

李辟与李代教 chapter 1

Chapter 1. 群的基本概念

0.1.1 对称

• 系统的对称性：指系统对某种变换保持不变的性质

• 保持系统不变的变换称为系统的对称变换

例如， N 个粒子构成的孤立系统的哈密顿量为：

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_j m_j \vec{V}_j^2 + \sum_{i < j} U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

\vec{V}_j^2 是关于 \vec{r}_j 的 Laplace 算符， U 是两个粒子间的二体相互作用势，它只是粒子之间距离的函数，它们对系统的平移、转动和反演都保持不变。若粒子是全同粒子，哈密顿量还对粒子间的任意置换保持不变。这个量子系统的对称性就用系统对这些变换的不变性来描述。

根据系统的对称性质，通过群论方法研究，可以得到系统精确的、与细节无关的重要性质。

0.1.2 群及乘法表

1.2.1 群的定义

系统的对称性质由对称变换的集合描写。把对称变换的共同性质归纳出来，得到群的定义

• 群的定义（集合，有一定要求）：规定了元素的“乘积”法则之后，满足以下四个条件的集合 G 称为群。

(1) 封闭性 对于 $\forall f, g \in G$ ，都有 $fg \in G$

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

(3) 存在恒元 $\exists e \in G$ ，对于 $\forall f \in G$ 都有 $ef = fe = f$

(4) 存在逆元 对于 $\forall g \in G$, $\exists g^{-1} \in G$. 使得 $gg^{-1} = g^{-1}g = e$

作为数学中群的定义，群元素可以是任何物体，元素的乘积法则也可以任意规定，满足以上四个条件的集合就为群。系统对称变换的集合，对于变换的乘积规则，若满足以上四个条件，就称为系统的对称变换群。

• 群的同构和同态：

同构：一一对应

同态：多一对应

1. 同构：设 $G = \{g_i\}$, $G' = \{g'_i\}$ 为两个群，群之间一一映射且为满射 $g_i \leftrightarrow g'_i$, 且 G 中任意两个元素的乘积也恰好相同的对应关系对应 G' 中相应两个元素的乘积，则称 G 和 G' 两个群是同构的。记作 $G \cong G'$

$$\text{① } g_1 \leftrightarrow g'_1 \quad \text{② 若 } g_2 \leftrightarrow g'_2, g_3 \leftrightarrow g'_3, \text{ 则 } g_2 g_3 \leftrightarrow g'_2 g'_3.$$

由前面讨论过的 Lagrange 定理，不难得出：

- 阶为同一素数的两个群同构（称为循环群）

- 无限群也存在同构，如 $SO(2) \cong U(1)$

2. 同态的定义（同构条件的放宽）：将同构中的一一对应，改为多-对应，同态是同态的一种特殊情况。同态包含更广泛的含义。

设 $G = \{g_{im}\}$ 与 $G' = \{g'_{ij}\}$ 之间有多-对应关系，且为满射。群 G 中任意两个元素的乘积也恰好相同的对应关系对应于 G' 中两个元素的乘积。符号表达为：① $g_{im} \rightarrow g'_{ij}$ ② 若 $g_{im} \rightarrow g'_{ij}, g_{jn} \rightarrow g'_{ij}$, 则 $g_{im} g_{jn} \rightarrow g'_{ij} g'_{ij}$ (注意箭头是单向的)

则称 G 与 G' 同态，记作 $G \leq G'$ (等号改为一横)

互相同构的群，性质完全相同。

一般来说，群元素乘积不可对易。所有元素乘积都可对易的群称为阿贝尔群。

- 重排定理、乘法表

1.2.2 子群

1.2.3 正 N 边形对称群

1.2.4 置换群

研究 n 个全同粒子体系的置换对称性， n 个客体排列次序的变换称为置换。设原来排列在第 j 位置的客体，经过置换 R 后排列到第 R_j 位置。可用 $n \times n$ 的矩阵描写 R ：

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ r_1 & r_2 & r_3 & \cdots & r_n \end{pmatrix}$$

permutation

对于一个给定量换，各列的排列次序是无差别的，重要的是每一列上下两个数字的对应关系。

两个置换的乘积定义为相连接的两个置换（在新排列的基础上做置换，不管之前排列在什么位置），注意，虽然置换操作同矩阵表示，但乘积不服从通常的矩阵乘积规则。置换乘积不满足交换律。把置换上下两行交换即得到逆置换，恒元即上下两行相同。

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n \end{pmatrix}$$

n 个客体有 $n!$ 个置换，按照上述置换乘积规则， n 个客体的所有置换满足群的四个条件，构成一个 $\mathfrak{S} = n!$ 阶群 S_n

轮换 (cycle) 是一类特殊的置换，有 $(n-1)$ 个客体保持不变，剩下的 1 个客体顺序变换：

$$(a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n) = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_{n-1} & a_1 & b_1 & \dots & b_{n-1} \\ a_2 & a_3 & \dots & a_n & a_1 & b_1 & \dots & b_{n-1} \end{pmatrix}$$

若用行矩阵描写轮换时，数位次序不可改变，但允许数位顺序变换：

如： $(123) = (231) = (312) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$

$\neq (213) = (132) = (321) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} = 123^{-1}$

且注：长度为 1 的轮换是恒等变换。长度为 2 的轮换称为对换，且也有对换满足：

$$(ab) = (ba) \quad (ab)(ab) = E$$

推广于此，长度为 1 的轮换，它的 1 次自身等于自身，阶数为 1. (1 行循环群)

两个没有公共客体的轮换，积分次序可以交换。任何置换都可唯一分解为若干个没有公共客体的轮换的乘积。

把一置换分解为没有公共客体的轮换来表示时，各轮换长度 l_i 的集合，称为该置换的轮换结构。一般来说， n 个客体的任一置换 R 的轮换结构可表示为：

$$(l_1, l_2, \dots) \quad \sum l_i = n$$

(l_1, l_2, \dots) 这样地正整数 n 分解为若干正整数之和称为 n 的一组配分数。置换的轮换结构由一组配分数来描写。通常认为，只有把置换化为没有公共客体的乘积时，才把置换化到了最简形式。不难证明以下乘积规则：

$$(a b \dots d)(d e \dots f) = (a b \dots d e \dots f)$$

即可按以下过程计算有公共客体的轮换的乘积

① 先把轮换链上式切断，使每一对轮换只包含一个没有公共客体

② 再接上式拼接起来

• 可利用置换群写出此解的末法表。(将三角形三个顶点看成三个客体)，且易看出 $S_3 \approx D_3$

○ 1.3 群的各种子集

1.3.1 陪集和不变子群，商群

定义及基本性质略。

在置换群 S_n 中有一指数为 2 的极大不变子群，称为交错子群 (alternating subgroup)，简记为 S_n'

在轮换每—客体处都切断，则长度为 1 的轮换合解为 $(-1)^k$ 对换的乘积：

$$(abc \cdots pq) = (ab)(bc) \cdots (pq)$$

同理，任何置换都可分解为若干个对换的乘积。这种分解虽然不是唯一的，但容易证明，它包含对换个数的奇偶性与分解方式无关。

把置换分解为对换乘积时，对换数目为偶数的置换称为偶置换，对换数目为奇数的对换称为奇对换。长度为奇数的施换是偶置换，长度为偶数的施换是奇置换。恒元是偶置换。常引入置换字称 $S(R)$ ：

$$S(R) = \begin{cases} 1, & R \text{ 是偶置换} \\ -1, & R \text{ 是奇置换} \end{cases}$$

1.3.2 共轭元素和类

对群 G 中任意给定的元素 $P \in G$ ，当 R_j 取遍类中所有元素时， $SR_j S^{-1}$ 相互共轭，且不会有重复元素，故有：

$$SC_\alpha S^{-1} = C_\alpha, \quad SC_\alpha = C_\alpha S$$



这说明，类 C_α 作为类元素，可以和群 G 中任意元素 S 对易。反之，对 C_α 中固定的元素 R_j ，让 P 取遍类中所有元素， $PR_j P^{-1}$ 全去现重复元素，证中每个元素复重次数相同，重次数为：

$$m(\alpha) = \frac{s}{n(\alpha)}$$

可见类 C_α 中包含的元素数目 $n(\alpha) = s/m(\alpha)$ 是群 G 所拥有的因子。

类 C_α 中各元素的逆元也必定相互共轭

$$R_k = PR_j P^{-1} \Rightarrow R_k^{-1} = P R_j^{-1} P^{-1}$$

因此 R_j^{-1} 的集合也构成类，记为 C_α^{-1} ， C_α 与 C_α^{-1} 称为相逆类，它们包含的元素数目相同。若 C_α 中有元素和其逆元素共轭，则 C_α 和 C_α^{-1} 重合，称为自逆。

- 同类而素的阶必相同，但阶数相同的元素不属于同一类。
- TS 和 ST 共轭，若群表中左素元素和右素元素次序相同，则对角线对称的两元素共轭，共轭两元素也一定会在对称位置出现。
- 绕等价轴转动相同角度的变换互相共轭。
- 绕双向轴转动正反相同角度的变换互相共轭。
- 不变子群由群 G 中若干个完整的类构成，例： D_n 群的类

置换群的类：从另一角度理解而置换的乘积公式

SR ：①. R 置换的第二行数字做 S 置换。

②. S 置换的第一行做 R^{-1} 置换。

共轭元素 SRS^{-1} 把括号内的两个数全部做 S 置换，特别当 R 是一个轮换时

$$S(a\ b\ c \cdots d)S^{-1} = (Sa\ Sb\ Sc \cdots Sd)$$

置换变换不改变轮换的长度，只改变轮换涉及的客体编号。因此，置换群中有相同轮换结构的元素互相共轭即置换群的类是由轮换结构来描写的。

任何置换都可表示为对换的乘积，而任何对换又都可表示为相邻客体对换 $P_a = (a \ a+1)$ 的乘积。 P_a 满足以下条件：

$$\textcircled{1} P_a^2 = E \quad \textcircled{2} P_a P_b = P_b P_a, |a-b| \geq 2 \quad \textcircled{3} P_a P_{a+1} P_a = P_{a+1} P_a P_{a+1} = (a \ a+2)$$

$$\textcircled{4} (ad) = (da) = P_{a-1} P_{a-2} \cdots P_{a+1} P_a P_{a+1} \cdots P_{a-2} P_{a-1} = P_d P_{d+1} \cdots P_{a-1} P_a P_{a-1} \cdots P_{a+1} P_a, ad < a$$

引入长度为 n 的轮换 W ：

$$W = (1 \ 2 \ \dots \ n), \quad W^{-1} = W^{n-1}$$

则： $P_a = W P_{a-1} W^{-1} = W^{a-1} P_1 W^{-a+1}$

因此， W 和 P_1 是置换群的生成元，置换群的阶为 $?$

1.3.3 群的同态、关系

• 同态核定理。 $G' \sim G$ 时， G' 反映了 G 中商群 G/H 的性质。

1.3.4 群的直接积

• 定义 设群 H_1 和 H_2 是群 G 的两个子群

① 除恒元外，子群 H_1 和 H_2 无公共元素

② $R_j \in H_1, S_k \in H_2$, 则 $R_j S_k = S_k R_j$

③ G 是所有 $R_j S_k$ 的集合。

则称 G 是 H_1 和 H_2 的直接乘积，记为 $V = H_1 \otimes H_2$ 。 H_1 和 H_2 都是 G 的不变子群。

结合 $\{R_j S_k\}$ 不含有公共元素。若 $R_i S_j = R_k S_l \Rightarrow R_i^{-1} R_k = S_l S_j^{-1}$ ，分属两个子群。因此， $G = H_1 \otimes H_2$ 的阶为 $g = h_1 h_2$ 。

实际问题中，常遇到两群 H_1 和 H_2 作用于不同时象上，从而一定可对易，补上相同恒元 e_1, e_2 ，定义集合

$$G = \{R_j S_k \mid R_j \in H_1, S_k \in H_2\} \rightarrow \text{相容直接积群 } G = H_1 \otimes H_2.$$

• 例：包含空间反演 O 的非圆柱点群称为 I 型非圆柱点群，不包含则为 P 型非圆柱点群。

G 是 I 型非圆柱点群，是 I 型圆柱点群和二阶反演群 V_2 的直积：

$$G = H \otimes V_2 \quad V_2 = \{E, O\}$$

• 舍夫利 (Schönhflies) 符号体系。

○ 1.4 正四面体和立方体对称变换群