续变化。 $\alpha$  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  $\alpha$  和  $\beta$ , 总可以在群参数空间中找到  $\gamma$ , 使得:

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

参数  $\gamma$  为实参数  $\alpha$ ,  $\beta$  的实函数:

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

即:

$$\gamma_i = f_i(lpha_1, \cdots, lpha_r; eta_1, \cdots, eta_r)$$
  $g(lpha)g(eta) = g(f(lpha, eta))$ 

称为李群的结构函数。

(2) 结合律:

$$\left[g(\alpha)g(\beta)\right]g(\gamma)=g(\alpha)\left[g(\beta)g(\gamma)\right]$$

地即:

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

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

$$g(lpha)=g(lpha_0)g(lpha)=g(lpha)g(lpha_0)$$

另一方面,

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

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

比较可得:

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

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

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

另一方面,

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

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

比较可得:

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

- (5) 结构函数  $\gamma = f(\alpha, \beta)$  是解析函数。
- 很多时候恒元对应的群参数的取值  $\alpha_0=0$ ,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。
- $\Xi \alpha$  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。
- 设恒元对应的群参数  $\alpha_0=0$ ,则当  $\alpha,\beta$  是小量时, $f(\alpha+\beta)=\alpha+\beta$
- 设恒元对应的群参数  $\alpha_0=0$ ,则当  $\alpha$  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

考虑 n 维空间中带 r 个实参数的线性坐标变换,变换前的坐标记为  $x_i$ ,变换后的坐标记为  $x_i'$ :

$$x_i'=arphi_i(x_1,x_2,\cdots,x_n;lpha_1,lpha_2,\cdots,lpha_r),\quad i=1,2,\cdots,n$$

简写为:

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

其中,  $\alpha$  是群 G 的独立参数。

线性坐标变换可写成矩阵形式:

$$egin{bmatrix} x_1' \ x_2' \ dots \ x_n' \end{bmatrix} = g(lpha) egin{bmatrix} x_1 \ x_2 \ dots \ x_n \end{bmatrix}$$

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:

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

其中  $D(\alpha)$  称为  $\alpha$  的函数矩阵,满足李群的法则:

$$D(lpha)D(eta)=D(\gamma), \;\; \gamma=f(lpha,eta) \ D(lpha_0)D(lpha)=ED(lpha)=D(lpha) \ D(lpha)D(arlpha)=D(lpha_0)=E, \;\; D(arlpha)=D^{-1}(lpha)$$

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  $\alpha$  在  $\alpha_0$  附近), $\alpha$  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  $\alpha_0$  附近展开:

$$D(lpha) = D(lpha_0) + rac{\partial D(lpha)}{\partial lpha_k}igg|_{lpha=lpha_0} (lpha_k - lpha_{0k}) \equiv E + (lpha_k - lpha_{0k})I_k$$

其中,

$$I_k \equiv \left. rac{\partial D(lpha)}{\partial lpha_k} 
ight|_{lpha = lpha_0}$$

为李群的线性表示的生成元。

若  $\alpha_0 = 0$ ,则上式化简为:

$$D(lpha) = E + \left. rac{\partial D(lpha)}{\partial lpha_k} 
ight|_{lpha=0} \!\!\! lpha_k \equiv E + lpha_k I_k$$

## 生成元的线性无关性

r 阶李群的生成元是线性无关的。

## 有限群元的生成

SO(2)群

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

$$D(\delta heta) = E + I\delta heta \ \delta heta = rac{ heta}{N}, \ \ N \gg 1 \ \ D( heta) = D^N(\delta heta) pprox (E + I\delta heta)^N$$

$$D( heta) = \lim_{N o \infty} \left( E + rac{ heta I}{N} 
ight)^N = \mathrm{e}^{ heta I}$$

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:

$$D( heta) = \mathrm{e}^{ heta I} = \exp\left( hetaegin{bmatrix} 0 & -1 \ 1 & 0 \end{bmatrix}
ight) = egin{bmatrix} \cos heta & -\sin heta \ \sin heta & \cos heta \end{bmatrix}$$

SO(3) 群

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

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

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

## 李群三定理

#### 定理一

李群的线性表示完全由生成元决定。

## 定理二

李群的线性表示的生成元满足如下关系:

$$\left[I_{j},I_{k}
ight]=C_{jk}^{i}I_{i}$$

其中, $C^i_{jk}$  为结构常数:

$$egin{aligned} C^i_{jk} &\equiv \left(rac{\partial S_{ik}(lpha)}{\partial lpha_j} - rac{\partial S_{ij}(lpha)}{\partial lpha_k}
ight)igg|_{lpha=lpha_0} \ S_{ji}(lpha) &= rac{\partial f_j(lpha,eta)}{\partial lpha_i}igg|_{eta=ar{lpha}} \end{aligned}$$

## 定理三

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:

$$C^m_{\{ij}C^n_{k\}}=0$$

# 李群的无穷小算子

$$egin{bmatrix} egin{bmatrix} x_1' \ x_2' \ dots \ x_n' \end{bmatrix} = egin{bmatrix} arphi^1(x,lpha) \ arphi^2(x,lpha) \ dots \ dots \ lpha^n(x,lpha) \end{bmatrix} = g(lpha) egin{bmatrix} x^1 \ x^2 \ dots \ lpha \end{bmatrix} \ \partial_\mu \equiv rac{\partial}{\partial x^\mu} \ \end{pmatrix}$$

与群参数  $\alpha_k$  对应的李群的无穷小算子:

$$X_k \equiv rac{\partial arphi^\mu(x,lpha)}{\partial lpha_k}igg|_{lpha=0} \partial_\mu$$

由生成元求无穷小算子:

$$X_i = \left(I_i
ight)^\mu_{\,\,
u} x_
u \partial_\mu$$

若李群的线性表示的生成元满足如下对易关系:

$$[I_i, I_j] = C_{ij}^k I_k$$

则该李群的无穷小算子满足对易关系:

$$[X_i, X_j] = -C_{ij}^k X_k$$

## 李代数

设 A 为数域  $\mathbb{F}$  上的一个 m 维线性空间, 若 A 上有一个运算:

$$A imes A o A, \quad (x,y) \mapsto [x,y]$$

并满足以下三个条件,则称 A 是一个李代数:

(1) 线性性:

$$[ax + by, z] = a [x, z] + b [y, z]$$

(2) 反对称性:

$$[x,y] = -[y,x]$$

(3) 雅可比恒等式:

$$[x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0$$

其中, a, b 是域  $\mathbb{F}$  中的任意数, x, y, z 是 A 中的任意矢量。

通过对易关系将 g 中的一对矢量  $I_i, I_j$  映射到 g 中的一个矢量  $[I_i, I_j]$ ,该矢量可用基矢的线性组合给出。对易关系相当于定义了这个线性空间的矢量乘积,这种乘积称为李乘积。

## 李群对应的李代数

设群 G 是 r 阶李群,则它的 r 个生成元  $I_i$  或无穷小算子  $X_i$  作为基矢张成一个 r 维的线性空间 g,定义矢量之间的运算为对易关系,若:

$$[I_i, I_j] = C_{ij}^k I_k$$

则称 g 是群 G 对应的李代数。

通过对易关系将 g 中的一对矢量  $I_i, I_j$  映射到 g 中的一个矢量  $[I_i, I_j]$ ,该矢量可用基矢的线性组合给出。对易关系相当于定义了这个线性空间的矢量乘积,这种乘积称为李乘积。

## 子代数

设 A 为一个李代数, 若它的子空间 B 满足:

$$\left[ar{I}_i,ar{I}_j
ight]=C^k_{ij}ar{I}_k,\quad ([B,B]=B)$$

其中  $\{\bar{I}_i\}$  为 B 的基矢,则称 B 为 A 的子代数。

## 不变子代数 (理想)

设B为A的子代数,且满足:

$$igl[ar{I}_i,I_jigr]=C^k_{ij}ar{I}_k,\quad orallar{I}_i\in B, orall I_j\in A,\quad ([B,A]=B)$$

则称 B 为 A 的不变子代数或理想。

## 中心

设 B 是 A 的子代数, $ar{I}_i \in B$ 

若  $orall I_j \in A$  都有  $\left[ar{I}_i, I_j
ight] = 0, ([B,A] = 0)$ 

则称 B 为 A 的中心。

中心是理想的一种特殊情况。

# 直和

设李代数 A 有两个理想  $A_1$  和  $A_2$ ,若它们满足:

$$A = A_1 \cup A_2, \quad A_1 \cap A_2 = 0, \quad [A_1, A_2] = 0$$

则称 A 为  $A_1$  和  $A_2$  的直和,记为:

$$A = A_1 \oplus A_2$$

## 直和的性质

(1)  $A_1$  和  $A_2$  为 A 的理想

$$[A_1,A] = A_1, \quad [A_2,A] = A_2$$

$$A_1 imes A o A_1, \quad A_2 imes A o A_2$$

- (2)  $A_1 \cap A_2 = 0$
- (3)  $A_1$  和  $A_2$  无公共基矢;
- (4) A 的基矢为  $A_1$  和  $A_2$  的基矢之并。

# 半直和

设  $A_1$  为李代数 A 的理想,  $A_2$  为 A 的子代数, 并满足:

$$A = A_1 \cup A_2, \quad A_1 \cap A_2 = 0$$

则称 A 为  $A_1$  和  $A_2$  的半直和,记为:

$$A = A_1 \oplus_{\mathbf{S}} A_2$$

# 单纯李代数和半单纯李代数

#### 单纯李代数

不含非平庸理想的李代数称为单纯李代数。

$$\mathfrak{so}(2),\mathfrak{so}(3),\mathfrak{so}(2,1)$$

## 半单纯李代数

不含 Abel 理想的李代数称为半单纯李代数。

## 度规

度规用李群的结构函数来定义:

$$g_{\mu
u}\equiv C^{
ho}_{\mu\lambda}C^{\lambda}_{
u
ho}$$

置换  $\rho$ ,  $\lambda$  哑标:

$$C^{\lambda}_{\mu
ho}C^{
ho}_{
u\lambda}=C^{
ho}_{
u\lambda}C^{\lambda}_{\mu
ho}$$

即:

$$g_{\mu 
u} = g_{
u \mu}$$

## Carton 准则 (判据定理)

李代数是半单纯的当且仅当  $\det\left(g_{\mu\nu}
ight) 
eq 0$ 

# Casmir 算子 C

设  $\det(g_{\mu\nu}) \neq 0$ 

引入逆变度规张量  $g^{\mu \nu}$ 

$$g_{\mu 
u} g^{\mu 
u} = \delta^{\mu}_{\mu} = r$$

其中,r 为李代数的维数。

定义算子 C:

$$C\equiv g^{\mu
u}X_{\mu}X_{
u}$$

其中,  $X_{\mu}$  和  $X_{\nu}$  对应李群的无穷小算子。

C 称为半单纯李代数的 Casmir 算子。

$$[C,X_{\mu}]=0$$

# 例题

## 例1

求SO(3)群的生成元、无穷小算子、李代数、度规与 Casmir 算子。

## 生成元

SO(3) 群线性表示  $D(\omega)$ :

$$D(\omega)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i T_i}$$

其中,

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

生成元:

$$egin{align} I_1 &= rac{\partial D(\omega)}{\partial \omega_1}igg|_{\omega=0} = -\mathrm{i}T_1 = egin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \ 0 & 0 & -1 \ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \ I_2 &= rac{\partial D(\omega)}{\partial \omega_2}igg|_{\omega=0} = -\mathrm{i}T_2 = egin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \ 0 & 0 & 0 \ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \ I_3 &= rac{\partial D(\omega)}{\partial \omega_3}igg|_{\omega=0} = -\mathrm{i}T_3 = egin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \ 1 & 0 & 0 \ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \ . \end{align}$$

## 生成元对易关系

$$[I_i,I_j]=arepsilon_{ijk}I_k$$

## 无穷小算子

利用李群无穷小算子与生成元的关系:

$$X_i = \left(I_i\right)^\mu_{\,\,
u} x_
u \partial_\mu$$

对于SO(3), 其生成元的矩阵元满足:

$$egin{split} \left(I_{i}
ight)_{\ 
u}^{\mu} &= -arepsilon_{i\mu
u} \ X_{1} &= \left(I_{1}
ight)_{\ 
u}^{\mu} x_{
u}\partial_{\mu} &= x_{2}\partial_{3} - x_{3}\partial_{2} \ X_{2} &= \left(I_{2}
ight)_{\ 
u}^{\mu} x_{
u}\partial_{\mu} &= x_{3}\partial_{1} - x_{1}\partial_{3} \ X_{3} &= \left(I_{3}
ight)_{\ 
u}^{\mu} x_{
u}\partial_{\mu} &= x_{1}\partial_{2} - x_{2}\partial_{1} \ X_{i} &= arepsilon_{ijk}x_{j}\partial_{k} \end{split}$$

## 无穷小算子对易关系

$$[X_i, X_j] = -\varepsilon_{ijk} X_k$$

#### 李代数

$$[I_i,I_j]=arepsilon_{ijk}I_k$$
  $C^k_{ij}=arepsilon_{ijk}$ 

## 度规

$$g_{ij} = C^l_{ik}C^k_{jl} = arepsilon_{ikl}arepsilon_{jlk} = arepsilon_{kli}arepsilon_{kjl} = \delta_{lj}\delta_{il} - \delta_{ll}\delta_{ij} = \delta_{ij} - 3\delta_{ij} = -2\delta_{ij}$$

## Casmir 算子

$$g_{\mu 
u} = -2 \delta_{\mu 
u}$$
  $g^{\mu 
u} = -rac{1}{2} \delta^{\mu 
u}$   $C = g^{\mu 
u} X_{\mu} X_{
u} = -rac{1}{2} \delta^{\mu 
u} X_{\mu} X_{
u} = -rac{1}{2} X_{\mu} X_{\mu} = -rac{1}{2} \left( X_1^2 + X_2^2 + X_3^2 
ight)$ 

# 例2

求 E<sub>3</sub> 群的生成元、无穷小算子、李代数。

E<sub>3</sub> 群:

$$\begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & & a \\ & SO(3) & & b \\ & & & c \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

## 生成元

转动变换生成元:

平移变换生成元:

生成元对易关系:

$$[I_i,I_j]=arepsilon_{ijk}I_k,\quad [L_i,L_j]=0,\quad [I_i,L_j]=arepsilon_{ijk}L_k$$

## 无穷小算子

无穷小算子:

$$\mathrm{SO}(3): X_i = arepsilon_{ijk} x_j \partial_k, \quad i=1,2,3$$

$$\mathrm{T}(3):Q_k=\partial_k=\mathrm{i}\hat{p}_x,\quad k=1,2,3$$

## 李代数

生成元对易关系:

$$[I_i,I_j]=arepsilon_{ijk}I_k,\quad [L_i,L_j]=0,\quad [I_i,L_j]=arepsilon_{ijk}L_k$$