

高等量子力学作业

Clark

1. (a) 我们把从一个位置矢量 $\mathbf{r} = (r_1, r_2, r_3)^T$ 映射到另外一个位置矢量 $\mathbf{r}' = (r'_1, r'_2, r'_3)^T$ 的变换记做 Q , 即 $\mathbf{r}' = Q\mathbf{r}$, 证明所有的 Q 变换构成一个群。
(b) 一个波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 在一个空间操作 Q 下遵循以下规则: $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = \psi(Q^{-1}\mathbf{r})$ 。由于所有波函数构成一个完整的 Hilbert 空间 (即完备性关系), 因此 $\psi(Q^{-1}\mathbf{r})$ 总是可以由 $\psi(\mathbf{r})$ 线性地表示出来:

$$\psi(Q^{-1}\mathbf{r}) = \hat{D}(Q)\psi(\mathbf{r}). \quad (1)$$

这里, $D(Q)$ 是算符 Q 在波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 下的表示算符。证明所有的表示算符 $D(Q)$ 也构成一个群。

解:

- (a) • 封闭性: 对于任意 $Q_1, Q_2 \in G$, 它们的复合变换 Q_2Q_1 也是可逆线性变换。因为对于任意 \mathbf{r} , 有

$$(Q_2Q_1)\mathbf{r} = Q_2(Q_1\mathbf{r}) = Q_2\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}', \quad (2)$$

其中 $\mathbf{r}_1 = Q_1\mathbf{r}$ 。由于 Q_1 和 Q_2 可逆, Q_2Q_1 也可逆, 且 $(Q_2Q_1)^{-1} = Q_1^{-1}Q_2^{-1}$ 。因此, $Q_2Q_1 \in G$, 封闭性成立。

- 结合律: 对于任意 $Q_1, Q_2, Q_3 \in G$, 变换的复合满足结合律:

$$(Q_1Q_2)Q_3 = Q_1(Q_2Q_3), \quad (3)$$

因为矩阵乘法 (或线性变换复合) 满足结合律。因此, 结合律成立。

- 单位元存在: 恒等变换 I 满足 $I\mathbf{r} = \mathbf{r}$ 对于所有 \mathbf{r} 。显然 $I \in G$, 且对于任意 $Q \in G$, 有

$$QI = IQ = Q. \quad (4)$$

因此, 单位元存在。

- 逆元存在: 对于每个 $Q \in G$, 由于 Q 可逆, 存在逆变换 Q^{-1} , 满足

$$QQ^{-1} = Q^{-1}Q = I, \quad (5)$$

且 Q^{-1} 也是可逆线性变换, 故 $Q^{-1} \in G$ 。因此, 逆元存在。

综上, G 构成一个群。

- (b) 设波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 在空间操作 Q 下变换为 $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(Q^{-1}\mathbf{r})$, 并定义表示算符 $\hat{D}(Q)$ 由下式给出:

$$\hat{D}(Q)\psi(\mathbf{r}) = \psi(Q^{-1}\mathbf{r}). \quad (6)$$

考虑所有这样的算符的集合 $\{\hat{D}(Q)|Q \in G\}$, 其中 G 是 (a) 中的变换群。我们需要证明该集合在算符乘法下构成群。

- 封闭性: 对于任意 $\hat{D}(Q_1)$ 和 $\hat{D}(Q_2)$, 它们的复合算符 $\hat{D}(Q_1)\hat{D}(Q_2)$ 满足: 对任意波函数 ψ ,

$$\begin{aligned}
 (\hat{D}(Q_1)\hat{D}(Q_2))\psi(\mathbf{r}) &= \hat{D}(Q_1)(\hat{D}(Q_2)\psi)(\mathbf{r}) \\
 &= \hat{D}(Q_2)\psi(Q_1^{-1}\mathbf{r}) \\
 &= \psi(Q_2^{-1}(Q_1^{-1}\mathbf{r})) \\
 &= \psi((Q_2^{-1}Q_1^{-1})\mathbf{r}) \\
 &= \psi((Q_1Q_2)^{-1}\mathbf{r}) \\
 &= \hat{D}(Q_1Q_2)\psi(\mathbf{r}).
 \end{aligned} \tag{7}$$

所以, $\hat{D}(Q_1)\hat{D}(Q_2) = \hat{D}(Q_1Q_2)$ 。由于 $Q_1Q_2 \in G$, 有 $\hat{D}(Q_1Q_2) \in \{\hat{D}(Q)\}$, 故封闭性成立。

- 结合律: 算符乘法满足结合律, 因为函数复合满足结合律。对于任意 $\hat{D}(Q_1), \hat{D}(Q_2), \hat{D}(Q_3)$, 有

$$(\hat{D}(Q_1)\hat{D}(Q_2))\hat{D}(Q_3) = \hat{D}(Q_1)(\hat{D}(Q_2)\hat{D}(Q_3)), \tag{8}$$

结合律成立。

- 单位元存在: 单位算符对应恒等变换 I , 即 $\hat{D}(I)$ 。对任意波函数 ψ ,

$$\hat{D}(I)\psi(\mathbf{r}) = \psi(I^{-1}\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}), \tag{9}$$

所以 $\hat{D}(I)$ 是单位算符。且对于任意 $\hat{D}(Q)$, 有

$$\hat{D}(Q)\hat{D}(I) = \hat{D}(QI) = \hat{D}(Q), \quad \hat{D}(I)\hat{D}(Q) = \hat{D}(IQ) = \hat{D}(Q), \tag{10}$$

故单位元存在。

- 逆元存在: 对于每个 $\hat{D}(Q)$, 其逆算符为 $\hat{D}(Q^{-1})$ 。因为

$$\begin{aligned}
 \hat{D}(Q)\hat{D}(Q^{-1}) &= \hat{D}(QQ^{-1}) = \hat{D}(I), \\
 \hat{D}(Q^{-1})\hat{D}(Q) &= \hat{D}(Q^{-1}Q) = \hat{D}(I),
 \end{aligned} \tag{11}$$

所以 $\hat{D}(Q^{-1})$ 是 $\hat{D}(Q)$ 的逆元, 且由于 $Q^{-1} \in G$, 有 $\hat{D}(Q^{-1}) \in \{\hat{D}(Q)\}$, 故逆元存在。

综上, 表示算符 $\hat{D}(Q)$ 的集合构成一个群。

2. (a) 对易关系 (commutation Relations)

列出位置算符 $\mathbf{R} = (X_1, X_2, X_3)^T$ 、动量算符 $\mathbf{P} = (P_1, P_2, P_3)^T$ 以及角动量算符 $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} = (L_1, L_2, L_3)^T$ 之间的所有对易关系。

(b) 空间平移 (spatial Translation) 操作下的变换

证明这些算符在空间平移算符 $D(\boldsymbol{\lambda}) = e^{-i\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{P}}$ 的作用下满足以下关系:

$$D(\boldsymbol{\lambda})\mathbf{R}D^{-1}(\boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{R} - \boldsymbol{\lambda}, \quad D(\boldsymbol{\lambda})\mathbf{P}D^{-1}(\boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{P}, \quad D(\boldsymbol{\lambda})\mathbf{L}D^{-1}(\boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{L} - \boldsymbol{\lambda} \times \mathbf{P}. \tag{12}$$

(c) 空间旋转 (rotation) 操作下的变换

证明这些算符在旋转算符 $D(\boldsymbol{\varphi}) = e^{-i\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L}}$ 的作用下满足以下关系:

$$D(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{R}D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = Q(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{R}, \quad D(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{P}D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = Q(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{P}, \quad D(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{L}D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = Q(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{L}, \tag{13}$$

其中 $\boldsymbol{\varphi} \equiv \varphi \hat{\mathbf{n}} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)^T$ 表示绕方向 $\hat{\mathbf{n}}$ 旋转角度 $\varphi = \sqrt{\varphi_1^2 + \varphi_2^2 + \varphi_3^2}$, $Q(\boldsymbol{\varphi}) = e^{-i\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{T}}$, $\mathbf{T} = (T_1, T_2, T_3)^T$,

$$T_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

解:

- (a) 位置算符 $\mathbf{R} = (X_1, X_2, X_3)^T$ 、动量算符 $\mathbf{P} = (P_1, P_2, P_3)^T$ 以及角动量算符 $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} = (L_1, L_2, L_3)^T$ 之间的基本对易关系为:

$$[X_i, X_j] = 0, \quad [P_i, P_j] = 0, \quad [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (15)$$

其中 $i, j = 1, 2, 3$, δ_{ij} 是 Kronecker-delta 符号。角动量算符的分量定义为:

$$L_i = \epsilon_{ijk} X_j P_k, \quad (16)$$

其中 ϵ_{ijk} 是 Levi-Civita 符号, 采用 Einstein 求和约定。角动量算符之间的对易关系为:

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} L_k. \quad (17)$$

位置算符与角动量算符的对易关系为:

$$[L_i, X_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} X_k. \quad (18)$$

动量算符与角动量算符的对易关系为:

$$[L_i, P_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} P_k. \quad (19)$$

位置算符与角动量平方算符的对易关系为:

$$[L^2, X_i] = 2i\hbar\epsilon_{ijk} L_j X_k + \hbar^2 X_i. \quad (20)$$

动量算符与角动量平方算符的对易关系为:

$$[L^2, P_i] = 2i\hbar\epsilon_{ijk} L_j P_k + \hbar^2 P_i. \quad (21)$$

- (b) 空间平移算符定义为 $D(\boldsymbol{\lambda}) = e^{-i\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{P}}$, 其中 $\boldsymbol{\lambda}$ 是平移矢量。我们需要证明以下关系:

$$\begin{aligned} D(\boldsymbol{\lambda})\mathbf{R}D^{-1}(\boldsymbol{\lambda}) &= \mathbf{R} - \boldsymbol{\lambda}, \\ D(\boldsymbol{\lambda})\mathbf{P}D^{-1}(\boldsymbol{\lambda}) &= \mathbf{P}, \\ D(\boldsymbol{\lambda})\mathbf{L}D^{-1}(\boldsymbol{\lambda}) &= \mathbf{L} - \boldsymbol{\lambda} \times \mathbf{P}. \end{aligned} \quad (22)$$

证明使用 Baker-Campbell-Hausdorff 公式: 对于算符 A 和 B , 有

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (23)$$

令 $A = -i\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{P}$, 则:

i. 对于位置算符 \mathbf{R} :

$$\begin{aligned} D(\lambda)X_iD^{-1}(\lambda) &= X_i + [-i\lambda_j P_j, X_i] + \frac{1}{2!}[-i\lambda_j P_j, [-i\lambda_k P_k, X_i]] + \dots \\ &= X_i - i\lambda_j [P_j, X_i] - \frac{1}{2!}i^2\lambda_j\lambda_k [P_j, [P_k, X_i]] + \dots \end{aligned} \quad (24)$$

由于 $[P_j, X_i] = -i\hbar\delta_{ji}$, 且高阶对易子为零 (因为 $[P_k, X_i]$ 是常数), 所以

$$D(\lambda)X_iD^{-1}(\lambda) = X_i - i\lambda_j(-i\hbar\delta_{ji}) = X_i - \lambda_i. \quad (25)$$

因此, $D(\lambda)\mathbf{R}D^{-1}(\lambda) = \mathbf{R} - \boldsymbol{\lambda}$ 。

ii. 对于动量算符 \mathbf{P} : 由于 $[P_j, P_i] = 0$, 所以

$$D(\lambda)P_iD^{-1}(\lambda) = P_i. \quad (26)$$

因此, $D(\lambda)\mathbf{P}D^{-1}(\lambda) = \mathbf{P}$ 。

iii. 对于角动量算符 \mathbf{L} : 角动量算符 $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$, 所以

$$\begin{aligned} D(\lambda)L_iD^{-1}(\lambda) &= \epsilon_{ijk}D(\lambda)X_jD^{-1}(\lambda)D(\lambda)P_kD^{-1}(\lambda) \\ &= \epsilon_{ijk}(X_j - \lambda_j)P_k. \end{aligned} \quad (27)$$

而 $\mathbf{L} - \boldsymbol{\lambda} \times \mathbf{P} = \epsilon_{ijk}X_jP_k - \epsilon_{ijk}\lambda_jP_k = \epsilon_{ijk}(X_j - \lambda_j)P_k$ 。因此, $D(\lambda)\mathbf{L}D^{-1}(\lambda) = \mathbf{L} - \boldsymbol{\lambda} \times \mathbf{P}$ 。

(c) 旋转算符定义为 $D(\boldsymbol{\varphi}) = e^{-i\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L}}$, 其中 $\boldsymbol{\varphi} = \varphi\hat{\mathbf{n}} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)^T$ 表示绕方向 $\hat{\mathbf{n}}$ 旋转角度 $\varphi = \sqrt{\varphi_1^2 + \varphi_2^2 + \varphi_3^2}$ 。我们需要证明以下关系:

$$\begin{aligned} D(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{R}D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) &= Q(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{R}, \\ D(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{P}D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) &= Q(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{P}, \\ D(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{L}D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) &= Q(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{L}, \end{aligned} \quad (28)$$

其中 $Q(\boldsymbol{\varphi}) = e^{-i\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{T}}$, $\mathbf{T} = (T_1, T_2, T_3)^T$,

$$T_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (29)$$

证明思路与平移变换类似, 使用 Baker-Campbell-Hausdorff 公式。

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (30)$$

令 $A = -i\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{L}$, 然后分别计算 $B = X_i$, P_i , L_i 的情况。

i. 位置算符 \mathbf{R} 的变换: 首先计算 $[L_j, X_i]$:

$$[L_j, X_i] = i\hbar\epsilon_{jik}X_k = -i\hbar\epsilon_{ijk}X_k. \quad (31)$$

因此,

$$[-i\varphi_j L_j, X_i] = -i\varphi_j(-i\hbar\epsilon_{ijk}X_k) = -\hbar\varphi_j\epsilon_{ijk}X_k. \quad (32)$$

二阶对易子:

$$\begin{aligned}
 [-i\varphi_k L_k, [-i\varphi_j L_j, X_i]] &= [-i\varphi_k L_k, -\hbar\varphi_j \epsilon_{ijl} X_l] \\
 &= -\hbar\varphi_j \epsilon_{ijl} [-i\varphi_k L_k, X_l] \\
 &= -\hbar\varphi_j \epsilon_{ijl} (-i\varphi_k) (-i\hbar \epsilon_{klm} X_m) \\
 &= -\hbar^2 \varphi_j \varphi_k \epsilon_{ijl} \epsilon_{klm} X_m.
 \end{aligned} \tag{33}$$

利用恒等式 $\epsilon_{ijl} \epsilon_{kml} = \delta_{ik} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jk}$, 可得:

$$[-i\varphi_k L_k, [-i\varphi_j L_j, X_i]] = -\hbar^2 (\varphi_j \varphi_k X_i - \varphi_j \varphi_i X_j) = -\hbar^2 (\varphi^2 X_i - (\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{X}) \varphi_i). \tag{34}$$

类似地, 可以计算更高阶对易子。整个级数可以识别为旋转矩阵的指数展开:

$$D(\boldsymbol{\varphi}) X_i D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = (e^{-i\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{T}})_{ij} X_j = Q(\boldsymbol{\varphi})_{ij} X_j. \tag{35}$$

因此, $D(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{R} D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = Q(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{R}$ 。

ii. 动量算符 \mathbf{P} 的变换: 动量算符与角动量算符的对易关系为:

$$[L_j, P_i] = i\hbar \epsilon_{jik} P_k = -i\hbar \epsilon_{ijk} P_k. \tag{36}$$

这与位置算符的对易关系形式完全相同。因此, 完全类似的推导可得:

$$D(\boldsymbol{\varphi}) P_i D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = (e^{-i\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{T}})_{ij} P_j = Q(\boldsymbol{\varphi})_{ij} P_j. \tag{37}$$

因此, $D(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{P} D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = Q(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{P}$ 。

iii. 角动量算符 \mathbf{L} 的变换: 角动量算符之间的对易关系为:

$$[L_j, L_i] = i\hbar \epsilon_{jik} L_k = -i\hbar \epsilon_{ijk} L_k. \tag{38}$$

这与位置和动量算符的对易关系形式相同。因此, 类似的推导可得:

$$D(\boldsymbol{\varphi}) L_i D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = (e^{-i\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{T}})_{ij} L_j = Q(\boldsymbol{\varphi})_{ij} L_j. \tag{39}$$

因此, $D(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{L} D^{-1}(\boldsymbol{\varphi}) = Q(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{L}$ 。

• 矩阵 T_i 的性质验证: 矩阵 T_i 满足角动量代数:

$$[T_i, T_j] = i\epsilon_{ijk} T_k. \tag{40}$$

例如, 验证 $[T_1, T_2]$:

$$\begin{aligned}
 T_1 T_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ i^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 T_2 T_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{41}$$

所以,

$$[T_1, T_2] = T_1 T_2 - T_2 T_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = i T_3. \quad (42)$$

类似可验证其他对易关系。因此, T_i 确实是角动量算符在向量空间中的表示。

综上所述, 我们严格证明了在旋转操作下, 位置算符、动量算符和角动量算符的变换规律:

$$D(\varphi) \mathbf{R} D^{-1}(\varphi) = Q(\varphi) \mathbf{R}, \quad D(\varphi) \mathbf{P} D^{-1}(\varphi) = Q(\varphi) \mathbf{P}, \quad D(\varphi) \mathbf{L} D^{-1}(\varphi) = Q(\varphi) \mathbf{L}, \quad (43)$$

其中 $Q(\varphi) = e^{-i\varphi \cdot \mathbf{T}}$ 是三维旋转矩阵的指数表示。

3. 关于离散群的基本问题。二面体群 D_N 是正 n 边形的对称群, 包括旋转和反射。以 D_4 为例:

- (a) 列出所有元素和元素之间满足的乘法表 (multiplication table);
- (b) 找到 D_4 的所有不可约表示, 并写出特征标表 (character table);
- (c) 列出生成元在每个不可约表示下的表示矩阵。

解:

- (a) 二面体群 D_4 是正四边形的对称群, 阶为 8。其元素包括恒等变换、旋转和反射。令 r 表示绕中心逆时针旋转 90° , 即 r 满足 $r^4 = e$, 其中 e 是单位元。令 s 表示关于一条主轴的反射 (例如关于 x 轴的反射), 满足 $s^2 = e$ 。群 D_4 的所有元素为:

$$D_4 = \{e, r, r^2, r^3, s, sr, sr^2, sr^3\}. \quad (44)$$

这些元素满足以下关系:

$$r^4 = e, \quad s^2 = e, \quad sr = r^3 s. \quad (45)$$

从 $sr = r^3 s$ 可推导出一般关系: 对任意整数 k , 有 $sr^k = r^{-k} s$ 。 D_4 的完整乘法表如下:

表 1: D_4 群的乘法表

.	e	r	r^2	r^3	s	sr	sr^2	sr^3
e	e	r	r^2	r^3	s	sr	sr^2	sr^3
r	r	r^2	r^3	e	sr^3	s	sr	sr^2
r^2	r^2	r^3	e	r	sr^2	sr^3	s	sr
r^3	r^3	e	r	r^2	sr	sr^2	sr^3	s
s	s	sr	sr^2	sr^3	e	r	r^2	r^3
sr	sr	sr^2	sr^3	s	r^3	e	r	r^2
sr^2	sr^2	sr^3	s	sr	r^2	r^3	e	r
sr^3	sr^3	s	sr	sr^2	r	r^2	r^3	e

乘法表的计算基于群关系:

- 旋转之间: $r^i \cdot r^j = r^{i+j} \pmod{4}$
- 反射与旋转: $s \cdot r^i = r^{-i}s = r^{4-i}s$ (因为 $r^4 = e$)
- 反射之间: $s \cdot s = e$, $(sr^i) \cdot (sr^j) = r^{j-i}$

(b) 群 D_4 的阶为 8, 其共轭类有 5 个:

$$\{e\}, \quad \{r, r^3\}, \quad \{r^2\}, \quad \{s, sr^2\}, \quad \{sr, sr^3\}. \quad (46)$$

不可约表示的维数满足 $d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 + d_4^2 + d_5^2 = 8$, 解为 4 个一维表示和 1 个二维表示。 D_4 的特征标表如下:

表 2: D_4 群的特征标表

.	$\{e\}$	$\{r, r^3\}$	$\{r^2\}$	$\{s, sr^2\}$	$\{sr, sr^3\}$
χ_1	1	1	1	1	1
χ_2	1	1	1	-1	-1
χ_3	1	-1	1	1	1
χ_4	1	-1	1	-1	1
χ_5	2	0	-2	0	0

表中:

- χ_1 是平凡表示 (所有元素映射到 1);
- χ_2 是符号表示, 其中反射元素特征标为 -1;
- χ_3 是另一符号表示, 其中 r 和 r^3 特征标为 -1;
- χ_4 是混合符号表示;
- χ_5 是二维不可约表示 (几何表示)。

(c) 取生成元为 r 和 s 。它们在每个不可约表示下的表示矩阵如下:

- 平凡表示 χ_1 (一维):

$$D_1(r) = (1), \quad D_1(s) = (1). \quad (47)$$

- 表示 χ_2 (一维):

$$D_2(r) = (1), \quad D_2(s) = (-1). \quad (48)$$

- 表示 χ_3 (一维):

$$D_3(r) = (-1), \quad D_3(s) = (1). \quad (49)$$

- 表示 χ_4 (一维):

$$D_4(r) = (-1), \quad D_4(s) = (-1). \quad (50)$$

- 二维表示 χ_5 : 采用几何表示, 其中 r 对应旋转 90° 矩阵, s 对应反射矩阵。

$$D_5(r) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D_5(s) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (51)$$

简单验证，发现这些矩阵满足群关系： $D^4(r) = I$, $D^2(s) = I$, $D(s)D(r) = D^3(r)D(s)$ ，其中 I 是单位矩阵。

4. 一个 $N \times N$ ($N = 2, 3, \dots$) 的实正交矩阵 O 满足 $O^T O = O O^T = 1_{N \times N}$ 且 $\det O = 1$ 。所有满足这些条件的 O 构成一个群 $SO(N)$ 。一个 $N \times N$ 的复幺正矩阵 U 满足 $U^\dagger U = U U^\dagger = 1_{N \times N}$ ，所有 U 构成一个群 $SU(N)$ 。

- (a) 一个矩阵 O 中包含多少个自由参数？ U 矩阵中包含多少个自由参数？
- (b) 计算 Lie 群 $SO(N)$ 和 $SU(N)$ 独立生成元的数量。
- (c) 证明 $SU(2)$ 与 $SO(3)$ 局域同构 (local isomorphism)。

解：

- (a) i. 实正交矩阵 O 满足 $O^T O = I$ 和 $\det O = 1$ 。矩阵 O 有 N^2 个实参数，但正交条件 $O^T O = I$ 施加约束。 $O^T O = I$ 是一个对称矩阵方程，给出 $\frac{N(N+1)}{2}$ 个独立约束（因为对称矩阵有 $\frac{N(N+1)}{2}$ 个独立元素）。因此，自由参数个数为：

$$N^2 - \frac{N(N+1)}{2} = \frac{N(N-1)}{2}. \quad (52)$$

此外， $\det O = 1$ 不减少自由参数个数，因为它只是从 $O(N)$ 中选取连通单位元的分支 ($SO(N)$ 是 $O(N)$ 的单位分支)，而参数化已隐含在连续群中。故 $SO(N)$ 的自由参数个数为 $\frac{N(N-1)}{2}$ 。

- ii. 复幺正矩阵 U 满足 $U^\dagger U = I$ 和 $\det U = 1$ 。矩阵 U 有 N^2 个复参数（即 $2N^2$ 个实参数），但幺正条件 $U^\dagger U = I$ 施加约束。 $U^\dagger U = I$ 是一个厄米矩阵方程，给出 N^2 个实约束（因为厄米矩阵有 N^2 个实参数： N 个对角元为实数， $\frac{N(N-1)}{2}$ 个非对角元为复数，相当于 $N + 2 \times \frac{N(N-1)}{2} = N^2$ 个实参数）。因此，自由参数个数为：

$$2N^2 - N^2 = N^2 \quad (\text{实参数}). \quad (53)$$

再考虑 $\det U = 1$ ，这是一个复条件，但相当于一个实约束（因为 $\det U$ 是复数，但模为 1，故约束相位，相当于一个实参数）。因此，自由参数个数减少为 $N^2 - 1$ 。故 $SU(N)$ 的自由参数个数为 $N^2 - 1$ 。

- (b) i. Lie 群的独立生成元数量等于其 Lie 代数的维度，即自由参数个数。对于 $SO(N)$ ，Lie 代数为 $\mathfrak{so}(N)$ ，由所有实反对称矩阵组成（满足 $A^T = -A$ ）。反对称矩阵有 $\frac{N(N-1)}{2}$ 个自由参数，故独立生成元数量为 $\frac{N(N-1)}{2}$ 。
- ii. 对于 $SU(N)$ ，Lie 代数为 $\mathfrak{su}(N)$ ，由所有无迹厄米矩阵组成（满足 $A^\dagger = A$ 且 $\text{tr} A = 0$ ）。厄米矩阵有 N^2 个实参数，无迹条件减少一个参数，故独立生成元数量为 $N^2 - 1$ 。

因此：

$$SO(N) \text{ 独立生成元数量} = \frac{N(N-1)}{2}, \quad SU(N) \text{ 独立生成元数量} = N^2 - 1. \quad (54)$$

- (c) 要证明 $SU(2)$ 与 $SO(3)$ 局域同构, 即证明它们的 Lie 代数同构, 且存在一个局部双射同态。
 $SU(2)$ 的 Lie 代数为 $\mathfrak{su}(2)$, 由所有 2×2 无迹厄米矩阵组成。其一组基为 Pauli 矩阵乘以 i :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (55)$$

则 $\mathfrak{su}(2)$ 的基为 $T_a = \frac{\sigma_a}{2}$ ($a = 1, 2, 3$), 满足对易关系:

$$[T_a, T_b] = i\epsilon_{abc} T_c. \quad (56)$$

$SO(3)$ 的 Lie 代数为 $\mathfrak{so}(3)$, 由所有 3×3 实反对称矩阵组成。其一组基为:

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (57)$$

满足对易关系:

$$[L_a, L_b] = \epsilon_{abc} L_c. \quad (58)$$

比较对易关系, 可见 $\mathfrak{su}(2)$ 和 $\mathfrak{so}(3)$ 有相同的结构常数 (差一个因子 i)。具体地, 定义映射 $\phi: \mathfrak{su}(2) \rightarrow \mathfrak{so}(3)$ 为:

$$\phi(T_a) = L_a, \quad a = 1, 2, 3. \quad (59)$$

则对易关系保持:

$$[\phi(T_a), \phi(T_b)] = [L_a, L_b] = \epsilon_{abc} L_c = \phi([T_a, T_b]), \quad (60)$$

因为 $[T_a, T_b] = i\epsilon_{abc} T_c$, 而 $\phi(iT_c) = iL_c$, 但注意 ϕ 是实线性映射, 而 Lie 代数同构需考虑复数扩展。实际上, $\mathfrak{su}(2)$ 和 $\mathfrak{so}(3)$ 是实 Lie 代数, 且它们的复化同构。直接验证对易关系表明 ϕ 是 Lie 代数同构。因此, $\mathfrak{su}(2) \cong \mathfrak{so}(3)$ 。由 Lie 群理论, Lie 代数同构意味着 Lie 群局域同构。具体地, 存在一个同态 $\Phi: SU(2) \rightarrow SO(3)$, 其核为 $\{\pm I\}$, 故 $SU(2)$ 是 $SO(3)$ 的双重覆盖, 因此局域同构。

为构造 Φ , 考虑 $SU(2)$ 在 \mathbb{R}^3 上的伴随表示。对于 $U \in SU(2)$, 定义作用在向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ 上, 对应矩阵 $X = x_1\sigma_1 + x_2\sigma_2 + x_3\sigma_3$ 。则变换:

$$X \rightarrow UXU^\dagger, \quad (61)$$

保持 X 的厄米性和无迹, 故对应 \mathbb{R}^3 上的线性变换。由于 $\det X = -(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$, 该变换保持范数, 故对应正交变换。且 $\det U = 1$ 保证变换属于 $SO(3)$ 。因此, 映射 $\Phi(U)$ 定义为该变换, 是群同态, 且局部是微分同胚。

综上, $SU(2)$ 与 $SO(3)$ 局域同构。

5. 樱井 (Sakurai) 教材中的问题 4.7。

- (a) $\psi(\mathbf{r}, t)$ 是一个无自旋粒子对应的三维平面波波函数。证明 $\psi^*(\mathbf{r}, -t)$ 是动量方向反转的平面波波函数。
- (b) 设 $\chi(\hat{\mathbf{n}})$ 是 $\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 算符的本征值为 $+1$ 的二分量本征旋量。利用 $\chi(\hat{\mathbf{n}})$ 的显式形式 (用描述 $\hat{\mathbf{n}}$ 的极角 β 和方位角 γ 表示), 验证 $-i\hat{\sigma}_2\chi^*(\hat{\mathbf{n}})$ 是自旋方向反转的二分量本征旋量。

解：

(a) 无自旋粒子的三维平面波波函数为：

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (62)$$

其中 \mathbf{k} 是波矢量， $\omega = \frac{E}{\hbar}$ 是角频率， E 是能量。计算 $\psi^*(\mathbf{r}, -t)$ ：

$$\psi^*(\mathbf{r}, -t) = [e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega(-t))}]^* = e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t)} = e^{i(-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}. \quad (63)$$

令 $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ ，则：

$$\psi^*(\mathbf{r}, -t) = e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (64)$$

其中 $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ 对应动量方向反转（因为动量 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ ，所以 $\mathbf{p}' = -\mathbf{p}$ ）。因此， $\psi^*(\mathbf{r}, -t)$ 是动量方向反转的平面波波函数。

(b) 自旋算符 $\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 的本征值为 +1 的二分量本征旋量为：

$$\chi(\hat{\mathbf{n}}) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} \\ e^{i\gamma} \sin \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}, \quad (65)$$

其中 β 是极角， γ 是方位角，方向 $\hat{\mathbf{n}} = (\sin \beta \cos \gamma, \sin \beta \sin \gamma, \cos \beta)$ 。首先计算 $\chi^*(\hat{\mathbf{n}})$ ：

$$\chi^*(\hat{\mathbf{n}}) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} \\ e^{-i\gamma} \sin \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (66)$$

Pauli 矩阵 $\hat{\sigma}_2$ 为：

$$\hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (67)$$

计算 $-i\hat{\sigma}_2\chi^*(\hat{\mathbf{n}})$ ：

$$\begin{aligned} -i\hat{\sigma}_2\chi^*(\hat{\mathbf{n}}) &= -i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} \\ e^{-i\gamma} \sin \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \\ &= -i \begin{pmatrix} -ie^{-i\gamma} \sin \frac{\beta}{2} \\ i \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -e^{-i\gamma} \sin \frac{\beta}{2} \\ \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (68)$$

现在验证这是自旋方向反转（即 $\hat{\mathbf{n}} \rightarrow -\hat{\mathbf{n}}$ ）的本征旋量。方向反转对应极角 $\beta \rightarrow \pi - \beta$ ，方位角 $\gamma \rightarrow \gamma + \pi$ 。自旋方向反转后的本征旋量应为：

$$\chi(-\hat{\mathbf{n}}) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\pi - \beta}{2} \\ e^{i(\gamma + \pi)} \sin \frac{\pi - \beta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \frac{\beta}{2} \\ -e^{i\gamma} \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (69)$$

但我们需要验证 $-i\hat{\sigma}_2\chi^*(\hat{\mathbf{n}})$ 是 $\hat{\sigma} \cdot (-\hat{\mathbf{n}})$ 的本征值为 +1 的本征旋量，即满足：

$$(\hat{\sigma} \cdot (-\hat{\mathbf{n}}))(-i\hat{\sigma}_2\chi^*(\hat{\mathbf{n}})) = -i\hat{\sigma}_2\chi^*(\hat{\mathbf{n}}). \quad (70)$$

利用 Pauli 矩阵的性质: $\hat{\sigma}_2 \hat{\sigma} \hat{\sigma}_2 = -\hat{\sigma}^*$, 以及 $\hat{\sigma}_2^2 = I$, 我们有:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma} \cdot (-\hat{n}) (-i\hat{\sigma}_2 \chi^*) &= i\hat{\sigma}_2 (\hat{\sigma} \cdot \hat{n})^* \chi^* \\ &= i\hat{\sigma}_2 ((\hat{\sigma} \cdot \hat{n}) \chi)^* \\ &= i\hat{\sigma}_2 \chi^* \quad (\text{因为 } (\hat{\sigma} \cdot \hat{n}) \chi = \chi) \\ &= -i\hat{\sigma}_2 \chi^*.\end{aligned}\tag{71}$$

因此, $-i\hat{\sigma}_2 \chi^*(\hat{n})$ 确实是 $\hat{\sigma} \cdot (-\hat{n})$ 的本征值为 +1 的本征旋量, 即自旋方向反转的二分量本征旋量。

6. 正四面体群 T 同构于交错群 A_4 , 后者是四个客体的置换群 S_4 的正规子群。 T 的生成元满足 $s^2 = t^3 = (st)^3 = 1$ 。

- (a) 给定下表所示的在所有不可约表示 (irreducible representation) 中 s 、 t 的表示矩阵, 检查这些不可约表示是实表示 (real)、赝实表示 (pseudo-real) 还是复表示 (complex)。

表 3: A_4 生成元在每个不可约表示中的表示矩阵, 其中 $\omega = e^{i2\pi/3}$ 。

	s	t
D_1	1	1
$D_{1'}$	1	ω
$D_{1''}$	1	ω^2
D_3	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

- (b) 现在改变 3 维不可约表示的基底, 使得 s 和 t 的表示矩阵写为:

$$D'_3(s) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}, \quad D'_3(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \omega^2 & 0 \\ 0 & 0 & \omega \end{pmatrix}.\tag{72}$$

检查 D'_3 是实表示、赝实表示还是复表示。

解:

- (a) 群 A_4 的阶为 12, 有 4 个不可约表示: 三个一维表示 D_1 、 $D_{1'}$ 、 $D_{1''}$ 和一个三维表示 D_3 。表示类型的判断可通过 Frobenius-Schur 指标 (简称 FS 指标) 进行。FS 指标定义为:

$$\frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi(g^2),\tag{73}$$

其中 χ 是表示的特征标。FS 指标取值为 1、-1 或 0, 分别对应实表示、赝实表示和复表示。首先, 计算每个表示的特征标。对于一维表示, 特征标就是表示矩阵本身 (标量)。对于三维表示, 特征标是矩阵的迹。

- **一维表示:** 一维表示的特征标是复数, 但可直接判断:

- D_1 : $\chi(s) = 1, \chi(t) = 1$ 。特征标均为实数，且 FS 指标计算中， g^2 的特征标与 g 相同（因为一维），所以 $\chi(g^2) = \chi(g)$ 。则 FS 指标为 $\frac{1}{12} \sum_g \chi(g)$ 。但一维表示的 FS 指标可直接判断：由于特征标全为实数，表示是实表示。
- $D_{1'}$: $\chi(s) = 1, \chi(t) = \omega$, 其中 $\omega = e^{i\frac{2\pi}{3}}$ 是复数。但注意 ω 不是实数，所以特征标不是实数，表示可能是复表示。计算 FS 指标：由于特征标不是实数，FS 指标应为 0，表示复表示。
- $D_{1''}$: $\chi(s) = 1, \chi(t) = \omega^2$, 类似地，特征标不是实数，是复表示。

严格计算 FS 指标对于一维表示：对于 $D_{1'}$ ，特征标 χ 满足 $\chi(t) = \omega, \chi(t^2) = \chi^2(t) = \omega^2$ ，但 t 和 t^2 属于不同共轭类。 A_4 有 4 个共轭类：单位元 e (1 个元素)、二阶元素 s 类 (3 个元素)、三阶元素 t 类 (4 个元素)、三阶元素 t^2 类 (4 个元素)。计算 $\sum_g \chi(g^2)$:

- $g = e: g^2 = e, \chi(e) = 1$ 。
- $g = s: g^2 = e, \chi(e) = 1$, 有 3 个 s 类元素，贡献 $3 \times 1 = 3$ 。
- $g = t: g^2 = t^2, \chi(t^2) = \omega^2$, 有 4 个 t 类元素，贡献 $4 \times \omega^2$ 。
- $g = t^2: g^2 = t, \chi(t) = \omega$, 有 4 个 t^2 类元素，贡献 $4 \times \omega$ 。

总和： $\sum_g \chi(g^2) = 1 + 3 + 4\omega^2 + 4\omega = 4 + 4(\omega^2 + \omega) = 4 + 4(-1) = 0$ 。FS 指标为 $\frac{0}{12} = 0$ ，故 $D_{1'}$ 是复表示。同理 $D_{1''}$ 也是复表示。对于 D_1 ， $\chi(g) = 1$ 对所有 g ，所以 $\sum_g \chi(g^2) = 12$ ，FS 指标为 1，是实表示。

- 三维表示 D_3 : 计算特征标:

- 单位元 $e: \chi(e) = 3$ 。
- s 类元素：矩阵 $D_3(s)$ 的对角元素为 $1, -1, -1$ ，迹为 -1 ，所以 $\chi(s) = -1$ 。
- t 类元素：矩阵 $D_3(t)$ 是置换矩阵，迹为 0，所以 $\chi(t) = 0$ 。
- t^2 类元素：矩阵 $D_3(t^2)$ 是置换矩阵，迹为 0，所以 $\chi(t^2) = 0$ 。

现在计算 FS 指标 $\frac{1}{12} \sum_g \chi(g^2)$ 。对于每个共轭类：

- $g = e: g^2 = e, \chi(e) = 3$, 1 个元素，贡献 3。
- $g = s: g^2 = e, \chi(e) = 3$, 3 个元素，贡献 $3 \times 3 = 9$ 。
- $g = t: g^2 = t^2, \chi(t^2) = 0$, 4 个元素，贡献 0。
- $g = t^2: g^2 = t, \chi(t) = 0$, 4 个元素，贡献 0。

总和： $\sum_g \chi(g^2) = 3 + 9 + 0 + 0 = 12$ 。FS 指标为 $\frac{12}{12} = 1$ 。因此， D_3 是实表示。

综上：

- D_1 : 实表示。
- $D_{1'}$: 复表示。
- $D_{1''}$: 复表示。
- D_3 : 实表示。

(b) D'_3 是 D_3 的等价表示，因为它们通过基底变换相联系。等价表示具有相同的特征标，因此 FS 指标相同。由 (a) 知 D_3 的 FS 指标为 1，故 D'_3 也是实表示。为验证，可直接计算 D'_3 的特征标：

- 单位元 e : $D'_3(e)$ 是单位矩阵, 迹为 3。
- s : $D'_3(s)$ 的矩阵是对称矩阵, 对角元素为 $-\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}$ 。其矩阵是如下形式:

$$D'_3(s) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}, \quad (74)$$

迹为 $\frac{1}{3}(-1 - 1 - 1) = -1$, 所以 $\chi(s) = -1$ 。

- t : $D'_3(t)$ 是对角矩阵, 对角元为 $1, \omega^2, \omega$ 。其矩阵形式是如下形式:

$$D'_3(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \omega^2 & 0 \\ 0 & 0 & \omega \end{pmatrix}, \quad (75)$$

迹为 $1 + \omega^2 + \omega = 1 + (-1) = 0$, 所以 $\chi(t) = 0$ 。

- t^2 : $D'_3(t^2)$ 是 $D'^2_3(t)$, 对角元为 $1, \omega, \omega^2$, 迹为 $1 + \omega + \omega^2 = 0$, 所以 $\chi(t^2) = 0$ 。

特征标与 D_3 相同, 因此 FS 指标为 1, 是实表示。尽管 $D'_3(t)$ 包含复数, 但表示是实表示, 意味着存在一个实向量空间基底, 使得所有表示矩阵是实矩阵。事实上, D'_3 可通过相似变换变为实表示。具体地, D'_3 等价于 D_3 , 而 D_3 的矩阵是实矩阵 (给定表中 $D_3(s)$ 和 $D_3(t)$ 都是实矩阵), 所以 D'_3 是实表示。因此, D'_3 是实表示。