

II. 有限群表示的基本定理

么正化定理

定义： 若一个群 G 的表示矩阵都是么正矩阵，则这个表示称为 G 的么正表示。

定理1： 有限群的任何非奇异的矩阵表示，都可以通过相似变换变成么正的矩阵表示。

证：对于给定的表示 $D(G)$ ，要找出相似变换 x ，使得：

$$\bar{D}(R) = x^{-1} D(R) x \quad \text{——①} \quad (\text{假定} D \text{非么正})$$

和

$$\bar{D}(R)^\dagger \cdot \bar{D}(R) = 1 \quad \text{——②}$$

经过相似变换后， $\bar{D}(G)$ 仍为 G 的表示称等价表示。

思路：按要求反推 \rightarrow 将①式代入②式得： $R, S \in G$

$$\{x^{-1}D(R)x\}^\dagger \{x^{-1}D(R)x\} = 1 \quad (x^\dagger)^{-1} \quad () \quad x^{-1}$$

即 $x^\dagger D(R)^\dagger (x^{-1})^\dagger \cdot x^{-1} D(R)x = 1$

即 $D(R)^\dagger (xx^\dagger)^{-1} D(R) = (xx^\dagger)^{-1} \quad (*)$

据群的性质（和群表示的性质）

$$\begin{aligned} & D(R)^\dagger \sum_{S \in G} [D(S)^\dagger D(S)] D(R) \\ &= \sum_{S \in G} D(SR)^\dagger D(SR) = \sum_{S \in G} D(S)^\dagger D(S) \quad (\text{重排定理}) \end{aligned}$$

\therefore 若能找到 x ，使 $(xx^\dagger)^{-1} = \sum_{S \in G} D(S)^\dagger D(S) = H$ （厄米矩阵）

(*) 式便成立了，也就证明了定理1。

H 作为厄米矩阵，总可通过幺正的相似变换 U 使其对角化：

思路：利用对角阵和幺正阵 U 来寻找厄米矩阵 H

$$\Gamma = U^{-1} H U; \Gamma_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} \sigma_{\mu} > 0$$

若令：

$$\boxed{x = U \Gamma' U^{-1}} \quad \Gamma'_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} (\Gamma_{\mu\mu})^{\frac{1}{2}}$$

$$\begin{aligned} (x x^{\dagger})^{-1} &= [U \Gamma' U^{-1} U^{-1\dagger} \Gamma'^{\dagger} U^{\dagger}]^{-1} = [U \Gamma' U^{\dagger} U \Gamma'^{\dagger} U^{\dagger}]^{-1} \\ &= [U \Gamma' \Gamma'^{\dagger} U^{\dagger}]^{-1} = U \Gamma'^{\dagger-1} \Gamma'^{-1} U^{-1} \\ &= U (\Gamma' \Gamma'^{\dagger})^{-1} U^{-1} = U \Gamma U^{-1} \end{aligned}$$

$$\boxed{\text{幺正矩阵 } \hat{A}^{\dagger} = \hat{A}^{-1},}$$

代入 $(x x^{\dagger})^{-1}$ ，而 $H = U \Gamma U^{-1} \therefore (x x^{\dagger})^{-1} = H$ ，定理得证。

\therefore 以后的所有表示均看成幺正表示。

定理2: 若群 $G\{A_1, A_2, \dots, A_k, \dots, A_h\}$ 有两组等价的幺正表示:

$$D^{(1)}(A_1), D^{(1)}(A_2), \dots, D^{(1)}(A_k), \dots, D^{(1)}(A_h)$$

$$D^{(2)}(A_1), D^{(2)}(A_2), \dots, D^{(2)}(A_k), \dots, D^{(2)}(A_h)$$

则 $D^{(1)}(G)$ 和 $D^{(2)}(G)$ 的相似变换可以借助于一个幺正矩阵来实现:

$$UD^{(1)}(A_k)U^{-1} = D^{(2)}(A_k) (\forall A_k \in G)$$

正交定理

Schur引理1: 与群的某一不可约表示的所有矩阵可对易的矩阵 (M) 必为常数矩阵。(此引理对所有群均成立)

证: I: 若两个表示矩阵对易 $D(A)D(B)=D(B)D(A)$, 则经过相似变换后仍可对易, 所以若表示矩阵不是幺正, 可用一相似变换使它幺正, 而对易性不变。

$$\bar{D}(R) = x^{-1}D(R)x$$

$$\begin{aligned}\bar{D}(A)\bar{D}(B) &= x^{-1}D(A)xx^{-1}D(B)x = x^{-1}D(A)D(B)x \\ &= x^{-1}D(B)D(A)x = x^{-1}D(B)xx^{-1}D(A)x = \bar{D}(B)\bar{D}(A)\end{aligned}$$

所以下面就认为 $D(R)$ 为幺正矩阵。

II: 若对 M 加上厄米条件, 也不影响结论:

设群 G , 表示 $D(G) \{D(R) \forall R \in G\}$

若 $D(R)M = MD(R)$, 对此式两边取转置共轭:

$$M^\dagger D(R)^\dagger = D(R)^\dagger M^\dagger \quad \text{两边乘 } D(R) \left(\right) D(R)$$

$$\text{即: } D(R)M^\dagger \boxed{D(R)^\dagger D(R)} = \boxed{D(R)D(R)^\dagger} M^\dagger D(R)$$

$\because D(R)$ 么正, 故上式即为: $D(R)M^\dagger = M^\dagger D(R)$

即: 只要 M 和 $D(R)$ 对易, 有 M^\dagger 和 $D(R)$ 对易,

则 $D(R)$ 与 $H_1 \equiv M + M^\dagger$ 和 $H_2 \equiv i(M - M^\dagger)$ 都可对易。

$$H_1^\dagger = (M + M^\dagger)^\dagger = M^\dagger + M = H_1;$$

$$H_2^\dagger = -i(M - M^\dagger)^\dagger = -iM^\dagger + iM = H_2$$

H_1 和 H_2 均为厄米, 因此, 只要证明 $D(R)$ 和厄米矩阵 H_1, H_2 可对易, 则 $D(R)$ 必和 M 对易。所以下面就认为 M 为厄米矩阵。

III: 对厄米矩阵 M , 总有么正矩阵 V , 使

$$V^{-1}MV = d \quad d \text{ 为对角矩阵}$$

$$D(R)M = MD(R)$$

$$\therefore \boxed{V^{-1}D(R)V} \boxed{V^{-1}MV} = V^{-1}MVV^{-1}D(R)V$$

\therefore 么正矩阵之积仍为么正矩阵, 故

$$V^{-1}D(R)V = D'(R) \quad \text{仍为么正矩阵}$$

证明:

$$D'(R)^\dagger = (V^{-1}D(R)V)^\dagger = V^\dagger D^\dagger(R) (V^{-1})^\dagger = V^\dagger D^{-1}(R)V$$

$$D'(R)^{-1} = (V^{-1}D(R)V)^{-1} = V^{-1}D^{-1}(R)(V^{-1})^{-1} = V^\dagger D^{-1}(R)V$$

\therefore 得:

$$\boxed{D'(R)} \boxed{d} = dD'(R)$$

Schur引理1: 与群的某一不可约表示的所有矩阵可对易的矩阵
(M) 必为常数矩阵。(此引理对所有群均成立)

Schur引理1直接应用:

- ① Abel群的表示矩阵一定是一维的(即常数矩阵), 因为它的任何一个元素的表示矩阵必与其它所有元素的表示矩阵对易。
- ② 如某个不是比例于单位矩阵的矩阵(常矩阵), 与表示的所有矩阵对易, 则此表示是可约的。

Schur引理2: 设 $D^{(1)}(G)$ 和 $D^{(2)}(G)$ 是群 G 的两个不等价不可约表示, 维数分别为 m_1 和 m_2 , x 是一个 $m_1 \times m_2$ 矩阵, 如果对所有元素 $R \in G$ 有: $D^{(1)}(R)x = xD^{(2)}(R)$ — (*) 则必有 $x = 0$ 。

证明:

$m_1 \times m_1$

$m_1 \times m_2$

$m_2 \times m_2$

$$D^{(1)}(R)x = xD^{(2)}(R)$$

不妨假设 $D^{(1)}$ 和 $D^{(2)}$ 均为幺正矩阵, 它们不可再约化

对(*)两边取厄米共轭: $x^\dagger D^{(1)\dagger}(R) = D^{(2)\dagger}(R) \cdot x^\dagger$

$\because D^{(1)}$ 和 $D^{(2)}$ 幺正, 故有 $x^\dagger D^{(1)-1}(R) = D^{(2)-1}(R)x^\dagger$

即 $x^\dagger D^{(1)}(R^{-1}) = D^{(2)}(R^{-1})x^\dagger$

$\because R$ 是取遍整个群 G , 故上式可写成: $x^\dagger D^{(1)}(R) = D^{(2)}(R)x^\dagger$

$$x^\dagger D^{(1)}(R) = D^{(2)}(R)x^\dagger$$

左乘 x 得：
$$xx^\dagger D^{(1)}(R) = \boxed{xD^{(2)}(R)}x^\dagger$$

$\because D^{(1)}(R)x = xD^{(2)}(R)$ ，上式为：
$$xx^\dagger D^{(1)}(R) = \boxed{D^{(1)}(R)}xx^\dagger \quad (\forall R \in G)$$

据Schur引理1， xx^\dagger 必为常数矩阵：

$$xx^\dagger = \lambda I_{m_1} \quad \text{—— (**)}$$

(i) 当 $m_1=m_2$ 时，此时 x 必为奇异的，即 $\det x = 0$ ，否则据(*)有

$$D^{(1)}(R)x = xD^{(2)}(R) \longrightarrow D^{(1)}(R) = xD^{(2)}(R)x^{-1}$$

即 $D^{(1)}(R)$ 和 $D^{(2)}(R)$ 等价，与假设矛盾，故 x 是奇异的

\therefore 对(**)两端求行列式： $\det(xx^\dagger) = \det(x)\det(x^\dagger) = \lambda^{m_1} = 0$

$\therefore \lambda = 0$ 又
$$\lambda = \sum_j x_{ij}x_{ji}^\dagger = \sum_j |x_{ij}|^2 = 0$$

$\therefore x$ 的所有矩阵元均为零 ($\because i, j$ 均可变)

相当于 λ_{ii}

(ii) 当 $m_1 \neq m_2$ 时, 设 $m_1 > m_2$

可对矩阵 x 添上 $m_1 - m_2$ 列零使得 x 变为 x' :

$$x' = \left(\begin{array}{c|c} \underbrace{x}_{m_2} & \underbrace{0}_{m_1 - m_2} \end{array} \right) \Bigg\} m_1 \quad \text{且:} \quad x'^{\dagger} = \left(\begin{array}{c} \underbrace{x^{\dagger}}_{m_1} \\ \underbrace{0}_{m_1 - m_2} \end{array} \right) \Bigg\} m_2$$

$$\text{显然: } x' \cdot x'^{\dagger} = x \cdot x^{\dagger} \quad \therefore \quad x' \cdot x'^{\dagger} = \lambda I_{m_1}$$

$$\text{但} \quad \det x' = \det x'^{\dagger} = 0$$

重复(i)的证明可得 $x=0$, ($\therefore x'=0$)

结论: 不同的不可约表示不可能彼此有联系 (除非用零矩阵)

定义： 群 G 的 m 维线性表示可以看成 G 的一个矩阵函数，它的每一个矩阵元都是 G 的一个函数，称为**群函数**，共有 m^2 个群函数。

正交定理： (the Great orthogonality theorem)

有限群 G 的不等价不可约么正表示的矩阵元素，作为群函数，满足正交关系：

$$\frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\mu\rho}^{(i)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{m_j} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} \delta_{\rho\lambda} \quad \text{—— } (\Delta)$$

其中 g 是群 G 的阶， m_j 是表示 $D^{(j)}(G)$ 的维数。

证明：设有一 $m_i \times m_j$ 矩阵 Y ，它只有第 μ 行第 ν 列元素不为零

即： $(Y)_{\rho\lambda} = \delta_{\mu\rho} \delta_{\nu\lambda}$

定义 $m_i \times m_j$ 矩阵 X ： $X = \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D^{(i)}(R^{-1}) Y D^{(j)}(R)$

则： $X_{\rho\lambda} = \frac{1}{g} \sum_{R \in G} \sum_{\rho'\lambda'} D_{\rho\rho'}^{(i)}(R^{-1}) Y_{\rho'\lambda'} D_{\lambda'\lambda}^{(j)}(R)$

$$= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} \sum_{\rho'\lambda'} D_{\rho\rho'}^{(i)}(R^{-1}) \delta_{\mu\rho'} \delta_{\nu\lambda'} D_{\lambda'\lambda}^{(j)}(R)$$

$$= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\rho\mu}^{(i)}(R^{-1}) D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) \quad \text{—— } (\Delta\Delta 1)$$

$$= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\rho\mu}^{(i)}(R)^{-1} D_{\nu\lambda}^{(j)}(R)$$

么正

$$= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\rho\mu}^{(i)}(R)^+ D_{\nu\lambda}^{(j)}(R)$$

这就是 Δ 式（正交定理）左边

$$= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\mu\rho}^{(i)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) \quad \text{—— } (\Delta\Delta 2)$$

另一方面

$$D^{(i)}(S)X = \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D^{(i)}(S) \cdot D^{(i)}(R^{-1})YD^{(j)}(R)$$

$$= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D^{(i)}(SR^{-1})YD^{(j)}(R) \cdot \boxed{D^{(j)}(S^{-1})D^{(j)}(S)}$$

单位元

$$= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D^{(i)}(SR^{-1})YD^{(j)}(RS^{-1})D^{(j)}(S)$$

$$= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D^{(i)}((RS^{-1})^{-1})YD^{(j)}(RS^{-1})D^{(j)}(S)$$

重排定理

$$= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D^{(i)}(R^{-1})YD^{(j)}(R)D^{(j)}(S)$$

$$\equiv XD^{(j)}(S)$$

$$\boxed{D^{(i)}(S)X = XD^{(j)}(S)}$$

$$D^{(i)}(S)X = XD^{(j)}(S)$$

当 $i \neq j$ 时，据schur引理2， $X \equiv 0$ ($\because S$ 是任取的)

当 $i=j$ 时，据schur引理1， $X = C_{\mu\nu} \mathbf{I} = \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D^{(j)}(R^{-1}) Y D^{(j)}(R)$

($\because C$ 常数同 Y 有关，故同 $\mu\nu$ 有关) $\delta_{\rho\lambda}$

$E=I$ (单位矩阵)

对 $(\Delta\Delta 2)$ 两边取 $i=j$ ， $\rho=\lambda$ 并对 λ 求和：

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda} X_{\lambda\lambda} &= \sum_{\lambda=1}^{m_j} C_{\mu\nu} = m_j C_{\mu\nu} = \frac{1}{g} \sum_{R \in G} \sum_{\lambda} D_{\mu\lambda}^{(j)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) \\ &= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} \sum_{\lambda} D_{\lambda\mu}^{(j)}(R) D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{g} \sum_{R \in G} \sum_{\lambda} D_{\lambda\mu}^{(j)}(R)^{-1} D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) \\ &= \frac{1}{g} \sum_{R \in G} \sum_{\lambda} D_{\lambda\mu}^{(j)}(R^{-1}) D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\nu\mu}^{(j)}(RR^{-1}) = \delta_{\mu\nu} \end{aligned}$$

$$\therefore C_{\mu\nu} = \frac{1}{m_j} \delta_{\mu\nu} \quad \frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\mu\rho}^{(i)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{m_j} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} \delta_{\rho\lambda}$$

表示矩阵元的正交性定理

有限群 G 的不等价不可约么正表示的矩阵元素，作为群函数，满足正交关系：

$$\frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\mu\rho}^{(i)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{m_j} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} \delta_{\rho\lambda} \quad \text{—— } (\Delta)$$

其中 g 是群 G 的阶， m_j 是表示 $D^{(j)}(G)$ 的维数。

正交定理指出：作为群函数，群 G 的不等价不可约表示的矩阵元互相正交，同一不可约么正表示的 m_j^2 个矩阵元也互相正交，这些群函数模的平方等于 g/m_j 。

例：两种原子组成的四方晶体的对称操作所组成的群的表示

$$a = b \neq c$$

共有八个对称操作使晶格保持不变：

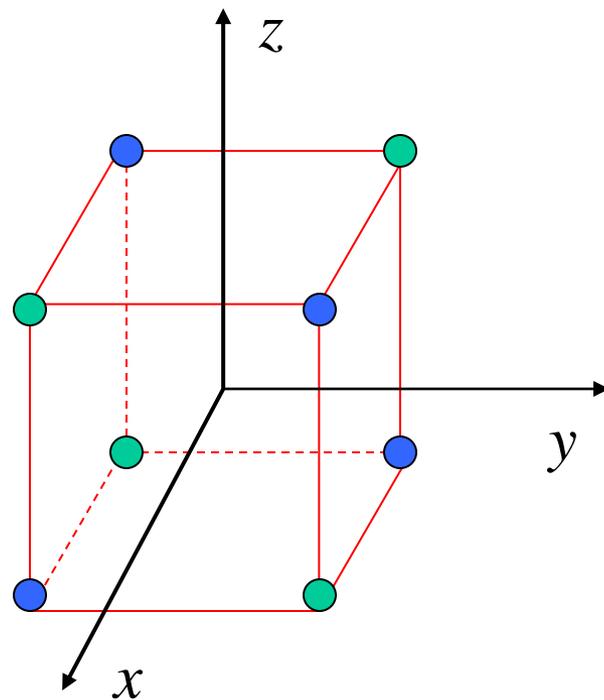
E ：不动，

$C_2(z)$ ：绕 z 轴的2-度转动，

$C_2(x)$ 和 $C_2(y)$ ：绕 x 轴和 y 轴的2-度转动，

σ_1 和 σ_2 ：关于对角平面反射

iC_4 和 iC_4^{-1} ：关于 z 轴4-度转动接着中心反演



八个对称操作所对应的变换矩阵

$$D(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; D(C_2(z)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; D(C_2(x)) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; D(C_2(y)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

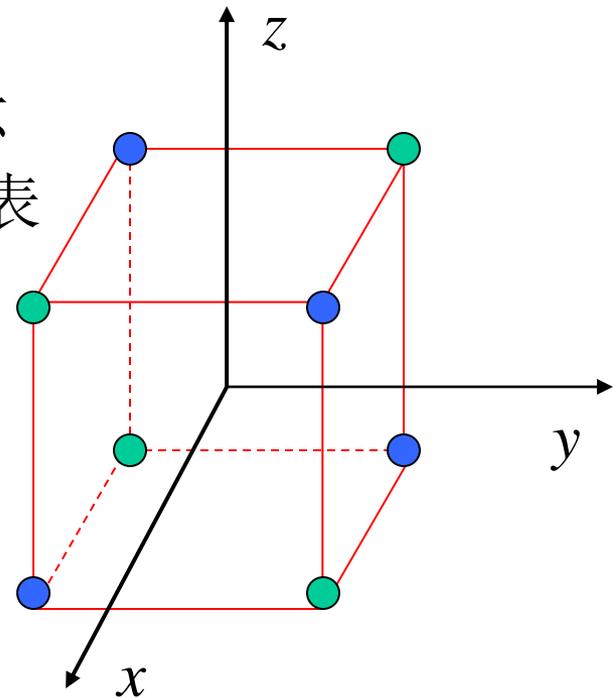
$$D(\sigma_1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; D(\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; D(iC_4) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; D(iC_4^{-1}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

蓝色 对角线 (下底面) 绿色 对角线 绕z轴逆时针

为方块对角矩阵，为右下角元素组成的1-维不可约表示 $D^{(1)}$ 及左上角元素组成的2-维不可约表示 $D^{(2)}$ ，则3-维可约表示可写成直和的形式：

$$D(a) = D^{(1)}(a) \oplus D^{(2)}(a)$$

所以用(x, y, z)为基矢求得的表示是可约化的。



	E	$C_2(z)$	$C_2(x)$	$C_2(y)$	σ_1	σ_2	iC_4	iC_4^{-1}
$D^{(1)}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
$D^{(2)}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
\bar{D}	1	1	1	1	1	1	1	1

$$\frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\mu\rho}^{(i)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{m_j} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} \delta_{\rho\lambda}$$

$$\sum_{R \in G} D^{(1)}(R)^* \bar{D}(R) = 1 \times 1 + 1 \times 1 + (-1) \times 1 + (-1) \times 1 + 1 \times 1 + 1 \times 1 + (-1) \times 1 + (-1) \times 1 = 0$$

$$\sum_{R \in G} D_{11}^{(2)}(R)^* D_{11}^{(2)}(R) = 1 \times 1 + (-1) \times (-1) + 1 \times 1 + (-1) \times (-1) + 0 + 0 + 0 + 0 = 4 = 8/2$$

$$\sum_{R \in G} D_{11}^{(2)}(R)^* D_{22}^{(2)}(R) = 1 \times 1 + (-1) \times (-1) + 1 \times (-1) + (-1) \times 1 + 0 + 0 + 0 + 0 = 0$$

正三角形 C_{3v} 的不可约表示:

$$\frac{1}{g} \sum_{R \in G} D_{\mu\rho}^{(i)}(R)^* D_{\nu\lambda}^{(j)}(R) = \frac{1}{m_j} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} \delta_{\rho\lambda}$$

	E	A	B	C	D	F
$D^{(1)}$	1	1	1	1	1	1
$D^{(2)}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

$$\sum_{R \in G} D_{11}^{(1)}(R)^* D_{11}^{(2)}(R) = 1 \times 1 + (-1) \times 1 + \frac{1}{2} \times 1 + \frac{1}{2} \times 1 + \left(-\frac{1}{2}\right) \times 1 + \left(-\frac{1}{2}\right) \times 1 = 0$$

$$\sum_{R \in G} D_{12}^{(2)}(R)^* D_{12}^{(2)}(R) = 0 + 0 + \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 = 3 = \frac{6}{2}$$

$$\sum_{R \in G} D_{11}^{(2)}(R)^* D_{12}^{(2)}(R) = 0 + 0 + \frac{1}{2} \times \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{2} \times \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + \left(-\frac{1}{2}\right) \times \frac{\sqrt{3}}{2} + \left(-\frac{1}{2}\right) \times \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = 0$$