物理学中的群论

Group Theory in Physics

郭 璐（Guo Lu）

中国科学院大学

2017 Fall Semester

教学内容

第零章：群论与对称性

第一章：数学准备

第二章：群的基本概念

第三章：群的线性表示理论

第四章：置换群

第五章：三维转动群

教材和参考书

教材：

1. 《物理学中的群论》，马中骐著，第二版（或第三版），科学出版社。

参考书：

2. 《群论》，孙洪洲、韩其智著，北京大学出版社。
3. E. P. Wigner, Group Theory and its Application to the Quantum mechanics of Atomic Spectra, Academic Press, New York 1959.

答疑与考核方式

Office Hour 答疑:

时间：每周星期二3－4节

地点：学园2－321

考核方式:

- 平时作业：　　　20%
- 期末小论文：　　15%
- 期末闭卷考试：65%

第零章　群论与对称性

➢ 什么是群论？

始于19世纪初，法国天才数学家伽罗华（Evariste Galois，1811～1832）

是众所公认的群论概念的主要开拓者；

在数学中，群是一种代数结构，由一个集合以及一个二元运算所组成.

群论是研究这种代数结构的理论，因此群论本身是一门抽象的代数理论.

在物理上，量子力学建立后，开始应用于物理学的各个领域；

更关心的是如何把群论方法灵活地运用到实际的物理问题中去.

群论是研究系统对称性质的数学语言或工具。

⇩

《物理学中的群论》

群的定义

- 群的定义：设G是一些元素的集合，在G中定义元素间二元运算（“乘积”法则），满足如下四条群公理，则称为群.

  1. 封闭性：　$RS \in G, \quad \forall R, S \in G$
  2. 结合律：　$R(ST) = (RS)T, \quad \forall R, S, T \in G$
  3. 恒元：　$E \in G, \quad ER = R, \quad \forall R \in G$
  4. 逆元：　$\forall R \in G, \quad \exists\, R^{-1} \in G, \quad R^{-1}R = E$

- 说明：

  1. 群元素可以是任何客体，例：数，空间反演，线性变换、算符，矩阵等；
  2. “乘积”法则（二元运算）可任意规定，例：数乘、数加，相继做两次变换，矩阵乘积等；

- 例：

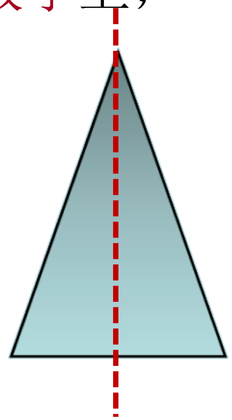
  G = {E, I} 空间反演群；

  R = {全体实数} 按加法构成群，记为(R, +)，但按乘法不构成群；

群论简介—对称性

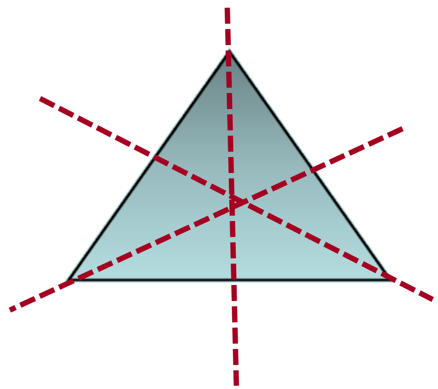
➢ 什么是对称性？

数学上，一个体系对某种变换保持不变的性质；



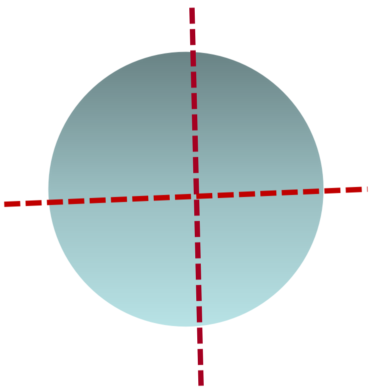
等腰三角形，空间反射不变性

E，x➞ −x （2个）



等边三角形，空间反射、空间转动不变性

E，x➞ −x，绕0转120度（6个）



圆对任一直径的空间反射、

任何角度的空间转动不变性

对称性的高低：保持系统不变的变换越多，系统的对称性就越高.

称为系统的对称变换，对称变换的集合描写系统的全部对称性质

20世纪以来，特别是爱因斯坦发现相对论之后，对称性的研究

在物理学各个领域都起着越来越重要的作用.

对称性的研究帮助人们求得物理问题的解，寻求新的运动规律.

物理学与对称性

- 描述四种基本相互作用的基本理论：

  强相互作用理论：量子色动力学基于SU(3)色和味的对称性；

  弱电相互作用理论：SU(2)*U(1)的对称；

  引力理论：广义相对论基于物理定律的广义时空变换不变性；

  凝聚态物理：晶体对称性；

- 诺特定理(Noether theorem)：

  作用量的每一种对称性都对应一个守恒定律，有一个守恒量.

  对称性 ⟶ 守恒定律

时间平移不变性	—>	能量守恒定律
空间平移不变性	—>	动量守恒定律
空间转动不变性	—>	角动量守恒定律

- Wigner分类原则：

  物理定律的对称性决定了自然界中基本粒子的属性，也即基本粒子是按物理对称性来分类。

群论在物理学中的应用

- 在不知道相互作用的细节的时候，对称性可以给出系统很多精确的、与细节无关的重要性质，如：跃迁选择定则、态的简并度。
- 在知道相互作用的具体形式的情况下，对称性可以帮助简化求解的过程和解的形式，如：变量分离，多余自由度的消除。
- 研究思路：
  - 确定体系的对称性（对称变换群：体系的所有对称变换）；
  - 利用体系在该对称变换下的性质（不可约表示的性质）；
  - 得到一些定量或定性的结果。

例如：具有空间反演对称性的量子体系，定态波函数可以按宇称分类，

由此可以确定微扰跃迁的选择定则。（见板书）

第一章：数学准备

1. 集合论：

集合的概念与运算、等价关系与划分、集合上的映射、复合映射；

2. 抽象代数中结构简介：

半群、环、域简介和举例；

3. 线性代数：

线性空间及其不变子空间、线性空间的基底变换与相似变换、

线性空间的直和与直积、线性映射(变换)、对角化与本征值问题、

矩阵的若干运算和性质；

第一节：集合论相关的基本概念

- 集合的概念：把现实世界和抽象思维中我们感兴趣的一些对象作为一个整体来研究，这个整体就成为一个集合，简称集；

- 集合的运算：集合的并、交和直积

  并集： $A\cup B=\{x\,|\,\forall x\in A \text{ or } x\in B\}$

  交集： $A\cap B=\{x\,|\,\forall x\in A \text{ and } x\in B\}$

  直积： $A\times B=\{(x,y)\,|\,\forall x\in A, \mathrm{y}\in B\}$

  例：二维Euclid空间R^2是实数集R与R的直积；

  注意：直积无交换律，即一般情况下$A\times B\neq B\times A$

- 集合的对等：集合A与集合B之间存在一一对应关系；

等价关系与划分

- **等价关系：** 集合的对等、元素、三角形相似等都是等价关系，满足：

  自反性：$A \sim A$; 对称性：$A \sim B \Rightarrow B \sim A$; 传递性：$A \sim B, B \sim C \Rightarrow A \sim C$;

- **等价类：** 思想本质是将集合、元素等按照等价关系进行分类；

  假设集合A上定义一个等价关系，则A中的某个元素a的等价类是在A中

  等价于a的所有元素形成的子集：$[\mathrm{a}] = \{x \in A \mid x \sim a\}$

- **划分：** 集合A的非空子集A_i两两不相交，且所有A_i的并为A，则称子

  集族$\{A_i\}$构成A的一个划分，子集A_i称为块。

- **性质：** （1）假设集合A上定义等价关系，则等价类构成A上的一个划分；

  （2）给出集合A上的一个划分，就有一个以块A_i为等价类的等价关系；

集合上的映射

- **映射：** 设A，B是两个非空集合，若 $\forall a \in A$，按照某一法则f，在B中有唯一的b与之对应，则称f是A到B的映射，记作 $f: A \to B$;
- **映射的像：** b为a在映射f下的像，记作f(a);
  - **恒等映射：** f(a)=a (A到自身的映射）；
  - **满射：** 如果 f(A)=B;
  - **单射：** $\forall a_1, a_2 \in A$，$a_1 \neq a_2$，$f(a_1) \neq f(a_2)$
  - **双射（一一映射）：** 既是满射又是单射；
- **逆映射：** 若f为A到B的双射，g为B到A的双射，满足g(f(a))=a，g为f逆映射，记作：$g=f^{-1}$
- **复合映射：** $f: A \to B$, $g: B \to C$ 为集合间映射，则连续作用得到A到C的映射 $g \circ f: A \to C$, $(g \circ f)(a) = g(f(a))$
  - **性质：** （1）复合映射满足结合律：$h \circ (g \circ f) = (h \circ g) \circ f$

    （2）f为双射的充要条件：$g \circ f = f \circ g = I$

第二节：抽象代数中结构简介

- **半群(semi-group)：** 集合上定义元素间的二元运算，满足封闭性和结合律；
  - 交换半群：二元运算满足交换律的半群；
  - 含幺半群：带有单位元的半群；

例：非负整数集合关于普通乘法构成（交换含幺）半群；

- **环(Ring)：** 集合R上定义两种二元运算“+”和“.”，满足如下三个条件：

  1. (R, +) 为交换群（阿贝尔群），恒元为0；
  2. (R, .) 为半群；
  3. 满足分配率，即对$\forall a,b,c \in R$，a (b+c) =ab+ac，(b+c) a=ba+ca

  - 交换环：乘法运算满足交换律的环，即 (R, .) 为交换半群；
  - 含幺环：乘法运算的单位元1满足，1a=a1=a；

例子：整数集合Z，有理数集合Q，实数集合R，复数集合C关于普通加法、乘法构成环；

第二节：抽象代数中结构简介

- **域(Field)**：交换含幺环，R中除零以外元素均可逆（乘法逆元），

  即满足如下条件：

  - 加法和乘法满足（1）封闭性，（2）结合律，（3）交换律；
  - 乘法对加法的分配律；
  - 存在加法恒元0，乘法恒元1；
  - 存在加法逆元 $a+(-a)=0$，乘法逆元 $a*a^{-1}=1$（除零以外）；

例：（1）整数集合Z关于普通加法、乘法不构成域；

（2）有理数集合Q关于普通加法、乘法构成域；

（3）实数集合R、复数集合C关于普通加法、乘法构成域；

第三节：线性空间

线性空间（矢量空间或函数空间）：设$\Re$是一个非空集合，满足如下运算：

（1）对$\forall x, y, z \in \Re$，加法运算满足：

i. $x + y \in \Re$ （加法封闭性）；

ii. $x + y = y + x$ （交换律）；

iii. $(x + y) + z = x + (y + z)$ （结合律）；

iv. 存在唯一的 $0 \in \Re$，使得 $0 + x = x$ （存在零元）；

v. 存在唯一的$-x \in \Re$，使得 $x + (-x) = 0$ （存在逆元）；

（2）对$\forall x, y \in \Re$，$\forall \alpha, \beta \in K$（复数或实数域），数乘运算满足：

i. $\alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x$ ；

ii. $1 \bullet x = x$ ；

iii. $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$ ；

iv. $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$ ；

称集合$\Re$为线性空间（矢量空间）.

线性空间相关概念

线性相关（无关）：若数域K中存在非全为零的数$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$,

使得 $\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \ldots \lambda_n x_n = 0$ 成立，则称这组矢量$x_1, x_2, \ldots, x_n$线性相关；

若数域K中不存在非全为零的数，称这组矢量线性无关。

线性空间的维数：线性空间中线性无关矢量的最大数目。

线性子空间： 若E依$\Re$上的加法与数乘构成一个线性空间，

如果$E \subset \Re$，且满足（加法封闭性和数乘封闭性）：

（1）若$\forall\ x, y \in E$，则 $x+y \in E$ ；

（2）若$\forall\ \alpha \in K$，$x \in E$，则 $\alpha x \in E$ ；

则称E是$\Re$的一个线性子空间。

线性空间的基底（矢量基）

➢ 线性空间的基底（矢量基）：

任何n个线性无关的矢量都可以作为一组矢量基（矢量基的选择不唯一）；

线性空间中任意矢量 $\vec{a}=\sum_{\mu=1}^{m} e_{\mu} a_{\mu}$ 可表达成此组基底的线性组合

矢量基（正交归一）：只有一个分量不为零而等于1，即

$$(e_{\mu})_{\upsilon}=\delta_{\mu\upsilon}=\begin{cases}1, & \mu=\upsilon \\ 0, & \mu\neq\upsilon\end{cases} \qquad e_1=\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix},\quad e_2=\begin{pmatrix}0\\1\\\vdots\\0\end{pmatrix},\quad \cdots,\ e_n=\begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\1\end{pmatrix}$$

矢量和列矩阵有一一对应关系：

$$\vec{a}\leftrightarrow \underline{a}=\begin{Bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_m\end{Bmatrix}$$

列矩阵是矢量在给定的矢量基中的表现形式；

线性空间的和与直和

- 线性空间的张成：

$$L=\left\{\sum_{\mu=1}^{m} e_\mu a_\mu \mid a_\mu \in K\right\}$$

- 线性空间的和：L_1+L_2，两个线性子空间L_1 和L_2 的所有矢量及其线性组合的集合

$$L_1+L_2=\left\{\lambda_1\vec{a}+\lambda_2\vec{b} \mid\ \forall\vec{a}\in L_1,\ \forall\vec{b}\in L_2,\lambda_1,\lambda_2\in K\right\}$$

- 线性空间的直和：$L_1 \oplus L_2$，满足下面三个条件之一的线性空间的和

（1） L_1 和L_2 的交是零空间

（2） L 的维数等于L_1 和L_2 的维数之和

（3） L 中任一矢量都可唯一地分解为分属L_1 和L_2 的矢量之和

其中L_1 和L_2称为互补的子空间

线性变换和线性算符

- 线性变换（映射）：

域 K上的 m 维线性空间 V 到 n 维线性空间 W 的线性映射 f 满足

$$f(\lambda_1 a+\lambda_2 b)=\lambda_1 f(a)+\lambda_2 f(b), \quad \forall \lambda_1,\lambda_2 \in K,\ a,b\in V$$

则称映射 f 为线性空间 V 上的线性变换。

- 线性算符（算子）：算符是描写变换的一种数学符号。

$$R[\lambda_1 f(a)+\lambda_2 f(b)]=\lambda_1 Rf(a)+\lambda_2 Rf(b), \quad \forall \lambda_1,\lambda_2 \in K,$$

- 算符的不变线性空间：若算符 R 作用在线性空间 $\mathcal{L}$ 中任一矢量上，仍得到属于该空间的一个矢量，则称此线性空间 $\mathcal{L}$ 为关于算符 R 的不变空间；

$$R\,\vec{\mathrm{a}}=\vec{\mathrm{b}}\in L, \qquad \forall\,\vec{\mathrm{a}}\in L$$

- 算符的矩阵形式（线性表示）：线性算符R与它的矩阵形式 D(R) 有一一对应关系

$$R\mathrm{e}_\mu=\sum_\nu e_\nu D_{\nu\mu}(R)$$

$$b_\nu=\sum_\mu D_{\nu\mu}(R)a_\mu\ , \quad \underline{b}=D(R)\underline{a}$$

线性表示的具体形式与线性空间的基底选择有关；

矩阵相关概念

- 矩阵行列式：

$$\det(X)=\sum_{\mu_1,\mu_2\cdots\mu_m}\varepsilon_{\mu_1,\mu_2\cdots\mu_m}x_{1\mu_1}x_{2\mu_2}\cdots x_{m\mu_m}$$

- 矩阵转置： $(X^T)_{\mu\nu}=X_{\nu\mu}$

  复共轭 矩阵： $(X^*)_{\mu\nu}=X^*_{\mu\nu}$

  厄米共轭 矩阵： $(X^+)_{\mu\nu}=X^*_{\nu\mu}$

  实正交矩阵： $X^TX=1$

  幺正矩阵： $X^+X=I$

  厄米矩阵： $X^+=X$

- 矩阵乘积： $(XY)_{ij}=\sum_{k=1}^{n}x_{ik}y_{kj}$

  矩阵直积（张量积或Kronecker积）：

$$X=(x_{ij})_{m\times n},\quad Y=(y_{ij})_{p\times q},\quad X\otimes Y=\left(x_{ij}B\right)_{mp\times nq}$$

相似变换和本征矢量

线性空间L中，对给定的矢量基

矢量和列矩阵 ⟺ 线性算符与其矩阵形式

有一一对应关系

在线性空间中，矢量基的选择不是唯一的，任何m个线性无关的矢量都可以作为一组矢量基. 矢量基的改变并不改变矢量和算符本身，但改变了它们的表现形式，即改变了对矢量和算符的描写方式。将讨论同一个矢量、同一个线性算符在新旧两组矢量基中的矩阵形式之间的关系.

相似变换

- 不同矢量基间的关系：不同矢量基可以相互表达成对方的线性组合

设{e_1，e_2，…，e_n}和 $\{e'_1, e'_2, \ldots, e'_n\}$是线性空间$\mathcal{L}$的两组不同的基，这两组基之间由非奇异矩阵 S 相联系，即

$$\boxed{e'_\nu = \sum_\mu e_\mu S_{\mu\nu}, \quad e_\mu = \sum_\nu e'_\nu (S^{-1})_{\nu\mu}}$$

- 同一矢量 a在不同矢量基中分量之间的关系：

$$\vec{a} = \sum_\mu e_\mu a_\mu = \sum_{\nu\mu} e'_\nu (S^{-1})_{\nu\mu} a_\mu = \sum_\nu e'_\nu a'_\nu \Rightarrow \quad \boxed{a'_\nu = \sum_\mu (S^{-1})_{\nu\mu} a_\mu}$$

- 同一线性算符R在不同矢量基中矩阵形式之间的关系：

$$\hat{R}e'_\nu = \sum_\rho R e_\rho S_{\rho\nu} = \sum_{\mu\rho} e_\mu D_{\mu\rho}(R) S_{\rho\nu} \quad , \Rightarrow$$

$$\hat{R}e'_\nu = \sum_\rho e'_\rho \overline{D}_{\rho\nu}(R) = \sum_{\mu\rho} e_\mu S_{\mu\rho} \overline{D}_{\rho\nu}(R) \, ,$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \sum_\rho D_{\mu\rho}(R) S_{\rho\nu} = \sum_\rho S_{\mu\rho} \overline{D}_{\rho\nu}(R) \\ \overline{D}(R) = S^{-1} D(R) S \end{array}}$$

$\Downarrow$

相似变换矩阵S不唯一，

例：若 [X, D(R)]=0 ，XS满足相似变换关系。

相似变换（等价矩阵）

本征矢量和矩阵对角化（见板书）

内积空间和矢量内积

内积空间定义：

设$\Re$是数域K上的线性空间，有$\forall x,y,z\in\Re,\alpha,\beta\in K$，下列内积公理成立：

(1) 共轭对称性：$(x,y)=(y,x)^*$，

(2) 线性共轭：　$(\alpha x+\beta y,z)=\alpha^*(x,z)+\beta^*(y,z)$；

(3) 正定性：　　$(x,x)\geq 0$，　且 $(x,x)=0\Leftrightarrow x=0$；

定义了内积（•,•）的线性空间是内积空间，记作$(\Re,(\bullet,\bullet))$.

内积公理说明:

1、对实内积空间，∗ 不起作用，可以略去。不论实内积空间还是复内积空间，条件(1)意味着任何向量与自身的内积总是实数，从而保证了条件(3)不等式有意义。

2、在同一线性空间，可以按照多种形式定义内积空间，只要满足内积公理(内积定义不唯一)

由内积公理，推得内积具有以下性质：

(1) $(x,\alpha y+\beta z)=\alpha(x,y)+\beta(x,z)$

(2) $(0,x)=(x,0)=0$

矢量内积

- 矢量基 e_μ 的内积一般可表为：$\langle e_\mu | e_\nu \rangle = \Omega_{\mu\nu}$

  其中 $\Omega_{\mu\nu}$是厄米矩阵：$\Omega_{\mu\nu} = (\Omega^+)_{\mu\nu} = \Omega^*_{\nu\mu}$

- 任意两矢量的内积：$a = \sum_\mu e_\mu a_\mu$, $b = \sum_\nu e_\nu b_\nu$, $\langle a | b \rangle = \sum_{\mu\nu} a^*_\mu \Omega_{\mu\nu} b_\nu$

  正交：若两矢量内积 $\langle a | b \rangle = 0$ 为零，称两矢量正交 .

  长度：矢量a的长度为 $|a| = \langle a | a \rangle^{1/2}$

  正交归一矢量基：$\langle e_\mu | e_\nu \rangle = \Omega_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$ 使公式变得简洁，简化计算

  但是某些情况下，采用非正交归一的基，例，晶格理论中常取不正交归一的晶格基矢作为矢量基，则某些与内积有关的公式必须做相应的修正(见板书).

- 矢量内积的定义不是唯一的

  $\langle e_\mu | e_\nu \rangle = \Omega_{\mu\nu} = \Omega_{\nu\mu}$ (非奇对称矩阵）

  $\langle e_\mu | e_\nu \rangle = \Omega_{\mu\nu} = -\Omega_{\nu\mu}$ （非奇反对称矩阵）

第一章 习题

1. 设 $R=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$， $S=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}-1 & -\sqrt{3}\\ \sqrt{3} & -1\end{pmatrix}$

找相似变换矩阵X使：

$$X^{-1}(R\times R)X=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$X^{-1}(S\times S)X=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & -\sqrt{3}\\ 0 & 0 & \sqrt{3} & -1\end{pmatrix}$$

2. 讨论2*2幺正矩阵和实正交矩阵各含有多少个独立参数，并写出它们的一般表达式。

注：教材上（第二版）第一章第5、10题。