- Symmetry: syn(希腊语) + metron (度量)

几何学： 一个物体经过一个变换（transformation），仍能和以前看起来一样。

第三章　完全转动群

3.1 三维空间中的正交群

三维转动矩阵

定义 （1）矢量的转动

矢量变换 A： 三维空间中的算符

且有

$$A\vec{r} = \vec{r}', A\vec{s} = \vec{s}'$$

$$(A\vec{r} \cdot A\vec{s}) = (\vec{r} \cdot \vec{s})$$

保持两个矢量的内积在变换前后的内积不变： A为转动算符

在三维空间中选定一组基矢$\vec{\imath}, \vec{\jmath}, \vec{k}$

任一矢量可由三个实数来确定

$$\vec{r} = \vec{\imath}x + \vec{\jmath}y + \vec{k}z,$$
$$\vec{r}' = \vec{\imath}x' + \vec{\jmath}y' + \vec{k}z',$$

用列矩阵 $\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$ 及 $\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix}$ 表示矢量$\vec{r}$ 及 $\vec{r}'$，我们可以得到$A\vec{r} = \vec{r}'$

三维转动矩阵，
矩阵元为实数

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix}$$

（2）基矢的转动

- 三维空间中的算符 B 作用在基矢 $\vec{\imath},\vec{\jmath},\vec{k}$上，保持其正交

  归一关系不变，得到一组新的基矢 $\vec{\imath}',\vec{\jmath}',\vec{k}'$ ，新基矢由旧基矢转动而来，满足关系式

$$\begin{pmatrix}\vec{\imath}' & \vec{\jmath}' & \vec{k}'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k}\end{pmatrix} B$$

矩阵形式

$$\begin{pmatrix}\vec{\imath}' & \vec{\jmath}' & \vec{k}'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k}\end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{pmatrix}$$

- 空间任一矢量可在新旧坐标系表示出：

$$\vec{r} = \vec{i}x + \vec{j}y + \vec{k}z = \vec{i}'x' + \vec{j}'y' + \vec{k}'z'$$

$$[\vec{i} \quad \vec{j} \quad \vec{k}]\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = [\vec{i}' \quad \vec{j}' \quad \vec{k}']\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix}$$

（单位阵） $$= [\vec{i} \quad \vec{j} \quad \vec{k}]B \quad A\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$BA = I_0 \Rightarrow B = A^{-1}$$

坐标系不动转动矢量的操作 等效于 矢量不动反向转动坐标系的操作

转动矩阵的性质

- 1， A是幺正阵，

$$(\vec{r},\vec{s}) = (\vec{r}',\vec{s}') = (A\vec{r},A\vec{s}) = \left(\vec{r},A^{\dagger}A\vec{s}\right)$$

$$(A\vec{r})^{\dagger}\cdot A\vec{s} = \vec{r}^{\dagger}A^{\dagger}A\vec{s}$$

$$[x_1 \quad y_1 \quad z_1]\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix} = [x_1 \quad y_1 \quad z_1]A^{\dagger}A\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix}$$

$A^{\dagger}A = AA^{\dagger} = 1$ 保持两个矢量内积不变的充要条件

2，矩阵元之间存在正交归一关系

$$A^\dagger A = AA^\dagger = 1$$

$$\sum_j A^\dagger{}_{ij} A_{jk} = \delta_{ik}$$

$$\sum_j A_{ij} A^\dagger{}_{jk} = \delta_{ik}$$

实矩阵

$$\sum_j A_{ji} A_{jk} = \delta_{ik}$$

列正交

$$\sum_j A_{ij} A_{kj} = \delta_{ik}$$

行正交

实幺正阵为正交矩阵

- 3，转动矩阵的行列式 $\det A = \pm 1$

$$\tilde{A}A = A\tilde{A} = 1$$

$$\det(\tilde{A}A) = \det(A\tilde{A}) = \det\tilde{A}\det A = (\det A)^2 = I_0$$

$\det A = 1$，　　正当转动 R

$\det A = -1$，　　非正当转动 S

行列式是线性变换的放大率

$$\frac{V_1}{V_2} = \det A, \quad n \text{ 维空间体积变换前后比}$$

$\det A = 0$，降维，n维体积为 0，“拍扁”了，无逆阵。

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{pmatrix}$$

$$\vec{C}_1 = (C_{11}, C_{12}, C_{13}), \vec{C}_2 = (C_{21}, C_{22}, C_{23}), \vec{C}_3 = (C_{31}, C_{32}, C_{33}),$$

$$V_1 = \vec{C}_1 \cdot (\vec{C}_2 \times \vec{C}_3) = \det C$$

同理，$V_2 = \vec{B}_1 \cdot (\vec{B}_2 \times \vec{B}_3) = \det B$

$$\therefore \det A = \frac{\det C}{\det B} = \frac{V_1}{V_2}$$

正当转动

Orthogonal

- 正当转动群$SO(3)$

Special：$\det R = 1$ 的转动 R 的集合构成群。

验证：1，集合$\{R\}$具有封闭性

$$\det(R_i R_j) = \det R_i \det R_j = 1,$$

2，存在逆元， $R^{-1} = R^{\dagger} = \tilde{R}$

$$\det R^{-1} = \det\tilde{R} = \det R = 1,$$

3，存在单位元， $R^{-1}R = RR^{-1} = E \in \{R\}$

4，矩阵乘法满足结合律

- 正当转动相当于刚体转动：

  考虑坐标轴不动而刚体绕某轴转过一个角φ的转动矩阵 $R(\vec{u},\varphi)$

$\vec{u}$: 转轴方向上的单位矢量

定义并矢

$$\overleftrightarrow{R}=\vec{i}\,\vec{i}R_{11}+\vec{i}\,\vec{j}R_{12}+\vec{i}\,\vec{k}R_{13}$$

$$+\vec{j}\,\vec{i}R_{21}+\vec{j}\,\vec{j}R_{22}+\vec{j}\,\vec{k}R_{23}$$

$$+\vec{k}\vec{i}R_{31}+\vec{k}\vec{j}R_{32}+\vec{k}\vec{k}R_{33}$$

并矢的九个分量就是转动矩阵的九个矩阵元

定义 $$\overleftrightarrow{I} = \vec{i}\,\vec{i} + \vec{j}\,\vec{j} + \vec{k}\,\vec{k}$$

问： $$\overleftrightarrow{I} \times \vec{u} = ?$$

$$\begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ u_i & u_j & u_k \end{vmatrix}$$

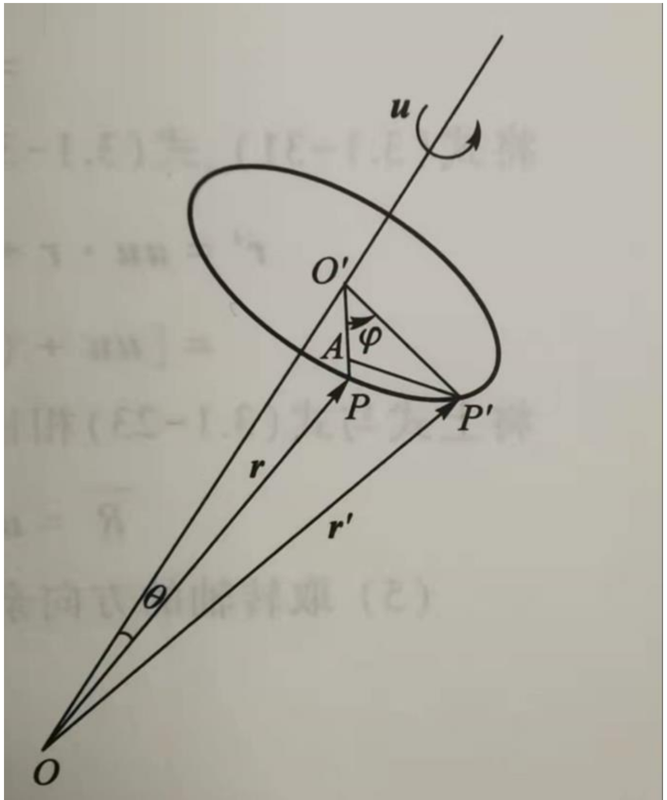


图 3.1

$$\vec{r}' = \overleftrightarrow{R}\vec{r}$$

利用几何关系求取转动矩阵元

$$\vec{u} = \vec{i}\lambda + \vec{j}\mu + \vec{k}\nu$$

λ，μ，ν：方向余弦

$$\lambda^2 + \mu^2 + \nu^2 = 1$$

$$R=\begin{pmatrix}\cos\varphi+\lambda^2(1-\cos\varphi) & \lambda\mu\,(1-\cos\varphi)-\nu\sin\varphi & \lambda\nu\,(1-\cos\varphi)+\mu\sin\varphi\\ \lambda\mu\,(1-\cos\varphi)+\nu\sin\varphi & \cos\varphi+\mu^2(1-\cos\varphi) & \mu\nu\,(1-\cos\varphi)-\lambda\sin\varphi\\ \lambda\nu\,(1-\cos\varphi)-\mu\sin\varphi & \mu\nu\,(1-\cos\varphi)+\lambda\sin\varphi & \cos\varphi+\nu^2(1-\cos\varphi)\end{pmatrix}$$

$$\det R=1,$$

刚体转动都是正当转动

$$\lambda^2+\mu^2+\nu^2=1$$

三个分量不独立，以λ，μ 表示转动方向， φ为转角

得到了以三个参数标识的任一转动的转动矩阵

非正当转动

- 非正当转动的行列式

$$\det S = -1,$$

非正当转动不能构成群，连续两次非正当转动行列式为 1

中心反演 I

$$\vec{r}' = I\vec{r} = -\vec{r} \qquad I\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

反演转动矩阵

- 镜面反射 σ （镜象）

镜面与转轴垂直：水平镜面反射σ_h

$$\sigma_h = IC_2 = C_2 I$$

$$C_2 = I\sigma_h = \sigma_h I$$

绕垂直轴转过 π 角

一个正当转动与I 或 σ 的连续作用是一个非正当转动；

一个非正当转动与I 或 σ 的连续作用是一个正当转动

$$S = IR = RI$$

非正当转动是刚体转动所不能实现：

在不改变矢量的长度和夹角的情况下，把右手系换成左手系。

- 正当转动：

$$\vec{z} = \vec{x} \times \vec{y}$$

$$R\vec{z} = R\vec{x} \times R\vec{y}$$

- 非正当转动：

$$I\vec{x} = -\vec{x}$$

$$S\vec{z} = -S\vec{x} \times S\vec{y}$$

负号来源于当我们保持右手螺旋的叉乘习惯

$$S\vec{z} = S\vec{x} \times S\vec{y}$$ （左手螺旋）

三维空间中的正交群

- 全部正当转动 + 全部非正当转动

------ 三维空间中的正交群（三维转动反演群）：$O(3)$

$SO(3)$：三维完全转动群

$SO(3)$ 是 $O(3)$ 的不变子群

$I^2 = E,\qquad C_i = \{E, I\}$是二阶非正当转动群

也是 $O(3)$ 的不变子群

$$\boxed{O(3) = SO(3) \otimes C_i}$$

可由 $SO(3)$ 和 C_i 的不可约表示得到$O(3)$ 群的不可约表示

3.2 完全转动群$SO(3)$ 的不可约表示

- 函数变换算符P_R

（1）考察与转动$R(z,\theta)$ 相应的算符$P_{z,\theta}$

Z 轴的方向余弦：

$$\lambda = \mu = 0, \nu = 1$$

$$R\,(z, \delta\theta) = \begin{pmatrix} \cos\delta\,\theta & -\sin\delta\,\theta & 0 \\ \sin\delta\,\theta & \cos\delta\,\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow[\text{无穷小变换}]{\delta\theta \to 0} \begin{pmatrix} 1 & -\delta\theta & 0 \\ \delta\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R\ (z,\delta\theta)^{-1} = R\ (z,-\delta\theta)$$

$$R\ (z,\delta\theta)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \delta\theta & 0 \\ -\delta\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$P_{z,\delta\theta}\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}) = \psi(x + y\delta\theta, y - x\delta\theta, z)$$

$$= \psi(x,\ \ y,\ \ z) + y\delta\theta\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\delta\theta\frac{\partial\psi}{\partial y}$$

$$= [1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\boxed{(-i\hbar)(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})}]\psi(x,\ \ y,\ \ z)$$

$$= [1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\boxed{\hat{L}_z}]\psi(\vec{r})$$

Reduce to $x - y$ plane,
Change to polar coordinates:

$$P_{z,\delta\theta}\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}) = \psi(r, \theta - \delta\theta)$$

$$= \psi(r,\theta) - \delta\theta \frac{\partial\psi(r,\theta)}{\partial\theta} + \frac{(\delta\theta)^2}{2\,!}\frac{\partial^2\psi(r,\theta)}{\partial\theta^2} + \cdots$$

$$= \left[1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta \boxed{(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial\theta}}\right]\psi(r,\theta)$$

$$= [1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta \boxed{\hat{L}_z}]\psi(r,\theta)$$

$$P_{z,\delta\theta} = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\hat{L}_z$$

令 $\theta = N\delta\theta$

$$P_{z,\theta} = \left(P_{z,\frac{\theta}{N}}\right)^N = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\hat{L}_z\right)^N = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}$$

（2）与转动$R\,(\vec{\omega},\theta)$相应的算符$P_{\vec{\omega},\theta}$

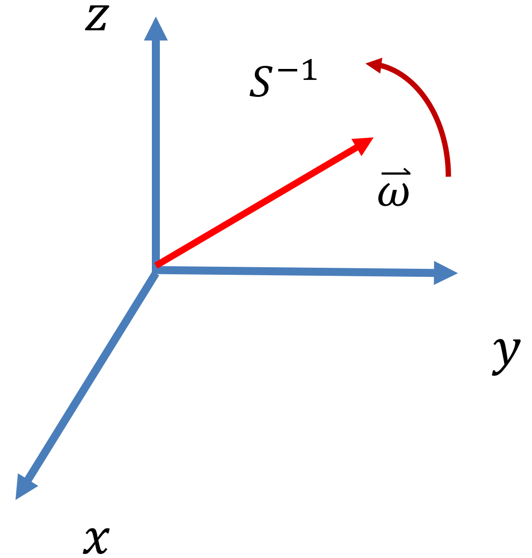
- $\vec{\omega}$是任意转轴，θ是转动角度

分三步：

1，做一个转动使 $\vec{\omega}$ 与 z 轴重合； $\boxed{S^{-1}}$

2，绕 z 轴转过 θ 角；

3，把转轴 $\vec{\omega}$ 转回原来位置。



$$R\,(\vec{\omega},\theta) = SR\,(\vec{z},\theta)S^{-1}$$

$\vec{z}$ 轴转向 $\vec{\omega}$ 轴

$$P_{\overrightarrow{\omega},\theta} = P_S P_{\vec{z},\theta} P_{S^{-1}}$$

S: $\vec{z}$ 轴转向$\overrightarrow{\omega}$ 轴

$$\begin{bmatrix}\omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z\end{bmatrix} = \begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} & S_{xz} \\ S_{yx} & S_{yy} & S_{yz} \\ S_{zx} & S_{zy} & S_{zz} \end{pmatrix} \begin{bmatrix}0 \\ 0 \\ 1\end{bmatrix}$$

$$S_{xz} = \omega_x, S_{yz} = \omega_y, S_{zz} = \omega_z$$

$$S_{\alpha z} = \omega_\alpha, \alpha = x, y, z$$

其余六个元素有一定任意性

求取 $P_{\vec{\omega},\theta} = P_S P_{z,\theta} P_{S^{-1}}$

$$P_{z,\theta} = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta \hat{L}_z}$$

$$P_{\vec{\omega},\theta} = P_S e^{-\frac{i}{\hbar}\theta \hat{L}_z} P_{S^{-1}} = P_S \left(\sum_n \frac{1}{n!} (-\frac{i}{\hbar}\theta \hat{L}_z)^n \right) P_{S^{-1}}$$

$$= \sum_n \frac{1}{n!} \left(P_S \left(-\frac{i}{\hbar}\theta \hat{L}_z \right) P_{S^{-1}} \right)^n$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\theta [P_S \hat{L}_z P_{S^{-1}}]}$$

求取 $\boxed{P_S \hat{L}_z P_{S^{-1}}}$

$$\frac{i}{\hbar}P_S\hat{L}_z P_{S^{-1}}\psi(\vec{r}) = \frac{i}{\hbar}P_S\hat{L}_z\psi(S\vec{r})$$

也是矢量

$$= P_S(\vec{r}\times\boxed{\vec{\nabla}})_z\psi(S\vec{r})$$

证明：P159, 习题1

$$\vec{r}' = S\vec{r}$$

$$= P_S\left[S^{-1}(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')\right]_z\psi(S\vec{r})$$

计算 $\left[S^{-1}(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')\right]_z$ （*1）

试证明：若有$x_i' = \sum_j R_{ij}x_j$ ，则有 $\frac{\partial}{\partial x_i'} = \sum_j R_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}$

$$S^{-1}(\vec{r}' \times \vec{\nabla}') = \begin{pmatrix} S_{xx}^{-1} & S_{xy}^{-1} & S_{xz}^{-1} \\ S_{yx}^{-1} & S_{yy}^{-1} & S_{yz}^{-1} \\ S_{zx}^{-1} & S_{zy}^{-1} & S_{zz}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\vec{r}' \times \vec{\nabla}')_x \\ (\vec{r}' \times \vec{\nabla}')_y \\ (\vec{r}' \times \vec{\nabla}')_z \end{pmatrix}$$

$$\left[S^{-1}(\vec{r}' \times \vec{\nabla}')\right]_z = \sum_{\alpha} S_{z\alpha}{}^{-1}\,(\vec{r}' \times \vec{\nabla}')_\alpha = \sum_{\alpha} S_{\alpha z}(\vec{r}' \times \vec{\nabla}')_\alpha$$

$\alpha = x, y, z$ $\qquad S_{\alpha z} = \omega_\alpha$

$$\left[S^{-1}(\vec{r}' \times \vec{\nabla}')\right]_z = \sum_{\alpha} \omega_\alpha\,(\vec{r}' \times \vec{\nabla}')_\alpha$$

代入（*1）

$$\frac{i}{\hbar}P_S\hat{L}_z P_{S^{-1}}\psi(\vec{r}) = P_S\sum_\alpha \omega_\alpha(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')_\alpha\,\psi(\vec{r}')$$
$$= P_S\omega\cdot(\vec{r}'\times\vec{\nabla}')\psi(\vec{r}')$$
$$= P_S\omega\cdot(S\vec{r}\times S\vec{\nabla})\psi(\vec{r}')$$
$$= \omega\cdot(S(S^{-1}\vec{r})\times S(S^{-1}\vec{\nabla}))\psi(S^{-1}\vec{r}')$$
$$= \omega\cdot(\vec{r}\times\vec{\nabla})\psi(\vec{r})$$

明确 P_S 的

作用范围

$$\frac{i}{\hbar}P_S\hat{L}_z P_{S^{-1}} = \vec{\omega}\cdot(\vec{r}\times\vec{\nabla})$$

$$P_S\hat{L}_z P_{S^{-1}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\omega}\cdot(\vec{r}\times\vec{\nabla}) = \vec{\omega}\cdot\hat{\vec{L}}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{P_{\vec{\omega},\theta} = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\vec{\omega}\cdot\hat{\vec{L}}}}$$

完全转动群的不可约表示

- 全部正当转动$R\ (\vec{\omega},\theta)$ 组成了完全转动群$SO(3)$

  ----无限连续群，描述球对称系统转动特性的群。

任意的两个转轴 $\vec{\omega},\vec{\omega}'$ ，总可以通过群中的元素实现重合，所以，转角相同的一切转动构成一类

$$P_{\vec{\omega},\theta}=P_S P_{\vec{\omega}',\theta} P_{S^{-1}}$$

求$SO(3)$群的不可约表示

- （1）取球谐函数$Y_l^m(\theta,\varphi)$作为不可约表示的基函数

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\varphi)$$

给定 l: $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$

本征函数简并度： $2l+1$

$$l_z = m\hbar$$

m： magnetic quantum number

$$[\hat{\vec{L}}, \hat{\vec{L}}^2] = 0$$

$$\boxed{P_{\vec{\omega},\theta} = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\vec{\omega}\cdot\hat{\vec{L}}}}$$

$$[P_{\vec{\omega},\theta}\ ,\ \ \hat{\vec{L}}^2] = 0$$

$$P_{\vec{\omega},\theta}\hat{\vec{L}}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 P_{\vec{\omega},\theta} Y_l^m(\theta,\varphi)$$

$$\hat{\vec{L}}^2 P_{\vec{\omega},\theta} Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 \boxed{P_{\vec{\omega},\theta} Y_l^m(\theta,\varphi)}$$

$$\Updownarrow$$

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\varphi)$$

本征函数简并度： $2l+1$

$$P_{\vec{\omega},\theta} Y_l^m(\theta,\varphi) = \sum_{m'} D^l(\vec{\omega},\theta)_{m'm} Y_l^{m'}(\theta,\varphi)$$ （*2）

本征函数的线性叠加

$$l:\ m' = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$$

$2l+1$个球谐函数$Y_l^m(\theta,\varphi)$ 形成了$SO(3)$ 群的一个
$2l+1$维表示的基函数

奇数维表示

特征标是类的函数

- 绕任意轴转动相同角度是一类：
  特征标是转角的函数，
  选个最简单的情形吧

球坐标系

$$R(\vec{z},\alpha)(\theta,\varphi)=(\theta,\varphi+\alpha)$$

$$R^{-1}(\vec{z},\alpha)(\theta,\varphi)=(\theta,\varphi-\alpha)$$

Legendre 函数

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

$$P_{\vec{z},\alpha}Y_l^m(\theta,\varphi)=Y_l^m(\theta,\varphi-\alpha)=P_l^m(\cos\theta)e^{im(\varphi-\alpha)}$$

$$=Y_l^m(\theta,\varphi)e^{-im\alpha}$$

比较（*2）

$$\boxed{D^l(z,\alpha)_{m'',m}=e^{-im\alpha}\delta_{m',m}}$$

表示矩阵：对角阵

$$D^l(z,\alpha) = \begin{bmatrix} e^{-il\alpha} & & & 0 \\ & e^{-i(l-1)\alpha} & 0 & \\ & 0 & \ddots & \\ 0 & & & e^{il\alpha} \end{bmatrix}$$

所以，在第 l 个表示中，转角为 α 这一类的特征标为

$$\boldsymbol{\chi^l(\alpha) = \sum_{m=-l}^{l} e^{-im\alpha} = e^{-il\alpha} \sum_{n=0}^{2l} (e^{i\alpha})^n}$$

$$= e^{-il\alpha} \frac{e^{i(2l+1)\alpha} - 1}{e^{i\alpha} - 1} = \frac{\sin(l + 1/2)\alpha}{\sin(\alpha/2)}$$

小结

- 以不同 l 的球谐函数为基函数的不可约表示，是 $SO(3)$ 群的全部 $2l+1$ 维不可约表示，计算比较复杂。

且不能求出偶数维的表示

（2）用欧拉角表征正当转动

- 固定一个坐标系$Oxyz$，及另一个可转动坐标系

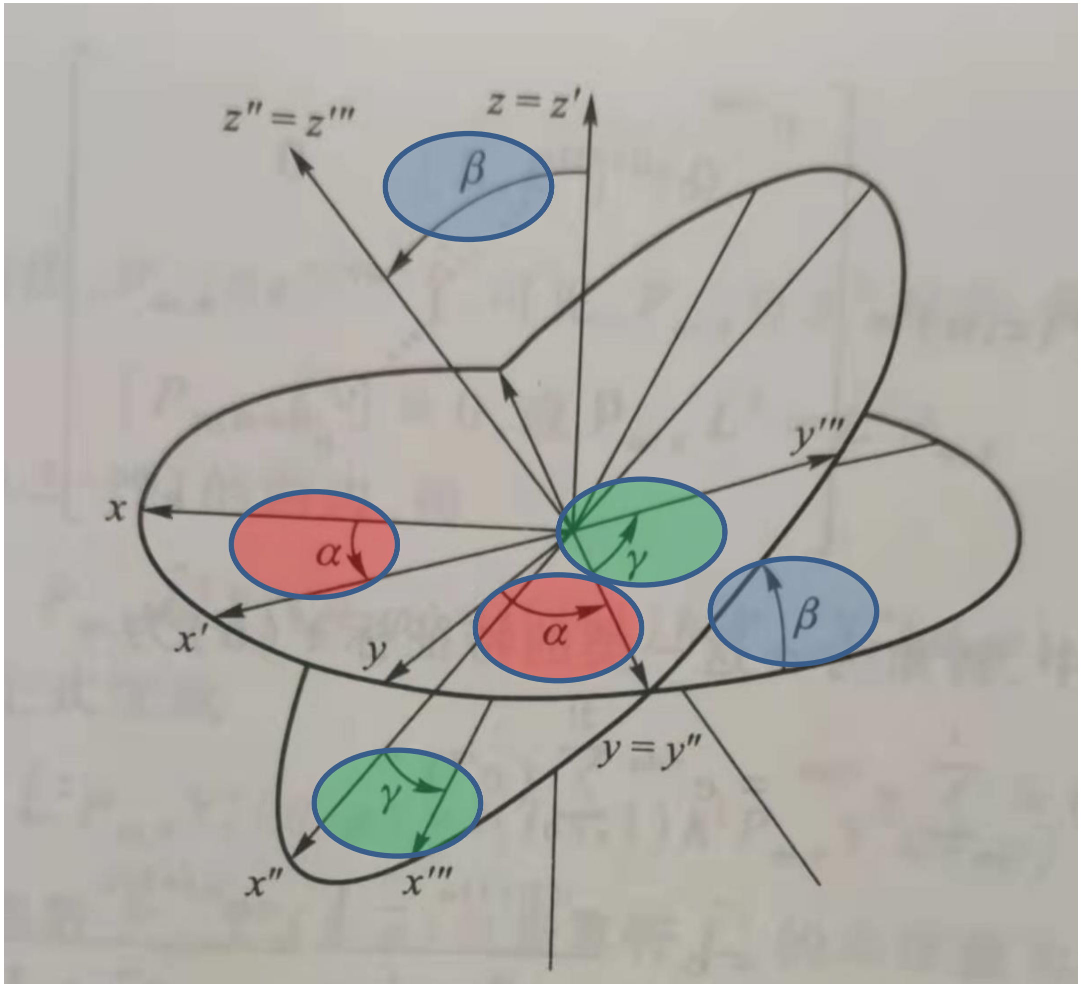
1，绕 z 轴转 α 角： x'，y'，$z'(z)$

2，绕 y' 轴转 β 角： x''，y''，z''

3，绕 z'' 轴转 γ 角： $x''',y''',z'''(z'')$

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

任一转动



$z''=z'''$
$z=z'$
β
y'''
x
α
γ
x'
y
α
β
$y=y''$
γ
x''
x'''

转轴一直在变，不方便

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

$$\Updownarrow$$ 等价

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(z,\alpha)R(y,\beta)R(z,\gamma)$$

证明等价性：

对固定坐标轴的转动

$$R(y,\beta)=[R(z,\alpha)]^{-1}R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

共轭元（类）

$$R(z,\gamma)=[R(z,\alpha)]^{-1}[R(y',\beta)]^{-1}R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

$$R(z,\alpha)R(y,\beta)R(z,\gamma)=R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\sin\alpha\sin\gamma & -\sin\gamma\cos\alpha\cos\beta-\sin\alpha\cos\gamma & \cos\alpha\cos\beta\\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma+\cos\alpha\sin\gamma & -\sin\gamma\sin\alpha\cos\beta+\cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta\\ -\cos\gamma\sin\beta & \sin\beta\sin\gamma & \cos\beta\end{pmatrix}$$

$SO(3)$群用欧拉角表示的特征标为

$$\chi(\alpha,\beta,\gamma)=\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\sin\alpha\sin\gamma-\sin\gamma\sin\alpha\cos\beta+\cos\alpha\cos\gamma+\cos\beta$$

$$=\cos\beta+（1+\cos\beta）\cos(\alpha+\gamma)$$

α, β, γ

欧拉角与转动$R\ (\vec{\omega}, \varphi)$的对应关系

$\lambda,\ \ \mu,\ \ \nu,$
$\lambda^2 + \mu^2 + \nu^2 = 1$

$$\cos\frac{\varphi}{2} = \cos\frac{\beta}{2}\cos\frac{\alpha+\gamma}{2}$$

$$\lambda = \frac{\sin\frac{\beta}{2}\sin\frac{\alpha-\gamma}{2}}{\sin\frac{\varphi}{2}}$$

$$\mu = \frac{\sin\frac{\beta}{2}\cos\frac{\alpha-\gamma}{2}}{\sin\frac{\varphi}{2}}$$

$$\nu = \frac{\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\alpha+\gamma}{2}}{\sin\frac{\varphi}{2}}$$

- 用欧拉角表示正当转动后，仍可以球谐函数为基函数，利用

$$P_{\vec{\omega},\theta} Y_l^m(\theta,\varphi) = \sum_{m'} D^l(\vec{\omega},\theta)_{m'm} Y_l^{m'}(\theta,\varphi)$$

求 $SO(3)$ 群的第 l 个不可约表示。

需要做替换

$$P_{\vec{\omega},\theta} \to P_{R(\alpha,\beta,\gamma)} = P_{z,\alpha} P_{y,\beta} P_{z,\gamma}$$

$$Y_l^m(\vec{r}) \to \frac{x^m y^n z^p}{r^l}, \qquad m+n+p=l$$

很繁琐！

3.3 二维幺模幺正群$SU(2)$

- 二维矩阵$u = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ 满足

（1） $uu^{\dagger} = u^{\dagger}u = I_0$ ， 单位阵

（2） $\det u = 1$ --------- 幺正幺模阵

条件（1，2）：

$$a = d^*, b^* = -c, aa^* + bb^* = 1$$

$$u = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix}$$ 三个独立参数

$$u = \begin{bmatrix} e^{i\xi}\cos\eta & e^{i\zeta}\sin\eta \\ -e^{-i\zeta}\sin\eta & e^{-i\xi}\cos\eta \end{bmatrix}$$

Cayley-Klein parameters:
ξ, η, ζ (real)
Xi(ksi), eta, zeta

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

这样的矩阵集合构成群：$SU(2)$

（1）封闭性：幺正阵相乘仍为幺正阵，行列式为1的矩阵相乘依然是行列式为1

（2）单位元：$E=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

（3）逆元： 行列式为 1， 非奇异矩阵，有逆

（4）结合律： 矩阵乘法满足结合律

$SO(n)$群的独立参数分析

- n^2 real parameters (orthogonal matrix)

- only $\frac{n^2+n}{2} = n(diagonal) + \frac{n^2-n}{2}\ (off-diagonal)\ \ independent\ equations$

$SO(n)$ $\quad M_{ij} = \sum_k R_{ik}\tilde{R}_{kj} = \sum_k R_{ik}R_{jk} = M_{ji} = \delta_{ij}$

Above / Below the diagonal line provide the same constraint

The independent real parameters :

$$n^2 - \frac{n^2+n}{2} = \frac{n^2-n}{2}$$

$SU(n)$群的独立参数分析

- n^2complex parameters: $2n^2$ real parameters (real + imaginary part)
- Unitary $uu^\dagger = u^\dagger u = I_0$: n^2 *equations*

only $\frac{n^2+n}{2}$ *independent equations*

off-diagonal equations：$(n^2-n)/2$，给出(n^2-n)个对实数变量的限制。

diagonal equations：each term 是实数，没有虚部，等式左边不会出现虚部，对角元意味着矢量的模长，于是直接给出(n)个限制

另外，det $u=1$ 是对 $u=ue^{i\delta}$ 中相位必须为0的约束，这个全局相位的引入不改变上述所有方程的描述。

$SU(n)$

所以独立实数参量是 $2n^2 - 2\times\frac{n^2-n}{2} - n - 1 = n^2 - 1$

二维幺正幺模群与完全转动群

- 共同点：三个独立参数

（1） h矩阵

（a） 二维迹为0的幺正矩阵，是pauli矩阵的线性组合

已知pauli 矩阵

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$h = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{bmatrix} = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z = \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$$

$$= \begin{bmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{bmatrix}$$

$$\boxed{h = h^{\dagger}}$$

$$x = \frac{h_{12} + h_{21}}{2}, \qquad y = \frac{h_{21} - h_{12}}{2i}, \qquad z = h_{11} = -h_{22}$$

(b) 用 u 矩阵对 h 做幺正变换

$$h' = uhu^{-1} = \begin{bmatrix} z' & x' - iy' \\ x' + iy' & -z' \end{bmatrix} = \vec{r}' \cdot \vec{\sigma}$$

$$u = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix} \Rightarrow u^{-1} = \begin{bmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{bmatrix}$$

$$h' = uhu^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{bmatrix}$$

$$h = \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$$

$$\Downarrow \qquad h' = uhu^{-1}$$

$$h' = \vec{r}' \cdot \vec{\sigma}$$

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' \qquad \vec{r}' = R(u)\vec{r}$$

每一个使矩阵 h 变成 h' 的幺模幺正阵 u， 总存在一个 3×3 的矩阵$R(u)$使得$\vec{r}(x,y,z)$ 变成 $\vec{r}'(x',y',z')$

$$R(u) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2}) & \frac{-i}{2}(a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2}) & -(a^*b^* + ab) \\ \frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} - b^2 + b^{*2}) & \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2}) & i(a^*b^* - ab) \\ a^*b + ab^* & i(a^*b - ab^*) & aa^* - bb^* \end{pmatrix}$$

- （2） $R(u)$的性质

（a） $R(u)$是个实矩阵： r_i', r_i 都是实数

$$r_i' = \sum_j R(u)_{ij}\, r_j$$

（b）$R(u)$是转动矩阵：

么正变换不改变矩阵的行列式

$$\det h' = \det u \cdot \det h \cdot \det u^{-1} = \det h$$

$$\det h = -z^2 - (x+iy)(x-iy) = -(x^2+y^2+z^2)$$

$$\det h' = -(x'^2+y'^2+z'^2)$$

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

$R(u)$：保长变换，因而保角，故为转动矩阵

内积是标量

- （c） $\det R\,(u) = 1$

　　转动矩阵的行列式为1或-1，这里所有的转动矩阵，可由矩阵 u 的参量 (a,b) 连续变化而得，

$$(1{,}0) \rightarrow u = I_0 \rightarrow \det R\,(I_0) = 1$$

行列式不能发生由1到−1的跳变，对于所有参量(a,b)都有$\det R\,(u) = 1$

$R(u)$： 三维空间的正当转动

（d）举例

- 例一 u是对角阵

$$u=\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & a^* \end{bmatrix} \qquad aa^*=1$$

$\boxed{取 a=e^{-i\frac{\alpha}{2}}}$

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

$\Downarrow$

$$R_1(\alpha)=\begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow R(z,\alpha)$$

- 例二　　　选择一个实矩阵

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

$$\Downarrow$$

$$R_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \quad \to R(y,\beta)$$

（3） $SU(2)$ 与 $SO(3)$ 同态

已知欧拉角表征的正当转动：

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R(z,\alpha)R(y,\beta)R(z,\gamma)$$

$$u(\alpha,\beta,\gamma) = u_1(\alpha)\ u_2(\beta)\ u_1(\gamma)$$

$$= \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix}$$

$SU(2)$ covers $SO(3)$ twice

- 零迹矩阵 h 作为媒介

$$h' = \boxed{u} \, h u^{-1}$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{r}\,' = \boxed{R(u)} \, \vec{r}$$

- but

$$h' = \boxed{(-u)} \, h(-u^{-1})$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{r}\,' = \boxed{R(u)} \, \vec{r}$$

$$\begin{matrix} u \\ -u \end{matrix} \rightarrow R(u)$$

2:1 的同态关系

几何原因

- 等价转动：　$\alpha \Leftrightarrow \alpha + 2\pi$

$$R(z,\alpha) = R(z,\alpha + 2\pi)$$

但对于二维幺正幺模矩阵不一样

$$u_1(\alpha + 2\pi) = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\alpha+2\pi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\alpha+2\pi}{2}} \end{bmatrix} = -u_1(\alpha)$$

$SO(3)$

$SU(2)$

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R(\alpha + 2\pi,\beta,\gamma)$$

$$\downarrow \qquad\qquad \downarrow$$

$$u(\alpha,\beta,\gamma), \quad -u(\alpha,\beta,\gamma)$$

关于算符与波函数

- 对于自旋pauli算符支撑起的零迹空间，

测量算符由$\hat{\sigma}_z = \vec{r} \cdot \vec{\sigma}$, $\vec{r} = (0,0,1)$ 。 $\vec{r}$ 经过旋转变换（绕着y轴转θ角）而得

$$\vec{r}' = (\sin\theta\,, 0, \cos\theta)$$

$$\hat{O} = \vec{r}' \cdot \vec{\sigma} = \sin\theta\,\hat{\sigma}_x + \cos\theta\,\hat{\sigma}_z$$

求其本征态$|+\rangle$，满足$\hat{O}|+\rangle = |+\rangle$

对应关系

$\vec{r} = (0,0,1)$ ⇨ $\vec{r}' = (\sin\theta\,, 0, \cos\theta)$

$|\uparrow\rangle$ ⇨ $|+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle$

- 三维空间中 $\vec{r}$ 矢量的θ角旋转，
- 自旋空间中本征矢$|\uparrow\rangle$ 的 $\theta/2$角旋转。

3.4 $SU(2)$群的不可约表示

- 二维幺正幺模矩阵组成的群，本身即为群的一个表示。

取这个二维表示的基为 ξ_1，ξ_2

（表示空间V：二维复向量空间）

two-component complex vector (spinor)

$$\xi_i' = P_u \xi_i = \sum_{j=1}^{2} \xi_j u_{ji}$$

$$[\xi_1' \quad \xi_2'] = [\xi_1 \quad \xi_2] \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix}$$

$$= [\ a\xi_1 - b^*\xi_2, \quad b\xi_1 + a^*\xi_2 \quad]$$

$SU(2)$群的其他表示

选取 ξ_1，ξ_2 的齐次单项式作为 $SU(2)$ 群表示的基函数

Homogeneous polynomial (nth degree) $\xrightarrow{U}$

Homogeneous polynomial (nth degree)

See also

《mathematical methods for physicists》chap-4

3 维： $\xi_1{}^2, \xi_1\xi_2, \xi_2{}^2$

4 维： $\xi_1{}^3, \xi_1{}^2\xi_2, \xi_1\xi_2{}^2, \xi_2{}^3$

。。。 。。。 。。。

$n+1$维： $\xi_1{}^n, \xi_1{}^{n-1}\xi_2, \cdots, \xi_1\xi_2{}^{n-1}, \xi_2{}^n$

基函数的一般形式：$\boxed{{\xi_1}^{n-a}{\xi_2}^{a}}$

- 为了表示幺正性，及与完全转动群相联系

$$n = 2j, a = j - m$$

正整数，　$j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots$

$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$$

表示编号

$$f_m^j(\xi_1, \xi_2) = \frac{{\xi_1}^{j+m}{\xi_2}^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}$$

表示维数：$2j + 1$

计算表示

基函数: $$f_m^j(\xi_1,\xi_2)=\frac{{\xi_1}^{j+m}{\xi_2}^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}$$

$$P_u f_m^j(\xi_1,\xi_2)=\sum_{m'} f_{m'}^j(\xi_1,\xi_2)D^j(u)_{m',m}$$

另一方面

$$P_u f_m^j(\xi_1,\xi_2)=f_m^j(\xi_1',\xi_2')=\frac{(a\xi_1-b^*\xi_2)^{j+m}(b\xi_1+a^*\xi_2)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}$$

二项式定理 $$(x+y)^n=\sum_{r=0}^{n}\frac{n!}{r!\,(n-r)!}x^r\,y^{(n-r)}$$

$$D^j(u)_{m',m}$$

$$P_u f_m^j(\xi_1,\xi_2)=\sum_{m'=j}^{-j}\boxed{\sum_{r=0}^{j+m}\frac{(-1)^r\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+m')!\,(j-m')!}}{r!\,(j+m-r)!\,(j-r-m')!\,(r-m+m')!}\cdot a^{j+m-r}{b^*}^r{a^*}^{j-r-m'}b^{m'-m+r}}\ f_{m'}^j(\xi_1,\xi_2)$$

求和遍及所有使分母为有限值的那些 r 值，

$r\geq 0$，$r\leq j+m, r\leq j-m', r\geq m-m'$

计算$j=\frac{1}{2},1$ 时的 $SU(2)$ 群的表示矩阵

m' \ m	1	0	-1
1	a^2	$\sqrt{2}ab$	b^2
0	$-\sqrt{2}ab^*$	$aa^* - bb^*$	$\sqrt{2}a^*b$
-1	${b^*}^2$	$-\sqrt{2}a^*b^*$	${a^*}^2$

三维表示

弄清楚基函数，矩阵指标，矩阵维度，
矩阵元与指标的对应关系

表示的性质

- （1）以 $f_m^j(\xi_1,\xi_2)$ 为基函数的表示 $D^j(u)$ 是幺正表示。

$$\text{需证 } P_u \sum_{m=-j}^{j} |f_m^j|^2 = \sum_{m=-j}^{j} |f_m^j|^2$$

- （2） $D^j(u)$ 是不可约表示（舒尔引理）

$$\sum_{m=-j}^{j} |f_m^j|^2 = \sum_{m=-j}^{j} \frac{(\xi_1^*\xi_1)^{j+m}(\xi_2^*\xi_2)^{j-m}}{(j+m)!\,(j-m)!}$$

$$= \frac{1}{(2j)!}(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2)^{2j}$$

$SU(2)$群

二维幺正表示的基函数

$$P_u(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2) = |\xi_1|^2 + |\xi_2|^2$$

$$P_u \sum_{m=-j}^{j} |f_m^j|^2 = \frac{1}{(2j)!} P_u(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2)^{2j}$$

$$= \frac{1}{(2j)!}(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2)^{2j}$$

$$= \sum_{m=-j}^{j} |f_m^j|^2$$

- （3）$D^j(u)$是$SU(2)$ 群的非忠实(unfaithful)表示

$u, -u$ 两个不同的群元

$$D^j(u) = (-1)^{2j} D^j(-u)$$

j 取整数时， $D^j(u) = D^j(-u)$

两个不同的群元对应同样的表示矩阵，非忠实表示

j 取半奇数时， $D^j(u) = -D^j(-u)$

$D^j(u)$ 与 u 一一对应，忠实表示

可证，所求得的表示是$SU(2)$群的全部不可约表示

表示$D^j(u)$的特征标

- 确定 $SU(2)$ 群类结构：

  幺模幺正矩阵的本征值方程

$$u\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}$$

本征值 λ 满足方程

$$\lambda^2-(a+a^*)\lambda+1=0$$

$$\lambda_1=\frac{\beta+\sqrt{\beta^2-4}}{2},\quad \lambda_2=\frac{\beta-\sqrt{\beta^2-4}}{2},\quad \beta=a+a^*$$

$\mathrm{Re}(a)\in[-1,1], -2\le\beta\le 2$ $\qquad \beta=\pm 2, \lambda_1=\lambda_2$

$$\lambda_{1,2} = \frac{\beta \pm \sqrt{\beta^2 - 4}}{2},$$

$$-2 < \beta < 2$$

$$\lambda_1 = \lambda_2{}^*，\ \lambda_1\lambda_2 = 1$$

定义一个 α 值：$\cos\frac{\alpha}{2} = \frac{\beta}{2}$，那么 $\sin\frac{\alpha}{2} = \frac{\sqrt{\beta^2-4}}{2}$

$$\lambda_1 = \exp(i\frac{\alpha}{2}), \lambda_2 = \exp(-i\frac{\alpha}{2}), 0 \le \alpha \le 2\pi$$

本征值只决定于$\beta(= a + a^*)$ --------- a的实部Re(a)

因此，所有具有相同的 Re(a) 的 $SU(2)$ 群的群元都有相同的本征值，群元彼此共轭：

$\mathrm{Tr}(A) = \mathrm{Tr}(BAB^{-1}) = \beta$。

$$0 \leq \alpha \leq 2\pi$$

每一个 $\mathrm{Re}(a)$ 值确定 $SU(2)$ 群的一个类

取 u 中 的 $a = \exp(i\frac{\alpha}{2}), b = 0$

$$u = \begin{bmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{bmatrix}$$

相应的表示 $D^j(e^{i\frac{\alpha}{2}}, 0)_{m',m} = e^{im\alpha}\delta_{m'm}$

$$D^j(u)_{m',m} = \boxed{\sum_{r=0}^{j+m} \frac{(-1)^r \sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+m')!\,(j-m')!}}{r!\,(j+m-r)!\,(j-r-m')!\,(r-m+m')}}\,.$$

$$a^{j+m-r}\,b^{*r}\,a^{*\,j-r-m'}\,b^{m'-m+r}$$

$$a = \exp(i\frac{\alpha}{2}),\ b = 0 \Rightarrow r = 0,\ m = m'$$

$$\downarrow$$

$$D^j(u)_{m',m} = \left(e^{i\frac{\alpha}{2}}\right)^{j+m}\left(e^{-i\frac{\alpha}{2}}\right)^{j-m} = e^{im\alpha}\delta_{m'm}$$

$$\chi^j(e^{i\frac{\alpha}{2}},0) = \sum_{m=-j}^{j} e^{im\alpha} = \frac{\sin(j+\frac{1}{2})\alpha}{\sin\frac{\alpha}{2}}$$

$\Leftrightarrow$ P138,(3.2-30)

$\searrow$ j 可取整数，半奇数

$\downarrow$ l 取整数

李群（Lie group）

- 连续群
- 每一个元素由一组独立的实参数来描写，
  参数在欧氏空间一定区域内连续变化。

参数变化区域：群空间。

独立实参数数目g：群空间维度。

Lie algebra rank: 互相对易的生成元的最大个数。因为SO(3),SU(2)
生成元都互相不对易，所以阶为1，另外还有一个叫做卡塞米尔算符(Casimir)的概念
卡塞米尔算符定义为与李群所有生成元都对易的算符。
理论证明李群的卡塞米尔算符的个数等于李群的阶数。所以SO(3)和SU(2)群都只有
一个卡塞米尔算符，它就是角动量平方L^2.

生成元个数为偶数，**rank even**；

SO(4), SU(3): rank 2

生成元个数为奇数→ **rank odd**

A . Zee (P367)

Cartan subalgebra

Out of the set of n X^as, find the maximal subset of mutually commuting generators H^i, $i = 1, 2, \ldots, l$, so that

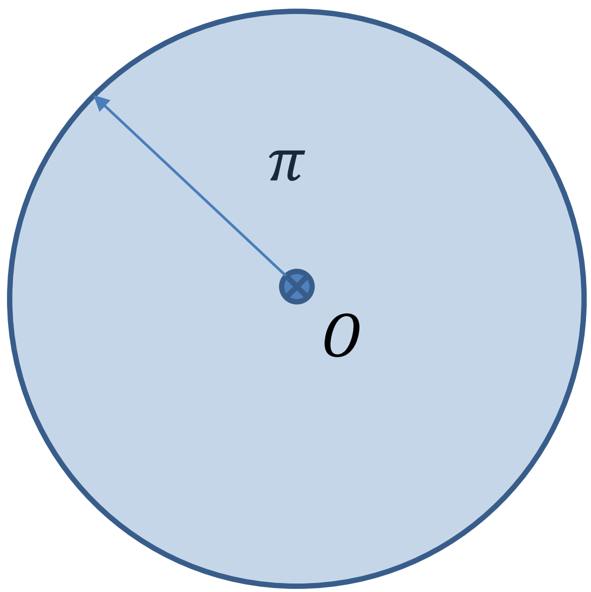
- $[H^i, H^j] = 0$, $i, j = 1, \ldots, l$

the important number l is known as the rank

- $SO(3)$表示空间：

$$R(\vec{\omega}, \alpha) = R(-\vec{\omega}, 2\pi - \alpha)$$

构建一个半径为 π 的球，球面上由直径相联系的两个点代表同一个元素。单位元在哪？



$SU(2)$的表示空间

Rotations in the two-component formalism

$$e^{\left(\frac{-i\vec{S}\cdot\vec{\hat{n}}\alpha}{\hbar}\right)} = e^{\left(\frac{-i\vec{\sigma}\cdot\vec{\hat{n}}\alpha}{\boxed{2}}\right)}$$

$\vec{\hat{n}}$: a unit vector in some specified direction

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}\right) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{a}\times\vec{b}\right)$$

$$\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{\hat{n}}\right)^n = \begin{cases} 1 & for\ n\ even \\ \vec{\sigma}\cdot\vec{\hat{n}} & for\ n\ odd \end{cases}$$

$SU(2)$的表示空间

- $$\exp\left(-\frac{i\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\alpha}{2}\right)=\left[1-\frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^2}{2!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2+\frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^2}{4!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^4-\cdots\right]$$
$$-i\left[(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})\frac{\alpha}{2}-\frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^3}{3!}\left(\frac{\alpha}{2}\right)^3+\cdots\right]$$
$$=\mathbf{1}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)-\boldsymbol{i}\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

- $$\exp\left(-\frac{i\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\alpha}{2}\right)=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)-\boldsymbol{i}\,n_z\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & (-in_x-n_y)\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\\ (-in_x+n_y)\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)+\boldsymbol{i}\,n_z\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\end{pmatrix}$$

$SU(2)$的表示空间

$$u = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix}$$

$\vec{\hat{n}} \to \vec{\omega}$:

$$n_z = \cos\theta$$
$$n_x = \sin\theta\cos\varphi$$
$$n_y = \sin\theta\sin\varphi$$

以单位矢量 $\vec{\omega}$ 的球坐标分量 θ, φ 来写矩阵元 。

$$a = \cos\frac{\alpha}{2} - i\sin\frac{\alpha}{2}\cos\theta\,,$$
$$b = -\sin\frac{\alpha}{2}\sin\theta\sin\varphi - i\sin\frac{\alpha}{2}\sin\theta\cos\varphi$$

对比前一页 $\exp\left(-\frac{i\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\alpha}{2}\right)$ 矩阵表达式

$$u(\vec{\omega}, \alpha) = I\cos\frac{\alpha}{2} - i\vec{\sigma}\cdot\vec{\omega}\sin\frac{\alpha}{2}$$

$SU(2)$的表示空间

$$u(\vec{\omega},\alpha) = I\cos\frac{\alpha}{2} - i\vec{\sigma}\cdot\vec{\omega}\sin\frac{\alpha}{2}$$

可证： $u(\vec{\omega},\alpha_1)u(\vec{\omega},\alpha_2) = u(\vec{\omega},\alpha_1+\alpha_2)$，

$u(\vec{\omega},4\pi) = 1$，$u(\vec{\omega},2\pi) = -1$

$$u(\vec{\omega},\alpha) = u(-\vec{\omega},4\pi-\alpha) = -u(-\vec{\omega},2\pi-\alpha)$$

$SU(2)$的表示空间

$$u(\vec{\omega},\alpha) = I\cos\frac{\alpha}{2} - i\vec{\sigma}\cdot\vec{\omega}\sin\frac{\alpha}{2}$$

构建一个半径为 2π 的球，球面上所有的点代表同一个元素。

$$u(\vec{\omega},\alpha) = I\cos\frac{\alpha}{2} - i\vec{\sigma}\cdot\vec{\omega}\sin\frac{\alpha}{2}$$

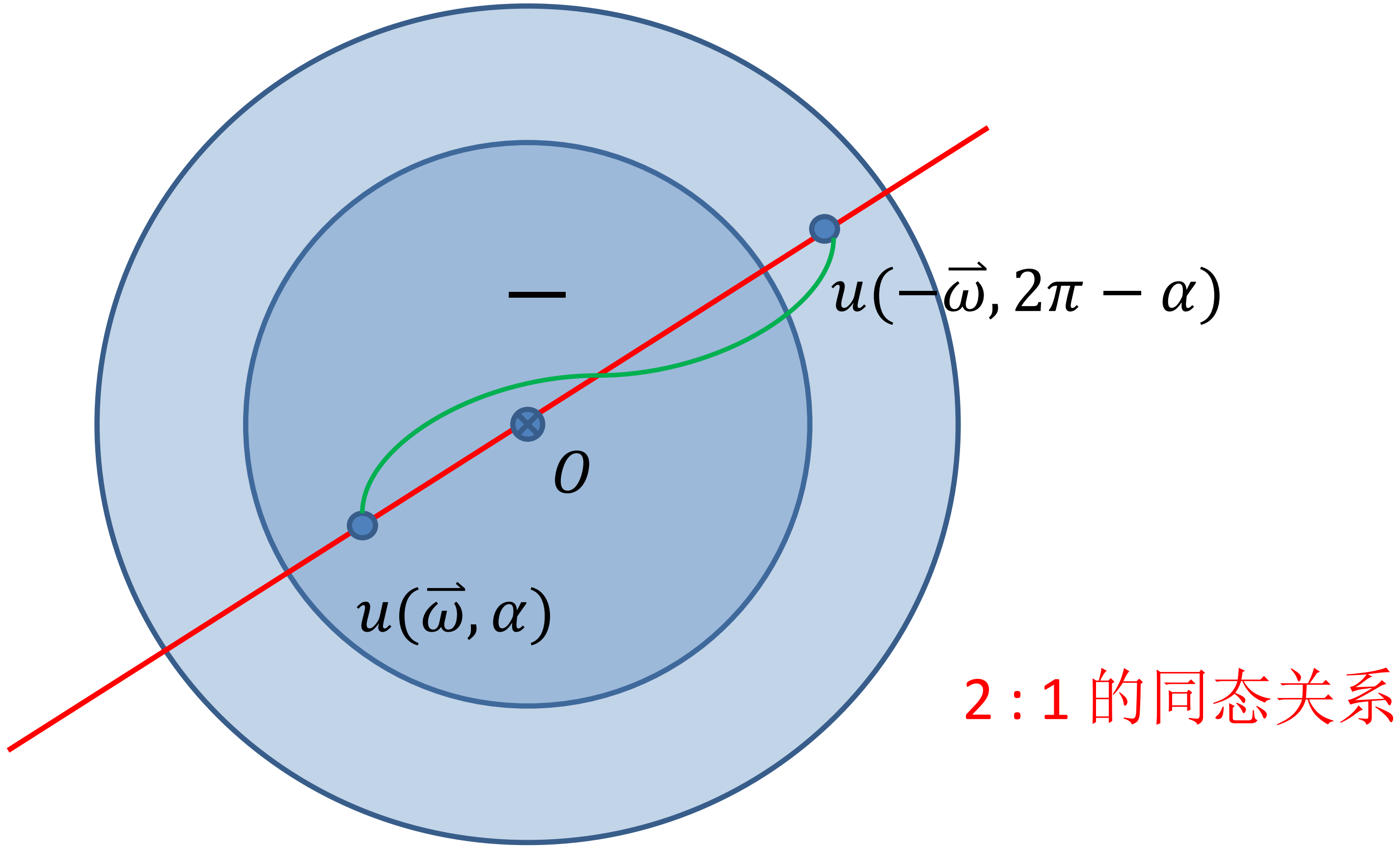
单连通

$$u(\vec{\omega},2\pi) = -I$$

任一个群元可由单位元出发在群空间连续变化得到。

$$u(\vec{\omega},\alpha) = -u(-\vec{\omega},2\pi-\alpha)$$

$$R(\vec{\omega},\alpha) = R(-\vec{\omega}, 2\pi-\alpha)$$



3.5 双群

- 双值表示 $u = \begin{bmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{bmatrix}$

$$u(\alpha,\beta,\gamma) = u_1(\alpha)u_2(\beta)u_1(\gamma)$$

$$= \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{array}{ll} a = e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} & b = -e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} \\ b^* = -e^{i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\sin\frac{\beta}{2} & a^* = e^{i\frac{\alpha+\gamma}{2}}\cos\frac{\beta}{2} \end{array}$$

- 鉴于$SU(2)$和$SO(3)$的同态关系，用$SU(2)$群的不可约表示作为$SO(3)$群的不可约表示

$$D^j(\alpha,\ \beta,\ \gamma)_{m',m} = D^j\left(\cos\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\alpha+\gamma}{2}}, -\sin\frac{\beta}{2}e^{-i\frac{\alpha-\gamma}{2}}\right)$$

a, b

这样可求$SO(3)$ 的第 j 个不可约表示，
可求相应的特征标

麻烦！

特征标是类的函数

- 选简单的来！

取$SU\ (2)$ 群中的对角元

$$u = \begin{bmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{bmatrix}$$

对应$SO(3)$ 群中的群元$R(\alpha,0,0)$

$R(\alpha,0,0)$
的特征标：

$$\chi^j(e^{i\frac{\alpha}{2}},0) = \sum_{m=-j}^{j} e^{im\alpha} = \frac{\sin(j+\frac{1}{2})\alpha}{\sin\frac{\alpha}{2}}$$

分析表示

j 取整数时， $D^j(u) = D^j(-u)$

$$R(\alpha,\beta,\gamma) \to \pm u(\alpha,\beta,\gamma)$$

j 取半奇数时， $D^j(u) = -D^j(-u)$

$$R(\alpha,\beta,\gamma) \to \pm u(\alpha,\beta,\gamma)$$

$$\pm D^j(\alpha,\ \beta,\ \gamma)$$

$SO(3)$群中一个群元对应两个表示矩阵

------------ 双值表示

双值表示的不便

$D^j(R)D^j(S) = \pm D^j(RS)$

将 $SO(3)$ 群元扩大一倍：

保证每一个元

$$R(\alpha,\beta,\gamma) \to u(\alpha,\beta,\gamma)$$

$SU(2)$.vs. $SO(3)$: 2:1 的同态关系

原因： $R(\alpha,\beta,\gamma) = R(\alpha + 2\pi,\beta,\gamma)$

如果我们将等式两边的群元处理成不同的群元？
每一个转动将与一个 u 相对应

具体执行方案

- （1）定义一个新的元 $\bar{E}$ 为绕某轴（比如 z 轴）转 2π 的转动。单位元$E = \bar{E}\bar{E}$ 为绕某轴转 4π 的转动
- （2）将$SO(3)$群的每一个元都与 $\bar{E}$ 相乘，得到 g 个新群元。
- （3）将 g 个新群元与$SO(3)$ 群原有的g 个群元放在一起，可以证明，这 $2g$ 个群元组成一个群，此群称为的双群（或复盖群），记作$SO^D(3)$

$SO^D(3)$ 与 $SU(2)$ 同构

$SO^D(3)$ 与 $SU(2)$ 同构

$D^j(\alpha，\beta，\gamma)$ 成为单值表示，不论 j 取何值

问： $SO(3)$ 是 $SO^D(3)$ 的子群吗？

不是，不封闭， 在新的群 $SO^D(3)$乘定义下，周期变了。

旋量波函数

- 与双群相关的物理系统：

  电子的自旋角动量 $s_x = \pm\frac{\hbar}{2}$

  算符$\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$

  对易关系：$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$

  与轨道角动量的相同

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

总角动量算符

$\hat{\vec{J}}$与$\hat{J}_z$有共同的本征函数ψ_{jm}

$$\hat{\vec{J}}^2\psi_{jm} = j(j+1)\hbar^2\psi_{jm}$$

$$J_z\psi_{jm} = m\hbar\psi_{jm}$$

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots; \;\; m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$$

ψ_{jm}： 电子波函数（位置+自旋）

$$\psi_{jm} = \psi_{jm}(x, y, z, \hat{S}_z, t)$$

$$\psi_{jm}(x, y, z, \frac{\hbar}{2}, t)$$

$$\psi_{jm}(x, y, z, -\frac{\hbar}{2}, t)$$

旋量波函数

$$\psi_{jm}=\begin{bmatrix}\psi_1(x,y,z,\frac{\hbar}{2},t)\\ \psi_2(x,y,z,-\frac{\hbar}{2},t)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\psi_+(\vec{r},t)\\ \psi_-(\vec{r},t)\end{bmatrix}=\psi_{jm}(\vec{r},t)$$

发生一个任意转动$R\ (\vec{\omega},\theta)$时

$$P_R=P_{\vec{\omega},\theta}=e^{-i\theta\vec{\omega}\cdot\hat{\vec{J}}/\hbar}$$

$$P_{\vec{\omega},\theta}\psi_{jm}=\sum_{m'}\psi_{jm'}\,D^j(\vec{\omega},\theta)_{m',m}$$

表示矩阵的基

完全转动群表示矩阵

绕 z 轴转 α 角

$$P_{z,\alpha}\psi_{jm}(\vec{r}) = e^{-i\alpha J_z/\hbar}\psi_{jm}(\vec{r})$$

$$P_{z,\alpha}\psi_{jm}(\vec{r}) = e^{-im\alpha}\psi_{jm}(\vec{r})$$

Mobius strip

$\alpha = 2\pi$

j 为整数， m 也为整数， $P_{z,2\pi}\psi_{jm}(\vec{r}) = \psi_{jm}(\vec{r})$

j 为半奇数，m也为半奇数， $P_{z,2\pi}\psi_{jm}(\vec{r}) = -\psi_{jm}(\vec{r})$

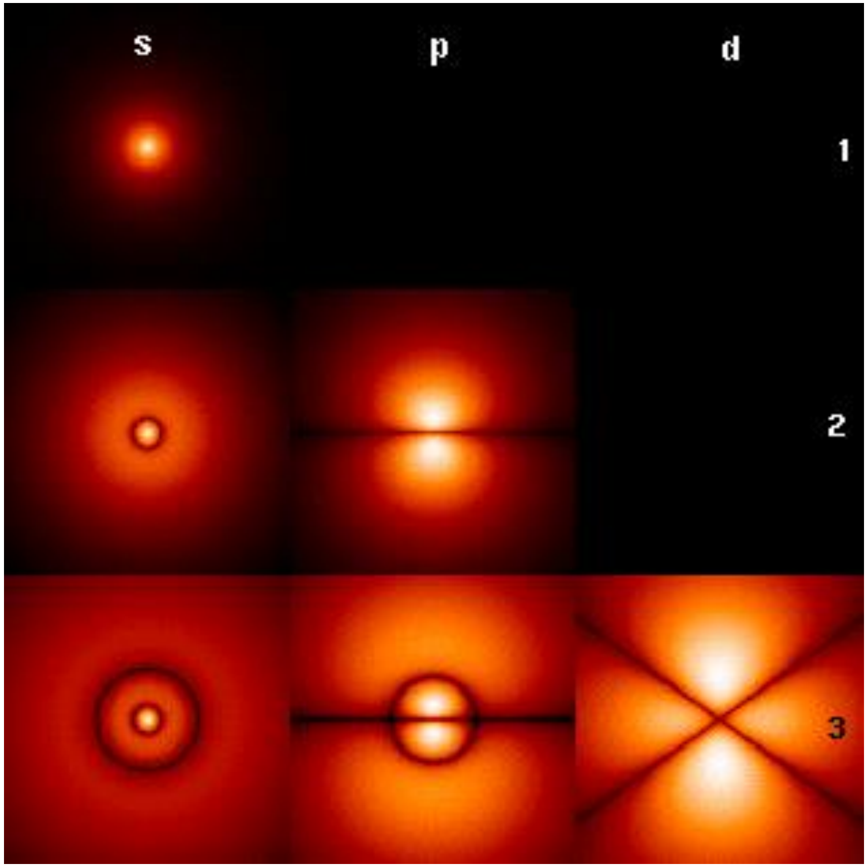
半奇数自旋角动量粒子旋量波函数特性：
转 $\boldsymbol{4\pi}$ 才能还原， 被双群所描述。

Visualizing the hydrogen electron orbitals – from wiki

- Probability densities through the xz-plane for the electron at different quantum numbers (ℓ, across top; n, down side; $m = 0$)
- The image to the right shows the first few hydrogen atom orbitals (energy eigen-functions). These are cross-sections of the probability density that are color-coded (black represents zero density and white represents the highest density).
- The angular momentum (orbital) quantum number ℓ (s means $\ell = 0$, p means $\ell = 1$, d means $\ell = 2$).
- The main (principal) quantum number n (= 1, 2, 3, ...) is marked to the right of each row.
- the cross-sectional plane is the xz-plane (z is the vertical axis). The probability density in three-dimensional space is obtained by rotating the one shown here around the z-axis.

- The "ground state", i.e. the state of lowest energy, in which the electron is usually found, is the first one, the 1s state (principal quantum level $n = 1$, $\ell = 0$).

- Black lines occur in each but the first orbital: these are the nodes of the wave function, i.e. where the probability density is zero. (More precisely, the nodes are spherical harmonics that appear as a result of solving Schrödinger's equation in polar coordinates.)



Probability densities through the xz-plane for the electron at different quantum numbers
(ℓ, across top;   n, down side; m = 0)