空间旋转在 Hilbert 空间中的表示

Spatial Rotations in Hilbert Space: Representations

角动量理论系列讲义, 第二篇: 旋转的幺正表示,Lie 代数表示与 SU(2) 双覆盖

RongYu

角动量理论系列讲义

2026.8.9

目录

导言 4

I 双覆盖: 从三维空间旋转到 SU(2) 6

1 从三维空间旋转到 Hilbert 空间旋转 7

1.1 物理空间, 轨道态空间与自旋空间 7

1.2 空间旋转的 Hilbert 空间表示 8

1.3 为什么要求这是群表示 9

2 双覆盖: 从 SO(3) 到 SU(2) 11

2.1 普通表示的限制 11

2.2 SU(2) 的定义 12

2.3 SU(2) 与 SO(3) 的联系 13

2.4 su(2) 与 so(3) 16

2.5 2π 与 4π 17

3 从 SU(2) 继承来的旋转算符性质 19

3.1 单位旋转 19

3.2 旋转的复合 19

3.3 逆旋转 20

3.4 正交性与幺正性 20

3.5 非交换性 21

3.6 连续旋转 21

II 旋转算符与生成元 23

4 Hilbert 空间中的无穷小旋转 24

4.1 恒等旋转附近 24

4.2 无穷小生成元 25

4.3 幺正性对生成元的限制 25

III Lie 代数表示与指数形式 28

5 从 su(2) 到 Hilbert 空间中的 Lie 代数 29

5.1 群表示诱导 Lie 代数表示 29

5.2 Lie 括号结构必须保持 30

5.3 Lie 群与 Lie 代数的对应 32

6 从生成元得到有限量子旋转 34

6.1 固定轴旋转 34

6.2 指数形式 34

6.3 轴角参数 35

6.4 Euler 角 35

IV 二维表示与总结 37

7 SU(2) 的特殊二维表示 38

7.1 二维表示空间 38

7.2 Pauli 矩阵 38

7.3 Pauli 矩阵与 su(2) 40

7.4 定义 S 型生成元 40

8 一般表示与二维表示的关系 42

8.1 同一个旋转群可以有不同表示 42

8.2 不同维数的表示 42

8.3 二维表示为什么特殊 43

9 第二篇总结 44

A 射影表示与双覆盖的严格表述 46

A.1 射影幺正表示与相位的严格定义 46

A.2 双覆盖的严格交换图 47

A.3 为什么 SU(2) 中没有相位 48

A.4 从 SO(3) 指数到 SU(2) 指数 49

A.5 得到 Hilbert 空间中的旋转算符 49

导言

上一篇《三维空间旋转与 SO(3)》把经典旋转本身研究透彻: 旋转是 $\mathbb{R}^3$ 上保持内积与取向的线性映射, 全体旋转构成三参数连续群 SO(3); 有限旋转可以写成轴角形式 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ 或 Euler 角形式, 其无穷小层面由三个生成元 G_1,G_2,G_3 描述, 生成元满足对易关系 $[G_i,G_j]=\varepsilon_{ijk}G_k$, 构成 Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$; 生成元经过指数映射重建有限旋转: $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)=\mathrm{e}^{\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{G}}$. 上一篇结尾提出了第二篇的问题: 把 SO(3) 通过群表示映射到量子力学的 Hilbert 空间后, 旋转矩阵、生成元、对易关系和指数形式分别会变成什么?

本篇默认物理系统同时具有轨道与自旋两类自由度: 量子态空间是轨道态空间与自旋空间的复合 $\mathscr{H}=\mathscr{H}_{\text{orb}}\otimes\mathscr{H}_{\text{spin}}$, 空间旋转同时作用于轨道坐标与自旋指标. 本篇的全部讨论 – 旋转算符, 生成元, 对易代数, 指数形式 – 都建立在这个完整空间上, 对轨道与自旋两类自由度同时成立; 至于哪一个生成元对应轨道、哪一个对应自旋, 是第三篇的主题.

本讲回答这个问题. 全篇沿着一条以双覆盖为起点的链

$$\begin{array}{|c|}\hline \text{SO(3)} \longrightarrow \text{双覆盖 SU(2)} \longrightarrow \text{群表示} \longrightarrow \hat{R} \longrightarrow \text{无穷小生成元} \longrightarrow \text{Lie 代数表示} \\ \longrightarrow \text{二维表示} \longrightarrow \text{Pauli 矩阵与 } S \\ \\ \text{双覆盖 (第 1–2 节)} \longrightarrow \text{继承性质与生成元 (第 3–4 节)} \longrightarrow \text{对易代数与指数形式 (第 5–6 节)} \longrightarrow \text{二维表示 (第 7–8 节)} \\ \hline \end{array} \tag{0.1}$$

组织如下. 第 1 节引入群表示的概念, 把空间旋转映为完整态空间上的幺正旋转算符. 第 2 节一开始就讨论双覆盖: 轨道部分的旋转可以由 SO(3) 的普通表示描述, 但自旋部分要求 $\hat{R}(\boldsymbol{n},2\pi)=-\hat{I}$ 的旋转结构, 无法作为 SO(3) 的普通单值表示出现; 为此引入 SU(2), 它是 SO(3) 的二对一双覆盖, 与 SO(3) 有相同的 Lie 代数, 使整数与半整数的旋转结构都能作为普通表示出现. 此后全篇的表示统一建立在 SU(2) 层面: 第 3 节逐项检查旋转算符继承自 SU(2) 的性质, 第 4 节由无穷小旋转引入三个自伴生成元, 第 5 节证明生成元的对易代数正是 $\mathfrak{su}(2)$ 的结构通过表示映射的结果, 第 6 节从生成元经指数映射恢复有限旋转算符. 第 7 节研究 SU(2) 的二维表示, 建立 Pauli 矩阵的纯数学性质并定义 S 型生成元; 第 8 节说明二维表示在不同维数表示中的地位. 第 9 节总结全篇的两个平行映射.

本讲讨论这些对象作为旋转的表示与生成元的数学结构; 轨道与自旋的物理内容 (本征

值, 测量, 角动量的物理解释) 是第三篇的主题. 但数学框架从一开始就容纳两者: 整数型结构 (经 π 降到 SO(3) 的普通表示) 对应第三篇的轨道角动量, 半整数型结构 (只存在于 SU(2) 层面) 对应第三篇的自旋.

Part I

双覆盖: 从三维空间旋转到 SU(2)

本部分引入群表示的概念, 然后一开始就讨论双覆盖: SO(3) 的普通表示中, 转 2π 的算符恒为恒等算符, 半整数自旋的旋转结构无法作为普通表示出现; 为此引入 SU(2), 它与 SO(3) 局部结构相同 (Lie 代数同构) 而全局结构不同 (二对一双覆盖), 使整数与半整数的旋转结构都能作为普通表示出现. 全篇的旋转表示统一建立在 SU(2) 层面.

内容概要

- 理解三维物理空间 $\mathbb{R}^3$, 轨道态空间 $\mathscr{H}_{\text{orb}}$ 与自旋空间 $\mathscr{H}_{\text{spin}}$ 三个层次: 完整态空间是复合空间 $\mathscr{H} = \mathscr{H}_{\text{orb}} \otimes \mathscr{H}_{\text{spin}}$, 旋转分别以旋转矩阵与旋转算符作用于其上.
- 掌握群表示的定义: 表示空间, 表示矩阵, 保持群乘法的群同态.
- 理解普通表示中 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, 2\pi) = \hat{I}$ 是必然的, 以及为何量子物理允许 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, 2\pi) = -\hat{I}$: 只研究 SO(3) 的普通表示, 理论只能适用于整数 (轨道) 角动量.
- 掌握 SU(2) 的定义与三参数结构, 二对一满同态及其核, $\mathfrak{su}(2) \cong \mathfrak{so}(3)$ 的同构, 以及 2π 与 4π 的转角周期.

1

从三维空间旋转到 Hilbert 空间旋转

1.1 物理空间, 轨道态空间与自旋空间

先把旋转作用的三个层次分清楚. 第一层是三维物理空间 $\mathbb{R}^3$: 它的元素是位置向量 $\boldsymbol{x}$, 旋转 $\boldsymbol{R} \in \mathrm{SO}(3)$ 作用在其上, 把向量按几何方式搬动: $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{R}\boldsymbol{x}$. 上一篇的全部内容, 从旋转矩阵到生成元, 都生活在这个空间里.

第二层是轨道态空间 $\mathscr{H}_{\mathrm{orb}}$: 无自旋粒子的波函数 $\psi(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle$ 所在的 Hilbert 空间. 旋转作用在轨道态上, 是把波函数的坐标搬动 (第三篇将详细展开). 第三层是自旋空间 $\mathscr{H}_{\mathrm{spin}}$: 粒子内部自由度所在的空间, 由离散的指标标记 (例如二分量旋量), 旋转会把这些指标互相混合. 本篇默认系统同时具有这两类自由度, 因此完整态空间是两者的复合:

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{\mathrm{orb}} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{spin}},$$

它的元素是量子态右矢 $|\psi\rangle$, 内积 $\langle\phi|\psi\rangle$ 给出测量概率 $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$. 量子力学中, 把整个物理系统旋转后, 量子态必须相应改变: 需要一个作用在完整空间 $\mathscr{H}$ 上的算符, 它同时作用于轨道坐标与自旋指标, 把态 $|\psi\rangle$ 变为转动后的态 $|\psi'\rangle$. 这个算符就是本篇研究的对象.

三个层次的结构完全不同: $\mathbb{R}^3$ 是实三维空间, 旋转是矩阵乘法; $\mathscr{H}_{\mathrm{orb}}$ 是 (一般无穷维) 的波函数空间; $\mathscr{H}_{\mathrm{spin}}$ 是有限维的内部空间. 空间旋转的量子理论, 就是在一一对应的意义上把 $\mathbb{R}^3$ 上的旋转结构" 翻译" 到完整空间 $\mathscr{H}$ 上. 这种翻译不是任意的: 它必须保持旋转的全部代数结构, 这正是群表示概念的内容.

1.2 空间旋转的 Hilbert 空间表示

Def. 1　群表示

设 G 是群, V 是域 F 上的向量空间, $\mathrm{GL}(V)$ 是 V 上全体可逆线性算符构成的群. 若映射 $\rho : G \to \mathrm{GL}(V)$ 保持群乘法:

$$\rho(g_1 g_2) = \rho(g_1)\rho(g_2) \qquad \text{对一切} g_1, g_2 \in G,$$

则称 ρ 为群 G 在线性空间 V 上的表示 (representation), 记作 (ρ, V); 称 V 为表示空间, $\dim V$ 为表示的次数. 若 V 是 Hilbert 空间且 ρ 取值在幺正算符之集 $\mathrm{U}(\mathscr{H})$ 中, 则称幺正表示.

表示论的全部要点是: 同一个群可以在不同的向量空间上" 扮演", 群元本身不变, 改变的是它作用的空间与它在该空间中的具体实现 (表示矩阵). 群 G 是被表示的群, 表示空间是 V, 群元 g 在 V 上的实现是线性算符 $\rho(g)$.

现在取 $G = \mathrm{SO}(3)$, 表示空间取完整态空间 $\mathscr{H} = \mathscr{H}_{\mathrm{orb}} \otimes \mathscr{H}_{\mathrm{spin}}$ (它同时承载轨道与自旋两类自由度):

Def. 2　空间旋转的表示

空间旋转的 Hilbert 空间表示是把每个旋转矩阵 $\boldsymbol{R} \in \mathrm{SO}(3)$ 对应到一个幺正算符 $\hat{R}(\boldsymbol{R}) \in \mathrm{U}(\mathscr{H})$ 的映射

$$\rho : \ \mathrm{SO}(3) \longrightarrow \mathrm{U}(\mathscr{H}), \qquad \boldsymbol{R} \longmapsto \hat{R}(\boldsymbol{R}),$$

满足 $\hat{R}(\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{R}_2) = \hat{R}(\boldsymbol{R}_1)\hat{R}(\boldsymbol{R}_2)$. 态在旋转下按 $|\psi\rangle \mapsto \hat{R}(\boldsymbol{R})\,|\psi\rangle$ 变换, $\hat{R}(\boldsymbol{R})$ 称为旋转算符.

这里最容易混淆的一点值得强调: 表示 ρ 不是把旋转矩阵 $\boldsymbol{R}$ 映射成一个量子态, 而是映射成作用在量子态上的线性算符. $\boldsymbol{R}$ 与 $\hat{R}(\boldsymbol{R})$ 的作用对象不同: $\boldsymbol{R}$ 作用于空间向量, $\hat{R}(\boldsymbol{R})$ 作用于态向量. 两者的联系是: $\hat{R}(\boldsymbol{R})$ 是 $\boldsymbol{R}$ 这个几何旋转在态空间中的实现.

一个提醒

把 $\boldsymbol{R}$ 与 $\hat{R}(\boldsymbol{R})$ 放在一起时, 时刻问自己: 它作用在哪个空间上? 是 $\mathbb{R}^3$ 中的向量, 还是 $\mathscr{H}$ 中的态 (轨道自由度还是自旋自由度)? 本篇的全部推导都建立在这个区分之上.

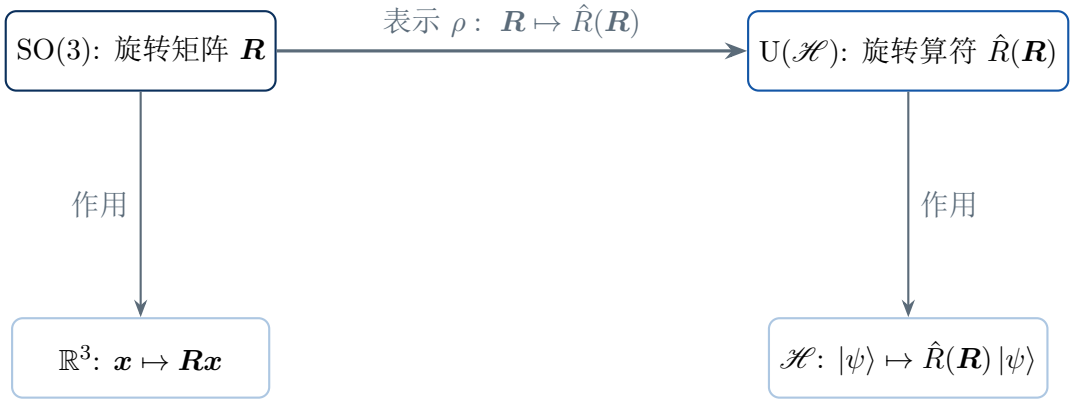


图 1: 旋转的两种实现: 同一个旋转在三维物理空间 $\mathbb{R}^3$ 中实现为矩阵作用 $\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{R}\boldsymbol{x}$, 在量子态空间 $\mathscr{H}$ 中实现为算符作用 $|\psi\rangle \mapsto \hat{R}(\boldsymbol{R})\,|\psi\rangle$; 表示 ρ 把两种实现联系起来.

1.3 为什么要求这是群表示

要求 $\boldsymbol{R} \mapsto \hat{R}(\boldsymbol{R})$ 保持群乘法, 不是数学上的洁癖, 而是物理的自洽性. 在空间中连续做两个旋转, 先 $\boldsymbol{R}_1$ 后 $\boldsymbol{R}_2$, 总效果是复合旋转 $\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{R}_1$ (第一篇, 乘积从右往左作用). 对应地, 量子层面必须先作用 $\hat{R}(\boldsymbol{R}_1)$ 再作用 $\hat{R}(\boldsymbol{R}_2)$, 总效果必须等于复合旋转对应的算符 $\hat{R}(\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{R}_1)$:

$$\hat{R}(\boldsymbol{R}_2)\hat{R}(\boldsymbol{R}_1) = \hat{R}(\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{R}_1).$$

如果这个等式不成立, 那么" 先转 90° 再转 90°" 这个物理过程在量子描述中就有两种不同的结果, 取决于我们是把它当作两次旋转的复合还是当作一次 180° 的旋转; 这显然不能接受. 因此表示条件不是外加的约束, 而是" 旋转算符描述的是旋转" 这一说法的数学定义.

由此建立本篇最重要的思想:

本篇的纲领

后面所有量子旋转的数学结构 – 旋转算符, 生成元, 对易代数, 指数形式 – 都是旋转群的结构通过表示映射进入 Hilbert 空间后的结果; 由于自旋自由度的存在, 这个群最终

取 SU(2) (第 2 节). 量子层面不会出现旋转群本身没有的结构.

最后补充幺正性的物理来源. 空间旋转保持量子态之间的物理可区分性: 转动前后的两对态, 其跃迁概率必须相同. 因此 $\hat{R}(\boldsymbol{R})$ 应保持内积, 即 $|\left\langle \hat{R}\phi \middle| \hat{R}\psi \right\rangle|^2 = |\langle \phi|\psi\rangle|^2$ 对一切态成立. 对线性算符, 保持模长蕴含保持内积 (极化恒等式), 故 $\left\langle \hat{R}\phi \middle| \hat{R}\psi \right\rangle = \langle \phi|\psi\rangle$, 即 $\hat{R}^\dagger \hat{R} = \hat{I}$: 旋转算符是幺正算符. 这里只用到旋转与恒等变换连续相连这一事实 (旋转可以连续地进行), 因此排除了反幺正实现.

到这里, 表示 ρ : $\mathrm{SO}(3) \to \mathrm{U}(\mathscr{H})$ 的框架已经建立. 但必须立刻指出它的局限: 如果只研究 SO(3) 的普通表示, 那么整套理论只能适用于整数型旋转结构 – 例如第三篇的轨道角动量; 半整数自旋的旋转结构 (转 2π 差一个整体符号) 无法作为 SO(3) 的普通单值表示出现, 因而被这个框架排除在外. 量子物理并不允许我们忽略它们. 下一节因此一开始就讨论双覆盖: 把被表示的群从 SO(3) 提升到 SU(2), 使整数与半整数的旋转结构都能作为普通表示出现. 这是本讲全部后续内容的前提.

2

双覆盖: 从 SO(3) 到 SU(2)

2.1 普通表示的限制

上一节建立了 SO(3) 的普通表示 $\rho:\ \mathrm{SO}(3)\to \mathrm{U}(\mathscr{H})$, 把每个空间旋转 $R\in\mathrm{SO}(3)$ 实现为旋转算符 $\hat{R}(\boldsymbol{R})$. 在默认设定下, 完整态空间同时承载轨道与自旋两类自由度: 轨道部分的旋转可以由 SO(3) 的普通表示描述 (第三篇将看到它给出整数角动量), 但自旋部分要求旋转 2π 差一个整体符号的表示结构. 于是需要回答: SO(3) 的普通表示是否已经穷尽这两类旋转结构?

普通表示有一个必然推论: 转 2π 的旋转算符恒为恒等算符. 因为经典中 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},2\pi)=\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},0)=\boldsymbol{I}$ (第一篇: 转角加 2π 给出同一个旋转), 由表示条件,

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},2\pi)=\hat{R}\Big(\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},2\pi)\Big)=\hat{R}(\boldsymbol{I})=\hat{I}.$$

这是普通表示无法绕过的: 只要 $\hat{R}$ 是 SO(3) 上的单值函数, 2π 旋转就必须回到恒等算符.

但自旋自由度恰恰要求另一种行为. 关键在于量子态由射线描述: 右矢 $|\psi\rangle$ 与 $-|\psi\rangle$ 代表同一个物理状态, 一切测量概率 $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$ 在整体符号下不变. 因此, 一个满足下列条件的连续幺正族

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)\hat{R}(\boldsymbol{n},\varphi)=\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta+\varphi)\quad(\text{局部}),\qquad \hat{R}(\boldsymbol{n},0)=\hat{I},\qquad \hat{R}(\boldsymbol{n},\theta+2\pi)=-\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)$$

在物理上完全自洽: 它给出绕轴 $\boldsymbol{n}$ 旋转的全部内容, 转 2π 后算符差一个整体符号, 而整体符号不影响任何可观测量. 这样的族与 SO(3) 的旋转在无穷小层面不可区分 (局部结构相同), 却不可能来自 SO(3) 的普通表示 – 因为在普通表示中 $\hat{R}(\boldsymbol{n},2\pi)$ 恒等于 $\hat{I}$. 它就是自旋空间上旋转算符必须满足的条件: 自旋 1/2 的态经过 2π 旋转差一个符号 (第 7 节的二维表示将给出具体实例).

问题

某些允许的量子旋转结构不能作为 SO(3) 的普通单值表示出现: 转 2π 时它们给出 $-\hat{I}$ 而不是 $\hat{I}$. 于是自然提出: 是否存在一个与 SO(3) 局部结构相同、但全局结构不同的群, 使这些表示能够作为普通表示出现?

直觉上的困难在于 2π: 要让 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, 2\pi) = -\hat{I} \neq \hat{R}(\boldsymbol{n}, 0)$ 与群乘法自洽, " 转角参数" 必须在一个 4π 才闭合的空间中取值: θ 与 $\theta + 4\pi$ 给出同一个群元, 而 $\theta + 2\pi$ 给出另一个群元 (符号相反). 也就是说, 需要的群其" 转角空间" 是 SO(3) 的两倍: 局部与 SO(3) 相同 (无穷小层面不可区分), 全局把 SO(3) 的一个旋转展开成两个群元. 满足这些条件的群正是 SU(2), 下一小节构造它并验证它确实具有这些性质. 第 7 节的二维表示将提供一个具体实例: 它的 2π 旋转正是 $-\hat{I}$.

2.2 SU(2) 的定义

Def. 1　SU(2)

集合

$$\mathrm{SU}(2) = \{\boldsymbol{U} \in \mathbb{C}^{2\times 2} \text{ s.t. } \boldsymbol{U}^\dagger \boldsymbol{U} = \boldsymbol{I},\ \det \boldsymbol{U} = 1\}$$

在矩阵乘法下构成群, 称为特殊幺正群 (special unitary group). 它是全体行列式为 1 的 2×2 幺正矩阵.

Prop. 1　一般形式与参数个数

每个 $\boldsymbol{U} \in \mathrm{SU}(2)$ 可以唯一地写成

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \qquad |a|^2 + |b|^2 = 1,$$

因而由三个实参数标记: 复参数 a, b 各两个实参数, 受约束 $|a|^2 + |b|^2 = 1$ 减一个. SU(2) 是非 Abel 群.

Pf　由 $\det \boldsymbol{U} = 1$, $\boldsymbol{U}^{-1}$ 是 $\boldsymbol{U}$ 的伴随矩阵: $\boldsymbol{U}^{-1} = \begin{pmatrix} u_{22} & -u_{12} \\ -u_{21} & u_{11} \end{pmatrix}$; 又 $\boldsymbol{U}^{-1} = \boldsymbol{U}^\dagger$ (幺正), 比较矩阵元: $\overline{u_{11}} = u_{22}$, $\overline{u_{12}} = -u_{21}$, 即得一般形式, 其中 $|a|^2 + |b|^2 = \det \boldsymbol{U} = 1$. 非 Abel:

例如 $\boldsymbol{U}_1 = \begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix}$ 与 $\boldsymbol{U}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ 都满足幺正与行列式条件, 但 $\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2 = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{U}_2\boldsymbol{U}_1 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$ 不等. □

SU(2) 与 SO(3) 一样, 是连续依赖三个参数的 Lie 群. 下一小节将证明两者在无穷小层面有相同的结构; 这里先注意一个初步迹象: 三个实参数, 且同为由矩阵条件定义的连续群.

2.3 SU(2) 与 SO(3) 的联系

现在构造 SU(2) → SO(3) 的映射. 思路是找 SU(2) 能够自然作用的三维实空间, 把它认作 $\mathbb{R}^3$. SU(2) 的元素是 2×2 矩阵, 它通过共轭作用 $A \mapsto \boldsymbol{U}A\boldsymbol{U}^\dagger$ 作用在 2×2 矩阵上. 共轭保持 Hermitian 性与无迹性, 因此 2×2 Hermitian 无迹矩阵之集是不变子空间; 它恰好是实三维的. 这个空间就是 $\mathbb{R}^3$ 在矩阵世界中的化身, 下一步把两者认同.

为此取它的标准基. 任意 2×2 Hermitian 无迹矩阵的一般形式为 (对角元是互为相反数的实数, 非对角元互为共轭):

$$\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} := \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - \mathrm{i}a_2 \\ a_1 + \mathrm{i}a_2 & -a_3 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{a} = (a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^3.$$

把它按三个实参数展开, 系数矩阵就是三个基本矩阵

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

它们不是凭空规定, 而是把 Hermitian 无迹矩阵按实参数展开时自然产生的系数矩阵: 三个实参数对应 $\mathbb{R}^3$ 的三个坐标方向, 系数矩阵就是这三个方向在矩阵空间中的实现. 通常称它们为 Pauli 矩阵, 其代数性质在第 7 节系统研究. 映射 $\boldsymbol{a} \mapsto \boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 是 $\mathbb{R}^3$ 与 Hermitian 无迹矩阵空间之间的线性同构, 且 $\det(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = -|\boldsymbol{a}|^2$ (直接展开): 长度的平方被编码为行列式. 共轭作用保持行列式, 因而保持长度 – 这正是下面把共轭作用读成正交变换的关键.

Prop. 2　双覆盖映射的存在

对 $\boldsymbol{U}\in\mathrm{SU}(2)$ 与任意 $\boldsymbol{a}\in\mathbb{R}^3$, 矩阵 $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\boldsymbol{U}^\dagger$ 仍是 Hermitian 无迹矩阵, 故存在唯一的实矩阵 $\pi(\boldsymbol{U})\in\mathbb{R}^{3\times3}$ 使

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\boldsymbol{U}^\dagger=(\pi(\boldsymbol{U})\boldsymbol{a})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\qquad\text{对一切}\boldsymbol{a}\in\mathbb{R}^3.\tag{2.1}$$

映射 $\pi:\ \mathrm{SU}(2)\to\mathbb{R}^{3\times3}$ 取值于 SO(3), 是满的群同态, 且核为 $\ker\pi=\{\pm\boldsymbol{I}\}$: 它是二对一映射. 因此

$$\mathrm{SO}(3)\cong\mathrm{SU}(2)/\{\pm\boldsymbol{I}\}.$$

Pf　分四步. 第一步 (像仍在同一空间): $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\boldsymbol{U}^\dagger$ 的 Hermitian 性由 $(\boldsymbol{AB})^\dagger=\boldsymbol{B}^\dagger\boldsymbol{A}^\dagger$ 与 $\hat{\sigma}_i^\dagger=\hat{\sigma}_i$ 直接得到; 无迹性由 $\mathrm{Tr}\big(\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}^\dagger\big)=\mathrm{Tr}\,\boldsymbol{A}=0$ 得到. 故它等于某个 $(\boldsymbol{R}\boldsymbol{a})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, 定义 $\pi(\boldsymbol{U})\boldsymbol{a}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{a}$; 由展开的唯一性, $\pi(\boldsymbol{U})$ 是良定义的线性映射. 第二步 (正交性): 取行列式, 用 $\det(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})=-|\boldsymbol{a}|^2$ (直接计算: $\det(a_1\hat{\sigma}_1+a_2\hat{\sigma}_2+a_3\hat{\sigma}_3)=-(a_1^2+a_2^2+a_3^2)$): $|\pi(\boldsymbol{U})\boldsymbol{a}|^2=|\boldsymbol{a}|^2$ 对一切 $\boldsymbol{a}$ 成立, 故 $\pi(\boldsymbol{U})$ 正交. 第三步 (行列式): 任何 $\boldsymbol{U}\in\mathrm{SU}(2)$ 都可以连续连接到 $\boldsymbol{I}$ (沿一般形式中的参数 a,b 连续变化到 $a=1,b=0$), 于是 $\pi(\boldsymbol{U})$ 连续地连接到 $\pi(\boldsymbol{I})=\boldsymbol{I}$; 而 $\det\pi(\boldsymbol{U})$ 连续且只取 ±1, 故恒为 1: $\pi(\boldsymbol{U})\in\mathrm{SO}(3)$. 第四步 (同态与核): 同态性由 $\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2)^\dagger=\boldsymbol{U}_1\big(\pi(\boldsymbol{U}_2)\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\big)\boldsymbol{U}_1^\dagger$ 逐项读出; 核: 若 $\pi(\boldsymbol{U})=\boldsymbol{I}$, 则 $\boldsymbol{U}$ 与三个 $\hat{\sigma}_i$ 都交换, 代入一般形式 $\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}a & b\\ -b^* & a^*\end{pmatrix}$ 与 $\hat{\sigma}_1$ 的交换条件解得 $b=0$ 且 a 为实数, $|a|^2=1$, 故 $\boldsymbol{U}=\pm\boldsymbol{I}$. 满射性: 下一命题给出 π 的显式像覆盖一切旋转. □

Prop. 3　指数的对应

对单位向量 $\boldsymbol{n}$ 与 $\theta\in\mathbb{R}$, 令

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta):=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2}\in\mathrm{SU}(2).$$

则

$$\pi\big(\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta)\big)=\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta),$$

即 SU(2) 中转角为 θ 的元素在 π 下的像, 正是 SO(3) 中绕同一轴转同一角的旋转矩阵. 由于每个 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ 都由此给出, π 是满射.

Pf　用恒等式 $(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{I}+\mathrm{i}(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ (第 7.2 节给出完整证明; 这里

由 $\hat\sigma_i\hat\sigma_j = \delta_{ij}\boldsymbol{I} + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat\sigma_k$ 直接展开). 取 $\boldsymbol{U} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2}$, 由 $(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \boldsymbol{I}$ 把指数展开为 $\boldsymbol{U} = \cos(\theta/2)\boldsymbol{I} - \mathrm{i}\sin(\theta/2)\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$. 记 $c = \cos(\theta/2)$, $s = \sin(\theta/2)$, 计算共轭:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\boldsymbol{U}^\dagger &= (c\boldsymbol{I} - \mathrm{i}s\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(c\boldsymbol{I} + \mathrm{i}s\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\\ &= c^2(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) + \mathrm{i}cs\Big[(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) - (\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\Big] + s^2(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}).\end{aligned}$$

第二项: 由乘法恒等式, 方括号内 $= 2\mathrm{i}(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{n})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, 故该项 $= \sin\theta\,(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$. 第三项: 先算 $(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{a})\boldsymbol{I} + \mathrm{i}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, 再与 $(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})$ 相乘 (同样用恒等式), 得

$$(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = 2(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) - (\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}).$$

合并三项, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 的线性部分为

$$\Big(\cos\theta\,\boldsymbol{a} + (1-\cos\theta)(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{a})\boldsymbol{n} + \sin\theta\,\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a}\Big)\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}},$$

由第一篇的 Rodrigues 公式, 括号内正是 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)\boldsymbol{a}$; 由展开的唯一性得 $\pi(\boldsymbol{U}) = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$. □

综合两个命题: 每个 SO(3) 旋转对应 SU(2) 中恰好两个元素, 它们相差一个符号:

$$\boxed{\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta) \;\longleftrightarrow\; \pm\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2}} \tag{2.2}$$

这是因为 $\pi(\boldsymbol{U}) = \pi(-\boldsymbol{U})$ (共轭作用中符号相消), 且核只有 $\{\pm\boldsymbol{I}\}$. SU(2) 与 SO(3) 是不同构的两个群: 一个 SO(3) 旋转对应两个 SU(2) 群元; 但下一小节将看到, 它们在无穷小层面具有相同的 Lie 代数结构. 这就是" 局部相同, 全局不同" 的精确内容.

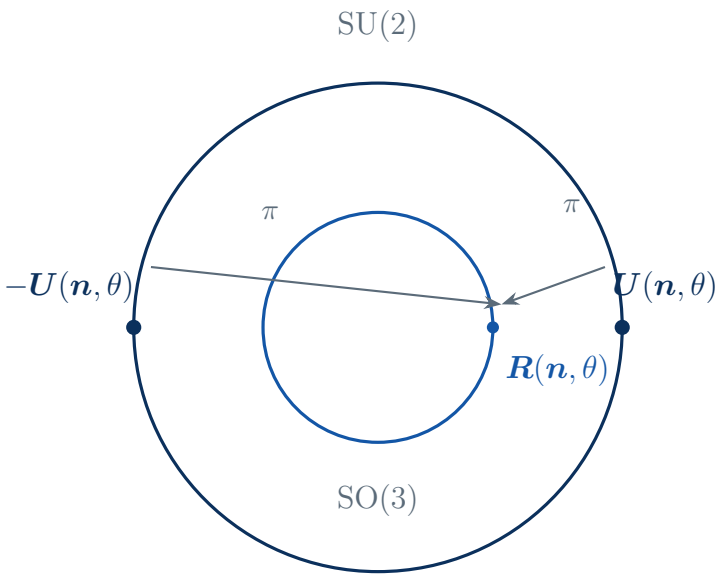


图 2: 双覆盖: SU(2) 的两个群元 $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta)$ 与 $-\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta)$ 经 π 映为同一个旋转 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$; 每个 SO(3) 旋转恰好有两个 SU(2) 原像, 相差一个符号.

2.4 su(2) 与 so(3)

SU(2) 的 Lie 代数由单位元处的无穷小生成元组成. 由 $\boldsymbol{U}^\dagger\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}$ 与 $\det\boldsymbol{U}=1$, 经过单位元的曲线 $\boldsymbol{U}(t)$ 满足 $\dot{\boldsymbol{U}}(0)^\dagger=-\dot{\boldsymbol{U}}(0)$ 且 $\operatorname{Tr}\dot{\boldsymbol{U}}(0)=0$ (与第一篇正交条件的求导完全平行): 生成元是反 Hermitian 无迹矩阵. 三维实向量空间

$$\mathfrak{su}(2)=\{\boldsymbol{X}\in\mathbb{C}^{2\times2}\ \text{s.t.}\ \boldsymbol{X}^\dagger=-\boldsymbol{X},\ \operatorname{Tr}\boldsymbol{X}=0\}$$

以 $\boldsymbol{T}_i:=-\dfrac{\mathrm{i}}{2}\hat{\sigma}_i$ $(i=1,2,3)$ 为基: 每个 $\boldsymbol{T}_i$ 反 Hermitian 无迹, 且三个线性无关 ($\hat{\sigma}_i$ 线性无关). 关键在于结构常数:

Prop. 4 $\mathfrak{su}(2)\cong\mathfrak{so}(3)$

基 $\boldsymbol{T}_i=-\dfrac{\mathrm{i}}{2}\hat{\sigma}_i$ 满足

$$[\boldsymbol{T}_i,\boldsymbol{T}_j]=\varepsilon_{ijk}\boldsymbol{T}_k,$$

与 $\mathfrak{so}(3)$ 的基 $\boldsymbol{G}_i$ 满足同一组对易关系 $[\boldsymbol{G}_i,\boldsymbol{G}_j]=\varepsilon_{ijk}\boldsymbol{G}_k$ (第一篇). 因此线性映射 $\boldsymbol{T}_i\mapsto\boldsymbol{G}_i$ 是 Lie 代数同构:

$$\boxed{\mathfrak{su}(2)\cong\mathfrak{so}(3)}$$

Pf　由显式矩阵直接计算 $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 = \mathrm{i}\hat{\sigma}_3$ (以及循环情形; $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = -\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i$ 对 $i \neq j$), 故 $[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$; 于是

$$[\boldsymbol{T}_i, \boldsymbol{T}_j] = \left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\right)^2 [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = -\frac{1}{4}\cdot 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k = \varepsilon_{ijk}\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\hat{\sigma}_k\right) = \varepsilon_{ijk}\boldsymbol{T}_k.$$

两边取 $\boldsymbol{T}_k \mapsto \boldsymbol{G}_k$ 的线性映射, 对易关系形式不变, 故它是同构. □

$$\boxed{\mathrm{e}^{\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2} = \boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta) \xrightarrow{\ \pi\ } \boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta) = \mathrm{e}^{\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{G}}} \tag{2.3}$$

(2.3) 是双覆盖在指数层面的完整对应: 两个群有同构的生成元代数, 生成元的指数在 SU(2) 中给出 $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta)$, 在 SO(3) 中给出 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$; π 把前者映为后者. 这就解释了为什么 SU(2) 能够描述空间旋转的无穷小结构: 无穷小层面只有对易关系 $[\boldsymbol{T}_i, \boldsymbol{T}_j] = \varepsilon_{ijk}\boldsymbol{T}_k$ 与 $[\boldsymbol{G}_i, \boldsymbol{G}_j] = \varepsilon_{ijk}\boldsymbol{G}_k$, 两者完全相同; 两个群的差别只在全局: 指数参数空间的大小.

2.5　2π 与 4π

由 $(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \boldsymbol{I}$, 指数可以精确求和 (第 7.2 节将系统证明):

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2} = \cos\frac{\theta}{2}\boldsymbol{I} - \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}.$$

代入 $\theta + 2\pi$:

$$\cos\frac{\theta+2\pi}{2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}+\pi\right) = -\cos\frac{\theta}{2}, \qquad \sin\frac{\theta+2\pi}{2} = -\sin\frac{\theta}{2},$$

故

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta+2\pi) = -\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta), \qquad \boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta+4\pi) = \boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta). \tag{2.4}$$

在 SO(3) 中, $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta+2\pi) = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ (第一篇: 转角周期为 2π); 在 SU(2) 中, 转角周期是 4π: 转 2π 到达 $-\boldsymbol{I}$ (对径点), 再转 2π 才回到 $\boldsymbol{I}$. 这正是" 双覆盖" 的直观内容: SU(2) 的转角空间是 SO(3) 的转角空间的两倍, 前者把后者的每个旋转展开成两个对径的群元.

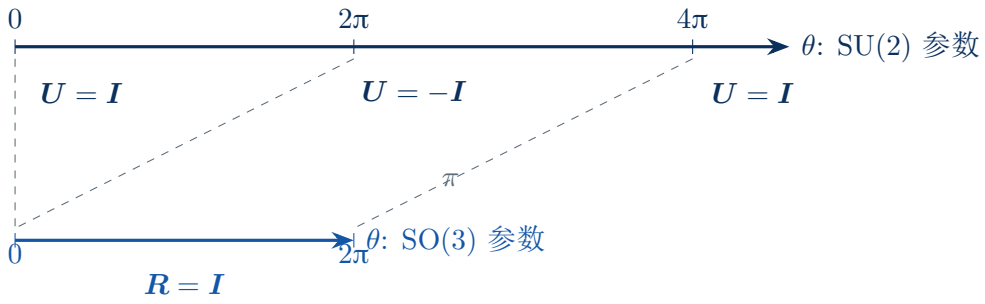


图 3: 2π 与 4π: SU(2) 的转角参数在 $[0, 4\pi)$ 上取值, 覆盖 SO(3) 的转角参数 $[0, 2\pi)$ 两次; 转 2π 时 SU(2) 到达 $-\boldsymbol{I}$ (对径点), 转 4π 才回到 $\boldsymbol{I}$, 而 SO(3) 中 2π 已回到恒等旋转.

对量子旋转算符, (2.4) 回答第 2.1 节的问题: 若旋转由 SU(2) 的普通表示实现, 则 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta + 2\pi) = \pm\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta)$ 是可能的 – 对 $\theta = 0$ 来说, 转 2π 的算符可以是 $-\hat{I}$ 而不是 $\hat{I}$, 这正是一个普通表示中无法出现的结构. 具体的符号由表示决定: 若表示把 $-\boldsymbol{I} \in \mathrm{SU}(2)$ 映为 $+\hat{I}$ (整数型), 则 2π 回到恒等; 若映为 $-\hat{I}$ (半整数型), 则出现符号. 第 7 节的二维表示属于第二种类型.

把双覆盖的结论收束起来: 本篇的旋转表示统一建立在 SU(2) 层面. 若表示把 $-\boldsymbol{I}$ 映为 $+\hat{I}$ (整数型), 则它经 π 降到 SO(3) 的普通表示, 覆盖轨道角动量一类; 若映为 $-\hat{I}$ (半整数型), 则它只在 SU(2) 层面, 覆盖自旋一类. 第 3 节起的所有结构 – 旋转算符的性质, 生成元, 对易代数与指数形式 – 对两类表示同时成立.

3

从 SU(2) 继承来的旋转算符性质

这一节把 SU(2) 的每一条基本性质, 逐项搬到旋转算符上. 由第 2 节, 旋转的量子表示统一建立在 SU(2) 层面: $\rho:\ \mathrm{SU}(2)\to \mathrm{U}(\mathscr{H})$ 把群元 $U\in \mathrm{SU}(2)$ 映为幺正旋转算符 $\hat{R}(U)$, 其中表示空间是完整态空间 $\mathscr{H}=\mathscr{H}_{\mathrm{orb}}\otimes\mathscr{H}_{\mathrm{spin}}$: 旋转算符同时作用于轨道与自旋两类自由度, 下面的性质对两类同时成立. 每一项的证明都只需表示条件 $\hat{R}(U_1U_2)=\hat{R}(U_1)\hat{R}(U_2)$ 与群本身的性质.

3.1 单位旋转

SU(2) 的单位元 $\boldsymbol{I}$ 对应 Hilbert 空间中的恒等算符:

Prop. 1　单位元

$$\hat{R}(\boldsymbol{I})=\hat{I}.$$

Pf　对任意 $U\in\mathrm{SU}(2)$, 表示条件给出 $\hat{R}(\boldsymbol{I})\hat{R}(U)=\hat{R}(\boldsymbol{I}U)=\hat{R}(U)$; 右乘 $\hat{R}(U)^{-1}$ (它存在, 因为 $\hat{R}(U)$ 可逆), 得 $\hat{R}(\boldsymbol{I})=\hat{I}$. □

3.2 旋转的复合

群乘法对应旋转算符的乘法, 这正是表示条件本身:

Prop. 2　复合

对 $U_1,U_2\in\mathrm{SU}(2)$,

$$\hat{R}(U_1)\hat{R}(U_2)=\hat{R}(U_1U_2).$$

特别地, 绕同一轴的旋转算符满足转角相加: $\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)\hat{R}(\boldsymbol{n},\varphi)=\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta+\varphi)$, 其中 $\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta):=\hat{R}(\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta))$, $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta)$ 是第 2.5 节的 SU(2) 元素.

Pf　第一个等式即表示条件. 第二个等式由 SU(2) 中绕同一轴的转角相加

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta)\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\varphi)=\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta+\varphi)$$

(第 2.5 节) 代入表示条件得出. □

3.3 逆旋转

Prop. 3　逆元

$$\hat{R}(U^{-1})=\hat{R}(U)^{-1}.$$

Pf　由表示条件, $\hat{R}(U)\hat{R}(U^{-1})=\hat{R}(UU^{-1})=\hat{R}(\boldsymbol{I})=\hat{I}$; 同理 $\hat{R}(U^{-1})\hat{R}(U)=\hat{I}$. 故 $\hat{R}(U^{-1})$ 是 $\hat{R}(U)$ 的逆. □

由 $\boldsymbol{U}^{-1}=\boldsymbol{U}^{\dagger}$ (幺正矩阵) 与旋转算符的幺正性, 逆旋转算符同时可以写成 $\hat{R}(U^{-1})=\hat{R}(U)^{-1}=\hat{R}(U)^{\dagger}$.

3.4 正交性与幺正性

Prop. 4　保持内积

SU(2) 的元素保持二维复内积: $\langle\boldsymbol{U}\phi|\boldsymbol{U}\chi\rangle=\langle\phi|\chi\rangle$, 因此是幺正矩阵, $\boldsymbol{U}^{\dagger}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}$; 旋转算符保持量子态内积: $\left\langle\hat{R}\phi\middle|\hat{R}\psi\right\rangle=\langle\phi|\psi\rangle$, 因此是幺正算符, $\hat{R}^{\dagger}\hat{R}=\hat{I}$.

Pf　幺正矩阵部分由 SU(2) 的定义直接得到; 旋转算符部分: 幺正性的物理来源已在第 1.3 节说明: 旋转保持跃迁概率, 由极化恒等式, 保持模长的线性算符保持内积, 即 $\hat{R}^{\dagger}\hat{R}=\hat{I}$. □

这里要强调两点. 第一, 两条性质是相同的几何思想在不同空间中的实现: 被表示的群元 (经典层面 $\mathbb{R}^3$ 上的正交矩阵, 或经双覆盖提升后的幺正矩阵) 保持各自空间的内积, $\mathscr{H}$ 的复内积由算符 $\hat{R}$ 保持. 第二, 群元本身并没有"变成"算符: 它们是不同空间上的不同对象, 一个是 2×2 (或 3×3) 矩阵, 一个是 (一般无穷维) 态空间上的算符; 表示 ρ 把它们一一对应起来, 而不是把它们等同起来. 保持内积的共同性质正是表示理论中"正交"与"幺正"这对概念平行对应的原因.

3.5 非交换性

Prop. 5　非交换

设表示是忠实的: 不同的群元对应不同的旋转算符 (这是物理上必须的, 否则两个不同的旋转操作在量子层面无法区分). 则 SU(2) 的非 Abel 性被保持:

$$U_1U_2 \neq U_2U_1 \quad \Longrightarrow \quad \hat{R}(U_1)\hat{R}(U_2) \neq \hat{R}(U_2)\hat{R}(U_1).$$

特别地, 绕不同轴的两个旋转算符一般不对易; 绕同一轴的旋转算符可交换 (命题 3.2).

Pf　反证. 若 $\hat{R}(U_1)\hat{R}(U_2) = \hat{R}(U_2)\hat{R}(U_1)$, 由表示条件, $\hat{R}(U_1U_2) = \hat{R}(U_2U_1)$; 忠实性给出 $U_1U_2 = U_2U_1$, 与假设矛盾. □

这里" 忠实" 是关键的限定: 数学上存在非忠实的表示 (例如把每个群元都映为恒等算符的平凡表示), 其中一切乘积都交换; 但这样的表示不描述物理, 因为不同的旋转在量子层面将无法区分. 本篇使用的旋转表示都是忠实的, 它把 SU(2) 的乘法结构完整体现出来. 这一非交换性是下一部分生成元对易代数非零的根源: 群层面两个有限旋转不对易, 无穷小层面两个生成元就对易子非零.

3.6 连续旋转

Prop. 6　连续性

SU(2) 是连续群, 旋转算符也随之连续变化: 对固定轴 $\boldsymbol{n}$, 映射 $\theta \mapsto \hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta)$ 连续, 且满足 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, 0) = \hat{I}$, $\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta)\hat{R}(\boldsymbol{n}, \varphi) = \hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta + \varphi)$.

Pf　经典映射 $\theta \mapsto \boldsymbol{U}(\boldsymbol{n}, \theta)$ 连续 (第 2.5 节); 物理上, 连续转动的量子实现必须连续, 否则无限小的转动会在态上引起有限跳变. 群性质继承自命题 3.2. □

于是第 1–2 节的内容可以收束为一个对应:

从 SU(2) 到旋转算符

$$\boxed{\mathrm{SU}(2) \longrightarrow \{\text{Hilbert 空间中的旋转算符}\}}$$

右边是幺正算符之集 $\mathrm{U}(\mathscr{H})$ 的一个子群: 它含恒等算符, 对乘法封闭 (命题 3.2), 对取

逆封闭 (命题 3.3), 群乘法连续依赖于三个参数 (命题 3.6). 也就是说, 右边同样具有 Lie 群结构, 与 SU(2) 同构 (对忠实表示). 它是 SU(2) 的精确镜像. 整数型表示把 $\pm U$ 映为同一算符, 因而经 π 降到 SO(3); 半整数型表示只在 SU(2) 层面 (第 2.5 节).

Part II

旋转算符与生成元

本部分从 SU(2) 继承旋转算符的性质: 单位元, 复合, 逆, 幺正性, 非交换性与连续性; 然后对应上一篇的" 无穷小旋转与生成元": 从恒等旋转附近的旋转算符展开引入无穷小生成元, 由幺正性推出生成元的反自伴性并转而使用自伴生成元 $\hat{\boldsymbol{J}}$.

内容概要

- 会对照列出旋转算符从 SU(2) 继承的性质, 理解正交性与幺正性是同一思想在不同空间的实现.
- 掌握旋转算符在恒等附近的展开 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, \mathrm{d}\theta) = \hat{I} - \dfrac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}} + O(\mathrm{d}\theta^2)$.
- 会由幺正性推导生成元的反自伴性, 理解 i 与 $\hbar$ 因子的由来.
- 理解 $\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3$ 只是旋转生成元, 不预先赋予轨道或自旋的身份 (第三篇).

4

Hilbert 空间中的无穷小旋转

这一节对应第一篇的" 无穷小旋转与生成元". 上一篇从转角趋于零的旋转矩阵 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n}, \mathrm{d}\theta)$ 的一阶展开得到了生成元; 现在对旋转算符做同样的事.

4.1 恒等旋转附近

考虑一个非常小的空间旋转 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n}, \mathrm{d}\theta)$ 及其对应的旋转算符 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, \mathrm{d}\theta) = \hat{R}(\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n}, \mathrm{d}\theta))$. 由连续性 (命题 3.6), $\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta)$ 在 $\theta = 0$ 附近与恒等算符 $\hat{I}$ 任意接近: $\theta \to 0$ 时 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta) \to \hat{R}(\boldsymbol{n}, 0) = \hat{I}$. 因此在 θ 很小时, $\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta)$ 可以按 θ 作 Taylor 展开, 保留一阶项:

Prop. 1　恒等附近的展开

$$\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta) = \hat{I} + \theta\, \hat{X}(\boldsymbol{n}) + O(\theta^2),$$

其中 $\hat{X}(\boldsymbol{n}) = \mathrm{d}\,\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta)/\mathrm{d}\theta\big|_{\theta=0}$ 是某个 (与 $\boldsymbol{n}$ 有关的) 线性算符.

Pf　即 Taylor 展开 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta) = \hat{R}(\boldsymbol{n}, 0) + \theta\, \hat{R}'(\boldsymbol{n}, 0) + O(\theta^2)$, 其中 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, 0) = \hat{R}(\boldsymbol{I}) = \hat{I}$ (命题 3.1). □

与上一篇完全平行, 有限旋转的全部局部信息都集中在 $\theta \to 0$ 的这一阶展开里: 知道了 $\hat{X}(\boldsymbol{n})$, 原则上可以重建整个单参数族 (第 6 节). 这就是" 无穷小旋转" 在量子层面的含义: 它不是某个具体的旋转, 而是恒等旋转附近的线性近似.

4.2 无穷小生成元

Def. 1　无穷小生成元

绕坐标轴 $\boldsymbol{e}_i$ 的无穷小旋转算符给出三个基本生成元

$$\hat{X}_i := \left.\frac{\mathrm{d}\,\hat{R}(\boldsymbol{e}_i,\theta)}{\mathrm{d}\theta}\right|_{\theta=0}, \qquad i=1,2,3,$$

于是 $\hat{R}(\boldsymbol{e}_i,\mathrm{d}\theta)=\hat{I}+\mathrm{d}\theta\,\hat{X}_i+O(\mathrm{d}\theta^2)$. 对一般方向的转轴 $\boldsymbol{n}$, 由空间中的无穷小旋转 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\mathrm{d}\theta)=\boldsymbol{I}+\mathrm{d}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{G}+O(\mathrm{d}\theta^2)$ (第 2.4 节) 是沿三个坐标轴分量的线性组合, 且表示保持乘法与连续性, 得

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\mathrm{d}\theta)=\hat{I}+\mathrm{d}\theta\,(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{X}})+O(\mathrm{d}\theta^2), \qquad \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{X}}=n_1\hat{X}_1+n_2\hat{X}_2+n_3\hat{X}_3.$$

称 $\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{X}}$ 为绕轴 $\boldsymbol{n}$ 的无穷小旋转的生成元. 精确的机制 – 表示在恒等元附近的微分是线性映射 – 将在第 5.1 节给出.

Eg. 1　轨道旋转算符

若 $\mathscr{H}$ 取为无自旋粒子的轨道态空间, 旋转算符是整数型表示, 经 π 降到 SO(3), 由位置本征态上的作用定义: $\hat{R}(\boldsymbol{R})\,|\boldsymbol{x}\rangle=|\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}\rangle$. 则无穷小旋转满足

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\mathrm{d}\theta)\,|\boldsymbol{x}\rangle=|\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\mathrm{d}\theta)\boldsymbol{x}\rangle\,,$$

用第一篇的展开 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\mathrm{d}\theta)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}+\mathrm{d}\theta\,(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})+O(\mathrm{d}\theta^2)$, 可以看出 $\hat{X}(\boldsymbol{n})$ 在此空间中作用为微分算子. 本篇不深入任何具体空间: 生成元的性质全部由表示的公理结构决定.

4.3 幺正性对生成元的限制

旋转算符是幺正算符, 这一性质对生成元施加严格限制.

Prop. 2　生成元的反自伴性

设 $\hat{R}(\mathrm{d}\theta)=\hat{I}+\mathrm{d}\theta\,\hat{X}+O(\mathrm{d}\theta^2)$ 是一族幺正算符, 则

$$\hat{X}^\dagger=-\hat{X},$$

即无穷小生成元必为反自伴算符.

Pf　把展开代入幺正条件 $\hat{R}(\mathrm{d}\theta)^\dagger \hat{R}(\mathrm{d}\theta) = \hat{I}$:

$$\hat{I} = \big(\hat{I} + \mathrm{d}\theta\, \hat{X}^\dagger + O(\mathrm{d}\theta^2)\big)\big(\hat{I} + \mathrm{d}\theta\, \hat{X} + O(\mathrm{d}\theta^2)\big) = \hat{I} + \mathrm{d}\theta(\hat{X}^\dagger + \hat{X}) + O(\mathrm{d}\theta^2).$$

一阶项必须为零: $\hat{X}^\dagger + \hat{X} = 0$. □

这与第一篇的结论完全平行: 那里从正交性 $\boldsymbol{R}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{I}$ 推出经典生成元反对称 $\boldsymbol{G}^{\mathsf{T}} = -\boldsymbol{G}$; 这里从幺正性 $\hat{R}^\dagger \hat{R} = \hat{I}$ 推出量子生成元反自伴 $\hat{X}^\dagger = -\hat{X}$. 反对称矩阵与反自伴算符分别是实空间与复 Hilbert 空间中" 无穷小等距变换" 的标准形式.

反自伴算符在物理上不顺手: 可观测量由自伴算符表示. 因此按标准归一化引入三个自伴生成元:

Def. 2　自伴生成元与生成元三元组

定义

$$\hat{J}_i := \mathrm{i}\hbar\, \hat{X}_i, \qquad i = 1, 2, 3,$$

则 $\hat{J}_i^\dagger = \hat{J}_i$ (自伴), 且无穷小旋转写成

$$\hat{R}(\boldsymbol{n}, \mathrm{d}\theta) = \hat{I} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}} + O(\mathrm{d}\theta^2), \qquad \hat{\boldsymbol{J}} = (\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3). \tag{4.1}$$

称 $\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3$ 为旋转算符的三个自伴生成元, 组成生成元三元组 $\hat{\boldsymbol{J}}$.

Pf　自伴性: $\hat{J}_i^\dagger = (-\mathrm{i}\hbar)\hat{X}_i^\dagger = -\mathrm{i}\hbar(-\hat{X}_i) = \mathrm{i}\hbar\hat{X}_i = \hat{J}_i$. 展开式由 $\hat{X}_i$ 的定义代回即得. □

因子 $\mathrm{i}\hbar$ 的来历值得说明: i 把反自伴变为自伴 (与经典情形 $\boldsymbol{G}^{\mathsf{T}} = -\boldsymbol{G}$ 对照, 那里只需要实数, 量子情形必须乘 i 才能在复空间中得到自伴算符); $\hbar$ 使 $\hat{J}_i$ 具有角动量的量纲 (经典生成元 $\boldsymbol{G}_i$ 无量纲, 指数 $\mathrm{e}^{\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{G}}$ 中 θ 是角度; 量子指数 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar}$ 中 $\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar$ 无量纲).

本篇的立场

到目前为止, $\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3$ 只是完整态空间 (同时承载轨道与自旋两类自由度) 上空间旋转的生成元: 它们的定义来自旋转算符的无穷小展开与幺正性, 不需要预先知道哪一部分对应轨道、哪一部分对应自旋. 两类自由度的旋转都由这同一个代数描述; 把它们分别识别为轨道角动量与自旋角动量 (并讨论总角动量) 是第三篇的主题. 本篇只使

用它们作为旋转生成元的数学身份.

Part III

Lie 代数表示与指数形式

本部分证明群表示在无穷小层面诱导 Lie 代数表示且必须保持对易结构, 得到 $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$; 再从生成元经指数映射恢复有限旋转算符, 给出轴角参数与 Euler 角的量子版本.

内容概要

- 理解群表示诱导 Lie 代数表示 $\pi : \mathfrak{su}(2) \to \{\text{生成元代数}\}$, 会完整推导对易关系 $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$.
- 掌握 $\rho(\mathrm{e}^{\boldsymbol{X}}) = \mathrm{e}^{\pi(\boldsymbol{X})}$ 与交换方块图.
- 掌握有限旋转算符的指数形式 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, \theta) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar}$ 及其与 SU(2) 指数形式的逐项对应, 含 Euler 角的量子版本.

5

从 su(2) 到 Hilbert 空间中的 Lie 代数

这是全篇第二个核心: 群表示在无穷小层面自动给出 Lie 代数表示, 第 2.4 节的对易结构 $[\boldsymbol{T}_i, \boldsymbol{T}_j] = \varepsilon_{ijk}\boldsymbol{T}_k$ 必须被保持, 由此得到 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 的对易代数.

5.1 群表示诱导 Lie 代数表示

把 SU(2) 与量子两个无穷小展开并排对照:

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n}, \mathrm{d}\theta) = \boldsymbol{I} + \mathrm{d}\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T} + O(\mathrm{d}\theta^2), \qquad \hat{R}(\boldsymbol{n}, \mathrm{d}\theta) = \hat{I} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}\theta\, \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}} + O(\mathrm{d}\theta^2).$$

SU(2) 的生成元 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}$ 与这里的生成元算符 $\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}$ 之间存在由表示 ρ 诱导的对应. 一般地:

Def. 1　诱导的代数表示

对 $\boldsymbol{X} \in \mathfrak{su}(2)$, 曲线 $t \mapsto \rho(\mathrm{e}^{t\boldsymbol{X}})$ 是 $\mathrm{U}(\mathscr{H})$ 中的幺正单参子群, 定义

$$\pi(\boldsymbol{X}) := \left.\frac{\mathrm{d}\,\rho(\mathrm{e}^{t\boldsymbol{X}})}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0},$$

即 $\pi(\boldsymbol{X})$ 是该单参子群的生成元. 这给出映射 $\pi : \mathfrak{su}(2) \to \{\mathscr{H}$ 上的算符$\}$, 称为群表示 ρ 诱导的生成元映射 (Lie 代数表示).

对 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}$: $\rho(\mathrm{e}^{t\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}}) = \rho(\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n}, t)) = \hat{R}(\boldsymbol{n}, t)$, 故

$$\pi(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}) = \left.\frac{\mathrm{d}\,\hat{R}(\boldsymbol{n}, t)}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} = \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{X}} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}},$$

即 SU(2) 旋转生成元 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}$ 对应量子旋转生成元 $-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}$ (带 i 与 $1/\hbar$ 因子). 映射 π 是线性的: 由定义, $\pi(s\boldsymbol{X}) = \mathrm{d}\rho(\mathrm{e}^{ts\boldsymbol{X}})/\mathrm{d}t|_{t=0} = s\pi(\boldsymbol{X})$, 且任意方向的无穷小旋转是三个基本生成元的线性组合 (第 2.4 节), 表示保持乘法, 故 π 在 $\mathfrak{su}(2)$ 上按线性组合分配. 它在单位元附近把群的乘法对应为生成元的加法, 这正是" 群表示在恒等元附近的微分" 的内

容.

5.2 Lie 括号结构必须保持

因为 π 是群表示诱导的代数表示, SU(2) 生成元之间的对易结构必须被保留: 对易子在 π 下的像, 等于像的对易子. 这一性质的严格论证如下. 先需要一个纯代数引理.

Lem. 1　群对易子恒等式

设 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 是矩阵 (或算符), 则

$$\mathrm{e}^{\varepsilon \boldsymbol{A}} \mathrm{e}^{\varepsilon \boldsymbol{B}} \mathrm{e}^{-\varepsilon \boldsymbol{A}} \mathrm{e}^{-\varepsilon \boldsymbol{B}} = \boldsymbol{I} + \varepsilon^2 [\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}] + O(\varepsilon^3).$$

Pf　把四个指数都展开到二阶:

$$\mathrm{e}^{\varepsilon \boldsymbol{A}} \mathrm{e}^{\varepsilon \boldsymbol{B}} = \boldsymbol{I} + \varepsilon(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}) + \frac{\varepsilon^2}{2}(\boldsymbol{A}^2 + 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^2) + O(\varepsilon^3),$$
$$\mathrm{e}^{-\varepsilon \boldsymbol{A}} \mathrm{e}^{-\varepsilon \boldsymbol{B}} = \boldsymbol{I} - \varepsilon(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}) + \frac{\varepsilon^2}{2}(\boldsymbol{A}^2 + 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^2) + O(\varepsilon^3).$$

相乘, 一阶项相消; 二阶项为 ε^2 乘以

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}^2 + 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^2) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{A}^2 + 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^2) - (\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B})^2 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}],$$

故乘积 $= \boldsymbol{I} + \varepsilon^2 [\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}] + O(\varepsilon^3)$. □

现在用两次这个引理. 第一次在 SU(2) 层面: 第 2.4 节已证 $[\boldsymbol{T}_x, \boldsymbol{T}_y] = \boldsymbol{T}_z$, 取 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{T}_x$, $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{T}_y$, 并写 $\mathrm{e}^{\varepsilon \boldsymbol{T}_x} \mathrm{e}^{\varepsilon \boldsymbol{T}_y} \mathrm{e}^{-\varepsilon \boldsymbol{T}_x} \mathrm{e}^{-\varepsilon \boldsymbol{T}_y} = \mathrm{e}^{\varepsilon^2 \boldsymbol{T}_z} + O(\varepsilon^3)$, 即

$$\boldsymbol{U}_x(\varepsilon) \boldsymbol{U}_y(\varepsilon) \boldsymbol{U}_x(-\varepsilon) \boldsymbol{U}_y(-\varepsilon) = \boldsymbol{U}_z(\varepsilon^2) + O(\varepsilon^3) :$$

绕 x 轴与绕 y 轴的无穷小旋转 (SU(2) 中的群元 $\mathrm{e}^{\varepsilon \boldsymbol{T}_x}$ 等) 的" 群对易子", 给出绕 z 轴的 ε^2 阶小旋转. 第二次在量子层面: 表示保持乘法, 把上式两边同时用 ρ 映过去:

$$\hat{R}_x(\varepsilon) \hat{R}_y(\varepsilon) \hat{R}_x(-\varepsilon) \hat{R}_y(-\varepsilon) = \hat{R}_z(\varepsilon^2) + O(\varepsilon^3),$$

其中 $\hat{R}_x(\varepsilon) = \hat{R}(\boldsymbol{U}_x(\varepsilon))$ 等. 左边用展开式(4.1): $\hat{R}_x(\varepsilon) = \hat{I} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon \hat{J}_x$, $\hat{R}_x(-\varepsilon) = \hat{I} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon \hat{J}_x$, 代入引理得

$$\hat{R}_x(\varepsilon)\hat{R}_y(\varepsilon)\hat{R}_x(-\varepsilon)\hat{R}_y(-\varepsilon) = \hat{I} - \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}[\hat{J}_x, \hat{J}_y] + O(\varepsilon^3).$$

右边展开: $\hat{R}_z(\varepsilon^2) = \hat{I} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon^2\hat{J}_z + O(\varepsilon^4)$. 比较 ε^2 项:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \mathrm{i}\hbar\,\hat{J}_z.$$

循环置换下标, 得完整的对易代数:

Thm. 1　旋转生成元的对易关系

Hilbert 空间中的旋转生成元满足

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = \mathrm{i}\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k, \tag{5.1}$$

即 $[\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{J}},\ \boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}] = \mathrm{i}\hbar\,(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\hat{\boldsymbol{J}}$.

Pf　上述推导: 群对易子恒等式 (引理 5.2) 给出 ε^2 阶的绕 z 轴旋转; 表示保持乘法把它映为算符等式; 两边分别用 SU(2) 生成元关系 $[\boldsymbol{T}_x, \boldsymbol{T}_y] = \boldsymbol{T}_z$ (第 2.4 节) 与量子无穷小展开(4.1) 展开, 比较 ε^2 项即得 $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \mathrm{i}\hbar\hat{J}_z$; 其余分量由循环置换与第一、三两个坐标轴的同类论证给出. □

这条定理是全篇最重要的结论, 其内容分三层. 第一, 三个生成元彼此不对易, 与第 2.4 节 $[\boldsymbol{T}_i, \boldsymbol{T}_j] = \varepsilon_{ijk}\boldsymbol{T}_k$ 结构相同: SU(2) 的非 Abel 性在无穷小层面的表现, 通过表示完整地进入了 Hilbert 空间. 第二, 系数从 ε_{ijk} 变成 $\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}$: i 来自生成元的自伴化 (反自伴 $\hat{X}_i$ 换成自伴 $\hat{J}_i = \mathrm{i}\hbar\hat{X}_i$), $\hbar$ 来自量纲归一化; 结构常数 ε_{ijk} 本身没有变. 第三, 也是最要紧的:

对易关系不是假设

量子力学中的角动量型对易关系 $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$ 不是额外假设, 而是 SU(2) 的 Lie 代数结构 $[\boldsymbol{T}_i, \boldsymbol{T}_j] = \varepsilon_{ijk}\boldsymbol{T}_k$ 通过表示映射进入 Hilbert 空间后的结果.

在 Lie 代数的语言里, 定理(5.1) 说: π 是 $\mathfrak{su}(2)$ 到 Hilbert 空间算符之集的 Lie 代数表示, 即

$$[\pi(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{T}),\ \pi(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{T})] = \pi\Big([\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{T},\ \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{T}]\Big) = \pi\Big((\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{T}\Big),$$

括号结构被严格保持. 代回去 (两边同乘 $-\hbar^2$) 就是(5.1) 的矢量形式. $\mathfrak{su}(2)$ 与 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 代数之

间的这个同构, 是" 角动量算符是旋转的生成元" 这句话的数学内容.

5.3 Lie 群与 Lie 代数的对应

把两层的对应放在一起. 先需要一个关于单参子群的标准事实:

Lem. 2　单参子群由其生成元唯一决定

设 $\hat{A}$ 是算符. 初值问题

$$\frac{\mathrm{d}\,\hat{R}(t)}{\mathrm{d}t} = \hat{A}\,\hat{R}(t), \qquad \hat{R}(0) = \hat{I}$$

在算符意义下有唯一解 $\hat{R}(t) = \mathrm{e}^{t\hat{A}}$.

Pf　存在性: 对指数级数逐项求导得 $\mathrm{d}\,\mathrm{e}^{t\hat{A}}/\mathrm{d}t = \hat{A}\mathrm{e}^{t\hat{A}}$, 且 $\mathrm{e}^{0} = \hat{I}$. 唯一性: 若 $\hat{V}(t)$ 也是解, 则 $\mathrm{d}\left(\mathrm{e}^{-t\hat{A}}\hat{V}(t)\right)/\mathrm{d}t = -\hat{A}\mathrm{e}^{-t\hat{A}}\hat{V}(t) + \mathrm{e}^{-t\hat{A}}\hat{A}\hat{V}(t) = 0$ (两个算符都与 $\mathrm{e}^{-t\hat{A}}$ 可交换), 故 $\mathrm{e}^{-t\hat{A}}\hat{V}(t)$ 恒等于其初值 $\hat{I}$, 即 $\hat{V}(t) = \mathrm{e}^{t\hat{A}}$. □

Prop. 1　群表示与代数表示的对应

设 $\rho\colon \mathrm{SU}(2) \to \mathrm{U}(\mathscr{H})$ 是幺正表示, π 是它诱导的代数表示. 则对 $\boldsymbol{X} \in \mathfrak{su}(2)$,

$$\rho\left(\mathrm{e}^{\boldsymbol{X}}\right) = \mathrm{e}^{\pi(\boldsymbol{X})}.$$

即: 先指数映射再表示, 等于先表示再指数映射. 对连通 Lie 群, 表示 ρ 完全由 π 决定.

Pf　固定 $\boldsymbol{X} \in \mathfrak{su}(2)$. 映射 $t \mapsto \rho(\mathrm{e}^{t\boldsymbol{X}})$ 是 $\mathrm{U}(\mathscr{H})$ 中的幺正单参子群 (ρ 保持乘法, $\mathrm{e}^{(s+t)\boldsymbol{X}} = \mathrm{e}^{s\boldsymbol{X}}\mathrm{e}^{t\boldsymbol{X}}$), 其生成元正是 $\pi(\boldsymbol{X})$ (π 的定义: 诱导生成元映射). 而 $t \mapsto \mathrm{e}^{t\pi(\boldsymbol{X})}$ 是以同一算符为生成元的单参子群. 由引理 5.3 的唯一性, 两者相等; 取 $t = 1$ 得 $\rho(\mathrm{e}^{\boldsymbol{X}}) = \mathrm{e}^{\pi(\boldsymbol{X})}$. 对连通群, 每个群元都是有限个指数的乘积, 故 ρ 由 π 完全决定. □

$$\begin{array}{ccc} \mathrm{SU}(2) & \xrightarrow{\ \rho\ } & \mathrm{U}(\mathscr{H}) \\ {\scriptstyle\exp}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle\exp} \\ \mathfrak{su}(2) & \xrightarrow[\ \pi\ ]{} & \{\text{旋转生成元代数}\} \end{array} \tag{5.2}$$

(5.2) 是整篇的结构图: 顶行是有限旋转的对应 (群表示), 底行是无穷小旋转的对应 (Lie

代数表示), 两条竖线都是指数映射. 第 2.4 节建立了左侧的对应 $\mathrm{SU}(2) \leftrightarrow \mathfrak{su}(2)$; 本节的定理建立右侧的对应 $\mathrm{U}(\mathscr{H}) \leftrightarrow$ {生成元代数}; 表示条件保证整个方形可交换. 于是:

两层的对应

$\mathrm{SU}(2) \longrightarrow$ Hilbert 空间旋转算符群,　　$\mathfrak{su}(2) \longrightarrow$ Hilbert 空间旋转生成元代数.

有限层面的群同构与无穷小层面的代数同构同步成立, 这正是" 旋转的表示" 一词的完整内容.

6

从生成元得到有限量子旋转

这一节对应第一篇的” 从生成元回到有限旋转”:固定转轴得到单参旋转算符群, 由无穷小生成元经指数映射恢复有限旋转算符, 并指出经典与量子使用的是同一个物理旋转参数.

6.1 固定轴旋转

固定转轴 $\boldsymbol{n}$. 由命题 3.2, $\theta \mapsto \hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ 满足

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)\hat{R}(\boldsymbol{n},\varphi)=\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta+\varphi),\qquad \hat{R}(\boldsymbol{n},0)=\hat{I},$$

加上连续性 (命题 3.6), 它是 $\mathrm{U}(\mathscr{H})$ 中的一个幺正单参子群: 群元素被一个连续参数 θ 标记, 参数可以相加. 这与第一篇的经典单参子群 $\theta \mapsto \boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ 完全平行. 于是” 绕固定轴的旋转” 这个几何对象, 在 Hilbert 空间中实现为一族连续旋转算符; 这一族的全部内容由它的生成元 $\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}$ (第 4.2 节) 决定.

6.2 指数形式

Thm. 1　有限旋转算符的指数形式

对单位向量 $\boldsymbol{n}$ 与 $\theta\in\mathbb{R}$,

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar}. \tag{6.1}$$

Pf　把 $\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ 视为 θ 的函数. 由单参子群性质与(4.1),

$$\frac{\mathrm{d}\,\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)}{\mathrm{d}\theta}=\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta+\varepsilon)-\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)}{\varepsilon}=\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{R}(\boldsymbol{n},\varepsilon)-\hat{I}}{\varepsilon}\,\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}})\,\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta),$$

初值为 $\hat{R}(\boldsymbol{n},0)=\hat{I}$. 由引理 5.3 的唯一性, 解是 $\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar}$. □

这个公式与第一篇的 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)=\mathrm{e}^{\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{G}}$ 逐字平行: 有限对称变换等于生成元的指数. 差别只在两点: 指数中的 i 与 $1/\hbar$ (由自伴生成元的归一化带来), 以及作用对象 (算符与矩阵,

分别作用在 $\mathscr{H}$ 与 $\mathbb{R}^3$ 上). 由指数形式立即得到 $\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ 的幺正性 ($\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}$ 自伴, 指数给出幺正算符), 这与第 3.4 节一致.

把有限旋转切成 N 份再复合, 也能得到同一公式: 由单参子群性质, $\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta) = \hat{R}(\boldsymbol{n},\theta/N)^N$, 每份用无穷小展开(4.1):

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta) = \Big(\hat{I} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\theta}{N}\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}} + O\Big(\frac{1}{N^2}\Big)\Big)^N \xrightarrow[N\to\infty]{} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar},$$

其中最后一步用第一篇的乘积极限 $\lim(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{X}/N)^N = \mathrm{e}^{\boldsymbol{X}}$. 两种推导给出同一结果: 有限量子旋转是无穷小生成元的积累.

6.3 轴角参数

经典旋转与量子旋转使用的是同一个物理旋转参数. 一个旋转由转轴 $\boldsymbol{n}$ 与转角 θ 完全确定 (第一篇的轴角表示); 在量子层面, 同一个 $(\boldsymbol{n},\theta)$ 进入指数 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar}$: 转轴进入生成元 $\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}$, 转角是参数本身. 也就是说, 参数化不因空间而变: 旋转的几何数据 $(\boldsymbol{n},\theta)$ 是唯一的, 变的只是它实现的空间与方式: 第 2 节把同一旋转提升到 SU(2), 这里的表示再把它实现为旋转算符, 两层因此形成完全平行的结构:

SU(2) 中的旋转 $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta) = \mathrm{e}^{\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}}$	$\longrightarrow$	$\mathscr{H}$ 旋转算符 $\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar}$
$\downarrow$		$\downarrow$
$\mathfrak{su}(2)$ 生成元 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}$		自伴生成元 $\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}$

(6.2)

两列的每一项逐行对应: SU(2) 中的有限旋转对 Hilbert 空间中的旋转算符, 群生成元对自伴生成元, 指数映射对指数映射. 这就是第 5.3 节对应关系在轴角参数下的具体形式.

6.4 Euler 角

第一篇证明了任意旋转可以分解为三次基本旋转 (zyz 约定):

$$\boldsymbol{R}(\alpha,\beta,\gamma) = \boldsymbol{R}_z(\alpha)\boldsymbol{R}_y(\beta)\boldsymbol{R}_z(\gamma).$$

由第 2.3 节的双覆盖, 它在 SU(2) 中提升为 $\boldsymbol{U}(\alpha,\beta,\gamma)=\boldsymbol{U}_z(\alpha)\boldsymbol{U}_y(\beta)\boldsymbol{U}_z(\gamma)$ (同态 π 保持乘积); 表示保持乘法, 把提升后的等式映到 Hilbert 空间, 立即得到 Euler 角的量子版本:

Prop. 1　Euler 角的量子版本

$$\hat{R}(\alpha,\beta,\gamma):=\hat{R}\big(\boldsymbol{U}(\alpha,\beta,\gamma)\big)=\hat{R}_z(\alpha)\,\hat{R}_y(\beta)\,\hat{R}_z(\gamma)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\hat{J}_z/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\hat{J}_y/\hbar}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\hat{J}_z/\hbar},$$

乘积次序与经典完全一致 (从右往左: 自转, 章动, 进动).

Pf　第一个等号是定义; 第二个等号由表示条件与 Euler 分解逐项保持; 第三个等号由指数形式(6.1) 逐项代入. □

注意参数化的退化不影响算符本身: 万向锁 ($\beta=0$ 或 π) 是坐标选取的奇点, 转动算符 $\hat{R}(\alpha,\beta,\gamma)$ 在 $\beta=0$ 处完全正常, 只是同一算符有无穷多种 Euler 角描述 (第一篇第 3.3 节). 本篇只需要 Euler 角作为旋转算符的一种参数化, 第三篇将用到它在固定 j 空间中的矩阵元.

Part IV

二维表示与总结

本部分转入最重要的特殊情况: 二维表示. 先说明 SU(2) 如何作用在二维复向量空间上, 再系统研究 Pauli 矩阵的纯数学性质 (Hermitian 性, 平方关系, 对易与反对易关系, 迹与行列式), 说明 Pauli 矩阵与 $\mathfrak{su}(2)$ 的关系, 并按量子旋转生成元的统一规范定义 S 型生成元; 然后讨论一般表示与二维表示的关系, 最后总结全篇的两个平行映射.

内容概要

- 掌握 SU(2) 在 $\mathbb{C}^2$ 上的二维幺正表示及其不可约性.
- 会完整推导 Pauli 矩阵的代数性质: $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \delta_{ij}\boldsymbol{I} + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$, 对易, 反对易, 迹与行列式.
- 理解 Pauli 矩阵是 $\mathfrak{su}(2)$ 的生成元 (基 $\boldsymbol{T}_i = -\mathrm{i}\hat{\sigma}_i/2$), 而不是 SU(2) 的群元.
- 掌握 S 型生成元 $\hat{S}_i = \hbar\hat{\sigma}_i/2$ 满足 $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$, 与一般旋转生成元代数结构相同.

7

SU(2) 的特殊二维表示

7.1 二维表示空间

SU(2) 的元素是 2×2 矩阵, 它们自然地作用在二维复向量空间 $\mathbb{C}^2$ 上: 对列向量 $|\chi\rangle\in\mathbb{C}^2$, 定义

$$\rho_2(\boldsymbol{U})\,|\chi\rangle := \boldsymbol{U}\,|\chi\rangle\,,$$

即矩阵乘法. $\mathbb{C}^2$ 配标准内积 $\langle\phi|\chi\rangle=\sum_a\overline{\phi_a}\chi_a$ 成为二维 Hilbert 空间. 由于 $\boldsymbol{U}^\dagger\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}$, 内积被保持: $\langle\boldsymbol{U}\phi|\boldsymbol{U}\chi\rangle=\langle\phi|\chi\rangle$, 故 ρ_2 是幺正表示. 它显然保持乘法 $(\rho_2(\boldsymbol{U}_1)\rho_2(\boldsymbol{U}_2)=\rho_2(\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2))$, 且是忠实的: 若 $\boldsymbol{U}\,|\chi\rangle=|\chi\rangle$ 对一切 $|\chi\rangle$ 成立, 则 $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}$. 表示空间维数为 2, 这是" 二维表示" 一词的来源.

在默认设定下, 这个二维复向量空间正是自旋 1/2 的自旋空间: 自旋态由两个独立分量标记, 构成 $\mathbb{C}^2$. 本篇把 $\mathbb{C}^2$ 当作 SU(2) 作用的表示空间, 只研究其数学结构 (例如不讨论自旋的测量); 自旋的系统理论是第三篇的主题.

7.2 Pauli 矩阵

第 2.3 节为了构造双覆盖已经引入了这三个矩阵, 当时它们是从 Hermitian 无迹矩阵的一般形式自然解出的系数矩阵; 现在系统研究它们的代数性质.

Def. 1 Pauli 矩阵

三个 2×2 矩阵

$$\hat\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\qquad \hat\sigma_2=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\qquad \hat\sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

称为 Pauli 矩阵. 对向量 $\boldsymbol{a}=(a_1,a_2,a_3)$, 记 $\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}=a_1\hat{\sigma}_1+a_2\hat{\sigma}_2+a_3\hat{\sigma}_3$.

Prop. 1　Pauli 矩阵的代数性质

Pauli 矩阵满足: (a) Hermitian 性: $\hat{\sigma}_i^\dagger=\hat{\sigma}_i$; (b) 平方关系: $\hat{\sigma}_i^2=\boldsymbol{I}$, 本征值为 ±1; (c) 乘积公式: $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j=\delta_{ij}\boldsymbol{I}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$, 由此

$$[\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j]=2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k,\qquad \{\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j\}=2\delta_{ij}\boldsymbol{I}$$

(对易与反对易关系); (d) 迹与行列式: $\operatorname{Tr}\hat{\sigma}_i=0$, $\det\hat{\sigma}_i=-1$; (e) 点乘公式: $(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{I}+\mathrm{i}(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, 特别地 $(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2=\boldsymbol{I}$ 对单位向量 $\boldsymbol{n}$ 成立; (f) 基定理: $\{\boldsymbol{I},\hat{\sigma}_1,\hat{\sigma}_2,\hat{\sigma}_3\}$ 构成 $\mathbb{C}^{2\times2}$ 的基, 且 $\operatorname{Tr}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j)=2\delta_{ij}$.

Pf　(a) 逐项取共轭转置即得. (b) 直接平方: $\hat{\sigma}_1^2=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$, 其余同理; 由 $\hat{\sigma}_i^2=\boldsymbol{I}$ 且 $\operatorname{Tr}\hat{\sigma}_i=0$ (见 (d)), 本征值 λ 满足 $\lambda^2=1$ 与 $\lambda_1+\lambda_2=0$, 故为 ±1. (c) 先算非对角情形, 例如 $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{i}&0\\0&-\mathrm{i}\end{pmatrix}=\mathrm{i}\hat{\sigma}_3$; 循环置换得其余两组. 对角情形由 (b) 给出: $\hat{\sigma}_i^2=\boldsymbol{I}=\delta_{ii}\boldsymbol{I}$. 合起来就是乘积公式; 对 $i\neq j$ 由 $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j=\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k=-\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i$ 相加减得对易与反对易; 对 $i=j$ 由 $\hat{\sigma}_i^2=\boldsymbol{I}$ 得 $[\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_i]=0$, $\{\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_i\}=2\boldsymbol{I}$. (d) 逐项读出行列式与迹. (e) 由 (c) 展开双线性组合: $\sum_{ij}a_ib_j(\delta_{ij}\boldsymbol{I}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k)=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{I}+\mathrm{i}(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$. (f) 四个矩阵线性无关 (由 (d) 的迹与对角结构直接看出), 而 $\mathbb{C}^{2\times2}$ 是四维复空间, 故成基; 迹公式由 (c) 取迹: $\operatorname{Tr}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j)=\delta_{ij}\operatorname{Tr}\boldsymbol{I}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\operatorname{Tr}\hat{\sigma}_k=2\delta_{ij}$. □

Eg. 1　Pauli 矩阵的显式计算

由 (c) 立即得到 $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2=\mathrm{i}\hat{\sigma}_3$, $\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3=\mathrm{i}\hat{\sigma}_1$, $\hat{\sigma}_3\hat{\sigma}_1=\mathrm{i}\hat{\sigma}_2$ (循环), 以及 $[\hat{\sigma}_1,\hat{\sigma}_2]=2\mathrm{i}\hat{\sigma}_3$ 等; 而 $(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2=\boldsymbol{I}$ 是第 2.5 节指数求和的依据.

性质 (f) 说明 Pauli 矩阵是 2×2 矩阵世界中的标准基: 任何 2×2 复矩阵都唯一地写成 $x_0\boldsymbol{I}+\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, 其中 $x_0=\operatorname{Tr}\boldsymbol{A}/2$, $a_i=\operatorname{Tr}(\hat{\sigma}_i\boldsymbol{A})/2$. 这些性质在后面将反复使用, 它们是二维表示的全部代数内容.

7.3 Pauli 矩阵与 su(2)

Pauli 矩阵与 $\mathfrak{su}(2)$ 的关系需要精确表述. 一方面, Pauli 矩阵本身不是 SU(2) 的元素: SU(2) 的元素幺正且行列式为 1, 而 $\det\hat{\sigma}_i = -1$. 另一方面, 它们也不是 $\mathfrak{su}(2)$ 的元素: $\mathfrak{su}(2)$ 由反 Hermitian 无迹矩阵组成, 而 $\hat{\sigma}_i$ 是 Hermitian 的. 真正属于 $\mathfrak{su}(2)$ 的基是第 2.4 节的

$$\boldsymbol{T}_i = -\frac{\mathrm{i}}{2}\hat{\sigma}_i, \qquad \boldsymbol{T}_i^\dagger = -\boldsymbol{T}_i, \quad \operatorname{Tr}\boldsymbol{T}_i = 0, \qquad [\boldsymbol{T}_i, \boldsymbol{T}_j] = \varepsilon_{ijk}\boldsymbol{T}_k.$$

因此严格的说法是: Pauli 矩阵 (差一个常数因子 $-\mathrm{i}/2$) 生成 $\mathfrak{su}(2)$, 是 $\mathfrak{su}(2)$ 的生成元; 由它们经指数映射得到 SU(2) 的群元 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2} \in \mathrm{SU}(2)$.

生成元属于 Lie 代数

生成元属于 Lie 代数, 不属于 Lie 群本身: $\boldsymbol{T}_i \in \mathfrak{su}(2)$ 经指数映射生成 $\mathrm{e}^{\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}} \in \mathrm{SU}(2)$. 物理文献常说"SU(2) 的生成元是 $\hat{\sigma}_i/2$", 这是省略了" 无穷小" 的简写: $\hat{\sigma}_i/2$ 通过 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\hat{\sigma}_i/2}$ 决定群元, 因而是 SU(2) 旋转的无穷小生成元. 与第一篇对照: $\boldsymbol{G}_i$ 是 $\mathfrak{so}(3)$ 的生成元, $\mathrm{e}^{\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{G}}$ 是 SO(3) 的群元; 两层结构完全平行.

7.4 定义 S 型生成元

按照量子旋转生成元的统一规范 (第 4.3 节: 自伴生成元 $\hat{J}_i$, 指数形式 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar}$), 把 Pauli 矩阵重新归一化:

Def. 2 S 型生成元

定义

$$\hat{S}_i := \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i, \qquad i = 1, 2, 3,$$

组成三元组 $\hat{\boldsymbol{S}} = (\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3)$.

Prop. 2 S 型生成元的代数

$\hat{S}_i$ 是自伴算符 ($\hat{S}_i^\dagger = \hat{S}_i$), 满足

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = \mathrm{i}\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k,$$

与一般旋转生成元 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 的对易代数(5.1) 结构完全相同. 因此二维表示中的旋转算符写成统一规范的形式:

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}/\hbar}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2},$$

且 $\hat{R}(\boldsymbol{n},2\pi)=-\boldsymbol{I}$: 转 2π 得到负恒等算符.

Pf 自伴性: $\hat{S}_i^\dagger=(\hbar/2)\hat{\sigma}_i^\dagger=\hat{S}_i$. 对易关系:

$$[\hat{S}_i,\hat{S}_j]=\frac{\hbar^2}{4}[\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j]=\frac{\hbar^2}{4}\cdot 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k=\mathrm{i}\hbar\,\varepsilon_{ijk}\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_k=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k.$$

归一化因子 $\hbar/2$ 正是为了使指数形式与一般旋转生成元统一: $\hat{\boldsymbol{S}}/\hbar=\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$, 故 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}/\hbar}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2}$. 2π 行为: $\hat{R}(\boldsymbol{n},2\pi)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}=\cos\pi\,\boldsymbol{I}-\mathrm{i}\sin\pi\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}=-\boldsymbol{I}$ (用 $(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2=\boldsymbol{I}$ 求和指数级数). □

本篇的立场

这是一组 SU(2) 二维表示 (即自旋 1/2 的自旋空间) 中的旋转生成元: 自旋空间的旋转算符正是 $\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}/\hbar}$. 它们的全部内容: $\hat{\boldsymbol{S}}$ 满足与 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 相同的代数, 且 2π 旋转给出 $-\boldsymbol{I}$ – 正是第 2 节所说" 不能作为 SO(3) 普通表示出现" 的结构的一个具体实例. 本篇不讨论自旋的测量与磁矩等物理内容; 那些是第三篇的主题.

8

一般表示与二维表示的关系

8.1 同一个旋转群可以有不同表示

群表示理论的基本观点是:群元没有变, 变的是它作用的表示空间以及对应的表示矩阵. 同一个旋转 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ 可以在不同的空间中用不同维数的矩阵实现. 例如:

- 在 $\mathbb{R}^3$ 上: $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ 本身是 3×3 矩阵 (第一篇, SO(3) 的定义表示);
- 在 $\mathbb{C}$ 上: 每个旋转映为 1×1 矩阵 1 (平凡表示: 一切群元映为单位数);
- 在 $\mathbb{C}^2$ 上 (经 SU(2)): 旋转 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$ 的两个原像给出 2×2 矩阵 $\pm \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}/2}$.

这三个例子中," 旋转 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$" 始终是同一个几何对象; 变化的是表示空间 (三维实空间, 一维平凡空间, 二维复空间) 与表示矩阵 (3×3, 1×1, 2×2). 表示理论研究的正是同一群的全部这些" 化身" 以及它们之间的关系.

8.2 不同维数的表示

Def. 1 不可约表示

设 (ρ, V) 是群 G 的表示. 若 V 存在非平凡的不变子空间 W (即对一切 $g\in G$, $\rho(g)W\subseteq W$, 且 $W\neq\{0\}, V$), 则称表示可约; 否则称为不可约表示 (irreducible representation). 不可约表示是表示论的" 原子": 更复杂的表示由它们拼装而成.

SU(2) 存在各个维数的不可约表示: 一维平凡表示, 二维表示 (第 7 节), 三维表示 (由双覆盖映射 π 给出: 把 $\pm\boldsymbol{U}$ 都映为 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta)$, 得到 SU(2) 的三维不可约表示), 以及更高维的表示族. 在默认设定下, 轨道与自旋正是这些表示的两类物理实现: 轨道部分的旋转由整数维表示描述, 自旋 s 的粒子占用 $2s+1$ 维表示 (自旋 1/2 即二维表示). 这些表示的具体构造, 维数与量子数的对应, 是第三篇的内容; 本篇只需要存在性, 并指出二维表示是其中最简单的一个非平凡成员.

Prop. 1　二维表示不可约

$\mathbb{C}^2$ 上的二维表示 ρ_2 是不可约的.

Pf　反证. 若可约, 则存在一维不变子空间 $\mathrm{Span}\{|\chi\rangle\}$: 对一切 $\boldsymbol{U}\in \mathrm{SU}(2)$, $\boldsymbol{U}|\chi\rangle \propto |\chi\rangle$, 即 $|\chi\rangle$ 是每个 $\boldsymbol{U}$ 的本征向量. 特别地取 $\boldsymbol{U}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\hat{\sigma}_1/2}$: $|\chi\rangle$ 必须是 $\hat{\sigma}_1$ 的本征向量 (对一切 θ 成立); 再取 $\boldsymbol{U}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\hat{\sigma}_2/2}$: $|\chi\rangle$ 又必须是 $\hat{\sigma}_2$ 的本征向量. 但 $\hat{\sigma}_1$ 与 $\hat{\sigma}_2$ 没有共同本征向量 ($\hat{\sigma}_1$ 的本征向量是 $(1,\pm 1)^{\mathsf{T}}/\sqrt{2}$, $\hat{\sigma}_2$ 的本征向量是 $(1,\pm \mathrm{i})^{\mathsf{T}}/\sqrt{2}$, 方向不同), 矛盾. □

8.3　二维表示为什么特殊

二维表示的特殊性在于它是 SU(2) 的最小非平凡表示: 一维表示只有平凡的相位结构, 二维表示是第一个能承载完整代数结构的表示, 而它承载的正是 Pauli 矩阵与 S 型生成元 (第 7.4 节). 从 2π 行为看, 二维表示的旋转算符满足 $\hat{R}(\boldsymbol{n},2\pi)=-\boldsymbol{I}$: 它属于第 2 节所说的" 半整数型" 结构, 是这种结构最具体的数学载体. 本篇只建立其数学上的可存在性: 这样的表示空间、这样的生成元代数、这样的 2π 符号, 全部由 SU(2) 的群结构自然给出. 至于各种不可约表示的量子数、本征值、升降算符与它们的物理意义, 是第三篇的系统理论.

9

第二篇总结

本讲建立了两个平行映射.第一个在有限层面: 群表示把 SU(2) 的每个群元映为 Hilbert 空间中的幺正旋转算符,

$$\boxed{\mathrm{SU}(2) \longrightarrow \mathrm{U}(\mathscr{H})}: \qquad U \longmapsto \hat{R}(U), \qquad \hat{R}(U_1)\hat{R}(U_2) = \hat{R}(U_1U_2),$$

把有限旋转变成 Hilbert 空间旋转算符. 第二个在无穷小层面: 表示诱导 Lie 代数表示, 把 SU(2) 的生成元变成量子旋转生成元,

$$\boxed{\mathfrak{su}(2) \longrightarrow \text{旋转生成元代数}}: \qquad \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T} \longmapsto -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}, \qquad [\hat{J}_i, \hat{J}_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k,$$

对易结构被完整保持: 量子层面的角动量型对易关系不是假设, 而是 SU(2) 的 Lie 代数结构通过表示进入 Hilbert 空间的结果. 两个层面由指数映射沟通: $\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}/\hbar}$, 与 SU(2) 中的 $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{n},\theta) = \mathrm{e}^{\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}}$ 逐字平行 (差 i 与 $1/\hbar$ 因子).

在默认设定 (轨道与自旋两类自由度并存) 下, 全篇以双覆盖为起点: SO(3) 的普通表示中 2π 旋转恒为恒等, 只能容纳整数型结构, 半整数自旋的旋转结构无法作为普通表示出现; SU(2) 与 SO(3) 有相同的 Lie 代数 ($\mathfrak{su}(2) \cong \mathfrak{so}(3)$) 但全局不同 (二对一双覆盖, 转角空间是两倍, 4π 才闭合), 使整数与半整数的旋转结构都能作为普通表示出现 – 整数型表示经 π 降回 SO(3), 半整数型表示只在 SU(2) 层面. SU(2) 的二维表示给出 Pauli 矩阵与 S 型生成元: 由 $\hat{S}_i = \hbar\hat{\sigma}_i/2$ 满足 $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$, 指数给出二维旋转算符 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}/2}$, 其 2π 行为正是 $-\hat{I}$.

整篇的逻辑链可以压缩为:

$$\boxed{\begin{array}{c}\mathrm{SO}(3) \longrightarrow \text{双覆盖 SU(2)} \longrightarrow \text{群表示} \longrightarrow \hat{R} \longrightarrow \text{无穷小生成元} \longrightarrow \text{Lie 代数表示} \\ \longrightarrow \text{二维表示} \longrightarrow \text{Pauli 矩阵与 } S\end{array}} \tag{9.1}$$

第三篇将回答(9.1) 的下一步: 这些目前只是” 旋转表示生成元” 的算符, 为什么在物理上会分别成为轨道角动量、自旋角动量和总角动量? 整数型表示将成为轨道角动量, 半整数型表示将成为自旋.

A

射影表示与双覆盖的严格表述

第 2.1 节指出, 量子态由射线描述, 物理上允许 $\hat{R}(\boldsymbol{n}, 2\pi) = -\hat{I}$ 的旋转结构, 而 SO(3) 的普通表示做不到这一点; 第 2 节引入 SU(2) 双覆盖, 使这种结构成为普通表示. 本附录把这条线索严格化: 用射影幺正表示的语言给出相位的精确定义, 用交换图给出双覆盖在算符层面的严格关系, 并给出从 SO(3) 到 SU(2) 再到 Hilbert 空间旋转算符的完整指数链条.

记号说明: 本附录用 $\hat{U}(R)$ 表示从 SO(3) 提升到 $\mathrm{U}(\mathscr{H})$ 的幺正算符 ($R \in \mathrm{SO}(3)$). 它只定义到整体相位 (第 A.1 小节); 第 3 节起经 SU(2) 构造的旋转算符仍记 $\hat{R}$, 两者的区别正是" 射影表示" 与" 普通表示" 的区别.

A.1 射影幺正表示与相位的严格定义

普通群表示把每个群元映为一个确定的幺正算符, 保持乘法:

$$\rho : G \longrightarrow \mathrm{U}(\mathscr{H}), \qquad \rho(g_1 g_2) = \rho(g_1)\rho(g_2). \tag{A.1}$$

但量子态不是矢量本身: 右矢 $|\psi\rangle$ 与 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|\psi\rangle$ 代表同一个物理状态, 一切测量概率 $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$ 在整体相位下不变. 因此物理状态属于射影 Hilbert 空间 $\mathbb{P}(\mathscr{H})$, 旋转群在物理态上的作用是一个射影幺正表示:

Def. 1　射影幺正表示

射影幺正群 (projective unitary group) 是商群

$$\mathrm{PU}(\mathscr{H}) := \mathrm{U}(\mathscr{H})/\mathrm{U}(1),$$

即把相差一个相位的幺正算符视为同一个元素 (这里 U(1) 指中心标量幺正算符组成的子群 $\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\hat{I}\}$). 商映射记为 q : $\mathrm{U}(\mathscr{H}) \to \mathrm{PU}(\mathscr{H})$, 其核为 $\ker q = \mathrm{U}(1)$. 群同态

$\bar{\rho}:\ G \to \mathrm{PU}(\mathscr{H})$ 称为 G 的射影幺正表示 (projective unitary representation).

对旋转群, 物理作用正是 SO(3) 的射影幺正表示 $\bar{\rho}:\ \mathrm{SO}(3) \to \mathrm{PU}(\mathscr{H})$. 取它的一个提升 $\hat{U}:\ \mathrm{SO}(3) \to \mathrm{U}(\mathscr{H})$, 即满足

$$\boxed{\bar{\rho}(R) = q\big(\hat{U}(R)\big)} \tag{A.2}$$

的幺正算符族. 由于 q 把相位消掉 ($q(\hat{U}_1) = q(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\hat{U}_1)$), 提升回 $\mathrm{U}(\mathscr{H})$ 时, 乘法规则只能保持到相位:

Prop. 1　相位的严格来源

设 $\hat{U}:\ \mathrm{SO}(3) \to \mathrm{U}(\mathscr{H})$ 满足(A.2). 则对 $R_1, R_2 \in \mathrm{SO}(3)$,

$$\hat{U}(R_1R_2)\big[\hat{U}(R_1)\hat{U}(R_2)\big]^{-1} \in \mathrm{U}(1),$$

故存在唯一的 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(R_1,R_2)} \in \mathrm{U}(1)$ 使

$$\boxed{\hat{U}(R_1R_2) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(R_1,R_2)}\,\hat{U}(R_1)\hat{U}(R_2)} \tag{A.3}$$

Pf　由(A.2) 与 $\bar{\rho}$ 保持乘法,

$$q\big(\hat{U}(R_1R_2)\big) = \bar{\rho}(R_1R_2) = \bar{\rho}(R_1)\bar{\rho}(R_2) = q\big(\hat{U}(R_1)\hat{U}(R_2)\big),$$

两个幺正算符落在同一个商类中; 由 $\ker q = \mathrm{U}(1)$, 它们的差属于中心标量子群, 即存在唯一的 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(R_1,R_2)} \in \mathrm{U}(1)$ 使(A.3) 成立. □

于是第 2.1 节讨论的" 整体相位" 有了严格来源: 它来自商映射 q 的核 $\ker q = \mathrm{U}(1)$, 而不是外加的自由度. 只要算符族是从 SO(3) 提升的, 相位就不可避免.

A.2　双覆盖的严格交换图

第 2–3 节建立了双覆盖 $\pi:\ \mathrm{SU}(2) \to \mathrm{SO}(3)$ 与 SU(2) 的普通幺正表示 $\rho:\ \mathrm{SU}(2) \to \mathrm{U}(\mathscr{H})$. 它们与射影表示 $\bar{\rho}$ 的严格关系是交换图:

$$\begin{array}{ccc} \mathrm{SU}(2) & \xrightarrow{\ \rho\ } & \mathrm{U}(\mathscr{H}) \\ {\scriptstyle\pi}\downarrow & & \downarrow{\scriptstyle q} \\ \mathrm{SO}(3) & \xrightarrow[\ \bar{\rho}\ ]{} & \mathrm{PU}(\mathscr{H}) \end{array} \tag{A.4}$$

即交换关系

$$\boxed{q \circ \rho = \bar{\rho} \circ \pi} \tag{A.5}$$

展开: 若 $\boldsymbol{U} \in \mathrm{SU}(2)$ 对应旋转 $R = \pi(\boldsymbol{U})$, 则

$$q\Big(\rho(\boldsymbol{U})\Big) = \bar{\rho}(R).$$

这就是双覆盖解决相位问题的严格表述: 经 π 下推到 SO(3) 后, SU(2) 的普通表示 ρ 与 SO(3) 的射影表示 $\bar{\rho}$ 完全一致 – 相位问题在 SU(2) 层面不存在, 因为它已经被二对一覆盖吸收进群结构.

A.3 为什么 SU(2) 中没有相位

因为 ρ 是普通群表示:

$$\rho(\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2) = \rho(\boldsymbol{U}_1)\rho(\boldsymbol{U}_2),$$

没有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$ 因子. 根本原因是 SU(2) 是 SO(3) 的覆盖群, 二对一覆盖写成短正合序列

$$1 \longrightarrow \{\pm\boldsymbol{I}\} \longrightarrow \mathrm{SU}(2) \xrightarrow{\ \pi\ } \mathrm{SO}(3) \longrightarrow 1, \tag{A.6}$$

其中核 $\{\pm\boldsymbol{I}\} \cong \mathbb{Z}_2$. 半整数表示存在于 SU(2): 表示是否携带 2π 符号, 取决于它把核的生成元 $-\boldsymbol{I}$ 映为 $+\hat{I}$ (整数型) 还是 $-\hat{I}$ (半整数型) (第 2.5 节). 在 SO(3) 层面, 同样的结构只能以(A.3) 的相位形式出现; 正是这个差别使得 SO(3) 只有射影表示, 而 SU(2) 拥有普通表示.

A.4 从 SO(3) 指数到 SU(2) 指数

有限旋转的指数形式 (第一篇):

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta}) = \mathrm{e}^{\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{G}}, \qquad \boldsymbol{\theta} = \theta\,\boldsymbol{n},$$

其中 $\boldsymbol{G}_i$ 是 $\mathfrak{so}(3)$ 的生成元基 (即轴角形式 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{n},\theta) = \mathrm{e}^{\theta\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{G}}$ 的缩写). Lie 群同态的指数映射满足

$$\pi(\mathrm{e}^{X}) = \mathrm{e}^{d\pi(X)}, \qquad \text{即} \qquad \boxed{\pi\circ\exp_{\mathfrak{su}(2)} = \exp_{\mathfrak{so}(3)}\circ d\pi} \tag{A.7}$$

这是严格关系; 第 2.4 节(2.3) 就是它的显式形式. 令

$$X = \boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{T} = -\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} \in \mathfrak{su}(2)$$

(基 $\boldsymbol{T}_i = -\mathrm{i}\hat{\sigma}_i/2$, 第 2.4 节), 则 $d\pi$ 把基 $\boldsymbol{T}_i$ 映为 $\boldsymbol{G}_i$, 故 $d\pi(X) = \boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{G}$, 因此

$$\boxed{\pi\left(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}\right) = \mathrm{e}^{\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{G}}} \tag{A.8}$$

这就是 SO(3) 元素与 SU(2) 元素之间指数对应的严格公式: 给定旋转 $\boldsymbol{R} = \mathrm{e}^{\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{G}}$, 它在 SU(2) 中的两个原像正是 $\pm\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}$ (第 2.3 节).

A.5 得到 Hilbert 空间中的旋转算符

再作用普通表示 $\rho:\ \mathrm{SU}(2)\to\mathrm{U}(\mathscr{H})$, 由(A.8):

$$\boxed{\hat{R}(\boldsymbol{\theta}) = \rho\left(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}\right)} \tag{A.9}$$

对一般角动量表示, 由第 5 节的诱导 Lie 代数表示 $d\rho:\ \mathfrak{su}(2)\to\mathfrak{u}(\mathscr{H})$ (基的对应 $\boldsymbol{T}_i\mapsto -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{J}_i$):

$$\boxed{\hat{R}(\boldsymbol{\theta}) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}} \tag{A.10}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 是 $\mathfrak{su}(2)$ 在 Hilbert 空间上的表示 $d\rho$ 给出的生成元三元组 (第 6 节). 于是完整严格链条是

$$\boxed{\begin{array}{c}\mathrm{SO}(3) \xleftarrow{\pi} \mathrm{SU}(2) \\ \boldsymbol{R}=\pi(\boldsymbol{U}), \qquad \boldsymbol{U}=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}, \\ \hat{R}=\rho(\boldsymbol{U})=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}\end{array}} \tag{A.11}$$

而第 2.1 节相位关系的本质是

$$\boxed{\hat{U}(R_1R_2)\,\hat{U}(R_2)^{-1}\hat{U}(R_1)^{-1}\in \mathrm{U}(1)} \tag{A.12}$$

即 SO(3) 只有到 $\mathrm{PU}(\mathscr{H})$ 的射影表示, 而 SU(2) 才有到 $\mathrm{U}(\mathscr{H})$ 的普通幺正表示. 这就是第 2 节的双覆盖图 2 与第 5 节的交换方块(5.2) 之间的严格数学联系: 后者没有相位的困扰, 不是近似, 而是因为旋转表示统一建立在 SU(2) 层面.