

# 第二章：群的基本概念

---

第一节：群的定义、乘法表、重排定理

第二节：群的各种子集

第三节：群的同态与同构，群的直积

第四节：点群简介

第五节：晶体的对称性

第六节：置换群

# 第一节：群的定义

➤ **群的定义：** 设 $G$ 是一些元素的集合，在 $G$ 中定义元素间的二元运算（“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：线性变换，线性算符，矩阵等  
2. 元素乘积可任意规定(运算法则)，例：相继做两次变换，矩阵乘积等

➤ **群的一些性质：**（由群的定义可证，见板书）

- $R^{-1}R = RR^{-1} = E; ER = RE = R;$
- 若  $TR = R$ , 则  $T = E$ （群中恒元唯一性）；
- 若  $TR = E$ , 则  $T = R^{-1}$ （群中任何元素的逆元唯一性）；
- $(RS)^{-1} = S^{-1}R^{-1}; \quad R^m R^n = R^{m+n}; \quad (R^m)^n = R^{mn};$

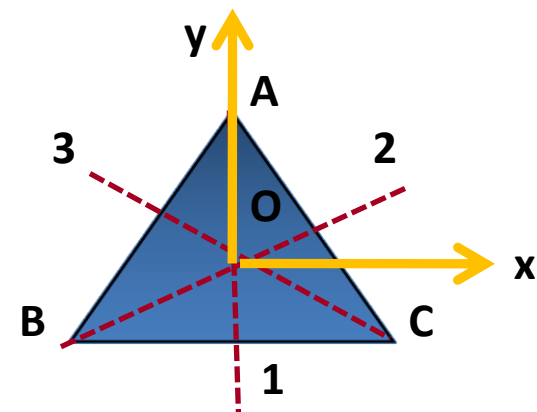
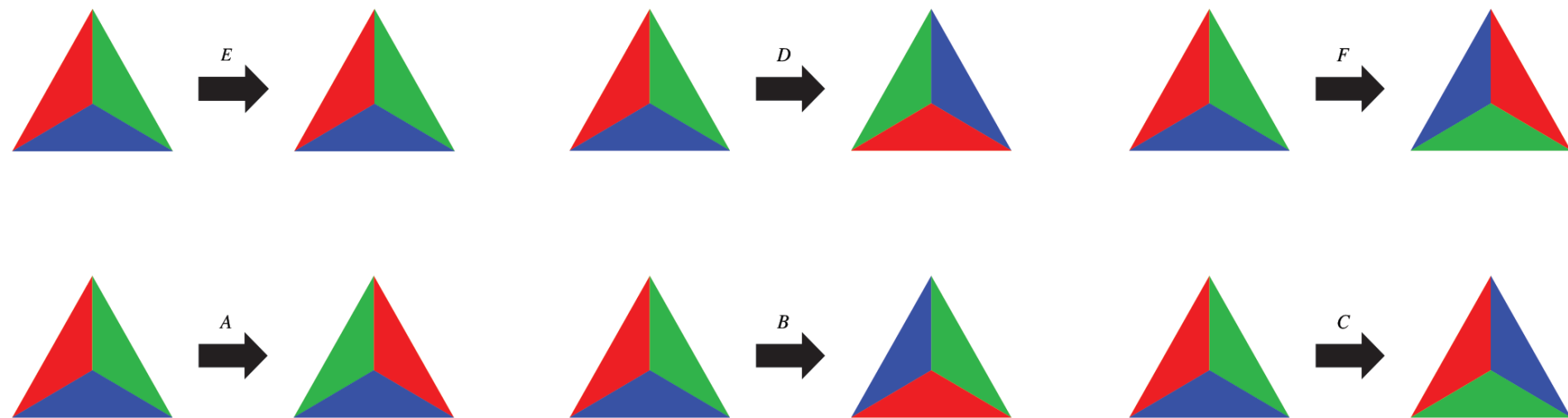
# 群的例子

元素的“乘积”法则      群的名称      (见板书)

1.  $G = \{\text{全体正实数}\}$       普通的数的乘积;      正实数乘法群;
2.  $G = \{\text{全体实数}\}$       普通的数的加法;      实数加法群;
3.  $G = \{E, I\}$       从右到左连续对 $r$ 作用;      空间反演群;
4.  $G = \{T(3)\}$       从……      ;      空间平移群;
5.  $D_3 = \{E, D, F, A, B, C\}$       从……      ;      正三角形对称变换群;
6.  $GL(n, C) = \{n\text{维非奇复矩阵}\}$       矩阵普通乘法;      一般线性群 (复矩阵群)
7.  $GL(n, R) = \{n\text{维非奇实矩阵}\}$       矩阵普通乘法;      一般线性群 (实矩阵群)
8.  $SL(n, C), SL(n, R), U(n), O(n), SU(n), SO(n)$

# 群的例子

$D_3 = \{E, D, F, A, B, C\}$  正三角形对称变换群



E: 恒等变换, D: 绕Z轴转 $2\pi/3$ , F: 绕Z轴转 $4\pi/3$ ,

A: 绕轴1转 $\pi$ , B: 绕轴2转 $\pi$ , C: 绕轴3转 $\pi$ 。

这些转动是保持正三角形在平面上的位置不变的全部变换, 因而它们构成正三角形的对称变换群。例:  $AB=D$ ,  $BA=F$

# 群的简单分类

## ➤ 按二元运算的可交换性分类：

- 阿贝尔群 (Abelian group)：群内任意两元素乘积可交换， $RS = SR$ ；
- 非阿贝尔群 (Non-abelian group)：群内至少存在一对元素乘积不可交换；

## ➤ 按群中元素数目分类：

- 有限群：群元素的数目有限；
- 无限群：群元素的数目无限；

## ➤ 按群中元素形式分类：

- 连续群：无限群的元素不可数，可用一组连续变换的参数描写；
- 离散群：群内元素可数；也称分立群；

# 有限群的一些概念

- 有限群的阶 (order)：有限群的元素数目；
- 复元素：把群的子集，即群中部分元素的集合  $R = \{R_1, R_2, \dots, R_n\}$ ，看作一个整体（元素）；

说明：

1. 复元素不考虑所包含元素的排列次序，每个元素只出现一次；
2. 两复元素相等的充要条件是它们所包含的元素相同；  $R \subset S$  and  $S \subset R \Rightarrow R = S$
3. 普通元素和复元素相乘是复元素；  $TR$  是由元素  $TR_j$  的集合构成的复元素，  
 $TR = \{TR_1, TR_2, \dots, TR_n\}$ （按照群元素的“乘积”规则相乘）；
4. 两复元素的乘积：设  $S = \{S_1, S_2, \dots, S_m\}$ ，则  $RS$  是所有形如  $R_j S_k$  的元素集合构成的复元素，即  $RS = \{R_1 S_1, \dots, R_1 S_m, \dots, R_n S_1, \dots, R_n S_m\}$ ；
5. 复元素的乘积满足结合律；
6. 若复元素的集合，按照复元素的“乘积”规则，符合群的四个条件，则构成群。

# 有限群的一些概念

## ➤ 有限群群元的阶（元素的阶）：

$\forall R \in G$ , 总是存在最小的正整数 $n$ , 使得  $R^n = E$  ( $n$ 是 $R$ 自乘得到恒元的最低幂次), 则 $n$ 称为群元（元素） $R$ 的阶；

## ➤ 周期：群元 $R$ 及其幂次生成的有限个元素的（子）集合；

说明： 同一个有限群中，不同元素的阶可以相同；

不同元素的周期也可有重复和重合；

## ➤ 循环群及其生成元：

由群中一个元素  $R$ 及其幂次构成的有限群，称为由 $R$ 生成的循环群，记作 $C_n$

$n$ ：循环群的阶， $R$ ：循环群的生成元，

$n$ 阶循环群的一般形式： $C_n = \{E, R, R^2, \dots, R^{n-1}\}$ ,  $R^n = E$ ,  $R^{-1} = R^{n-1}$

说明： 1. 循环群是阿贝尔群，循环群中元素乘积可以对易；

2. 循环群生成元的选择不唯一；

3. 只有循环群，生成元的阶才等于群的阶；

# 有限群的一些概念

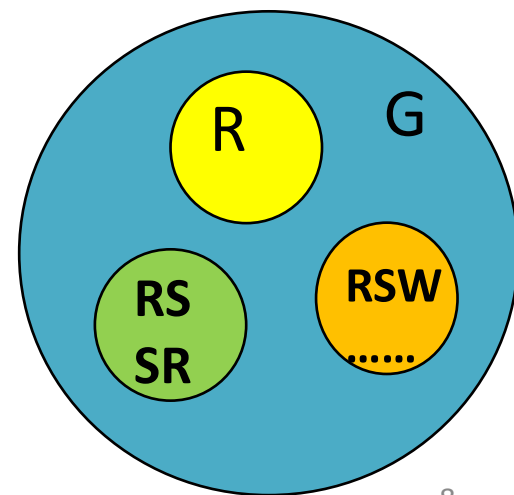
## ➤ 有限群的生成元和秩：

群中元素可以由最小数目个群元的乘积生成，这组群元称为该群的生成元；  
生成元的数目为有限群的秩；

说明：有限群生成元的选择不唯一，但秩不变。

选取生成元  $\{r, s, w, \dots\}$  方法：

1. 有限群中任元素 $r$ 的周期构成群的一个子集， $R = \{r, r^2, \dots, r^n = E\}$
2. 若 $R$ 未充满整个群，则在子群外任取一元素 $s$ ，由 $s$ 周期构成的子集 $S$ 与子集 $R$ 相乘得另两个子集 $RS$ 和 $SR$ （封闭性验证）；
3. 以此类推，最后总能充满整个群，群中所有元素可表示为若干元素的乘积  $T = r^m s w \dots$
4. 适当选择这些元素，使有限群中的元素表示为尽可能少的若干元素的乘积。





# 有限群的一些概念

例1:  $D_3$ 群 =  $\{E, D, F, A, B, C\}$

阶: 群G: 6 ; 群元E: 1 ; 群元D(F): 3 ; 群元A(B, C): 2 ;

周期: E:  $\{E\}$  ; D(F):  $\{E, D, F\}$  ; A:  $\{E, A\}$  ; B:  $\{E, B\}$  ; C:  $\{E, C\}$  ;

复元素:  $\{E, A\} \{D, F\} = \{D, F, AD, AF\} = \{D, F, B, C\}$

生成元:  $\{D, A\}$   $E=D^3=A^2$   $F=D^2$   $B=AD$   $C=DA$  ;

(选择不唯一)  $\{F, A\}$   $E=F^3=A^2$   $D=F^2$   $B=FA$   $C=AF$  ;

秩: 2

例2: 由两个元素A, B生成一个群G, 要求 $A^2=B^3=(AB)^2=E$ 。

解: 群G =  $\{E, A, B, B^2, AB, BA\}$  (见板书)。

例3: 由两个元素A,  $B^2$ 生成一个群G, 要求 $A^2=B^3=(AB)^2=E$ 。

# 有限群的乘法表

➤ **有限群的乘法表：**有限群的二元运算规则，群的全部性质都体现在群的乘法表中

对于有限群，群元素数目有限，我们有可能把元素的乘积全部排列出来，构成一个表，称为群的乘法表(multiplication table)，简称群表。

➤ **乘法表的建立：**

对于  $RS = T$ ， R：左乘元素，S：右乘元素，T：乘积元素；

表的最左面一列：列出全部群元素，作为左乘元素；

表的最上面一行：列出全部群元素，作为右乘元素；

通常：群元素的排列次序可任意选定；

左乘元素和右乘元素的排列次序相同，恒元E排在第一位；

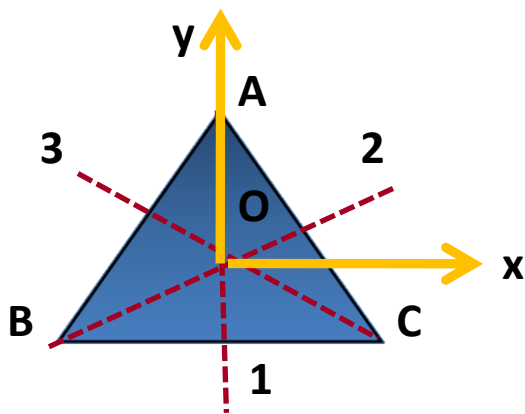
表中每一格填入它所在行最左面一列的元素R（左乘元素）

和它所在列最上面一行的元素S（右乘元素）的乘积RS.

# 有限群的乘法表

例：正三角形的对称变换群  $D_3 = \{E, D, F, A, B, C\}$  的乘法表：

	E	D	F	A	B	C
E	E	D	F	A	B	C
D	D	F	E	C	A	B
F	F	E	D	B	C	A
A	A	B	C	E	D	F
B	B	C	A	F	E	D
C	C	A	B	D	F	E



E: 恒等变换,                      D: 绕Z轴转  $2\pi/3$ ,  
 F: 绕Z轴转  $4\pi/3$ ,            A: 绕轴1转  $\pi$ ,  
 B: 绕轴2转  $\pi$ ,                  C: 绕轴3转  $\pi$ .

# 重排定理

## ➤ 重排定理：关于群的乘法的重要定理

设 $T$ 是群  $G = \{E, R, S, \dots\}$  中的任一确定元素，则下列三个集合与原群  $G$  相同

$TG = \{T, TR, TS, \dots\}$ ,  $GT = \{T, RT, ST, \dots\}$ ,  $G^{-1} = \{E, R^{-1}, S^{-1}, \dots\}$ ,

用复元素符号表达为： $TG = GT = G^{-1} = G$

## ➤ 证明：以 $TG = G$ 为例证明

$T \in G$ , 由群元素乘积封闭性，集合 $TG$ 的所有元素都是群 $G$ 的元素，  $TG \subset G$

反之，群 $G$ 的任意元素 $R$ 都可表成：

$$\left. \begin{array}{l} R = ER = TT^{-1}R = T(T^{-1}R) \in TG \\ T^{-1} \in G \\ R \in G \end{array} \right\} \Rightarrow (T^{-1}R) \in G \quad \left. \vphantom{\begin{array}{l} R = ER = TT^{-1}R = T(T^{-1}R) \in TG \\ T^{-1} \in G \\ R \in G \end{array}} \right\} \Rightarrow G \subset TG$$

因此，由两复元素相等的条件， $TG = G$

## 等价表述：

乘法表的每一行（列）都是所有群元的一个重新排列；

群元素在乘法表的每一行（列）出现一次且只有一次，

不可能有两行（列）元素是相同的。

# 有限群的乘法表

➤ 低阶群乘法表：重排定理完全确定了表中剩余位置的填充（黄色格）

$C_1$ 群

	E
E	E

$C_2$ 群 ( $V_2$ 群)

	E	I
E	E	I
I	I	E

$C_3$ 群:  $C_3 = \{1, \exp(-i2\pi/3), \exp(i2\pi/3)\}$

	E	D	F
E	E	D	F
D	D	F	E
F	F	E	D

$$C_2 = \{1, -1\}$$

$$V_2 = \{\text{恒等变换, 空间反演变换}\}$$

四阶循环群 $C_4$

	E	A	B	C
E	E	A	B	C
A	A	B	C	E
B	B	C	E	A
C	C	E	A	B

四阶反演群 $V_4$  ( $D_2$ 群)

	E	A	B	C
E	E	A	B	C
A	A	E	C	B
B	B	C	E	A
C	C	B	A	E

五阶循环群 $C_5$

	E	A	B	C	D
E	E	A	B	C	D
A	A	B	C	D	E
B	B	C	D	E	A
C	C	D	E	A	B
D	D	E	A	B	C

循环群的乘法表：

当表中元素按生成元的幂次排列时，表的每一行都可由前一行向左移动一格得到，而最左面的元素移到最右面去。

# 有限群的乘法表

建立群表的方法：

例：正三角形的对称变换群  $D_3 = \{E, D, F, A, B, C\}$  的乘法表

	E	D	F	A	B	C
E	E	D	F	A	B	C
D	D	F	E	C	A	B
F	F	E	D	B	C	A
A	A	B	C	E	D	F
B	B	C	A	F	E	D
C	C	A	B	D	F	E

只利用：

$C_3$ 群乘法表、 $DA=C$ 、重排定理，  
完成了 $D_3$ 群乘法表。

对阶数较高的有限群，填乘法表的工作量会比较大，这时由子群乘法表扩充的方法，可以减轻工作量。

1. 填写第一行和第一列；
2.  $\{E, D, F\}$  构成三阶循环群，由 $C_3$ 群乘法表给出；
3.  $A, B, C$ 的阶为2，平方是恒元 $E$ ；
4. 利用  $DA=C$ （第二行第四列），重排定理填写第二、三行；
5.  $D=CA$ （ $A$ 右乘）， $CD=A$ （ $C$ 左乘），重排定理填写第六行；
6. 余下的格子（第四、五行）都可根据重排定理填写；

# 有限群的乘法表

建立群表的另一种方法（群的线性表示）：

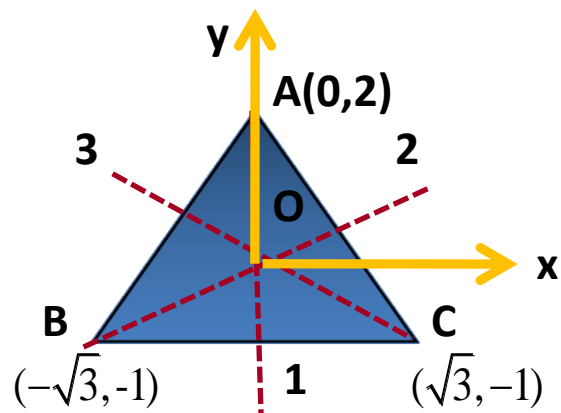
例：正三角形的对称变换群  $D_3 = \{E, D, F, A, B, C\}$  的乘法表

变换前的坐标记作  $(x, y)$ ，变换后的坐标记作  $(x', y')$ ，则变换操作用  $2 \times 2$  矩阵表示

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

例如：变换D将点A变到点B，点B变到点C，有：

$$\begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}$$



$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, \quad F = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix},$$
$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, \quad C = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix},$$

# 第二节：群的各种子集

## ➤ 子群(subgroup)：

设H是群G的一个子集，若H与群G有同样的乘积规则，也满足群的四个条件，则称H为G的子群，常记为  $H \subset G$

说明：证明群G的非空子集 H是群G的子群充要条件：

- ① 封闭性：  $h_\alpha, h_\beta \in H \Rightarrow h_\alpha \cdot h_\beta \in H \Rightarrow$  对有限群而言
- ② 逆元：  $h_\alpha \in H \Rightarrow h_\alpha^{-1} \in H$
- ③ 恒元：  $E \in H$

## ➤ 几类常用子群：

- 平庸（凡）子群（显然子群）：对任意群G，恒元E和整个群G本身都是G的子群；
- 固有子群（真子群）：群的非平庸子群（若无特殊说明，所说子群为真子群）；
- 循环子群：任一元素的周期构成的子群（群的乘法封闭性保证）；

## ➤ 寻找有限群子群的方法：

先列出它的全部循环子群，然后把若干循环子群并起来，看它们是否满足封闭性。

例：正三角形的对称变换群  $D_3 = \{E, D, F, A, B, C\}$  的子群：

$\{E, A\}$  ,  $\{E, B\}$  ,  $\{E, C\}$  ,  $\{E, D, F\}$



# 陪集和不变子群

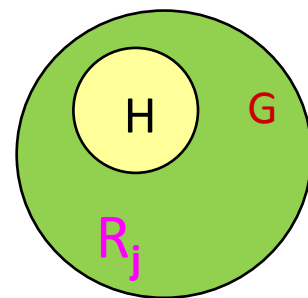
## ➤ 陪集（旁集）：

设群G的阶为g，有子群H的阶为h， $H = \{S_1, S_2, \dots, S_h\}$ ， $S_1 = E$

任取群G中不属于子群H的元素 $R_j$ ，把它左乘或右乘到子群H上，

得到群G的两个子集  $R_j H = \{R_j, R_j S_2, \dots, R_j S_h\}$ ，则 $R_j H$ 称为子群H的左陪集；

$(R_j \in G, R_j \notin H)$   $H R_j = \{R_j, S_2 R_j, \dots, S_h R_j\}$ ，则 $H R_j$ 称为子群H的右陪集。



## ➤ 陪集性质：

(1) 陪集与子群没有公共元素

证明：假设左陪集与子群有公共元素  $R_j S_\mu = S_\nu \Rightarrow R_j = S_\nu S_\mu^{-1} \in H$

与前提  $R_j \notin H$  矛盾

说明：陪集中不包含恒元，即陪集一定不是群G的子群

(2) 陪集中没有重复元素

证明：若有重复元素  $R_j S_\mu = R_j S_\nu \Rightarrow S_\mu = S_\nu \in H$

与H中无重复元素矛盾

# 陪集性质

## ➤ 陪集性质:

(3) 陪集定理:  $H$  的两个左 (右) 陪集, 要么有完全相同的元素;  
要么没有任何公共元素。

证明: 设  $R_1, R_2 \in G, R_1, R_2 \notin H$  则由  $R_1, R_2$  生成  $H$  两个左陪集

$$R_1H = \{R_1S_1, \dots, R_1S_\mu, \dots, S_\mu \in H\}, \quad R_2H = \{R_2S_1, \dots, R_2S_\mu, \dots, S_\mu \in H\}$$

假设两个左陪集有一个公共元素, 即

$$R_1S_\mu = R_2S_\nu \Rightarrow R_2^{-1}R_1S_\mu = S_\nu \Rightarrow R_2^{-1}R_1 = S_\nu S_\mu^{-1} = S_\rho \in H$$

由重排定理,  $TG=G$ , 对子群同样适用

$$S_\rho \in H \Rightarrow S_\rho H = H \Rightarrow R_2^{-1}R_1H = H \Rightarrow R_1H = R_2H$$

若两个左陪集有一个公共元素, 则两个左陪集完全相同

# 陪集性质

(4) 拉格朗日定理 (Lagrange theorem): 给出分割有限群的一种方式;

群 $G$ 的阶 $g$ 一定是子群 $H$ 的阶 $h$ 的整数倍

证明: 任取  $R_1 \in G, R_1 \notin H$  作左陪集  $R_1H$  (不是群), 陪集与子群无公共元素, 则 $H$ 与  $R_1H$  是不同的集合; 若 $H$ 与  $R_1H$  不能充满整个群, 则另取  $R_2 \in G, R_2 \notin H$  作 $R_2H$ , 则  $H, R_1H, R_2H$ 无公共元素; 若仍不能充满整个群, 则继续...

由于 $G$ 是有限群, 则存在一个 $R_{d-1}$ 使得  $H, R_1H, R_2H, \dots, R_{d-1}H$  充满整个群,

即群 $G$ 的任一元素都包含在子群和它的左陪集中, 每个集合都有 $h$ 个元素;

群 $G$ 的阶 $g = \text{子群}H\text{的阶}h \times d$ ,  $d$ 为整数, 称为子群的指数, 等于子群 $H$ 左陪集数+1。

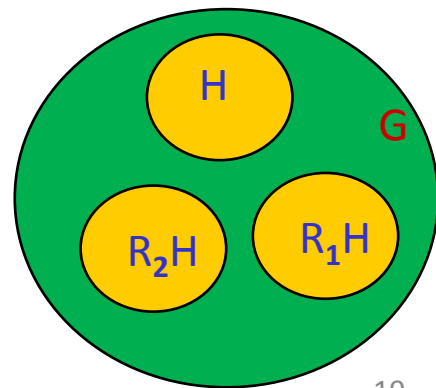
上面证明中, 把群 $G$ 的元素分成其子群和左陪集的做法,

提供了一种把群 $G$ 分割为不相交子集的方法, 这是一种

很有用的分割方法; 同样也可以将 $G$ 分割成子群和右陪集串。

$$G = H \cup R_1H \cup R_2H \cup \dots \cup R_{d-1}H, \quad g = dh$$

推广: 阶数为素数的群没有非平庸子群, 群中除恒元外元素的阶都是该素数, 因此此群一定是循环群。



# 陪集性质

(5) 群G中两元素R和T属于同一个左陪集的充要条件是  $R^{-1}T \in H$

群G中两元素R和T属于同一个右陪集的充要条件是  $TR^{-1} \in H$

证明：充分性（左 到 右）

$$R^{-1}T \in H \Rightarrow R(R^{-1}T) = RS_{\mu} \in RH \Rightarrow T = RS_{\mu} \in RH$$

$$R = RE \in RH$$

R、T属于同一左陪集RH

必要性（右 到 左）

$$T \in RH = \{R, RS_1, \dots, RS_h\} = \{RS_{\mu}, S_{\mu} \in H\}$$

$$T = RS_{\mu} \Rightarrow R^{-1}T = S_{\mu} \in H \Rightarrow R^{-1}T \in H$$

# 不变子群和商群

## ➤ 不变子群（正规子群）：

若群G的子群H的所有左陪集都与对应的右陪集相等，

$R_j H = H R_j$ ,  $R_j S_\mu = S_\nu R_j$ ，则称子群H为不变子群。

说明：

①  $S_\mu, S_\nu$  不一定是同一元素；

② 阿贝尔群的所有子群都是不变子群（所有群元素对易）；

③ 指数为2的子群必为不变子群（ $d=2$ ，则只有一个陪集）；

## ➤ 商群：

不变子群H及其所有陪集作为复元素的集合，若按复元素的乘积规则满足群的四个条件，称为群G关于不变子群H的商群，记作G/H。

恒元：不变子群H

阶：子群的指数  $d=g/h$

# 陪集和不变子群

## 从乘法表上找子群的陪集

乘法表中与子群元素有关的各列中，每一行的元素分别构成子群或左陪集；

乘法表中与子群元素有关的各行中，每一列的元素分别构成子群或右陪集；

例： $D_3$ 群= {E, D, F, A, B, C}

子群 {E, A} 的左陪集：{D, C} , {F, B}；

右陪集：{D, B} , {F, C}；非不变子群

子群 {E, B} 的左陪集：{D, A} , {F, C}；

右陪集：{D, C} , {F, A}；非不变子群

子群 {E, C} 的左陪集：{D, B} , {F, A}；

右陪集：{D, A} , {F, B}；非不变子群

子群 {E, D, F} 的左陪集：{A, B, C} ；

右陪集：{A, B, C} ；不变子群

不变子群 {E, D, F} 的商群：{ {E, D, F}, {A, B, C} } .

	E	D	F	A	B	C
E	E	D	F	A	B	C
D	D	F	E	C	A	B
F	F	E	D	B	C	A
A	A	B	C	E	D	F
B	B	C	A	F	E	D
C	C	A	B	D	F	E

# 共轭元素和类


## ➤ 共轭元素:

设 $R$ 、 $T$ 是群 $G$ 的两个元素  $R, T \in G$  , 若存在  $S \in G$  , 使  $T = SRS^{-1}$

则称元素 $T$ 与 $R$ 共轭, 即 $T$ 与 $R$ 称为互相共轭的元素;

性质:

对称性:  $T = SRS^{-1} \Rightarrow R = S^{-1}TS$  共轭是相互的;

传递性:  $T_1$ 与 $R$ 互为共轭元素,  $T_1 = S_1RS_1^{-1}$   
 $T_2$ 与 $R$ 互为共轭元素,  $T_2 = S_2RS_2^{-1}$    $T_1$ 与 $T_2$ 互为共轭元素  
 $T_2 = S_2RS_2^{-1} = S_2S_1^{-1} T_1 S_1 S_2^{-1}$   
 $= (S_2S_1^{-1}) T_1 (S_2S_1^{-1})^{-1}$

## ➤ 共轭子群:

设 $H$ 和 $K$ 是群 $G$ 的两个子群, 若有  $g \in G$  使得

$K = gHg^{-1} = \{k = ghg^{-1} \mid h \in H\}$  , 则称 $H$ 是 $K$ 的共轭子群

性质:

对称性:  $K$ 是 $H$ 的共轭子群, 同时 $H$ 也是 $K$ 的共轭子群

传递性: 若 $H_1, H_2$ 是 $K$ 的共轭子群, 则 $H_1, H_2$ 也互为共轭子群。

# 共轭元素和类

## ➤ 类 (class) :

群G的所有相互共轭的元素集合组成G的一个类，即

$$C_{\alpha} = \{R_1, R_2, \dots, R_{n(\alpha)}\} = \{R_k | R_k = SR_j S^{-1}, S \in G\}$$

$n(\alpha)$  : 类中所含元素数目;  $g_c$  : 群G所包含的类的数目

性质:

- 1) 恒元自成一类;  $\forall S \in G, SES^{-1} = SS^{-1}E = E$
- 2) 阿贝尔群的每个元素自成一类;  $\forall S, R \in G, SRS^{-1} = SS^{-1}R = R$
- 3) 若R的阶为m, 即 $R^m=E$ , 则有限群中相互共轭的元素的阶相同;
- 4) 对任意给定的  $S \in G$ , 当 $R_j$ 取遍所有元素时,  $SR_j S^{-1}$  不会有重复,  
故  $SC_a S^{-1} = C_a$  类中每个元素只出现一次, 仍为自身 (重排定理);
- 5) 类 $C_a$  中包含元素数目是群G阶的整数因子;
- 6) 两个不同的类没有公共元素, 可将群G按照共轭类进行分割 (共轭元素传递性)



# 共轭元素和类

➤ **相逆类：** 类  $C_\alpha$  中元素  $R_j$  的逆元  $R_j^{-1}$  也必定互相共轭

$$R_i = SR_j S^{-1} \Rightarrow R_i^{-1} = SR_j^{-1} S^{-1}$$

逆元  $R_j^{-1}$  的集合也够成类，记作  $C_\alpha^{-1}$ ； $C_\alpha$  与  $C_\alpha^{-1}$  称为相逆类，

它们包含的元素数目相同  $n(\alpha)$

**自逆类：** 若元素与其逆元互相共轭，则类  $C_\alpha$  与其逆  $C_\alpha^{-1}$  重合，  
这样的类称为自逆类。

**说明：**

同类元素的阶必相同，但阶数相同的元素不一定属于同一类

在寻找类时，我们只需在阶数相同的元素中去判断它们是否共轭

➤ **用乘法表判断共轭元素：**

(1)  $TS$  与  $ST$  是共轭的， 因为  $ST = ST \quad SS^{-1} = S(TS)S^{-1}$ ；

反之，互相共轭的元素一定可表达成某两元素的不同次序的乘积；

(2) 若乘法表中左乘元素与右乘元素排列次序相同，

则在乘法表中关于对角线对称的两元素互相共轭；

即 互相共轭的元素一定出现在乘法表中关于对角线对称位置

# 类和不变子群

➤ 寻找群的类和不变子群： 是分析有限群性质的关键步骤

- 有限群的类：

- (1) 由乘法表寻找共轭元素；
- (2) 类中元素的阶和类的定义；
- (3) 群元素的转动性质；

- 有限群的不变子群：

- (1) 不变子群的定义；
- (2) 由类来构造；

例：  $D_3$  群 =  $\{E, D, F, A, B, C\}$

D, F 的阶数： 3； A, B, C 的阶数： 2；

共轭类：  $\{E\}$ ,  $\{D, F\}$ ,  $\{A, B, C\}$ ， 都是自逆类

不变子群：  $\{E, D, F\}$

# 第三节：群的同态与同构、群的直乘

## ➤ 群的同构关系：

若群 $G'$ 和 $G$ 的所有元素间都按某种规则存在一一对应的关系（双射），且它们的乘积也按同一规则一一对应，则称两群同构。

符号表示：

若  $R, S \in G$ ,  $R', S' \in G'$  且  $R' \leftrightarrow R$ ,  $S' \leftrightarrow S$ ,  $R'S' \leftrightarrow RS$  则  $G' \approx G$

说明：

- ① 互相同构的群，它们群的性质完全相同；
- ② 如果两个有限群的乘法表相同，则此两群同构；
- ③ 两个群的恒元与恒元对应；
- ④ 同构无方向性  $G' \approx G \Leftrightarrow G \approx G'$
- ⑤ 阶数为相同素数的有限群都同构；

例子： $C_2$ 群与 $V_2$ 群同构（乘法表相同，所有的二阶群同构）；

绕 $z$ 轴转过 $2\pi/N$ 角度的所有转动变换与 $N$ 阶循环群同构；

群 $G$ 的两个互为共轭的子群是同构的；

# 群的同态关系

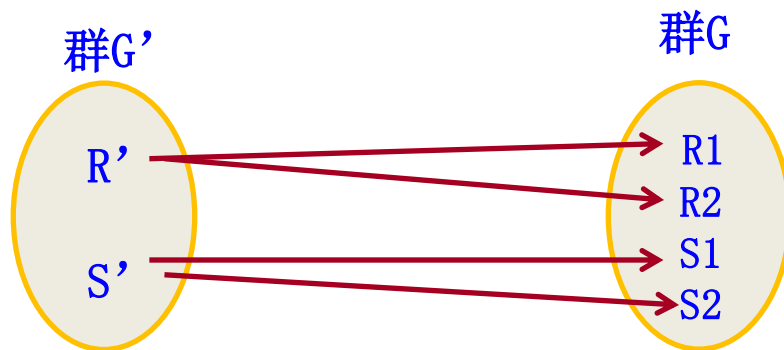
## ➤ 群的同态关系：

若群 $G'$  和 $G$ 的所有元素间都按某种规则存在一多对应关系（满射），即群 $G$ 中任一元素都唯一对应 $G'$  中的一个确定元素， $G'$  中任一元素至少对应 $G$ 中一个元素，也可对应 $G$ 中若干元素，且群元素的乘积也按同一规则一多对应，则称两群同态。  
符号表示：

若  $R, S \in G$ ,  $R', S' \in G'$  且  $R' \leftarrow R$ ,  $S' \leftarrow S$ ,  $R'S' \leftarrow RS$  则  $G' \sim G$

说明：

- ① 同态有方向性，即 $G'$  与 $G$ 同态，不一定 $G$ 与 $G'$  同态；
- ② 同构是一种特殊的同态，即 若 $G' \approx G$ ，则必有  $G' \sim G$ ；反之则不一定；
- ③ 显然只含恒元的群 $\{E\}$ 与任何群同态，一般不考虑这种同态；
- ④ 群 $G'$  只反映了群 $G$ 的部分性质；



# 群的同态关系

## ➤ 同态核定理：

若群 $G'$ 与群 $G$ 同态，则与 $G'$ 恒元相对应的 $G$ 中元素的集合 $H$ 称为同态核，则有

1. 同态核 $H$ 是 $G$ 的不变子群；
2. 与 $G'$ 其它每个元素对应的 $G$ 中元素的集合构成 $H$ 的陪集；
3. 群 $G'$ 与群 $G$ 关于 $H$ 的商群同构，即 $G' \approx G/H$ ；

### 说明：

当 $G'$ 与 $G$ 同态时， $G'$ 反映的是 $G$ 中商群 $G/H$ 的性质；

但同态核 $H$ 内部元素的差别没有反映出来。

### 证明思路：

- ① 先证与群 $G'$ 中恒元 $E'$ 对应的 $G$ 中元素集合 $H$ 是 $G$ 的子群；
- ② 再证 $H$ 是 $G$ 的不变子群；
- ③ 最后证与 $G'$ 其它元素 $R'$ 对应的 $G$ 中元素集合是 $H$ 的陪集 $RH$   
则 $G'$ 显然与商群 $G/H$ 同构（见商群定义）；

# 群的同态关系

证明:

(1) 设  $H = \{S_1, S_2, \dots, S_h\}$ ,  $H$  中的元素与元素间乘积均对应于  $G'$  中的恒元  $E'$ , 即

$$S_\mu \rightarrow E', \quad S_\nu \rightarrow E', \quad S_\mu S_\nu \rightarrow E', \quad \text{因此有 } S_\mu \in H, \quad S_\nu \in H, \quad S_\mu S_\nu \in H$$

即子集  $H$  对元素乘积封闭。

设  $G$  中的恒元  $E \rightarrow G'$  中的元素  $T'$ , 则  $ES_\mu \rightarrow T' E'$ , 同时,  $ES_\mu = S_\mu \rightarrow E'$ , 则  $T' E' = E'$  即  $T' = E'$ , 亦即  $E \rightarrow E'$ , 恒元  $E$  属于子集  $H$ .

将群  $G$  中任意元素  $R$  及其逆元  $R^{-1}$  对应  $G'$  中的元素  $R'$ ,  $P'$  即  $R \rightarrow R', \quad R^{-1} \rightarrow P'$

$$\left. \begin{array}{l} R^{-1}R = E \rightarrow E' \\ R^{-1}R \rightarrow P'R' \end{array} \right\} \Rightarrow E' = P'R' \Rightarrow P' = R'^{-1}$$

即  $R \rightarrow R', \quad R^{-1} \rightarrow R'^{-1}$ ,  $G$  中互逆元素对应  $G'$  中的元素也互逆, 则对  $S_\mu, S_\mu^{-1} \in H \in G$  有  $S_\mu \rightarrow E', S_\mu^{-1} \rightarrow E'^{-1} = E'$ , 因此,  $H$  中任意元素  $S_\mu$  的逆  $S_\mu^{-1}$  属于子集  $H$ .

$H$  中的元素都属于群  $G$ , 则  $H$  中元素乘积显然满足结合律。

子群  $H$  在与群  $G$  相同的乘积规则下, 满足群的四个条件, 因此,  $H$  是  $G$  的子群。

# 群的同态关系

(2)

群 $G$ 中的元素  $RS_{\mu} R^{-1} \rightarrow G'$  中的元素  $R' E' R'^{-1} = E'$

即  $RS_{\mu} R^{-1} = S_{\nu} \rightarrow E'$  属于 $H$ , 则  $RS_{\mu} = S_{\nu} R$ , 由元素的任意性, 可知  $RH = HR$

因此, 子群 $H$ 是 $G$ 的不变子群

(3)

$H$ 的陪集元素  $RS_{\mu} \rightarrow G'$  中的元素  $R' E' = R'$  ;

反过来, 将 $G'$  中的元素 $R'$  对应 $G$ 中的任意元素记为 $R_{\mu}$  (不唯一);

群 $G$ 中的元素  $RS_{\mu} R^{-1} \rightarrow G'$  中的元素  $R' E' R'^{-1} = E'$  ,

又 $G$ 中 $R^{-1} \rightarrow G'$  中  $R'^{-1}$  ,  $R_{\mu} \rightarrow R'$  , 则  $R^{-1}R_{\mu} \rightarrow R'^{-1}R' = E'$  ,

因此,  $R^{-1}R_{\mu}$  属于 $H$ , 这是 $R, R_{\mu}$  属于同一左陪集 $RH$ 的充要条件。

又  $R, R_{\mu}$  均对应 $G'$  中的 $R'$  , 考虑到元素的任意性, 可知商群 $G/H$ 的每一个复元素 $H$ 或 $RH$ 分别与 $G'$  中元素 $E'$  或 $R'$  存在一一对应的关系, 它们的乘积也同一规则地一一对应, 因此,  $G/H \approx G'$  .

# 群的同态关系

## ► 定理：

设群 $G$ 是一已知群，集合 $G'$ 是一个定义了乘积规则又对乘积规则封闭的集合，若群 $G$ 中任一元素 $R$ 都按某种规则唯一地对应集合 $G'$ 中的一个确定元素 $R'$ ，而集合 $G'$ 中任一元素 $R'$ 至少对应 $G$ 中的一个元素 $R$ ，而且这种一一对应或一对多对应的关系对元素乘积保持不变；则集合 $G'$ 构成群，且与已知群 $G$ 同构或同态。

## 证明思路：

只需证 $G'$ 构成群，然后由定理给出的条件就可知道它与群 $G$ 同构或同态。

## 证明：

- ① 封闭性：由定理给出的假设条件自动满足
- ② 结合律：设 $G$ 中的元素与 $G'$ 中元素的对应为  $R \rightarrow R'$ ， $S \rightarrow S'$ ， $T \rightarrow T'$ ，  
则乘积也有对应关系  $(RS)T \rightarrow (R'S')T'$ ， $R(ST) \rightarrow R'(S'T')$   
群 $G$ 中的元素满足结合律，即  $(RS)T = R(ST)$ ，则  $(R'S')T' = R'(S'T')$   
即集合 $G'$ 中的元素乘积满足结合律
- ③ 恒元： $E \rightarrow E'$ ， $R \rightarrow R'$ ， $ER = R \rightarrow E'R' = R'$ ，即集合 $G'$ 中的恒元为 $E'$
- ④ 逆元：设  $R^{-1} \rightarrow P'$ ，则  $R^{-1}R = E \rightarrow P'R' = E'$  可得  $P' = R'^{-1}$  即 $G'$ 中存在任意元素 $R'$ 的逆 $R'^{-1}$



# 例子

(1)  $D_3$ 群到 $S_3$ 群的同构映射:

$$\begin{aligned} E &\leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, & D &\leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, & F &\leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \\ A &\leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}, & B &\leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, & C &\leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

(2)  $D_3$ 群到 $C_2$ 群的同态映射:  $C_2 = \{E, I\}$

$$\{E, D, F\} \rightarrow E, \quad \{A, B, C\} \rightarrow I$$

(3)  $D_3$ 群到 $C_3$ 群的映射:  $C_3 = \{E, W, W^2\}$

$$\{E, A\} \rightarrow E, \quad \{D, C\} \rightarrow W, \quad \{F, B\} \rightarrow W^2,$$

$$\{D, C\} \{D, C\} = \{F, A, B, E\} \neq \{F, B\},$$

不是同态映射。

# 群的直接乘积

## ➤ 群的直乘:

设群 $H_1$ 和 $H_2$ 是群 $G$ 的两个子群  $H_1 = \{R_1, R_2, \dots, R_{h_1}\}$ ,  $R_1 = E$ ,  $H_2 = \{S_1, S_2, \dots, S_{h_2}\}$ ,  $S_1 = E$ , 若满足:

- ① 除恒元 $R_1 = S_1 = E$ 外, 子群 $H_1$ 和 $H_2$ 无公共元素;
- ② 群 $G$ 的乘积规则:  $R_j \in H_1, S_\mu \in H_2 \Rightarrow R_j S_\mu = S_\mu R_j$ ;
- ③ 群 $G$ 的元素:  $G = \{R_j S_\mu, R_j \in H_1, S_\mu \in H_2\}$

则称群 $G$ 为 $H_1$ 和 $H_2$ 的直接乘积, 简称直乘 (直积), 记作  $G = H_1 \otimes H_2$ , 群 $H_1, H_2$ 称为群 $G$ 的直乘 (直积) 因子.

## 说明:

- ① 直积群的阶是两个子群阶的乘积  $g = h_1 \times h_2$  ;
- ② 群 $H_1$ 和 $H_2$ 都是群 $G$ 的不变子群;
- ③ 直乘因子 $H_1, H_2$ 并不一定是阿贝尔群;

例:  $C_6 = C_2 \otimes C_3$  ;  $V_4 = C_2 \otimes C_2$

# 应用：列举给定阶的不同群

同构的群具有相同的结构，无论具体的群元素是什么（数值，变换或矩阵），从群论角度讲，同构的群本质是相同的，只是解决具体问题时，需将群元素对应到具体的研究对象（物理量）即可，因此，我们只需研究众多同构群中的一个即可；自然希望能够列举出给定阶的不同群，这里的不同，指相互不同构的群，当阶数 $n$ 较小时，这很容易做到，下面列举 $n=1-7$ 的各阶群的可能结构。

## 判别依据：

(1) 群 $G$ 的阶 $g$ 一定是子群 $H$ 的阶 $h$ 的整数倍，子群的指数  $d=g/h$  ( $d$ =陪集数+1)

$$G = H \cup R_2 H \cup R_3 H \cup \cdots \cup R_d H, \quad g = dh, \quad R_1 = E$$

(2) 对有限群 $G$ 中的元素 $A$ ，它的周期是群 $G$ 的一个子群，则

有限群的任一元素的阶( $m$ )必定是此群阶( $g$ )的整数因子，即  $g/m$ =整数

# 应用：列举给定阶的不同群

## (1) 一阶群 ( $n=1$ ) :

只有一种结构：仅有恒元  $G = \{E\}$

## (2) 二阶群 ( $n=2$ ) :

只有一种结构：2阶循环群  $G = \{A, A^2=E\}$

## (3) 三阶群 ( $n=3$ ) :

只有一种结构，3阶循环群  $G = \{A, A^2, A^3=E\}$  或  $G = \{B, B^2, B^3=E\}$

## (4) 四阶群 ( $n=4$ ) :

(a) 4阶循环群  $G = \{A, A^2, A^3, A^4=E\}$

(b) 4阶非循环阿贝尔群  $G = \{E, A, B, C\}$ ,

且  $A^2=B^2=C^2=E$ ,  $AB=C$ ,  $BC=A$ ,  $CA=B$ ; 这是最低阶非循环群

## (5) 五阶群 ( $n=5$ ) :

只有一种结构，5阶循环群  $G = \{A, A^2, A^3, A^4, A^5=E\}$

## (6) 六阶群 ( $n=6$ ) : 两种不同构的群

(a) 6阶循环群  $G = \{A, A^2, A^3, A^4, A^5, A^6=E\}$

(b) 6阶非循环非阿贝尔群  $G = \{E, A, B, C, D, F\}$ ,

且  $A^3 = B^3 = E$ ,  $C^2 = D^2 = F^2 = E$ ; 这是最低阶非阿贝尔群

# 应用：列举给定阶的不同群

## (7) 七阶群 ( $n=7$ )：

只有一种结构，7阶循环群  $G = \{A, A^2, A^3, A^4, A^5, A^6, A^7 = E\}$

更大的  $n$  值，按照这样的做法继续下去，原则上可以求出所有不同构的群，但比较困难。

一般说来，非同构群的数目随  $n$  的增大而增加，但是有两点**共性**：

1. 对任意有限的  $n$  值，总有一个由  $n$  阶元素构成的循环群，  
即  $\{A^n=E, A, \dots, A^{n-1}\}$ ；
2. 若群的阶  $n$  是一个素数，则只能有一种结构，就是  $n$  阶循环群。

# 第四节：点群简介

## ➤ 转动分类：

- 固有转动： 三维空间的纯粹转动（保持坐标系手征性不变）；
- 非固有转动： 纯转动与空间反演的联合变换（改变坐标系的手征性）

两类转动都保持坐标系原点不变，保持空间任意点到原点的距离不变（保长变换）

## ➤ 点群定义：

由两类转动的集合构成的有限群；

## ➤ 点群分类：

- 固有点群： 由固有转动的集合构成的有限群，例： $C_n$  群、 $D_n$ 群、T、O、I群；
- 非固有点群： 由固有和非固有转动的集合构成的有限群；

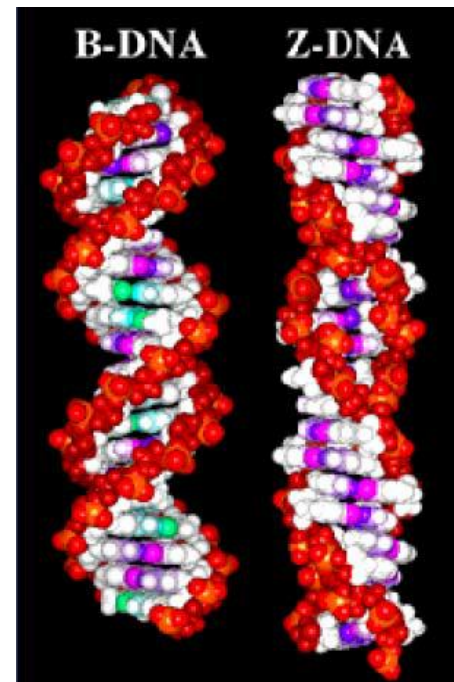
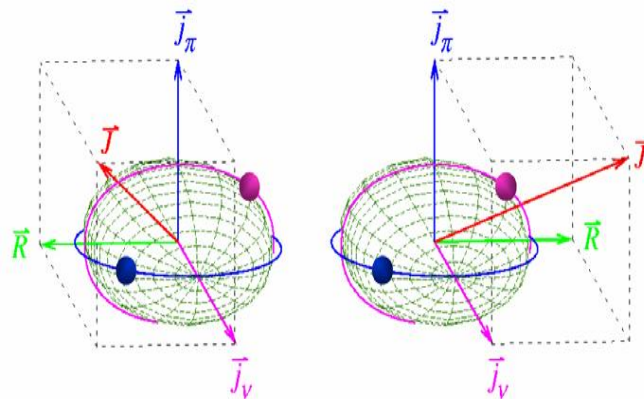
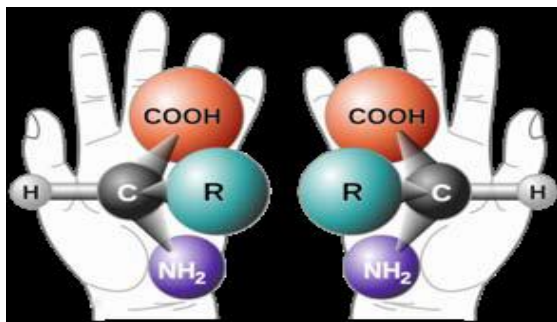
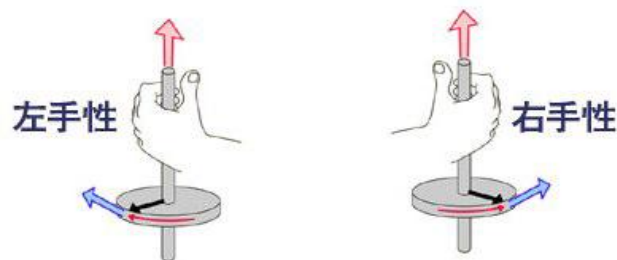
由固有点群构造非固有点群；

# 第四节：点群简介

## ➤ 手征对称性：

如果一个图像与其镜像在空间上不能完全重叠，则该图像有手征性；

- 宏观世界：左右手，海螺壳
- 手性药物：2001年诺贝尔化学奖
- 分子生物学：氨基酸、DNA分子
- 固体物理：晶体结构
- 粒子物理：中微子
- 核物理：原子核手征转动



# 正N边形对称变换群-D<sub>N</sub>群

**D<sub>N</sub>群** (正N边形对称变换群):

➤ **群元素:** 2N个元素, N个T, N个S<sub>j</sub>

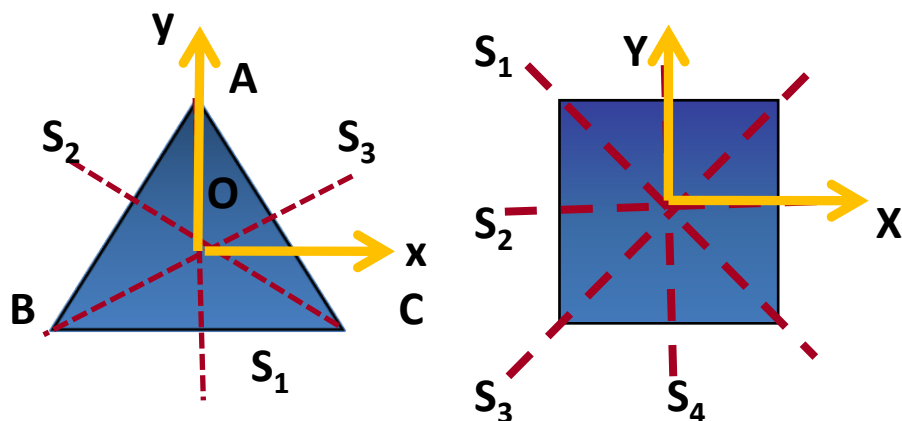
1. **N阶转动轴:** 通过中心垂直于正N边形的轴 (Z轴), 绕Z轴转动  $2\pi/N$  角的变换记作T, N个对称变换:  $T, T^2, \dots, T^{N-1}, T^N=E$  (N阶循环群)

2. **二阶转动轴:** 在xy平面上      N为偶数: 两相对顶点连线 (N/2个)

两对边中点连线 (N/2个)

N为奇数: 顶点到对边中点连线 (N个)

这样的转动轴共N个, 相应的变换记作 S<sub>j</sub> ( $0 \leq j \leq N-1$ ),  $S_j^2=E$  (2阶循环群)



**N次 (阶) 转动轴:**

设点群G是由绕固定轴k 转动生成的n阶群, 则G由C<sub>k</sub>(2π/n)生成. 固定轴k 称为n次轴, 将元素C<sub>k</sub>(2π/n)记为C<sub>n</sub>, 群G是由C<sub>n</sub>生成的n阶循环群 {C<sub>n</sub>, C<sub>n</sub><sup>2</sup>, ..., C<sub>n</sub><sup>n</sup>=E}.



# 固有点群-正N边形对称变换群

$D_N$ 群（正N边形对称变换群）：

➤ 群元素：

$2N$ 个元素， $N$ 个 $T$ ， $N$ 个 $S_j$ ：

$T, T^2, \dots, T^{N-1}, T^N=E$ （ $N$ 阶循环群）

$S_j, S_j^2=E$ （2阶循环群）

➤ 乘积规则：

由  $TS_j=S_{j+1}$ （ $j \bmod N$ ）可推得乘积规则：

$T^N=S_j^2=E$ ； $T^m S_j=S_{j+m}$ ， $j \bmod N$ （ $S_{j+N}=S_j$ ）；

$T^m=S_{j+m} S_j=S_j S_{j-m}$ ； $S_j T^m=S_{j-m}$ ；

上面一组公式给出有限群群元素乘积规则的另一种方法，

当群的阶数较高时，这个方法方便；阶数较低时，用乘法表更方便。

# 固有点群-正N边形对称变换群

$D_N$ 群 (正N边形对称变换群):

➤ 生成元:  $\{T, S_0\} \cdots$ ;

➤ 子群:  $C_N$ 群  $\{T, \cdots, T^N=E\}$ ,  $\{E, S_j\}$  with  $j=0, 1, \cdots, N-1$ ;

➤ 类:

$D_{2n+1}$ 群:  $N=2n+1$  有 $n+2$ 个自逆类:  $\{E\}$ ,  $\{T^m, T^{-m}\}$  ( $1 \leq m \leq n$ ),  $\{S_0, S_1, \cdots, S_{2n}\}$ ;

$D_{2n}$ 群:  $N=2n$  有 $n+3$ 个自逆类:  $\{E\}$ ,  $\{T^m, T^{-m}\}$  ( $1 \leq m \leq n-1$ ),  $\{T^n\}$ ,  
 $\{S_0, S_2, \cdots, S_{2n-2}\}$ ,  $\{S_1, S_3, \cdots, S_{2n-1}\}$ ;

➤ 不变子群:

$D_{2n+1}$  群:  $C_{2n+1}$ 群  $= \{E, T, T^2, \cdots, T^{2n}\}$ ;

$D_{2n}$  群:  $C_{2n}$ 群  $= \{E, T, T^2, \cdots, T^{2n-1}\}$ ,  $D_n$ 群  $= \{E, T^2, \cdots, T^{2n-2}, S_0, S_2, \cdots, S_{2n-2}\}$ ,

$D_n'$  群  $= \{E, T^2, \cdots, T^{2n-2}, S_1, S_3, \cdots, S_{2n-1}\}$ , 中心  $= \{E, T^n\}$ ;

# 固有点群-正N边形对称变换群

$D_N$ 群 (正N边形对称变换群) 例子:

- $D_4$ 群 =  $\{E, T, T^2, T^3, S_0, S_1, S_2, S_3\}$

类:  $\{E\}, \{T, T^3\}, \{T^2\}, \{S_0, S_2\}, \{S_1, S_3\};$

不变子群:  $C_4$ 群 =  $\{E, T, T^2, T^3\}$ ,  $D_2$ 群 =  $\{E, T^2, S_0, S_2\}$ ,  $D_2'$ 群 =  $\{E, T^2, S_1, S_3\}$ ,

中心 $C_2$ 群 =  $\{E, T^2\}$

群的直积:  $D_4 \neq D_2 \otimes C_2$

- $D_5$ 群 =  $\{E, T, T^2, T^3, T^4, S_0, S_1, S_2, S_3, S_4\}$

类:  $\{E\}, \{T, T^4\}, \{T^2, T^3\}, \{S_0, S_1, S_2, S_3, S_4\};$

不变子群:  $C_5$ 群 =  $\{E, T, T^2, T^3, T^4\}$

- $D_6$ 群 =  $\{E, T, T^2, T^3, T^4, T^5, S_0, S_1, S_2, S_3, S_4, S_5\}$

类:  $\{E\}, \{T, T^5\}, \{T^2, T^4\}, \{T^3\}, \{S_0, S_2, S_4\}, \{S_1, S_3, S_5\};$

不变子群:  $C_6$ 群 =  $\{E, T, T^2, T^3, T^4, T^5\}$ ,  $D_3$ 群 =  $\{E, T^2, T^4, S_0, S_2, S_4\}$ ,

$D_3'$ 群 =  $\{E, T^2, T^4, S_1, S_3, S_5\}$ , 中心 $C_2$ 群 =  $\{E, T^3\}$ ;

群的直积:  $D_6 = D_3 \otimes C_2$ ;

# 正多面体的固有点群

► **正多面体**：侧面是N个全等正多边形的多面体；

正N面体包含：

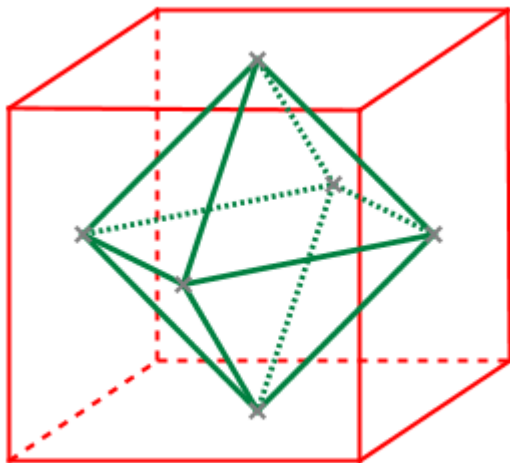
棱边数：L ；

顶点数：V ；

侧面多边形边数：n ；

每个顶点有m条棱相会；

有关系： $nN = 2L = mV$



可能的正多面体及其固有点群

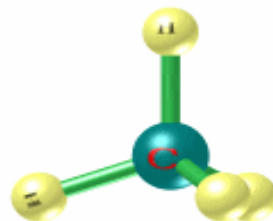
侧面数 $N$	4	6	8	12	20
顶点数 $V$	4	8	6	20	12
侧面多边形边数 $n$	3	4	3	5	3
交于每顶点棱数 $m$	3	3	4	3	5
总棱数 $L$	6	12	12	30	30
固有点群	T	O	O	I	I
固有点群阶数 $2L$	12	24	24	60	60

立方体六个侧面的中心及其连线和面构成正八面体，而正八面体八个侧面的中心及其连线和面也构成立方体，立方体和正八面体的这种关系互称为共轭图形，也称为**对偶多面体**。它们有完全相同的对称变换群。

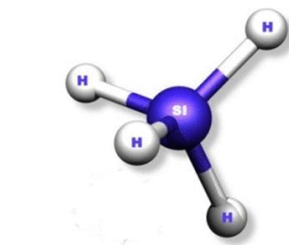
# 正四面体固有对称群：T群

## ➤ 正四面体结构：

化学和固体中 $\text{CH}_4$ ,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{SiH}_4$ 等物质；



甲烷分子 $\text{CH}_4$



硅烷分子 $\text{SiH}_4$

## ➤ 群元

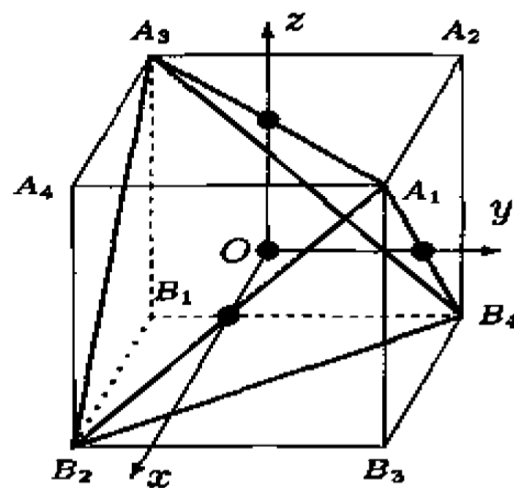
- 绕坐标轴  $x, y, z$  旋转 $\pi$ 不变，（二次固有转动轴）

操作记为： $T_x^2$  ,  $T_y^2$  ,  $T_z^2$  ；

- 四面体中心O到顶点连线为轴（三次固有转动轴），

绕此轴旋转  $2\pi/3$ 和  $4\pi/3$ 下不变，

操作记为： $R_1$  ,  $R_1^2$  ,  $R_2$  ,  $R_2^2$  ,  $R_3$  ,  $R_3^2$  ,  $R_4$  ,  $R_4^2$



## ➤ 正四面体的固有对称变换：

	E	$T_x^2$	$T_y^2$	$T_z^2$	$R_1$	$R_1^2$	$R_2$	$R_2^2$	$R_3$	$R_3^2$	$R_4$	$R_4^2$
$A_1$	$A_1$	$B_2$	$B_4$	$A_3$	$A_1$	$A_1$	$A_3$	$B_4$	$B_4$	$B_2$	$B_2$	$A_3$
$A_3$	$A_3$	$B_4$	$B_2$	$A_1$	$B_2$	$B_4$	$B_4$	$A_1$	$A_3$	$A_3$	$A_1$	$B_2$
$B_2$	$B_2$	$A_1$	$A_3$	$B_4$	$B_4$	$A_3$	$B_2$	$B_2$	$A_1$	$B_4$	$A_3$	$A_1$
$B_4$	$B_4$	$A_3$	$A_1$	$B_2$	$A_3$	$B_2$	$A_1$	$A_3$	$B_2$	$A_1$	$B_4$	$B_4$

# 正四面体固有对称群：T群乘法表

➤ 子群乘法表扩充的方法（曾用  $C_3$  群乘法表填充  $D_3$  群乘法表，见P14）：

1. 找群G的一个尽可能大的子群  $H = \{S_1, S_2, \dots, S_h\}$ ，它不一定是不变子群，它的阶数为h，指数为d，乘法表已经知道；
2. 把群G元素分解为子群及其陪集之并： $R_j$ 可随意选择，根据经验，选所有 $R_j$ 是  
$$G = H \cup R_2H \cup R_3H \cup \dots \cup R_dH = H \cup HR_2 \cup HR_3 \cup \dots \cup HR_d, \quad g = dh, \quad R_1 = E$$
同一元素的幂，可以简化计算；
3. 将乘积结果排列得到陪集表；
4. 由子群H的乘法表及其陪集表，可简单计算出群G任何两元素的乘积；

➤ 列出群乘法表的方法：

1. 把群G的乘法表分成 $d^2$ 个小方块，子群乘法表列在第一行第一列的小方块位置；
2. 将陪集表中的结果顺次填入其它小方块中；

# T群陪集表

## ➤ 陪集表

1. 选取子群  $\{E, T_x^2, T_y^2, T_z^2\}$ ，其阶为4，指数为3，同构于 $D_2$  群；
2. 选取代表元素  $R_1, R_1^2$  做左陪集（第一行、第二行）；
3. 右陪集由左陪集乘积取逆元得到（第三行、第四行）；
4. 这些等式（第三、四行）左乘 $R_1, R_1^2$ 得到（第五、六、七、八行）；  
或者等式（第一、二行）右乘 $R_1, R_1^2$ 得到（第五、六、七、八行）；

例：  $R_1(T_x^2 R_1) = R_1(R_4) = R_1(R_1 T_z^2) = R_2^2$ ；  $R_1^2(T_x^2 R_1) = R_1^2(R_1 T_z^2) = T_z^2$ ；  
 $R_1(T_x^2 R_1^2) = R_1(R_3^2) = R_1(R_1^2 T_y^2) = T_y^2$ ；  $R_1^2(T_x^2 R_1^2) = R_1^2(R_1^2 T_y^2) = R_2$ ；

左乘	E	$T_x^2$	$T_y^2$	$T_z^2$	右乘
$R_1$ $R_1^2$	$R_1$ $R_1^2$	$R_3$ $R_4^2$	$R_2$ $R_3^2$	$R_4$ $R_2^2$	
	$R_1$ $R_1^2$	$R_4$ $R_3^2$	$R_3$ $R_2^2$	$R_2$ $R_4^2$	$R_1$ $R_1^2$
$R_1$ $R_1$ $R_1^2$ $R_1^2$	$R_1^2$ E E $R_1$	$R_2^2$ $T_y^2$ $T_z^2$ $R_2$	$R_4^2$ $T_z^2$ $T_x^2$ $R_4$	$R_3^2$ $T_x^2$ $T_y^2$ $R_3$	$R_1$ $R_1^2$ $R_1$ $R_1^2$

# T群乘法表

1. 把群T的乘法表分成三行三列共九个小方块，子群 $D_2$ 乘法表在**第一行第一列**；
2. 陪集表中**第一、二行**的元素分别替换子群乘法表中的元素，填在**第一列**的第二和第三小方块；
3. 陪集表中**第三、四行**的元素分别替换子群乘法表中的元素，填在**第一行**的第二和第三小方块；
4. 陪集表中**第五、六行**的元素分别替换子群乘法表中的元素，填在**第二行**的第二和第三小方块；
5. 陪集表中**第七、八行**的元素分别替换子群乘法表中的元素，填在**第三行**的第二和第三小方块；

	$E$	$T_x^2$	$T_y^2$	$T_z^2$	$R_1$	$R_4$	$R_3$	$R_2$	$R_1^2$	$R_3^2$	$R_2^2$	$R_4^2$
$E$	$E$	$T_x^2$	$T_y^2$	$T_z^2$	$R_1$	$R_4$	$R_3$	$R_2$	$R_1^2$	$R_3^2$	$R_2^2$	$R_4^2$
$T_x^2$	$T_x^2$	$E$	$T_z^2$	$T_y^2$	$R_4$	$R_1$	$R_2$	$R_3$	$R_3^2$	$R_1^2$	$R_4^2$	$R_2^2$
$T_y^2$	$T_y^2$	$T_z^2$	$E$	$T_x^2$	$R_3$	$R_2$	$R_1$	$R_4$	$R_2^2$	$R_4^2$	$R_1^2$	$R_3^2$
$T_z^2$	$T_z^2$	$T_y^2$	$T_x^2$	$E$	$R_2$	$R_3$	$R_4$	$R_1$	$R_4^2$	$R_2^2$	$R_3^2$	$R_1^2$
$R_1$	$R_1$	$R_3$	$R_2$	$R_4$	$R_1^2$	$R_2^2$	$R_4^2$	$R_3^2$	$E$	$T_y^2$	$T_z^2$	$T_x^2$
$R_3$	$R_3$	$R_1$	$R_4$	$R_2$	$R_2^2$	$R_1^2$	$R_3^2$	$R_4^2$	$T_y^2$	$E$	$T_x^2$	$T_z^2$
$R_2$	$R_2$	$R_4$	$R_1$	$R_3$	$R_4^2$	$R_3^2$	$R_1^2$	$R_2^2$	$T_z^2$	$T_x^2$	$E$	$T_y^2$
$R_4$	$R_4$	$R_2$	$R_3$	$R_1$	$R_3^2$	$R_4^2$	$R_2^2$	$R_1^2$	$T_x^2$	$T_z^2$	$T_y^2$	$E$
$R_1^2$	$R_1^2$	$R_4^2$	$R_3^2$	$R_2^2$	$E$	$T_z^2$	$T_x^2$	$T_y^2$	$R_1$	$R_2$	$R_4$	$R_3$
$R_4^2$	$R_4^2$	$R_1^2$	$R_2^2$	$R_3^2$	$T_z^2$	$E$	$T_y^2$	$T_x^2$	$R_2$	$R_1$	$R_3$	$R_4$
$R_3^2$	$R_3^2$	$R_2^2$	$R_1^2$	$R_4^2$	$T_x^2$	$T_y^2$	$E$	$T_z^2$	$R_4$	$R_3$	$R_1$	$R_2$
$R_2^2$	$R_2^2$	$R_3^2$	$R_4^2$	$R_1^2$	$T_y^2$	$T_x^2$	$T_z^2$	$E$	$R_3$	$R_4$	$R_2$	$R_1$



# T群性质

➤ T群群元也可当作三维实线性空间中的线性变换，在直角坐标系下，群元可表示为矩阵形式，T群乘法表可由矩阵相乘得到；

➤ T群的生成元可选为  $\{T_x^2, R_1\}$ ，秩为2；

➤ 真子群：（子群阶数是原群阶数的约数） $\{E, T_x^2, T_y^2, T_z^2\}$ ，

$$\{E, R_i, R_i^2\} \quad i=1, 2, 3, 4, \quad \{E, T_k^2\}, \quad k=x, y, z ;$$

➤ 共轭类： $\{E\}$ ， $\{T_x^2, T_y^2, T_z^2\}$ ，—— 自逆类

$$\{R_1, R_2, R_3, R_4\}, \{R_1^2, R_2^2, R_3^2, R_4^2\}; \text{—— 相逆类}$$

➤ 不变子群： $D_2 = \{E, T_x^2, T_y^2, T_z^2\}$ ，指数为3，

➤ 陪集为： $\{R_1, R_2, R_3, R_4\}$ 、 $\{R_1^2, R_2^2, R_3^2, R_4^2\}$ ；

➤ 商群： $\{\{E, T_x^2, T_y^2, T_z^2\}, \{R_1, R_2, R_3, R_4\}, \{R_1^2, R_2^2, R_3^2, R_4^2\}\} \text{——} C_3$

# 正六 (八) 面体固有对称群: O群

➤ 正六面体结构: 金刚石型晶体结构;

正八面体结构:  $\text{SF}_6$ (六氟化硫)分子、 $\text{IO}_6^{5-}$ (正高碘酸根)离子等

➤ 群元: T群+陪集元素

- 绕三个坐标轴  $x, y, z$  旋转 $\pi/2$ 、 $\pi$ 、 $3\pi/2$ 下不变,  
(三个坐标轴是正六面体的四次固有转动轴), 操作  
记为:  $T_x, T_y, T_z, T_x^2, T_y^2, T_z^2, T_x^3, T_y^3, T_z^3$ ;

- 六体中心O到顶点连线为轴(三次固有转动轴),  
绕此轴旋转  $2\pi/3$ 和  $4\pi/3$ 下不变,

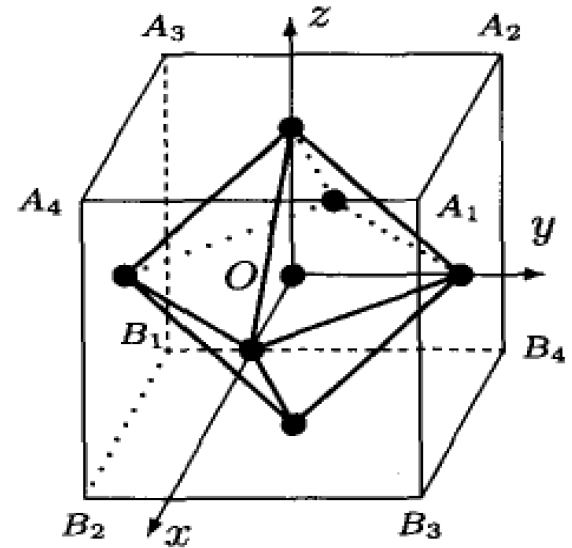
操作记为:  $R_1, R_1^2, R_2, R_2^2, R_3, R_3^2, R_4, R_4^2$

- 联结立方体相对棱中点的连线, 绕这些轴转动 $\pi$ 为O群元素,

操作记为:  $S_1, S_2, S_3, S_4, S_5, S_6$  ;

**O群群元 (24阶):** T群为O群的不变子群

$$\{E, T_x, T_y, T_z, T_x^2, T_y^2, T_z^2, T_x^3, T_y^3, T_z^3, R_1, R_1^2, R_2, R_2^2, R_3, R_3^2, R_4, R_4^2, S_1, S_2, S_3, S_4, S_5, S_6\}$$



# 正六（八）面体固有对称群：O群

➤ **O群陪集表：**选T群为子群，群元素 $S_1$ 为任选元素

左乘	E	$T_x^2$	$T_y^2$	$T_z^2$	$R_1$	$R_4$	$R_3$	$R_2$	$R_1^2$	$R_3^2$	$R_2^2$	$R_4^2$	右乘
$S_1$	$S_1$	$T_z$	$T_z^3$	$S_2$	$T_x^3$	$S_3$	$T_x$	$S_4$	$T_y$	$T_y^3$	$S_5$	$S_6$	
	$S_1$	$T_z^3$	$T_z$	$S_2$	$T_y^3$	$S_6$	$T_y$	$S_5$	$T_x$	$T_x^3$	$S_4$	$S_3$	$S_1$
$S_1$	E	$T_y^2$	$T_x^2$	$T_z^2$	$R_3^2$	$R_4^2$	$R_1^2$	$R_2^2$	$R_3$	$R_1$	$R_2$	$R_4$	$S_1$

➤ **O群乘法表：**24\*24乘积元素，分成4个小方块，

1. 子群T乘法表在**第一行第一列**；
2. 陪集表中**第一行**的元素分别替换子群乘法表中的元素，填在**第一列**的第二小方块；
3. 陪集表中**第二行**的元素分别替换子群乘法表中的元素，填在**第一行**的第二小方块；
4. 陪集表中**第三行**的元素分别替换子群乘法表中的元素，填在**第二行**的第二小方块；

例：计算  $T_x S_3 = ?$

由上表有：  $T_x = S_1 R_3$ ,  $S_3 = R_4^2 S_1$  ； 由T群乘法表有：  $R_3 R_4^2 = T_z^2$  ；

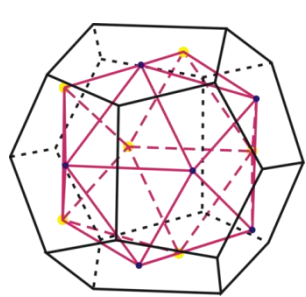
因此有：  $T_x S_3 = S_1 T_z^2 S_1 = T_z^2$

# O群性质

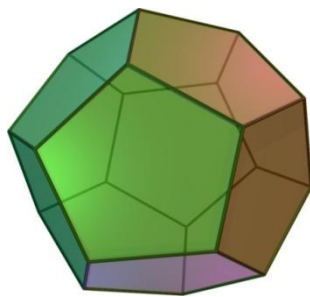
- O群生成元可选为  $\{T_x, R_1\}$ , 秩为2 ;
- 真子群: (子群阶数是原群阶数的约数) T群,  $\{E, T_x, T_y, T_z\}$ ,  
 $\{E, S_1, S_2, T_z^2\}$ ,  $\{E, S_3, S_4, T_y^2\}$ ,  $\{E, S_5, S_6, T_x^2\}$ ,  
 $\{E, T_x^2, T_y^2, T_z^2\}$ ,  $\{E, T_k, T_k^2, T_k^3\}$   $k=x, y, z$ , ,  
 $\{E, R_i, R_i^2\}$   $i=1, 2, 3, 4$ ,  $\{E, T_k^2\}$ ,  $k=x, y, z$  ,  
 $\{E, T_k^2\}$   $k=x, y, z$ , ,  $\{E, S_j\}$   $i=1, 2, 3, 4, 5, 6$  ;
- 共轭类:  $\{E\}$ ,  $\{T_x^2, T_y^2, T_z^2\}$ ,  $\{S_1, S_2, S_3, S_4, S_5, S_6\}$ ,  
 $\{R_1, R_2, R_3, R_4, R_1^2, R_2^2, R_3^2, R_4^2\}$ ,  
 $\{\{T_x, T_y, T_z, T_x^3, T_y^3, T_z^3\}$ ,
- 不变子群: T群和  $D_2 = \{E, T_x^2, T_y^2, T_z^2\}$ , 指数分别为2和6,
- 陪集:  $D_2$ 群的陪集  $\{R_1, R_2, R_3, R_4\}$  、  $\{R_1^2, R_2^2, R_3^2, R_4^2\}$   
 $\{S_1, T_z, T_z^3, S_2\}$ ,  $\{S_3, T_x, T_x^3, S_4\}$ ,  $\{S_5, T_y, T_y^3, S_6\}$  ;
- 商群:  $O/D_2$  同构于  $D_3$

# 正十二 (二十) 面体固有对称群: I 群

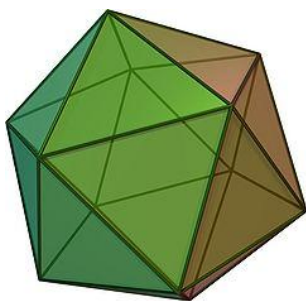
- **正十二面体结构**: 硫化铁晶体, 富勒烯 $C_{20}$ 结构, 烷 $C_{20}H_{20}$  (人工合成的碳氢化合物)
- **正二十面体结构**: 准晶体 (2011年诺奖);  $C_{60}$ 分子, 生物学中某些病毒;



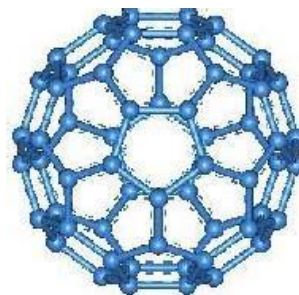
正十二面体是正二十面体的对偶多面体



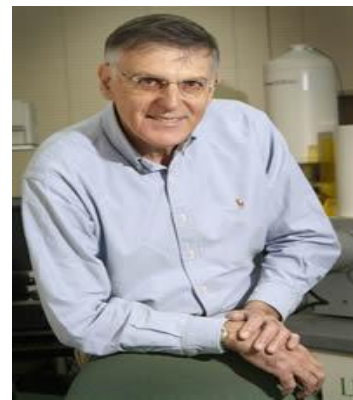
正十二面体



正二十面体



正二十面体



达尼埃尔·谢赫特曼  
(Daniel Shechtman)

- **I 群**: 阶为60, 正十二面体和正二十面体的对称群 (不是晶体点群);

**群元和类**: 有5个类,  $\{\text{恒元}\}$ ,  $\{15\text{个二次轴转动 } S_j\}$ ,  $\{20\text{个三次转动 } \pm 2/3\pi R_j^{(\pm 1)}\}$ ,  $\{12\text{个五次转动 } \pm 2/5\pi T_j^{(\pm 1)}\}$ ,  $\{12\text{个五次转动 } \pm 4/5\pi T_j^{(\pm 2)}\}$

**乘法表**: T群是I群的子群 (指数为5), 由T群乘法表和陪集表( $T_0, T_0^2, T_0^3, T_0^4$ )得到;  
没有不变子群, 是单群;

I群在凝聚态物理和材料科学的研究中起着非常重要的作用。

# 非固有点群

## ➤ 非固有点群：

$G = \{\text{固有转动元素}, \text{非固有转动元素}\}$

## ➤ 从固有点群出发构造非固有点群：

群 $G$ 的子群 $H = \{\text{所有固有转动元素}\}$  （不变子群）

子群 $H$ 的陪集 $= \{\text{所有非固有转动元素}\}$  （子群指数为2）

- **I型非固有点群：**  $G = H \otimes V_2$  ,  $V_2 = \{E, I\}$

固有点群 $H$ 和 $V_2 = \{E, I\}$  ( $I$  为空间反演) 的直积；

- **P型非固有点群：**  $G = \{H, gH\}$  ,  $G' = \{H, IgH\}$  ,  $H$ 为不变子群,  $I$ 为空间反演

设固有点群 $G'$  含有指数为2的不变子群, 保持子群元素不变,

把陪集元素都乘以空间反演 $I$ , 就构成与该固有点群同构的P型非固有点群 $G$ ;

群 $G$ 和群 $G'$  同构, 它们包含共同的指数为2的不变子群。

# I型非固有点群

## ➤ I型非固有点群:

熊夫利(Schoenflies)符号下, 与已知的固有点群所对应的I型非固有点群, 记作

$$C_i \approx C_1 \otimes V_2, \quad C_{2nh} \approx C_{2n} \otimes V_2,$$

$$C_{(2n+1)i} \approx C_{(2n+1)} \otimes V_2, \quad D_{2nh} \approx D_{2n} \otimes V_2,$$

$$D_{(2n+1)d} \approx D_{(2n+1)} \otimes V_2, \quad T_h \approx T \otimes V_2,$$

$$O_h \approx O \otimes V_2, \quad I_h \approx I \otimes V_2.$$

## ➤ 设次数最高的转动轴方向为z轴方向, 称为主轴 (T群除外, 以O群的主轴为主轴)。

熊夫利(Schoenflies)符号主要以非固有点群中二次操作的特性而分类。例如:

- 下标为i的点群只含有空间反演一个二次操作, 如  $C_i$ 、 $C_{(2n+1)i}$  ;
- 只要有关于x-y平面反射操作的点群下标为 h, 如  $C_{(2n)h}$ ,  $D_{(2n)h}$ ,  $T_h$ ,  $O_h$ ,  $I_h$  ;
- 如无关于x-y平面反射操作, 且x-y平面内既有二次固有转动轴也有二次非固有转动轴, 则下标是d, 如  $D_{(2n+1)d}$  ;
- 如x-y平面内只有二次非固有转动轴, 则下标是 v (P型非固有转动群) ;
- 熊夫利(Schoenflies)符号规则也有一些例外。

# P型非固有点群

## ➤ P型非固有点群:

在已知的固有点群中，挑出那些包含指数为2不变子群的固有点群，构造出的P型非固有点群及其不变子群为:

$$S_{4n} \approx C_{4n}, \quad \text{子群 } C_{2n}; \quad C_{(2n+1)h} \approx C_{4n+2}, \quad \text{子群 } C_{2n+1};$$

$$C_s \approx C_2, \quad \text{子群 } C_1; \quad C_{Nv} \approx D_N, \quad \text{子群 } C_N;$$

$$D_{(2n)d} \approx D_{4n}, \quad \text{子群 } D_{2n}; \quad D_{(2n+1)h} \approx D_{4n+2}, \quad \text{子群 } D_{2n+1};$$

$$T_d \approx O, \quad \text{子群 } T;$$

➤ 熊夫利(Schoenflies)符号命名规则也有一些例外，如， $S_{4n}$ ,  $C_s$ （按规则要加下标h）

➤ **晶体点群:** 晶体的平移对称性限制晶体中允许的旋转对称只能有1, 2, 3, 4, 6, 等5种旋转轴，不允许出现5次或6次以上的旋转对称性（准晶：5次、8次、10次、12次旋转对称），因此相应的晶体点群只有:

11种固有点群:  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$ ,  $C_4$ ,  $C_6$ ,  $D_2$ ,  $D_3$ ,  $D_4$ ,  $D_6$ ,  $T$ ,  $O$ ;

11种I型非固有点群:  $C_i$ ,  $C_{2h}$ ,  $C_{3i}$ ,  $C_{4h}$ ,  $C_{6h}$ ,  $D_{2h}$ ,  $D_{3d}$ ,  $D_{4h}$ ,  $D_{6h}$ ,  $T_h$ ,  $O_h$ ;

10种P型非固有点群:  $C_s$ ,  $S_4$ ,  $C_{3h}$ ,  $C_{2v}$ ,  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $D_{2d}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$ ;



# 第五节：晶体的对称性

晶体(crystal)结构与性质的研究是凝聚态物理研究中重要课题

➤ **晶格(lattice)**:组成晶体的原子在三维欧氏空间中周期性的规则排列;

- **空间平移不变性**: 晶格对三维空间的平移变换保持不变,

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = T(\vec{l})\vec{r} = \vec{r} + \vec{l}$$

- **晶格矢量** (格矢): 满足晶格不变条件的平移矢量  $\vec{l}$ ;
- **晶格原胞** (原始晶胞): 晶格中最小的周期单元;
- **原始格矢** (晶格基矢): 晶格矢量都可表为晶格基矢的整数线性组合;

$$\vec{l} = \vec{a}_1 l_1 + \vec{a}_2 l_2 + \vec{a}_3 l_3, \quad l_1, l_2, l_3 \in \mathbb{Z}$$

# 晶格的对称群

- **晶体平移群**：保持晶体不变的平移变换的集合构成群；

$$T = \{T(\vec{l}) \mid \vec{l} = \vec{a}_1 l_1 + \vec{a}_2 l_2 + \vec{a}_3 l_3, \quad l_1, l_2, l_3 \in \mathbb{Z}\}$$

- **晶体对称操作**：  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = g(R, \vec{a})\vec{r} = R\vec{r} + \vec{a}, \quad R \in O(3)$

- **空间群**：晶体的对称变换的集合  $S = \{g(R, \vec{a})\}$

- **空间群元素间的乘法规则**：

$$g(R, \vec{\alpha})g(R', \vec{\beta}) = g(RR', \vec{\alpha} + R\vec{\beta})$$

$$g(R, \vec{\alpha})^{-1} = g(R^{-1}, -R^{-1}\vec{\alpha})$$

- **晶格的平移群是空间群的不变子群**：平移变换的共轭元素仍是平移变换

$$g(R, \vec{\alpha})T(\vec{l})g(R, \vec{\alpha})^{-1} = T(R\vec{l})$$

- 对于给定晶格及允许的转动群元R，则对应的  $\vec{t}$  被唯一地确定下来（见板书）

$$a_i = l_i + t_i \quad 0 \leq t_i < 1, \quad g(R, \vec{\alpha}) = T(\vec{l})g(R, \vec{t})$$

由于  $(R, \vec{t})$  一一对应，则空间群关于平移群的商群同构于转动群元素R

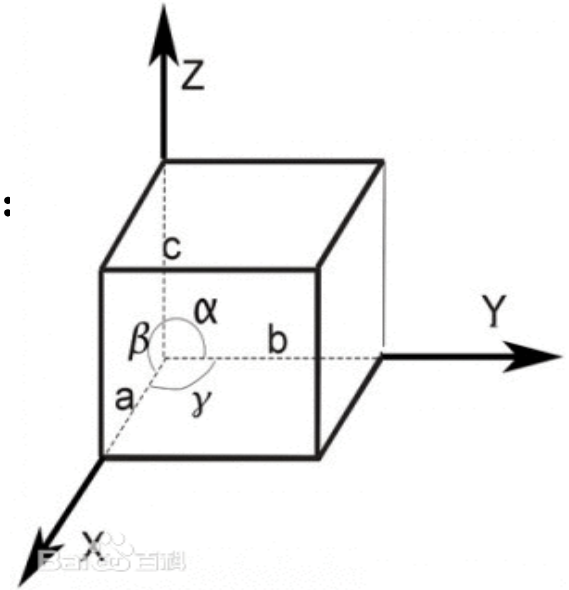
构成的点群  $G = R \approx S/T$ ；若  $g(R, \vec{t})$  中  $\vec{t} = \mathbf{0}$ ，则R为晶体点群。

# 空间群的分类

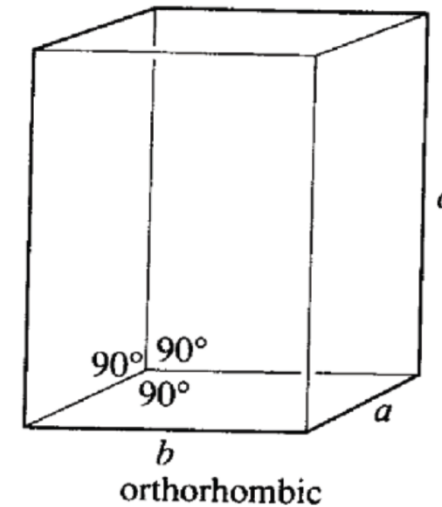
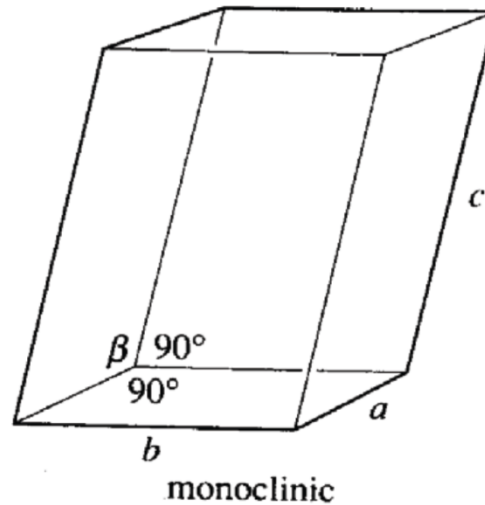
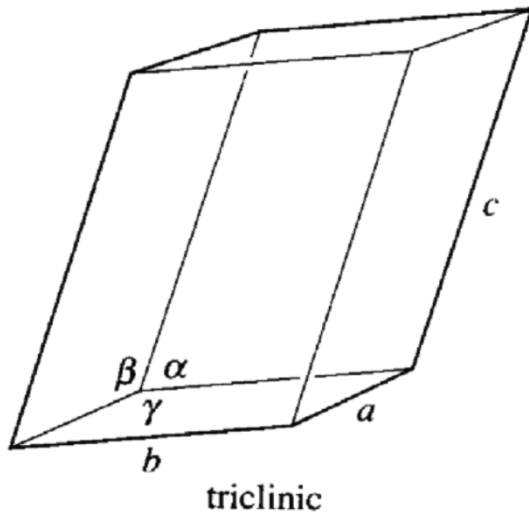
- 晶格 (lattice) 给定之后, 空间群由允许的  $(R, \vec{t})$  决定;
    - 简单空间群: 群元由唯一的平移操作与转动操作的乘积形式 (S同构于T和G的半直积);
    - 复杂空间群: 对称操作包括滑移面或螺旋轴;
  - 晶体的固有转动操作的转动角只能是  $0^\circ$ 、 $60^\circ$ 、 $90^\circ$ 、 $120^\circ$ 、 $180^\circ$  ;
- 晶体点群: 32种 (见第四节)
- 11种固有点群:  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$ ,  $C_4$ ,  $C_6$ ,  $D_2$ ,  $D_3$ ,  $D_4$ ,  $D_6$ ,  $T$ ,  $O$  ;
- 11种I型非固有点群:  $C_i$ ,  $C_{2h}$ ,  $C_{3i}$ ,  $C_{4h}$ ,  $C_{6h}$ ,  $D_{2h}$ ,  $D_{3d}$ ,  $D_{4h}$ ,  $D_{6h}$ ,  $T_h$ ,  $O_h$  ;
- 10种P型非固有点群:  $C_s$ ,  $S_4$ ,  $C_{3h}$ ,  $C_{2v}$ ,  $C_{3v}$ ,  $C_{4v}$ ,  $C_{6v}$ ,  $D_{2d}$ ,  $D_{3h}$ ,  $T_d$  ;
- 晶体点群会给出对格矢的限制, 从而限定可能的晶格样子; 而晶格的样子给定之后, 就可以确定相应的简单空间群;
  - 对于一般空间群的分类, 可以由简单空间群出发, 用相应点群操作及其对应的平移量分类;

# 七大晶系与十四种布拉菲格子

- 主要考虑简单空间群的分类；
- 晶体点群给定之后，会对晶格矢量的选取给出限定，因此给出对平移群的限制，从而可以对简单空间群进行分类；
- 晶格分为七大晶系（晶体点群对晶格矢量的限制）：  
三斜晶系、单斜晶系、三方晶系（菱方晶系）、  
六方晶系、正交晶系、四方晶系、立方晶系；
- 进一步考虑带心的格子，给出具体晶格的十四种分类，即十四种Bravis格子；
- 最后由Bravis格子与允许的晶格点群结合，给出具体的73种简单空间群。



# 七大晶系的代表晶胞



●晶系名称： 三斜晶系

单斜晶系

正交晶系

●对称操作： 没有二次固有  
与非固有转动  
对称操作；

有二次固有与非固有对  
称操作，且第一、二基  
矢间夹角不是直角；

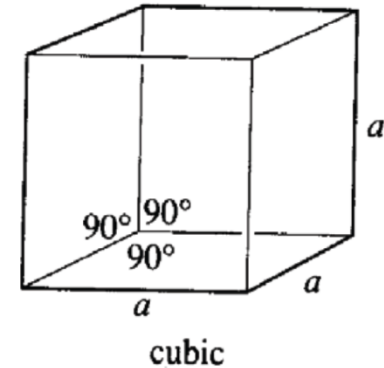
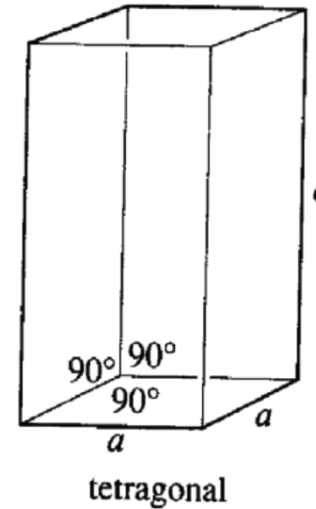
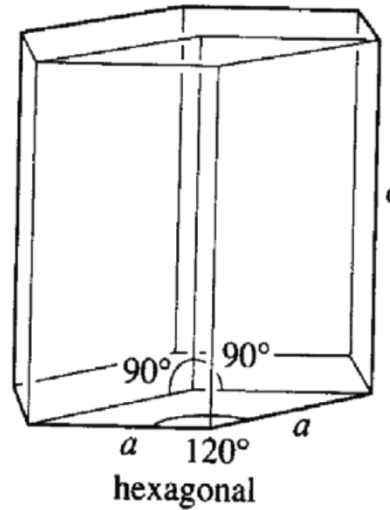
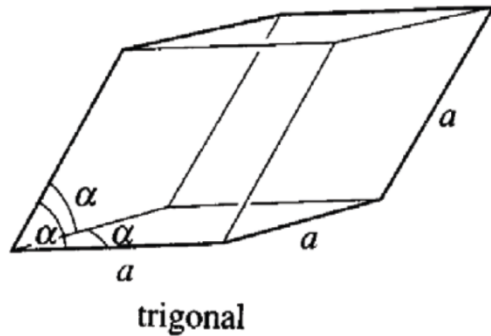
有二次固有与非固有对  
称操作，且夹角都是直角

●对应点群：  $C_1$ ,  $C_i$

$C_2$ ,  $C_s$ ,  $C_{2h}$

$D_2$ ,  $C_{2v}$ ,  $D_{2h}$

# 七大晶系的代表晶胞



晶系名称:	三方晶系	六方晶系	四方晶系	立方晶系
对称操作:	有三次固有转动 三个晶格基矢长度相同、夹角相同	有三次固有转动 基矢间夹角为 $120^\circ, 90^\circ, 90^\circ$	有二次固有与非固有转动, 第一、二基矢长度相同	有二次固有与非固有转动, 基矢长度都相同
对应点群:	$C_3, C_{3i}, D_3, C_{3v}, D_{3d}$	$C_6, C_{3h}, C_{6h}, D_6, C_{6v}, D_{3h}, D_{6h}$	$C_4, S_4, C_{4h}, D_4, C_{4v}, D_{2d}, D_{4h}$	$T, T_h, O, T_d, O_h$

# 布拉菲格子

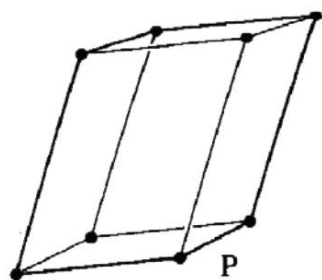
- **P型Bravis格子**：若晶胞为原始晶胞（前面给出了七大晶系的代表性晶胞），对应的晶体平移群称为原始平移群 $T_1$ ；因此由32种晶体点群和原始平移群的直乘就给出了32种P型简单空间群；
- **带心的Bravis格子**：考虑在七大晶系给出的晶胞中加入一些点，而不破坏原有晶胞的点群对称性。允许的平移群有：
- 体心平移群I：  $T = T_l \otimes \{E, T(1/2, 1/2, 1/2)\}$ ；
  - 底心平移群A：  $T = T_l \otimes \{E, T(0, 1/2, 1/2)\}$ ；
  - 底心平移群B：  $T = T_l \otimes \{E, T(1/2, 0, 1/2)\}$ ；
  - 底心平移群C：  $T = T_l \otimes \{E, T(1/2, 1/2, 0)\}$ ；
  - 面心平移群F：  $T = T_l \otimes \{E, T(0, 1/2, 1/2), T(1/2, 0, 1/2), T(1/2, 1/2, 0)\}$ ；

# 布拉菲格子

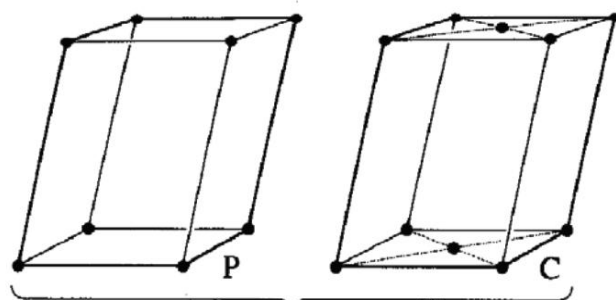
- 七种P型Bravis格子；
- 七种带心的Bravis格子；
  - 对于三斜晶系，所有带心的格子都可以通过格矢的重新选取变成P型格子；
  - 对应单斜晶系的带心格子可以是体心（I）和底心（A）格子，但体心格子可以通过格矢的重新选取变成A型底心格子；
  - 对于正交晶系的带心格子可以是底心（C或A）、体心（I）和面心（F）；
  - 对于三方晶系和六方晶系，可以通过合适的格矢选取得到六方晶系的P型格子和菱方格子；
  - 四方晶系的带心格子只能是体心（I）格子；
  - 立方晶系的带心格子可以是体心（I）和面心（F）格子；



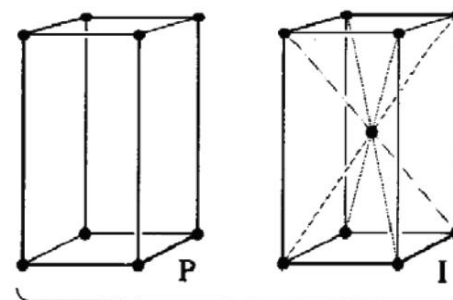
# 十四种布拉菲格子



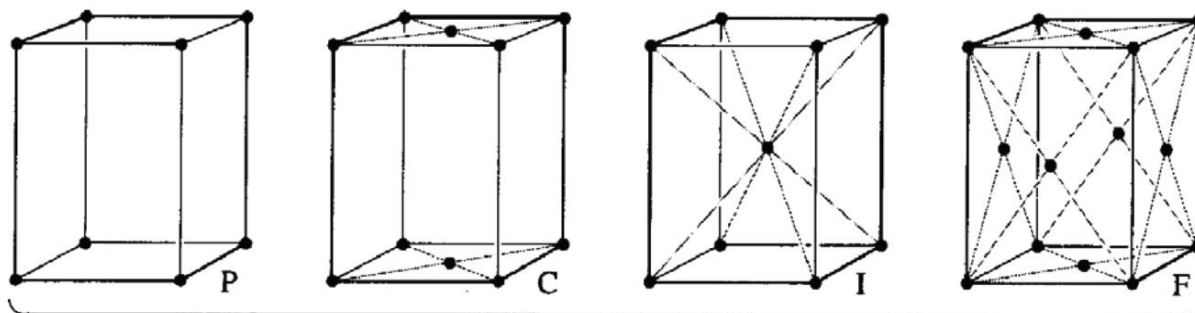
triclinic  
2种空间群



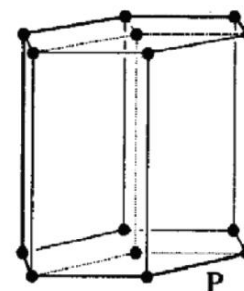
monoclinic  
6种



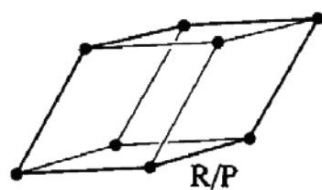
tetragonal  
16种



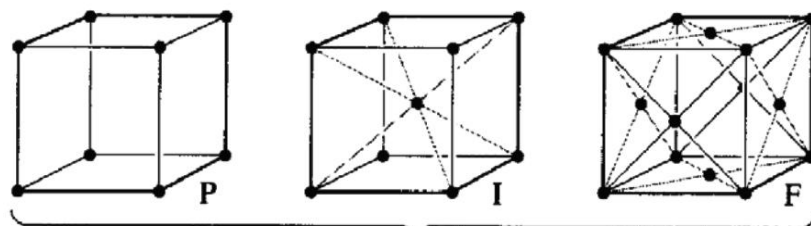
orthorhombic  
13种空间群



hexagonal  
16种



trigonal  
5种空间群



cubic  
15种

# 空间群

- 73种简单空间群：14种Bravis格子与晶系的点群结合；
  - 三斜晶系：2个； 单斜晶系：6个； 正交晶系：13个；
  - 三方晶系：5个； 六方晶系：16个； 四方晶系：16个； 立方晶系：15个；
- 230种空间群（73种简单空间群+157种复杂空间群）：
  - 三斜晶系：2个； 单斜晶系：13个； 正交晶系：59个；
  - 三方晶系：25个； 六方晶系：68个； 四方晶系：27个； 立方晶系：36个；
- 现今还有几十种空间群未找到对应的晶体结构；
- 空间群的国际符号：三个部分组成
  - 第一个拉丁大写字母标记Bravis格子：P, A, C, I, F；
  - 国际符号标记点群，即将点群拆成其若干循环子群的乘积形式；
    - N表示N次固有转动， $\bar{N}$ 表示N次非固有转动， $\pm N$ 代表沿某轴的固有与非固有N次转动。
    - 例如： $D_{6h}$ 群为 $D_6$ 群构成的I型非固有点群，则群元可以表达成6次固有转动或非固有转动幂次与转动轴在与主轴垂直平面内的二次转动幂次的乘积形式，记为 $\pm 62'$ 。
  - 在每个点群旋转操作辅以下标，标记与之对应的最小平移量；

## 第六节：置换群

➤ **置换：**  $n$ 个客体排列次序的变换，用 $2*n$ 的矩阵描写： $R = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & j & n \\ r_1 & r_2 & \dots & r_j & r_n \end{pmatrix}$

性质：

(1) 各列次序可任意交换，各列的排列次序是无关紧要的，重要的是每一列上下两个数字的对应关系，即各客体在变换前后所处的位置关系

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 4 & 5 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}$$

(2) 两个置换的乘积定义为相继做两次置换，例如SR，两个置换乘积仍是一个置换；置换变换虽然用矩阵来描写，但置换乘积不服从通常的矩阵乘积规则。

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 5 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 5 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$SR = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 5 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 5 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 4 & 5 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 4 & 5 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$SR = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 4 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 5 \end{pmatrix}$$

# 第六节：置换群

## ➤ 置换群：

$n$ 个客体的所有置换的集合满足群的四个条件，构成 $n$ 个客体的置换群 $S_n$

性质：

- (1) 群的阶： $n$ 个客体有 $n!$ 个不同的置换；
- (2) 乘积规则：置换乘积满足结合律，但不满足交换律；
- (3) 恒元：所有客体位置不变的置换是恒等变换；

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & j & n \\ 1 & 2 & \dots & j & n \end{pmatrix}$$

- (4) 逆元：把置换上下两行交换得到逆置换

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & \dots & r_j & r_n \\ 1 & 2 & \dots & j & n \end{pmatrix}; \quad R^{-1}R = \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & \dots & r_j & r_n \\ 1 & 2 & \dots & j & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & j & n \\ r_1 & r_2 & \dots & r_j & r_n \end{pmatrix} = E$$

- (5) 注意：不同的教材文献对置换及其乘积有不同的定义；

## 第六节：置换群

➤ **轮换：** 如果在一个置换中，有  $n-l$  个客体保持不变，而余下的  $l$  个客体顺序变换，则称为**长度为  $l$  的轮换**，用一个行矩阵描写

性质：

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

(1) 数字排列次序不能改变，但允许数字顺序变换；

$$(a_1 \ a_2 \ a_3 \ \dots \ a_l) = (a_2 \ a_3 \ \dots \ a_l \ a_1) = (a_3 \ \dots \ a_l \ a_1 \ a_2)$$

$$(1 \ 2 \ 3) = (2 \ 3 \ 1) = (3 \ 1 \ 2) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

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

(2) 轮换的逆：  $(a_1 \ a_2 \ \dots \ a_{l-1} \ a_l)^{-1} = (a_l \ a_{l-1} \ \dots \ a_2 \ a_1)$

(3) 长度为1的轮换是恒等变换；

(4) 长度为2的轮换，称为对换；  $(a \ b) = (b \ a)$ ,  $(a \ b)(a \ b) = E$

(5) 长度为  $l$  的轮换，它的  $l$  次自乘等于恒元

## 第六节：置换群

(6) 任何置换都能分解为没有公共客体的轮换乘积，这些轮换的乘积次序可以互相交换。

例： $R=(1\ 3\ 5)(2\ 4)=(2\ 4)(1\ 3\ 5)$ ；  $S=(1\ 3\ 2)(4)(5)=(1\ 3\ 2)$

**置换的轮换结构**：把一置换分解为没有公共客体的轮换乘积时，各轮换长度的集合；

例：R的轮换结构  $(3, 2)$ ，S的轮换结构  $(3, 1, 1)=(3, 1^2)$

n个客体的任一置换的轮换结构表示为： $(l_1\ l_2\ \dots)$ ， $\sum_i l_i = n$

这个正整数集合  $(l_1\ l_2\ \dots)$  称为n的一组**配分数**(partition)

(7) 当把两个置换相乘时，需计算两个有公共客体的轮换乘积。只有把置换乘积化为没有公共客体的轮换乘积时，才算把乘积化到最简形式。

● 只有一个公共客体的轮换乘积：

$$\begin{aligned}(a\ b\ c\ d)(d\ e\ f) &= \begin{pmatrix} a & b & c & e & f & d \\ b & c & d & e & f & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & c & d & e & f \\ a & b & c & e & f & d \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a & b & c & d & e & f \\ b & c & d & e & f & a \end{pmatrix} = (a\ b\ c\ d\ e\ f)\end{aligned}$$

● 推广到一般情况：

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

## 第六节：置换群

- 任意多个公共客体的轮换乘积：

思路：先把轮换切断，使每一对轮换乘积都只包含一个公共客体，再利用上式链接起来；

$$\begin{aligned} & (a_1 \dots a_i \ c \ a_{i+1} \dots a_j \ d)(d \ b_1 \dots b_r \ c \ b_{r+1} \dots b_s) \\ &= (a_1 \dots a_i \ c)(c \ a_{i+1} \dots a_j \ d)(d \ b_1 \dots b_r \ c)(c \ b_{r+1} \dots b_s) \\ &= (a_1 \dots a_i \ c)(a_{i+1} \dots a_j \ d \ c)(c \ d \ b_1 \dots b_r)(c \ b_{r+1} \dots b_s) \\ &= (a_1 \dots a_i \ c)(a_{i+1} \dots a_j \ d)(d \ c)(c \ d)(d \ b_1 \dots b_r)(c \ b_{r+1} \dots b_s) \\ &= (a_1 \dots a_i \ c)(a_{i+1} \dots a_j \ d)(d \ b_1 \dots b_r)(c \ b_{r+1} \dots b_s) \\ &= (a_1 \dots a_i \ c \ b_{r+1} \dots b_s)(a_{i+1} \dots a_j \ d \ b_1 \dots b_r) \end{aligned}$$

# 第六节：置换群

## ➤ 置换群的类和杨图：

(1) 与置换s共轭的元素 $tst^{-1}$ ：

对置换s上下两行同时实行置换t而得到。  
当把s写成无公共客体轮换的乘积时，就相当于对s的每个轮换因子中的客体实行置换t，而每个轮换因子中所包含客体的个数不会改变。

$$s = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ c_1 & c_2 & \dots & c_n \end{pmatrix},$$

$$t = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ d_1 & d_2 & \dots & d_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 & c_2 & \dots & c_n \\ f_1 & f_2 & \dots & f_n \end{pmatrix},$$

$$t^{-1} = \begin{pmatrix} d_1 & d_2 & \dots & d_n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 & f_2 & \dots & f_n \\ c_1 & c_2 & \dots & c_n \end{pmatrix},$$

$$tst^{-1} = \begin{pmatrix} d_1 & d_2 & \dots & d_n \\ f_1 & f_2 & \dots & f_n \end{pmatrix},$$

(2) 若两个置换s和r所包含轮换因子的个数相同，每个轮换因子长度（客体个数）也相同，称s和r有**相同轮换结构**，则s和r必互相共轭。

$$s = (a_1 \ a_2 \ a_3)(b_1 \ b_2) \dots (c_1 \ c_2 \ \dots \ c_i), \quad r = (d_1 \ d_2 \ d_3)(e_1 \ e_2) \dots (f_1 \ f_2 \ \dots \ f_i),$$

$$\text{则有：} \quad t = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & b_1 & b_2 & \dots & c_1 & c_2 & \dots & c_i \\ d_1 & d_2 & d_3 & e_1 & e_2 & \dots & f_1 & f_2 & \dots & f_i \end{pmatrix} \in S_n, \quad \text{使} \quad tst^{-1} = r.$$



## 第六节：置换群

### 杨图：

任取一组配分数  $[\lambda]$ ,  $[\lambda] = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m]$ ,  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m > 0$ ,  $\sum_{j=1}^m \lambda_j = n$

画  $n$  个方格图，分成  $m$  行，左边对齐，第一行含  $\lambda_1$  个格，第二行含  $\lambda_2$  个格...

根据配分数画出杨图，杨图的数目就是置换群类的个数。

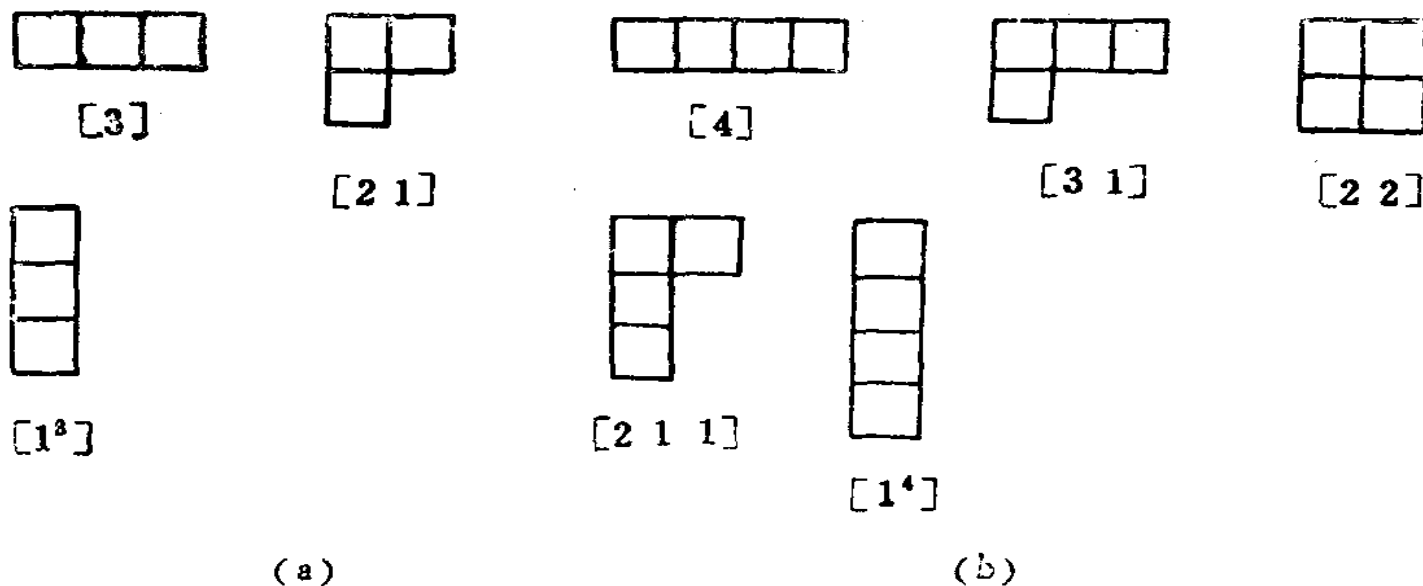


图5.1 (a)  $S_3$  群的类；(b)  $S_4$  群的类

把杨图中行和列互换得到互为共轭的杨图。

例如， $S_3$  中  $[3]$  和  $[1^3]$  是互为共轭， $[2, 1]$  是自共轭；

$S_4$  中  $[4]$  和  $[1^4]$ ， $[3, 1]$  和  $[2, 1^2]$  是互为共轭， $[2, 2]$  是自共轭；

## 第六节：置换群

### ➤ 交变子群 (alternating subgroup):

当把置换分解为对换乘积时，

对换数目是偶数的置换称为偶置换；

对换数目是奇数的置换称为奇置换：

置换群中所有偶置换的集合构成置换群的一个指数为2的不变子群，称为交变子群。

### ➤ 生成元：

相邻客体的对换： $P_a = (a \ a+1)$

引入长度为 $n$ 的轮换 $W$ ： $W = (1 \ 2 \ \cdots \ n)$ ，

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

因此， $W$ 和 $P_1$  是置换群的生成元，秩为2。

## 第二章 习题

1. 证明：除恒元外，每个元素的阶都是2的群一定是阿贝尔群。
2. 泡利矩阵定义如下：

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_a \sigma_b = \delta_{ab} I + i \sum_{d=1}^3 \varepsilon_{abd} \sigma_d, \quad \text{如 } \sigma_a^2 = 1, \quad \sigma_1 \sigma_2 = i \sigma_3$$

其中 $\varepsilon_{abd}$ 是三阶完全反对称张量。证明由 $\sigma_1$ 和 $\sigma_2$ 的所有可能乘积和幂次的集合构成群，列出此群的乘法表，指出此群的阶数，各元素的阶数，群所包含的类和不变子群，不变子群的商群与什么群同构，建立同构关系，证明此群和正方形对称群 $D_4$ 同构。

1. 准确到同构，证明九阶群 $G$ 只有两种：循环群 $C_9$ 和直乘群。
4. 以 $T$ 群的子群 $C_3 = \{E, R_1, R_1^2\}$ 为基础，将 $C_3$ 群的乘法表扩充，计算 $T$ 群的乘法表。
5. 把下列置换化为无公共客体的轮换乘积

$$(1) (1\ 2)(2\ 3)(1\ 2); \quad (2) (1\ 2\ 3)(1\ 3\ 4)(3\ 2\ 1); \quad (3) (1\ 2\ 3\ 4)^{-1}$$

$$(4) (1\ 2\ 4\ 5)(4\ 3\ 2\ 6); \quad (2) (1\ 2\ 3)(4\ 2\ 6)(3\ 4\ 5\ 6).$$

## 第二章 习题

6. 群G由12个元素组成，它的乘法表如下：

	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>F</i>	<i>I</i>	<i>J</i>	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>
<i>E</i>	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>F</i>	<i>I</i>	<i>J</i>	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>
<i>A</i>	<i>A</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>I</i>	<i>J</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>K</i>	<i>L</i>
<i>B</i>	<i>B</i>	<i>F</i>	<i>A</i>	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>E</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>I</i>	<i>J</i>	<i>C</i>	<i>D</i>
<i>C</i>	<i>C</i>	<i>I</i>	<i>L</i>	<i>A</i>	<i>K</i>	<i>N</i>	<i>E</i>	<i>M</i>	<i>J</i>	<i>F</i>	<i>D</i>	<i>B</i>
<i>D</i>	<i>D</i>	<i>J</i>	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>A</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>I</i>	<i>B</i>	<i>C</i>
<i>F</i>	<i>F</i>	<i>B</i>	<i>E</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>A</i>	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>I</i>	<i>J</i>
<i>I</i>	<i>I</i>	<i>C</i>	<i>N</i>	<i>E</i>	<i>M</i>	<i>L</i>	<i>A</i>	<i>K</i>	<i>D</i>	<i>B</i>	<i>J</i>	<i>F</i>
<i>J</i>	<i>J</i>	<i>D</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>E</i>	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>F</i>	<i>I</i>
<i>K</i>	<i>K</i>	<i>M</i>	<i>J</i>	<i>F</i>	<i>I</i>	<i>D</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>N</i>	<i>E</i>	<i>L</i>	<i>A</i>
<i>L</i>	<i>L</i>	<i>N</i>	<i>I</i>	<i>J</i>	<i>F</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>B</i>	<i>E</i>	<i>M</i>	<i>A</i>	<i>K</i>
<i>M</i>	<i>M</i>	<i>K</i>	<i>D</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>J</i>	<i>F</i>	<i>I</i>	<i>L</i>	<i>A</i>	<i>N</i>	<i>E</i>
<i>N</i>	<i>N</i>	<i>L</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>B</i>	<i>I</i>	<i>J</i>	<i>F</i>	<i>A</i>	<i>K</i>	<i>E</i>	<i>M</i>

- (1) 找出群G各元素的逆元；
- (2) 指出那些元素可与群中任一元素乘积对易；
- (3) 列出各元素的周期和阶；
- (4) 找出群G各类包含的元素；
- (5) 找出群G包含那些不变子群，列出它们的陪集，并指出它们的商群与什么群同构；
- (6) 判断群G是否与正四面体对称群T或与正六边形对称群 $D_6$ 同构。