

群表示论的物理方法 (I)*

有限群表示论的新途径

陈金全 王 凡 高美娟

(南京大学物理系)

提 要

本文介绍一种完全用量子力学中对易算符集方法处理的有限群表示论。把群表示论中的基本问题,如计算特征标,不可约基,不可约矩阵元和 CG 系数等都归结为求完备算符集的本征值和本征函数。

一、引 言

群表示论是量子论的有力数学工具,为了便于应用,最好是有一个与量子论的概念和方法一致的群表示论。经过 Racah, Biedenharn^[1] 等人的努力,半纯李群的表示论已较符合这一要求。有限群方面 Gamba 和 Killingbeck^[2] 作了初步探讨,但还只能说是表示了这种愿望而远没有成为一个完整的理论。我们这一组工作将给出一种完全按量子论精神建立的有限群表示论,其特点是概念简单,应用方便。以此为基础,我们还得出了置换群和西群表示间的一些重要新联系^[3]。本文仅扼要介绍这种新的有限群表示论,详细论证及计算结果见文献[4]。熟悉群代数的人也可直接从原有群表示论^[5]来理解这些结果。

二、不可约表示的统一标志和求特征标的普适方法

对于一个含有 N 个类的群 G , 我们定义: 一组两两互相对易且和所有群元都对易的算符集 C , 如果它有 N 套不同的本征值, 则称 C 为群 G 的第一类完备算符集, 简称为群 G 的完备算符集, 缩写为 CSCO-I 或 CSCO (Complete Set of Commuting Operators)。

C 是由少数类算符组成的, $C = (C_{i_0}, C_{i_1}, \dots)$, 它的本征值记为 $\lambda^{(\nu)} = (\lambda_{i_0}^{(\nu)}, \lambda_{i_1}^{(\nu)}, \dots)$, $\nu = 1, 2, \dots, N$ 。容易证明

定理 1: 群 G 的完备算符集 C 在类空间的本征算符 $Q^{(\nu)}$ (除归一因子外) 就是到群 G 不可约表示 (ν) 的投影算符。

算符 $Q^{(\nu)}$ 可直接由以下联立本征方程解出:

$$C Q^{(\nu)} = \lambda^{(\nu)} Q^{(\nu)}. \quad (1)$$

* 1975 年 1 月 13 日收到。

由(1),(2)式以及 $C_i C_j = \sum_k C_{ij}^k C_k$, 得出 $q_i^{(\nu)}$ 满足的联立本征方程

$$\sum_i (C_{ij}^k - \lambda_i^{(\nu)} \delta_{ik}) q_j^{(\nu)} = 0 \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad i = i_0, j_0, \dots \quad (3)$$

只要知道构成 CSCO 的那 l 个类算符 $C_{i_0}, C_{j_0}, \dots$ 的矩阵表示 $\|C_{i_0}^k\|_1^N, \|C_{j_0}^k\|_1^N, \dots$ 就可由(3)式解出本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 和本征算符 $Q^{(\nu)}$. C 的共同本征矢量 $q_i^{(\nu)}$ 满足正交归一完备性(以同一类的元素数目 g_i 为权)

$$\sum_i g_i q_i^{(\nu)*} q_i^{(\nu')} = \delta_{\nu\nu'} \quad \sum_\nu g_i q_i^{(\nu)*} q_i^{(\nu)} = \delta_{ii}. \quad (4)$$

可以证明 $q_i^{(\nu)}$ 和特征标 $x_i^{(\nu)}$, 本征值 $\lambda_i^{(\nu)}$ 的关系为

$$x_i^{(\nu)} = \sqrt{g} q_i^{(\nu)*} \quad \lambda_i^{(\nu)} = \frac{g_i}{h_\nu} x_i^{(\nu)}, \quad (5a, 5b)$$

h_ν 为 $\text{IR}(\nu)$ 的维数. 因此(4)式就是特征标的正交定理.

(3),(5a) 式也为我们计算有限群特征标提供了一个普适而且简单的方法——本征函数法. 以前早就有利用结构常数 C_{ij}^k 来决定特征标的多种方法^[5,7]. 那些方法和本文的方法的根本区别在于, 他们都没有引入完备算符集及其本征矢量 $q_i^{(\nu)}$ 的概念. 因此对高阶群根本不能用. 而用本征函数法计算则很简单, 例如, 本文轻易地就算得了 S_{11} 群的 $56 \times 56 = 3136$ 个特征标.

三、不可约基的标志和求法

由定理 1 可立刻证明

定理 2: $\psi^{(\nu)}$ 属于群 G $\text{IR}(\nu)$ 的充要条件是 $\psi^{(\nu)}$ 为群 G 的完备算符集 C 的本征函数¹⁾

$$C\psi^{(\nu)} = \lambda^{(\nu)}\psi^{(\nu)}. \quad (6)$$

在类空间解本征方程(1)时, 对应一 $\lambda^{(\nu)}$ 只有一个本征算符 $Q^{(\nu)}$. 当从类空间转到群空间或者组态函数空间时, C 的本征值谱仍然不变(见文献[4]-I), 但本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 有了不同程度的简并. 例如, 在 g 维群空间解本征方程(6)时, 设对应于本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 的简并度为

m_ν . 显然有 $\sum_{\nu=1}^N m_\nu = g$, 并且可以证明, m_ν 为某一整数的平方, $m_\nu = h_\nu^2$. 本征值 $\lambda^{(\nu)}$

及其简并度 m_ν (因而 h_ν) 都可从(6)式解出. 下面将看到, h_ν 即为 $\text{IR}(\nu)$ 的维数.

因此, 一般来说, (6)式不能完全确定 $\psi^{(\nu)}$. 这是很自然的, 因为本征方程(6)只决定到不等价的 IR 为止. 为了完全确定一个 IR 基, 必须对它作进一步的限制. 通常是要求 $\psi^{(\nu)}$ 同时也是群 G 的某种子群链 $G(s)$ 的 IR 基. 以下我们将这种按群 G 及其子群链 $G(s)$ 的不可约表示分类基简称为 $G \supset G(s)$ 分类基, 并用 $C(s)$ 代表子群链 $G(s)$ 中各子群原有的 CSCO 的集合.

1) $\psi^{(\nu)}$ 可以是类空间或者群空间的算符, 也可以是类上函数, 群上函数或者是组态空间的波函数.

定义: 若算符集 $(C, C(s))$ 共有 $M = \sum_{v=1}^N h_v$ 套不同的本征值, 则称 $(C, C(s))$ 为群 G 的第二类完备算符集 (CSCO-II), 相应的群链 $G \supset G(s)$ 称为整链. 于是定理 2 就可直接推广成

定理 3: $\phi_m^{(v)}$ 为 $G \supset G(s)$ 分类基的充要条件是 $\phi_m^{(v)}$ 为群 G 的第二类完备算符集的共同本征函数

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \end{pmatrix} \phi_m^{(v)} = \begin{pmatrix} v \\ m \end{pmatrix} \phi_m^{(v)}. \quad (7a)$$

这里改用 v 代表 $\lambda^{(v)}$, 而用 m 代表 $C(s)$ 的本征值. 一些常用的有限群的整链 $G \supset G(s)$ 及算符集 $C(s)$ 如下:

置换群 $G = S_f, \quad G(s) = S_{f-1} \supset S_{f-2} \supset \cdots \supset S_2, \quad C(s) = (C(f-1), C(f-2) \cdots C(2)).$ 这里 $C(f')$ 为 $S_{f'}$ 群的 CSCO.

单轴群 $G = D_n, D_{nh}, \quad G(s) = C_2, \quad C(s) = C_2^x$ (x 方向的二度轴);
 $G = C_{nv}, \quad D_{nd}, \quad G(s) = C_s, \quad C(s) = \sigma^y$ (法线为 y 方向的反射面).

立方体群 $G = T_d, \quad G(s) = S_4^1, \quad C(s) = S_4^2;$
 $G = O, O_h, \quad G(s) = C_4^1, \quad C(s) = C_4^2.$

找出了群 G 的 CSCO-II, 就可通过解本征方程 (7a) 而求得 IR 基. 因此, 可统一用量子数 (v, m) 来标志群 G 的 IR 基 $\phi_m^{(v)}$, 它具有下列性质:

$$R\phi_m^{(v)} = \sum_{m'} D_{m'm}^{(v)}(R)\phi_{m'}^{(v)}, \quad D_{m'm}^{(v)}(R) = \langle \phi_m^{(v)} | R | \phi_{m'}^{(v)} \rangle, \quad \langle \phi_m^{(v)} | \phi_{m'}^{(v')} \rangle = \delta_{vv'} \delta_{mm'}. \quad (8)$$

下面着重讨论置换群 IR 基的标志和求法. 首先要指出算符集 $(C, C(f-1) \cdots C(2))$ 是过完备的, 其实群链 $S_f \supset S_{f-1} \supset \cdots \supset S_2$ 的 2-cycle 类算符就构成置换群 S_f 的 CSCO-II. 即

$$(C, C(s)) = (C_{(2)}(f), C_{(2)}(f-1), \cdots, C_{(2)}(2)). \quad (9)$$

它们的共同本征函数构成 S_f 群的标准基.

证明上述结论, 等价于证明 $f-1$ 个 2-cycle 类算符的本征值 $\lambda_f, \cdots, \lambda_2$ (以下一律用 $\lambda_{f'}$ 标志 $C_{(2)}(f')$ 的本征值) 唯一标志 S_f 群的一个 IR 基. 当 $f \leq 5$ 时, 所有的 λ_f 均无简并, 上述结论不证自明. 现在来证明, 若对 S_f 群上述结论成立, 则对 S_{f+1} 群也成立. 根据熟知的分支律以及杨图和 CSCO 的本征值的对应关系, 这又等价于证明若 S_{f+1} 群有 m 个杨图 $[\nu^1] \cdots [\nu^m]$ 对应同一个本征值 λ_{f+1} , 令杨图 $[\bar{\nu}^i]$ 为杨图 $[\nu^i]$ 中任意去掉一个方块后剩下的杨图, 则必有 $[\bar{\nu}^i] \neq [\bar{\nu}^j]$ ($i \neq j$). 为此又只需证明在 S_f 群杨图 $[\bar{\nu}] = [f_1, f_2, \cdots]$ 中加上一个方块后所得的各种杨图 $[\nu^i] = [f_1, \cdots, f_{i-1}, f_i + 1, f_{i+1}, \cdots]$, 其对应的 2-cycle 类算符本征值 $\lambda_{f+1}^{(i)}$ 均不相等. 由表 1 的说明 2 有

$$\lambda_{f+1}^{(i)} = (f+1)/2 + \frac{1}{2} \sum_l (f_l + \delta_{il})(f_l + \delta_{il} - 2l), \quad (9a)$$

因此, 若 $\lambda_{f+1}^{(i)} = \lambda_{f+1}^{(j)}$, 则由 (9a) 式立即得到以下关系式:

$$f_i + i = f_j + j. \quad (9b)$$

1) 这种分类基其三维表示为复数 $(-x-iy, z, x-iy)$, 如果对三维表示取 $G \supset D_2$ 分类, 取 $C(s) = (C_2^x, C_2^y)$, 则三维 IR 基为实数 (x, y, z) .

若 $i < j$, 根据杨图规则必有 $f_i > f_j$. 因此, 上式只有当 $i = j$ 时才能成立, 对 $i > j$ 可同样证之. 于是证毕.

因此求 S_f 群的标准基就归结为求解以下联立本征方程:

$$C_{(2)}(f')\psi_m^{(v)} = \lambda_{f'}\psi_m^{(v)} \quad f' = f, f-1, \dots, 2, \quad (7b)$$

$$(v; m) = (\lambda_f; \lambda_{f-1}, \dots, \lambda_2), \quad \psi_m^{(v)} = \psi_{\lambda_f, \lambda_{f-1}, \dots, \lambda_2}^{(\lambda_f)}$$

置换群传统理论中, 用一个杨盘或者 f 个 Yamanouchi 数来标志 S_f 群的一个标准基, 现在也可改用 $(f-1)$ 个量子数 $(\lambda_f, \lambda_{f-1}, \dots, \lambda_2)$ 来标志它. $\lambda_{f'} (f' = f, f-1, \dots, 2)$ 具有简单的物理意义: $\lambda_{f'}$ 为属于 $S_{f'}$ 群 $\text{IR}(\lambda_{f'})$ 的基函数中, 对称对的数目和反对称对的数目之差(见表 1 说明 2). 将所有量子数反号, 就给出对应于杨盘行列转置的基 $\psi_m^{(v)} = \psi_{-m}^{(-v)}$. 例如:

$$\begin{array}{cccc} \psi_{5,6,3,1}^{(3)} = \begin{array}{c} 1 \ 2 \ 3 \ 4 \\ 5 \\ 6 \end{array} & \psi_{5,2,3,1}^{(3)} = \begin{array}{c} 1 \ 2 \ 3 \ 5 \\ 4 \\ 6 \end{array} & \psi_{2,2,3,1}^{(3)} = \begin{array}{c} 1 \ 2 \ 3 \\ 4 \ 5 \ 6 \end{array} & \psi_{2,2,0,1}^{(3)} = \begin{array}{c} 1 \ 2 \ 4 \\ 3 \ 5 \ 6 \end{array} \\ \psi_{-5,-6,-3,-1}^{(-3)} = \begin{array}{c} 1 \ 5 \ 6 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{array} & \psi_{-5,-2,-3,-1}^{(-3)} = \begin{array}{c} 1 \ 4 \ 6 \\ 2 \\ 3 \\ 5 \end{array} & \psi_{-2,-2,-3,-1}^{(-3)} = \begin{array}{c} 1 \ 4 \\ 2 \ 5 \\ 3 \ 6 \end{array} & \psi_{-2,-2,0,-1}^{(-3)} = \begin{array}{c} 1 \ 3 \\ 2 \ 5 \\ 4 \ 6 \end{array} \end{array}$$

求置换群标准基的本征函数法可归纳为

1. 对于 f 个粒子体系的一个给定组态 $(\alpha)^{f_1}(\beta)^{f_2}\dots$, 写出所有可能的单粒子乘积态 $\varphi_a, a = 1, 2, \dots, \mathcal{N}$, $\mathcal{N} = f_1!f_2!\dots$.

2. 令待求的标准基为 $\psi_\lambda = \sum_a u_{\lambda a} \varphi_a$, $\lambda = (\lambda_f, \lambda_{f-1}, \dots, \lambda_2)$. 将 $f-1$ 个二循环类算符同时对角化就可求出系数 $u_{\lambda a}$,

$$\sum_b [\langle \varphi_a | \sum_{i>j=1}^{f'} p_{ij} | \varphi_b \rangle - \lambda_{f'} \delta_{ab}] u_{\lambda b} = 0 \quad f' = f, f-1, \dots, 2. \quad (7c)$$

3. 适当选择本征解 ψ_λ 的位相, 可使上述方法求得的基和 Young-Yamanouchi 基包括位相在内完全一致(详见文献[4]-I, II).

有限群 IR 基通常都是用投影算符求的. 投影算符法有很多缺点: 1. 必须先求出所有 g 个群元的矩阵表示 $D^v(R)$; 然后将 g 个群元作用在某一可约基上, 分别乘以系数 $D_{mm'}^v(R)$, 合并同类项等. 2. 如果用来投影的原始可约基选得不当, 投影的结果可能为零. 本征函数法则完全没有上述困难, 事先不要知道任何 IR 矩阵元, 只要从 $\mathcal{N}$ 个线性独立的可约基 φ_a 出发, 解 $\mathcal{N}$ 个未知数的一组联立本征方程即可.

四、内 禀 群

将群 G 的某一可约表示约化成 IR 时, 如果某一 $\text{IR}(v)$ 只出现一次, 则对一组 (v, m) 值, 由 (7a) 式可得出唯一的一个解 $\psi_m^{(v)}$; 如果某一 $\text{IR}(v)$ 出现 τ_v 次, 则对一组 (v, m) 可以得到 τ_v 个线性独立解 $\psi_m^{(v)1}, \psi_m^{(v)2}, \dots, \psi_m^{(v)\tau_v}$. 为了完全确定这些情形下的 IR 基, 必须寻找新的算符, 它的本征值可用来区分在群 G 作用下变换性质完全相同的 IR 基. 显然, 从群 G 中决不可能找到这种算符了. 但是对任何一个抽象群 G 可以定义两种算符表

示:

$$\hat{R}S = RS \text{ 和 } \bar{R}S = SR \text{ 对任意 } S \in G. \quad (10a, b)$$

算符群 $(\hat{R}, \hat{S}, \hat{T}, \dots)$ 构成群 G 的左正则表示. 物理中应用的通常都是算符群, 因此往往对 $\hat{R}$ 和 R 不加区分. 算符群 $(\bar{R}, \bar{S}, \bar{T}, \dots)$ 构成群 G 的反表示(文献[5]中 Boerner 的书里 p.62 附注), 以后称它为内禀群 $\bar{G}$. 对群上函数 $u(S)$, 群元 R 和 $\bar{R}$ 的作用分别为

$$Ru(S) = u(R^{-1}S), \quad \bar{R}u(S) = u(SR^{-1}).$$

对组态空间函数 $\Phi(X)$, 群元 R 的作用为

$$R\Phi(X) = \Phi(R^{-1}X).$$

而内禀群元 $\bar{R}$ 的作用则比较复杂些. 这里首先引进内禀态的概念. 令函数集 $\Phi_1(X), \dots, \Phi_g(X)$ 构成群 G 的正则表示的基, 注意 (10b) 式是用来定义算符 $\bar{R}$ 的, 它不是一个算符恒等式, 即 $\bar{R}ST \neq SRT$, 而应当把 ST 看作一个新元素

$$\bar{R}ST = \bar{R}(ST) = STR,$$

因此, (10b) 式作用在这 g 个函数上不能同时成立. 但是因为 $\bar{R}$ 对 $\Phi(X)$ 的作用尚未定义, 我们总可以假定 (10b) 式作用在某一个态, 例如 $\Phi_{i_0}(X) \equiv \Phi_0(X)$ 上成立: $\bar{R}S\Phi_0(X) = SR\Phi_0(X)$. 由此来确定 $\bar{R}$ 对 $\Phi(X)$ 的作用. 令这里的 S 为么元素, 立即得到

$$\bar{R}\Phi_0(X) = R\Phi_0(X). \quad (10c)$$

称满足 (10c) 式的态 $\Phi_0(X)$ 为内禀态. 因此, 内禀群元 $\bar{R}$ 作用在内禀态 $\Phi_0(X)$ 上就等于群元 R 作用在 $\Phi_0(X)$ 上. (10c) 式可看作内禀态的定义. 函数集 $\Phi_1(X) \cdots \Phi_g(x)$ 中其余任一函数都可以从已选定的内禀态 $\Phi_0(x)$ 经群 G 的元素作用而得到. 例如 $\Phi(X) = T\Phi(X_0)$, 由 (10b), (10c) 式, 就可确定内禀群元 $\bar{R}$ 对这个函数的作用

$$\bar{R}\Phi(X) = \bar{R}T\Phi_0(X) = TR\Phi_0(X).$$

注意 $\bar{R}\Phi(X) \neq R\Phi(X) = RT\Phi_0(X)$. 那么究竟选哪一个态作为内禀态呢? 内禀态 Φ_0 的选取和表象选取有关, 表象一经选定, Φ_0 也定了. 但原则上讲, 可以选取任一种表象, 因此从这一意义上讲, Φ_0 的选取又是任意的.

容易证明, 内禀群 $\bar{G}$ 和群 G 反同构, 且互相对易:

$$\text{反同构 } \bar{R}_2\bar{R}_1S = \bar{R}_2(SR_1) = SR_1R_2, \quad (11a)$$

$$\text{对易 } \bar{R}ST = STR, \quad S\bar{R}T = STR,$$

$$\text{所以 } [\bar{R}, S] = 0. \quad (11b)$$

众所周知, 李群中第二参数群和第一参数群是互相对易而又反同构的^[1]. 所以, 群 $\bar{G}$ 和 G 的关系犹如第二参数群和第一参数群之间的关系.

五、正则表示的完全分解和 IR 矩阵元的求法

由 (11) 式可知, 前面关于群 G 的一切结论也适用于内禀群 $\bar{G}$. 例如, 若 $C = (C_{i_0}, C_{i_0})$ 为群 G 的 CSCO, 则 $\bar{C} = (\bar{C}_{i_0}, \bar{C}_{i_0})$ 为群 $\bar{G}$ 的 CSCO. 对应于子群链 $G(s)$ 的算符集 $C(s)$, 有子群链 $\bar{G}(s)$ 的算符集 $\bar{C}(s)$ 等等.

由定义 (10b) 式, 可立即证明群 G 和 $\bar{G}$ 的 CSCO 相等, 即 $\bar{C} = C$. 因此, 内禀群 $\bar{G}$ 的 CSCO 不能为我们提供新算符. 但 $\bar{G}$ 和 G 的子群链的 CSCO 并不相等, $\bar{C}(s) \neq C(s)$.

$\bar{C}(s)$ 和 $C(s)$ 对易且具有相同的本征值谱, 它为我们提供所必需的新算符. 对于一个阶数为 g 的群, 我们

定义: 一组两两互相对易的算符, 如果它们有 g 套不同的本征值, 则称它为群 G 的第三类完备算符集 (CSCO-III).

可以证明, 若 $(C, C(s))$ 为群 G 的 CSCO-II, 则 $(C, C(s), \bar{C}(s))$ 为 CSCO-III. 定理 3 可推广成

定理 4: $\phi_m^{(v)\bar{m}}$ 为 $G \supset G(s)$ 分类基 (vm) , $\bar{G} \supset \bar{G}(s)$ 分类基 $(v\bar{m})$ 的充要条件是, $\phi_m^{(v)\bar{m}}$ 为群 G 的 CSCO-III 的本征函数

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s) \end{pmatrix} \phi_m^{(v)\bar{m}} = \begin{pmatrix} v \\ m \\ \bar{m} \end{pmatrix} \phi_m^{(v)\bar{m}}. \quad (12a)$$

群 $\bar{G}(G)$ 的元素 $\bar{R}(R)$ 作用在 $\phi_m^{(v)\bar{m}}$ 上只改变内禀(外部)量子数 $\bar{m}(m)$, 即

$$R\phi_m^{(v)\bar{m}} = \sum_{m'} D_{m'm}^{(v)}(R) \phi_{m'}^{(v)\bar{m}}, \quad \bar{R}\phi_m^{(v)\bar{m}} = \sum_{\bar{m}'} D_{\bar{m}\bar{m}'}^{(v)}(R) \phi_m^{(v)\bar{m}'}. \quad (13)$$

由此看到, 内禀量子数 $\bar{m}$ 为我们提供了所必需的附加量子数.

CSCO-III 的本征函数在 g 维线性空间构成正交归一完备函数组

$$\langle \phi_m^{(v)\bar{m}} | \phi_{m'}^{(v')\bar{m}'} \rangle = \delta_{vv'} \delta_{mm'} \delta_{\bar{m}\bar{m}'}, \quad \sum_{v\bar{m}} |\phi_m^{(v)\bar{m}} \rangle \langle \phi_m^{(v)\bar{m}}| = 1. \quad (14)$$

定理 5: CSCO-III 在群空间的本征算符就是转移算符^[8]

$$P_m^{(v)\bar{m}} = \frac{h_v}{g} \sum_{a=1}^g D_{m\bar{m}}^{(v)*}(R_a) R_a, \quad (15)$$

$$RP_m^{(v)\bar{m}} = \sum_{m'} D_{m'm}^{(v)}(R) P_{m'}^{(v)\bar{m}}, \quad \bar{R}P_m^{(v)\bar{m}} = P_m^{(v)\bar{m}} R = \sum_{\bar{m}'} D_{\bar{m}\bar{m}'}^{(v)}(R) P_m^{(v)\bar{m}'}. \quad (15)$$

以后我们称 $P_m^{(v)\bar{m}} = \sqrt{\frac{g}{h_v}} P_m^{(v)\bar{m}}$ 为 $G \supset G(s)$, $\bar{G} \supset \bar{G}(s)$ 分类基投影算符. 它作用在没有任何对称性的组态空间波函数 $\Phi_0(X)$ 上有

$$\phi_m^{(v)\bar{m}}(X) = P_m^{(v)\bar{m}} \Phi_0(X). \quad (16a)$$

定理 6: CSCO-III 在群上函数空间的本征函数就是群 G 不可约表示矩阵元的复共轭 $D_{m\bar{m}}^{(v)*}(R_a)$.

将归一化函数 $\phi_m^{(v)\bar{m}}(R_a) = \sqrt{\frac{h_v}{g}} D_{m\bar{m}}^{(v)*}(R_a)$ 代入(14)式, 就得到 IR 矩阵元的第一、第二正交定理.

由上述定理, 可得到在组态函数空间将正则表示完全分解并求出所有 IR 基和 IR 矩阵元的一般方法. 设 $\varphi_a = R_a \Phi_a$, $a = 1, 2, \dots, g$ 满足正交归一, 通过解联立本征方程

$$\sum_b \left[\left\langle \varphi_a \left| \begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s) \end{pmatrix} \right| \varphi_b \right\rangle - \begin{pmatrix} v \\ m \\ \bar{m} \end{pmatrix} \delta_{ab} \right] D_{m\bar{m}}^{(v)*}(R_b) = 0, \quad (12b)$$

可求出 IR 矩阵元 $D_{m\bar{m}}^{(v)*}(R)$, 同时也就求得了 IR 基

$$\phi_m^{(\nu)\bar{m}} = \sqrt{\frac{\hbar_\nu}{g}} \sum_a D_{m\bar{m}}^{(\nu)*}(R_a) \varphi_a. \quad (16b)$$

下面讨论一下态空间置换群 $\mathcal{S}_f^{[8]}$ 的标准基. 令 Φ_0 为 f 个态指标全不相同的单粒子乘积态, $\Phi_0 = (i_1 i_2 \cdots i_f)$. 取 Φ_0 为内禀态, 则容易证明, 内禀置换群 $\bar{S}_f$ 的群元 $\bar{R}$ 和 $\mathcal{S}_f$ 的群元 $\mathcal{R}$ 的关系为 $\bar{R} = \mathcal{R}^{-1}$. 因此 $\mathcal{S}_f$ 和 $\bar{S}_f$ 的 CSCO 相等, 其子群的 CSCO 也相等, 即

$$C = \bar{C}, \quad \mathcal{C}(s) = \bar{C}(s). \quad (17)$$

所以 $\phi_m^{(\nu)\bar{m}}$ (16) 式也是态空间置换群 $\mathcal{S}_f$ 的标准基 $(\nu\bar{m})$

$$\mathcal{R} \phi_m^{(\nu)\bar{m}} = \sum_{\bar{m}'} D_{\bar{m}'m}^\nu(R) \phi_{\bar{m}'}^{(\nu)\bar{m}'}. \quad (18)$$

六、有限群 CG 系数的求法

若 $\phi_{m_1}^{(\nu_1)}, \phi_{m_2}^{(\nu_2)}$ 为群 G 的两套 IR 基, 它们的积 $|m_1 m_2\rangle = \phi_{m_1}^{(\nu_1)} \phi_{m_2}^{(\nu_2)}$ 构成群 G 的可约基, 利用 CG 系数 $C_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2}^{\nu \tau}$ 可将它们组合成 IR 基

$$\phi_m^{(\nu\tau)} = \sum_{m_1 m_2} C_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2}^{\nu \tau} \phi_{m_1}^{(\nu_1)} \phi_{m_2}^{(\nu_2)} \quad \tau = 1, 2, \cdots, (\nu_1 \nu_2 \nu). \quad (19)$$

由定理 3, 立即得到有限群 CG 系数满足的联立本征方程

$$\sum_{m_1 m_2} \left[\left\langle m'_1 m'_2 \right| C_{(s)} \left| m_1 m_2 \right\rangle - \left(\frac{\nu}{m} \right) \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \right] C_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2}^{\nu \tau} = 0, \quad (20)$$

$$\langle m'_1 m'_2 | C_i | m_1 m_2 \rangle = \sum_{l=1}^{g_i} D_{m'_1 m_1}^{\nu_1 l}(R_i) D_{m'_2 m_2}^{\nu_2 l}(R_i).$$

如果对某一 (νm) 值, (20) 式只有一组线性独立解, 则指标 τ 是多余的.

以前计算点群的 CG 系数一般都用投影算符法或者用生成元 (generator) 方法. 这些方法都很烦, 对阶数迅速增长的置换群更是行不通. Hamermesh^[9] 给出了计算置换群 CG 系数的递推公式, 但正如他本人所指出的, 用它作具体计算也是非常烦的. 最近 Sullivan^[10] 再次研究了此问题, 对最简单的配分 (bipartition) 情形, 给出了一个仍然很烦的递推公式. 因此, 虽然一系列理论计算工作^[3,10] 需要置换群 CG 系数, 但至今世界上还没有置换群 CG 系数表. 用本征函数法 (20) 式来计算则很方便, 我们已算好了 $f \leq 6$ 时 S_f 群的 CG 系数, 结果将另文发表.

校后注 校稿后看到了 C. W. Patterson 和 W. G. Harter [Journal of Math. Phys., 17(1976), 1125] 的最近工作. 他们得出的结论是唯一标志 S_f 群的不可约表示需要 $(f-1)$ 个 r -cycle 类算符 $(C_{(r)}(f), r=2, \cdots, f)$, 唯一标志 S_f 群的标准基需要 $f(f-1)/2$ 个 r -cycle 类算符 $(C_{(r)}(f'), f'=2, \cdots, f, r=2, \cdots, f')$. 我们的结论是前者一般说只要少数几个类算符. 如 $C_{(2)}(f), C_{(3)}(f)$ 等. 而后者只要 $(f-1)$ 个 2-cycle 类算符 $(C_{(2)}(f'), f'=2, \cdots, f)$. 正是由于后面两个结论使得本征函数法能简单地用来求置换群和西群的 IR 基等等.

参 考 文 献

- [1] G. Racah, *Group Theory and Spectroscopy* Notes from Princeton (1951); L. C. Biedenharn *et al.*, *J. Math. Phys.*, **4** (1963), 436, 1449; *ibid.*, **5** (1964), 1273.
- [2] A. Gamba, *J. Math. Phys.*, **10** (1969), 872; J. Killingbeck, *J. Math. Phys.*, **11** (1970), 2268; *ibid.*, **14** (1973), 185.
- [3] 陈金全、王凡、高美娟, 群表示论的物理方法 (II, III, IV, V), 物理学报, 待发表.
- [4] 陈金全、王凡、高美娟, 有限群表示论的新途径 (I, II, III, IV), 南京大学学报 (自然科学版), 1977 年, 第二期.
- [5] H. Boerner, *Group Representation* North-Holland (1963), Chapter 3, 4, 5; P. O. Lowding, *Rev. Mod. Phys.*, **36** (1964), 966.
- [6] 山内恭彦、堀江久, 回转群和对称群的应用 (中译本), (1962) p. 6.
- [7] W. Burnside, *Theory of Finite Order* Dover Pubs. (1955). H. Jones, *The Theory of Brillouin Zones* (1960), p. 76.
- [8] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, Vol. 1 (1969).
- [9] M. Hamermesh, *Group Theory and Its Application to Physical Problems* (1962).
- [10] J. J. Sullivan, *Phys. Rev.*, **A5** (1972), 29.

PHYSICAL METHODS OF GROUP REPRESENTATION THEORY (I)

A NEW APPROACH TO THE THEORY OF FINITE GROUP REPRESENTATIONS

CHEN JIN-QUAN WANG FAN GAO MEI-JUAN

(Department of Physics, Nanjing University)

ABSTRACT

This paper advocates a new approach to the theory of finite group representations by applying exclusively the method of commuting operators in quantum mechanics. The basic problems of group representation theory such as the labeling of irreducible representations, the finding of characters, irreducible bases and matrix elements and the CG coefficients et al are all simplified to the solving of the eigenfunctions of a certain complete set of commuting operators. This method has the advantage of being concise in theory and easily manageable in practice.