Clifford 代数を用いた水素原子の隠れた対称性の解釈

2022年9月9日 9:40-10:40

伊藤祐斗

@材料科学における幾何と代数III

自己紹介

■学生：物理工学専攻

物性理論（トポロジカル物質＋disorder）

■仕事：製造業研究開発職

理論化学（量子化学・分子動力学）を用いた材料開発

■趣味：数理物理研究

可解量子系（かろうじて材料科学のモデル？）の理論

本講演のキーワード

材料科学における幾何と代数

水素原子
元素周期表

コンパクト化
立体射影
Hopf fibration

Lie代数・Lie群
Clifford 代数

対称性

目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

※非相対論的水素原子の束縛状態に限定します

↓

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化
立体射影

3. 線形化
Hopf fibration

↓

4. Clifford代数による解釈

目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

↓

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化
立体射影

3. 線形化
Hopf fibration

↓

4. Clifford代数による解釈

球対称な系のエネルギー

球対称性を持つポテンシャルに対する Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} - V(r)\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

球極座標において変数分離することが可能であり解は

$$E_{n,l} = n,\ l \text{ の関数}$$

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$n, l \geq 0,\ m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l$$

と書かれる．Y_{lm} は球面調和関数，R_{nl} は動径方向関数（V に依存する），

同じエネルギーを持つ状態は複数ある（＝縮退）．

縮退数は $2l+1$.

水素原子のエネルギー

非相対論的水素原子の Schrödinger 方程式は以下である.

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e}-\frac{\kappa}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r})=E\Psi(\boldsymbol{r}),\ \kappa=\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

束縛状態のエネルギー（<0）は次のようになる.

$$E_{n,l}=-\frac{1}{2(n+l+1)^2}\frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2},\ n,l\geq 0$$

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

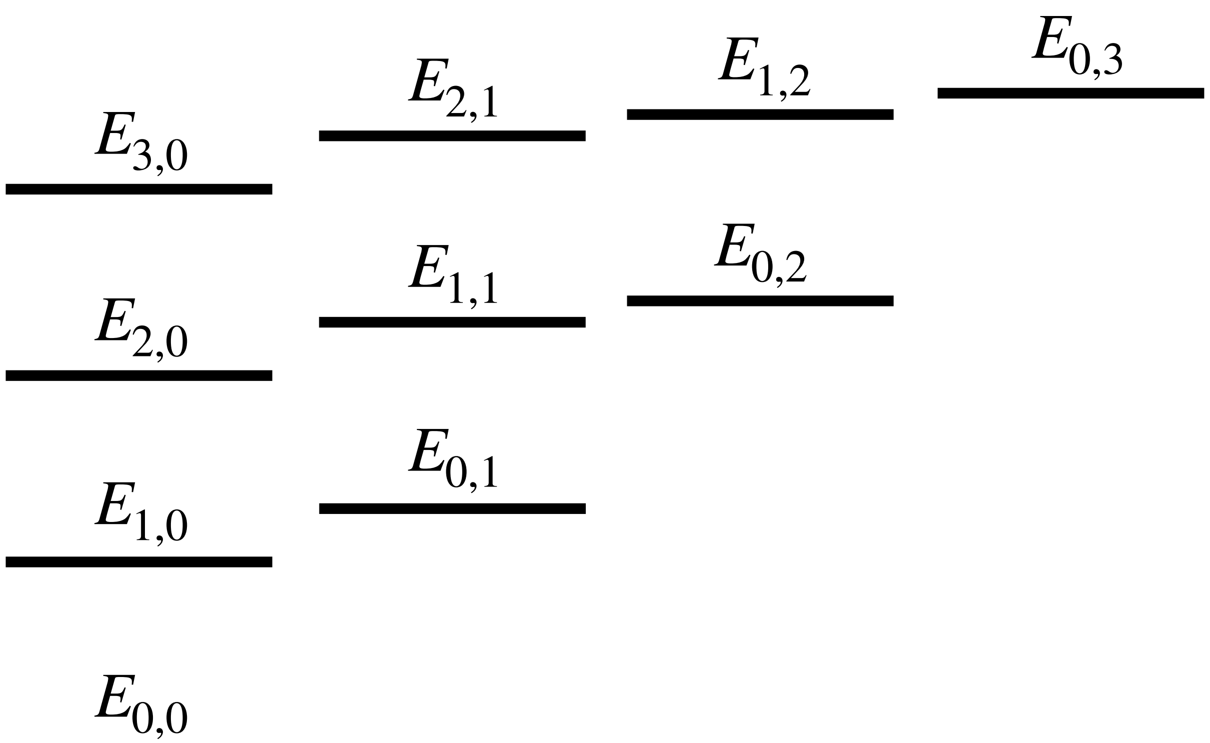
$$m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l$$

と書かれる. R_{nl} は Laguerre 陪多項式を用いて書かれる.

水素原子における偶然縮退

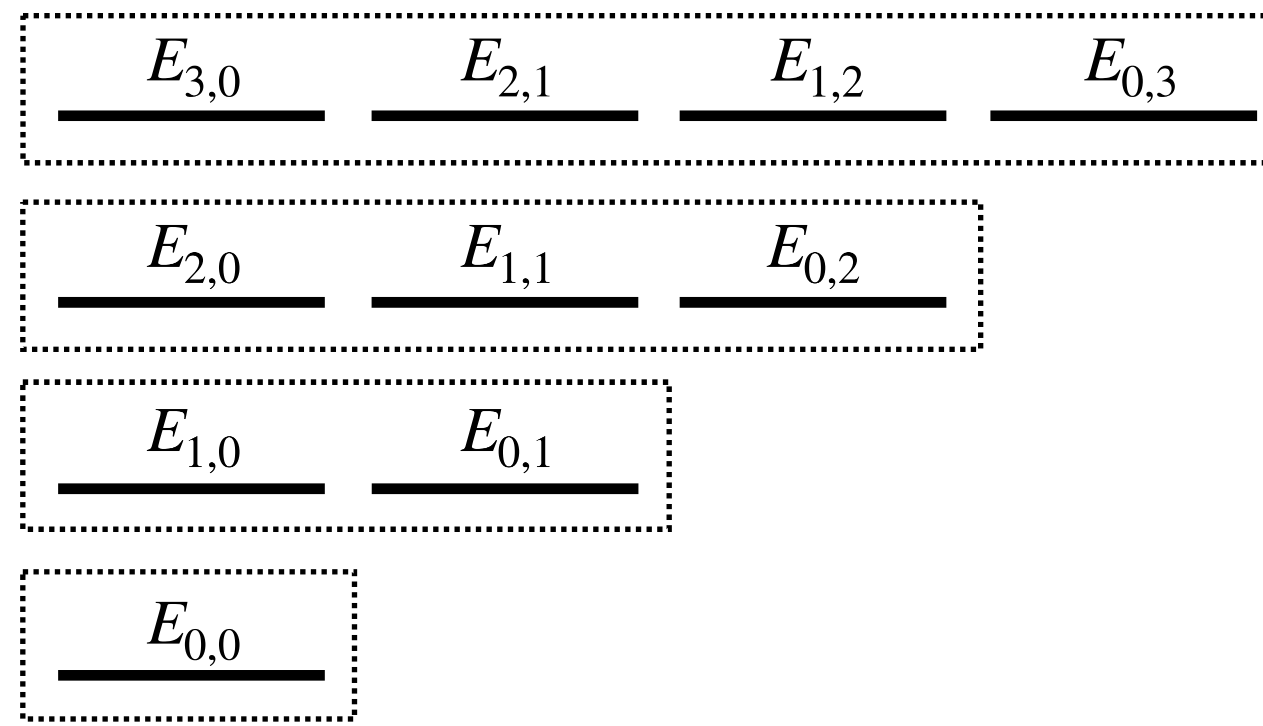
一般の球対称ポテンシャルの場合

$E_{n,l} = n,\ l$ の関数



水素原子の場合

$$E_{n,l} = -\frac{1}{2(n+l+1)^2}\frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2},\ n, l \geq 0$$



水素原子の場合，$n + l$ が同じならば同じエネルギー（= 縮退）．

球対称性では説明できない高度な縮退＝**偶然縮退**がある．

どれくらい縮退するか？

水素原子のエネルギーは $N = n + l + 1$ に依存する.

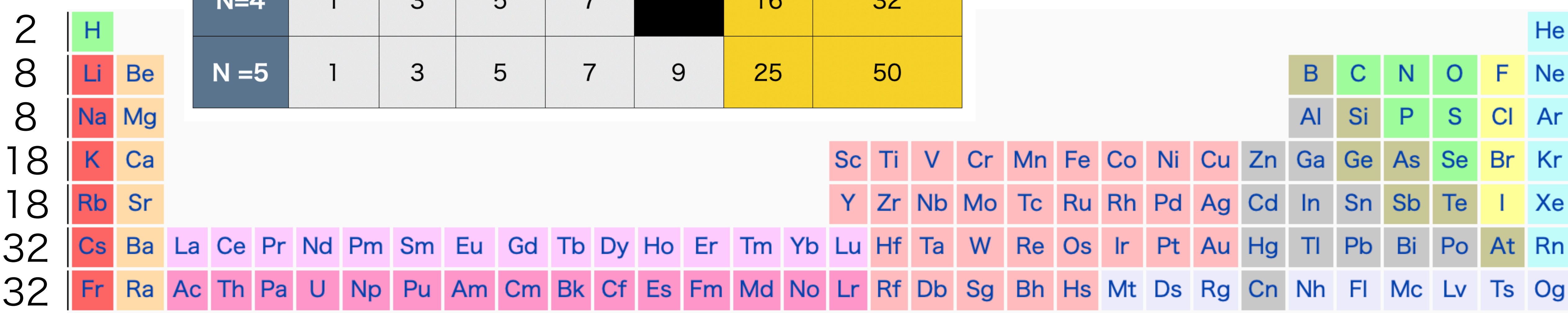
$$E_{n,l} = -\frac{1}{2(n+l+1)^2}\frac{\kappa^2 m_e}{\hbar^2},\ n, l \geq 0,\ m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l$$

	l=0 S軌道	l=1 P軌道	l=2 D軌道	l=3 F軌道	l=4 G軌道	縮重度 N^2	スピン軌道数 $2N^2$
N=1	1					1	2
N=2	1	3				4	8
N=3	1	3	5			9	18
N=4	1	3	5	7		16	32
N =5	1	3	5	7	9	25	50

偶然縮退と周期表の関係

周期表の構造に水素原子における縮重度が反映されている！

	L=0 S軌道	L=1 P軌道	L=2 D軌道	L=3 F軌道	L=4 G軌道	縮重度 N^2	スピン軌道数 $2N^2$
N=1	1					1	2
N=2	1	3				4	8
N=3	1	3	5			9	18
N=4	1	3	5	7		16	32
N =5	1	3	5	7	9	25	50



※実際には原子は多体系なので水素原子の結果以上のことが必要.

1s → 2s → 2p → 3s → 3p → 4s → 3d → 4p → 5s → 4d → 5p → 6s

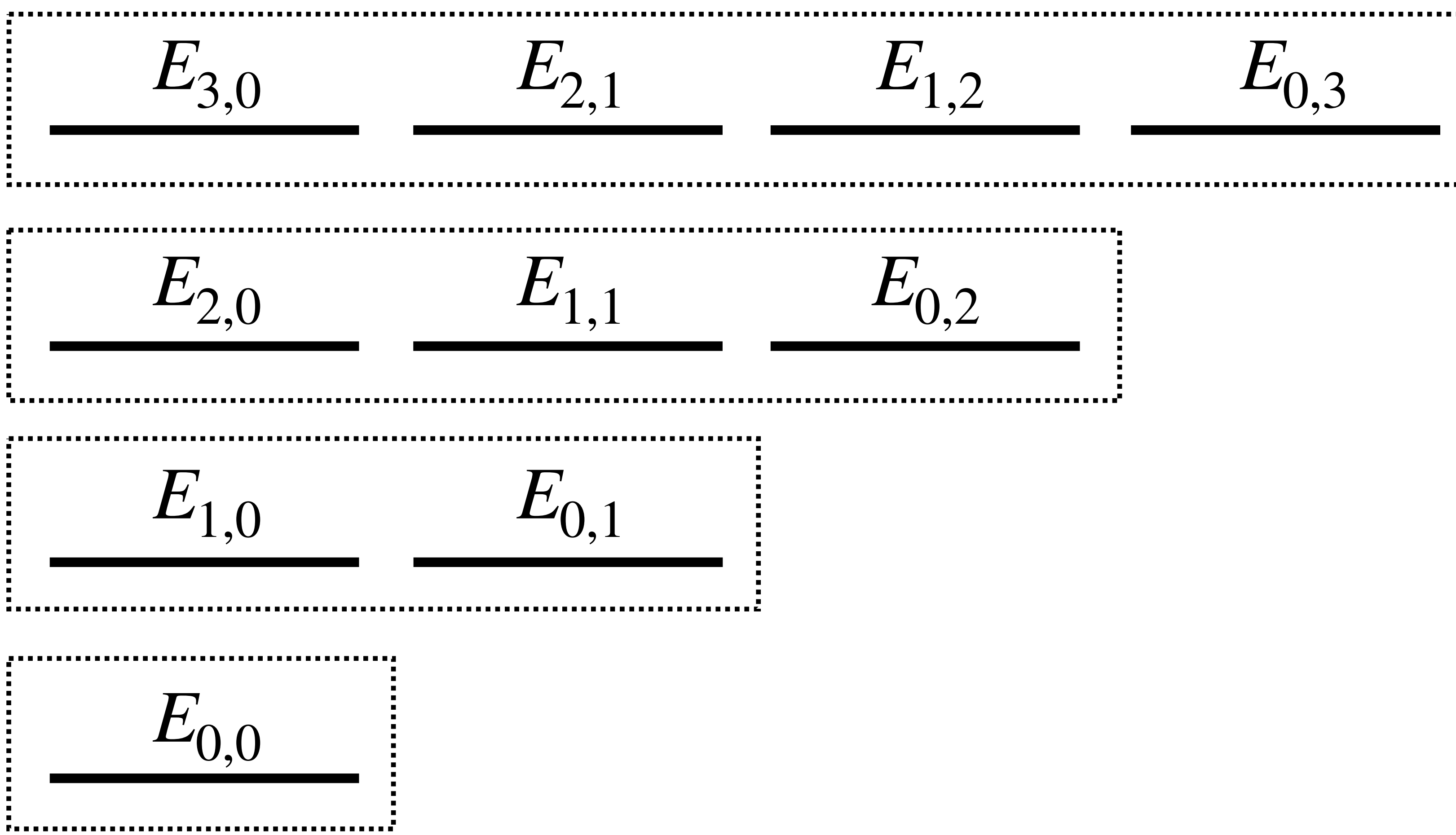
の順で大まかには収容されていく.

隠れた対称性

偶然縮退が生じる理屈は何だろうか？

一般には対称性があると縮重度が大きくなる.

球対称性より大きい**隠れた対称性**が示唆される.



目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

↓

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化
立体射影

3. 線形化
Hopf fibration

↓

4. Clifford代数による解釈

角運動量保存則とSO(3)対称性

球対称性を持つポテンシャルに対する Schrödinger 方程式

$$H\Psi = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} - V(r)\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

角運動量ベクトル

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

$$L_x = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

角運動量保存則

$$\left[H, L_i\right] = HL_i - L_iH = 0$$

so(3) Lie 代数の生成元となる.

$$\left[L_i, L_j\right] = L_iL_j - L_jL_i = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k$$

LRL ベクトル保存則と?対称性

水素原子に対する Schrödinger 方程式

$$H\Psi = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

LRL ベクトル

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) - \frac{\kappa\boldsymbol{r}}{r}$$

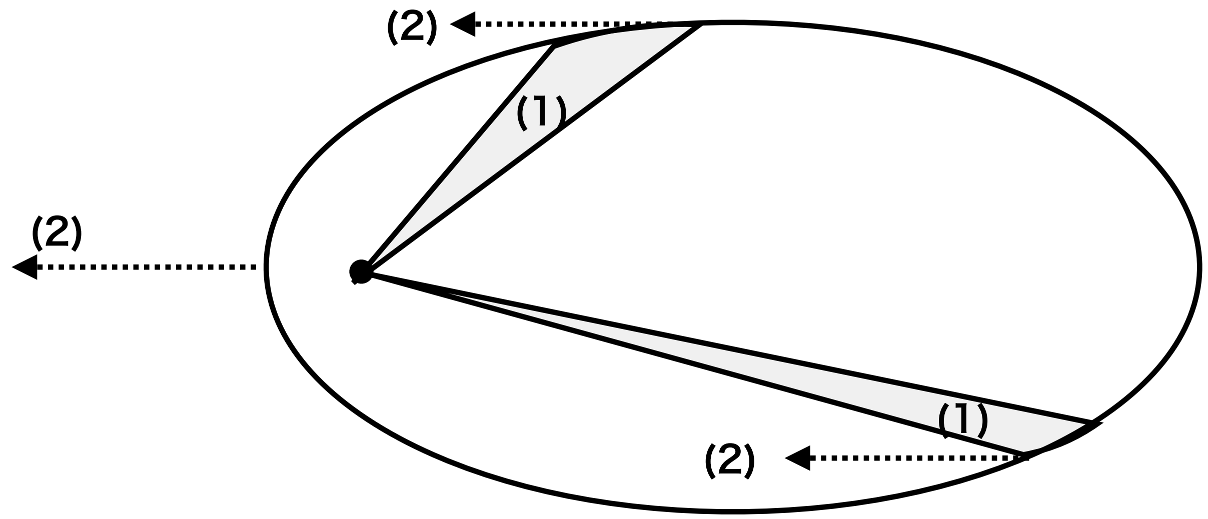
LRLベクトル保存則

$$\left[H, M_i\right] = HM_i - M_iH = 0$$

これらは有限次元 Lie 代数とはならない.

$$\left[L_i, L_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k,\ \left[M_i, L_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}M_k,\ \left[M_i, M_j\right] = -\mathrm{i}\hbar\frac{2H}{m_e}\epsilon_{ijk}L_k$$

保存則の古典力学的解釈



(1) 角運動量保存則の意味

・方向：運動する平面の法線方向，大きさ：面積速度に比例

→運動する平面が不変，面積速度が一定.

・三成分の保存はエネルギー保存と独立な情報

(2) LRLベクトル保存則の意味

・方向：原点から近日点を指す向き，大きさ：離心率と比例（$M = e\kappa$）

→近日点が不変，離心率が一定.

・特に「近日点が不変」は角運動量及びエネルギー保存と独立な情報

トータルで５つの独立な保存量→最大超可積分系の代表例

水素原子に潜むso(4)対称性

エネルギー $E<0$ の部分空間に制限→演算子 H をスカラー E と見なせる.

添字に対して反対称となる形式的な記号

$$L_{23}=\frac{L_1}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{31}=\frac{L_2}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{12}=\frac{L_3}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{14}=\frac{\tilde{M}_1}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{24}=\frac{\tilde{M}_2}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{34}=\frac{\tilde{M}_3}{\mathrm{i}\hbar}$$

但し，$\tilde{\boldsymbol{M}}=\boldsymbol{M}\sqrt{\dfrac{m_e}{-2E}}$

を導入すると,

$$\left[L_{\mu\nu},L_{\sigma\rho}\right]=\delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho}+\delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma}-\delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma}-\delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho}$$

となるが，これは **Lie 代数** so(4) を成すことを表す.

力学的対称性，**隠れた対称性**，等と呼ばれることがある.

立体射影とコンパクト化

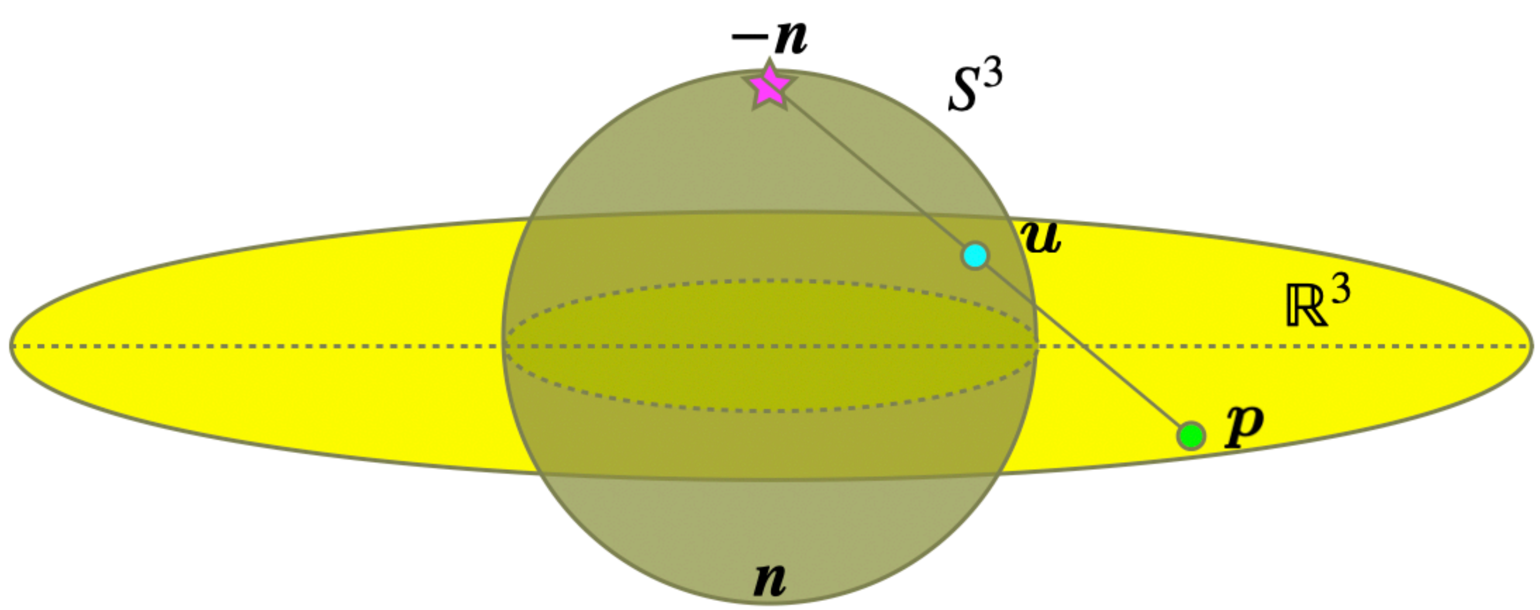
水素原子の Schrödinger 方程式を運動量空間で書くと積分方程式になる.

$$\frac{1}{\left(\boldsymbol{p}^2+p_0^2\right)}\frac{m_e\kappa}{\pi^2\hbar}\int_{\boldsymbol{R}^3}d\boldsymbol{p}'\frac{\tilde{\psi}\left(\boldsymbol{p}'\right)}{\left|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'\right|^2}=\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}),\ p_0^2=-2m_eE<0$$

立体射影変換で**コンパクト多様体である超球面 S^3 上の積分方程式**となる.

$$\boldsymbol{u}=\frac{p_0^2-\boldsymbol{p}^2}{p_0^2+\boldsymbol{p}^2}\boldsymbol{n}+\frac{2p_0}{p_0^2+\boldsymbol{p}^2}\boldsymbol{p},\ \tilde{\Psi}(\boldsymbol{u})=\sqrt{\frac{2\pi^2}{p_0}}\left(\frac{p_0^2+\boldsymbol{p}^2}{2p_0}\right)^2\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}),\ G(\boldsymbol{x})=\frac{1}{4\pi^2\left|\boldsymbol{x}\right|^2}$$

$$\tilde{\Psi}(\boldsymbol{u})=\frac{2m_e\kappa}{p_0\hbar}\int_{S^3}d\Omega\left(\boldsymbol{u}'\right)\tilde{\Psi}\left(\boldsymbol{u}'\right)G\left(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}'\right)$$



超球面 S^3 上自由粒子との等価性

積分核 $G(\boldsymbol{x}) = \left(4\pi^2 |\boldsymbol{x}|^2\right)^{-1}$ の正体は S^3 上自由粒子の Green 関数.

$$\Delta_{S^3} G(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}') = -\delta(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}')\big|_{S^3}$$

ここで Δ_{S^3} は S^3 上の Laplace-Beltrami 作用素.

$$\Delta_{\mathbb{R}^4} = \frac{1}{u^3}\frac{\partial}{\partial u}\left(u^3 \frac{\partial}{\partial u}\right) + \frac{\Delta_{S^3}}{u^2}$$

Stokesの定理等より，**S^3 上の自由粒子の Schrödinger 方程式**に帰着.

$$\Delta_{S^3} \tilde{\Psi}(\boldsymbol{u}) = \Lambda \tilde{\Psi}(\boldsymbol{u})$$

Laplace-Beltrami 作用素 Δ_{S^3} と前述の $L_{\mu\nu}$ の関係

$$\Delta_{S^3} = \sum_{1 \le \mu < \nu \le 4} \tilde{L}_{\mu\nu}^2, \quad (p_0^2 + p^2)^{-2} \tilde{L}_{\mu\nu} (p_0^2 + p^2)^2 = L_{\mu\nu}$$

$\tilde{L}_{\mu\nu}$ は変換後の空間 $\mathbb{R}^4$ あるいは S^3 の回転生成子である.

目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化
立体射影

3. 線形化
Hopf fibration

4. Clifford代数による解釈

線形化の歴史

■ 天体力学が起源

・古くは Euler が１次元上の３体問題の解析に使った．（18C）

・時間・空間の変数変換により力の発散を取り除く．（正則化）

・調和振動子の運動方程式に変換される．（線形化）

■ ２次元バージョンの発見（19C~20C前半）

・Goursat, Bohlin, Levi-Civita らによる

・共形変換の一種を用いることで2D Kepler → 2D 調和振動子

■ 高次元化の取り組み（20C中盤まで）

・長らく３次元バージョンは見つからず.

・3D Kepler → 3D 調和振動子 は可能？

Kustaanheimo-Stiefel 変換

1960s に発明された３次元バージョン.

Kustaanheimo-Stiefel（KS）変換は三次元を四次元に埋め込む変換.

$$\Phi_{KS} : \mathbb{R}^3 \times S^1 \to \mathbb{R}^4 : (x_1, x_2, x_3, \sigma) \mapsto (q_1, q_2, q_3, q_4)$$

$$\begin{aligned} x_1 &= r\cos\theta \\ x_2 &= r\sin\theta\cos\phi \\ x_3 &= r\sin\theta\sin\phi \end{aligned}$$

$$r > 0,\ 0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \phi < 2\pi,\ 0 \le \sigma < 4\pi$$

球極座標

$$\begin{aligned} q_1 &= \sqrt{r}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\sigma+\phi}{2}\right) \\ q_2 &= \sqrt{r}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\sigma+\phi}{2}\right) \\ q_3 &= \sqrt{r}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\sigma-\phi}{2}\right) \\ q_4 &= \sqrt{r}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\sigma-\phi}{2}\right) \end{aligned}$$

Cylindrical 座標

Euler の四次元座標

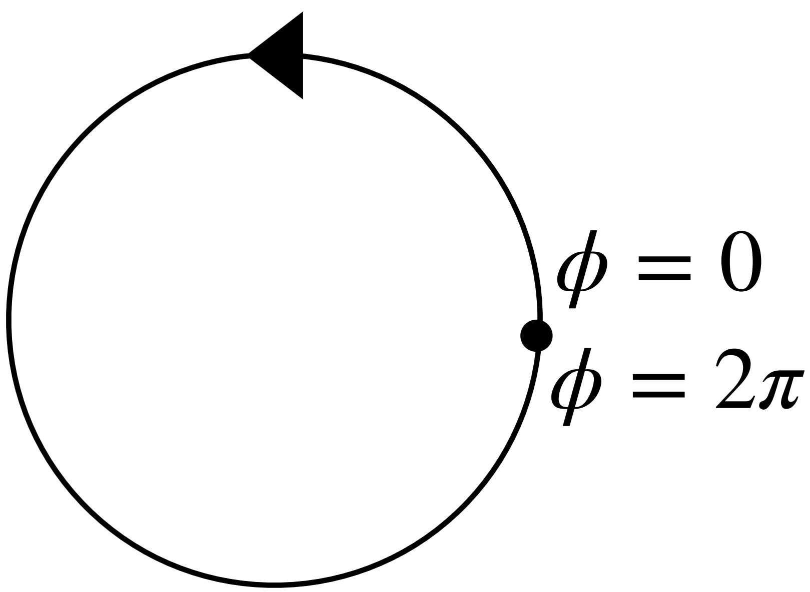
どんな変換か？

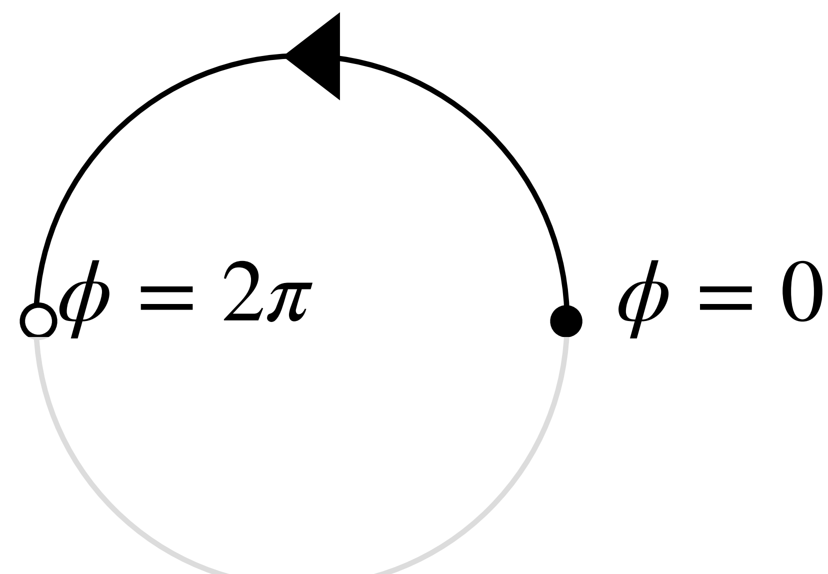
$r = 1,\ \theta = 0,\ \ \sigma = 0$ で固定して考える

$$x_1 = 0$$

$$\boxed{\begin{aligned} x_2 &= \cos\phi \\ x_3 &= \sin\phi \end{aligned}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} q_1 &= \cos\left(\frac{+\phi}{2}\right) \\ q_2 &= \sin\left(\frac{+\phi}{2}\right) \end{aligned}} \quad \begin{aligned} q_3 &= \cos\left(\frac{-\phi}{2}\right) \\ q_4 &= \sin\left(\frac{-\phi}{2}\right) \end{aligned}$$





一周しても戻れない，戻るには二周する必要.

Hopf fibration

KS変換（の $r=1$ への制限）$\Phi_{KS}|_{r=1}: S^2\times S^1 \to S^3$は**ねじれ**がある

$S^2\times S^1$ と S^3 は局所的には似ているが全体としては異なることを示唆.

$\to$ こういった状況を記述するのが**ファイバー束**

Hopf fibration: $S^1 \hookrightarrow S^3 \to S^2$

ファイバー, ファイバー束, 底空間

球面 S^2 の各点に円周 S^1 があるが，それらがねじれて繋がっている

※ Hopf fibrationにはファミリーがある.

$S^0 \hookrightarrow S^1 \to S^1$ ← Levi-Civita 変換に相当

$S^3 \hookrightarrow S^7 \to S^4$ ← 5次元水素原子-8次元調和振動子対応

$S^7 \hookrightarrow S^{15} \to S^8$ ← 9次元水素原子-16次元調和振動子対応

$\mathbb{R}^4$ 上調和振動子との等価性

水素原子 Schrödinger 方程式

$$H\Psi(\boldsymbol{r}) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e} - \frac{\kappa}{r}\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$$

に対して変数 $k = -\dfrac{8m_eE}{\hbar^2}, \lambda = \dfrac{8m_e\kappa}{\hbar^2}$ を導入して KS 変換を行うと,

４次元調和振動子の Schrödinger 方程式に帰着する.

$$\left[-\nabla_{\boldsymbol{q}}^2 + kq^2\right]\Psi(\boldsymbol{q}) = \lambda\Psi(\boldsymbol{q})$$

波動関数が σ に陽によらないという拘束条件から以下の式も成立する.

$$\left(q_1\frac{\partial}{\partial q_2} - q_2\frac{\partial}{\partial q_1} + q_3\frac{\partial}{\partial q_4} - q_4\frac{\partial}{\partial q_3}\right)\Psi(\boldsymbol{q}) = 0$$

SO(4) 対称性は何処にあるか？

四次元調和振動子のSchrödinger方程式

$$\left[-\nabla_{\boldsymbol{q}}^2 + kq^2\right]\Psi(\boldsymbol{r}) = \lambda\Psi(\boldsymbol{q})$$

の対称性は $\mathrm{su}(4) \simeq \mathrm{so}(6)$ である（n次元調和振動子は $\mathrm{su}(n)$）.

$$\boxed{\mathrm{so}(2)} \oplus \boxed{\mathrm{so}(4)} \subset \boxed{\mathrm{so}(6)} \longrightarrow$$

4D調和振動子の対称性

$\mathrm{so}(2)$: 拘束条件の生成元

$$q_1\frac{\partial}{\partial q_2} - q_2\frac{\partial}{\partial q_1} + q_3\frac{\partial}{\partial q_4} - q_4\frac{\partial}{\partial q_3}$$

からなる部分 Lie 代数

$\mathrm{so}(4)$: 拘束条件の生成元と可換な演算子（中心元）からなる部分 Lie 代数

$\downarrow$

水素原子の対称性に相当する

二つの手法の比較

手法	コンパクト化	線形化
舞台	運動量空間	位置空間
幾何学	立体射影変換	**Hopf fibration**
行先	S^3	$\mathbb{R}^4$
帰着するモデル	自由粒子	調和振動子

両手法ともに低次元空間から高次元を発想する手法である.
そもそもなぜ高次元発想の仕組みを解釈したい

目次

1. イントロ：水素原子の隠れた対称性とは？

隠れた対称性を見出す二つの手法

2. コンパクト化
立体射影

3. 線形化
Hopf fibration

4. Clifford代数による解釈

Clifford代数とは

■ 内積空間 $\mathbb{R}^n$

（反対称テンソル代数）

$e_1, e_2, \cdots, e_n, \ \langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$ （正規直交基底）

Clifford代数とは

■ 内積空間 $\mathbb{R}^n$

（反対称テンソル代数）

$$e_1, e_2, \cdots, e_n,\ \langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$$ （正規直交基底）

■ 外積代数 $\bigwedge(\mathbb{R}^n)$

（量子化）

$$\{e_{i_1} e_{i_2} \cdots e_{i_k} \mid 0 \le k \le n,\ 1 \le i_1 \le i_2 \le \cdots \le i_k \le n\}$$ を基底とする線形空間

$$e_i e_j = -e_j e_i \ (i \ne j)$$ （反対称性）

Clifford代数とは

■ 内積空間 $\mathbb{R}^n$

（反対称テンソル代数）

$e_1, e_2, \cdots, e_n,\ \langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$ （正規直交基底）

■ 外積代数 $\bigwedge(\mathbb{R}^n)$

（量子化）

$\{e_{i_1}e_{i_2}\cdots e_{i_k} \mid 0 \le k \le n,\ 1 \le i_1 \le i_2 \le \cdots \le i_k \le n\}$ を基底とする線形空間

$e_i e_j = -e_j e_i\ (i \neq j)$ （反対称性）

■ Clifford 代数 Cl_n

線形空間としては外積代数と同型（$\mathbb{R}$ 上代数としては異なる）

$e_i^2 = -\langle e_i, e_i \rangle = -1$ を課す（量子化）

Clifford代数とは

■ 内積空間 $\mathbb{R}^n$

（反対称テンソル代数）

$e_1, e_2, \cdots, e_n, \langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$ （正規直交基底）

■ 外積代数 $\bigwedge(\mathbb{R}^n)$

$\{e_{i_1}e_{i_2}\cdots e_{i_k} \mid 0 \leq k \leq n,\ 1 \leq i_1 \leq i_2 \leq \cdots \leq i_k \leq n\}$ を基底とする線形空間

（量子化）

$e_ie_j = -e_je_i\ (i \neq j)$ （反対称性）

■ Clifford 代数 Cl_n

線形空間としては外積代数と同型（$\mathbb{R}$ 上代数としては異なる）

$e_i^2 = -\langle e_i, e_i \rangle = -1$ を課す（量子化）

内積・外積が代数の内部演算に組み込まれている（cf. $\langle e_i, e_j \rangle \in Cl_n$ ）

→ 面積・体積・回転，といった幾何学的な量・操作を統一的に扱える

Clifford代数の例

■ 例1 $Cl_1 \simeq \mathbb{C}$ （複素数体との $\mathbb{R}$ 上代数同型）

基底：0重ベクトル 1, 1重ベクトル e_1 に対して,

$$e_1^2 = -1$$（量子化の式）

が成立する.

例えば，以下のようにとると矛盾がない.

$$e_1 = \mathrm{i}$$（ i は $\mathbb{C}$ の虚数単位元）

Clifford代数の例

■ 例1 $Cl_1 \simeq \mathbb{C}$ （複素数体との $\mathbb{R}$ 上代数同型）

基底：0重ベクトル 1, 1重ベクトル e_1 に対して,

$$e_1^2 = -1 \text{（量子化の式）}$$

が成立する.

例えば，以下のようにとると矛盾がない.

$$e_1 = \mathrm{i} \text{（ i は } \mathbb{C} \text{ の虚数単位元）}$$

■ 例2 $Cl_2 \simeq \mathbb{H}$（四元数体との $\mathbb{R}$ 上代数同型）

基底：0重ベクトル 1, 1重ベクトル e_1, e_2, 2重ベクトル e_1e_2 に対して,

$$e_1^2 = e_2^2 = -1,\ (e_1e_2)^2 = e_1e_2e_1e_2 = -e_1^2e_2^2 = -1 \text{ （量子化の式）}$$

が成立する.

例えば，以下のようにとると矛盾がない.

$$e_1 = \mathrm{i}, e_2 = \mathrm{j}, e_1e_2 = \mathrm{k} \text{（ i, j, k は } \mathbb{H} \text{ の虚数単位元）}$$

$\mathbb{R}$ 上代数同型のまとめ

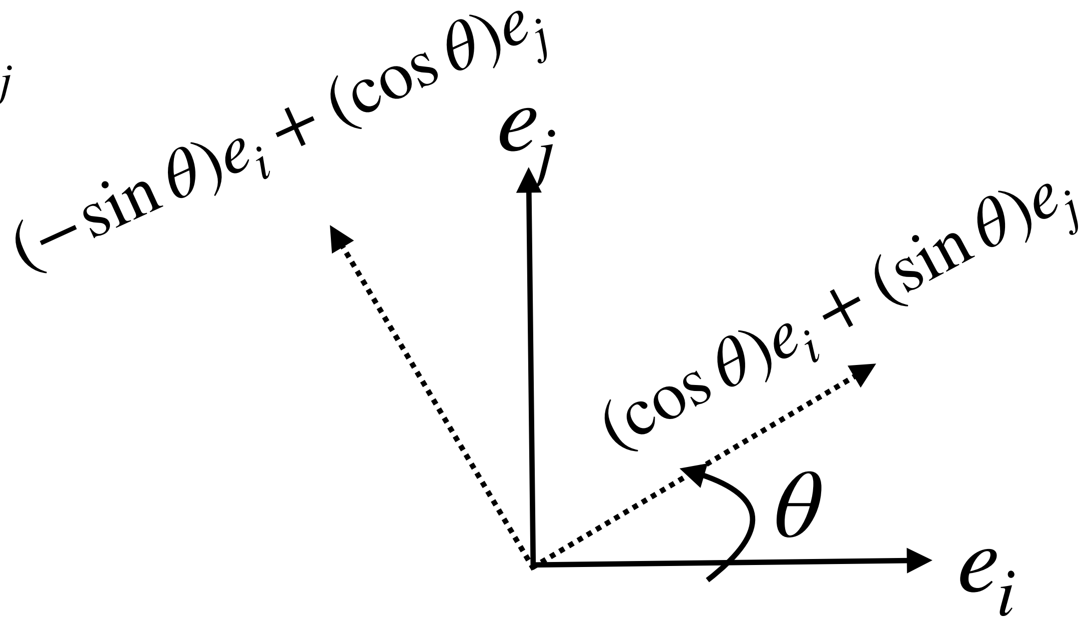
Clifford 代数	同型な代数
Cl_0	$\mathbb{R}$
Cl_1	$\mathbb{C}$
Cl_2	$\mathbb{H}$
Cl_3	$\mathbb{H} \oplus \mathbb{H}$
Cl_4	$\mathbb{H}(2)$
Cl_5	$\mathbb{C}(4)$
Cl_6	$\mathbb{R}(8)$
Cl_7	$\mathbb{R}(8) \oplus \mathbb{R}(8)$
Cl_8	$\mathbb{R}(16)$

代表的な応用：回転の表現

Euler の式の拡張 $\exp\left(\theta \frac{e_i e_j}{2}\right) = \cos\frac{\theta}{2} + e_i e_j \sin\frac{\theta}{2}$ を用いて回転を表現できる.

$$
\begin{aligned}
\exp\left(\theta \frac{e_i e_j}{2}\right) e_i \exp\left(-\theta \frac{e_i e_j}{2}\right) &= \left(\cos\frac{\theta}{2} + e_i e_j \sin\frac{\theta}{2}\right) e_i \left(\cos\frac{\theta}{2} - e_i e_j \sin\frac{\theta}{2}\right) \\
&= \left(\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}\right) e_i + \left(2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\right) e_j \\
&= (\cos\theta) e_i + (\sin\theta) e_j
\end{aligned}
$$

$$
\exp\left(\theta \frac{e_i e_j}{2}\right) e_j \exp\left(-\theta \frac{e_i e_j}{2}\right) = (-\sin\theta) e_i + (\cos\theta) e_j
$$



1重ベクトル e_i は n 次元ベクトル

2重ベクトル $e_i e_j$ は n 次元空間の回転生成子（ $\mathrm{so}(n)$ を構成）

$\exp(e_i e_j/2)$ の随伴表現は n 次元空間の回転表現（ $\mathrm{SO}(n)$ を構成）

Clifford 代数における高次元化

Cl_3 を考える.

2重ベクトルたち：$L_{23} = \frac{1}{2}e_2e_3,\ L_{31} = \frac{1}{2}e_3e_1,\ L_{12} = \frac{1}{2}e_1e_2$

$$\left[L_{\mu\nu}, L_{\sigma\rho}\right] = \delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho} + \delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma} - \delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma} - \delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho},\ 1 \le \mu, \nu, \sigma, \rho \le 3$$

so(3) を構成する.

Clifford 代数における高次元化

Cl_3 を考える.

2重ベクトルたち：$L_{23} = \frac{1}{2}e_2e_3,\ L_{31} = \frac{1}{2}e_3e_1,\ L_{12} = \frac{1}{2}e_1e_2$

$$\left[L_{\mu\nu}, L_{\sigma\rho}\right] = \delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho} + \delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma} - \delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma} - \delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho},\ 1 \le \mu, \nu, \sigma, \rho \le 3$$

so(3) を構成する.

1重ベクトルたち：$L_{14} = \frac{1}{2}e_1,\ L_{24} = \frac{1}{2}e_2,\ L_{34} = \frac{1}{2}e_3$

を加えると,

$$\left[L_{\mu\nu}, L_{\sigma\rho}\right] = \delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho} + \delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma} - \delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma} - \delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho},\ 1 \le \mu, \nu, \sigma, \rho \le 4$$

so(4) を構成する.

一段高い回転を表現可能.

水素原子 so(4) のおさらい

角運動量：$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p},\ L_{23} = \dfrac{L_1}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{31} = \dfrac{L_2}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{12} = \dfrac{L_3}{\mathrm{i}\hbar}$

$$\left[L_{\mu\nu}, L_{\sigma\rho}\right] = \delta_{\mu\sigma} L_{\nu\rho} + \delta_{\nu\rho} L_{\mu\sigma} - \delta_{\mu\rho} L_{\nu\sigma} - \delta_{\nu\sigma} L_{\mu\rho},\ 1 \leq \mu, \nu, \sigma, \rho \leq 3$$

so(3)を構成する.

水素原子 so(4) のおさらい

角運動量：$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$, $L_{23} = \dfrac{L_1}{\mathrm{i}\hbar}$, $L_{31} = \dfrac{L_2}{\mathrm{i}\hbar}$, $L_{12} = \dfrac{L_3}{\mathrm{i}\hbar}$

$$\left[L_{\mu\nu}, L_{\sigma\rho}\right] = \delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho} + \delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma} - \delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma} - \delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho},\ 1 \le \mu, \nu, \sigma, \rho \le 3$$

so(3)を構成する.

LRLベクトル：$\tilde{\boldsymbol{M}} = \sqrt{\dfrac{m_e}{-2E}} \left[\dfrac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}) - \dfrac{\kappa \boldsymbol{r}}{r}\right]$

$$L_{14} = \frac{\tilde{M}_1}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{24} = \frac{\tilde{M}_2}{\mathrm{i}\hbar},\ L_{34} = \frac{\tilde{M}_3}{\mathrm{i}\hbar}$$

を導入すると,

$$\left[L_{\mu\nu}, L_{\sigma\rho}\right] = \delta_{\mu\sigma}L_{\nu\rho} + \delta_{\nu\rho}L_{\mu\sigma} - \delta_{\mu\rho}L_{\nu\sigma} - \delta_{\nu\sigma}L_{\mu\rho}$$

となるが，これは **Lie 代数** so(4) を成すことを表す.

一段高い次元に持ち上がるのが立体射影と関係.

水素原子 so(4) とClifford代数 Cl_3 の対応

■ 水素原子におけるso(4)

空間反転に対する振る舞いの異なる三次元空間の物理量,

$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ は**「極性ベクトル」**（空間反転で奇）

$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}) - \frac{\kappa \boldsymbol{r}}{r}$ は**「軸性ベクトル」**（空間反転で偶）

これらを混合することで高次元の代数 so(4) の構造が見えてきた.

■ Clifford 代数 Cl_3

空間反転に対する振る舞いの異なる元

1重ベクトル e_1, e_2, e_3 は**「極性ベクトル」**（空間反転で奇）

2重ベクトル e_1e_2, e_2e_3, e_3e_1 は**「軸性ベクトル」**（空間反転で偶）

を混合した演算が可能である.

これらを混合することで高次元の代数 so(4) の構造が見えてきた.

Clifford 代数を用いたHopf fibration

$Cl_2 \simeq \mathbb{H}$ のノルム1の要素の集合は S^3 と見做せる.

この要素は,

Euler の四次元座標

$$
\begin{aligned}
Q &= \exp(-\psi \mathrm{k})\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi \mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi \mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right) \\
&= \sin\psi\cos\frac{\theta}{2} + \cos(\phi-\psi)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{i} + \sin(\phi-\psi)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{j} + \cos\psi\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k} \\
&\qquad 0 \le \psi \le 2\pi,\ 0 \le \phi \le 2\pi,\ 0 \le \theta \le \pi
\end{aligned}
$$

と書ける.

Clifford 代数を用いたHopf fibration

$Cl_2 \simeq \mathbb{H}$ のノルム1の要素の集合は S^3 と見做せる.

この要素は,

Euler の四次元座標

$$Q = \exp(-\psi \mathrm{k})\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi \mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi \mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right)$$

$$= \sin\psi\cos\frac{\theta}{2} + \cos(\phi-\psi)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{i} + \sin(\phi-\psi)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{j} + \cos\psi\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}$$

$$0 \le \psi \le 2\pi,\ 0 \le \phi \le 2\pi,\ 0 \le \theta \le \pi$$

と書ける.

$$\bar{Q}\mathrm{k}Q = -\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi \mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi \mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right)\mathrm{k}\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi \mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi \mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right)$$

$$= \sin\theta\cos\phi \mathrm{i} + \sin\theta\sin\phi \mathrm{j} + \cos\theta \mathrm{k} \longrightarrow$$ 三次元極座標

$$0 \le \phi \le 2\pi,\ 0 \le \theta \le \pi$$

を考えると, これの全体は S^2 と見做せる.

写像 $f(Q) = \bar{Q}\mathrm{k}Q$ は S^3 から S^2 への写像と見做せる.

さらに $\mathrm{Ker}(f) = S^1$ より, Hopf fibration と見做せる.

スピン群による Hopf fibration の解釈

$Cl_2 \simeq \mathbb{H}$ では 1~3次元のスピン群を考えることができる.

$$G = \mathrm{Spin}(3) = \left\{h \in \mathbb{H} \mid |h| = 1\right\} \simeq \mathrm{SU}(2) \simeq S^3$$
$$H = \mathrm{Spin}(2) = \{e^{\mathrm{k}t} \mid 0 \leq t < 2\pi\} \simeq \mathrm{U}(1) \simeq S^1$$
$$K = \mathrm{Spin}(1) = \{1, -1\} \simeq \mathrm{O}(1) \simeq \mathbb{Z}_2$$

G は e_1, e_2, e_1e_2 より生成, H は e_1e_2 より生成.

スピン群による Hopf fibration の解釈

$Cl_2 \simeq \mathbb{H}$ では 1~3次元のスピン群を考えることができる.

$$G = \mathrm{Spin}(3) = \left\{ h \in \mathbb{H} \,|\, |h| = 1 \right\} \simeq \mathrm{SU}(2) \simeq S^3$$

$$H = \mathrm{Spin}(2) = \{ e^{\mathrm{k}t} \,|\, 0 \leq t < 2\pi \} \simeq \mathrm{U}(1) \simeq S^1$$

$$K = \mathrm{Spin}(1) = \{1, -1\} \simeq \mathrm{O}(1) \simeq \mathbb{Z}_2$$

G は e_1, e_2, e_1e_2 より生成, H は e_1e_2 より生成.

ここで,

微分同相

$$G \geq H \geq K, G \triangleright K, H \triangleright K \Rightarrow G/K \simeq (G/H)/(K/H)$$

あることを用いると, （群同型定理に似ているが違う）

$$\mathrm{SU}(2)/U(1) \simeq (\mathrm{SU}(2)/\mathbb{Z}_2)/(\mathrm{U}(1)/\mathbb{Z}_2) \simeq \mathrm{SO}(3)/\mathrm{SO}(2)$$

したがって,

$$S^3/S^1 \simeq \mathrm{SU}(2)/\mathrm{U}(1) \simeq \mathrm{SO}(3)/\mathrm{SO}(2) \simeq S^2$$

1,2重ベクトルが
生成するスピン群
（高次元化）

2重ベクトルが
生成するスピン群

1,2重ベクトルに
よる回転表現
（高次元化）

2重ベクトルに
よる回転表現

まとめ

■ 水素原子は高度な準位縮退があり，背後に隠れた対称性がある.

■ 隠れた対称性は四次元回転対称性 SO(4) である.

■ 隠れた対称性を見出す手法として，
１）コンパクト化（立体射影），2）線形化（Hopf fibration）
を紹介したが，いずれも高次元を経由する手法である.

■ Clifford 代数は高次元を発想する機能を持つ.

■ 立体射影の方は Cl_3 の構造から説明できる.

■ Hopf fibrationの方は Cl_2 の構造から説明できる.