

# 物質科学のための群論入門

ガオゾウ

2019 年 12 月 11 日

## 1 導入：物質の対称性と群論

現実の物質を対象とする物質科学は、理論的な解析が非常に困難なことが多いです。その理由としては例えば、ほとんどの場合に自由度が非常に多いことや、相互作用を考慮しなくてはならないことが挙げられます。このような系では、理論的に厳密な解析をするのは困難であるため、しばしば大胆な近似を行う必要があります。

そんな物質の理論を構築するにあたり非常に重要となる一つの手がかりが、物質の持つ対称性です。対称性のもっとも簡単な例は「左右対称」でしょう。しばしば物質も「左右対称」を含む様々な対称性を持ちえます。実は、このような対称性を持つ・持たないという情報だけから物質の様々な性質を知ることができるのです。しかも、このような議論は、しばしば理論的に厳密に行うことができます。複雑な物質であっても、対称性は容易にわかることが多いので、これは非常に強力な手法です。

このような対称性の議論をするにあたって基本的な道具となるのが、本記事のテーマである群論、特に群の表現論です。

本記事の基本的な流れは以下ようになります。まず、群の定義を簡単に述べた後、群の表現の定義を述べます。その後、群の表現に関する重要な定理をいくつか紹介します。その後、これらの定理を用いた実際の物質の解析例を紹介します。

前提知識としては、線形代数と量子力学の基本的な知識を仮定します。「シュレーディンガー方程式を解くということはハミルトニアンを対角化することだ」と言われて意味がわかれば大丈夫です。群論については、一応群の公理から話を始めるので、前提知識は原理的にはいりません。しかし、多少は触れたことがあった方が話は分かりやすいとは思いますが。

本記事ではあくまで物質の解析への応用を主眼とするので、定理の証明にはあまり踏み込みません。興味のある方は参考文献にも挙げている応用群論 [?] などをご覧ください。また、本記事では有限群のみを扱います。本記事で群はすべて有限群を指すと思ってください。

## 2 対称性と群論の概観

### 2.1 群の定義

群とは、以下の四つの公理を満たす集合  $G$  と演算  $\cdot$  (積と呼ぶ) の組  $(G, \cdot)$  のことを指します。

## 群の公理

1.  $G$  は積に関して閉じている。すなわち、任意の元  $g, h \in G$  に対して、 $g \cdot h \in G$  が成り立つ。
2. 積に関して結合律が成り立つ。すなわち、任意の元  $g_1, g_2, g_3 \in G$  に対して、

$$g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3) = (g_1 \cdot g_2) \cdot g_3$$

が成り立つ。

3.  $G$  は単位元  $e$  を持つ。すなわち、任意の元  $g \in G$  に対し  $g \cdot e = e \cdot g = g$  となるような元  $e \in G$  が存在する。
4. 任意の  $G$  の元に対し、積に関する逆元が存在する。すなわち、任意の元  $g \in G$  に対し、ある  $g' \in G$  が存在し、

$$g \cdot g' = g' \cdot g = e$$

が成り立つ。(このときの  $g$  に対する  $g'$  のことを  $g^{-1}$  とかく。)

ここで、一般に積に関して可換であるとは限らないことに注意してください。

群の例としてよく挙げられるのは、実数全体の集合  $\mathbb{R}$  と和  $+$  の組  $(\mathbb{R}, +)$  です。この場合単位元は  $0$  で、 $a \in \mathbb{R}$  に対する逆元は  $-a$  です。なお、実数は積に関しては群になりません。 $0$  に対する逆元が存在しないからです。

また、複素数係数の  $n$  次正則行列全体の集合  $GL_n(\mathbb{C})$  も、通常の行列積に関して群を成します。この場合の単位元は単位行列であり、逆元は逆行列になります(正則行列に対しては必ず逆行列が存在します)。

気分としては、逆元を持つような最低限「まとも」な演算を持つ集合のことを群と呼ぶ、と思っておけばとあえずはよいと思います。

以下本記事では、誤解の恐れがない限り、積の記号  $\cdot$  は省略し、 $g_1 \cdot g_2$  のことを単に  $g_1 g_2$  と書きます。

## 2.2 対称性の定式化と群

さて、前節で定義した群はどのように物質における対称性の議論に用いられるのでしょうか。それを考えるためには、まず「対称性」という概念を数学的に定式化する必要があります。結論から言えば、対称性とは、ある変換に対して不変であることとして定式化されます。

### 2.2.1 対称性と変換

系がある変換に対して不変であるとき、その系は(その操作に対応する)対称性を持つと言われます。たとえば、簡単な場合として正方形を考えてみましょう。正方形は左右対称です。つまり、適当な中心線に対して正方形を折り返した時にピッタリ正方形が重なります(図 1(a))。このことは、正方形の中心に原点をとり、辺に平行に  $x, y$  軸をとったとき(図 2)、正方形は  $\sigma_x : x \mapsto -x$  という変換  $\sigma_x$  に対して不変である、ということもできます。同様に、正方形は  $\sigma_y : y \mapsto -y$  という変換  $\sigma_y$  に対しても不変です。これは正方形が上下対称であるということに対応します。

その他にも様々な対称性を、このような「ある変換に対する不変性」という形で定式化することができます。例えば、図 1(b),(c) はそれぞれ、正方形が  $90^\circ$  回転、斜め方向の折り返しに関して不変である様子を表

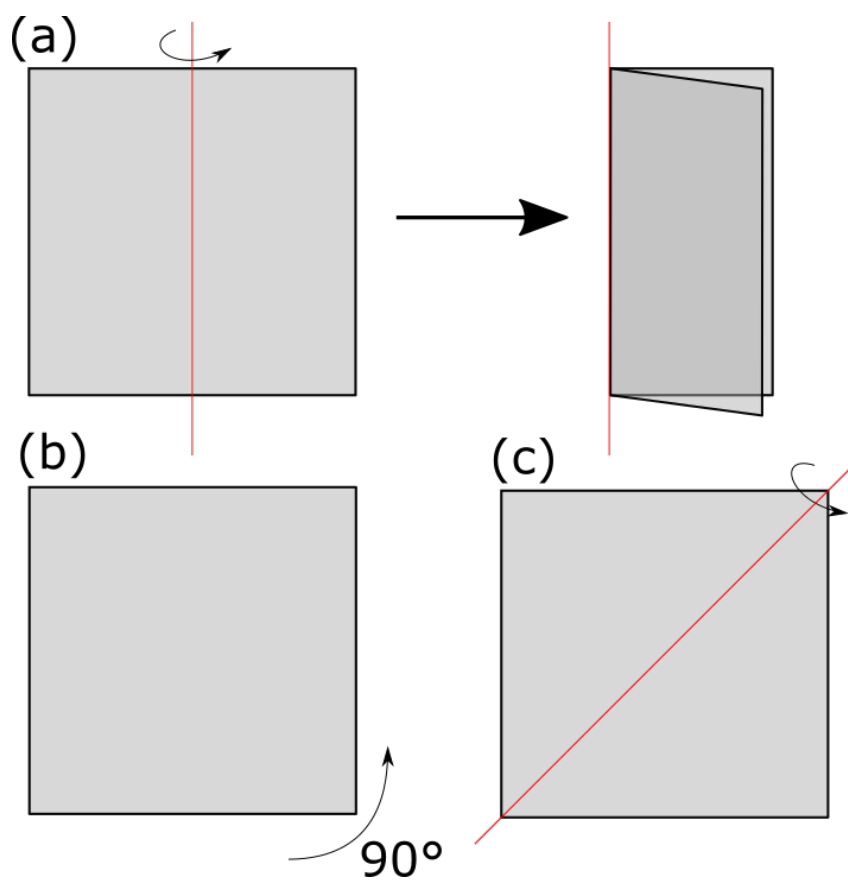


図 1: 正方形の対称性

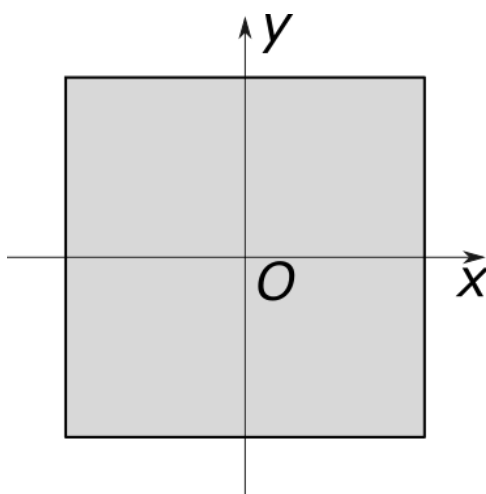


図 2: 正方形の座標系

しています。これらも、それぞれ次のような変換に対応していると考えられます。

$$\begin{aligned}C_4 &: (x, y) \mapsto (-y, x) \\ \sigma_d &: (x, y) \mapsto (y, x)\end{aligned}$$

これらの変換はよく見るとすべて線形変換なので、行列を用いて表すことができます。例えば、

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ C_4 &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_d &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma'_d &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

などです。これらの変換はすべて長さ（ノルム）を変えない直交変換になっていることにも注意してください。

さて、二つの変換を続けて行うことを、新しい一つの変換とみなせば、変換の合成を定義することができます。例えば、最初に  $\sigma_x$  という変換を行ってから、次に  $C_4$  という変換を行うことを  $C_4 \circ \sigma_x$  と書くことにしましょう。 $C_4 \circ \sigma_x$  は、もちろん正方形を不変に保つ変換になっています。実際、先ほど導入した行列を用いて計算してみると、

$$C_4 \circ \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma'_d$$

となっていて、合成した結果もまた正方形を不変にする変換の一つになっていることが確かめられます。他にも、例えば  $\sigma_y \circ \sigma_y$  は、

$$\sigma_y \circ \sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

と、単位行列になることがわかります。単位行列は、何もしない変換ですから、当然正方形は不変にする変換の一つということが出来ます。一般に、このような何もしない変換のことを恒等変換と呼び、本記事では  $E$  と書くことにします。

ここまで述べたことをまとめます。本節では正方形を例にとって、系を不変にする変換について考えました。このとき、変換の合成や、恒等変換を考えることができました。勘のいいひとは気づいているかもしれませんが、これらの正方形を不変にする変換全体の集合は、変換の合成を積として群をなします。これこそが、本記事で考えたい「対称性を表す群」です。

より一般に、ある注目する系について、本節で述べたような系を不変にする変換をすべて集めてきた集合  $G$  を考えましょう。この集合は、変換の合成を積とみれば群になっています。この場合の単位元は、恒等変換  $E$  になります\*1。

---

\*1 このあたりの「何を対称性の群の定義にするか」という話については、正直自分もよくわからないが、フォーマルには後述の「ハミルトニアンを不変にする変換全体の集合」というのが最も良いと思う。このように考えればきちんとこの集合が群になっていることも示すことができる。ただ、実際にモデルを作ったりするときは、始めに対称性の群がありきで、その対称性を持つようなハミルトニアンを考えたりする。まあ物理なので細かいことは気にしない。

### 2.2.2 量子力学における対称性と保存則

前節では、正方形を例にとって対称性が変換に対する不変性という形でとらえられることを説明しました。また、系が不変になるような変換全体の集合が群になることを述べました。

ここでは、量子力学においてこのような変換がどのように表されるかということと、量子系の対称性から導かれる保存則について簡単に述べます。

量子力学において、対称性  $g$  に対応する変換はユニタリ変換  $U_g$  で表されます\*2。このとき、ある状態  $|\psi\rangle$  は次のように変換されます：

$$|\psi\rangle \mapsto U_g |\psi\rangle$$

このとき、物理量  $A$  の期待値は次のように変化します。

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \mapsto \langle \psi | U_g^\dagger A U_g | \psi \rangle$$

この後、しばしば状態そのものではなく物理量に着目して調べていくことが多くなります。そこで、 $g$  による変換を状態ではなく物理量に押し付けて定式化することにしましょう。すなわち、状態ベクトル  $|\psi\rangle$  が  $g$  によって変換すると考えるのではなく、物理量の演算子  $A$  が  $g$  によって変換を受けると考えます。このように考えると、演算子  $A$  は次のように変換するのが自然であるとわかります：

$$A \mapsto U^\dagger A U$$

これを用いて量子系の対称性をキチンと定義しましょう。量子系は、あるハミルトニアン  $H$  によって記述されます。量子系がある対称性を持つということは、対称性  $g$  に対応するユニタリ変換  $U_g$  に対して、ハミルトニアンが不変であること、すなわち、

$$H = U_g^\dagger H U_g \quad \text{あるいは} \quad U_g H = H U_g \quad (1)$$

が成り立つこととして定義されます\*3。

ところで、ハミルトニアンが対称性を持つとき、すなわち式 (1) が成り立つとき、ユニタリ変換  $U_g$  とハミルトニアンの固有状態  $|\psi\rangle$  の関係はどうなっているのでしょうか。直観的には、 $|\psi\rangle$  を  $U_g$  によって変換しても、ハミルトニアンが対応する不変性を持っているのであれば、エネルギー固有値は変わらないように思えます。これは実際正しいことが次のように確かめられます。

$$H(U_g |\psi\rangle) = U_g H |\psi\rangle = E U_g |\psi\rangle$$

ここで  $E$  は  $|\psi\rangle$  のエネルギー固有値です。したがって、 $U_g |\psi\rangle$  は  $|\psi\rangle$  と同じエネルギーを持つ状態であることがわかりました。 $U_g |\psi\rangle$  と  $|\psi\rangle$  は同じエネルギーを持ちますが、必ずしも量子力学的に同じ状態とは限らないことに注意してください。また、量子力学的に同じ状態であったとしても、位相因子分だけ異なっている可能性もあります。これらは「対称性  $g$  による変換  $U_g$  は、異なるエネルギー固有状態を混ぜることはない。すなわち、演算子  $U_g$  はエネルギー固有空間ごとにブロック対角化されている」と言い換えることもできます。

さて、ある一つの固有エネルギーに着目し、その固有空間だけを考えることにしましょう。すると、 $U_g$  はこの固有空間内だけで閉じたユニタリ変換になっています。しかも、このことは対称性の群  $G$  のすべての元

\*2 時間反転対称性は反ユニタリ変換。

\*3 この定義から、量子系の対称性に対応するユニタリ変換全体の集合は、確かに群をなしていることがわかります。

$g$  について成り立っています。ここで、次のような問題を考えることができます：「このとき、どのような  $U_g$  や固有空間が許されるのか？」つまり、「固有空間内だけで  $U_g$  の変換が閉じている」という事実そのものを、ハミルトニアンやエネルギー固有値に対する制約とみるのです。実は、 $U_g$  や固有空間として、

### 2.2.3 対称性と量子数

線形代数の定理から、二つの演算子が可換であるときその二つの演算子について同時固有状態をとることができます。したがって、量子系が対称性を持ちユニタリ変換  $U_g$  に対して不変であるとき、 $U_g$  と  $H$  の固有状態を取ることができます。これは、 $U_g$  の固有値が保存すること、つまり  $U_g$  の固有値が良い量子数になっていることを意味します。

さて、ここまで系が持っている対称性のうちの一つ  $g$  の場合について述べましたが、興味がある系が複数の対称性を持っていることもしばしばあります。この場合には、ハミルトニアンの固有状態を特徴づける量子数について、どのようなことが言えるのでしょうか。

最も簡単なケースは、群

## 2.3 群の表現論の基本的な定義と定理

本節では、群の表現に関する基本的な定義と、応用上重要となる定理についてまとめます。定理の証明についてはここでは踏み込みません。参考文献などを参照してください。

### 2.3.1 群の表現の定義

群の表現は次のように定義されます。

定義：群の表現

ある群  $G$  の表現  $D$  とは、 $G$  から  $d$  行  $d$  列の行列  $D(G)$  への写像であって、次の性質を満たすようなものである。

- 任意の  $g_1, g_2 \in G$  に対し、

$$D(g_1)D(g_2) = D(g_1g_2) \quad (2)$$

が成り立つ。

このとき、 $d$  は表現の次元などと呼ばれる。

つまり簡単に言ってしまうと、考えている群  $G$  を行列で表したものが群の表現  $D$  です。何も説明になっていませんね。

注意が必要なのは、この表現  $D$  は必ずしも単射でなくてもよいということです（特に単射であるような表現は忠実であるといわれます）。単射でない表現を考えて何がうれしいのかわからないかもしれませんが、実はこれこそが群の表現論を強力な道具たらしめる一つの理由になっています。今はとりあえず先に進みましょう。

いくつか例を挙げます。

- 最も自明な表現として、任意の  $g \in G$  に対し  $D^{(A_1)}(g) = 1$  とするような表現  $A_1$  があります。これは

確かに式 (2) を満たしていることが容易に確認できます。このようにすべての群の元に 1 を対応させる表現のことを恒等表現と呼びます。

- 空間反転対称性  $I$  を例にとって考えてみましょう。 $I$  を含む最も簡単な群は、 $G = \{E, I\}$  です。この群に対する表現を考えてみましょう。まず恒等表現はもちろん  $G$  の表現になっています。恒等表現の次に簡単な表現は、 $E = 1, I = -1$  という表現です。これは確かに式 (2) を満たしていることが容易に確認できます。
- 正方形の対称性を表す群として、 $G = \{E, \sigma_x, \sigma_y, C_4, C_2, C_4^{-1}, \sigma_d, \sigma'_d\}$  を考えましょう。ここで  $C_2$  は  $180^\circ$  回転  $(x, y)$ 、 $C_4^{-1}$  は  $C_4$  の逆元で時計回りに  $90^\circ$  回転する変換を表します。このとき、 $G$  の表現として、例えば

$$\begin{aligned} D(E) &= \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}, \quad D(\sigma_x) = \begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}, \quad D(\sigma_y) = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \\ D(C_4) &= \begin{pmatrix} & 1 \\ -1 & \end{pmatrix}, \quad D(C_2) = \begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}, \quad D(C_4^{-1}) = \begin{pmatrix} & -1 \\ 1 & \end{pmatrix} \\ D(\sigma_d) &= \begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix}, \quad D(\sigma'_d) = \begin{pmatrix} & -1 \\ -1 & \end{pmatrix} \end{aligned}$$

は群  $G$  の表現になっています。(もっとも、これはほとんど  $G$  そのものの定義なので当たり前ですが……)

- 前項と同じ、正方形の対称性を表す群  $G$  を考えましょう。この  $G$  に対して、次のような表現  $D'$  を考えることもできます。

$$\begin{aligned} D'(E) &= D'(C_4) = D'(C_4^{-1}) = D'(C_2) = 1 \\ D'(\sigma_x) &= D'(\sigma_y) = D'(\sigma_d) = D'(\sigma'_d) = -1 \end{aligned}$$

これも確かに群の表現の定義 (2) を満たしています。

## 2.4 規約表現

前節で群の表現を定義しました。群の表現の中でも特に重要な表現となるのが、規約表現と呼ばれている表現です。これは、直観的には