

8 回転群と球面調和関数

8.1 二次元、三次元の回転

角度 θ の回転は、行列でかけば

$$g(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

である。回転は長さを保つ:

$$|\vec{v}| = |g\vec{v}| \quad (8.2)$$

内積の形で書くと

$${}^T\vec{v} g g \vec{v} = \vec{v}^T \vec{v} \quad (8.3)$$

これは

$${}^T g g = 1. \quad (8.4)$$

これより $\det g = \pm 1$ がわかる。 $\det g = -1$ になるのは

$$g = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \quad (8.5)$$

等で、これは回転ではなくて反転。 $\det g = 1$ なら必ず (8.1) と書ける。

三次元の回転も同様に、 3×3 行列で

$${}^T g g = 1 \quad (8.6)$$

をみたし、 $\det g = 1$ であるもので与えられる。

二次元の回転はパラメタ θ のみで与えられる。三次元の回転にはいくつパラメタがあるだろうか？ x, y, z 軸がそれぞれ単位ベクトル $\vec{x}', \vec{y}', \vec{z}'$ へ回されたとする。 \vec{z}' のもとの座標での極座標 θ, ϕ が必要。この時点で、 \vec{x}', \vec{y}' は新たな赤道の上についているので、 \vec{x}' がそのどこにあるかを指定するのにもうひとつ ψ が必要。結局三パラメタ必要なことが判った。この3つの角度を三次元の回転の Euler 角という。

別の言い方では、勝手な回転は、回転軸とそのまわりの回転角をあたえらる。回転軸を決めるのに極座標がふたつ、回転角がひとつ必要。

8.2 二次元の回転と複素数

$e^{i\theta}$ を掛けるという操作は複素平面の θ 回転になるのは知っていると思う。もっと一般に、 $z = a + bi = r e^{i\theta}$ を掛けるというのは、長さを r 倍して θ だけ回すという操作。 $r = |z|$ の部分が長さを変える操作で、 $e^{i\theta} = z/|z|$ が回す操作。

さて、 $z = a + bi$ に対し、 $\bar{z} = a - bi$ と定めて、

$$|z|^2 = z \bar{z} \quad (8.7)$$

で、また

$$|z||z'| = |zz'| \quad (8.8)$$

であった。これは

$$(a^2 + b^2)(a'^2 + b'^2) = (aa' - bb')^2 + (ab' + a'b)^2 \quad (8.9)$$

という等式を意味している。

8.3 四元数

二次元の回転は複素数のかけ算としてうまく理解できた。三次元の回転もなにかのかけ算としてうまく理解できないか？そこで、複素数について反省したあと、四元数を導入する。四元数はシラバス外だけれど。

実二次元ベクトル (a, b) を複素数と同一視すると、複素数の足し算はベクトルの足し算である。複素数のかけ算は、実二次元ベクトル $\vec{z} = (a, b)$ と $\vec{z}' = (a', b')$ に対して、もうひとつの実二次元ベクトル $\vec{z} \circ \vec{z}'$ を定める操作であって、たし算に関して分配的

$$(\vec{z} + \vec{z}') \circ \vec{w} = \vec{z} \circ \vec{w} + \vec{z}' \circ \vec{w} \quad (8.10)$$

であって、さらに積の長さが長さの積になる

$$|\vec{z} \circ \vec{z}'| = |\vec{z}| |\vec{z}'|. \quad (8.11)$$

さて、ハミルトンはこれが実三次元ベクトルでも出来ないかと考えた。すなわち、実三次元ベクトル $\vec{z} = (a, b, c)$, $\vec{z}' = (a', b', c')$ に対しその積 $\vec{z} \circ \vec{z}'$ が三次元ベクトルになるようにして、

$$|\vec{z} \circ \vec{z}'| = |\vec{z}| |\vec{z}'| \quad (8.12)$$

を満たすようにできないかと考えた。(三次元のベクトル積 $\vec{z} \times \vec{z}'$ はこの条件を満たさない。) 死の床についたハミルトンが昔を回想して息子にあてた手紙が残っている¹:

Every morning in the early part of the above cited month, on my coming down to breakfast, your (then) little brother, William Edwin, and yourself, used to ask me, “Well, papa, can you multiply triplets?” Whereto I was always obliged to reply, with a sad shake of the head: “No, I can only *add* and *subtract* them”.

ハミルトンはしばらくして、実 4 次元ベクトルなら積の長さが長さの積になるような積を入れられることを発見した。これを (ハミルトンの) 四元数 (quaternion) と言う。実四次元ベクトル $\vec{q} = (a, b, c, d)$ の代わりに、通常虚数単位を i, j, k のみつつ導入して

$$q = a + bi + cj + dk \quad (8.13)$$

と書く。かけ算則は

$$i^2 = j^2 = k^2 = -1, \quad ij = -ji = k, \quad jk = -kj = i, \quad ki = -ik = j \quad (8.14)$$

で定める。これから判るように、 qq' と $q'q$ は必ずしも等しくないことに注意。複素共役を

$$\bar{q} = a - bi - cj - dk \quad (8.15)$$

と定めると、

$$q\bar{q} = \bar{q}q = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = |q|^2. \quad (8.16)$$

がんばって計算すれば、

$$|q||q'| = |qq'| \quad (8.17)$$

¹<http://books.google.co.jp/books?id=9j8MAQAIAAJ&pg=PA46> を参照。もうちょっと文献を探すと、この会話をしたのは息子が 9 歳だかのときということがわかる。

を示せる。(練習問題として、やってみると勉強になる。) もうすこし一般に、

$$\overline{ab} = ba \quad (8.18)$$

になる。これは \bar{a} のかわりに a^\dagger と書けば

$$(ab)^\dagger = b^\dagger a^\dagger \quad (8.19)$$

となってよりなじみ深いかもしれない。

現在では、長さの積が積の長さになるような積を入れられる実ベクトル空間の次元は 1,2,4,8 のよっつに限ることが知られている。(十六元数以上はない。)

| | | | |
|-----|--------------|--|-------------------------------|
| 実数 | \mathbb{R} | $a = a$ | |
| 複素数 | \mathbb{C} | $z = a + bi$ | $z^2 > 0$ を諦める |
| 四元数 | \mathbb{H} | $q = a + bi + cj + dk$ | $qq' = q'q$ を諦める |
| 八元数 | \mathbb{O} | $o = a_0 + a_1 i_1 + a_2 i_2 + \cdots + a_7 i_7$ | $o(o' o'') = (o o') o''$ を諦める |

8.4 四元数と三次元の回転

さて、四元数だと四次元なので、やりすぎではないかと思えるが、実はこれで巧くいく。 $q = a + bi + cj + dk$ のうち、 $q = -\bar{q}$ を満たす「純虚」なものは

$$v = xi + yj + zk \quad (8.20)$$

の形をしていて、ちょうど実三次元である。

長さ 1 の四元数 q をとってくる。すると、変換

$$v \mapsto v' = qv\bar{q} \quad (8.21)$$

は

$$\bar{v}' = q\bar{v}\bar{q} = q\bar{v}\bar{q} = -qv\bar{q} = -v' \quad (8.22)$$

で、かつ

$$|v'| = |q||v||\bar{q}| = |v| \quad (8.23)$$

だから、三次元の回転を与える。このような $q = a + bi + cj + dk$ は

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1 \quad (8.24)$$

を満たすので、実三パラメタある。さきほど、三次元の回転は一般に三パラメタあるといったので、これで丁度良い。

もうすこし具体的に、 $q = e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ の場合に作用を考えると、

$$qi\bar{q} = i \quad (8.25)$$

また

$$qj\bar{q} = (\cos \theta + i \sin \theta)j(\cos \theta - i \sin \theta) = j \cos 2\theta + k \sin 2\theta \quad (8.26)$$

さらに

$$qk\bar{q} = (\cos \theta + i \sin \theta)k(\cos \theta - i \sin \theta) = -j \sin 2\theta + k \cos 2\theta \quad (8.27)$$

なので、これは j - k 平面内の 2θ 回転である。同様に、 $e^{j\theta}$ は k - i 平面の 2θ 回転、 $e^{k\theta}$ は i - j 平面内の 2θ 回転である。

一般に、 $s^2 + t^2 + u^2 = 1$ なる 3 つの実数を取ると、

$$(si + tj + uk)^2 = -1 \quad (8.28)$$

であるので、

$$q = e^{((si+tj+uk))\theta} = \cos \theta + (si + tj + uk) \sin \theta \quad (8.29)$$

である。この q に対し、

$$v \mapsto qv\bar{q} \quad (8.30)$$

は軸 $\vec{n} = (s, t, u)$ 周りの 2θ 回転である。勝手な長さ 1 の四元数 q は、かならず (8.29) の形にかけるから、これで、 $|q| = 1$ なる四元数がどういう三次元の回転を与えるかが一般にわかった。

三次元の回転角は Euler 角で書くより長さ 1 の四元数 q で書くほうがいろいろと便利で、3d CG 等の処理ではしばしば使われる (そうである。)

8.5 四元数とパウリ行列

唐突だが、

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (8.31)$$

をパウリ行列と呼ぶ。ここで、

$$\mathbf{i} = i\sigma_x, \quad \mathbf{j} = i\sigma_y, \quad \mathbf{k} = i\sigma_z \quad (8.32)$$

と定めると、

$$\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = -1, \quad \mathbf{ij} = -\mathbf{ji} = \mathbf{k}, \quad \mathbf{jk} = -\mathbf{kj} = \mathbf{i}, \quad \mathbf{ki} = -\mathbf{ik} = \mathbf{j} \quad (8.33)$$

を満たすので、

$$\mathbf{q} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k} = \begin{pmatrix} a + di & c + bi \\ c - bi & a - di \end{pmatrix} \quad (8.34)$$

のことを四元数と思ってよい。このとき、

$$\bar{\mathbf{q}} = \mathbf{q}^\dagger \quad (8.35)$$

ただし右辺の † は行列としてのエルミート共役、また

$$|\mathbf{q}|^2 = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = \det \mathbf{q}. \quad (8.36)$$

これより、

$$|\mathbf{q}\mathbf{q}'| = |\mathbf{q}||\mathbf{q}'| \quad (8.37)$$

はほとんどあたりまえ、なぜなら左辺の自乗は $\det(\mathbf{q}\mathbf{q}')$ で、右辺の自乗は $\det \mathbf{q} \det \mathbf{q}'$ だから。

四元数は複素数と同様あらたな「数」とすべきなのか、それとも単に 2×2 行列なのか？これは複素数に対しても同じことが言えて、上記

$$\mathbf{j} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.38)$$

は $j^2 = -1$ を満たすから、 $z = a + bi$ のかわりに全ての計算で

$$\mathbf{z} = a + b\mathbf{j} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b & a \end{pmatrix} \quad (8.39)$$

を使ってもいいのである、すると上記と同様に $|\mathbf{z}|^2 = \det \mathbf{z}$ だし、この行列の要素は全部実数だから、複素数なんてものは無くって、単に実数の行列があるだけだと思ってもよい。これから、量子力学の通俗解説書で、複素数ってのは実際の数じゃないのに波動関数には複素数が現れて不思議だ、とか書いてあるのはちゃんちゃらナンセンスであることがわかる。

結局のところ、実際に数なのか、行列なのか、という疑問自体がよくないので、場合に応じて適切に使いやすい形式をつかえばいいというだけである。

8.6 微小回転

さて、四元数のことはすっかり忘れて、微小な回転を考える。対応する行列でいえば、単位行列に近いということ:

$$g = 1 + \epsilon M + O(\epsilon^2) \quad (8.40)$$

${}^T g g = 1$ に代入し、オーダー ϵ の項を比較すると、

$${}^T M = -M \quad (8.41)$$

がわかる。すなわち、反対称行列。実際、二次元の微小な回転は

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = 1 + \begin{pmatrix} 0 & -\theta \\ \theta & 0 \end{pmatrix} + O(\theta^2) \quad (8.42)$$

で、単位行列からのずれは反対称。

三次元の場合はどうか？勝手な反対称行列は

$$M = \begin{pmatrix} 0 & -c & b \\ c & 0 & -a \\ -b & a & 0 \end{pmatrix} \quad (8.43)$$

と書けて、みつつ自由度がある。たとえば、 c の部分は、 x - y 平面の微小回転である:

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 + \begin{pmatrix} 0 & -\theta & 0 \\ \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + O(\theta^2). \quad (8.44)$$

同様に、 a, b は y - z 平面、 z - x 平面内の微小回転。そこで、上記 M を

$$M = aM_x + bM_y + cM_z, \quad (8.45)$$

ただし

$$M_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.46)$$

と書こう。 $M_{x,y,z}$ はそれぞれ x, y, z 軸まわりの微小回転。

さて、 M, M' を反対称行列だとして、その交換子 (commutator)

$$[M, M'] := MM' - M'M \quad (8.47)$$

を考えると、 $[M, M']$ も反対称行列である。微小回転の交換子は微小回転。これは、

$$g = 1 + \epsilon M + \epsilon^2 P + \dots, \quad h = 1 + \epsilon N + \epsilon^2 Q + \dots, \quad (8.48)$$

とすると、

$$gh = 1 + \epsilon(M + N) + \epsilon^2(P + MN + Q) + \dots \quad (8.49)$$

$$hg = 1 + \epsilon(M + N) + \epsilon^2(P + NM + Q) + \dots \quad (8.50)$$

だから、 gh と hg のズレの一番はじめに出てくるのが

$$gh(hg)^{-1} = 1 + \epsilon^2(MN - NM) + \dots \quad (8.51)$$

である。「回転 A をして、回転 B をする」と「回転 B をして、回転 A をする」のは一般には同じでない。そのズレを (微小なときに) 測るのが交換子である。上記 $M_{x,y,z}$ に対しては

$$[M_x, M_y] = M_z, \quad [M_y, M_z] = M_x, \quad [M_z, M_x] = M_y. \quad (8.52)$$

これを回転群の生成子の交換関係、という。

三次元ベクトルに回転は作用するが、三次元空間上の関数にも回転は作用する。微小回転 $g = 1 + \epsilon M + \dots$ は関数に

$$((1 + \epsilon M)f)(\vec{v}) = f((1 - \epsilon M)\vec{v}) \quad (8.53)$$

と作用するものとする。(右辺のマイナスは誤植でない。こうしておかないと群作用の合成がうまくいかない。) 右辺は ϵ を微小として展開すると

$$= f + \epsilon(a(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})f + b(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})f + c(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})f) + \dots \quad (8.54)$$

というわけで

$$T_x = y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}, \quad T_y = z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}, \quad T_z = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \quad (8.55)$$

を定めよう。これの交換子を計算すると、

$$T_x T_y f = (y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})f, \quad (8.56)$$

$$T_y T_x f = (z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})f \quad (8.57)$$

なので、がんばって整理すると

$$(T_x T_y - T_y T_x)f = T_z f \quad (8.58)$$

を得る。同様にやると、

$$[T_x, T_y] = T_z, \quad [T_y, T_z] = T_x, \quad [T_z, T_x] = T_y. \quad (8.59)$$

8.7 微小回転の表現

一般に、3つの行列 (もしくは演算子) A_x, A_y, A_z で

$$[A_x, A_y] = A_z, \quad [A_y, A_z] = A_x, \quad [A_z, A_x] = A_y. \quad (8.60)$$

を満たすものを (三次元の) 回転の表現という。上にでてきた 3×3 行列 $M_{x,y,z}$ や、微分演算子 $T_{x,y,z}$ は回転の表現という。前者は、三次元ベクトルへの回転の表現、後者は、三次元空間の関数への回転の表現である。

$A_{x,y,z}$ が $N \times N$ 行列のとき、これを N 次元表現という。以下、行列の反対称性等や行列要素が複素でも気にしないことにする。 $N \times N$ の可逆な行列 P にたいして、

$$B_{x,y,z} = P A_{x,y,z} P^{-1} \quad (8.61)$$

とすると、 $B_{x,y,z}$ も N 次元表現になる。これは、単に基底をと리카えただけで、実質一緒なので、同値な表現という。

また、 $N \times N$ 行列の $A_{x,y,z}$ 、 $N' \times N'$ 行列の $A'_{x,y,z}$ がそれぞれ表現だとして、

$$C_x = A_x \oplus A'_x, \quad C_y = A_y \oplus A'_y, \quad C_z = A_z \oplus A'_z \quad (8.62)$$

とすると、これも表現になる。ただし、 \oplus は $N \times N$ 行列と $N' \times N'$ 行列をブロック対角に組み合わせ $(N + N') \times (N + N')$ 行列にする操作のこと:

$$X \oplus Y = \left(\begin{array}{c|c} X & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & Y \end{array} \right). \quad (8.63)$$

($[C_x, C_y] = C_z$ を確かめてみよ。) これを直和表現という。

$N \times N$ 次元の与えられた表現 $C_{x,y,z}$ が、どう巧く P をとっても、

$$P C_{x,y,z} P^{-1} = A_{x,y,z} \oplus A'_{x,y,z} \quad (8.64)$$

とふたつの表現 $A_{x,y,z}$ と $A'_{x,y,z}$ の直和に分解しないばあい、これを既約表現という。

いろいろ定義したが、例をあげると、 $M_{x,y,z}$ は三次元の既約表現である。ひどい例としては $K_{x,y,z} = 0$ は一次元の既約な表現である。

二次元の既約表現として、前の節で四元数を学んだときに出てきたパウリ行列 (8.31) をもちいて

$$\tau_{x,y,z} = \frac{i}{2} \sigma_{x,y,z} \quad (8.65)$$

がある。実際、

$$[\tau_x, \tau_y] = \tau_z, \quad [\tau_y, \tau_z] = \tau_x, \quad [\tau_z, \tau_x] = \tau_y \quad (8.66)$$

を確認できる。三次元表現として、この二次元表現と一次元表現の直和をとって、

$$U_{x,y,z} = \left(\begin{array}{c|c} \tau_{x,y,z} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & 0 \end{array} \right) \quad (8.67)$$

としたものがある。

8.8 回転の表現と球面調和関数

回転の行列表現を沢山つくる方法を説明しよう。いま、三次元空間上の関数への回転の微分演算子 $T_{x,y,z}$ (8.55) を考える。これは関数の空間という無限次元空間に作用しているが、たまたま、 n 個の一次独立な関数

$$f_1(x, y, z), \dots, f_n(x, y, z) \quad (8.68)$$

があって、 $T_{x,y,z}$ を作用させてもその複素一次結合で閉じるとしよう:

$$T_x f_i(x, y, z) = \sum_j f_j(x, y, z) A_{x,ji}, \quad (8.69)$$

$$T_y f_i(x, y, z) = \sum_j f_j(x, y, z) A_{y,ji}, \quad (8.70)$$

$$T_z f_i(x, y, z) = \sum_j f_j(x, y, z) A_{z,ji}. \quad (8.71)$$

ここで、 A_x, A_y, A_z は $n \times n$ 定数行列である。 $[T_x, T_y] = T_z$ を f_i に作用させて、整理して書き直すと、

$$[A_x, A_y] = A_z \quad (8.72)$$

同様にして

$$[A_y, A_z] = A_x, \quad [A_z, A_x] = A_y \quad (8.73)$$

を得る。よって、 n 次元表現を得た。

例として、

$$f_1 = x, \quad f_2 = y, \quad f_3 = z \quad (8.74)$$

とすると、上の条件をみだし、うえからつくった $A_{x,y,z}$ はさっきからでている $M_{x,y,z}$ と一致する。

もっと一般に、三次元空間 (x, y, z) 上の滑らかな関数 f で、 $\Delta f = 0$ を満たすものを考える。ラプラシアンを極座標で書くと、

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Delta_{S^2}}{r^2} \quad (8.75)$$

だった。 Δ_{S^2} は角度方向のラプラシアン (7.12) である。 $f = \sum_{l,m} F_{l,m}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$ と展開すると、 $F_{l,m}(r)$ に関する方程式は

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} F_{l,m}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} F_{l,m}(r) = 0 \quad (8.76)$$

これはすぐにとけて、 $F_{l,m}(r) = r^l$ が原点で滑らかな解である。よって、一般に三次元空間で $\Delta f = 0$ を満たす滑らかな関数は、

$$f_{l,m}(r, \theta, \phi) := r^l Y_{l,m}(\theta, \phi) = r^l e^{im\phi} P_l^{(m)}(\cos \theta) \quad (8.77)$$

で与えられる。右辺をこれまでまなんだルジャンドル陪多項式の性質を用いて変形すると、不思議なことに (?)、 x, y, z の l 次斉次多項式である。

たとえば、 $l = 1$ のときは、 $m = -1, 0, 1$ に応じて $x - iy, z, z + iy$ を得、 $l = 2$ のときは、 $m = -2, -1, 0, 1, 2$ の順に

$$(x - iy)^2, z(x - iy), z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2), z(x + iy), (x + iy)^2, \quad (8.78)$$

を得る。

すると、 $2l + 1$ 個の関数

$$f_{l,m}(x, y, z) := r^l Y_{l,m}(r, \theta, \phi), \quad m = -l, -l+1, \dots, +l \quad (8.79)$$

は、 $T_{x,y,z}$ の作用で閉じることがわかる。まず、

$$T_x \Delta = \Delta T_x, \quad T_y \Delta = \Delta T_y, \quad T_z \Delta = \Delta T_z, \quad (8.80)$$

であることは頑張れば示せる。すると、 $\Delta f = 0$ なら $\Delta(T_x f) = 0$ である。また、 T_x の具体的な形から、 T_x は l 次式を l 次式にうつす。すると、 $T_x f_{l,m}$ は、 l 次式であり、 Δ を作用させると消える。上の解析で、そのような関数はかならず $f_{l,m}$ の線形結合であると示してあった。証明終了。

実は、

$$T_x^2 + T_y^2 + T_z^2 = \Delta_{S^2} \quad (8.81)$$

であることががんにって変数変換をするとわかる。よって、この場合

$$(T_x^2 + T_y^2 + T_z^2) f_{l,m} = -l(l+1) f_{l,m} \quad (8.82)$$

がわかる。

具体的に、(8.78) にある $f_{2,m}$ ($m = -2, -1, 0, 1, 2$) への作用から定まる 5×5 行列 $A_{x,y,z}$ を計算し、それらが $[A_x, A_y] = A_z$ 等を満たすので表現になっていることを確認するのは勉強になるだろう。

8.9 既約表現が唯一であること

実は、回転の表現で n 次元、既約であるものは実質一種類のみであることが知られている。球面調和関数で l を固定すると、上の考察から $2l + 1$ 次元の既約表現が得られているので、奇数次元の既約表現はすべて球面上の関数のラプラシアンを調べることからでてくるわけだ。

以下、 n 次元で既約であるものは一種類であることを導出しておく。 n 次元既約表現 $A_{x,y,z}$ が与えられたとして、

$$J_z = iA_z, \quad J_+ = A_x + iA_y, \quad J_- = A_x - iA_y \quad (8.83)$$

とする。

$$[J_z, J_+] = J_+, \quad [J_z, J_-] = -J_-, \quad [J_+, J_-] = -2J_z \quad (8.84)$$

である。 v を J_z の固有ベクトルだとする:

$$J_z v = m v. \quad (8.85)$$

すると、

$$J_z(J_+ v) = (J_+ J_z + [J_z, J_+])v = m J_+ v + J_+ v = (m+1)(J_+ v) \quad (8.86)$$

また同様に

$$J_z(J_- v) = (m-1)(J_- v). \quad (8.87)$$

すると、 $(J_+)^n v$ や $(J_-)^n v$ はどんどん固有ベクトルになる。いずれこれはゼロにならないと有限次元性に反する。そこで、 $J_+^{n+1} v = 0$ だが $w = J_+^n v \neq 0$ なギリギリのところを取る。

$J_z w = jw$ とする。逆に動かして、 $J_-^{k-1} w \neq 0$, $J_-^k w = 0$ とする。

$$0 = J_+ J_-^k w \quad (8.88)$$

$$= J_+ J_- (J_-^{k-1} w) \quad (8.89)$$

$$= (J_- J_+ - 2J_z)(J_-^{k-1} w) \quad (8.90)$$

$$= (J_- J_+ - 2(j - k + 1))(J_-^{k-1} w) \quad (8.91)$$

$$= \dots \quad (8.92)$$

$$= -2[(j - k + 1) + (j - k + 2) + \dots + j] J_-^{k-1} w \quad (8.93)$$

だが、 $J_-^{k-1} w \neq 0$ なので、お終いの式の $[\dots]$ 内はゼロ。よって $k = 2j + 1$ で $[\dots]$ 内は

$$-j + (-j + 1) + \dots + (j - 1) + j = 0 \quad (8.94)$$

となるしかない。

この時点で、 $w, J_- w, J_-^2 w, \dots, J_-^{k-1} w$ を基底にとりなおすと、 J_- , J_+ , J_z がどう作用するかは具体的に決定できる。たとえば、 J_z は

$$J_z = \text{diag}(j, j - 1, \dots, -j), \quad A_z = -i \text{diag}(j, j - 1, \dots, -j) \quad (8.95)$$

とわかった。だから、これは k 次元表現だ。はじめは n 次元表現と仮定していたので、 $n = k$ 。

また、

$$D = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2 \quad (8.96)$$

とかくと、

$$[D, A_x] = [D, A_y] = [D, A_z] = 0 \quad (8.97)$$

であることは確認できる。

$$D = J_- J_+ + J_z^2 + J_z \quad (8.98)$$

だから、

$$Dw = j(j + 1)w \quad (8.99)$$

なので、勝手な s に対して自動的に

$$D(J_-)^s w = j(j + 1)(J_-)^s w \quad (8.100)$$

となるので、 D は単に単位行列に比例して、対角要素はみな $j(j + 1)$ 。

以上の結果を、三次元表現、二次元表現について確認しておく。(いつでも一般論を勉強したら、簡単な例について具体的に計算して確認するのが理論物理を学ぶ際にとっても重要。) 三次元既約表現は M_x, M_y, M_z だったが、上記の結果から、 M_z の固有値は $k = 3, j = 1$ なので $-i, 0, i$ のはず。実際その通りである。また、

$$M_x^2 + M_y^2 + M_z^2 = \text{diag}(2, 2, 2). \quad (8.101)$$

同様に、二次元既約表現は $\tau_{x,y,z}$ と書いたが、 $j = 1/2$ なので、

$$\tau_x^2 + \tau_y^2 + \tau_z^2 = \text{diag}\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right) \quad (8.102)$$

は $j(j + 1)$ とあっている。

8.10 もういちど球面調和関数について

ここまでのこのノートの構成では、まず球面調和関数を特殊関数をルジャンドル関数等いろいろ勉強してから、それを使っている導いた。例えば、角度方向のラプラシアン Δ_{S^2} の固有値が $l(l+1)$ だとか、球面調和関数に r^l をかけると何故か多項式になる、等は、ルジャンドル多項式の不思議な性質におしつけられている。それでかまわないのではあるが、出発点をひっくりかえして、回転群の表現を調べた前節の内容から、ルジャンドルの微分方程式が多項式解を持つのは固有値が $l(l+1)$ の時のみ、というのを導出することも出来る。

その一環として、球面上のラプラシアンの固有値が $l(l+1)$ であって、固有関数が $2l+1$ 個あることを直接しめしておこう。

まず、単位球 $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ 上の勝手な関数 $f(\theta, \phi)$ を考える。球体 $x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$ 内で、 $\Delta F(r, \theta, \phi) = 0$ という方程式を、境界条件

$$F(1, \theta, \phi) = f(\theta, \phi) \quad (8.103)$$

のもとで解くことは可能である。(境界での熱分布を与えました。中での熱はどうなりますか？これに解がないわけではない。)

さて、球体内の勝手な滑らかな関数は、 x, y, z の多項式で近似できる。よって、球面上の勝手な関数は、 x, y, z の多項式 P で、 $\Delta P = 0$ なるものを、表面に制限したもので近似できる。

では、 x, y, z の多項式で $\Delta P = 0$ なるものはどれくらいあるか？ l 次斉次多項式のなす線形空間 V_l の次元を勘定しよう。それは x, y, z の l 次単項式の個数だから、

$$\binom{l+2}{2} = \frac{(l+2)(l+1)}{2} \quad (8.104)$$

個ある。 Δ は V_l を V_{l-2} にうつす。きちんと考えると、これは全射なので、 Δ で消える部分空間の次元は

$$\dim V_l - \dim V_{l-2} = \frac{(l+2)(l+1)}{2} - \frac{l(l+1)}{2} = 2l+1 \quad (8.105)$$

である。すなわち、 l 次斉次で Δ で消えるような多項式は $2l+1$ 種類ある。

斉次式を $z, x+iy, x-iy$ の多項式と思って、 $z = r \cos \theta, x+iy = r \sin \theta e^{i\phi}$ とすると Δ と $i\partial_\phi$ は交換するので、 $2l+1$ 種類の多項式は $i\partial_\phi$ の固有値 m で分類できる。 $x+iy$ は固有値 1 , $x-iy$ は固有値 -1 で、 $x+iy$ と $x-iy$ について高々 l 次だから、固有値 m は $-l$ から l までちょうど $2l+1$ 個ある。 $m=l$ のときは $(x+iy)^l$, $m=-l$ のときは $(x-iy)^l$ しかありえないことまでわかる。

というわけで、 l 次斉次で Δ で消え、 $i\partial_\phi$ の固有値が m であるような多項式を $f_{l,m}(x, y, z)$, $m = -l, -l+1, \dots, l$ と書こう。球面上の関数は $f_{l,m}$ を球面に制限したものの線形結合で書ける。

さて、

$$f_{l,m}(x, y, z) = r^l Y_{l,m}(\theta, \phi) = r^l e^{im\phi} P_l^{(m)}(\cos \theta) \quad (8.106)$$

によって $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ および $P_l^{(m)}(z)$ を定義する。これに

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Delta_{S^2}}{r^2} \quad (8.107)$$

が $\Delta f = 0$ を満たすことを使うと、

$$\Delta_{S^2} Y_{l,m}(\theta, \phi) = -l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (8.108)$$

が判った。