量子力学中的对称性

作者：周国伟（1100090404）、郑泽川（1200011602）、叶伟成（1200011384）

摘要：本文利用群论的方法，详尽研究了物理学中的各种对称性，并对对称性与守恒量、简并度、能级分裂的关系做了较详尽的讨论。另外给出了 Coulomb 势和谐振子势的动力学对称性的阐述 ，以及给出了详尽的群论知识附录。

关键词：对称性、群论、守恒量、简并度、能级分裂

一、引言

对称性早在经典物理中就已经有人研究，但对称性真正成为物理学日常工作的语言，还是在量子力学建立以后。对称性似乎是一种十分抽象而模糊的概念，例如我们可以直观地认为等边三角形比普通的等腰三角形更加对称，但我们很难用直观的数学去表示出来。而群论在这里就发挥了重要的作用。群论把抽象的对称性具体到了一个一个的“对称变换”这样的元素上面，并在这上面定义了代数结构。这样，我们就能够把抽象的对称性利用这种具体的代数结构加以研究，大大增加了我们手中的数学工具。1930 年左右，Wigner 在他的名著《群论及其在原子光谱的量子力学中的应用》这本书中详细阐述了群论与量子力学之间的密切联系，群论的重要性日益凸显了出来。因此，本文主要通过群论来阐述对称性。

在本文的第二部分，我们首先用数学的语言阐明什么是对称性。第三部分，我们论述了对称性与守恒量之间的关系。第四部分，我们讨论了对称性与简并度之间的关系。第五部分，我们阐述了对称性的破坏将导致的能级分裂。第六部分，我们列举了一些常见的几何学对称系统，并分析了对称性对于系统的影响。第七部分，我们给出了 Coulomb 势及谐振子势的高度简并的解释。在附录中，我们整理了群表示论及 $SO(3)$ 群的一些基本知识，便于读者快速入手。

二、对称性的数学表达

在物理学中，人们习惯用群论描述体系的对称性，所谓一个对称变换，即变换前后，遵循相同的力学规律。

Schrödinger 方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$$

在某种对称性变换下：$\psi \to \psi' = Q\psi$

由力学规律的不变性，可知 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi' = H\psi'$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Q\psi = HQ\psi$$

$$\therefore i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = Q^{-1}HQ\psi$$

$$\therefore [Q,H]=0$$

这就是体系满足对称性变换的数学表达式。

显然，所有满足上式的变换组成一个群，就是体系的对称性群。

我们现在简要探索一下这个群的一些简单常用的性质。

有对称性的定义，必有：

$$|(\psi,\phi)| = |(\psi',\phi')|$$

任意两个波函数变换前后内积的模不变。

由此，Wigner 曾经得出：对称变换只能是幺正变换，或反幺正变换。

对于连续变换，可以证明，只能是幺正变换。离散变换既可能是幺正变换，也可能是反幺正变换（比如说时间反演）。

三、对称性与守恒量

守恒量揭示了系统的一种不变性，人们很容易将守恒量与对称性联系起来。

可以证明：一个体系有一定的守恒量，一定有与该守恒量对应的对称性，反之则不一定成立，比如时间反演对称性，并不会导致什么守恒量。

Wigner 曾证明过更强的结论：对于幺正变换对称性，的确存在相应的守恒量，但对于反幺正变换对称性，并不存在对应的守恒量。

对于守恒量的数目，有如下结论：

（1） 对称性群中并不是每个元素都对应着有价值的守恒量，也并不是每个元素对应的守恒量都是独立的。
（2） 设体系的对称性群为连续群 G，如为 r 阶 Lie 群，对应 r 个生成元，即体系独立守恒量的数目为 r。但这 r 个守恒量不一定都对易。

比如说系统拥有 $SO(3)$ 对称性，则系统的 Hamiltonian 必然与 $SO(3)$ 的生成元，即角动量算符对易，也就是说，系统的角动量守恒。

四、对称性与简并度

设能级 E 是 m 重简并的，对应对称变换群 G 的表示 D（G）。若此表示是群 G 的不可约表示，则此简并称为正则简并；若是可约表示则称为偶然间并。通常认为，如果群 G 包括了系统哈密顿量 H 的全部对称变换，能级只能是正则简并。偶然简并常常与系统尚未发现的对称性有关。但例外的情况是，哈密顿量中有一些参量的变化会导致一些本来不处于简并态的能级简并，这种情况是真正的偶然间并。

由群表示论知，体系的简并度与群相应不可约表示的维数密切相关，故如果体系的对称性群为 Abel 群，即每个不可约表示都是 1 维的，那么能级不会出现简并，例如 1 维的谐振子。若体系对称群是非 Abel 群，则能级一般来说是简并的。

下面我们来具体分析一下中心势场的简并度。中心势场的对称性群为 $SO(3)$,对于其不可约表示 $D^j(G)$，矩阵的维数为 $(2j+1)$，也就是说能级的简并度为 $(2j+1)$，这与我们算出的大部分中心力场势的简并度是吻合的。两个例外是 Coulomb 势与谐振子势它们简并波函数空间对应的群表示是可约的,暗示着这两种势存在更高的对称性,我们将在部分详细讨论之。

我们再来同样分析一下 Stark 效应与 Zeeman 效应。

对于 Stark 效应，当加上沿 z 方向的电场后，系统的 Hamiltonian 为：

$H = p^2/2m + V(r) + e\varepsilon z$，

$SO(3)$对称性被破坏，所以能级必然分裂。由于还具有沿 z 方向的旋转不变性，并且还具有沿通过 Z 轴平面的镜面对称性，并且

$[\sigma_z, l_z] \neq 0$

故系统的对称性群为非 Abel 群，能级简并不会完全解除，出现 2 重简并。

相反对于 Zeeman 效应，Hamiltonian 为：

$$H = p^2/2m + (eB/2\mu c)l_z + (e^2B^2/8\mu c^2)(x^2+y^2) + V(r)$$

对称性群为$SO(2)$,为一 Abel 群，能级简并完全解除。

在下面一部分，我们将更加定量的分析能级简并的分裂。

五、对称性的破坏

为了更加透彻的分析对称性的破坏，我们要引入不可约张量算符。

在量子力学中，常用到的许多算符，都是 SO(3)群的不可约张量算符。如 Hamiltonian $H = p^2/2m + V(r), r, r^n$都是 0 秩不可约张量，也称为标量算符；坐标$\vec{r}$，动量$\vec{p}$和磁偶极矩$\vec{\mu}$是 1 秩不可约张量，也称为向量算符；而电四极矩算符$\vec{D}$是 2 秩不可约张量等。

定义：设$2k+1$个算符$\{T_q^k\}(q = k, k-1, \cdots, -k+1, -k)$，在空间转动$R(\alpha,\beta,\gamma)$下，按 SO(3)群的不可约表示$D^k(\alpha,\beta,\gamma)$变换：

$$R(\alpha,\beta,\gamma)T_q^k R^+(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_{q'} D_{q'q}^k(\alpha,\beta,\gamma)T_{q'}^k$$

则称这组算符$\{T_q^k\}$是 SO(3)群的 k 秩不可约张量，T_q^k是这不可约张量的 q 分量。

不可约张量算符还有一个等价的定义：

$$J_\pm = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x \pm iJ_y)$$
$$J_0 = J_z$$

有对易式：

$$[J_0, T_q^k] = qT_q^k$$
$$[J_\pm, T_q^k] = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{(k \pm q)(k \mp q+1)}T_{q\pm1}^k$$

我们经常会遇到求不可约张量算符矩阵元的问题。Wigner-Eckart 定理，将使不可约张量算符矩阵元的计算大为简化。

设$|ajm\rangle$是量子力学的一个态，它是角动量J^2, J_z的共同本征态，a是其它简并量子数。

$$J^2 | ajm >= j(j+1) | ajm >$$
$$J_z | ajm >= m | ajm >$$

Wigner-Eckart 定理：设$\{T_q^k\}$为不可约张量算符，则矩阵元满足

$$< a' j' m' | T_q^k | ajm >= (-1)^{2k} \frac{< jmkq | j' m' >}{\sqrt{2j'+1}} \times < a' j' \| T^k \| aj >$$

即矩阵元对分量指标的依赖，完全体现在 SO(3)群的 CG 系数$< jmkq | j' m' >$中。

$< a' j' \| T^k \| aj >$称为约化矩阵元，它与分量指标m, q, m'无关。

回到能级分裂问题现在引入微扰相互作用$H_1(x)$,设它和原始哈密顿量$H_0(x)$有相同的对称性，称为对称微扰，即在对称变换中两个哈密顿量都保持不变：

$$[P_G, H_0(x)] = 0$$
$$[P_G, H_1(x)] = 0$$

首先，用上法把$H_0(x)$的本征波函数组合成属于对称变换群 G 确定的不可约表示确定行的函数$\psi_\mu^j(x)$

$$P_R \psi_\mu^j(x) = \sum_\nu \psi_\nu^j(x) D_{\nu\mu}^j(R)$$

在P_R作用下，$H_1\psi_\mu^j(x)$具有相同的变换性质：

$$P_R[H_1(x)\psi_\mu^j(x)] = H_1(x)P_R\psi_\mu^j(x) = \sum_\nu [H_1(x)\psi_\nu^j(x)]D_{\nu\mu}^j(R)$$

这一性质称为对称微扰不改变波函数的变换性质。

由不可约张量算符的定义可知，$H_1(x)$为不可约张量算符，而能量一级修正由H_1在H_0的本征函数中的矩阵元决定。对正则简并，有

$$<\psi_\nu^j(x)|H_1(x)|\psi_\mu^j(x)>=\delta_{\nu\mu}(\Delta E^j)$$

能级修正ΔE^j与μ无关，能级发生平移但不分裂，即对称微扰不能解除能级简并。

对偶然简并，先假定能级对应的可约表示中包含的各不可约表示互不等价。属同一不可约表示各行的函数，能级移动相同，能级不会分裂，但属两个不等价不可约表示的函数，能级移动一般不相等，于是能级分裂了。在对称微扰下，偶然简并的能级可以分裂，但最多分裂到正则简并。

对于非对称微扰，显然引入的微扰破坏了系统的对称性，系统的对称性群变为以前的一个子群，这样能级必然分裂。最终将分裂到新的群所确定的简并度。

六、几何学对称性

1、宇称变换对称性

宇称，或空间反演变换，对系统的坐标作用下，是系统的态函数从原本的$\Psi(x)$变为$\Psi(-x)$。从这个定义出发，定义宇称幺阵算符π。

$$\pi\Psi(x) = \Psi(-x)$$

且

$$\langle\Psi(x)|\pi^+\hat{x}\pi|\Psi(x)\rangle = -\langle\Psi(x)|\hat{x}|\Psi(x)\rangle$$

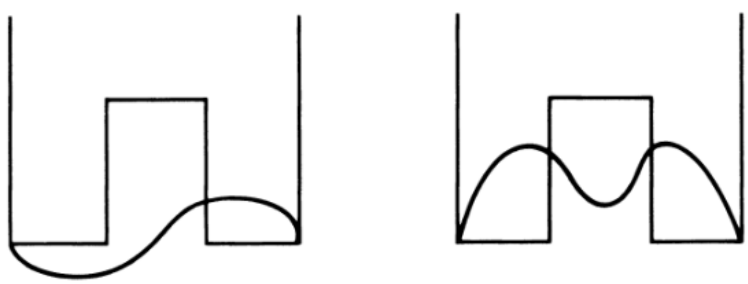
可以得知$\pi^+\hat{x} + \hat{x}\pi = 0$，即$\pi$与$\hat{x}$是反对易的。

另外，设Ψ为π的本征态，由于$\pi^2\Psi(x) = \Psi(x)$，因此，π的本征值为± 1。对于宇称本征态Ψ，在π的作用下，有两种结果，即Ψ及$-\Psi$。我们称前者为偶宇称，后者为奇宇称。

另外，对于非简并的系统，若其 Hamiltonian 为$\hat{H}$，且$\left[\hat{H},\pi\right]=0$，可以推出若$\Psi_n$为系统能量本征太，本征值为$E_n$，那么$\Psi_n$就是是$\pi$的本征态。从直观上了解，由于处于能量本征值$E_n$的态只能有一个，因此只能出现的情况是$\pi\Psi_n=\pm\Psi_n$。

考虑一维谐振系统，对于其基态$|0\rangle$，由于是高斯波函数，因此其宇称是偶的。对于第 n 个激发态，有$|n\rangle=(\hat{a}^{+})^{n}|0\rangle$。基于$\hat{a}^{+}$是奇宇称的，因此$|n\rangle$的宇称为$(-1)^n$。

对于对称双势阱，如图所示，设左边奇宇称的能量本征态为$|A\rangle$，右边的偶宇称态为$|S\rangle$。



Anti-symmetric IA>　　Symmetric IS>

先让中间的势垒趋 0，可以看出$E_A>E_S$，设：

$$|L\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle-|A\rangle)$$
$$|R\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle+|A\rangle)$$

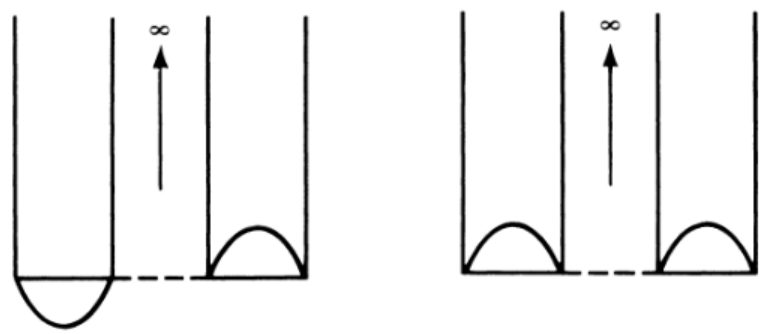
由于$|L\rangle$态及$|R\rangle$态都不是系统本征态，因此其随时间变化为：

$$|L(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle e^{-\frac{iE_St}{\hbar}}-|A\rangle e^{-\frac{iE_At}{\hbar}})$$
$$|R(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|S\rangle e^{-\frac{iE_St}{\hbar}}+|A\rangle e^{-\frac{iE_At}{\hbar}})$$

因此系统是在$|L\rangle$态及$|R\rangle$态之间震荡其角频率为：

$$\omega=\frac{E_A-E_S}{\hbar}$$

从隧穿角度看，可以把粒子当作是在势阱中来回隧穿。若让中间的势垒趋 0，如图所示，可以发现$|A\rangle$态及$|S\rangle$态是简并的，由于隧穿不可能发生，因此，$|L\rangle$，$|R\rangle$皆为本征态，因此这个可以看作是简单的宇称破缺导致简并的例子。



这并不是一个抽象的例子，自然界中的许多分子都可以抽象成为这种模型。对于 NH3 氨分子来说，三个氢原子对这个氮原子的作用就可以等效为这样的一个双势阱。我们用右手定则定义分子的旋度，也就是说右手比划出分子自旋的方向，如果氮原子在自旋方向上，则称分子为“右旋”，否则称分子为左旋。那么可以测得氨分子并没有旋度的偏好，它从$|L\rangle$态到$|R\rangle$态的频率大约为 24,000 Hz。有趣的是，自然界中有一些物质，例如糖，却有着对某种旋度的偏好。这其中具体的物理化学机理尚不得而知。

2、平移变换对称性

系统在平移变换群下保持不变，下面证明平移变换的生成元为动量算符：

设平移变换$\tau(a,b,c)$，且$\tau(a,b,c)(x,y,z)^T=(x+a,y+b,z+c)^T$；

根据生成元的定义：$I_j=-i\left.\dfrac{\partial(\tau(a,b,c)x)_a}{\partial\alpha_j}\right|_{\alpha=0}\dfrac{\partial}{\partial x_a}=-i\dfrac{\partial}{\partial x_j}=p_j$

故动量算符为生成元。

故动量算符与系统 Hamiltonian 对易，即动量守恒。

3、空间旋转对称性

系统在$SO(3)$群下保持不变，下面证明$SO(3)$变换生成元为角动量算符：

设$SO(3)$群元素 A，则$(Ax)_a=\{\delta_{ab}-i\alpha_d(T_d)_{ab}\}x_b=x_a-\alpha_d\varepsilon_{dab}x_b$

$$I_j=-i\varepsilon_{dba}x_b\frac{\partial}{\partial x_a}=L_j$$

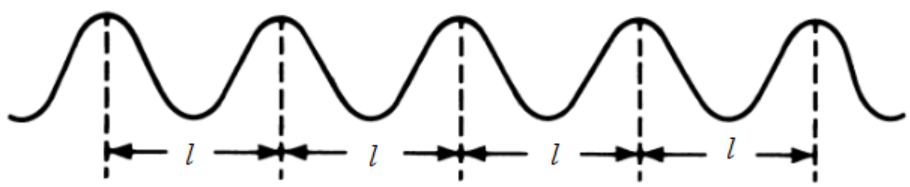
故角动量算符为生成元。

故角动量算符与体系 Hamiltionian 对易，即角动量守恒。

4、Lattice 平移对称性

对于平移对称操作，根据定义有：

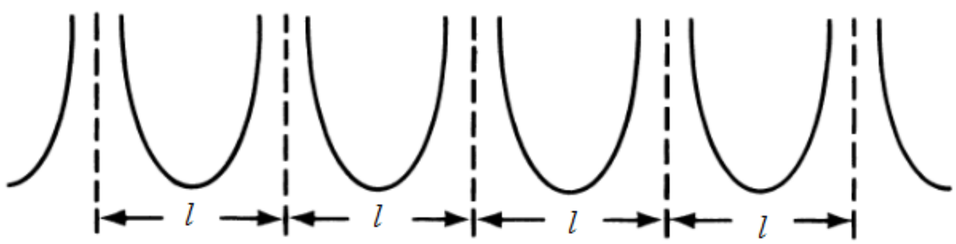
$$T(l)^{+}\hat{x}T(l) = \hat{x} + l$$



由于粒子是处于周期势场$V(x+l) = V(x)$，因此$T(l)^{+}VT(l) = V$，再加上粒子的动能对平移操作不变，因此，可以得出粒子的 Hamiltonian 与$T(l)$是可同时对角化的，即：

$$\left[\hat{H}, T(l)\right] = 0$$

由于$T(l)$不是 Hermitian，因此$T(l)$的本征值会是模为 1 的复数。



考虑粒子在周期势场中的第 n 个区域处于基态$|n\rangle$，设势场中的势垒趋无穷，因此$|n \pm 1\rangle = 0$。加上周期势场是无限大尺度，可以得知粒子的基态是简并（因为粒子可以处于任何区域的基态中基态）。对于平移算符$T(l)$，有

$$T(l)|n+1\rangle = |n\rangle$$

显然的$|n\rangle$不是$T(l)$的本征矢。考虑线形组合：

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}\,|n\rangle$$

因此，$T(l)|\theta\rangle = T(l)\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}\,|n\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(n-1)\theta}\,|n\rangle = e^{-i\theta}|\theta\rangle$。

但是，一般情况下势场中的势垒不是无穷，粒子能隧穿到其他区域，因此$|n'\rangle \neq 0$。基于隧穿，$\langle n'|\hat{H}|n\rangle \neq 0$，因此$\hat{H}$的非对角元素也不等于 0。这里可以做个近似，即粒子的波函数只能隧穿到左右两端，

$$\langle n'|\hat{H}|n\rangle \neq 0 \ , \quad n' = n, n \pm 1$$

设

$$\langle n \pm 1|\hat{H}|n\rangle = \Delta$$

则有

$$\hat{H}|n\rangle = E_0|n\rangle + \Delta|n+1\rangle + \Delta|n-1\rangle$$

这种情况下$|n\rangle$不再是$\hat{H}$的本征矢。同样考虑线性组合

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}\,|n\rangle$$

可以得到

$$\hat{H}|\theta\rangle = E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}\,|n\rangle - \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}\,|n+1\rangle - \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}\,|n-1\rangle$$
$$= (E_0 - 2\Delta\cos\theta) \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}\,|n\rangle$$

这时，粒子的能量本征值出现展宽，其取值在$E_0 \pm 2\Delta$之间，这就是著名的能带结构。

七、动力学对称性

1、Coulomb 势的动力学对称性

众所周知，Coulomb 势的能级简并度为n^2，比上面第四部分通过几何学对称性预言的简并度$(2l+1)$要高，这预言了 Coulomb 势有比其余大部分中心势场更高的对称性。在这一部分，我们将分析为什么 Coulomb 势拥有比其它中心力场更高的对称性，并只通过代数学的方法，应用对称性分析，给出 Coulomb 势的能级及简并度。

在经典力学中有一个力学量，用于描述天体运动，称为 Runge-lenz 矢量，其表示形式为：

$$\vec{M} = \frac{\vec{p}\times\vec{L}}{\mu} + V(r)\vec{r}$$

其中μ为质量，$\vec{p}$为动量，$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$为角动量。对于与库仑势有相同形式的万有引力$V(r)=-\frac{k}{r}$，$\vec{M}$是守恒量，其大小为$k\epsilon$（$\epsilon$为天体轨道的离心率），方向指向椭圆轨道的近日点。

在量子力学中，相应的 Runge-lenz 矢量经过正则量子化后算符为：

$$\hat{M}=\frac{\hat{p}\times\hat{L}-\hat{L}\times\hat{p}}{2\mu}+V(r)\hat{r}$$

而 Coulomb 中心势场 Hamiltonian 为：

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r}$$

可以证明，$[\vec{M},\hat{H}]=0$，也就是说，在 Coulomb 势中，$\vec{M}$依然为守恒量。

上面曾经提到，守恒量必定存在与之相对应的对称性，那么，新的对称性是什么呢？对于三维中心势场，我们已经得到其对称 Lie 群生成元对易关系：

$$[L_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$$

将$\vec{M}$矢量加入其中，可以证明：

$$[M_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}M_k;$$

$$[M_i,M_j]=-i\hbar\varepsilon_{ijk}\frac{2}{m}HL_k$$

很遗憾，我们发现，算符的对易式不是封闭的，无法构成 Lie 群的生成元。但我们如果在 H 的一个本征值对应的子空间中分析，那么我们可以用 E 替代 H，这个对易式就是封闭的了。

进一步，我们令$\vec{N}=(-\frac{m}{2E})^{1/2}\vec{M}$，可以得到对易式：

$$[L_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$$

$$[N_i,L_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}N_k$$

$$[N_i,N_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$$

熟悉$SO(N)$ Lie 代数结构的人应该可以看出，这就是其对易关系，更详细一点的说，

令：
$$\begin{aligned}
L_3&=T_{12}=x_1p_2-x_2p_1\\
L_2&=T_{31}=x_3p_1-x_1p_3\\
L_1&=T_{23}=x_2p_3-x_3p_2\\
T_{14}&=x_1p_4-x_4p_1=N_1\\
T_{24}&=x_2p_4-x_4p_2=N_2\\
T_{34}&=x_3p_4-x_4p_3=N_3
\end{aligned}$$

与$SO(N)$ Lie 代数对易关系比较，

$[T_{ab},T_{cd}]=-i\{\delta_{bc}T_{ad}+\delta_{ad}T_{bc}-\delta_{bd}T_{ac}-\delta_{ac}T_{bd}\}$（规定式中第一个指标比第二个小）

$SO(N)$阶为$N(N-1)/2$，可知 Coulomb 势对称性为$SO(4)$。

下面，我们给出其简并度 3 大小的一个解释：

定义算符：

$$\vec{I}=(\vec{L}+\vec{N})/2$$

$$\vec{K}=(\vec{L}-\vec{N})/2$$

易得对易式：

$$[I_i,I_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}I_k$$

$$[K_i,K_j]=i\hbar\varepsilon_{ijk}K_k$$

$$[I_i,K_j]=0$$

即它们为独立的角动量算符（从这里我们可以看出，其对称性群亦可以表示为$SU(2)\otimes SU(2)$，与$SO(4)$局域同构）。

它们具有性质：

$$\vec{I}^2+\vec{K}^2=\frac{1}{2}(\vec{L}^2-\frac{m}{2E}\vec{M}^2)$$

$$\vec{I}^2-\vec{K}^2=0$$

对本征值为 E 的态矢量作用之后，可得：

$$E=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(2k+1)^2}(k=0,1/2,1,,,,,)$$

与玻尔能级公式对照，$n=2k+1$。

简并度为$(2i+1)(2j+1)=n^2$。

2、各向同性谐振子的动力学对称性

同样的，我们来分析各向同性谐振子势。

考虑一维谐振子势（$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$）中运动的粒子，其的本征能量为$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$。把粒子的 Hamiltonian 算符可以写成：$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^+-\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\right)$。其中存在算符$\hat{a}$及$\hat{a}^+$分别为声子湮灭和产生算符，其表达式为：

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\hat{x}+i\frac{1}{\sqrt{\mu\hbar\omega}}\hat{p}_x\right]$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{\mu\omega}{\bar{h}}}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{\mu\bar{h}\omega}}\hat{p}_x\right]$$

若Ψ_n为能量本征态，算符$\hat{a}$及$\hat{a}^+$的作用分别把Ψ_n变为Ψ_{n-1}及Ψ_{n+1}，因此 Ψ_n及Ψ_{n-1}的能量本征值相差$\bar{h}\omega$。

三维的情况，设谐振子势是球对称（$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2+y^2+z^2) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$）。把粒子的 Schrodinger 方程沿直角坐标系作分离变量分解，可以得到粒子每个方向的运动是独立的。每个方向分量的 Schrodinger 方程相当于一维谐振子的情况，因此各个方向的能量本征值为$E_{n_i} = \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\bar{h}\omega$。粒子的总能量为：

$$E = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\bar{h}\omega$$

令$n = n_x + n_y + n_z$，则可以总结出三维对称谐振子势也是高度简并，与库仑势相同。

对于每个方向，都有相互独立的声子湮灭和产生算符，因此有三组声子算符（$(\hat{a}_x, \hat{a}_x^+)$，$(\hat{a}_y, \hat{a}_y^+)$，$(\hat{a}_z, \hat{a}_z^+)$）。

推广到对 k 维情况，Hamilton 量可以表示为（取自然单位）：

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k}(x_j^2 + p_j^2) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k}(x_j + ip_j)^+(x_j + ip_j) + \frac{k}{2} \\ &= \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k}|x_j + ip_j|^2 + \frac{k}{2} \end{aligned}$$

故 H 可视为 k 维复空间的一个矢量$(x_j + ip_j)$的模方。

所以$H' = UHU^{-1} = H$

即$[U, H] = 0$。

故各向同性谐振子的动力学对称性为U_k。

与一维谐振子类似，引入升、降算符

$$\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{\mu\omega}{\bar{h}}}\hat{x}_j + i\frac{1}{\sqrt{\mu\bar{h}\omega}}\hat{p}_j\right] \quad \hat{a}_j^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{\mu\omega}{\bar{h}}}\hat{x}_j - i\frac{1}{\sqrt{\mu\bar{h}\omega}}\hat{p}_j\right]$$

容易证明它们依然满足对易关系 $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}$，其中$\mathrm{i}, \mathrm{j} = 1, 2, \ldots, \mathrm{k}$

与 Bose 子的产生和湮灭算符的基本对易式相同。于是我们可以得到

$$\mathrm{H} = \sum_{i=1}^{k}\hat{a}_i^+\hat{a}_i + \frac{k}{2}$$

于是我们可以得到，能量的本征值及本征态为

$$E_N = N + \frac{k}{2}$$

$$|n_1 n_2 \dots n_k\rangle = |n_1\rangle|n_2\rangle \dots |n_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!\, n_1! \dots n_k!}} \hat{a}_1^{+n_1} \hat{a}_2^{+n_2} \dots \hat{a}_k^{+n_k} |0\rangle$$

$$\mathrm{N} = n_1 + n_2 + \cdots + n_k = 0,1,2,\dots$$

而能级的简并度$f_N = \frac{(N+k-1)!}{N!(k-1)!}$，这就是各向同性谐振子幺正对称性的表现

附录　群论、有限群表示论及其他

在论文的本部分，我们想扼要地阐述一下群论，特别是有限群表示理论的相关数学概念和定理，让读者对群论这种强大的数学工具有一个感性的认识和理解。

（一）群论的基本概念

定义 1.1　设 G 是一个集合，在 G 上给定一个二元运算，称之为乘法运算，即给定一个映射$\mathrm{G}\times\mathrm{G}\rightarrow\mathrm{G}$，使其满足下列条件：

1. 封闭性：对任意两个元素g_i，$g_j\in G$，有
$$g_ig_j\in G$$
2. 满足乘法结合率：对任意三个元素g_i，$g_j,g_k\in G$，有
$$(g_ig_j)g_k=g_i(g_jg_k)$$
3. 存在一个（左）单位元$\mathrm{e}\in\mathrm{G}$，对所有$\mathrm{g}\in\mathrm{G}$满足
$$\mathrm{eg}=\mathrm{e}$$
4. 对每个元素$\mathrm{g}\in\mathrm{G}$，都存在与之对应的一个（左）逆元$g^{-1}\in\mathrm{G}$，满足
$$g^{-1}\mathrm{g}=\mathrm{e}$$

则称集合 G 在所给的运算下构成群，这个二元运算成为群的乘法，定义中的条件称为群的公理。如果一个集合在某个乘法下构成群，那么这四条公理都必须满足。需要指出的是，所谓群的乘法不一定是普通的乘法，可以是非常一般的二元运算。

需要指出的是，这样得到的左单位元与左逆元也是右单位元与右逆元，并且还是唯一的。因此可以把这两条改写成：

3. 存在一个单位元$\mathrm{e}\in\mathrm{G}$，对所有$\mathrm{g}\in\mathrm{G}$满足
$$\mathrm{eg}=\mathrm{ge}=\mathrm{e}$$
4. 对每个元素$\mathrm{g}\in\mathrm{G}$，都存在与之对应的一个（左）逆元$g^{-1}\in\mathrm{G}$，满足
$$g^{-1}\mathrm{g}=\mathrm{g}g^{-1}=\mathrm{e}$$

定义 1.2　群 G 所包含的元素数目如果是有限的，则称之为有限群，G 所包含的元素的数目称为群 G 的阶，记作$|G|$。如果包含的元素数目是无限的，则称之为无限群。

定义 1.3　群元 f 与 h 是群 G 的两个元素，若有元素$\mathrm{g}\in\mathrm{G}$使得$\mathrm{gf}g^{-1}=h$，则称元素 h 与元素 f 共轭。容易证明，共轭是一种等价关系，于是我们可以利用共轭关系为群 G 分类，群 G 的所有相互共轭的元素构成群 G 的一个类。

定义 1.4　设有两个群$\mathrm{G}=\{g_j\}$与$\mathrm{G}'=\{g_j{}'\}$。若存在一个映射$\mathrm{f}\colon\mathrm{G}\rightarrow\mathrm{G}'$，使得

$$\mathbf{f}(g_i)f(g_j)=f(g_jg_j)$$

则称这两个群具有同态关系，映射 f 为同态映射，简称同态。若映射还是 1-1 的，则同态同时是同构。

（二）有限群表示论

群表示论是群论中最重要的内容之一。在物理学应用中，对称群与所研究体系的对称变换紧密相关。体系的解构成线性向量空间，而我们的兴趣就在于将群的对称性与这个线性空间的对称变换联系在一起。

定义 2.1 如果存在从群 G 到作用在线性向量空间 V 上的算符群 $D_g(\mathrm{g}\in\mathrm{G})$ 的一个同态，则该算符群称为群 G 的一个表示，线性向量空间 V 的维数称为表示的维数。如果这一同态同时也是同构，则称该表示为忠实表示。

上述的概念似乎十分抽象，我们来取一个较为具体的例子说明一下。如果在 d 维向量空间 V 中选择一组基 $\{e_i,\mathrm{i}=1,2,\dots,\mathrm{d}\}$，$D_g$可以用 $\mathrm{d}\times\mathrm{d}$ 的矩阵来实现，具体为

$$D_g e_i=e_i^{'}=e_jD_{ji}(g),g\in G,i=1,2,\dots,d$$

其中用到了 Einstein 求和规则，即相同指标自动求和。

上式表明，向量空间 V 在算符 $D_g(\mathrm{g}\in\mathrm{G})$ 的作用下保持不变。即向量空间 V 是群 G 的不变空间。连续作用给出了

$$D_{g_1}D_{g_2}e_i=D_{g_1}e_jD_{ji}(g_2)=e_k(D(g_1)\mathrm{D}(g_2))_{ki}$$

而考虑到

$$D_{g_1g_2}e_i=e_\mathrm{k}D_{ki}(g_1g_2)$$

有同态关系 $D_{g_1}D_{g_2}=D_{g_1g_2}$ 可以得到

$$D(g_1)D(g_2)=D(g_1g_2)$$

可见，映射

$$\mathrm{g}\in\mathrm{G}\ \rightarrow D(g)\in\mathrm{G}$$

也是群 G 的同态。称矩阵集合 $\{\mathrm{D(g)},\mathrm{g}\in\mathrm{G}\}$ 为群 G 的一个矩阵表示。在物理学中所用的群表示大部分为矩阵表示，表示矩阵的维数即为表示的维数。这就把抽象的算符与具体的矩阵联系在了一起。

容易证明，对任何表示都有

$$\mathrm{D(e)=I,D}(g^{-1})=D(g)^{-1}$$

对于群 G 的一个特定表示的不变向量空间 V，这个空间的基 $\{e_i\}$是可以任意选取的，矩阵表示也是与空间的基的选取密切相关的。考虑负载同一表示 D_g 的两个不同表示 $D(g)$ 和 $D^{'}(g)$ 两组基 $\{e_i\}$ 和 $\{e_i^{'}\}$，考虑两组基之间的变换

$$e_i=e_j^{'}S_{ji}$$

其中矩阵 S 应该为非奇异矩阵

那么由 $D_g e_i=e_j D_{ji}(g)$ 可以得到

$$D_g e_i^{'}=e_j^{'}(\mathrm{SD}(g)S^{-1})_{ji}$$

即负载在另一组基的矩阵表示为 $\mathrm{SD}(g)S^{-1}$ ，考虑到这是同一表示的两个不同矩阵表示，于是我们有如下的定义：

定义 2.2 设 D(G) 是群 G 的一个 d 维表示，那么集合

$$\{\mathrm{SD}(g)S^{-1}，\mathrm{g}\in\mathrm{G}\}$$

也是群 G 的一个 d 维表示，称为 D(G) 的等价表示，其中 S 是一个 d 维非奇异矩阵

在定义中需要补充证明的一件事情是 $\mathrm{SD}(g)S^{-1}$ 确实是一个矩阵表示，证明过程希望读者自己完成。

由于存在无穷多的非奇异矩阵，也就存在着无穷多的等价表示，而他们给出的信息是相同的，所以我们只需要研究其中的一个就足够了。

定义 2.3 如果群 G 的表示 D(G) 可以通过相似变换化为

$$D(g)=\begin{pmatrix}D_1(g) & R(g)\\ 0 & D_2(g)\end{pmatrix},\mathrm{g}\in\mathrm{G}$$

则称 D(G) 为可约表示，否则称之为不可约表示。如果 $R(g)=0$ 则称之为完全可约表示。对于可约表示，我们有如下的定理

定理 2.1 对有限群，可约表示一定是完全可约的。

证明过程是构造一个非奇异矩阵

$$S=\begin{pmatrix} I_1 & C \\ 0 & I_2 \end{pmatrix}$$

其中矩阵 C 的定义为

$$\mathrm{C}=-\frac{1}{n}\sum_{\mathrm{g}\in\mathrm{G}} R(g)\,D_2(g^{-1})$$

具体过程略去。

而对于一个完全可约表示，我们可以把它 $D_1(g)$ 和 $D_2(g)$ 的直和，记为

$$D(G)=D_1(g)+D_2(g)$$

可以证明 $D_1(g)$ 和 $D_2(g)$ 也是群 G 的表示，而原来的不变空间已经被分解成了两个不变子空间的直和。

定义 2.4 设 D(G) 是群 G 的 d 维表示，定义

$$\chi(\mathrm{g})=\mathrm{Tr}\,\mathrm{D}(\mathrm{g})$$

称$\chi(\mathrm{g})$ 为群元 g 在表示 D(G) 中的特征标，显然有等价表示的特征标相同，而$\chi(\mathrm{e})=\mathrm{Tr}\,\mathrm{I}=\mathrm{d}$ ，其中 d 就是该表示的维数。

定义 2.5 如果表示矩阵 $\mathrm{D}(\mathrm{g}),\mathrm{g}\in\mathrm{G}$ 都是幺正的，那么称表示为幺正表示。

定理 2.2 任何表示都有等价的幺正表示。

证明方法是利用任何一个厄米矩阵都可以通过幺正变换对角化构造一个相似变换，具体过程略。

考虑到幺正表示具有的“保距”的性质，这个定理说明了幺正表示在表示理论中的特殊作用，也使我们在处理具体群表示理论的问题的时候，尽可能地化为幺正矩阵，利用幺正矩阵的性质尽可能地简化问题。例如下面我们所说的 Schur 引理，就利用了幺正矩阵的特殊性质。

定理 2.3（Schur 引理） 与某一不可约表示的所有矩阵对易的矩阵一定是一个常数矩阵。

证明的方法是将该对易的矩阵化成一个厄米矩阵，把表示化成幺正表示，利用这两类矩阵的特殊性质即可以轻松证明。将这个结论推广，我们可以得到：

定理 2.4（广义 Schur 引理） 设群 G 的两个不可约表示分别为$\{D^{(p)}(g)\}$ 和 $D^{(q)}(g)$，它们的维数分别为d_p和d_q，若存在一个$d_p \times d_q$维的矩阵 M，使得

$$D^{(p)}(g)M = MD^{(q)}(g)$$

定理 2.5 （广义正交定理） 设 $D^{(p)}(G)$ 和 $D^{(p)}(G)$ 是 n 阶群 G 的两个不等价不可约的幺正表示，维数分别为d_p和d_q。则下列正交关系成立：

$$\sum_{\mathrm{g}\in\mathrm{G}} D_{\mu\sigma}^{(p)*}(g) D_{\mu'\sigma'}^{(q)}(g) = \frac{n}{d_p} \delta_{pq} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

特别地，令$\mathrm{p} = \mathrm{q}$，$\mu = \mu'$，$\sigma = \sigma'$，得到

$$\sum_{\mathrm{g}\in\mathrm{G}} \left| D_{\mu\sigma}^{(p)}(g) \right|^2 = \frac{n}{d_p}$$

证明 定义矩阵

$$M = \sum_{\mathrm{g}\in\mathrm{G}} D^{(p)}(g) S D^{(q)}(g^{-1})$$

其中 S 是一个$d_p \times d_q$的矩阵。由重排定理可以得到

$$D^{(p)}(g)M = MD^{(q)}(g)$$

由广义 Schur 引理可以得到，若两个表示是不等价的，即$\mathrm{p} \neq \mathrm{q}$，则 M 一定是一个零矩阵；否则，M 必须是常数和单位矩阵的乘积，这样我们可以对 S 赋恰当的值而得到证明。

广义正交定理是群表示论中的一个非常重要的定理。为了更加清楚地理解这个定理，对于固定的$(\mathrm{p}, \mu, \sigma)$值，可以将

$$\left\{ \sqrt{\frac{n}{d_p}} D_{\mu\sigma}^{(p)}(g) \right\}$$

看成一个具有 n 个分量的向量$r^{(\mathrm{p},\mu,\sigma)}$，其中不同的群元依次对应了向量的不同的分量，不同的$(\mathrm{p}, \mu, \sigma)$值就对应了不同的向量。则上述方程可以写成向量的正交归一关系

$$r^{(\mathrm{p},\mu,\sigma)*} \cdot r^{(\mathrm{q},\mu',\sigma')} = \delta_{pq} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

而 n 维向量空间中彼此正交的线性独立向量数最多为 n 个。如果群 G 总共有 r 个彼此不等价的不可约幺正表示，则一共有

$$\sum_{p=1}^{r} {d_p}^2$$

个不同的向量，因此条件

$$\sum_{p=1}^{r} {d_p}^2 \leq n$$

一定成立。事实上，我们有如下定理。

定理 2.6 （Burnside 定理） 群 G 的所有不等价不可约表示的维数的平方和等于群的阶数。

要证明这个定理，一个直接的想法找出所有的不等价不可约表示，然后验证它们的维数的平方和等于群的阶数。幸运的是，我们可以找到这样的一组非常特殊而重要的表示，那就是所谓的正则表示。

由群的封闭性可知，如果将群 G 的 n 个群元看成是 n 维向量空间的基，即 $e_i = g_i(i = 1,2, \dots, n)$，同时将群元 g 看成作用在这个向量空间上的算符，即 $D_g = g(\mathrm{g} \in \mathrm{G})$,则算符对 G 的作用可写成

$$g g_i = \sum_{k=1}^{n} g_k D_{ki}^{(c)}(g)$$

其中正则表示矩阵可以定义为

$$D_{ki}^{(c)}(g) = \begin{cases} 1，如果 g g_i = g_k \\ 0，如果 g g_i \neq g_k \end{cases}$$

容易证明$D_g(\mathrm{g} \in \mathrm{G})$满足群 G 的同态关系，是群 G 的一个表示，称这个表示为群 G 的正则表示。

一般来说，正则表示是一个可约的表示，如何将它转化为不可约表示的直和，则是我们下面将要研究的内容之一。

定理 2.7 （特征标正交定理） 群 G 的不等价不可约表示的特征标满足正交关系

$$\frac{1}{n}\sum_{\mathrm{g}\in\mathrm{G}}\chi^{(p)*}(g)\chi^{(q)}(g)=\delta_{pq}$$

证明 由广义正交定理，并令$\mu=\sigma$，$\mu^{'}=\sigma^{'}$，对下标求和得到

$$\sum_{\mathrm{g}\in\mathrm{G}}\sum_{\mu\sigma}D_{\mu\mu}^{(p)*}(g)D_{\sigma\sigma}^{(q)}(g)=\sum_{\mathrm{g}\in\mathrm{G}}\chi^{(p)*}(g)\chi^{(q)}(g)=\frac{n}{d_p}\delta_{pq}\sum_{\mu\sigma}\delta_{\mu\sigma}\delta_{\mu\sigma}=n$$

由于同类元素的特征标相同，可以将求和改成

$$\frac{1}{n}\sum_{i\leq k}k_i\chi^{(p)*}(g_i)\chi^{(q)}(g_i)=\delta_{pq}$$

其中k_i是第 i 类所包含的元素数，同样，对于固定的 p，可以讲

$$\left\{\sqrt{\frac{k_i}{n}}\chi^{(p)*}(g_i)\right\}$$

看成一个具有 k 个分量的向量$r^{(\mathrm{p})}$，其中不同的类依次对应了向量的不同的分量，不同的不可约表示就对应了不同的向量。则上述方程可以写成向量的正交归一关系

$$r^{(\mathrm{p})*}\cdot r^{(\mathrm{q})}=\delta_{pq}$$

而 k 维向量空间中彼此正交的线性独立向量数最多为 k 个。如果群 G 总共有 r 个彼此不等价的不可约幺正表示，则一共有 r 个相互正交归一的向量，所以我们得到$\mathrm{r}\leq\mathrm{k}$。

实际上我们有：

定理 2.8 群 G 的不等价不可约表示的数目等于群的类数。

定理 2.6 和定理 2.8 给出了对于任意一个有限群，确定它的不等价不可约表示的数目的方法，是有限群表示中最为重要的两个定理。

考虑任何一个表示，把它写作不可约表示的直和

$$\mathrm{D}(\mathrm{g})=\sum_{\mathrm{j}}a_jD_j(g)$$

其中a_j是不可约表示$D_j(g)$的重数，由特征标正交定理可以知道

$$a_j = \frac{1}{|G|}\sum_{\mathrm{g}\in\mathrm{G}} \chi(\mathrm{g})\chi_j(g)$$

那么对于正则表示，我们可以发现，对于任何一个不等价不可约表示，我们都可以得到它的重数等于

$$a_j = \frac{1}{|G|}\sum_{\mathrm{g}\in\mathrm{G}} \chi(\mathrm{g})\chi_j(g) = d_j$$

于是我们得到了 Burnside 定理的证明，并且我们可以发现，正则表示中包含了所有的不等价不可约表示。

于是正则表示的特征标满足

$$\chi(\mathrm{g}) = \sum_{\mathrm{j}} \chi_j(e)\chi_j(g)$$

于是我们可以证明到另一个特征标的正交关系（特征标第二正交定理）

$$\frac{1}{n}\sum_{p} k_l \chi^{(p)*}([g_l])\chi^{(q)}([g_m]) = \delta_{lm}$$

其中k_l是第 l 类所包含的元素数，同样，对于固定的类$[g_l]$，可以讲

$$\left\{\sqrt{\frac{k_i}{n}}\chi^{(\mathrm{p})*}(g_i)\right\}$$

看成一个具有 k 个分量的向量$r^{(\mathrm{p})}$，其中不同的类依次对应了向量的不同的分量，不同的不可约表示就对应了不同的向量。则上述方程可以写成向量的正交归一关系

$$r^{(\mathrm{p})*}\cdot r^{(\mathrm{q})} = \delta_{pq}$$

类似于前面的特征标正交定理，我们可以得到$\mathrm{k} \le \mathrm{r}$，对于也就是说$\mathrm{r} = \mathrm{k}$，我们得到了定理 2.8 的证明。

特征标这种很好的正交性使得我们可以把特征标列成一个表格，横行是不同的类，纵行是不同的不可约表示，交叉的格子填上对应于不同的类与不同的不可约表示的特征标，于是我们得到了一个特征标表，它的横行与纵行两两正交，这样的特征标表可以很好地反应相应的群表示的性质。

（三）李群与旋转群

前面我们所讨论的群元素的数目都是有限的，而实际上，并不是所有的对称变换的数目都是有限的。例如三维空间的转动变换所构成的群就是一个无限群，我们称之为 SO(3)群。这样的群的群元素的数目不仅是无限的，而且还是不可列的，所以前面用到的许多处理的方法在这里是并不适用的。幸运的是，数学家发明了一套非常完善的群论的一个分支解决这个问题，这个分支被称为李群与李代数。而变换群 SO(3)与 SU(2)，则是在物理学中最常用的两种变换群。

在本文中，由于要牵扯到拓扑的定义与性质，我并不打算对李群与李代数下一个精确的定义。但是李群是一种满足“很好的”拓扑性质的群。所谓“很好的”拓扑性质，指的是群元的连续性、可微性可以被很好地满足。

定义 3.1 全体 n 维非平凡复矩阵构成的群称为一般复线性变换群，记作 GL(n,C)。

其中非平凡保证每个群元素都有逆元素，单位元素即为单位矩阵。这个所谓的一般复线性变换群是一个“最大的”线性变换群。而特殊地，我们有

定义 3.2 全体 n 维幺正矩阵构成的群称为幺正群，记作 U(n)。全体 n 维实正交矩阵构成的群称为实正交群，记作 O(n)。

可以看出，这两种群都被分成了不连通的两个部分，行列式为+1 的部分与行列式为-1 的部分。而取出行列式为+1 的部分，也就是保持变换的手征性不变，我们可以得到

定义 3.2 全体行列式为 1 的 n 维幺正矩阵构成的群称为幺正群，记作 SU(n)。全体行列式为+1 的 n 维实正交矩阵构成的群称为实正交群，记作 SO(n)。

而我们所想要在量子力学中重点讨论的，就是以上的几种群。特别地，对于 SO(3) 群，我们有 SO(3)群的每一个元素都可以用 $C_k(\psi)$ 来标记，其中 $k(\theta,\varphi)$ 为转动轴，ψ 为转角。我们也同样可以用理论力学课程中所学的欧拉角 $R(\alpha,\beta,\gamma)$ 来描述 SO(3)的每一个元素。

根据欧拉角的定义，

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=C_{z''}(\gamma)C_{y'}(\beta)C_z(\alpha)$$

根据 SO(3)群的元素性质进行变形，易得：

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=C_z(\gamma)C_y(\beta)C_z(\alpha)$$

将其表述为矩阵形式，可得：

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

SU(2)群是二维特殊幺正群：

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

其中 a，b 满足:

$$aa^*+bb^*=1$$

定义 SU(2)群到 SO(3)群的一个映射：

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

$$\begin{pmatrix} \cos\beta/2 & -\sin\beta/2 \\ \sin\beta/2 & \cos\beta/2 \end{pmatrix}\to C_y(\beta)$$

可以证明，这是一个同态映射，同态核为$E_{2\times2}$，$-E_{2\times2}$。

对于一个拓扑群，我们不仅仅想知道它的代数机构，我们还想知道它的拓扑结构。而对于李群来说，由于它具有非常好的拓扑性质，我们更加希望研究清楚它的微分结构，于是我们可以引进无穷小生成元与无穷小算子的概念。

定义 3.3 设 G 是一拓扑群，e 为它的单位元素。假定 e 的某一邻域$\mathrm{U}=\mathrm{O(e)}$与 r 维欧式空间包含原点的邻域$\mathrm{V}=\mathrm{O(e)}$上存在一拓扑映照，满足：

$$\varphi\colon \mathrm{V}\to\mathrm{U}，使\begin{cases} \varphi(0)=\mathrm{e} \\ \varphi(x)=\mathrm{g}=\varphi(x_1,x_2,\dots,x_r)\in\mathrm{O(e)} \end{cases}$$

$\{x_i\}$为点 x 在欧式空间中的左边，我们称$\mathrm{g}\in\mathrm{U}$，引入了坐标。现在设φ是一个解析函数，我们称 G 为一个局部解析李群。于是我们可以得到

$$\varphi(x)=\mathrm{g}=\varphi(x_1,x_2,\dots,x_r)=\boldsymbol{e}+\sum_{i=1}^{r}x_i\frac{\partial\boldsymbol{\varphi}}{\partial x_i}+\mathrm{O}(\mathrm{x}^2)$$

当$|x_i|$无限趋于 0 时，我们可以记为

$$\varphi(x) = \mathbf{g} = \mathbf{e} + \epsilon\mathbf{A}$$

可以验证，所有这些与 e 充分接近的群元素同样构成一个群，称为无穷小群。而只要讨论清楚无穷小群的结构，我们就可以讨论清楚与 e 连通部分的拓扑结构。我们还称这里的$\mathbf{A}_i = \left\{\frac{\partial\varphi}{\partial x_i}\right\}$为无穷小生成元，可以证明，无穷小生成元满足如下的对易关系

$$[A_l, A_m] = \sum_p C_{lm}^p A_p$$

其中C_{lm}^p称为结构常数

例如，对于 SU(2) 群，直接计算得，它的三个无穷小生成元分别为

$$\mathbf{A_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{A_2} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \mathbf{A_3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

即 Pauli 矩阵。对于 SO(3)群，它的三个无穷小生成元分别为

$$\mathbf{A_1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{A_2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{A_3} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

而可以证明，SO(3)群与 SU(2)群的无穷小生成元的对易关系均为

$$[A_i, A_j] = \epsilon_{ijk} A_k$$

可以看出，这两个群实际上具有相同的代数结构，可以看做是具有相同代数性质的两个不同表示的展示，我们一会儿可以证明，它们的李代数是同构的。另外值得注意的是，它们的对易关系与角动量的对易关系就相差一个系数，这暗示了 SO(3) 与角动量之间十分重要而深刻的关系。

（四）群表示的直积与 CG 系数

在研究复杂系统的问题时，常常出现多个子系统耦合的问题，因此有必要对 CG 系数进行较深入的研究

1、广泛意义下的 CG 系数

Clebsch-Gordan 系数（以下简称 CG 系数）主要描述由两个或多个系统耦合时波函数的线性关系。设合成系统由两个子系统组成，子系统有共同的对称变换群 G，波函数分别按群 G 不可约表示变换

$$P_R \psi_\mu^j(1) = \sum_P \psi_\rho^j(1) D_{\rho\mu}^j(R), \quad P_R \phi_\nu^k(2) = \sum_P \phi_\lambda^k(2) D_{\lambda\nu}^k(R)$$

合成系统的波函数是它们的乘积,$\Psi_{\mu\nu}^{jk}(1,2) = \psi_\mu^j(1)\phi_\nu^k(2)$,按直乘表示变换

$$P_R\Psi^{jk}_{\mu\nu}(1,2)=\sum_{\rho\lambda}\Psi^{jk}_{\rho\lambda}(1,2)[D^j(R)\times D^k(R)]_{\rho\lambda,\mu\nu}$$

$$[D^j(R)\times D^k(R)]_{\rho\lambda,\mu\nu}=D^j_{\rho\mu}(R)D^k_{\lambda\nu}(R)$$

用相似变换C^{jk}来约化直乘表示

$$(C^{jk})^{-1}[D^j(R)\times D^k(R)]C^{jk}=\bigoplus_J a_J D^J(R)$$

等式左面的级数称为 CG 级数，C^{jk}矩阵称为 CG 矩阵，矩阵元素$C^{jk}_{\mu\nu,JMr}$称为 CG 级数，其中 r 表示$D^j(R)$的重数大于一时，需要附加指标区分这些重矩阵。

这些 CG 系数把合成系统的波函数$\Psi^{jk}_{\mu\nu}(1,2)$合成属于不可约表示的波函数：

$$\Phi^J_{Mr}(1,2)=\sum_{\mu\nu}\Psi^{jk}_{\mu\nu}(1,2)C^{jk}_{\mu\nu,JMr}$$

$$P_R\Phi^J_{Mr}(1,2)=\sum_{M'}\Phi^J_{M'r}(1,2)D^J_{M'M}(R)$$

2、SO(3)群的 CG 系数

由于角动量的耦合是量子力学中最为常见的耦合形式，在量子力学中讨论的 CG 系数一般为角动量耦合的 CG 系数，也就是 SO(3)群的 CG 系数，所以，有必要说明一下 SO(3)群的 CG 系数

（1）SU(2)群的不可约表示

SU(2)群的全部不可约表示矩阵元可以表示为：

$$A^j_{\mu\nu}(u)=\sum_k\frac{(-1)^{k+\nu-\mu}\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!(j+\nu)!(j-\nu)!}}{k!(j-\nu-k)!(j+\mu-k)!(k-\mu+\nu)!}\times a^{j+\mu-k}a^{*j-k-\nu}b^k b^{*k-\mu+\nu}$$

由于其证明比较繁琐，我们略去，还可以证明这是幺正表示。

其中j为整数或半整数。

令$D^j(R_u)=A^j(\pm u)$，j为整数时，A^j为偶表示，故也是 SO(3)的不可约表示，当j为奇数时，A^j为奇表示，我们把这种差一个正负号的表示称为双值表示。

$$D^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=\sum_k \frac{(-1)^k\sqrt{(j+m')!(j-m')!(j+m)!(j-m)!}}{k!(j-m-k)!(j+m'-k)!(k-m'+m)!}\times e^{-im'\alpha}(\cos\beta/2)^{2j-m+m'-2k}(\sin\beta/2)^{2k-m'+m}e^{-im\gamma}$$

可以证明 j 取整数时，给出 SO(3) 全部不可约表示。

（2）CG 系数的结果

给出 SO（3）的全部不可约表示后，我们将其代入表达式，很幸运，在这种情况下，我们可以得到解析解：

$$S^{j_1 j_2}_{jmm_1m_2}=\delta_{mm_1+m_2}\times\sqrt{\frac{(2j+1)(j+j_1-j_2)!(j-j_1+j_2)!(j_1+j_2+-j)!(j+m)!(j-m)!}{(j+j_1+j_2+1)!(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!}}\times$$
$$\sum_k(-1)^{j_1-m_1+k}\frac{(j+j_1-m_2-k)!(j_2+m_2+k)!}{k!(j-m-k)!(j+j_1-j_2-k)!(k-j_1+j_2+m)!}$$

参考文献

【1】 *物理学中的群论基础（徐建军），清华大学出版社*
【2】 *物理学中的群论(马中骐)，科学出版社*
【3】 *群论（韩其智、孙洪洲）北京大学出版社*
【4】 *物理学中的群论（陶瑞宝），上海科学技术出版社*
【5】 *抽象代数基础（丘维声），高等教育出版社*
【6】 *量子力学（卷Ⅰ）（曾谨言），科学出版社*
【7】 *量子力学（卷Ⅱ）（曾谨言），科学出版社*
【8】 *高等量子力学，喀兴林，高等教育出版社*
【9】 *Modern Quantum Mechanics, Second Edition, J. J. Sakurai, Jim Napolitano, 世界图书出版社*