5 回転群 $SO(3)$ ⌓

◁ ▷

5.1 回転群の定義と基本表現

この節では，リー群の中で最も基本的で物理においても様々な分野で現れる回転群をリー群の例として，生成元やリー環，指数写像，表現，など基本的な概念を紹介する．回転はすでに述べたようにベクトルの内積を一定にする変換として特徴づけられる．その基本的定義を復習しておこう．

３次元空間の２つのベクトルを $|u\rangle$,$|v\rangle$ を

$$\begin{aligned} |u\rangle &= u_1|1\rangle + u_2|2\rangle + u_3|3\rangle = u_1\mathbf{e}_1 + u_2\mathbf{e}_2 + u_3\mathbf{e}_3 \quad , \\ |v\rangle &= v_1|1\rangle + v_2|2\rangle + v_3|3\rangle = v_1\mathbf{e}_1 + v_2\mathbf{e}_2 + v_3\mathbf{e}_3 \end{aligned} \tag{5.1}$$

とする．ただし，$|i\rangle(\mathbf{e}_i)$ は正規直交基底で，内積は

$$\mathbf{e}_i^\dagger \mathbf{e}_j = \langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{5.2}$$

である．ベクトルの内積は

$$(|u\rangle, |v\rangle) = \langle u|v\rangle = \sum_{ij} u_i v_j \langle i|j\rangle = \sum_{ij} u_i v_j \delta_{ij} = \mathbf{u}^t \mathbf{v} \tag{5.3}$$

で与えられる．

次に，回転 $\hat{R}$ は１次変換なので，

$$|i\rangle' = \hat{R}|i\rangle = \sum_j |j\rangle R_{ji} = \sum_j |j\rangle\langle j|\hat{R}|i\rangle \tag{5.4}$$

のように，基底の変換を与えれば定義される．このとき新しい基底の内積は

$$(|i\rangle', |j\rangle') = (\sum_{kl} |k\rangle R_{ki}, |l\rangle R_{lj}) = \sum_{kl} \delta_{kl} R_{ki} R_{lj} = \sum_k R_{ki} R_{kj} = (R^t R)_{ij} \tag{5.5}$$

回転では，正規直交基底はやはり正規直交基底に移るので

$$(|i\rangle', |j\rangle') = \delta_{ij} \tag{5.6}$$

が成り立つ．つまり

$$\sum_k R_{ki} R_{kj} = (R^t R)_{ij} = \delta_{ij} \tag{5.7}$$

または $R^t = R^{-1}$ をみたす．このような行列 R は，直交行列と呼ばれ, 回転群はこの３次元直交行列と同一視できる．一方で，これは回転群の行列表現と思うことができる．この表現は忠実な表現であり，回転群の定義と思うことができることから，**基本表現**と呼ばれる．

この変換でベクトルは

$$|u'\rangle = \hat{R}|u\rangle = \sum_i \hat{R}|i\rangle u_i = \sum_i |j\rangle R_{ji} u_i \tag{5.8}$$

成分に関しては

$$\mathbf{u}' = R\mathbf{u} \tag{5.9}$$

内積は,$\sum_i u_i' v_i' = \sum_i u_i v_i$ になっていることが分かる.

このようにベクトルの成分に関する変換が表現行列の積として書ける．これは，回転群の元と同様に，それの作用する空間ベクトルを表現空間 ($\mathbb{C}$ 加群) の複素ベクトルの写像 π を与えたことになる．つまり

$$\begin{array}{lllll} \pi : & G \rightarrow & Hom(V,V) & : g \mapsto & D(g) \\ \pi : & \mathbb{R}^3 \rightarrow & V & : |i\rangle \mapsto & \begin{pmatrix} \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} \; : |u\rangle \; \mapsto \; \mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} \end{array} \tag{5.10}$$

5.2 回転行列と無限小回転

回転は，回転軸と角度で指定できる．そこで，i 方向軸の回転の基本表現は

$$\begin{aligned} R^{(1)}_\alpha &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \\ R^{(2)}_\beta &= \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \\ R^{(3)}_\gamma &= \begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{5.11}$$

で与えられる．

実際，

$$R^{(3)}_\psi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\psi \\ \sin\psi \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5.12}$$

のように R の各列はそれぞれの基底の返還後のベクトルの成分 $|i\rangle' = |1\rangle\cos\psi + |2\rangle\sin\psi$ を与える．$\mathbf{e}_3$ の返還後はよって図のようになる．（x 軸が第 1 象限 y 軸が第 2 象限に動く）

これらの変換の様子は，無限小変換を考えると分かりやすい．$\alpha, \beta, \gamma << 1$ として，それぞれの方向の無限小変換を考えると

$$\begin{aligned} R^{(1)}_\alpha &\simeq \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\alpha \\ 0 & \alpha & 1 \end{pmatrix} \\ R^{(2)}_\beta &\simeq \begin{pmatrix} 1 & 0 & \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\beta & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ R^{(3)}_\gamma &\simeq \begin{pmatrix} 1 & -\gamma & 0 \\ \gamma & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{5.13}$$

(これによってそれぞれの基底ベクトルの変換の方向が分かる．)
　この無限小変換を, パラメータの１次として

$$R_\epsilon^{(i)} = \mathbf{1} - i\epsilon J_i \tag{5.14}$$

と書いた時 J_i を i 軸周りの回転の生成元とよぶ．生成元は,

$$\left.\frac{dR_\theta^{(i)}}{d\theta}\right|_{\theta=0} = -iJ_i \tag{5.15}$$

とも定義できる．
　1 軸 (x 軸) 周りの回転は

$$R_\alpha^{(1)} = e^{-i\alpha J_1} \sim 1 - i\alpha J_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\alpha \\ 0 & \alpha & 1 \end{pmatrix} \tag{5.16}$$

と書けるので

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{5.17}$$

同様に，それぞれの軸の回転の生成元は

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \ , \ J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \ , \ J_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.18}$$

　これより，生成元の交換関係は

基本交換関係

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k \tag{5.19}$$

　を満たすことがわかる．ここに，ϵ_{ijk} は完全反対称テンソルとよばれ

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (ijk) \text{ が偶置換} \\ -1 & (ijk) \text{ が奇置換} \\ 0 & \text{その他の組み合わせ} \end{cases} \tag{5.20}$$

　生成元の交換関係は，対応する連続群の局所的な構造を決定することが知られている．

5.3 指数写像とリー環

一方，それぞれの k 軸周りの角 α の回転は，生成元の指数関数として

$$R_\alpha^{(k)} = e^{-i\alpha J_k} \tag{5.21}$$

と表すことができる．これを，**指数写像**と呼ぶ．

これは次のように考えると導くことができる．まず，k 軸まわりの角度 t の回転行列を $g(t)$ とかくさらに ϵ だけ回転すると群の準同型の関係から

$$g(\epsilon)g(t) = g(t+\epsilon) \tag{5.22}$$

ところが，k 軸周りの無限小変換を与える行列は $g(\epsilon) = 1 - i\epsilon J_k$ なので

$$(1 - i\epsilon J_k)g(t) = g(t+\epsilon) \tag{5.23}$$

これを整理すると

$$\frac{g(t+\epsilon) - g(t)}{\epsilon} = -iJ_k g(t) \tag{5.24}$$

という関係式を得る．ここで，$\epsilon \to 0$ の極限を考えると，上の式は微分方程式

$$\frac{d}{dt}g(t) = -iJ_k g(t) \tag{5.25}$$

をえる．この微分方程式は行列 g に関する微分方程式だが，次の情報からテーラー展開で解を求めることができる．

1. $t = 0$ は無回転を表すので $g(0) = \mathbf{1}$. ただし右辺は 3×3 の単位行列である．
2. 両辺を微分してやると
$$\left.\frac{d^n}{dt^n}g(t)\right|_{t=0} = (-iJ_k)^n g(0) \tag{5.26}$$

よって，テーラー展開より

$$g(t) = \sum_n \frac{t^n}{n!}\left.\frac{d^n}{dt^n}g(t)\right|_{t=0} = \sum_n \frac{t^n}{n!}(-iJ_k)^n g(0) = e^{-iJ_k t} \tag{5.27}$$

となり証明できた．

ここで，指数写像によって確かに無限小変換から有限変換の行列が出ることを見ておこう．ここで

$$-iJ_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = I_1 \tag{5.28}$$

とする，すると

$$I_1^2 = -\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = -I_0 \tag{5.29}$$

よって

$$\begin{aligned} I_1^{2n} &= (-1)^n I_0 \\ I_1^{2n+1} &= (-1)^n I_1 \end{aligned} \tag{5.30}$$

である．代入すると

$$e^{-i\alpha J_1} = \mathbf{1} + \sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m!}\alpha^m I_1^m = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n)!}\alpha^{2n}I_0 + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\alpha^{2n+1}I_1$$

$$= \mathbf{1} - I_0 + \cos\alpha I_0 + \sin\alpha I_1 \tag{5.31}$$

なので，

$$e^{-i\alpha J_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \tag{5.32}$$

ここで，実直交行列であることは

$$(e^{-i\alpha J_i})^t = e^{-i\alpha J_i^t} = e^{i\alpha J_i} \quad \Rightarrow \quad J_i^t = -J_i \tag{5.33}$$

かつ,（ユニタリー）

$$(e^{-i\alpha J_i})^\dagger = e^{i\alpha J_i^\dagger} = e^{i\alpha J_i} \quad \Rightarrow \quad J_i^\dagger = J_i \tag{5.34}$$

が成り立つので，

回転群の基本表現の生成元は，反対称エルミート行列である．

一般の回転を表す行列は，これらの回転を組み合わせることによって実現される．指数関数の形で書かれた，回転の行列の積は，次の Baker-Campbell-Hausdorff の公式によって再び指数関数の形に書けることが分かる．

Baker-Campbell-Hausdorff の公式

$$e^X e^Y = e^{X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]+\frac{1}{12}[X-Y,[X,Y]]+\cdots+[\cdots[X,Y]]]+\cdots} \tag{5.35}$$

２次の項までを具体的に比べてみると

$$(1+X+\frac{1}{2}X^2)(1+Y+\frac{1}{2}Y^2) = 1+X+Y+XY+\frac{1}{2}(X^2+Y^2)+\cdots \tag{5.36}$$

$$1+(X+Y+\frac{1}{2}[X,Y])+\frac{1}{2}(X+Y)^2 = 1+X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]+\frac{1}{2}(X^2+Y^2+XY+YX)+\cdots \tag{5.37}$$

確かに，公式が成立していることが分かる． *q.e.d.*

一方，回転群の生成元 J_i の交換関係は生成元 J_i の１次なので，BCH 公式の右辺の指数関数の肩は繰り返し交換関係を使うことで，結局

$$R_{\alpha\beta\gamma} = e^{-i\sum_i \theta_i J_i} \tag{5.38}$$

のように書くことができる．

幾何学的には，この回転は，$\vec{\theta} = \theta\mathbf{n}$ とすると，

$$e^{-i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}} \tag{5.39}$$

と書ける．この時，$\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}$ は，ベクトル $\mathbf{n}$ 方向を軸とする回転の生成元である．一方，$\theta = |\vec{\theta}|$ は，回転角を与えている．

このことから，生成元の線形結合はある軸の回転の無限小回転の生成元になっている．この生成元全体の作る空間は，J_i を基底とするベクトル空間でとかんがえられそこには交換子 $[\cdot,\cdot]$ が定義されている．この代数 $(J_i, [\cdot,\cdot])$ が，回転群の**リー環**である．回転群 $SO(3)$ のリー環は小文字で $so(3)$ と書かれたり，$Lie(G)$，または $\mathfrak{so}(3)$ と書かれる．

指数写像は，リー環からリー群への

$$Exp \ : \ \mathfrak{g} \ \rightarrow \ G \tag{5.40}$$

という写像を与えている．

5.4 オイラー角

それぞれの軸の周りに関する回転が定義できると，一般の回転はその組み合わせで実現することができる．ここで，一般の回転を与える回転行列を定義しておこう．ここで与えるのはオイラー角と呼ばれる３つの角度をパラメータとする回転行列である．

３次元の座標系の任意の回転は次のような３種類の連続する回転で与えられる．任意の２つの座標系 S と S' が与えられた時，$x-y$ 平面と $x'-y'$ 平面を考え，２面の交線を y_1 軸とし，その y 軸との角度を α，y' 軸との角度を γ, さらに２面のなす角度を β とする．

1. z 軸の周りの角 α の回転 R^z_α．この回転で座標軸 x, y, z は $x_1, y_1, z_1 = z$ 軸に移る．$(0 \leq \alpha < 2\pi)$

2. y_1 軸の周りの角 β の回転．この回転で S 系の $x-y$ 面が回転される．対応する，回転行列は
$$R^{y_1}_\beta = R^z_\alpha R^y_\beta R^z_{-\alpha} \tag{5.41}$$
つまり，z 軸周りでもとに戻ってから y 軸周りに回転し，もう一度 z 軸周りに回してやる．この回転で (x_1, y_1, z_1) が $(x_2, y_2 = y_1, z_2)$ に移る．$(0 \leq \beta \leq \pi)$

3. z_2 軸周りの角 γ の回転
$$R^{z_2}_\gamma = R^{y_1}_\beta R^{z_1}_\gamma R^{y_1}_{-\beta} \tag{5.42}$$
これで，$(x_2, y_2 = y_1, z_2)$ が $(X, Y, Z = z_2)$ に移る．$(0 \leq \gamma < 2\pi)$

4. これらの３っつの回転の合成は
$$R^{z_1}_\gamma = R^z_\alpha R^z_\gamma R^z_{-\alpha} = R^z_\gamma \tag{5.43}$$
に注意すると
$$R_{\alpha\beta\gamma} = R^{z_2}_\gamma R^{y_1}_\beta R^z_\alpha = R^z_\alpha R^y_\beta R^z_\gamma \tag{5.44}$$
となる．この回転はそれぞれもとの軸に関する回転の合成になっている．

5. オイラー角を慣例に従って (ϕ, θ, ψ) とすると
$$\begin{aligned}
R_{\phi\theta\psi} &= e^{-i\phi J_3} e^{-i\theta J_2} e^{-i\psi J_3} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\psi & -\cos\theta\sin\psi & \sin\theta \\ \sin\psi & \cos\psi & 0 \\ -\sin\theta\cos\psi & \sin\theta\sin\psi & \cos\theta \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi\cos\psi - \sin\phi\sin\psi & -\cos\theta\cos\phi\sin\psi - \sin\phi\cos\psi & \sin\theta\cos\phi \\ \cos\theta\sin\phi\cos\psi + \cos\phi\sin\psi & -\cos\theta\sin\phi\sin\psi + \cos\phi\cos\psi & \sin\theta\sin\phi \\ -\sin\theta\cos\psi & \sin\theta\sin\psi & \cos\theta \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{5.45}$$

6. $\mathbf{e}_3$ の回転がちょうど極座標の動径方向の表す単位行列になっていることが分かる．つまり，
$$R_{\phi,\theta}\mathbf{e}_3 = \frac{\mathbf{r}}{r}\ , \quad \mathbf{r} = (x, y, z)\ ,\ r^2 = \mathbf{r}^2 \tag{5.46}$$
で，(ϕ, θ) は S^2 上の点を表す，つまり座標を与えている．

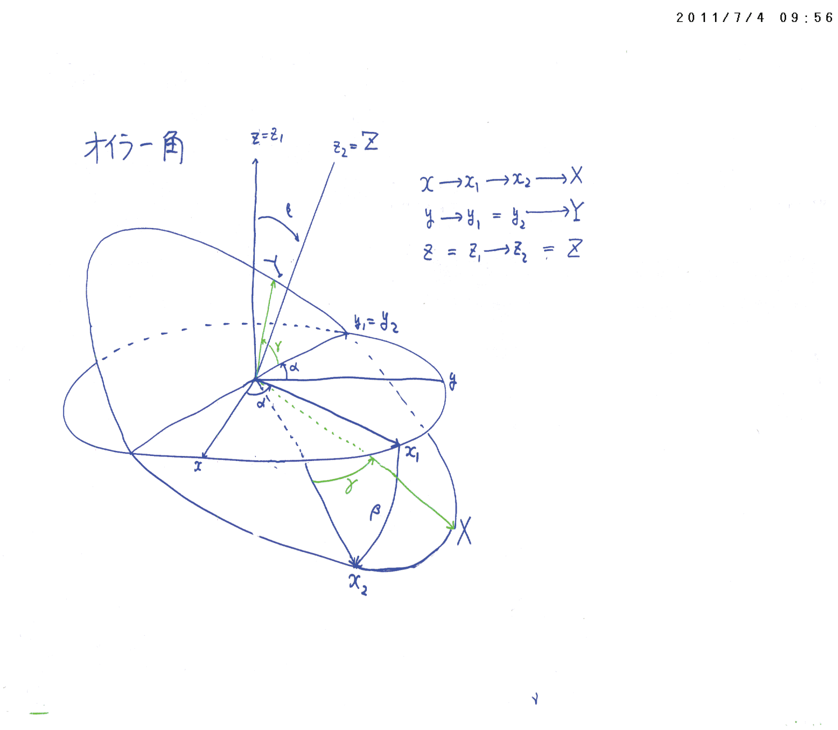

Figure 3: オイラー角

5.5 回転群の表現

物理への応用，特に量子力学への応用には，この回転群の表現とくにユニタリー表現を求めることが重要になる．回転群の表現を求めるとは，有限群の場合と同様に，行列とくにユニタリー行列への準同型写像

$$D : G \ni \hat{R}_{\alpha\beta\gamma} \;\; \rightarrow \;\; D(R_{\alpha\beta\gamma}) \in Mat(\mathbb{C}) \tag{5.47}$$

を求めることである．つまり，回転行列 $R_{\alpha\beta\gamma}$ と同じ積の法則

$$D(R_{\alpha\beta\gamma})D(R_{\alpha'\beta'\gamma'}) = D(R_{\alpha\beta\gamma}R_{\alpha'\beta'\gamma'}) \tag{5.48}$$

を満たすような行列を求めることにある．ところが，回転行列が指数写像で与えられているとし，その積が BCH の公式で与えられるとすると，生成元 J_k と同じ交換関係を満たす行列を使ってその指数写像で有限回転の行列を作ると，回転行列と同じ積の規則を満たすことが分かる．つまり．

リー群の表現は，リー環の表現を求めることと等価である．

　つまり，リー環からある (表現) ベクトル空間 V の変換 Hom(V,V) への環準同型写像を求めればよい．

5.5.1 もっとも簡単な表現　スピン表現

そこで，回転群の表現,（一般に連続群の表現）を求めるためにそのリー環の表現を求める．回転群の場合，無限小変換のなすリー環は

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \tag{5.49}$$

を満たすことを示した．ここで，抽象化するために一般に演算子として表示した．もちろん，基本表現で定義されていると思ってもよい．

回転群はユニタリー群の一種なので，回転行列はユニタリー表現を持ちそのためリー環はエルミート行列になる．

中でも，上の生成元の交換関係は次の 2×2 エルミート行列で表現することができる．

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{5.50}$$

この行列を，パウリ行列と呼ぶ．パウリ行列は

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\mathbf{1} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k \tag{5.51}$$

を満たす．ここで，$\mathbf{1}$ は 2×2 単位行列である．これから，簡単に次の交換関係が導ける．

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \tag{5.52}$$

という交換関係が成り立つので，

$$\hat{J}_i = \frac{1}{2}\sigma_i \tag{5.53}$$

とすると，生成元の交換関係を満たす．つまり

パウリ行列はリー環（無限小回転の生成元）の表現を与えている．

無限小回転の表現ができると，有限回転を与える行列はベクトルの回転と同様に指数関数を使って

$$D_{\frac{1}{2}}(R_{\vec{\theta}}) = e^{-i\frac{1}{2}\theta_i\sigma_i} \tag{5.54}$$

という，2×2 行列であらわされる．これは，回転の積を行列の積として表していることは，ベクトルの回転と同じであるので回転群の表現となり，2 次元表現または $j = \frac{1}{2}$ 表現やスピン表現などと呼ぶ．

この 2 次元表現の行列によって回転されるベクトル（単に複素数の組）$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = (u_\alpha)$ をスピノルと呼ぶ．

オイラー角を使って回転の表現を求めると

$$D_{\frac{1}{2}}(R_{\phi\theta\psi}) = e^{-i\frac{1}{2}\phi\sigma_3}e^{-i\frac{1}{2}\theta\sigma_2}e^{-i\frac{1}{2}\psi\sigma_3} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{1}{2}(\psi+\phi)} & -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{1}{2}(\phi-\psi)} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{1}{2}(\phi-\psi)} & \cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{1}{2}(\psi+\phi)} \end{pmatrix} \tag{5.55}$$

証明

$$g = g_3(\phi)g_2(\theta)g_3(\psi) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}\phi} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{1}{2}\phi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}\psi} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{1}{2}\psi} \end{pmatrix} \tag{5.56}$$

q.e.d.

2 価表現　注意するべきことは，指数の肩に $\frac{1}{2}$ がついているために，2π 回転ではなく 4π 回転しないと元に戻らないことで，例えば回転の単位元 $\phi = 0, 2\pi$ がそれぞれ別の 2 個の元に対応してしまう．これは，厳密な意味での表現ではなく，スピン表現が回転群の 2 価表現になっていることを意味している．

物理的には，電子がこの表現に属することが分かっていることから，この 2 x 2 行列で定義される $SU(2)$ という群がより基本的であるということになる．

スピン表現は $SU(2)$ の基本表現になっている．

$SO(3) = SU(2)/Z_2$ である．ここで見たことは，リー環が同形であっても必ずしも群が同形であるとは限らない．この準同型写像の構造は

$$1 \to \mathbb{Z}_2 \to SU(2) \to SO(3) \to 1 \tag{5.57}$$

と表すことができる．

5.5.2　一般の表現

この章ではいよいよ，回転群のすべての表現を求める．表現の構成は，前節で説明したように，リー環の行列表現を求めればよい．リー環の表現が得られれば，指数写像によって回転群の表現を得ることができる．(以下では，演算子の hat を落として書く．)

よって，表現を求めることは

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \tag{5.58}$$

という交換関係を満たす行列を構成することに帰着する．微小回転のベクトルへの作用は

$$\hat{J}_i|j\rangle = \sum |k\rangle\langle k|\hat{J}_i|j\rangle \tag{5.59}$$

と書ける．ここでは，このような表現の中で既約表現に対応するベクトル空間 $V = \{|i\rangle\}$ とその表現行列 $\langle k|\hat{J}_i|j\rangle \in End(V)$ を構成する．

1. **昇降演算子：**まず，それぞれの生成元の行列を求めるために，回転群の生成元（角運動量演算子）の交換関係を次のように書きなおす．

$$\hat{J}_3 \quad , \quad \hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2 \tag{5.60}$$

ここで，$\hat{J}_\pm$ は，それぞれはエルミートではない．$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$ 一般の生成元は

$$\hat{J} = \phi\hat{J}_3 + \omega\hat{J}_+ + \bar{\omega}\hat{J}_- \tag{5.61}$$

で与えられる．

これらの生成元の交換関係は

$$[J_3, J_\pm] = \pm J_\pm \quad , \quad [J_+, J_-] = 2J_3 \tag{5.62}$$

なので，$J_\pm$ は，J_3 の固有値を ± 1 上げ下げする，昇降演算子である．

2. **全角運動量 (Casimir 演算子)：**
次に，全角運動量に相当する
$$\mathbf{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 = J_3^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) \tag{5.63}$$
を導入すると
$$[\mathbf{J}^2, J_3] = 0 \tag{5.64}$$
が成り立つ．
証明
$$\begin{aligned} [J_3, J_+J_-] &= [J_3, J_+]J_- + J_+[J_3, J_-] = J_+J_- - J_+J_- = 0 \\ [J_3, J_-J_+] &= [J_3, J_-]J_+ + J_-[J_3, J_+] = -J_-J_+ + J_-J_+ = 0 \end{aligned} \tag{5.65}$$
$\mathbf{J}^2$ は３方向について対称なので，他の成分も同じように可換になる． *q.e.d.*

全角運動量

$$[\mathbf{J}^2, J_i] = 0 \tag{5.66}$$
$\mathbf{J}^2$（全角運動量）は**カシミア演算子**と呼ばれ，$\mathbf{J}^2$ と J_3 を同時対角化することができる．また，既約表現の表現ベクトルは $\mathbf{J}^2$ の同じ固有値をもつ．

3. **固有ベクトル：**そこで，角運動量演算子が作用するベクトル空間を考えて J_3 を対角化する表示をとる．このとき，その規格化された固有ベクトルと固有値を
$$\hat{J}_3|m\rangle = m|m\rangle \quad , \quad \langle m'|m\rangle = \delta_{m'm} \quad \Rightarrow \quad \langle m'|\hat{J}_3|m\rangle = m\delta_{mm'} \tag{5.67}$$
とする．J_3 がエルミートであることから，固有値 m は実数である．

4. **ゼロでない $J_\pm$ の行列要素：** １番目の交換関係より
$$J_3J_\pm|m\rangle = (m \pm 1)J_\pm|m\rangle \tag{5.68}$$
さらに左から $\langle m'|$ をかけると
$$\langle m'|J_3J_\pm|m\rangle = m'\langle m'|J_\pm|m\rangle = (m \pm 1)\langle m'|J_\pm|m\rangle \tag{5.69}$$
よって $m' = m \pm 1$ のときだけ $\langle m'|J_\pm|m\rangle$ が値を持つことが分かる．
$$(m - m' \pm 1)\langle m'|J_\pm|m\rangle = 0 \tag{5.70}$$

5. **漸化式：**$J_\pm$ の行列要素の情報は，２番目の交換関係の対角成分の値（期待値）から得られる．
$$\langle m|(J_+J_- - J_-J_+)|m\rangle = \langle m|J_+|m-1\rangle\langle m-1|J_-|m\rangle - \langle m|J_-|m+1\rangle\langle m+1|J_+|m\rangle \tag{5.71}$$

そこで

$$f(m) = \langle m|J_+|m-1\rangle\langle m-1|J_-|m\rangle = |\langle m|J_+|m-1\rangle|^2 = |\langle m-1|J_-|m\rangle|^2 \quad (5.72)$$

という行列要素の2乗を与える関数を導入する．[12] $f(m)$ が求まれば，行列要素は位相[13]を除いて決定できる．交換関係の期待値から，

$f(m) = |\langle m|J_+|m-1\rangle|^2$ は，漸化式

$$f(m) - f(m+1) = 2m \quad (5.73)$$

を満たす．また $f(m) \geq 0$ である．

6. **highest weight state**：いまある既約表現に限って考えると，$\mathbf{J}^2$ も同時に対角化される．さらに，$f(m)$ の定義より

$$\langle m|(\mathbf{J}^2 - J_3^2)|m\rangle = \frac{1}{2}\langle m|(J_+J_- + J_-J_+)|m\rangle = \frac{1}{2}(f(m) + f(m+1)) > 0 \quad (5.74)$$

なので，$\mathbf{J}^2$ の固有値は

$$\langle m|\mathbf{J}^2|m\rangle - m^2 > 0 \quad (5.75)$$

という関係を満たす．これは既約表現では，m^2 には上限があることを意味する．上限の m の値を $j \geq 0$ とすると

$$J_+|j\rangle \propto |j+1\rangle = 0 \quad (5.76)$$

になる．このような状態を **highest weight state/vector(最高ウエイト状態またはベクトル)** と呼ぶ．さらに漸化式 (5.73) で $m = j$ と置くと，

$$f(j+1) = 0 \quad \Rightarrow \quad f(j) = 2j \quad (5.77)$$

が言える．すると漸化式を解くことができて，

$$\begin{aligned} f(m) &= 2m + \cdots + 2j = 2\big(m + (m+1) + \cdots + j\big) \\ &= (j+m)(j-m+1) \end{aligned} \quad (5.78)$$

よって

$$f(m) = (j+m)(j-m+1) = j(j+1) - m(m-1) \quad (5.79)$$

を得る．

[12] $J_+|m-1\rangle = \sqrt{f(m)}|m\rangle$ または，$J_-|m\rangle = \sqrt{f(m)}|m-1\rangle$ が成り立つ．
[13] 絶対値が1の複素数．$e^{i\theta}$

7. **下限のベクトル**: 次に，(5.75) より m には下限も存在する．J_- を作用させることで m の値は 1 下がるので k 回作用させて得られるベクトル（状態）が m の下限を与えるとすると
$$J_-|j-k\rangle \propto J_-^{k+1}|j\rangle = 0 \tag{5.80}$$
を満たす．$f(m) = |\langle m-1|J_-|m\rangle|^2$ なので m が下限の値 $m = j-k$ とするとこの値は 0 になる．つまり，
$$f(j-k) = (2j-k)(k+1) = 0 \tag{5.81}$$
$k > 0$ なので，$k = 2j$ で，$\boxed{\text{下限のベクトルは } |-j\rangle \text{ である.}}$

8. j **の範囲**：一方 k は整数なので
$$j = \frac{k}{2} > 0 \tag{5.82}$$
で，$\boxed{j \text{ の値は正整数，または正の半整数である.}}$

9. **カシミア演算子の固有値**：$\mathbf{J}^2$ は，J_i と可換なので，J_3 の固有値には依らずに j のみで定まる．実際，
$$\mathbf{J}^2 = J_3^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) = J_3^2 - J_3 + J_+J_- \tag{5.83}$$
なので，m の最大値 (highest weight) が j とすると，
$$\begin{aligned}\langle m|\mathbf{J}^2|m\rangle &= \langle m|J_3^2 - J_3 + J_+J_-|m\rangle \\ &= m^2 - m + \langle m|J_+|m-1\rangle\langle m-1|J_-|m\rangle \\ &= m^2 - m + f(m) = j(j+1)\end{aligned} \tag{5.84}$$
となり，$\mathbf{J}^2$ の固有値は m によらず，$j(j+1)$ になることが分かる．

10. **既約表現の基底**：このように，回転群の表現は j の値で特徴づけられる．j の値が与えられると，$2j+1$ 個の J_3 の固有ベクトルが定まり，$2j+1$ 次元のベクトル空間が定まる．そこで，j に属する表現の基底ベクトルを
$$|j,m\rangle \tag{5.85}$$
で表す．この状態は $\mathbf{J}^2, J_3$ の同時固有状態で
$$\mathbf{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)|j,m\rangle \quad , \quad J_3|j,m\rangle = m|j,m\rangle \tag{5.86}$$
を満たす．さらに, 対角でない演算子 $J_\pm$ の行列要素は
$$\langle j,m+1|J_+|j,m\rangle = \sqrt{f(m+1)} = \sqrt{j(j+1)-m(m+1)} = \langle m|J_-|m+1\rangle^\dagger \tag{5.87}$$
で与えられる[14]．これにより，$|j,m\rangle$ が既約表現であることが分かる．
この結果は，昇降演算子の作用に関して，
$$|j,m-1\rangle = ((j+m)(j-m+1))^{-\frac{1}{2}}J_-|j,m\rangle \tag{5.88}$$
$$|j,m+1\rangle = ((j-m)(j+m+1))^{-\frac{1}{2}}J_+|j,m\rangle \tag{5.89}$$
という関係が成り立つことを意味する．

[14] 2 乗根を取るときに，位相の不定性がある．ここでは 1 に取る．

回転群の表現のまとめ

1. 回転群の既約表現 D_j は $j \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}$ で定まり，カシミア演算子 (全角運動量)$\mathbf{J}^2$ の固有値は $j(j+1)$ である．
2. 表現空間 V_j の基底 $|j,m\rangle$ は J_3 の固有値ウェイト (weight)m でラベルされ，weight m は，$m = j, j-1, \cdots, -j$ の値をとる．V_j は $2j+1$ 次元空間である．

問題：

1. 次の交換関係を示せ．
$$[J_3, J_\pm] = \pm J_\pm \quad , \quad [J_+, J_-] = 2J_3 \tag{5.90}$$
2. 次の関係式を証明せよ．
$$\mathbf{J}^2 = J_3^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) = J_3^2 - J_3 + J_+J_- = J_3^2 + J_3 + J_-J_+ \tag{5.91}$$
3. 状態ベクトル $|j,m\rangle$ を highest weight vector $|j,j\rangle$ と，下降演算子 J_- を使って表せ．

解

1. $J_\pm$ の定義を代入すれば良い．
2. 略
3. 昇降演算子に関する公式を，続けて使うことにより
$$\begin{aligned}
|j,j-1\rangle &= ((2j))^{-\frac{1}{2}} J_-|j,j\rangle \\
|j,j-2\rangle &= ((2j-1)2)^{-\frac{1}{2}} J_-|j,j-1\rangle = (2j(2j-1)2\cdot 1)^{-\frac{1}{2}} J_-^2|j,j\rangle \\
|j,j-k\rangle &= (2j\cdots(2j-k+1)k!)^{-\frac{1}{2}} J_-^k|j,j\rangle = \sqrt{\frac{(2j-k)!}{(2j)!k!}} J_-^k|j,j\rangle \\
|j,m\rangle &= (2j\cdots(j+m+1)k!)^{-\frac{1}{2}} J_-^k|j,j\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} J_-^{j-m}|j,j\rangle
\end{aligned} \tag{5.92}$$
を得る．

5.5.3 表現の例

1. 例１）$j = \frac{1}{2}$ 基底は $m = \pm\frac{1}{2}$, なので $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ で与えられる．それぞれの行列要素は
$$\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|J_+|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{f(\tfrac{1}{2})} = 1 = \langle m|J_-|m+1\rangle^\dagger \tag{5.93}$$
なので
$$D_{\frac{1}{2}}(J_+) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad D_{\frac{1}{2}}(J_-) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.94}$$

また,

$$\langle \tfrac{1}{2}, m'|J_3|\tfrac{1}{2}, m\rangle = m\delta_{m'm} \ , \quad m = \pm\frac{1}{2} \tag{5.95}$$

である．よって $J_1 = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$, $J_2 = -i\frac{1}{2}(J_+ - J_-)$ より

$$D_{\frac{1}{2}}(J_i) = \frac{1}{2}\sigma_i \tag{5.96}$$

で，スピノル表現であることが分かる．

2. 例２）$j = 1$,$m = -1, 0, 1$ それぞれの行列要素は

$$\langle 1, 1|J_+|1, 0\rangle = \sqrt{f(1)} = \sqrt{2} \ \ , \ \ \langle 1, 0|J_+|1, -1\rangle = \sqrt{2} \tag{5.97}$$

$$J_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \ , \ J_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \ , \ J_- = J_+^\dagger \tag{5.98}$$

$$J_+J_- = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \ , \ J_-J_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{5.99}$$

よって，交換関係を満たす．回転の演算子と関係つけるためには基底の取り換えを行う必要がある．

$$|+\rangle = |x\rangle + i|y\rangle, |0\rangle = |z\rangle, |-\rangle = |x\rangle - i|y\rangle \tag{5.100}$$

$$J_3|x\rangle = i|y\rangle, J_3|y\rangle = -i|x\rangle \tag{5.101}$$

$$J_1|y\rangle = i|z\rangle, J_1|z\rangle = -i|y\rangle \ , \quad J_2|x\rangle = -i|z\rangle, J_2|z\rangle = i|x\rangle \tag{5.102}$$

$$\begin{aligned} (J_1 \pm iJ_2)|+\rangle &= iJ_1|y\rangle \pm iJ_2|x\rangle = -|z\rangle \pm |z\rangle \\ (J_1 \pm iJ_2)|-\rangle &= iJ_1|y\rangle \mp iJ_2|x\rangle = -|z\rangle \mp |z\rangle \end{aligned} \tag{5.103}$$

これらの結果，$D_1(J_i)$ は基本表現の生成元の表現行列 (5.18) と一致する．

5.6 波動関数の回転と角運動量演算子

量子力学において，回転対称性を議論する場合，波動関数の回転を考える必要がある．ここでは，関数に対する回転の作用と回転群の表現の関係を議論しておく．

まず，物理的には回転のとらえ方に，二つの立場があるのではっきりさせておく必要がある．

1. 問題の回転を座標軸に対して施し，空間の各点Ｐと各点に結びついた物理量を動かさない
2. 座標軸を固定しておき，物理系そのものを回転させる．

ここでは，後者の立場をとる．これは，回転の変換行列の定義が

$$\hat{R}_\theta|u\rangle = |i\rangle\langle i|\hat{R}_\theta|j\rangle u_j \tag{5.104}$$

では，基底 $|i\rangle$ は変化していないと見るのが自然であるからである．

回転 T_R によって回転された関数 $\phi' = T_R(\phi)$ が，点 $\mathbf{r}$ でとる値は回転によって $\mathbf{r}$ に移される点 $\mathbf{r}_{\rm org}$ において元の関数がとる値に等しい．[15]

$$\phi'(\mathbf{r}) = (T_R\phi)(\mathbf{r}) = \phi(R^{-1}\mathbf{r}) \tag{5.106}$$

このとき，連続して回転を施すと

$$\begin{aligned} T_{R_2}T_{R_1}\phi(\mathbf{r}) &= T_{R_2}\phi'(\mathbf{r}) = T_{R_2}\phi(R_1^{-1}\mathbf{r}) = \phi'({R_2}^{-1}\mathbf{r}) \\ &= \phi({R_1}^{-1}{R_2}^{-1}\mathbf{r}) = \phi((R_2R_1)^{-1}\mathbf{r}) = T_{R_2R_1}\phi(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{5.107}$$

となり，関数の回転の作用 T_R は群の表現になっている．

この定義に従うと，z 軸周りの無限小回転により，波動関数は，

$$T_{R_z^\epsilon}\phi(\mathbf{r}) = \phi(R_z^{\epsilon-1}\mathbf{r}) = \phi(x+\epsilon y, -\epsilon x + y, z) \tag{5.108}$$

と回転される．最後の座標の微小変化に関してテーラー展開をして ϵ の最低次を見ると

$$T_{R_z^\epsilon}\phi(\mathbf{r}) = (1 - i\epsilon\ell_z)\phi(\mathbf{r}) \tag{5.109}$$

と書ける．ここで，ℓ_z

$$\ell_z = -i(x\partial_y - y\partial_x) \tag{5.110}$$

は無限小回転の生成元と考えられる．同様にして，それぞれの方向の無限小回転の生成元は $l_k \in (\ell_x, \ell_y, \ell_z)$

$$\ell_k = -i\epsilon_{ijk}x_i\partial_j \tag{5.111}$$

を求めることができる．実際

$$[\theta_k\ell_k, x_m] = -i\theta_k\epsilon_{kij}x_i[\partial_j, x_m] = -i\theta_k\epsilon_{mki}x_i = -i(\vec{\theta}\times\vec{x})_m \tag{5.112}$$

なので，確かに無限小回転の生成元になっている．

$\mathbf{L}_k = \hbar\ell_k = \mathbf{x}\times\mathbf{p}$ は量子力学で，**(軌道) 角運動量演算子**として現れる演算子である．

回転と角運動量演算子

回転の生成元に $\hbar$ をかけると角運動量演算子になる．つまり角運動量は $\hbar$ を単位に角度を測った時の回転の生成元である．

$$角運動量演算子 = \hbar \times 無限小回転の生成元$$

[15] $\mathbf{r}$ の変換はあくまで，ベクトルの成分の変換である．座標系を変換すると，ベクトルは動かないので基底 $\mathbf{e}_i$ の変換は

$$\mathbf{e}_i' = T_R(\mathbf{e}_i) = \mathbf{e}_j R_{ji} \tag{5.105}$$

である．すると，点 P の座標 x_i は，新しい座標系では $x_i' = R_{ij}^{-1}x_j$ で与えられる．

生成元は次の回転群の基本交換関係を満たす：

$$[\ell_k, \ell_{k'}] = i\epsilon_{kk'j}\ell_j \tag{5.113}$$

証明

$$\begin{aligned}[\ell_k, \ell_{k'}] &= -[(\epsilon_{ijk}x_i\partial_j), (\epsilon_{i'j'k'}x_{i'}\partial_{j'})] = -(\epsilon_{ijk}x_i\epsilon_{jj'k'}\partial_{j'} - \epsilon_{i'ik'}x_{i'}\epsilon_{ijk}\partial_j) \\ &= -(x_{k'}\partial_k - x_k\partial_{k'}) = \epsilon_{kk'i}\epsilon_{ijl}x_j\partial_l \\ &= i\epsilon_{kk'j}\ell_j \end{aligned} \tag{5.114}$$

q.e.d.

このことから，演算子 ℓ_k はリー環の表現になっている[16]．一般の無限小回転は

$$T_{R_\theta^\epsilon}\phi(\mathbf{r}) = (1 - i\epsilon\vec{\theta}\cdot\vec{l})\phi(\mathbf{r}) \tag{5.115}$$

よって有限回転を与える群の元はこの微分作用素をつかって

$$\mathcal{R}(\theta) = e^{-i\vec{\theta}\cdot\vec{\ell}} = e^{-i\vec{\theta}\cdot\vec{\mathbf{L}}/\hbar} \tag{5.116}$$

と書ける．ただし，最後は量子力学と比較のために軌道角運動量演算子 $\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$ を使った式を与えた．行列表現のときは $D_j(\theta)$ と書くのに対してこの演算子には $\mathcal{R}(\theta)$ を使う．

[16]角運動量の交換関係には右辺の構造定数のところに $\hbar$ が現れる．