

化学家的入门书——

不可约张量法导论

Irreducible Tensor Methods
AN INTRODUCTION
FOR CHEMISTS

B . L 杨尔弗 著

山西人民出版社

不可约张量法导论

[以色列] B.L. 锡尔弗 著
曾 成 杨 频 王国雄 等译
罗遵度 等校

江苏工业学院图书馆
藏书章

山西人民出版社

1986年 太原

内 容 简 介

本书是为化学家学习不可约张量法而写的一本导论。第一篇介绍旋转群的不可约张量法理论；第二篇介绍其应用；第三、第四篇介绍点群的不可约张量法理论及其应用；第五篇介绍矢量场的应用。

本书可作为高等院校化学系研究生或高年级学生的教材，也可供从事配位化学、无机化学、结构化学和量子化学研究的化学工作者参考。

Brain L. Silver
Irreducible Tensor Methods
An Introduction for Chemists

Academic Press
New York San Francisco London, 1976

不可约张量法导论

〔以色列〕 B.L. 锡尔弗 著
曾 成 杨 频 王国雄 等译
罗遵度 等校
责任编辑 徐亚东

山西人民出版社出版（太原并州北路十一号）
山西省新华书店发行 山西新华印刷厂印刷

开本 850×1168 1/16 印张 12 字数 276千字
1987年2月第1版 1987年2月第1次印刷
印数 1—4,100 册

书号：7088·1420 定价：2.20 元

译者序

加拿大不列颠哥伦比亚大学化学系林慰桢教授应中国科学院福建物质结构研究所卢嘉锡所长的邀请,于1979年5、6月间来华讲学,在福州举办了“配位场理论讲习班”。全国十六所高等院校和研究所共三十人参加了这个班的学习。林慰桢教授讲授的课题是“不可约张量法导论”,并指定 B.L.Silver 编著的《Irreducible Tensor Methods—An Introduction for Chemists》一书作为主要参考书。卢嘉锡教授在推荐此书时曾指出:“该书用比较深入浅出的语言向化学工作者介绍了现代理论化学的一个重要领域——配位场理论中不可缺少的数学工具——不可约张量法。尽管原书还存在一些缺点和错误,到目前为止,它还是同一论题的书籍中最易于为化学和其它学科初学这个方法的人们所接受的一本好的入门书。必须看到,不可约张量方法今天已广泛应用于原子物理、原子核物理、光谱学以至于材料科学的广泛领域。将这本化学家入门书介绍给国内的广大读者是有好处的”。林慰桢教授推荐说:“不可约张量法是配位化学理论上较为深奥的工具。实验工作者虽亦时感有理解的必要,但因学习常觉不易,畏难而退。Silver的此书数年前问世,将这项难于理解的课题,从浅处出发,渐入深境,使学习者不觉其难,实是它独到之处。……”

在卢嘉锡教授和林慰桢教授的鼓励和支持下,福州“配位场理论讲习班”的部分同志和中国科学院福建物质结构研究所的一些同志,在较短的时间内将此书译成中文。参加初译的有:曾成,杨频,王国雄(以下按姓氏笔画排出),马福太,邓敏智,冯良波,刘金波,陈天明,林连堂,林政炎,郑能武,赵琨,姚玉书,徐汉民,赖城明,蔡元坝等同志。后经曾成,杨频,王国雄三同志对全书译文进行了多次修改,并对原文的错误作了改正,定稿后由中国科学院福建物质结构研究所罗遵度同志对译文作了总校。

我们在翻译此书的过程中曾得到中国科学院福建物质结构研究所的领导和业务处、情报室的同志们多方面的支持和帮助,在此谨表谢意。此书初译稿曾由该所油印,在此一并致谢。

虽经反复修改、校阅,但译文中仍难免有错漏之处,恳请读者指正。

译者

1985年12月

著 者 序 言

我试图在本书中介绍不可约张量算符的理论和应用。因本书是针对化学系研究生的，故对数学的深度和阐述性例子的选择作了适当的控制。专用于具有球对称性体系的那一部分理论是属于物理学者称之为角动量理论的范围，它已由Fano和Racah(1959)作了权威性的总结。将此理论应用在分子上，则是Griffith的一本专著(1962)的主题。自从这些经典著作发表以来，技术上已有了进展，但其大多数并没有纳入教科书或论著里。特别是在化学物理中，应用的范围在最近几年里增长得很快。我将技术上的发展，特别是二次量子化的应用，实笛卡儿张量，非对角线的等价算符，以及旋量群的耦合和重耦合系数都包括进本书中。此外，我还介绍了矢量球谐函数，并接着描述光波的多极子展开式，以及用不可约张量表示的相干矩阵表达式。这些资料是用来总结光散射作用的现代公式，它结束了此书的最后一章。在本书中始终强调着球对称性和较低对称性在理论上的紧密关系。

读者只需要有普通的数学知识。掌握一些基本的群论会大有帮助。物理学家，数学家，或理论化学家会感觉到本书深度不够。不在于迎合他们而是作为对一般化学家的指点作用，我们将一些简短（几乎等于零）的章节分散在本书中。这些章节提示读者领会李群，逆步变换，时间反演和其他抽象名词(Borges, 1974)的乐趣。

书中例子几乎全取自近期的科研论文，并且作了相当详细的推导。我相信所有例子都有它们自身引人兴趣之处，但主要目的是用它们来阐明理论技术的实际应用。

(以下略去。)

前 言

‘国王的脸色苍白，双膝发抖。他大声呼叫，命令人把巫师，术士，占星家召来。他们一到，王对他们说：“谁会读墙上的字，解释它的意思，我就赐他穿王的紫袍，戴荣誉的金项链，在王国中居第三高位。”……’

但以理书：5:6,7 *

化学专业和物理专业的大学生在听过了基本群论课程和学习了按照群表示对波函数和算符进行分类的方法之后，应熟悉利用对称性来简化原子和分子中量子力学的问题。从这种分类中，几乎不用推导就可得出选择定则来，这是说明群论威力的最好例子，群论不需要计算就可揭示出普遍规律。粗略地讲，不可约张量法是被设计来推导出体系中由于其空间对称性而必然产生的所有那些性质。这种方法可看成是群论的一个分支，或者，当应用于原子体系上时，也可看成是角动量理论的一部分。

不可约张量的概念，以及使它们发展成为可实际应用的体系主要应归功于Guilio Racah，他的四篇经典论文(Racah, 1942a, b, 1943, 1949)被认为是原子光谱学中的一个突破。处理多电子体系的Racah方法很快就被核物理学家所采用，他们认识到了两种中心场模型之间数学上的紧密联系；这两种中心场就是原子中的电子，以及核壳层理论中的核子（参阅de-Shalit和Talmi, 1963）。

Racah的工作并不是在真空中建立起来的，它部分是基于Eugene Wigner所提出来的角动量理论，并随着角动量理论的推进而共同发展起来。两部权威性的书总结了他们的工作：Fano和Racah(1959)写的“不可约张量集合”，以及Wigner(1959)写的“群论及其在原子光谱的量子力学中的应用”。本书的第一篇叙述了角动量理论的某些部分，它们是理解不可约张量方法所必需的。在第一篇的末尾，即第九章，我们推导出了广泛应用范围内所需要的少数基本表达式。第二篇主要包括各种应用。

Wigner的角动量理论工作大部分是用群论的语言来表达，他还指出许多理论可直接应用到点群上(Wigner, 1940)。这方面一直没有人考虑过，直到1950年，关于点群的不可约张量理论才发展起来，主要的工作是日本的Yukito Tanabe所做。接着是由英国的John Griffith，他的专著“分子对称群的不可约张量法”(Griffith, 1962)是理论上最有综合性的总结。本书第三篇是部分地再现了Griffith的工作。另外还叙述了有关旋量（双值）群的最近工作。技术上还是建立在对状态和算符正确分类的基础上，但这时却是用通常有限群的对称操作所引出的变换来表示。处理点群和球对称性方法之间有许多相似而引人入胜，因而常常加以注释。第四篇包括了第三篇的理论的应用，还简略叙述了二次量子化的应用。

在计算多电子状态的矩阵元时最好是利用亲态比系数(cfp)。这些系数允许我们从包含

• 现代中文译本：圣经，圣经公会出版（1980），第1103页。

较少电子的状态建立起多电子体系的反对称状态。希望这种步骤在第二十一章中会显示出其优越性。cfp的应用几乎全部是由Racah在涉及原子光谱学的问题中发展起来的。这个概念渗入到核壳层理论，之后，又渗入到分子的电子结构中去。

对称性和变换性质的基础和有关概念可用于矢量场。场的多极子展开在物理学中已用了许多年。例如，在与核光谱相关的问题上(Rose,1955)。分子的物理性质(例如，极化率，电子电荷分布)常常用多极子展开来描述。在处理静态场或辐射与分子的相互作用时，很自然地会用到有关场的多极子展开。在第五篇中，对矢量场在坐标转动下的变换进行了分析。

读者不要因为偶而遇到可畏的公式而气馁。化学家一般具有的数学知识已足够克服任何困难。带标记(□)的某些小节指出它们是离题的内容，故可暂时或永久地省略掉。把这些内容搁在一边的做法常常暗示着书中某些部分有更广泛更深入的方面，在这种情况下，读者不要期望有什么方法可以代替认真的讨论。

本书写的是单一的简单主题的各个方面——标量、旋量和矢量场在坐标变换下的行为。我们只限于坐标的转动和反演。甚至于在这些界限内，还有更为复杂的发展我们还没有接触到，但它们只主要对原子和核光谱学家来讲是重要的(参考Judd,1963,1967)。此外，越过这些地平线仍然有着普遍变换理论的广阔平原，在那里可漫游于被物理学家所驯服的一群奇异群和变换之中。我们所涉及到的张量法代表的只是对称性王国中的一个小区域而已。

虽然能指出本书中不可避免的错误的那些读者不会被指定在王国中占第三高位，但他们将受到作者的感谢。

目 录

译者序

著者序言

前 言

第一篇

第一章 转动算符	(1)
1.1 坐标的转动	(1)
1.2 Euler角	(2)
1.3 无限小的转动算符	(4)
1.4 变换的函数	(6)
1.5 单个轴的转动算符	(6)
1.6 转动算符	(7)
1.7 某些错误概念	(8)
1.8 自旋空间中的转动	(8)
1.9 一个例子	(9)
1.10 逆转动算符	(9)
1.11 函数的转动	(9)
1.12 算符的转动	(9)
1.13 关于旋转群的说明	(10)
□ 1.14 关于李群的说明	(10)
1.15 规约	(11)
第二章 Wigner 转动矩阵	(12)
2.1 转动矩阵	(12)
2.2 位相的问题	(13)
2.3 $\mathcal{D}^{(1/2)}$ 和 $\mathcal{D}^{(1)}$ 的形式	(15)
2.4 转动矩阵的性质	(17)
2.5 张量分量的变换	(19)
□ 2.6 对 $\mathcal{D}^{(1/2)}$ 的另一种看法	(20)
2.7 规约	(21)
第三章 两个角动量的耦合	(22)
3.1 两个简单的例子	(22)
3.2 矢量耦合系数	(24)
□ 3.3 关于位相的说明	(25)
3.4 VC 系数的计算和性质	(26)
3.5 $3-j$ 符号	(27)
3.6 $3-j$ 符号的计算	(29)

3.7	Clebsch-Gordan 关系式	(29)
3.8	两个有用的积分	(31)
□ 3.9	Regge对称性	(33)
3.10	$\overline{V}$ 系数	(33)
3.11	最后的说明	(34)
第四章	标量, 矢量, 张量	(35)
4.1	矢量	(35)
4.2	笛卡儿张量	(35)
4.3	不可约的球张量	(35)
4.4	不可约笛卡儿张量	(36)
4.5	不可约张量场	(36)
4.6	标量	(37)
第五章	不可约张量算符	(38)
5.1	不可约张量算符的定义	(38)
□ 5.2	一个例子	(39)
5.3	Racah的对易关系式	(40)
5.4	标量和矢量算符	(41)
□ 5.5	李群	(41)
5.6	复合不可约张量算符的构成	(42)
5.7	标量算符	(45)
5.8	标准基矢	(46)
5.9	其它位相规约	(46)
□ 5.10	关于逆步变换的说明	(46)
5.11	伴随张量算符	(47)
第六章	Wigner-Eckart 定理	(49)
6.1	引言	(49)
6.2	Wigner-Eckart 定理的证明	(49)
6.3	定理的评论与结果	(51)
6.4	宇称	(53)
6.5	选择律	(53)
6.6	加和律	(53)
6.7	关于点群的说明	(55)
第七章	6-j 符号	(56)
7.1	引言	(56)
7.2	重耦合	(56)
7.3	6-j 符号的性质	(59)
7.4	6-j 符号的不变性	(61)
7.5	Regge对称性	(61)
7.6	读者须知	(61)

第八章	$9-j$ 符号	(62)
8.1	$9-j$ 符号的意义	(62)
8.2	$9-j$ 符号的性质	(62)
8.3	算符的重耦合	(64)
8.4	$9-j$ 符号的不变性	(65)
第九章	不可约张量算符的矩阵元	(66)
9.1	引言	(66)
9.2	基本公式的推导	(66)
9.3	ITO的约化矩阵元	(68)
9.4	双张量算符	(69)
9.5	基本方程的评价	(72)
第二篇		
第十章	库仑相互作用	(75)
10.1	球谐函数加和定理	(75)
10.2	p^2 组态的库仑分裂	(76)
第十一章	旋轨耦合	(79)
11.1	旋轨哈密顿算符的矩阵元	(79)
11.2	$3d^2$ 组态的旋轨作用能	(81)
第十二章	磁偶极子-偶极子相互作用	(84)
12.1	偶极子-偶极子哈密顿算符	(84)
12.2	一个例子	(85)
第十三章	自旋-自旋耦合	(88)
第十四章	电子塞曼相互作用	(90)
第十五章	等价算符	(92)
15.1	等价算符	(92)
15.2	非对角线等价算符	(93)
第十六章	R_3 中实张量集——笛卡儿张量	(96)
第十七章	一些多极子展开式	(99)
17.1	引言	(99)
17.2	平面波	(99)
17.3	电多极矩	(99)
17.4	多极子算符的宇称	(102)
第三篇		
第十八章	点群的Racah代数	(103)
18.1	引言	(103)
18.2	位相问题	(103)
18.3	基函数	(104)
18.4	点群的耦合系数	(104)
18.5	V 系数	(106)

18.6	二面体群	(109)
□ 18.7	关于位相的进一步说明	(109)
18.8	W 系数	(109)
18.9	X 系数	(111)
第十九章	算符和矩阵元	(113)
19.1	不可约张量算符	(113)
19.2	Wigner-Eckart定理	(113)
19.3	矩阵元和复合张量算符的RME	(114)
19.4	双张量算符	(115)
19.5	双张量算符的RME	(117)
19.6	旋轨耦合	(118)
第二十章	旋量群	(120)
20.1	引言	(120)
20.2	O^* 群的 V 和 W 系数	(121)
20.3	Wigner-Eckart定理	(121)
□ 20.4	一个例子	(122)
□ 20.5	重复表示的基	(123)
第二十一章	多电子体系矩阵元	(125)
21.1	引言	(125)
21.2	亲态比系数	(126)
21.3	CFP的值	(129)
21.4	多电子体系矩阵元	(129)
第二十二章	多电子体系的约化矩阵元	(132)
22.1	引言	(132)
22.2	自旋无关单电子算符	(132)
22.3	自旋相关单电子算符——旋轨耦合	(134)
□ 22.4	单位张量	(136)
第四篇		
第二十三章	d^5低自旋配合物中的旋轨耦合	(139)
第二十四章	旋轨耦合的进一步例子	(141)
24.1	三个开壳层中的旋轨耦合	(141)
24.2	二面体群的旋轨耦合	(142)
第二十五章	四面体配合物中的电偶极跃迁	(145)
第二十六章	二次量子化	(147)
26.1	算符	(147)
26.2	约化矩阵元	(149)
第二十七章	开壳层分子的光电子能谱	(152)
第五篇		
第二十八章	矢量场	(155)

28.1	引言	(155)
28.2	在转动下矢量场的变换	(155)
28.3	矢量场转动算符的本征矢量	(160)
第二十九章	光	(164)
29.1	偏振光的多极展开式	(164)
29.2	相干矩阵	(166)
第三十章	光散射	(168)
参考文献		(171)
索引		(175)

第一篇

第一章 转动算符

1.1 坐标的转动

我们的初始目的是：当给定的一组坐标绕原点转动时，如何找出简洁的公式来描述这组坐标的任意函数所产生的变化。这是不可约张量方法的重要问题。

把问题通过空间中的物理场来考察是最容易的，例如在这页书上每一点的温度就形成了二维标量场。为了描述此温度分布，我们可以选择两个互相垂直的坐标轴，把它们标记为 x 和 y ，然后造出此页书上许多点的温度数值表。对场的描述很明显地要求有各点及其温度的无限多个数值的表。然而物理和化学中所出现的大部分标量（和矢量）场可以用坐标的函数来描述。例如我们可用函数 $\text{temp}(x, y) = xy$ ，以某种单位来给出此页书上的温度分布（虽然这是不太可能的）。当然，只有在指定点的坐标 (x, y) 是参考我们所选定的轴时这个函数才能应用。设想现在我们把坐标系加以转动。例如利用旧坐标轴 x, y 绕原点逆时针转动 45° ，就可以得到新坐标轴 X, Y 。现在我们想用 X 和 Y 来描述标量（温度）场。很明显，我们不能用同一函数 $\text{temp}(x, y)$ ，而只把 X 取代 x ， Y 取代 y 。因为在旧坐标系中 $\text{temp}(1, 1) = 1$ ，而在新坐标系中，在点 $(1, 1)$ 的温度则是零。为此我们需要 X 和 Y 的不同函数来描述此标量场。

我们所需要的函数是 $\text{TEMP}(X, Y) = \frac{1}{2}(X^2 - Y^2)$ ，这可用几个点来加以验证，而以后

将用更完美的方法来得到它。现在我们提出来的问题是“如果我们同时知道了函数 $\text{temp}(x, y)$ 以及 (X, Y) 坐标系和 (x, y) 坐标系的相对取向时，能找出 $\text{TEMP}(X, Y)$ 来吗？”换句话说，无疑是不需要再重新根据原始的物理数据来找出函数 $\text{TEMP}(X, Y)$ 的形式。这的确是不必要的。在这一章中，我们将涉及“在坐标转动下函数的变换”，它是以探求如何从 $\text{temp}(x, y)$ 导出 $\text{TEMP}(X, Y)$ 为典型问题的通称。第一步是商定出一种明确和方便的方法

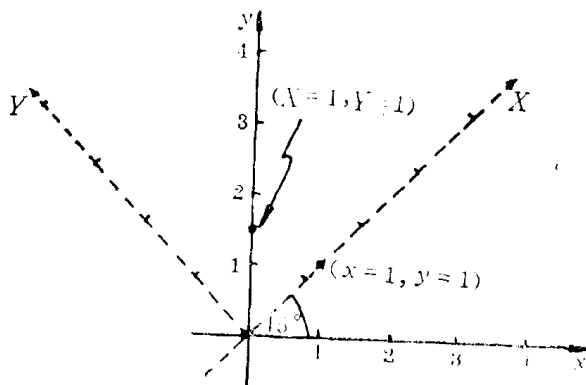


图 1

来描述坐标转动，然而在做之前认识到我们暂时只限制在讨论标量函数的变换上是很重要的。矢量场如磁场的变换不是那么简单的，因为空间中的各点的量除了有数值之外还有方向。矢量场的变换在第二十八章中再讨论。

1.2 EULER角

有两种显而易见的方式来描述坐标的转动——我们可指明所执行的操作或者指明最终的结果。因此在开始的例子中我们可以说：

- (i) x, y 轴系绕着 z 轴逆时针转动 45° ，或者
- (ii) X 轴同时对 x 和 y 轴倾斜 45° ， Y 轴对 y 轴倾斜 45° 而对 x 轴倾斜 135° 。

这两种说法之间的区分看来可能是学究式的，但我们在第二章中将看到，在某些情况下，转动 2π 的效果并不同于转动 4π 的效果，尽管有着这样的事实，即对于这两种转动来说，站在街上的一个人在最初和最终坐标系中的相对取向是相同的。为此理由，我们用操作来描述坐标的转动。

我们在此书中自始至终将应用右手坐标系（图2）。这是一种任意性的选择，但认识到下面的事实是重要的，即如果我们选择了左手坐标系，将使以后推导出来的某些表达式中的符号发生改变。

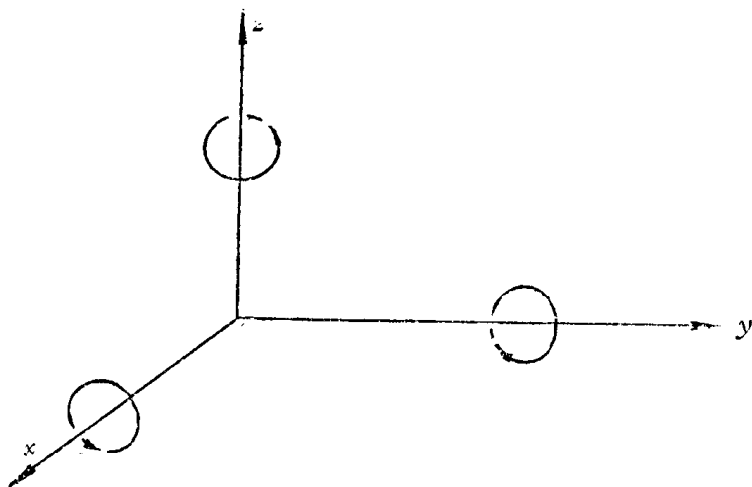


图 2

我们是这样来定义正向转动的，即它将使右手螺旋沿着相关的轴离开原点向前推进。我们用 $R_n(\theta)$ 来作为绕某一轴 n 转动正向角 θ 的符号。现定义三个标准转动（图3）。由原来的坐标系 x, y, z 出发，我们作如下三种操作：

- (i) 绕 z 轴将坐标轴转动一个正向角度 α ($0 \leq \alpha < 2\pi$)（这第一次转动给了我们新坐标系 x', y', z' ，其中 z' 和原有的 z 轴是等同的）；
- (ii) 绕着 y' 轴转动一个正向角 β ($0 \leq \beta < \pi$)，给出了新坐标系 x'', y'', z'' ，其中 $y'' = y'$ ；
- (iii) 绕 z'' 轴转动 γ ($0 \leq \gamma < 2\pi$)而给出了坐标系 x''', y''', z''' ，其中 z''' 和 z'' 是等同的。

角度 α, β 和 γ 是有名的Euler角，它广泛地应用在描述坐标系，函数或固体绕某固定点的转动。应用它们至少具有一个实际优点是角度 α 和 β 等同于最终坐标轴 z''' 相对于原有坐标轴 z

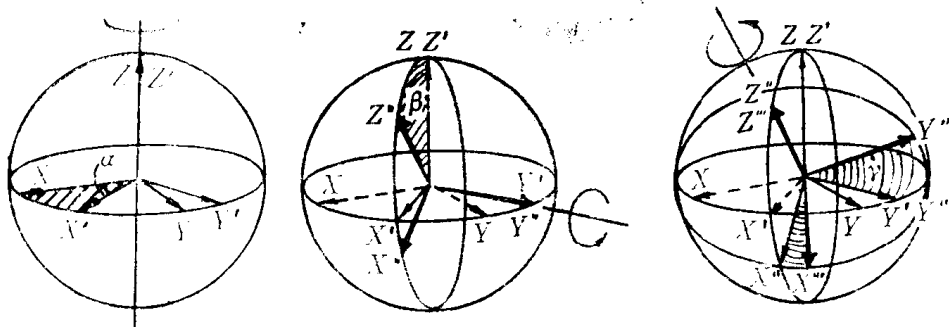


图 3

的两个极角。

注意到绕 y' 轴的转动是限制在 π 或更小的角度 β 内,读者可利用模型来理解如果角度 α, β 和 γ 中的任意两个允许在 0 到 2π 范围内变化而第三个则限制在范围 0 到 π 内变化时,坐标轴可以转动到任何所要求的最终位置上。

三个转动的连续结果可以写成 $R_{z''}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha)$, 其中的次序意味着我们先用 $R_z(\alpha)$ 操作,最后用 $R_{z''}(\gamma)$ 操作。执行绕轴 z, y' 和 z'' 的三个转动的最终结果可以证明是等价于绕固定(原有的)轴 x, y 和 z 坐标系的三个转动。实际上即为

$$R_{z''}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) \equiv R_z(\alpha)R_{y'}(\beta)R_z(\gamma) \quad (1.1)$$

注意 α, β 和 γ 次序的逆向。标准的证明依赖于这样的事实,例如我们可以写出

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(-\alpha)$$

这说明绕 y' 轴转动 β 的结果也可用其他过程得到,即首先利用绕 z 轴转动 $-\alpha$ 而使 y' 轴移回到 y 轴上;然后绕 y 轴把体系转动角度 β ;最后用 $R_z(\alpha)$ 的转动把 y 轴移回到 y' 轴上。应用同样的道理,记住 $z' \equiv z$,

$$\begin{aligned} R_{z''}(\gamma) &= R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}(-\beta) \\ &= [R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(-\alpha)]R_z(\gamma)[R_z(\alpha)R_y(-\beta)R_z(-\alpha)] \end{aligned}$$

因为绕同一轴的转动是对易的,我们可以将此表达式中的第 4 个和第 5 个算符的次序倒反过来,由于 $R_z(-\alpha)R_z(\alpha) \equiv 1$, 我们就有

$$R_{z''}(\gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)R_y(-\beta)R_z(-\alpha)$$

应用此式以及 $R_{y'}(\beta)$ 的先前结果,我们就得到

$$\begin{aligned} R_{z''}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) &= [R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)R_y(-\beta)R_z(-\alpha)] \\ &\quad \times [R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(-\alpha)]R_z(\alpha) \\ &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma) \end{aligned}$$

从而使 (1.1) 式成立。这个等式是有用的,因为在应用中把坐标的变换考虑成为一系列绕某固定坐标系的转动常常是比较容易的。如果必要的话,固定坐标轴变换中所包含的三个角度 α, β 和 γ 可以直接和描述相应的转动坐标轴变换的 Euler 角联系起来。于是固定的角度转动 $R_z(90^\circ)R_y(0^\circ)R_z(180^\circ)$ 明显地是相应于 $\alpha = 90^\circ, \beta = 0^\circ$ 和 $\gamma = 180^\circ$ 的 Euler 角。

解决了我们对于坐标转动的规定和定义之后,我们现在就可进而研究这种转动在函数上产生的影响。

1.3 无限小的转动算符

如第1.1节中所略述, 我们现在处理的问题是函数的变换。我们先限于只考虑坐标系的很小转动。为了更明确起见, 我们采取在坐标系 x, y, z 中的函数 $f(x, y, z)$, 然后绕 z 轴使坐标转动一个无限小的正向角 $\delta\theta$ 而给出坐标轴 X, Y, Z 。我们设法把这种情况表示在图4中。为了举例说明的目的, 我们在图4中应用了二维的标量场, 并作出一些场的等值线。我们现在就来找出 $F(X, Y, Z)$ 的形式, 即在新坐标系中给出标量场的函数。

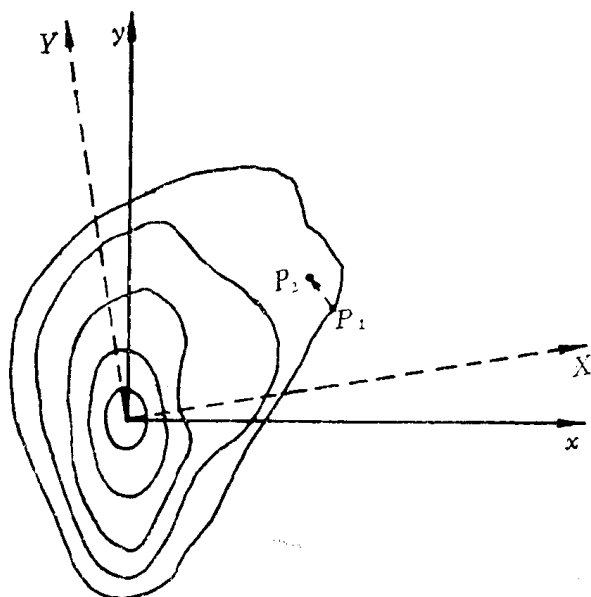


图 4

在原有坐标系中选定任意一点 P_1 , 当坐标系转动时它也随着转动。这个点转动后的位置用 P_2 表示。 P_1 在旧的和新的坐标系中的坐标各为 (x_1, y_1, z_1) 和 (X_1, Y_1, Z_1) 。 P_2 在两个坐标系中的坐标则各为 (x_2, y_2, z_2) 和 (X_2, Y_2, Z_2) 。认识到一组数 $[x_1, y_1, z_1]$ 等同于另一组数 $[X_2, Y_2, Z_2]$ 是很重要的,

$$[x_1, y_1, z_1] = [X_2, Y_2, Z_2] \quad (1.2)$$

这恰好是意味着在旧坐标系中 P_1 的位置等价于在新坐标系中 P_2 的位置。在点 P_2 上由 $f(x_2, y_2, z_2)$ 所给出的函数值现在是等于同一点上函数 F 的值 $F(X_2, Y_2, Z_2)$,

$$f(x_2, y_2, z_2) = F(X_2, Y_2, Z_2) \quad (1.3)$$

这个等式是从下列事实得出的, 即空间中某一点的标量场的大小不依赖于我们选用哪一种坐标系。从(1.2)式中有 $F(X_2, Y_2, Z_2) = F(x_1, y_1, z_1)$, 因此从(1.3)推出

$$f(x_2, y_2, z_2) = F(x_1, y_1, z_1) \quad (1.4)$$

这个关系式以后将用到。

我们现在来找出把 f 改变成新函数 F 的算符, 函数 F 以新坐标系来描述场。在着手之前我们必须作一些一般的三角运算。考虑到图5, 其中指出了点 P_1 和 P_2 , 我们的目的是找出 P_1C 和 P_2C , 具体步骤如下:

$$\begin{aligned} OA_2/OP_1 &= OA_2/OP_2 \\ &= \cos(\theta + \delta\theta) \\ &= \cos\theta\cos\delta\theta - \sin\theta\sin\delta\theta \end{aligned}$$

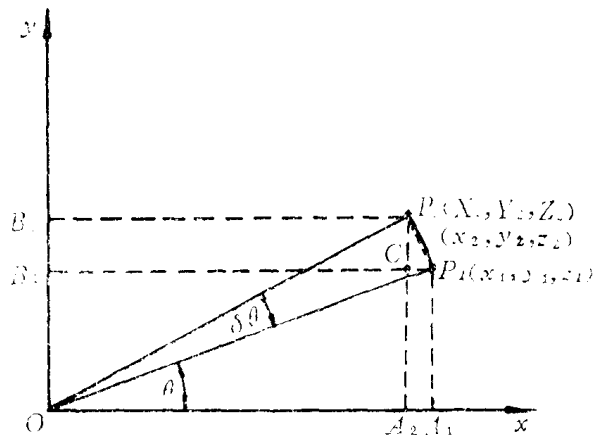


图 5

$$= (OA_1/OP_1)\cos\delta\theta - (A_1P_1/OP_1)\sin\delta\theta$$

$$= (x_1/OP_1)\cos\delta\theta - (y_1/OP_1)\sin\delta\theta$$

其中 (x_1, y_1, z_1) 是点 P_1 的坐标。

如果 $\delta\theta$ 趋于零, $\sin\delta\theta \rightarrow \delta\theta$ 和 $\cos\delta\theta \rightarrow 1$, 因而

$$OA_2/OP_1 \rightarrow x_1/OP_1 - (y_1/OP_1)\delta\theta, \quad OA_2 \rightarrow x_1 - y_1\delta\theta$$

$$CP_1 = A_2A_1 = OA_1 - OA_2 = x_1 - x_1 + y_1\delta\theta = y_1\delta\theta$$

类似地, 我们可得到 $CP_2 = x_1\delta\theta$ 。

下一步是用 P_1 的场值来表达在 P_2 上的场值:

$$f(x_2, y_2, z_2) = f(x_1, y_1, z_1) + y_1\delta\theta \left[\frac{-\partial f(x_1, y_1, z_1)}{\partial x} \right] + x_1\delta\theta \left[\frac{\partial f(x_1, y_1, z_1)}{\partial y} \right]$$

用文字来表述就是在 P_2 点上的场值是等于 P_1 点上的场值加上两个无限小的增量: 即(从 P_1 过渡到 P_2 时 x 坐标的变化) $\times$ (在点 P_1 上相对于 x 的场梯度) 以及在 P_1 过渡到 P_2 时由于 y 坐标变化所引起的类似的增量。应用 (1.4) 式并去掉指标 1, 我们得到

$$F(x, y, z) = [1 + \delta\theta(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x)]f(x, y, z) \quad (1.5)$$

我们可将它缩写成

$$F(r) = R_z(\delta\theta)f(r) \quad (1.6)$$

算符 $R_z(\delta\theta)$ 就是绕 z 轴的无限小转动算符, 它把函数 f 转变成函数 F 。这个算符只适用于无限小的转动, 因为我们的推导只在 $\delta\theta \rightarrow 0$ 时才成立。我们可以利用下列等式

$$l_z = -i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x)$$

而从 (1.5) 式得出 $R_z(\delta\theta)$ 的另一种形式

$$R_z(\delta\theta) = 1 + i\delta\theta l_z \quad (1.7)$$

请注意我们自始至终对角动量都采用 $\hbar/2\pi$ 为单位。

用物理学家的语言来说, 算符 l_z 是“绕 Z 轴的无限小转动的生成算符。”更繁琐一些, 我们还可加上“在标量场的情况下”这一条件。还有其他的无限小的变换, 例如移动, 它可用形式为 $1 + iaS$ 来表达, 其中 S 是一个算符, 它可说成是“生成”出变换来, a 则是某种无限小的标量位移(Messiah, 1962, 第十五章)。