角運動量代数と群論

一般化された角運動量の交換関係から導出した固有状態が半整数の j を許すことの説明。

ポイントのまとめ

- 物理系の対称性は群で表される[9]。
- 群の（局所的な）性質は微小変換を与える生成子の交換関係で決まる。
- 対称性に従う状態は群の規約表現（多重項）で分類できる。
- ３次元空間の回転を表す群は SO(3) で生成子は軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{L}}/\hbar$。
- SO(3) の（一価）表現は角運動量の大きさ $\ell = 0, 1, 2, \cdots$ で分類される[10]。空間回転の角運動量（軌道角運動量）の固有状態としてシュレディンガー方程式から導かれるのはこれらの状態のみ。
- 2 次元複素ベクトルの "回転" を表す群は SU(2) で生成子は $\boldsymbol{\sigma}/2$。
- SU(2) の表現はスピンの大きさ $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$ で分類される。
- SO(3) と SU(2) の生成子の交換関係はどちらも $[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k$
  $\Rightarrow$ 交換関係のみから導いた状態 $|j, m\rangle$ は SO(3) の表現（整数の j）だけでなく SU(2) の表現（整数と半整数の j）も含むため、半整数の j が許される

位置ベクトル $\boldsymbol{r}$（3 次元実ベクトル）の空間回転変換は

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \boldsymbol{r}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R\boldsymbol{r}$$

と 3×3 行列 R で表される。具体的に z 軸まわりの角度 θ の回転は

$$R = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

のように書ける。これは 3 成分実ベクトルの内積（$(^t)$ は転置）

$$(\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{r}^{(2)}) = (\boldsymbol{r}^{(1)})^t \boldsymbol{r}^{(2)} = \begin{pmatrix} x^{(1)} & y^{(1)} & z^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{(2)} \\ y^{(2)} \\ z^{(2)} \end{pmatrix} = x^{(1)}x^{(2)} + y^{(1)}y^{(2)} + z^{(1)}z^{(2)}$$

[9]群論についての詳細は佐藤光「群と物理」（丸善）や H. ジョージアイ「物理学におけるリー代数」（吉岡書店）などの教科書を参照、ただしここでの説明は J.J. サクライ「現代の量子力学」（吉岡書店）３章の内容で十分。

[10]スピノル表現を用いると半整数の表現が可能であるが、これらは回転群の二価表現になっている。座標表示で波動関数の一価性を課して得られるのは整数表現のみ。

を不変に保つ変換行列で、3×3 直交行列（$R^{-1}=R^t$ を満たす行列、R^t は転置）で表される：

$$(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)})=(\boldsymbol{r}^{(1)})^t\boldsymbol{r}^{(2)}\to(R\boldsymbol{r}^{(1)})^tR\boldsymbol{r}^{(2)}=(\boldsymbol{r}^{(1)})^tR^tR\boldsymbol{r}^{(2)}=(\boldsymbol{r}^{(1)})^t\boldsymbol{r}^{(2)}=(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)})$$

特に $\boldsymbol{r}^{(2)}=\boldsymbol{r}^{(1)}$ のとき、$(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(1)})=|\boldsymbol{r}^{(1)}|^2$ つまりベクトルの長さを不変に保つので、回転を表すことがわかる。このような変換 R（を抽象化したもの）を群論では SO(3) と呼ぶ（S は行列式が 1 であること[11]、O は直交行列 orthogonal matrix、3 は 3×3 行列に由来）。空間回転の微小変換を与える演算子は軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}/\hbar$ であり[12]、3 次元空間の回転の自由度 3（x 軸まわり、y 軸まわり、z 軸まわり）に対応して 3 つの演算子 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$ がある。交換関係は

$$\left[\frac{\hat{L}_i}{\hbar},\frac{\hat{L}_j}{\hbar}\right]=i\epsilon_{ijk}\frac{\hat{L}_k}{\hbar}$$

となり、これが SO(3) の（局所的な）性質を特徴づける。対称性に従う状態は群の規約表現が指定する多重項に分類される。2 つの状態が縮退する表現は二重項、3 つの状態が縮退する表現は三重項、のように、縮退する状態の数で多重項の名前が決まる。回転対称性の場合、多重項は量子化された角運動量の大きさ $\ell=0,1,2,\cdots$ で指定され、ある ℓ に対し $2\ell+1$ 個の m の状態が縮退するので

$$\begin{aligned}\ell&=0:\text{一重項}\\ \ell&=1:\text{三重項}\\ \ell&=2:\text{五重項}\\ &\ \vdots\end{aligned}$$

が可能である。これらの状態は空間回転の角運動量（軌道角運動量）の固有状態としてシュレディンガー方程式から導かれる球面調和関数で表現される。n 重項は n 成分ベクトルと $n\times n$ 行列でも表現できる。

2 次元複素ベクトル $\boldsymbol{a}$ に対し、2×2 行列による変換

$$\boldsymbol{a}=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}\to\boldsymbol{a}'=U\boldsymbol{a}$$

を考える。特に内積（$^{(\dagger)}$ はエルミート共役つまり転置複素共役）

$$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=\boldsymbol{a}^\dagger\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}a_1^* & a_2^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix}=a_1^*b_1+a_2^*b_2$$

を不変に保つ変換は

$$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=\boldsymbol{a}^\dagger\boldsymbol{b}\to(U\boldsymbol{a})^\dagger U\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}^\dagger U^\dagger U\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}^\dagger\boldsymbol{b}=(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$$

[11] 直交行列の行列式は ±1 で、O(3) と SO(3) の生成子は同じで局所的な性質は同じ（大域的な性質に違いがある）。

[12] 例えば z 軸まわりの角度 θ の回転は演算子 $\exp\{-i\theta\hat{L}_z/\hbar\}$ で与えられる。ただし指数関数の肩に演算子がある場合は級数展開 $e^x=\sum_n x^n/n!$ で定義されているものとする。

となる必要があるので（$U^\dagger$ は転置複素共役つまりエルミート共役)、

$$U^\dagger U = 1 \quad \Leftrightarrow \quad U^{-1} = U^\dagger$$

を満たす行列、つまり 2×2 ユニタリー行列である。ここで

$$U_0 = e^{i\phi}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}, \quad \phi \in \mathbb{R}$$

のように単位行列と位相変換の積に比例するような行列も $(U_0)^{-1} = U_0^\dagger$ を満たすが、これはベクトルの成分 a_1, a_2 の比を変化させないのでここでは考えないことにすると[13]、2 次元複素ベクトルの内積を不変に保つ "回転" を

$$U^{-1} = U^\dagger \quad \text{かつ} \quad \det U = 1$$

を満たす行列 U で表すことができる[14]。このような変換 U（を抽象化したもの）を群論では SU(2) と呼ぶ（S は行列式が 1 であること、U はユニタリー行列 unitary matrix、2 は 2×2 行列に由来)。SU(2) の微小変換を与える演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ はパウリ行列（を抽象化したもの）を使って

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}$$

と書ける。これは一般に U を

$$U = \begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}, \quad a, b, c, d \in \mathbb{C}$$

と書くと

$$U^{-1} = \frac{1}{\det U}\begin{pmatrix}d & -b\\ -c & a\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}d & -b\\ -c & a\end{pmatrix}$$

$$U^\dagger = \begin{pmatrix}a^* & c^*\\ b^* & d^*\end{pmatrix}$$

より $d = a^*, c = -b^*$ となり、SU(2) の行列は

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

と書けることから、U の独立な自由度は、a, b の 2 つの複素数（実部と虚部がある）の自由度 4 から $\det U = 1$ の条件 1 を引いた 3 自由度であることがわかり、微小変換も 3 つのパウリ行列で表現できることがわかる。微小変換の演算子 $\boldsymbol{s}$ の交換関係は、パウリ行列の交換関係を使うことで

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{s}_k$$

[13] 行列 U_0 は U(1) 変換で、U(2)=U(1)⊗SU(2) と分解して SU(2) だけ考えることに対応する。
[14] $\det U_0 = e^{2i\phi} \neq 1$ であるので。

となり、これが SU(2) の（局所的な）性質を特徴づける。SU(2) の多重項はスピンの大きさ $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$ で指定され、ある s に対し $2s+1$ 個の m_s の状態が縮退するので

$$
\begin{aligned}
s = 0 &: \text{一重項} \\
s = \frac{1}{2} &: \text{二重項} \\
s = 1 &: \text{三重項} \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

が可能である。

SO(3) と SU(2) は生成子の交換関係が同じであるので、局所同型という。交換関係を使って状態を構成する方法では、元の群が SO(3) だったか SU(2) だったかは分からないので、最も一般的な状態を構成すると、SO(3) の表現（実空間の回転変換から出る状態）以外に SU(2) の表現（複素ベクトルの "回転" から出る状態）も導かれる。つまり、§3 のシュレディンガー方程式から球面調和関数を出す計算と、§5 の交換関係 $[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k$ から状態を構成する計算は、同じものを計算しているのではなく、§5 の方がより一般的な "回転" の下での変換を扱っており、SO(3) だけでなく SU(2) の表現も $|j, m\rangle$ として得られたことがわかる。