本征值问题图形理论的几条推理

杨 忠 志

（吉林大学理论化学研究所）

一、引 言

图形理论[1]指出，可以将每一个行列式A与一个图形G对应起来，行列式的m个对角元$a_{ii}(i=1,2,\cdots,m)$即为图形G的m个点g_{ii}（或g_i）的值，图G的i，j（$i\neq j$）两点之间的连线有两条，从i到j的连线g_{ij}的数值等于$-a_{ij}$（非对角元的负值），从j到i的连线g_{ji}的数值等于$-a_{ji}$，连线按顺时针方向用箭头表示．这样，一个行列式和一个图形有确定的对应关系，可以用图形来方便地讨论行列式的某些性质．

下面定义几个关于图的符号．$G_{[i|j]}$代表在G中割断i，j两点之间连线后所剩下的图形，它对应的行列式为在A中令$a_{ij}=a_{ji}=0$的行列式．割断某连线就是使此连线的数值为0．

$G_{[i]}$表示在G中去掉i点的图形（也去掉此点与其它点间的一切连线）．$G_{[i]}$对应的行列式为$m-1$阶．类似地，$G_{[i,j]}$代表在G中去掉i，j两点后的图形，它有$m-2$个点，所对应的行列式为$m-2$阶．

所谓途径，就是从始点出发经过一条或多条连线到达终点所经过的路线．始点与终点不同的途径为开途径；始终点相同的途径为闭途径．

从i点到j点的途径不止一条（当$m>2$时）．最短的途径是只经过连线g_{ij}，可以称为最短途径．途径也可以经过其它点，只要是从i点出发，按顺时针方向前进，最后到达j点．注意在一个途径中每个点最多只能经过一次．每一个途径包括自己所经过的点和连线（包括起点和终点），途径因子为这一途径所经过的连线的数值的连乘积（不包括所经过的点）．

$G_{[(i\to j)_k]}$代表去掉从i点到j点的第k个途径后所剩的图形，既要去掉途径所经过的点（包括端点），也要去掉经过的连线．注意去掉点时包括去掉此点与其它点的一切连线．

用$\bar{G}$代表图形G所对应的行列式．

定义

$$\bar{G}_{[i\to j]}=\sum_k b_k G_{[(i\to j)_k]}, \tag{1}$$

对k求和包括从i点到j点的所有可能的途径，b_k为途径因子．注意$\bar{G}_{[i\to j]}$是一些行列式的带因子的加和，不能直接断定它能否用一个行列式来表达，下面将证明回答是肯定的．

二、几 条 推 理

推理 1　若图形G'与图形G的区别仅在于二条连线：

本文 1980 年 7 月 23 日收到．

$$g'_{ij} = g_{ij} + \eta, \quad g'_{ji} = g_{ji} + \zeta \tag{2}$$

则

$$\bar{G}' = \bar{G} - \eta\zeta\bar{G}_{[i,j]} - \eta\bar{G}_{[j\to i]} - \zeta\bar{G}_{[i\to j]}. \tag{3}$$

证明　根据图形理论[1]，应用定理 1，对图形 G' 割断一组连线 g'_{ij} 和 g'_{ji}，注意到 G' 和 G 的联系，有

$$\begin{aligned}\bar{G}' = {} & \bar{G}_{[i|j]} - (g_{ij} + \eta)(g_{ji} + \zeta)\bar{G}_{[i,j]} \\ & - (g_{ij} + \eta)(\bar{G}_{[j\to i]} - g_{ji}\bar{G}_{[i,j]}) \\ & - (g_{ji} + \zeta)(\bar{G}_{[i\to j]} - g_{ij}\bar{G}_{[i,j]}),\end{aligned}$$

上式右端后三项包括了通过割断连线所有可能闭途径的贡献．整理上式，由定理 1[1]知不包含 η, ζ 的项等于图形 G 对应的行列式，因此有

$$\bar{G}' = \bar{G} - \eta\zeta\bar{G}_{[i,j]} - \eta\bar{G}_{[j\to i]} - \zeta\bar{G}_{[i\to j]}, \tag{4}$$

推理 1 得证．

对于 $\eta = \zeta$ 的情形，上式为

$$\bar{G}' = \bar{G} - \eta^2\bar{G}_{[i,j]} - \eta(\bar{G}_{[i\to j]} + \bar{G}_{[j\to i]}), \tag{5}$$

若 $\bar{G}_{[i\to j]} = \bar{G}_{[j\to i]}$，(5)式变为

$$\bar{G}' = \bar{G} - \eta^2\bar{G}_{[i,j]} - 2\eta\bar{G}_{[i\to j]}. \tag{6}$$

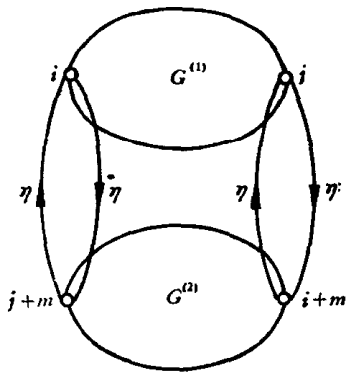
推理 2　由(1)式所定义的 $\bar{G}_{[i\to j]}$ 是行列式 $\bar{G}$ 去掉第 i 列、第 j 行的代数余子式．

证明　设图形 G' 仅有一条连线 g'_{ji} 区别于图形 G，且 $g'_{ji} = g_{ji} + 1$，应用推理 1，现在 $\eta = 0, \zeta = 1$，因此有 $\bar{G}' = \bar{G} - \bar{G}_{[i\to j]}$，从而 $\bar{G}_{[i\to j]} = \bar{G} - \bar{G}'$，注意到 $\bar{G}$ 与 $\bar{G}'$ 的差别，应用行列式的性质，将行列式 $\bar{G}$ 与 $\bar{G}'$ 按第 i 行展开，即知 $\bar{G}' - \bar{G}$ 等于行列式 $\bar{G}$ 去掉第 i 行、第 i 列的代数余子式．推理 2 得证．

推理 3　对图形 G 的任意两点 i, j，下关系式成立

$$\bar{G}_{[i\to j]}\bar{G}_{[j\to i]} = \bar{G}_{[i]}\bar{G}_{[j]} - \bar{G}_{[i,j]}\bar{G}. \tag{7}$$

证明　由两个图形 G 做成图形 H，示意如下图：



即将两个 G 图形的 i 点和 j 点用连线 η 连接起来，组成图形 H．这个图形具有二重旋转轴对称性，图形 H 可以分解成两个小图形 $H^{(0)}$, $H^{(1)}$，它们与图形 G 的区别仅在于一组连线，

对图形 $H^{(0)}$

$$h^{(0)}_{ij} = g_{ij} + \eta, \quad h^{(0)}_{ji} = g_{ji} + \eta,$$
$$h^{(0)}_{kl} = g_{kl} \text{（非以上两种情形）；}$$

对图形 $H^{(1)}$

$$h^{(1)}_{ij} = g_{ij} - \eta, \quad h^{(1)}_{ji} = g_{ji} - \eta,$$
$$h^{(1)}_{kl} = g_{kl} \text{（非以上两种情形）．}$$

对图形 $H^{(0)}$、$H^{(1)}$ 分别应用推理 1，有

$$\begin{aligned}\bar{H}^{(0)} &= \bar{G} - \eta^2\bar{G}_{[i,j]} - \eta(\bar{G}_{[i\to j]} + \bar{G}_{[j\to i]}), \\ \bar{H}^{(1)} &= \bar{G} - \eta^2\bar{G}_{[i,j]} + \eta(\bar{G}_{[i\to j]} + \bar{G}_{[j\to i]}),\end{aligned} \tag{8}$$

其中 $\bar{H}^{(0)}$ 和 $\bar{H}^{(1)}$ 分别为图形 $H^{(0)}$ 和 $H^{(1)}$ 所对应的行列式，$\bar{H}$ 等于 $\bar{H}^{(0)}$ 和 $\bar{H}^{(1)}$ 的乘积

$$\bar{H} = \bar{G}^2 + \eta^4\bar{G}^2_{[i,j]} - 2\eta^2\bar{G}_{[i,j]}\bar{G} - \eta^2(\bar{G}_{[i\to j]} + \bar{G}_{[j\to i]})^2. \tag{9}$$

用另一种方法来推算 $\bar{H}$：对于图形 H，割断两个图形 G 之间的两组连线，应用定理 1[1]有

$$\bar{H} = \bar{G}^2 - 2\eta^2\bar{G}_{[i]}\bar{G}_{[j]} + \eta^4\bar{G}^2_{[i,j]} - \eta^2(\bar{G}^2_{[i\to j]} + \bar{G}^2_{[j\to i]}), \tag{10}$$

(9)和(10)两式恒等，使右端相等，整理后即得(7)式

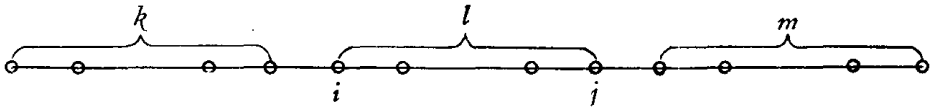
$$\bar{G}_{[i\to j]}\bar{G}_{[j\to i]} = \bar{G}_{[i]}\bar{G}_{[j]} - \bar{G}_{[i,j]}\bar{G},$$

推理 3 证毕.

设 A 为图形 G 对应的行列式，A_{ij} 和 $A_{ij,kl}$ 为行列式 A 的一级和二级代数余子式，则上式相应地表达为 $A_{ij}A_{ji} = A_{ii}A_{jj} - A_{ij,ij}A$，这是行列式内部存在的一类关系式，称做为 Jacobi 定理[2]. 也就是说，这里用图形理论的方法证明了 Jacobi 定理.

三、应 用 示 例

推理 1 表达出图形中一对连线的变动对相应的行列式的影响. 可以用来考虑分子图形的微小变动. 推理 2 与分子轨道有密切的联系. 推理 3 可用于简明地导出一些有意义的关系式. 例如函数 $g_n(x)$ 对应的图形为[3]



设如图所示，将其分为三段，每段的点数为 k, l 和 m, 对 i, j 两点应用推理 3，并注意此处

$$\bar{G}_{[i\to j]} = \bar{G}_{[j\to i]} = g_k(x)g_m(x),$$

就得到

$$g_k^2(x)g_m^2(x) = g_k(x)g_{m+l-1}(x)g_m(x)g_{k-l+1}(x) - g_k(x)g_m(x)g_{l-2}(x)g_{k+l+m}(x),$$

消去 $g_k(x)g_m(x)$ 得关系式

$$g_k(x)g_m(x) = g_{k+l-1}(x)g_{m+l-1}(x) - g_{l-2}(x)g_{k+l+m}(x), \tag{11}$$

或令 $s = l - 1$, 有

$$g_k(x)g_m(x) = g_{k+s}(x)g_{m+s}(x) - g_{s-1}(x)g_{k+m+s+1}(x), \tag{12}$$

若 $m = 0$, 即相当于 i 在右端点，有关系式

$$g_k(x) = g_s(x)g_{k+s}(x) - g_{s-1}(x)g_{k+s+1}(x), \tag{13}$$

或令 $k + s = t$, 上式成为

$$g_{t-s}(x) = g_s(x)g_t(x) - g_{s-1}(x)g_{t+1}(x), \quad t \geqslant s, \tag{14}$$

若 $t = s$, 上式变成

$$1 = g_t^2 - g_{t-1}(x)g_{t+1}(x), \tag{15}$$

对两个端点直接应用推理 3，设链中有 $t + 1$ 个点，可直接得到公式(15). 这些关于 g 函数的公式是常应用的.

致谢：唐敖庆教授对本文提出了宝贵意见，在此表示感谢.

参 考 文 献

[1] 唐敖庆、江元生，科学通报，22(1977)，11：494.
[2] 藤原松三郎著、萧君纾译，行列论，商务印书馆，1934，66.
[3] 唐敖庆、江元生，中国科学，1976，1：49.