# 群 论 习 题 精 解

马 中 骐　著

科 学 出 版 社
北　京

## 内 容 简 介

本书是《物理学中的群论》配套的习题集，主要包括群的基本概念、群的线性表示理论、三维转动群、晶体的对称性、置换群、SU( $N$)群、SO( $N$)群和洛伦兹群、李群和李代数.后者是中国科学院研究生教学丛书之一，1998年出版以来，深受读者欢迎，已重印两次.

习题的亲手演算对于掌握群论的理论内容和计算方法都是必不可少的.本书为读者提供了一个好帮手.

本书适合于物理各专业的研究生，亦可供物理工作者参考.

**图书在版编目(CIP)数据**

群论习题精解/马中骐著. —北京：科学出版社，2002
ISBN 7-03-010390-4

Ⅰ.群…　Ⅱ.马…　Ⅲ.群论—解题　Ⅳ.O152—44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 027305 号

责任编辑：张邦固/责任校对：柏连海
责任印制：安春生/封面设计：黄华斌

科学出版社发行　各地新华书店经销

*

2002 年 8 月第　一　版　　开本：B5(720×1000)
2005 年 3 月第三次印刷　　印张：23
印数：6 001—9 000　　字数：425 000

**定价：35.00 元**

(如有印装质量问题，我社负责调换〈环伟〉)

谨 以 此 书 献 给 我 亲 爱 的 妻 子 戴 安 英

# 前　　言

群论是研究系统对称性质的十分有效的数学工具．随着人类对客观世界的认识逐步深入到微观领域，对称性在现代物理理论中的应用越来越广泛，群论方法也逐渐深入到物理学各个领域，因而近年来群论课已成为物理专业研究生必修的基础课程．

群论本身是一门抽象的代数理论，有它自身的特点和规律性．但作为一个物理工作者，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．作者从 1962 年开始长期担任物理系本科生或研究生的群论教学工作，同时作为理论物理的科研工作者，在科研工作中，从物理学不同角度应用群论方法来研究和处理问题．总结自己的教学经验和科研心得，也从已有的群论专著和教材中吸取营养，逐渐形成了比较适合物理专业学生学习的群论教学体系，于 1998 年由科学出版社出版了《物理学中的群论》(下称文献[1])一书，书中并附有适量的习题，供物理专业研究生教学使用．此书出版四年多来，承蒙广大读者的支持，已再印了两次．现已有不少高等院校和科研机构采用此书作为物理专业研究生的群论课教材或主要参考书．

在这几年教材的使用过程中，作者收到了不少教师和同学的来信来电，除了表达对作者的鼓励外，也提出了一些中肯的意见．意见归纳起来有三方面．一是感到书中有的习题比较难做，或者不容易找到简洁明了的计算方法，希望能看到供参考的习题解法．二是教材的篇幅较大，不能适应不同情况的教学需要，由于课时的限制，希望有一本简写本，能对物理学中所用群论方法有提纲式的介绍．三是结合物理科研和教学各种情况的需要，希望能提供一些供查阅的常用资料和表格，以及反映近年在物理学中所应用的群论方法的新发展．由此萌发出写一本供物理专业用的群论习题精解的想法．在科学出版社和各位朋友的鼓励和支持下，促成了本习题精解的出版．当然要想通过一本习题精解完全克服这些缺点是不现实的，也超出了作者的能力所及．作者只是希望通过本习题精解，在作者比较熟悉的领域内，尽其所能，努力在下面几方面作一些弥补和改进．

首先，习题精解涵盖了文献[1]的全部习题，尽可能采用简单的方法解答这些习题．在选用文献[1]作为群论教材时，希望习题精解会对教学工作有所帮助．为便于读者寻找，本习题精解对新增加的习题用星号加以区分．在文献[1]中包

含的习题，除作为群论方法的基本练习题外，还包括两种类型的题．一是某些群论定理或方法，让读者知道可能会有好处，由于篇幅有限，放在习题里向读者提示可能更合适．这类题有的比较简单，有的包含一些小技巧，也有的通过适当的提示是可以证明或计算出来的．作者原意并不要求读者都会计算或证明这些习题，只是知道这些结论就行．后来知道有些题使部分读者花费了过多的精力．现在把它们一一解出来，供读者参考．二是数学上一些重要结论，它们并不是群论本身的内容，放在教材中花大量篇幅讨论似乎不很合适，于是就放在习题中告诉读者，其中最典型的是把矩阵化为若尔当标准型(第一章第 15 题，以本习题精解编号为准，下同)．此结论在数学上虽有严格证明，但涉及名词概念太多，容易分散读者学习群论知识的精力．文献[1]用习题形式向读者告知这结论，本习题精解用物理工作者习惯的语言作了证明．但作者并不鼓励读者花很大精力去学懂它们，承认其结论对大多数读者已经足够．

其次，本习题精解在各节习题前面，用了相当的篇幅概括主要解题方法，有的加以简单证明，有的只是列出结论，努力去包括物理学中常用群论方法的基本方面．这些注解一方面为读者做习题提供方便，另一方面也希望为课时较少的群论课程教学提供一个提纲．后一目的能否达到，作者没有把握，也许考虑尚欠成熟，希望通过实践来加以验证或今后改进．

第三，本习题精解比原教材(文献[1])增加了一些内容．近年来的教学使作者体会到分导表示和诱导表示的概念在处理某些问题时相当有效，因而在本习题精解的第三章专门设一节作详细的介绍，并在第六章和第七章介绍了有关的应用．计算可约表示的分解和函数基的重新组合是群论方法在物理学中应用的一个重要方面，本习题精解对此问题给予了较多的关注，在各章都有较大篇幅的介绍和举例，希望能引起读者足够的重视．置换群是物理学中常见的一个有限群，在第六章不仅介绍了主要计算方法，也列出了若干计算结果供查阅，如第 6，7，8，31 题．文献[1]第二章和第三章列举了正二十面体及其对称群的一些重要性质，这些内容本来是供查阅用的，书中对具体计算方法介绍不够，本习题精解在第四章第 5，6，12 题作了补充．有限群群空间不可约基的计算，实际上提供了一类投影算符，可以很快地把波函数组合成属不可约表示的函数基．在文献[1]第三章有过介绍，本习题精解除在第三章给出计算的例子外，还在第六章第 22～25 题把此方法应用于甲烷分子对称基的计算．这方法已在物理中找到实际应用，具体可参看文献[21～23,43,56,58]．非紧致李群的无穷维幺正表示也是物理学中群论方法的一个应用方向，在文献[1]把这方面完全略去了．本习题精解在第四章第 24 题就一个最简单的例子作了认真的分析，其方法有普遍意义．第八章第三节介绍洛伦兹群的一些性质，也是对文献[1]的补充．量子少体系统转动自由度的分离是量子物理中的一个基本问题，从量子力学创始之初就得到大师们的关注

(见文献[26,76,41])，以后不断有新的改进(见文献[14,60,9,10])，近年来引入了新的方法(见文献[36,37])，其中充分运用了群论工具. 第九章第三节把这问题当作一个群论应用的例子作了介绍.

由于作者对物理学中应用的群论方法的理解不可避免地具有局限性，对群论习题精解的编写也缺乏经验，题目和方法的选择明显表现出偏向于作者熟悉的领域，引文肯定存在挂一漏万的现象. 限于作者的水平和写作时间，本习题精解只能作为一种尝试，希望能起到抛砖引玉的作用. 作者对书中可能出现的错误事先向读者致以深深的谦意，诚恳欢迎读者的各种批评和指正.

本书编写过程中有关的科研工作得到国家自然科学基金的资助。

马中骐
高能物理研究所
2002 年于北京

# 目　　录

# 第一章　线性代数复习

## 一、矩阵的本征值和本征矢量

★　$m$ 维矩阵 $R$ 的本征值 $\lambda$ 和本征矢量 $\boldsymbol{a}$ 满足

$$R\boldsymbol{a} = \lambda\boldsymbol{a}, \tag{1.1}$$

这是关于本征矢量分量 $a_\mu$ 的联立线性齐次方程，方程有非零解的充要条件是方程的系数行列式为零

$$\det(R - \lambda\mathbf{1}) = \begin{vmatrix} R_{11}-\lambda & R_{12} & \cdots & R_{1m} \\ R_{21} & R_{22}-\lambda & \cdots & R_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R_{m1} & R_{m2} & \cdots & R_{mm}-\lambda \end{vmatrix} \tag{1.2}$$

$$= (-\lambda)^m + (-\lambda)^{m-1}\operatorname{tr} R + \cdots + \det R = 0.$$

其中 $\operatorname{tr} R$ 是矩阵的迹，即矩阵对角元之和，$\det R$ 是矩阵的行列式. 方程(1.2)称为矩阵的久期方程，它是关于 $\lambda$ 的 $m$ 次代数方程，包括重根共有 $m$ 个复根. 这些根就是矩阵的本征值. 对于每一个给定的本征值 $\lambda$，由本征方程(1.1)，至少可解得一个本征矢量 $\boldsymbol{a}$. 本征矢量包含有一个可乘的非零常数因子.

如果本征值 $\lambda$ 是 $n$ 重根，由本征方程(1.1)不一定可算出 $n$ 个线性无关的本征矢量. 如果矩阵 $R$ 的 $m$ 个行(或列)矢量中只有 $r$ 个是线性无关的，则称矩阵 $R$ 的秩为 $r$. 若矩阵($R-\lambda\mathbf{1}$)的秩为 $r$，则由久期方程可找到($m-r$)个线性无关的本征矢量. 对应同一本征值的本征矢量之任意线性组合都是对应此本征值的本征矢量. 零矢量是任何矩阵的平庸的本征矢量，我们只讨论非平庸的本征矢量.

对于维数较低的矩阵，或包含较多零矩阵元素的矩阵，本征值和本征矢量有时可以根据经验猜出来，或由计算和猜测相结合得到，只要猜出的本征值和本征矢量满足本征方程(1.1)，它们就是正确的结果. 另一方面，即使是计算得的结果，也应该代入方程(1.1)进行验算.

★　$R^\dagger = R$ 的矩阵称为厄米矩阵，$R^\dagger = R^{-1}$ 的矩阵称为幺正矩阵. 实的厄米矩阵是实对称矩阵，实的幺正矩阵是实正交矩阵. 本征值都是正数的矩阵称为正定的

矩阵，不包含负本征值的矩阵称为半正定的矩阵．同样可定义负定或半负定的矩阵．

**1．** 证明矩阵的本征值之和等于矩阵迹，本征值之积等于矩阵行列式．

**证** 对于一个 $m$ 维矩阵 $R$，久期方程是一个 $m$ 次代数方程，它的包括重根在内的 $m$ 个复根 $\lambda_j$，就是矩阵 $R$ 的本征值．因此久期方程又可以表为

$$\begin{aligned}\det(R-\lambda\mathbf{1}) &= \prod_{j=1}^{m}(\lambda_j-\lambda) \\ &= (-\lambda)^m+(-\lambda)^{m-1}\sum_{j=1}^{m}\lambda_j+\cdots+\prod_{j=1}^{m}\lambda_j=0.\end{aligned}$$

与(1.2)式比较，得 $R$ 矩阵的矩阵迹等于本征值之和，$R$ 矩阵的行列式等于本征值之积．证完．

**2．** 计算泡利矩阵 $\sigma_1$ 和 $\sigma_2$ 的本征值和本征矢量

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

**解** $\sigma_1$ 矩阵对矢量的作用是把矢量上下两个分量交换，如果矢量的两分量相等，则它是 $\sigma_1$ 矩阵的本征值为 1 的本征矢量，如果矢量的两分量互差负号，则它是 $\sigma_1$ 矩阵的本征值为 −1 的本征矢量，

$$\sigma_1\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix},\quad \sigma_1\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}.$$

同理可知，如果矢量的两分量相差 $\pm\mathrm{i}$，则它是 $\sigma_2$ 矩阵的本征矢量：

$$\sigma_2\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix},\quad \sigma_2\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

当矩阵 $R$ 包含许多零矩阵元素时，有时会以直和或直积形式包含着 $\sigma_1$ 或 $\sigma_2$ 矩阵，此时 $R$ 矩阵的某些本征值和本征矢量可以利用上面结果猜出来．所谓矩阵 $R$ 以直和形式包含一个二维子矩阵是指在给定的 $a$ 和 $b$ 行(列)，有 $R_{ac}=R_{ca}=R_{bc}=R_{cb}=0$，其中 $c$ 是所有不等于 $a$ 和 $b$ 的行(列)指标．

**3.** 计算下面 $R$ 矩阵的本征值和本征矢量

$$R=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}.$$

**解** 矩阵 $R$ 可以看成两个子矩阵 $\sigma_1$ 的直和，其中一个子矩阵处在第一和第四行(列)，另一个子矩阵处在第二和第三行(列)．根据上题的计算结果知，$R$ 矩阵有两个本征值为 1，另两个本征值为 $-1$，对应的本征矢量分别为

$$1:\begin{pmatrix}1\\0\\0\\1\end{pmatrix},\quad\begin{pmatrix}0\\1\\1\\0\end{pmatrix},\qquad -1:\begin{pmatrix}1\\0\\0\\-1\end{pmatrix},\quad\begin{pmatrix}0\\1\\-1\\0\end{pmatrix}.$$

**4.** 计算下面 $R$ 矩阵的本征值和本征矢量

$$R=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}.$$

**解** 这是 $\sigma_1$ 矩阵的推广，它对矢量的作用是把矢量的三个分量顺序变换，变换三次则恢复原状，即 $R^3=\mathbf{1}$，因此 $R$ 矩阵的本征值为 1，$\omega=\exp\{-i2\pi/3\}$ 和 $\omega^2$，本征矢量两个相邻分量之比为本征值．下面依次列出各本征值对应的本征矢量：

$$1:\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix},\quad \omega:\begin{pmatrix}1\\\omega^2\\\omega\end{pmatrix},\qquad \omega^2:\begin{pmatrix}1\\\omega\\\omega^2\end{pmatrix}.$$

**5.** 若 $\det R\neq 0$，证明 $R^\dagger R$ 和 $RR^\dagger$ 都是正定的厄米矩阵．

**解** 显然，$R^\dagger R$ 和 $RR^\dagger$ 是厄米矩阵．设 $\lambda$ 和 $\boldsymbol{a}$ 是 $R^\dagger R$ 的本征值和非零的本征矢量，

$$(R^\dagger R)\boldsymbol{a}=\lambda\boldsymbol{a},\qquad \boldsymbol{a}^\dagger\boldsymbol{a}>0,$$

则

$$\lambda\{\boldsymbol{a}^\dagger \boldsymbol{a}\} = \boldsymbol{a}^\dagger(R^\dagger R)\,\boldsymbol{a} = (R\boldsymbol{a})^\dagger(R\boldsymbol{a}) \geqslant 0,$$

即 $\lambda \geqslant 0$. 由于 $\det R \neq 0$，$\det(R^\dagger R) \neq 0$，则本征值 $\lambda$ 不为零，因此 $(R^\dagger R)$ 是正定的. 把 $R^\dagger$ 看成新的 $R$，同样可证 $RR^\dagger$ 是正定的.

**6.** 证明：(1) 若 $R^\dagger R=\mathbf{1}$，则 $RR^\dagger=\mathbf{1}$；

(2) 若 $R^{-1}R=\mathbf{1}$，则 $RR^{-1}=\mathbf{1}$；

(3) 若 $R^T R=\mathbf{1}$，则 $RR^T=\mathbf{1}$.

**证** 三个小题的证法完全相同，这里以小题(1)为例来证明.

由于 $R^\dagger R=\mathbf{1}$，$R^\dagger$ 是非奇的. 设 $S$ 是 $R^\dagger$ 的逆矩阵，$SR^\dagger=1$，于是有 $RR^\dagger=(SR^\dagger)RR^\dagger=S(R^\dagger R)R^\dagger=SR^\dagger=1$. 把第一小题中的 $R^\dagger$ 换成 $R^{-1}$ 或 $R^T$，同样可证明后两个小题.

**7.** 试讨论 $2\times 2$ 幺正矩阵，实正交矩阵和厄米矩阵各含有多少个独立实参数，并写出它们的一般表达式.

**解** $2\times 2$ 复矩阵包含四个复参数，即八个实参数. 对幺正矩阵，两个列矩阵的归一条件给出参数的两个实条件，列矩阵正交给出一个复条件，即两个实条件，共四个实条件，因此 $2\times 2$ 幺正矩阵包含四个独立实参数. 对厄米矩阵，对角元是实数，即它们的虚部为零，给出两个实条件，一对非对角元互为复共轭，给出一个复条件，因此 $2\times 2$ 厄米矩阵也包含四个独立实参数.

$2\times 2$ 实矩阵包含四个实参数. 对实正交矩阵，两个列矩阵的归一条件给出参数的两个实条件，列矩阵正交给出一个实条件，共三个实条件，因此 $2\times 2$ 实正交矩阵只包含一个独立实参数.

取任意 $2\times 2$ 幺正矩阵 $u$，行列式为 $\det u=\exp\{\mathrm{i}\varphi\}$，提出因子 $\exp\{\mathrm{i}\varphi/2\}$，得

$$u = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}.$$

根据定义，

$$aa^* + bb^* = cc^* + dd^* = 1,\quad ac^* + bd^* = 0,\quad ad - bc = 1.$$

由此得

$$a = a(cc^* + dd^*) = d^*(-bc + ad) = d^*,$$

$$b = b(cc^* + dd^*) = c^*(bc - ad) = -c^*.$$

因此,2×2 幺正矩阵的一般形式为

$$u = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\begin{pmatrix} a & -b^* \\ b & a^* \end{pmatrix}, \quad aa^* + bb^* = 1.$$

其中受限制的复参数 $a$ 和 $b$ 包含三个实参数,加上 $\varphi$,共四个独立实参数.

实正交矩阵也是幺正矩阵,行列式可等于±1.当行列式为 1 时,$a$ 和 $b$ 取实数,满足条件 $a^2 + b^2 = 1$,常取 $a = \cos\theta$, $b = \sin\theta$.当行列式为 −1 时,常把第一行矩阵元素改号,得 2×2 实正交矩阵的一般形式为

$$R = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}, \quad 或 \quad R' = \begin{pmatrix} -\cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}.$$

2×2 厄米矩阵的一般形式为

$$R = \begin{pmatrix} a & c + \mathrm{i}\,d \\ c - \mathrm{i}\,d & b \end{pmatrix},$$

其中 $a$, $b$, $c$ 和 $d$ 都是独立实参数.

## 二、相似变换和矩阵的对角化

★　在 $m$ 维空间 $\mathscr{L}$ 中,选定基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 后,任何矢量 $\boldsymbol{a}$ 可按基展开,

$$\boldsymbol{a} = \sum_{\mu=1}^{m} \boldsymbol{e}_\mu a_\mu\ . \tag{1.3}$$

$a_\mu$ 称为矢量 $\boldsymbol{a}$ 关于基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 的分量,把这些分量排成 $m$ 行一列的列矩阵 $\underline{\boldsymbol{a}}$,称为矢量 $\boldsymbol{a}$ 关于基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 的列矩阵形式.

★　设 $m$ 维空间 $\mathscr{L}$ 对算符 $R$ 保持不变,则算符 $R$ 作用在基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 上得到基的线性组合,

$$R\boldsymbol{e}_\mu = \sum_{\nu=1}^{m} \boldsymbol{e}_\nu D_{\nu\mu}(R). \tag{1.4}$$

组合系数 $D_{\nu\mu}(R)$ 排列起来得到的 $m \times m$ 矩阵 $D(R)$ 称为算符 $R$ 关于基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 的矩阵形式.

★　选择一组新基 $\boldsymbol{e}'_\nu$,把它们在原基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 中的列矩阵形式,作为列矩阵排列成 $S$ 矩阵:

$$\boldsymbol{e}'_\nu = \sum_{\mu=1}^{m} \boldsymbol{e}_\mu S_{\mu\nu}\ . \tag{1.5}$$

此 $S$ 矩阵称为两组基间的变换矩阵,它是 $m$ 维非奇矩阵.关于新基 $\boldsymbol{e}'_\nu$,矢量 $\boldsymbol{a}$ 的列矩阵形式和算符 $R$ 的矩阵形式分别为

$$\boldsymbol{a} = \sum_{\mu=1}^{m} \boldsymbol{e}'_\mu a'_\mu, \quad R\boldsymbol{e}'_\nu = \sum_{\rho=1}^{m} \boldsymbol{e}'_\rho \overline{D}_{\rho\nu}(R), \tag{1.6}$$

它们与关于原基的矩阵形式间的联系为

$$\boldsymbol{a}' = S^{-1}\boldsymbol{a}, \quad \overline{D}(R) = S^{-1} D(R) S. \tag{1.7}$$

通常称"$D(R)$矩阵经过相似变换 $S$ 变成 $\overline{D}(R)$矩阵",有的书上把 $D(R)$矩阵和 $\overline{D}(R)$矩阵称为等价的矩阵,它们是同一个算符关于不同基的矩阵形式.由相似变换相联系的矩阵有共同的本征值.

把相似变换关系写成矩阵元素形式:

$$\sum_{\rho=1}^{m} D_{\mu\rho}(R) S_{\rho\nu} = \sum_{\rho=1}^{m} S_{\mu\rho} \overline{D}_{\rho\nu}(R), \quad D(R) S_{\cdot\nu} = \sum_{\rho=1}^{m} S_{\cdot\rho} \overline{D}_{\rho\nu}(R). \tag{1.8}$$

因为 $S$ 矩阵的列矩阵正是新基在原来基中的列矩阵形式,而(1.8)式中的 $\overline{D}_{\rho\nu}(R)$ 是作为组合系数出现的,所以(1.8)式是(1.6)式在原来基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 中的矩阵形式.这形式在以后的计算中非常有用.

★　如果 $S$ 矩阵的第一列是 $D(R)$矩阵的本征值为 $\lambda_1$ 的本征矢量,则 $\overline{D}(R)$的第一列只有第一个分量等于 $\lambda_1$,其余分量都为零.如果 $S$ 矩阵的所有列矩阵都是 $D(R)$矩阵的线性无关的本征矢量,则 $\overline{D}(R)$矩阵是对角矩阵,对角元依次是各本征矢量对应的本征值.这就是矩阵通过相似变换对角化的本质.

把 $m$ 维 $D(R)$矩阵对角化的充要条件是 $D(R)$矩阵存在 $m$ 个线性无关的本征矢量.把 $D(R)$矩阵对角化的相似变换矩阵 $S$ 的各列矩阵正是 $D(R)$矩阵的线性无关的本征矢量.这样的 $S$ 矩阵并没有完全确定,它允许右乘一个与对角化的 $\overline{D}(R)$矩阵相对易的矩阵 $X$.如果 $D(R)$矩阵的 $m$ 个本征值互不相同,则 $X$ 矩阵是对角矩阵,它的存在说明每个本征矢量允许乘一个任意常数.如果 $D(R)$矩阵各本征值 $\lambda_j$ 的重数分别为 $n_j$, $\sum_j n_j = m$,则 $X$ 矩阵是方块矩阵,包含 $\sum_j n_j^2$ 个任意常数,这些常数表明,对应同一本征值的本征矢量之间允许作任意线性组合.

★　$m$ 维幺正矩阵和厄米矩阵都存在 $m$ 个正交归一的本征矢量,因此它们可通过幺正的相似变换对角化.$m$ 维实对称矩阵(也是厄米矩阵)存在 $m$ 个正交归一的实本征矢量,因此可通过实正交相似变换对角化.但 $m$ 维实正交矩阵(也是幺正矩阵)不一定可以通过实正交相似变换对角化.

**8.** 找相似变换把下列矩阵对角化：

$$(1)\begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix};\quad (2)\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}.$$

**解**　设题中给出的矩阵为 $D(R)$.

(1) 矩阵 $D(R)$的久期方程为

$$-\lambda^3+2\lambda^2-4\lambda+8=(2-\lambda)(\lambda^2+4)=0,$$

解得本征值为 2,2i 和−2i.注意到 $D(R)/2$ 矩阵是实正交矩阵,它的三个本征矢量是互相正交的.由 $D(R)$矩阵的第二行可以看出,若本征矢量的第一和第三分量相等,第二分量为零,则在 $D(R)$矩阵作用后,第二分量保持为零.再由 $D(R)$矩阵的第一和第三行知,它正是 $D(R)$矩阵的本征值为 2 的本征矢量,它的转置为(1,0,1).根据正交性,其他两个本征矢量的转置取$(1, a, -1)$的形式,代入本征方程

$$\begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ a \\ -1 \end{pmatrix}=\pm 2\mathrm{i}\begin{pmatrix} 1 \\ a \\ -1 \end{pmatrix},$$

解得 $a=\mp\mathrm{i}\sqrt{2}$.归一化后得

$$X^{-1}D(R)X=\begin{pmatrix} 2\mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -2\mathrm{i} \end{pmatrix},\quad X=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ -\mathrm{i}\sqrt{2} & 0 & \mathrm{i}\sqrt{2} \\ -1 & \sqrt{2} & -1 \end{pmatrix}.$$

(2) 矩阵 $D(R)$的久期方程为

$$\lambda^2-2(\cos\theta)\lambda+1=(\lambda-e^{\mathrm{i}\theta})(\lambda-e^{-\mathrm{i}\theta})=0,$$

解得本征值为 $\exp(\pm\mathrm{i}\theta)$.代入本征方程,

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ a \end{pmatrix}=e^{\pm\mathrm{i}\theta}\begin{pmatrix} 1 \\ a \end{pmatrix},$$

解得 $a=\mp\mathrm{i}$.归一化后得

$$X^{-1}D(R)X=\begin{pmatrix} e^{i\theta} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{pmatrix},\quad X=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix}.$$

**9.** 找相似变换矩阵 $M$ 使

$$M^{-1}\begin{pmatrix} 0 & -\cos\theta & \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta & 0 & -\sin\theta\cos\varphi \\ -\sin\theta\sin\varphi & \sin\theta\cos\varphi & 0 \end{pmatrix}M=\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

**解**　设相似变换前的矩阵为 $D(R)$,相似变换后的矩阵为 $\overline{D}(R)=M^{-1}D(R)M$. $\overline{D}(R)$矩阵是$-i\sigma_2$ 和 0 的直和,故可与下面矩阵对易

$$X=\begin{pmatrix} \alpha & -\beta & 0 \\ \beta & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}.$$

因此,若 $M$ 矩阵满足式 $M^{-1}D(R)M=\overline{D}(R)$,则 $MX$ 矩阵也满足此式,其中 $X$ 中的参数反映了相似变换 $M$ 的不完全确定性.

由 $\overline{D}(R)$矩阵的形式可知,$D(R)$矩阵的本征值是 0 和$\pm i$,而 $M$ 矩阵的第三列正是对应零本征值的本征矢量,前两列则是对应本征值为$\pm i$ 的本征矢量之线性组合.先计算 $D(R)$的零本征值的本征矢量.取本征矢量的第三个分量为 $\cos\theta$,由 $D(R)$矩阵的前两行知,本征矢量的前两个分量分别为 $\sin\theta\cos\varphi$ 和 $\sin\theta\sin\varphi$.这相当选择了参数 $\gamma$.令

$$M=\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \sin\theta\cos\varphi \\ b_1 & b_2 & \sin\theta\sin\varphi \\ c_1 & c_2 & \cos\theta \end{pmatrix},$$

代入

$$D(R)M=M\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_2 & -a_1 & 0 \\ b_2 & -b_1 & 0 \\ c_2 & -c_1 & 0 \end{pmatrix},$$

得

$$
\begin{aligned}
a_2 &= -b_1\cos\theta + c_1\sin\theta\sin\varphi,\\
b_2 &= a_1\cos\theta - c_1\sin\theta\cos\varphi,\\
c_2 &= -a_1\sin\theta\sin\varphi + b_1\sin\theta\cos\varphi,\\
-a_1 &= -b_2\cos\theta + c_2\sin\theta\sin\varphi,\\
-b_1 &= a_2\cos\theta - c_2\sin\theta\cos\varphi,\\
-c_1 &= -a_2\sin\theta\sin\varphi + b_2\sin\theta\cos\varphi.
\end{aligned}
$$

把前三式代入后三式,或后三式代入前三式,得

$$
\begin{aligned}
a_1\sin\theta\cos\varphi + b_1\sin\theta\sin\varphi + c_1\cos\theta = 0,\\
a_2\sin\theta\cos\varphi + b_2\sin\theta\sin\varphi + c_2\cos\theta = 0.
\end{aligned}
$$

这两个关系说明 $M$ 矩阵的前两列与第三列正交.这是 $D(R)$矩阵的反对称性所决定的,因为若 $D(R)\underline{\boldsymbol{a}}=\lambda\underline{\boldsymbol{a}}\neq 0$, $D(R)\underline{\boldsymbol{b}}=0$,则 $\underline{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}}D(R)=0$,

$$
0 = \underline{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}}D(R)\underline{\boldsymbol{a}} = \lambda\underline{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}}\underline{\boldsymbol{a}}
$$

现在为方便起见,选择 $c_1=-\sin\theta$,则由上式可得一组特解:$a_1=\cos\theta\cos\varphi$ 和 $b_1=\cos\theta\sin\varphi$.这相当对参数 $\alpha$ 和 $\beta$ 的一种选择.再由前面公式可解得 $a_2=-\sin\varphi$, $b_2=\cos\varphi$和 $c_2=0$.最后得 $M$ 是一个实正交矩阵:

$$
M = \begin{pmatrix}
\cos\theta\cos\varphi & -\sin\varphi & \sin\theta\cos\varphi\\
\cos\theta\sin\varphi & \cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi\\
-\sin\theta & 0 & \cos\theta
\end{pmatrix}.
$$

**10.** 找相似变换矩阵 $M$ 使

$$
M^{-1}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0\\ \mathrm{i} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix},
$$

$$
M^{-1}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\mathrm{i}\\ 0 & \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}M = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix},
$$

$$M^{-1}\begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 \end{pmatrix} M = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

**解**　第一式是一个把矩阵对角化的相似变换关系,相似变换前的矩阵的三个本征矢量,构成了 $M$ 矩阵的三个列矩阵.为了满足后两个公式,本征矢量必须保留可乘因子,即 $M$ 矩阵可取为

$$M = \begin{pmatrix} a & 0 & c \\ \mathrm{i}a & 0 & -\mathrm{i}c \\ 0 & b & 0 \end{pmatrix}.$$

可以取 $b=1$,这相当对相似变换的可乘因子的一种选择.代入第二式,为了避免计算 $M^{-1}$ 矩阵,可先把 $M^{-1}$ 移到等式右面去,得

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ -a & 0 & c \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & a+c & 0 \\ 0 & \mathrm{i}(a-c) & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

解得 $a=-c=-\sqrt{1/2}$,

$$M = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -\mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

经过检验,它确实也满足第三式.

**11.**　设

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

找相似变换矩阵 $X$ 使

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

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

**解**　根据矩阵直乘的定义，

$$R\times R=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\quad S\times S=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1&\sqrt{3}&\sqrt{3}&3\\-\sqrt{3}&1&-3&\sqrt{3}\\-\sqrt{3}&-3&1&\sqrt{3}\\3&-\sqrt{3}&-\sqrt{3}&1\end{pmatrix}.$$

$R\times R$ 已经是对角矩阵，容易看出，它的本征值为 1 和 $-1$ 的本征矢量分别为

$$+1:\begin{pmatrix}a\\0\\0\\b\end{pmatrix},\qquad -1:\begin{pmatrix}0\\c\\d\\0\end{pmatrix},$$

因此 $X$ 矩阵取如下形式

$$\begin{pmatrix}a&0&a'&0\\0&c&0&c'\\0&d&0&d'\\b&0&b'&0\end{pmatrix}.$$

在代入第二式前，先把 $X^{-1}$ 矩阵移到等式的右面，得

$$\frac{1}{4}\begin{pmatrix} a+3b & \sqrt{3}(c+d) & a'+3b' & \sqrt{3}(c'+d') \\ -\sqrt{3}(a-b) & c-3d & -\sqrt{3}(a'-b') & c'-3d' \\ -\sqrt{3}(a-b) & -3c+d & -\sqrt{3}(a'-b') & -3c'+d' \\ 3a+b & -\sqrt{3}(c+d) & 3a'+b' & -\sqrt{3}(c'+d') \end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2a & 0 & -a' & -\sqrt{3}a' \\ 0 & 2c & \sqrt{3}c' & -c' \\ 0 & 2d & \sqrt{3}d' & -d' \\ 2b & 0 & -b' & -\sqrt{3}b' \end{pmatrix}.$$

解得 $a=b$, $c=-d$ 和 $c'=d'=-a'=b'$.由于相似变换的不完全确定性,可选 $a=c=c'=\sqrt{1/2}$,得

$$X=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

**12.** 找使下面三矩阵同时对角化的公共相似变换矩阵 $X$,

$$\begin{pmatrix} 0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0 \\ 0&0&0&0&0&1 \\ 1&0&0&0&0&0 \\ 0&1&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0 \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} 0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&1 \\ 0&0&0&0&1&0 \\ 1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0 \\ 0&1&0&0&0&0 \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} 0&0&0&1&1&1 \\ 0&0&0&1&1&1 \\ 0&0&0&1&1&1 \\ 1&1&1&0&0&0 \\ 1&1&1&0&0&0 \\ 1&1&1&0&0&0 \end{pmatrix}$$

**解** 前两个矩阵都是方块矩阵,除了行列排列的区别外,它们都是三个 $\sigma_1$ 矩阵的直和,第一个矩阵中,子矩阵涉及的行列是(1,4),(2,5)和(3,6),而对第二个矩阵

则为(1,4),(2,6)和(3,5).因此,两矩阵各有三个本征值为 1,三个本征值为−1.两个矩阵的本征矢量分别为

$$
\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ a \\ b \\ c \end{pmatrix},\quad
\begin{pmatrix} a' \\ b' \\ c' \\ -a' \\ -b' \\ -c' \end{pmatrix},\quad
\begin{pmatrix} d \\ e \\ f \\ d \\ f \\ e \end{pmatrix},\quad
\begin{pmatrix} d' \\ e' \\ f' \\ -d' \\ -f' \\ -e' \end{pmatrix}.
$$

$$
\begin{matrix} 1 & \qquad -1 & \qquad 1 & \qquad -1 \end{matrix}
$$

第三个矩阵的本征方程为

$$
\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} p \\ q \\ r \\ s \\ t \\ u \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} s+t+u \\ s+t+u \\ s+t+u \\ p+q+r \\ p+q+r \\ p+q+r \end{pmatrix}
=\lambda
\begin{pmatrix} p \\ q \\ r \\ s \\ t \\ u \end{pmatrix}.
$$

除了本征值为零的情况外,前三个分量必须相等,后三个分量也必须相等,因此本征值是±3.相应的本征矢量是

$$
+3:\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},\qquad
-3:\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}.
$$

这两个矢量也是前两个矩阵的本征矢量,本征值为 1 和−1.在余下的子空间中,第

三个矩阵的本征值都是零,而前两个矩阵的本征值分别是±1.适当排列后,得相似变换矩阵为

$$\frac{1}{2\sqrt{3}}\begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & 2 & 0 & 0 & 2 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & -1 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} & -1 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & -1 & -\sqrt{3} & \sqrt{3} & -1 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 2 & 0 & 0 & -2 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & -1 & \sqrt{3} & \sqrt{3} & 1 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & -1 & -\sqrt{3} & -\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix},$$

经过此相似变换,三个矩阵都变成对角矩阵,列举如下:

$$\mathrm{diag}\{1,-1,1,1,-1,-1\},$$

$$\mathrm{diag}\{1,-1,1,-1,1,-1\},$$

$$\mathrm{diag}\{3,-3,0,0,0,0\}.$$

**13.** 写出 $m$ 行 $m$ 列既幺正又厄米矩阵的一般形式.

**解** 幺正矩阵和厄米矩阵都可以通过幺正的相似变换对角化,对角化后,幺正矩阵对角元的模为 1,而厄米矩阵的对角元为实数.因此,既幺正又厄米的矩阵经过幺正的相似变换对角化后,对角元只能取±1.适当排列后记作 $\Gamma_n$,它是对角矩阵,前 $n$ 个对角元为 1,后 $m-n$ 个对角元为 $-1$.因此既幺正又厄米的矩阵一般可表为 $U\Gamma_n U^{-1}$,其中 $U$ 矩阵是行列式为 1 的幺正矩阵.

**14.** 证明若 $R$ 和 $R^\dagger$ 乘积可以对易,则 $R$ 和 $R^\dagger$ 可通过共同的幺正相似变换对角化.进一步再证明矩阵 $R$ 能通过幺正相似变换对角化的充要条件是 $R$ 和 $R^\dagger$ 乘积可以对易.

**证** 本题第一部分的证明,与证明幺正或厄米矩阵能通过幺正的相似变换对角化的方法很类似.取 $R$ 矩阵的任一本征值 $\lambda_1$ 和相应归一化的本征矢量 $S_{\cdot 1}^{(1)}$,以 $S_{\cdot 1}^{(1)}$ 为第一个列矩阵,找一组完备的正交归一的列矩阵,把它们排列起来构成幺正矩阵 $S^{(1)}$.经过 $S^{(1)}$ 相似变换,$(S^{(1)})^{-1}R^\dagger(S^{(1)})$和$(S^{(1)})^{-1}RS^{(1)}$ 仍互为转置共轭矩阵,且仍互相对易.因为

$$(S^{(1)})^{-1}RS^{(1)}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & r_2 & \cdots & r_m\\ 0 & & & \\ \vdots & & R^{(1)} & \\ 0 & & & \end{pmatrix}=\{(S^{(1)})^{-1}R^{\dagger}S^{(1)}\}^{\dagger},$$

两矩阵的两种次序的乘积得到的第一行第一列矩阵元素应该相等

$$|\lambda_1|^2=|\lambda_1|^2+\sum_{n=2}^{m}|r_n|^2.$$

可见所有 $r_n$ 都等于零.余下的子矩阵 $R^{(1)}$ 仍与$(R^{(1)})^{\dagger}$ 对易,可以重复前面的步骤,通过一系列的幺正相似变换把 $R$ 和 $R^{\dagger}$ 同时对角化.

反之,若 $R$ 可以通过幺正相似变换 $S$ 对角化,则 $R^{\dagger}$ 也可以通过 $S$ 相似变换对角化,因对角矩阵互相对易,得出对角化前的矩阵 $R$ 和 $R^{\dagger}$ 也可对易.证完.

**15.** 证明任何矩阵都可通过相似变换化为若尔当(Jordan)标准型的直和,若尔当标准型是

$$R_{a,b}=\begin{cases}\lambda, & \text{当 } a=b\\ 0\text{ 或 }1, & \text{当 } a+1=b\\ 0, & \text{其他}.\end{cases}$$

**证**　我们已经知道,对久期方程解得的每一个本征值,至少可以找到一个本征矢量与它相对应,但当有重本征值出现时,不一定能找到与重数相同个数的线性无关的本征矢量.若 $R$ 矩阵存在 $m$ 个线性无关的本征矢量,把它们作为列矩阵排列起来,就得到能把 $R$ 矩阵对角化的相似变换矩阵.现在我们需要研究的是当久期方程存在重根,又找不到与重数相同个数的线性无关的本征矢量的情况.下面分三步来证明.第一步证明,任何矩阵 $R$ 都可通过相似变换化为上三角矩阵,矩阵的对角元就是本征值,而且相同的本征值排在一起,第二步证明,可进一步通过相似变换,把 $R$ 矩阵化为方块矩阵,其中每一个子矩阵都只与一个确定的本征值相联系.换言之,如果一个非对角元,它所在的行和列的对角元(本征值)不相同,则可通过相似变换把它化为零.第三步证明,每一个与确定本征值相联系的子矩阵可通过相似变换化为若尔当标准型.因此任何矩阵都可通过相似变换化成若干个若尔当型矩阵的直和.

第一步,用数学归纳法来证明.对一维矩阵,此性质显然满足.现在假设此性质对任意 $n\leqslant m-1$ 维矩阵都成立,要证此性质对 $m$ 维矩阵 $R$ 也成立.设 $R$ 矩阵有 $d$ 个不同的本征值 $\lambda_j$,重数分别为 $n_j$,