第五章　角动量理论

§22 角动量和转动群

§22-1 本章概述

轨道角动量的两个引入途径：

同经典角动量类比：　$\mathbf{r}\times\mathbf{p}\rightarrow\hat{\mathbf{L}}=\hat{\mathbf{X}}\times\hat{\mathbf{P}}$

空间转动对称性：　$\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}\times\nabla\rightarrow\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}$

自旋角动量：没有经典类比，与轨道角动量有相同的对易关系，且　$S_z=\pm\hbar/2$

§22-2 空间转动

一、有限转动

1. 基矢的转动关系

位形空间的无限小转动

$$\mathbf{r}' = Q(\mathbf{n}d\varphi)\mathbf{r} = \mathbf{r} + d\varphi\mathbf{n}\times\mathbf{r}$$

转动变换定义为将位置矢量r和s变为 $\mathbf{r}' = Q\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{s}' = Q\mathbf{s}$ 并对任意r和s，满足 $Q\mathbf{r}\cdot Q\mathbf{s} = \mathbf{r}\cdot\mathbf{s}$ 的变换。

因此Q 是一个实的幺正矩阵

$$Q^{+} = Q^{-} \quad 或 \quad Q^{+}Q = I$$

矢量**r**可写成 $\mathbf{r}=\sum_{i=1}^{3}\mathbf{e_i}r_i$

转动后成为 $\mathbf{r}'=\sum_{i=1}^{3}\mathbf{e_i}r_i'$ $\mathbf{r}'=Q\mathbf{r}=\sum_i(Q\mathbf{e_i})r_i=\sum_i\mathbf{e}_i'r_i$

其中 $\mathbf{e}_i'=Q\mathbf{e_i}$ 表示基矢的转动关系。

利用**3D**位形空间的完全性关系 $\sum_i\mathbf{e_i}\mathbf{e_i}\cdot=1$

有 $\mathbf{e}_i'=Q\mathbf{e_i}=\sum_j\mathbf{e_j}(\mathbf{e_j}\cdot Q\mathbf{e_i})=\sum_j\mathbf{e}_jQ_{ji}$

其中 Q_{ji}是在基矢$\mathbf{e_1},\mathbf{e_2},\mathbf{e_3}$下的转动矩阵元

$$(Q)=\begin{pmatrix}Q_{11} & Q_{12} & Q_{13}\\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23}\\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33}\end{pmatrix}$$

2. 分量的关系

同一基矢下新老两个矢量的分量 r_i' 与 r_i 之间的关系

由（22.5）式知 $$\mathbf{r}' = \sum_i \mathbf{e}_i' r_i$$

由（22.6）式有 $$\mathbf{e}_i' = \sum_j \mathbf{e}_j Q_{ji}$$

所以 $$\mathbf{r}' = \sum_{ij} \mathbf{e}_j Q_{ji} r_i = \sum_j \mathbf{e}_j r_j'$$

得 $$r_j' = \sum_i Q_{ji} r_i$$

二、正当转动和非正当转动

1．3D转动群

对幺正变换矩阵 **Q**，有 $Q^{+}Q=1$

取其行列式，则 $\det(Q^{+}Q)=\det Q^{+}\cdot\det Q=(\det Q)^{2}=1$

所以 $\det Q=\pm 1$

当 $\det Q=+1$ 时，称此类转动为正当转动，

当 $\det Q=-1$ 时，称此类转动为非正当转动。

任意多次正当转动相继进行，结果仍相当于一个正当转动；而两次或偶次非正当转动相继进行，则相当于一个正当转动，全部满足幺正条件的算符$\boldsymbol{Q}$构成三维转动群，记为$\boldsymbol{O(3)}$；全部正当转动的$\boldsymbol{Q}$是$\boldsymbol{O(3)}$的一个子群，记为$\boldsymbol{SO(3)}$或三维正当转动群；而全部非正当转动的$\boldsymbol{Q}$不是群，因为它不满足封闭性条件（两个非正当转动相乘是正当转动，属于$\boldsymbol{SO(3)}$群）。

对空间反演算符***P***， $P\mathbf{r} = -\mathbf{r}$

在转动的定义下也是一种转动，但由于

$$P_{ji} = -\delta_{ji} \quad \text{即} \qquad \det P = -1$$

所以这种转动是非正当转动。任何正当转动继之以空间反演就成为非正当转动；非正当转动继之以空间反演就成为正当转动，所以三维转动群***O***(*3*)是三维正当转动群与空间反演群的直积群。

2. 三正交矢量的转动

三个正交的矢量若构成右手系的关系，则在正当转动变换之后仍然保持这种关系，而在非正当转动之后则变成左手关系；即若 $\mathbf{z} = \mathbf{x} \times \mathbf{y}$

则　　若$\boldsymbol{Q}$为正当转动　　$Q\mathbf{z} = Q\mathbf{x} \times Q\mathbf{y}$

若$\boldsymbol{Q}$’为非正当转动　　$Q'\mathbf{z} = -Q'\mathbf{x} \times Q'\mathbf{y}$

三、转动矩阵的构造

所有的正当转动都可以用两类简单的转动相继进行而达到，其中一个是绕z轴转 α 角 $Q(\mathbf{k},\alpha)$

另一个是绕y轴转 β角 $Q(\mathbf{j},\beta)$

$$\mathbf{i}' = Q\mathbf{i} = \mathbf{i}\cos\alpha + \mathbf{j}\sin\alpha$$

$$\mathbf{j}' = Q\mathbf{j} = \mathbf{i}(-\sin\alpha) + \mathbf{j}\cos\alpha$$

$$\mathbf{k}' = Q\mathbf{k} = \mathbf{k}$$

因此有 $$Q(\mathbf{k}\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

注意这里是基矢的转动： $\mathbf{e}_i' = Q\mathbf{e}_\mathbf{i} = \sum_j \mathbf{e}_j Q_{ji}$

$$\begin{pmatrix}\mathbf{i}' & \mathbf{j}' & \mathbf{k}'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

类似有 $$Q(\mathbf{j}\beta) = \begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}$$

令： **n**与**k**的夹角为 θ

n在*xy*平面上的投影与**i**轴夹角为 ψ

则 $Q(\mathbf{n}\varphi) = Q(\mathbf{k}\psi)Q(\mathbf{j}\theta)Q(\mathbf{k}\varphi)Q(\mathbf{j},-\theta)Q(\mathbf{k},-\psi)$

四、欧拉角

欧拉角是三个角：　α,β,γ

用这三个参数表征所有的正当转动。

任何正当转动其最后位置和初始位置之间可以用以下三个转动得到

$$Q(\alpha,\beta,\gamma)=Q(\mathbf{k}'\gamma)Q(\mathbf{j}'\beta)Q(\mathbf{k}\alpha)$$

即先绕 z 轴转 α，再绕 y' 转 β，再绕 z' 转 γ

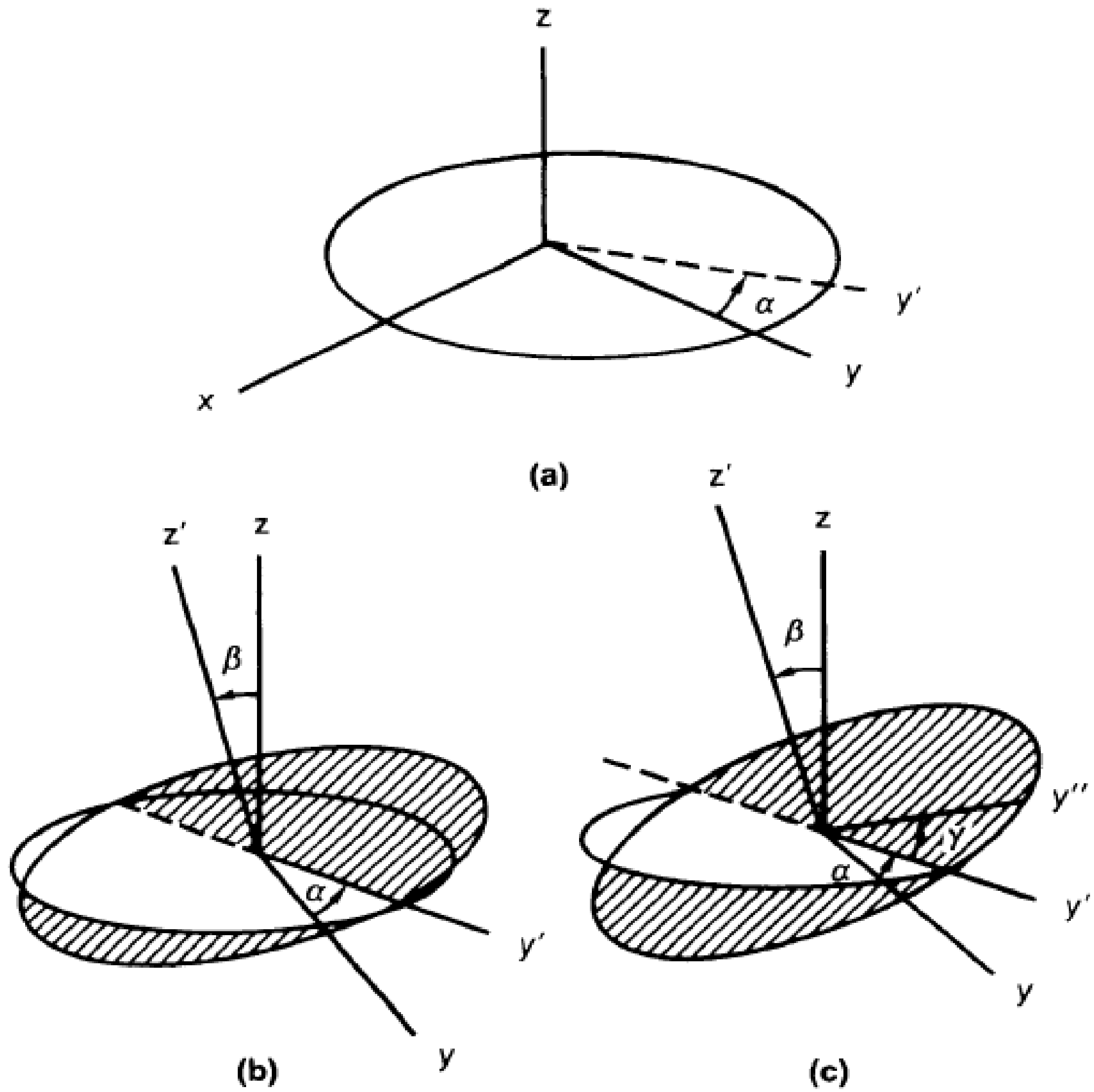

FIGURE 3.4. Euler rotations.

可以证明 $Q(\alpha\beta\gamma) = Q(\mathbf{k}\alpha)Q(\mathbf{j}\beta)Q(\mathbf{k}\gamma)$

注意此时转动的轴是固定的坐标系。

可得到 $Q(\alpha\beta\gamma) =$ **22.14式。**

欧拉角的取值范围是：

$$0 \le \alpha \le 2\pi \qquad 0 \le \beta \le \pi \qquad 0 \le \gamma \le 2\pi$$

§22-3 正当转动群

一、研究转动群性质的基本思路

研究群的性质，主要是求群的全部不可约表示及其特征标。为达到这个目的，往往是找另一个与此群同构（或同态）的群，去求这个群的不可约表示，而后者往往是某一矢量空间中的变换矩阵群，因为求一个矢量空间中的变换的矩阵表示是很容易的事情。

要研究正当转动群$\{Q(\alpha\beta\gamma)\}$的性质，由于这个群与函数空间中的转动算符群$\{\hat{D}(\mathbf{n}\varphi)\}$和**Hilbert**空间中的转动算符群$\{D(\mathbf{n}\varphi)\}$同构，因而知道了$\{Q\}$的性质，$\{D\}$的性质也就知道了。

二、SU(2)群的构造

SU(2)群是**2D**幺模幺正群，在一定条件下（选择适当的参数），可以使得正当转动群**SO(3)**与**SU(2)**保持同态关系，知道了**SU(2)**群的不可约表示，就可以知道**SO(3)**群的不可约表示。

SU(2)群是全部行列式为+1的 2×2

复幺正矩阵的集合，其一般形式为

$$u=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\quad,\quad u^{+}=\begin{pmatrix} a^{*} & c^{*} \\ b^{*} & d^{*} \end{pmatrix}$$

$\det u=1$ 导致条件 $ad-bc=1$ ①

而幺正导致条件（$u^{+}u=I$）

$$u^{+}u=\begin{pmatrix} a^{*} & c^{*} \\ b^{*} & d^{*} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a^{*}a+c^{*}c & a^{*}b+c^{*}d \\ b^{*}a+d^{*}a & b^{*}b+d^{*}d \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$ad - bc = 1 \quad ①$$

$$a^*a + c^*c = 1 \quad ②$$

$$b^*b + d^*d = 1 \quad ③$$

$$a^*b + c^*d = 0 \quad ④$$

$$b^*a + d^*c = 0 \quad ⑤$$

以上5式共包含以下6个实方程（其中a_1，a_2分别为a的实部和虚部）

$$① \Rightarrow \begin{cases} a_1 d_1 - a_2 d_2 - b_1 c_1 + b_2 c_2 = 1 \\ a_2 d_1 + a_1 d_2 - b_2 c_1 - b_1 c_2 = 0 \end{cases}$$

$$② \Rightarrow a_1^2 + a_2^2 + c_1^2 + c_2^2 = 1$$

$$③ \Rightarrow b_1^2 + b_2^2 + d_1^2 + d_2^2 = 1$$

$$④⑤ \Rightarrow \begin{cases} a_1 b_1 + a_2 b_2 + c_1 d_1 + c_2 d_2 = 0 \\ a_1 b_2 - a_2 b_1 + c_1 d_2 - c_2 d_1 = 0 \end{cases}$$

可以证明，上述6个方程是线性相关的，独立的方程只有5个。矩阵中4个复变数有8个实参数，考虑到5个条件，故SU(2)群的每个群元由3个实参数确定，其一般形式可以写成

$$u=\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \qquad aa^*+bb^*=1$$

可取 $a=me^{-i\xi}$ $\qquad b=-ne^{-i\varsigma}$

而为使 $aa^*+bb^*=1$

再取 $m=\cos\eta$ $\qquad n=\sin\eta$

于是***u***的一般形式可写为 $u(\xi\varsigma\eta)=\begin{pmatrix} e^{-i\xi}\cos\eta & -e^{-i\varsigma}\sin\eta \\ e^{i\varsigma}\sin\eta & e^{i\xi}\cos\eta \end{pmatrix}$

式中 $0\le\xi\le 2\pi$ $\qquad 0\le\varsigma\le 2\pi$ $\qquad 0\le\eta\le\frac{\pi}{2}$

三、SO(3)与SU(2)的同态关系

1. *u*和*Q*的对应关系

为建立二者的关系，首先建立3D位形空间中的点**r**与一个2D复矢量空间中的算符（即矩阵）***h***的关系：

$$h = \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r} = \sigma_x x + \sigma_y y + \sigma_z z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} z = \begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix}$$

当一个SU(2)的群元***u***对算符***h***作幺正变换时，得到一个新算符

$$h' = uhu^{-1}$$

而*h'*又与3D位形空间中的另一个点*r'*对应

$$h' = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}' = \begin{pmatrix} z' & x' - iy' \\ x' + iy' & -z' \end{pmatrix}$$

由于 $\det h' = \det(uhu^{-1}) = \det h$

所以 $x'^2 + y'^2 + z'^2 = x^2 + y^2 + z^2$

可见：通过*h*算符作为桥梁，由一个SU(2)的元*u*可以把点*r*变成*r'*而保持其距原点的距离不变，即每一个*u*肯定与SO(3)中的某一个元等价，把这个元记为*Q(u)*，且

$$\mathbf{r}' = Q(u)\mathbf{r}$$

于是有 $h' = uhu^{-1} = u\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}u^{-1} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}' = \boldsymbol{\sigma} \cdot Q(u)\mathbf{r}$

对于SU(2)中的两个群元u_1,u_2，有

$$(u_1u_2)\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}(u_1u_2)^{-1}=u_1u_2\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}u_2^{-1}u_1^{-1}=u_1\boldsymbol{\sigma}\cdot Q(u_2)\mathbf{r}u_1^{-1}$$

$$\because u_2\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}u_2^{-1}=\boldsymbol{\sigma}\cdot Q(u_2)\mathbf{r}$$

$$=\boldsymbol{\sigma}\cdot Q(u_1)Q(u_2)\mathbf{r}=\boldsymbol{\sigma}\cdot Q(u_1u_2)\mathbf{r}$$

这样SO(3)和SU(2)之间建立了同态关系，

SO(3)群的表示也就是SU(2)群的表示。

举例：首先取$\boldsymbol{u}$为一个一般的对角矩阵

$$u_1(\alpha)=\begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}$$

$$h'=u_1 h u_1^{-1}=\begin{pmatrix} z & (x-iy)e^{-i\alpha} \\ (x+iy)e^{i\alpha} & -z \end{pmatrix}$$

又 $$h'=\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}'=\begin{pmatrix} z' & x'-iy' \\ x'+iy' & -z' \end{pmatrix}$$

比较得 $$\begin{cases} x'-iy'=(x-iy)e^{-i\alpha} \\ x'+iy'=(x+iy)e^{i\alpha} \\ z'=z \end{cases}$$ 即 $$\begin{cases} x'=x\cos\alpha-y\sin\alpha \\ y'=x\sin\alpha+y\cos\alpha \\ z'=z \end{cases}$$

从$\boldsymbol{r}$到$\boldsymbol{r}'$的变换正是绕z轴转α 角的$Q(\mathbf{k}\alpha)$：

$$Q(\mathbf{k}\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

得到对应关系：

$$u_1(\alpha)\ [22.21]\rightarrow Q(\mathbf{k}\alpha)\ [22.11]$$

再取$\boldsymbol{u}$为一般的实矩阵

$$u_2(\beta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}$$

可得 $u_2(\beta)$ 正好是绕$\boldsymbol{y}$轴转 β 角的$Q(\mathbf{j}\beta)$对应，即

$$Q(\mathbf{j}\beta)=\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}$$

从而有

$$u_2(\beta)\,\mathbf{[22.23]}\rightarrow Q(\mathbf{j}\beta)\,\mathbf{[22.12]}$$

一般的 $Q(\alpha\beta\gamma)=Q(\mathbf{k}\alpha)Q(\mathbf{j}\beta)Q(\mathbf{k}\gamma)$ 对应的是

$$u(\alpha\beta\gamma)=u_1(\alpha)u_2(\beta)u_1(\gamma)=\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

这就是 $u(\alpha\beta\gamma)$ 的一般形式，与一般式比较

$$u(\xi\varsigma\eta)=\begin{pmatrix} e^{-i\xi}\cos\eta & -e^{-i\varsigma}\sin\eta \\ e^{i\varsigma}\sin\eta & e^{i\xi}\cos\eta \end{pmatrix}$$

发现 $\alpha=\xi+\varsigma \quad \beta=2\eta \quad \gamma=\xi-\varsigma$

因而 $0\le\alpha\le 4\pi \quad 0\le\beta\le\pi \quad 0\le\gamma\le 2\pi$

2. *u*和*Q*的同态关系

由 $h' = uhu^{-1}$ 知， ***u*和-*u*是与相同的*Q*对应的。**

假设u_1和*u*产生同样的*h'*，即也与*Q*对应，则

$$h' = u_1 h u_1^{-1} = uhu^{-1}$$

两边左乘u^{-1}，右乘u_1： $u^{-1}u_1 h u_1^{-1} u_1 = u^{-1} uhu^{-1} u_1$

$$u^{-1}u_1 h = hu^{-1}u_1$$

因u,u_1都是幺正幺模矩阵，即$u^{-1}u_1$也是一个模为1的2×2矩阵，而 $h = \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}$ **又显然是一个迹为0的厄米矩阵，可以证明，同所有这种厄米矩阵都对易的2×2矩阵$u^{-1}u_1$只能是正的或复的单位矩阵。**

证明：　已知 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}=\begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix}$ 令 $u^{-1}u_1=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$

利用 $[\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r},u^{-1}u_1]=0$ 可得

a. 当 $x,y\neq 0$ 时，$b=c=0$ ，$a=d$ ，但 $\det(u^{-1}u_1)=1$

可知 $a=d=\pm 1$ 即 $u^{-1}u_1=\pm I$

b. 当 $x,y=0$ 时，$b=c=0$，$ad=1$，

利用 $(u^{-1}u_1)(u^{-1}u_1)^{+}=I$，可得 $a=d=\pm 1$，即 $u^{-1}u_1=\pm I$

所以 $u^{-1}u_1=\pm I$，则 $u_1=\pm u$。

这就证实了与***u***对应相同***Q***的只有***-u***一个。

对应关系是二对一的同态关系。

四、SU(2)群的表示

1.寻找一个群的表示的一般方法

a. 建立一个自变量空间，使得这个群本身成为自变量空间对称变换群，或者与其对称变换群同构。比如位置矢量及其变换群 $\{Q\}$。

b. 建立一个这些自变量的函数空间作为表示空间。

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

找出函数空间中与原来的群同构或同态的算符群，而函数空间中这个算符群的表示就是原来群的一个表示。比如函数变换算符群 $\left\{\hat{D}(Q)\right\}$

c. 表示的维数等于函数空间的维数。

为求群的有限维表示，必须找到一个有限维的函数空间，使得其中所有函数（矢量）在群的作用下都不跑出空间之外。

2. SU(2)矩阵群的表示

a. 建立一个复2维的矢量空间。空间中一般矢量v的两个分量 ξ,η（复数）便构成两个独立的自变量：

$$v=\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}$$

2×2 幺正矩阵 $u(a,b)=\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$

正好作为这种矢量的变换算符：

$$v'=\begin{pmatrix} \xi' \\ \eta' \end{pmatrix}=u(a,b)\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a\xi+b\eta \\ -b^*\xi+a^*\eta \end{pmatrix}$$

b. 建立表示空间。表示空间的基矢 $f_i(\xi,\eta)$ 应该是 ξ,η 的函数，基矢的数目就是表示的维数。

发现，变换 u 是 ξ,η 的线性变换。如果将基矢取为 ξ,η 的齐次多项式，就可以保证表示空间中的任意函数变换后仍是同次的齐次多项式，满足表示空间的封闭性条件。

ξ,η可能的齐次多项式如下：

零次： **1**； 即 $\xi^0\eta^0$ **1项**

1次： ξ,η ； 即 $\xi^{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}\eta^{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}},\xi^{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}\eta^{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}$ **2项**

2次：$\xi^2,\xi\eta,\eta^2$； 即 $\xi^{1+1}\eta^{1-1},\xi^{1+0}\eta^{1-0},\xi^{1-1}\eta^{1+1}$ **3项**

… … … …

$2j$ 次： $\xi^{j+j}\eta^{j-j},\xi^{j+(j-1)}\eta^{j-(j-1)},\cdots,\xi^{j+(-j)}\eta^{j-(-j)}$ $2j+1$ 项

由于 $2j$ 次的齐次多项式共有 $2j+1$ 个线性无关的项，

所以若求 n 维表示，可取 $2j+1=n$

将上面的基矢稍作变换，乘上一系数，

把***2j+1***维空间的基矢写成标准形式：

$$f_m^j(v) = f_m^j(\xi,\eta) = \frac{\xi^{j-m}\eta^{j+m}}{\sqrt{(j-m)!(j+m)!}}$$

式中 $m = -j, -j+1, \cdots, j-1, j$

共**2*j*+1**个。这是一般表示空间的基矢。

在2D自变量空间的变换*u(a,b)*之下，函数空间中的各基矢的变换为

$$(f')^j_m(v) = \hat{D}(u) f^j_m(v) = f^j_m(u^{-1}v)$$

由 $u^{-1} = u^+$ $u^{-1}(a,b) = u(a^*,-b) = \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix}$

有 $u^{-1}v = \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^*\xi - b\eta \\ b^*\xi + a\eta \end{pmatrix}$

于是 $\hat{D}(u) f^j_m(v) = f^j_m(u^{-1}v) = \dfrac{(a^*\xi - b\eta)^{j-m}(b^*\xi + a\eta)^{j+m}}{\sqrt{(j-m)!(j+m)!}}$

将此式按基函数 $f^j_{m'}(\xi,\eta)$ 展开，展开系数就是表示矩阵 $D^j_{m'm}(u)$

$$\hat{D}(u) f^j_m(\xi,\eta) = \sum_{m'=-j}^{+j} f^j_{m'}(\xi,\eta) D^j_{m'm}(u)$$

2*j*+1维

可以求出矩阵元：

$$D^{j}_{m'm}(a,b)=\sum_{n}(-1)^{n}\frac{\sqrt{(j-m)!(j+m)!(j-m')!(j+m')!}}{(j+m'-n)!(j-m-n)!n!(n+m-m')!}\times a^{j+m'-n}(a^{*})^{j-m-n}b^{n}(b^{*})^{n+m-m'}$$

这就是SU(2)群的*2j+1*维表示的一般形式。其中，***n*** 取分母上的四个阶乘都不为负的一切整数，

$m',m=-j,-j+1,\cdots,j-1,j$ ， $j=\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\cdots$ 共2j+1个值。

五、表示 $D^{j}_{m'm}(u)$ 的性质

SU(2)群的所有整数维表示的主要性质有：

1. 这些表示都是幺正表示；

2.它们都是不可约表示；

3.它们是SU(2)群的全部不可约表示。

证明自阅

六、SO(3)群的表示

因为同**SO(3)**群的每一个群元 $Q(\alpha\beta\gamma)$

相对应的**SU(2)**群元 $u(\alpha\beta\gamma)$ 是

$$u(\alpha\beta\gamma)=u_1(\alpha)u_2(\beta)u_1(\gamma)=\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

相当于 $a=e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2}$ $\qquad b=e^{-i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2}$

可得SO(3)群的群元表示矩阵元：

$$\boxed{\begin{aligned} D^{j}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) &= \sum_{n}(-1)^{n}\frac{\sqrt{(j-m)!(j+m)!(j-m')!(j+m')!}}{(j+m'-n)!(j-m-n)!n!(n+m-m')!} \\ &\quad \times e^{-im'\alpha}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j+m'-m-2n}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2n+m-m'}e^{-im\gamma} \end{aligned}}$$

当$j=l$，即j为整数时，

$$\begin{tikzcd} & +u(\alpha\beta\gamma) \arrow[dr] & \\ Q(\alpha\beta\gamma) \arrow[ur] \arrow[dr] & & D^{l}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) \\ & -u(\alpha\beta\gamma) \arrow[ur] & \end{tikzcd}$$

当j=半数时，

$$\begin{tikzcd} & +u(\alpha\beta\gamma) \arrow[r] & D(u)=D^{j}_{m'm}(\alpha\beta\gamma) \\ Q(\alpha\beta\gamma) \arrow[ur] \arrow[dr] & & \\ & -u(\alpha\beta\gamma) \arrow[r] & D(-u)=D^{j}_{m'm}(\alpha+2\pi,\beta\gamma) \end{tikzcd}$$

下面写出j=1/2,1两种情况的表示矩阵D^j的明显形式，在矩阵中行和列的编号m'和m习惯上取由大到小的顺序，即m'大的在上面，m大的在左边。

$j=1/2, m'=m=\pm 1/2:$

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cc} m=1/2 & m=-1/2 \end{array} \\
D^{1/2}(\alpha\beta\gamma)=\begin{pmatrix} D^{1/2}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} & D^{1/2}_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \\ D^{1/2}_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} & D^{1/2}_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} & \begin{array}{c} m'=1/2 \\ \\ m'=-1/2 \end{array}
\end{array}
$$

计算 $D^{1/2}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ ：由 $j-m-n\geq 0$，有 $n=0$

$$D^{1/2}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma) = e^{-im'\alpha}(\cos\frac{\beta}{2})^{2j+m'-m-2n}(\sin\frac{\beta}{2})^{2n+m-m'}e^{-im\gamma}$$

$$= e^{-i\alpha/2}(\cos\frac{\beta}{2})^{2\times\frac{1}{2}}(\sin\frac{\beta}{2})^{0}e^{-i\gamma/2} = e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\frac{\beta}{2}$$

所以 $$D^{1/2}(\alpha\beta\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

$j=1, m'=m=\pm 1, 0:$

$$\begin{array}{cc} \begin{array}{ccc} m=1 & m=0 & m=-1 \end{array} & \\ D^1(\alpha\beta\gamma)=\begin{pmatrix} D^1_{11} & D^1_{10} & D^1_{1-1} \\ D^1_{01} & D^1_{00} & D^1_{0-1} \\ D^1_{-11} & D^1_{-10} & D^1_{-1-1} \end{pmatrix} & \begin{array}{c} m'=1 \\ m'=0 \\ m'=-1 \end{array} \end{array}$$

可得

$$D^1(\alpha\beta\gamma)=\begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)}\cos^2\frac{\beta}{2} & -\sqrt{2}e^{-i\alpha}\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2} & e^{-i(\alpha-\gamma)}\sin^2\frac{\beta}{2} \\ \sqrt{2}e^{-i\gamma}\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2} & \cos^2\frac{\beta}{2}-\sin^2\frac{\beta}{2} & -\sqrt{2}e^{-i\gamma}\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)}\sin^2\frac{\beta}{2} & \sqrt{2}e^{i\alpha}\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)}\cos^2\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

七、特征标计算

特征标是类的函数，而所有相同转角的转动

属于同一类，因为对 $Q(\mathbf{n},\varphi)$ 和 $Q(\mathbf{n}',\varphi)$

一定会有转动S（不止一个），将**n**轴转到**n**’轴：

$$Q(\mathbf{n},\varphi)=S^{-1}Q(\mathbf{n}',\varphi)S$$

即 $Q(\mathbf{n},\varphi)$ 和 $Q(\mathbf{n}',\varphi)$ 同属一类。

所以求特征标就可以利用一个转角为 φ

的最简单的转动，例如 $Q(\mathbf{k},\varphi)=Q(\varphi,0,0)$

则 $$D^{j}_{m'm}(\varphi,0,0)=e^{-im'\varphi}\delta_{m'm}$$

所以特征标

$$\chi^j(\varphi) = trD^j(\varphi,0,0) = \sum_{m=-j}^{j} e^{-im\varphi}$$

$$= (e^{ij\varphi} + e^{i(j-1)\varphi} + \cdots + e^{-ij\varphi}) \frac{(e^{i\varphi} - 1)e^{-i\varphi/2}}{(e^{i\varphi} - 1)e^{-i\varphi/2}}$$

$$= \frac{\sin[(j+\frac{1}{2})\varphi]}{\sin\frac{\varphi}{2}}$$

§22-4 正当转动与角动量

现在设法找到正当转动群的全部不可约表示22.38式的基矢，因为它们有很强的物理意义。

一、正当转动群表示基矢的寻找

对于正当转动群，已经找到了一个算符群

$$D(\mathbf{n}\varphi)=e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}}$$

以及位置表象中另一个算符群 $\hat{D}(\mathbf{n}\varphi)=e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{L}}}$

这两个算符都与正当转动群 $\{Q(\mathbf{n}\varphi)\}$ 同态。

考虑了自旋变量之后，扩展为

$$D(\mathbf{n}\varphi)=e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}}\otimes e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}}=e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}}$$

利用表示基矢与表示矩阵的关系，设**Hilbert**空间中第***j***个不可约表示***D***^{j}的第***m***个基矢为 $f_m^j=\left|m\right\rangle^j$

则有 $$D(\mathbf{n}\varphi)\left|m\right\rangle^j=\sum_{m'}\left|m'\right\rangle^j D^j_{m'm}(\mathbf{n}\varphi)$$

首先取***Q*(n*φ*)**为绕**z**轴的转动***Q*(k*φ*)**，这时***Q*(k*φ*)**的欧拉角形式为

$$D(00\varphi)=\exp(-\frac{i}{\hbar}\varphi J_z)$$

而 $$D^j_{m'm}(00\varphi)=\delta_{m'm}e^{-im\varphi}$$

于是按照22.49式，有 $e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi J_z}|m\rangle^j = e^{-im\varphi}|m\rangle^j$

对 φ 取导数

$$-\frac{i}{\hbar}J_z e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi J_z}|m\rangle^j + e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi J_z}\frac{d}{d\varphi}|m\rangle^j = -ime^{-im\varphi}|m\rangle^j + e^{-im\varphi}\frac{d}{d\varphi}|m\rangle^j$$

令 $\varphi = 0$

$$-\frac{i}{\hbar}J_z|m\rangle^j + \frac{d}{d\varphi}|m\rangle^j = -im|m\rangle^j + \frac{d}{d\varphi}|m\rangle^j$$

$$-\frac{i}{\hbar}J_z|m\rangle^j = -im|m\rangle^j$$

$$J_z|m\rangle^j = m\hbar|m\rangle^j$$

再取绕y轴绕φ角的转动，这时$D(\mathbf{j}\varphi)$

的欧拉角形式为$D(0\varphi 0)$，由**22.38**式可求得

$$D^j_{m'm}(0\varphi 0)=\sum_n(-1)^n\frac{\sqrt{(j-m)!(j+m)!(j-m')!(j+m')!}}{(j+m'-n)!(j-m-n)!n!(n+m-m')!}$$

$$\times(\cos\frac{\varphi}{2})^{2j+m'-m-2n}(\sin\frac{\varphi}{2})^{2n+m-m'}$$

$$\frac{d}{d\varphi}D^j_{m'm}(0\varphi 0)|_{\varphi=0}=-\frac{1}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{m'm+1}+\frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m'm-1}$$

由此得 $J_y|m\rangle^j=-\frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|m+1\rangle^j+\frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|m-1\rangle^j$

同样有 $J_x|m\rangle^j=\frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|m+1\rangle^j+\frac{\hbar}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|m-1\rangle^j$

由以上二式得 $(J_x \pm iJ_y)|m\rangle^j = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m+1)}\,|m \pm 1\rangle^j$

由 $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ 又可得

$$J^2|m\rangle^j = j(j+1)\hbar^2|m\rangle^j \qquad \text{（自证）}$$

证明中有

$$J_x J_x|m\rangle^j = J_x[\frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|m+1\rangle^j + \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|m-1\rangle^j]$$

$$J_x|m+1\rangle^j = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m-1)(j+m+2)}\,|m+2\rangle^j + \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,|m\rangle^j$$

$$J_x|m-1\rangle^j = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\,|m\rangle^j + \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j+m-1)(j-m+2)}\,|m-2\rangle^j$$

$$J_y J_y|m\rangle^j = -\frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,J_y|m+1\rangle^j + \frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,J_y|m-1\rangle^j$$

$$J_y|m+1\rangle^j = -\frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j-m-1)(j+m+2)}|m+2\rangle^j + \frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}|m\rangle^j$$

$$J_y|m-1\rangle^j = -\frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j-m+1)(j+m)}|m\rangle^j + \frac{i\hbar}{2}\sqrt{(j+m-1)(j-m+2)}|m-2\rangle^j$$

$$J_zJ_z|m\rangle^j = J_z m\hbar|m\rangle^j = m^2\hbar^2|m\rangle^j$$

证明中 $|m+2\rangle^j$ 和 $|m-2\rangle^j$ 会相互抵消，最后可得22.54式。

$$J^2|m\rangle^j = j(j+1)\hbar^2|m\rangle^j$$

可知，在Hilbert空间中，正当转动群的表示基矢就是角动量J的本征矢量：

$$|m\rangle^j = |jm\rangle$$

这是一个很重要的结论，它将转动群的表示同物理上的角动量的本证矢量联系了起来，因此有，

$$\boxed{\begin{aligned} D(\alpha\beta\gamma)|jm\rangle &= \sum_{m'} |jm'\rangle D^j_{m'm}(\alpha\beta\gamma) \\ \langle j'm'|D(\alpha\beta\gamma)|jm\rangle &= D^j_{m'm}(\alpha\beta\gamma)\delta_{j'j} \end{aligned}}$$

二、在态函数空间中寻找基矢

即在态函数空间中寻找 $D^l_{m'm}(\alpha\beta\gamma)$ 的表示基函数。

对22.49式 $$D(\mathbf{n}\varphi)\left|m\right\rangle^j = \sum_{m'}\left|m'\right\rangle^j D^j_{m'm}(\mathbf{n}\varphi)$$

取***j*=*l***，并取位置$(\theta\varphi)$表象，令 $\left\langle\theta\varphi\middle|m\right\rangle^l = f^l_m(\theta\varphi)$

则 $$\hat{D}(\mathbf{n}\gamma)f^l_m(\theta\varphi) = \sum_{m'} f^l_{m'}(\theta\varphi)D^l_{m'm}(\mathbf{n}\gamma)$$

由于 $f^l_m(\theta\varphi)$是$\theta\varphi$ 空间的函数，所以转角改为 γ

首先取转动为$Q(00\gamma)$ 这时 $D^l_{m'm}(00\gamma)=\delta_{m'm}e^{-im\gamma}$

而**22.57**式右边由于δ函数，求和只剩一项，为

$e^{-im\gamma}f^l_m(\theta,\varphi)$，左边由**19.4**式可得

$$\hat{D}(\mathbf{n}\gamma)f^l_m(\theta\varphi)=f^l_m(Q^{-1}(\theta\varphi))=f^l_m(\theta,\varphi-\gamma)$$

所以 $$f^l_m(\theta,\varphi-\gamma)=e^{-im\gamma}f^l_m(\theta,\varphi)$$

取上式两边的 $\theta=0$ ，得 $f^l_m(0,\varphi-\gamma)=e^{-im\gamma}f^l_m(0,\varphi)$

但是$(0,\varphi)$是单位球面与**z**轴的交点，此点与 γ

无关，应有 $$f^l_m(0,\varphi-\gamma)=f^l_m(0,\varphi)$$

由以上两式（**22.58**和**22.59**）看，只有**m=0**时才能不为零，否则 $f_m^l(0,\varphi)$ 只能为零，即

$$f_m^l(0,\varphi)=\delta_{m0}f \qquad (\boldsymbol{f}\text{为常数})$$

因此又可得出 $f_m^l(0,0)=\delta_{m0}f$

m*=0**的要求，使得j***只能为整数***l***而不能取半数。（因为上面的特列说明***m***取值时要有**0**，如果***j***为半数的话，***m***取值时没有**0**，而是***m*=±1/2,±3/2…**）因此函数空间只能成为转动群的奇数维（**2*j*+1**）的表示空间，而不能成为偶数维的表示空间。

讨论一个转动***Q***，使 $(\theta\varphi)$ 成为**(00)**，即

$$Q(\theta\varphi)=(00) \quad \text{而} \quad (\theta\varphi)=Q^{-1}(00)$$

这样的转动应是 $Q(0,-\theta,-\varphi)$，将此***Q***与**22.61**式代入下式

$$\hat{D}(\mathbf{n}\gamma)\,f_m^{\,l}(\theta\varphi)=\sum_{m'} f_{m'}^{\,l}(\theta\varphi)D_{m'm}^{l}(\mathbf{n}\gamma)$$

一方面有 $$\hat{D}(Q)\,f_m^{\,l}(00)=f_m^{\,l}[Q^{-1}(00)]=f_m^{\,l}(\theta\varphi)$$

另一方面有

$$\hat{D}(Q)\,f_m^{\,l}(00)=\sum_{m'} f_{m'}^{\,l}(00)D_{m'm}^{l}(0,-\theta,-\varphi)=fD_{0m}^{l}(0,-\theta,-\varphi)$$

所以 $$f_m^{\,l}(\theta\varphi)=fD_{0m}^{l}(0,-\theta,-\varphi)=fD_{m0}^{*l}(\varphi,\theta,0)$$

常数*f*可由归一化决定：

$$\int f_m^l(\theta\varphi) f_m^{*l}(\theta\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = 1$$

$$f^* f\int D_{0m}^l(0,-\theta,-\varphi) D_{0m}^{*l}(0,-\theta,-\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = 1$$

$$f^* f\int D_{m0}^{*l}(\varphi,\theta,0) D_{m0}^{l}(\varphi,\theta,0)\sin\theta d\theta d\varphi = 1$$

将此式对*m*求和：

$$f^* f\int \sum_{m=-l}^{l} (\hat{D}^+)_{0m}^l(\varphi,\theta,0) D_{m0}^{l}(\varphi,\theta,0)\sin\theta d\theta d\varphi = 2l+1$$

右边因为有**2*l*+1**个*m*值，左边利用了

$$(\hat{D}^+)_{0m}^l(\varphi,\theta,0) = D_{m0}^{*l}(\varphi,\theta,0)$$

$$f^* f \int (\hat{D}^+ \hat{D})_{00} \sin\theta d\theta d\varphi = 2l+1$$

利用 $\hat{D}$ 的幺正性，于是 $\hat{D}^+ \hat{D} = 1$ ， $(\hat{D}^+ \hat{D})_{00} = 1$

得 $f^* f 4\pi = 2l+1$ $f = \sqrt{\dfrac{2l+1}{4\pi}}$

最后得转动群在函数空间的表示基矢的具体形式是

$$\boxed{\langle \theta\varphi | lm \rangle = f_m^l(\theta\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} D_{m0}^{*l}(\varphi, \theta, 0)}$$

从上面在**Hilbert**空间中的讨论得知，这个表示基矢一定是 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$

于是得 $$\boxed{Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}D_{m0}^{*l}(\varphi,\theta,0)}$$

这是球谐函数和表示矩阵元之间的一个关系。