旋转群与角动量

王逸飞

2021 年 5 月 16 日

1 三维转动

考虑保持坐标系 (基) 不变, 而转动矢量 $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)^T$ 的旋转变换

$$\begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = R \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \tag{1}$$

对于固连在矢量上的标架 (e_1', e_2', e_3'), 其变换为

$$\begin{bmatrix} e_1' & e_2' & e_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix}. \tag{2}$$

要保持旋转前后模长和标架的手性 $e_1 \cdot (e_2 \times e_3)$ 不变, 则要求 $R \in \mathrm{SO}(3)$.
为了一般而紧凑地表达所有的旋转矩阵, 先研究绕坐标轴旋转的情况. 考虑 Pauli 矩阵

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{3}$$

它们满足

$$\sigma_a \sigma_b = \delta_{ab} + \mathrm{i}\epsilon_{abc}\sigma_c, \quad \operatorname{tr} \sigma_a = 0. \tag{4}$$

由于指数矩阵

$$\exp(-\mathrm{i}\omega\sigma_2) = \begin{bmatrix} \cos\omega & -\sin\omega \\ \sin\omega & \cos\omega \end{bmatrix} \tag{5}$$

是一个二维旋转, 定义矩阵 $(T_a)_{bc} = -\mathrm{i}\epsilon_{abc}$, 即

$$T_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \quad T_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad T_3 = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{6}$$

我们就可以将绕坐标轴 e_a 旋转 ω 的矩阵表示为

$$R(e_a,\omega)=\exp\left(-\mathrm{i}\omega T_a\right). \tag{7}$$

最后考虑一般的旋转. 绕 $\hat{n}(\theta,\phi)=(n_1,n_2,n_3)$ 旋转 ω 可以分三步完成: 将 $\hat{n}$ 旋转与 e_3 重合, 绕 e_3 旋转 ω, 将 $\hat{n}$ 旋转回去, 其中 θ,ϕ 是球坐标下的角. 因此我们需要引入将 e_3 旋转到 (θ,ϕ) 方向的矩阵

$$S(\phi,\theta)=R(e_3,\phi)R(e_2,\theta)=\begin{bmatrix}\cos\phi\cos\theta & -\sin\phi & \cos\phi\sin\theta\\ \sin\phi\cos\theta & \cos\phi & \sin\phi\sin\theta\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{bmatrix}. \tag{8}$$

计算可知

$$S(\phi,\theta)T_3S^{-1}(\phi,\theta)=n_1T_1+n_2T_2+n_3T_3=\hat{n}\cdot\boldsymbol{T}. \tag{9}$$

于是绕 $\hat{n}(\theta,\phi)=(n_1,n_2,n_3)$ 旋转 ω 的矩阵可以写成

$$R(\hat{n},\omega)=S(\phi,\theta)R(e_3,\omega)S^{-1}(\theta,\phi)=\exp\left(-\mathrm{i}\omega\hat{n}\cdot\boldsymbol{T}\right)=\exp\left(-\mathrm{i}\vec{\omega}\cdot\boldsymbol{T}\right), \tag{10}$$

矢量 ω 定义为

$$\vec{\omega}=\omega\hat{n}=(\omega\sin\theta\cos\phi,\omega\sin\theta\sin\phi,\omega\cos\theta). \tag{11}$$

于是我们给出了三维实旋转矩阵的一般形式. 反过来, 给出旋转矩阵, 我们可以由迹 $\operatorname{tr}R(\hat{n},\omega)=1+2\cos\omega$ 得出旋转角, 通过本征值 1 对应的本征矢量得到旋转轴.

2 三维转动群的覆盖群

由李群的理论可知, 三维转动群的群空间为一个半径为 π 的球, 同一直径两端的两点代表同一个元素; SO(3) 是双连通的, 我们要研究它的覆盖群 SU(2).

SU(2) 矩阵有 3 个独立参量. 事实上, 它满足两对角元互为复共轭, 非对角元互为复共轭的相反数这一条件, 且满足列向量归一化条件. 我们可以用 ω 和 $\hat{n}(\theta,\phi)$ 来确定一个 SU(2) 矩阵,

$$u\left(\hat{n},\omega\right)=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\vec{\omega}\cdot\vec{\sigma}}{2}\right)=\cos(\omega/2)-\mathrm{i}\left(\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right)\sin(\omega/2). \tag{12}$$

其中 $\vec{\sigma}$ 是以三个 Pauli 矩阵为分量构成的矢量. 可以看出 u 满足

$$\begin{aligned}&u\left(\hat{n},\omega_1\right)u\left(\hat{n},\omega_2\right)=u\left(\hat{n},\omega_1+\omega_2\right),\\&u\left(\hat{n},4\pi\right)=1,\quad u\left(\hat{n},2\pi\right)=-1,\\&u\left(\hat{n},\omega\right)=u\left(-\hat{n},4\pi-\omega\right)=-u\left(-\hat{n},2\pi-\omega\right).\end{aligned} \tag{13}$$

因此 $\vec{\omega}=\omega\hat{n}$ 的变化范围是一个半径为 2π 的球, 球内的点和 SU(2) 群元一一对应, 球面对应 -1. SU(2) 是简单的单连通李群.

计算可知, SU(2) 群与 SO(3) 群有如下同态映射:

$$u(\hat{n},\omega)\sigma_bu^{-1}(\hat{n},\omega)=\sum_{a=1}^{3}\sigma_aR(\hat{n},\omega)_{ab}. \tag{14}$$

3 SU(2) 群的表示

我们先通过标量函数的变换构造 SU(2) 的表示, 再证明我们构造出了所有有限维不等价不可约表示. 如果有函数组 $\psi^j_\mu(x)$ 张成的不变函数空间, 使得标量函数变换算符作用于其上得到它的线性组合

$$P_R\psi^j_\mu(x) = \psi^j_\mu(R^{-1}x) = \sum_\nu \psi^j_\nu(x) D^j_{\nu\mu}(R), \quad \forall R \in G, \tag{15}$$

那么 D^j 为群 G 的一个表示. 对于 $u \in \mathrm{SU}(2)$, 记

$$\begin{bmatrix}\xi' \\ \eta'\end{bmatrix} = u \begin{bmatrix}\xi \\ \eta\end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix}\xi'' \\ \eta''\end{bmatrix} = u^{-1} \begin{bmatrix}\xi \\ \eta\end{bmatrix}. \tag{16}$$

那么 ξ, η 的 n 次齐次函数就是不变函数空间. 引入如下记号

$$\begin{aligned}
&\psi^j_\mu(\xi,\mu) = \frac{(-)^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}\xi^{j-\mu}\eta^{j+\mu}, \\
&j = n/2 = 0, 1/2, 1, 3/2, \cdots, \\
&\mu = j-m = j, j-1, \cdots, -j+1, -j.
\end{aligned} \tag{17}$$

下面由

$$\begin{aligned}
&\psi^j_\mu(\xi'',\eta'') = \sum_\nu \psi^j_\nu(\xi,\eta) D^j_{\nu\mu}(u), \\
&u^{-1} = \cos(\omega/2) + \mathrm{i}\,(\vec{\sigma}\cdot\hat{n})\sin(\omega/2) = \begin{bmatrix} \cos(\omega/2) + \mathrm{i}n_3\sin(\omega/2) & \sin(\omega/2)\,(n_2 + \mathrm{i}n_1) \\ \sin(\omega/2)\,(-n_2+\mathrm{i}n_1) & \cos(\omega/2) - \mathrm{i}n_3\sin(\omega/2). \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{18}$$

计算表示矩阵. 经过简单的计算可知

$$\begin{aligned}
&D^j_{\nu\mu}(e_3,\omega) = \delta_{\nu\mu}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\omega}, \\
&d^j_{\nu\mu} \equiv D^j_{\nu\mu}(e_2,\omega) = \sum_n \frac{(-)^n\sqrt{(j+\nu)!(j-\nu)!(j+\mu)!(j-\mu)!}}{n!(n-\nu+\mu)!(j+\nu-n)!(j-\mu-n)!}\cos^{2j+\nu-\mu-2n}\left(\frac{\omega}{2}\right)\sin^{2n-\nu+\mu}\left(\frac{\omega}{2}\right).
\end{aligned} \tag{19}$$

在第二行中, n 的求和取遍 $\max(0, \nu-\mu)$ 和 $\min(j+\nu, j-\mu)$ 之间的整数. 用欧拉角表示的一般元素的表示为

$$D^j_{\nu\mu}(\alpha,\beta,\gamma) = \left\{D^j(e_3,\alpha)D^j(e_2,\beta)D(e_3,\gamma)\right\}_{\nu\mu} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\nu\alpha}d^j_{\nu\mu}(\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\gamma}. \tag{20}$$

这样我们就构造出了 SU(2) 群的 $n = 2j$ 维表示. 考察转角为 ω 的共轭类的特征标

$$\chi^j(\omega) = \sum_{\mu=-j}^{j}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\omega} = \frac{\sin\left((j+1/2)\omega\right)}{\sin(\omega/2)}. \tag{21}$$

由李群的理论知, 将有限群的结论拓展到 SU(2) 群, 只要把求和替换成积分

$$\sum_{g\in G} \mapsto \int_0^{2\pi}\frac{\sin^2(\omega/2)}{4\pi^2\omega^2}\mathrm{d}\omega_1\mathrm{d}\omega_2\mathrm{d}\omega_3. \tag{22}$$

由于

$$\frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\omega \sin^2(\omega/2)\chi^i(\omega)\chi^j(\omega)^* = \delta_{ij}, \tag{23}$$

这些表示都是不等价不可约的; 上式中我们考虑到了一个共轭类的特征标是相同的, 对应群空间体积为 $4\pi\omega^2$. 又因为 $\sin((j+1/2)\omega)$ 构成 $[0,2\pi]$ 内的完备函数系, 所以不存在不等价于上述表示的不可约表示.

4 SU(2) 群表示的生成元和角动量算符

将 SU(2) 的表示矩阵按无穷小元展开并保留到一阶, 得到

$$\begin{aligned} D^j_{\nu\mu}(e_3,\omega) &= \delta_{\nu\mu}\left(1 - \mathrm{i}\mu\omega + O\left(\omega^2\right)\right), \\ d^j_{\nu\mu}(\omega) &= \delta_{\nu\mu} + \frac{\omega}{2}\left(\delta_{\nu,\mu-1}\Gamma^j_\mu - \delta_{\nu,\mu+1}\Gamma^j_\nu\right), \\ D^j_{\nu\mu}(e_1,\omega) &= \delta_{\nu\mu} + \frac{\omega}{2}\left(-\mathrm{i}\delta_{\nu,\mu-1}\Gamma^j_\mu - \mathrm{i}\delta_{\nu,\mu+1}\Gamma^j_\nu\right), \end{aligned} \tag{24}$$

其中

$$\Gamma^j_\nu = \Gamma^j_{-\nu+1} = \sqrt{(j+\nu)(j-\nu+1)}. \tag{25}$$

依定义, 我们得到这个表示的生成元为

$$\begin{aligned} \left(I^j_1\right)_{\nu\mu} &= \frac{1}{2}\left(\delta_{\nu,\mu+1}\Gamma^j_\nu + \delta_{\nu,\mu-1}\Gamma^j_{-\nu}\right), \\ \left(I^j_2\right)_{\nu\mu} &= -\frac{\mathrm{i}}{2}\left(\delta_{\nu,\mu+1}\Gamma^j_\nu - \delta_{\nu,\mu-1}\Gamma^j_{-\nu}\right), \\ \left(I^j_3\right)_{\nu\mu} &= \mu\delta_{\nu\mu}. \end{aligned} \tag{26}$$