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

本講演のキーワード

<u>材料科学</u>における<u>幾何</u>と<u>代数</u>

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.

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

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

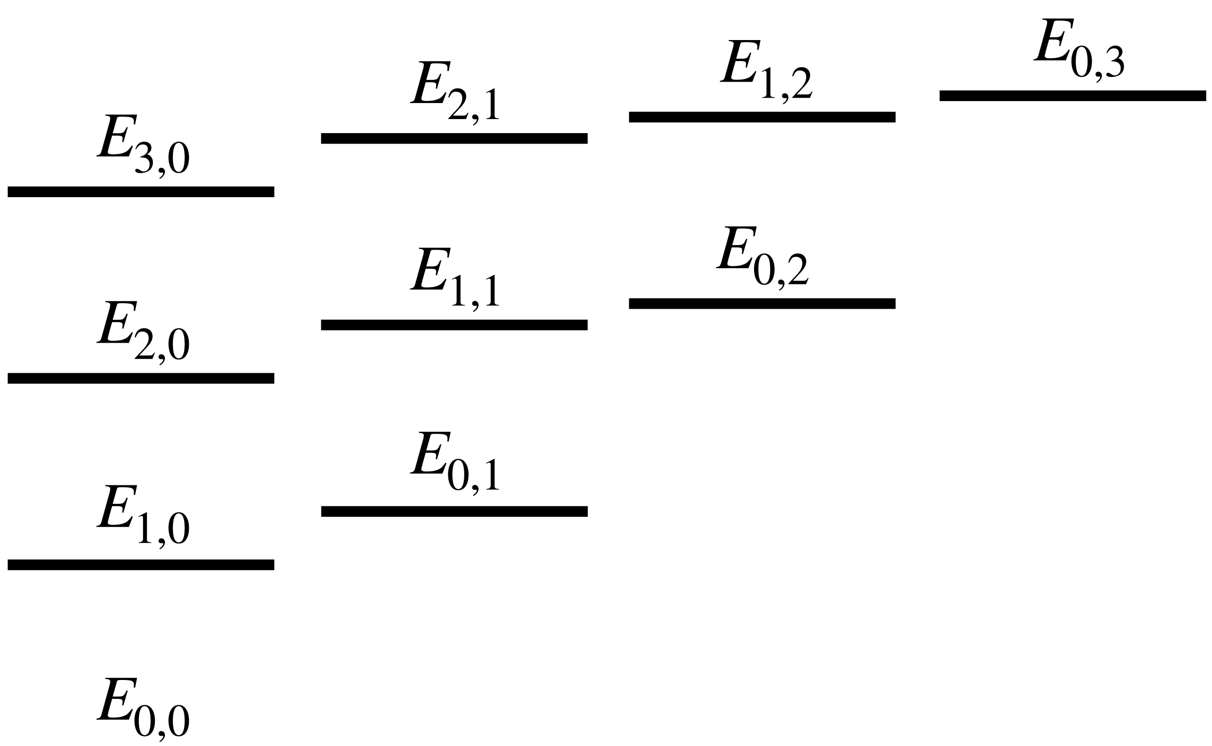
$$m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l$$

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

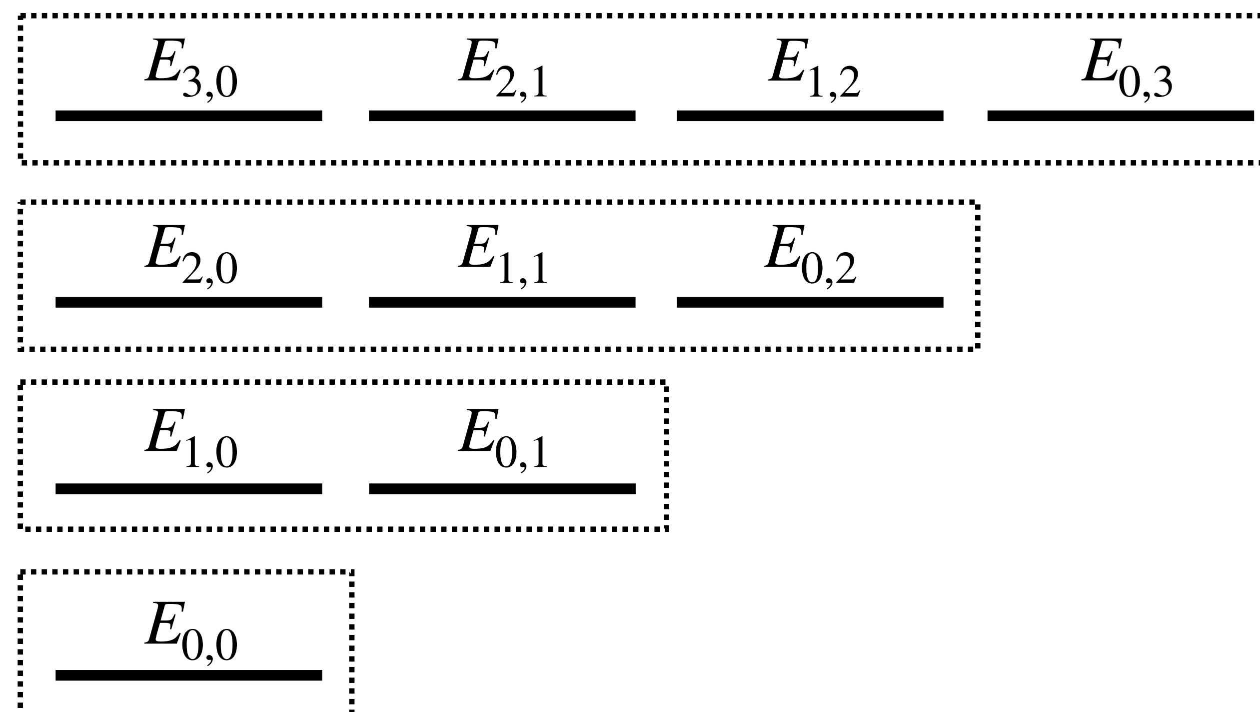
一般の球対称ポテンシャルの場合

$E_{n,l} = n,\ l$ 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

2	H																															He
8	Li	Be																									B	C	N	O	F	Ne
8	Na	Mg																									Al	Si	P	S	Cl	Ar
18	K	Ca															Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
18	Rb	Sr															Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
32	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
32	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

※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

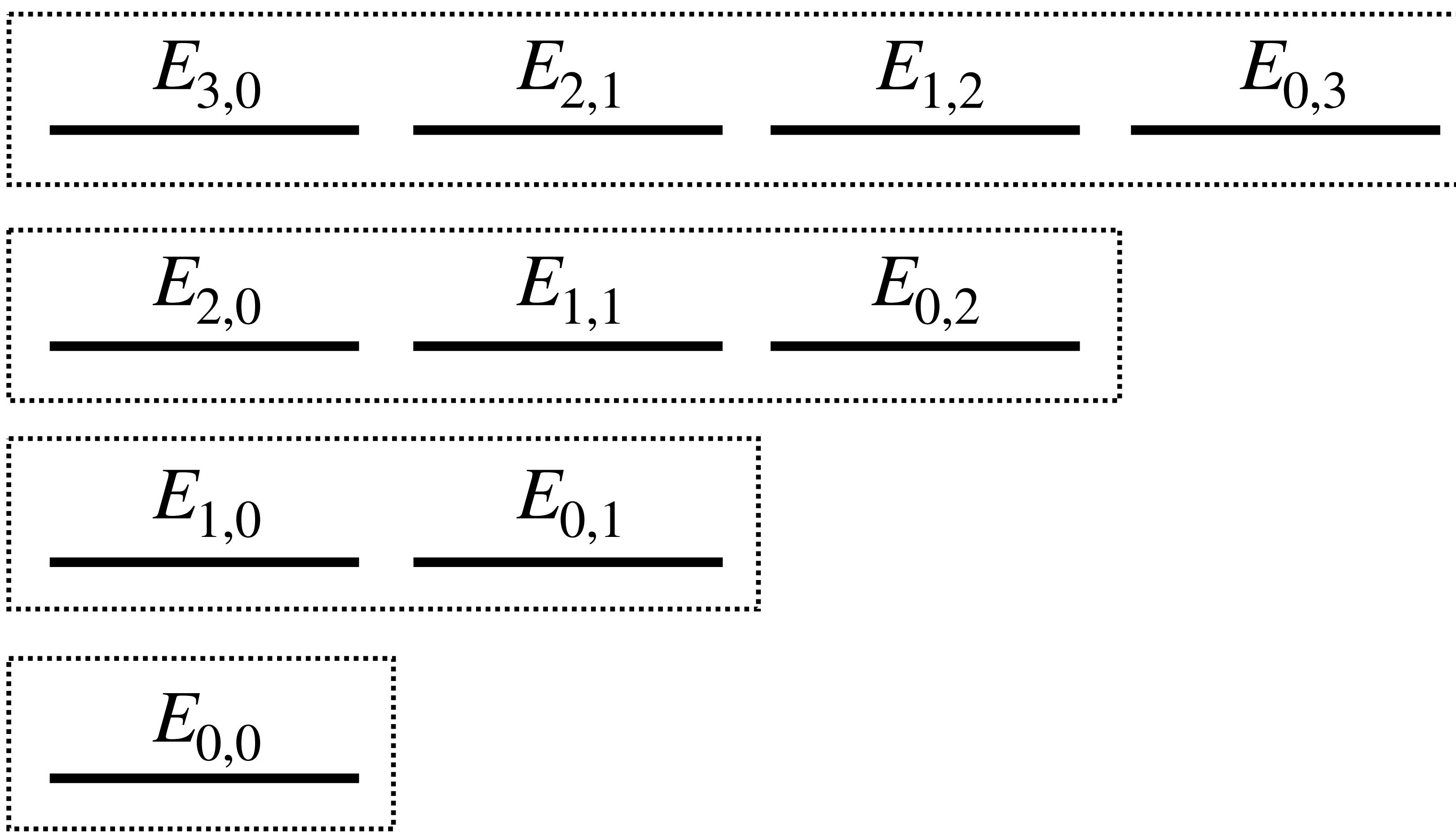
の順で大まかには収容されていく.

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

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

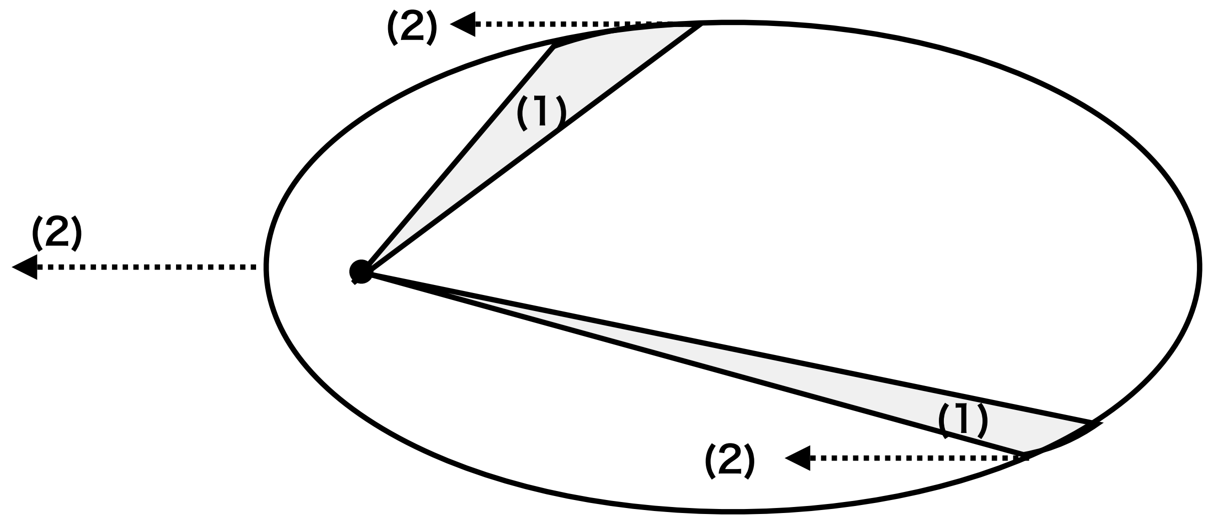
LRLベクトル保存則

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

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** $\mathrm{so}(4)$ 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

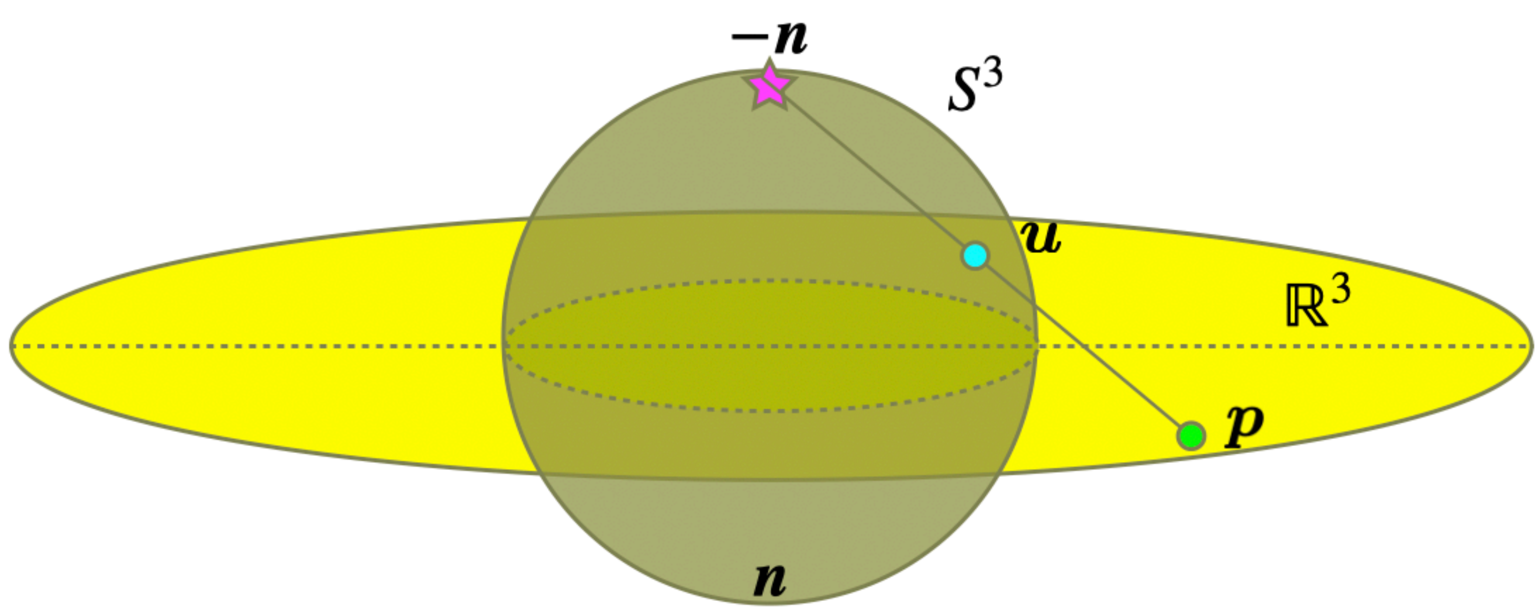
水素原子の Schrödinger 方程式を運動量空間で書くと積分方程式になる.

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

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

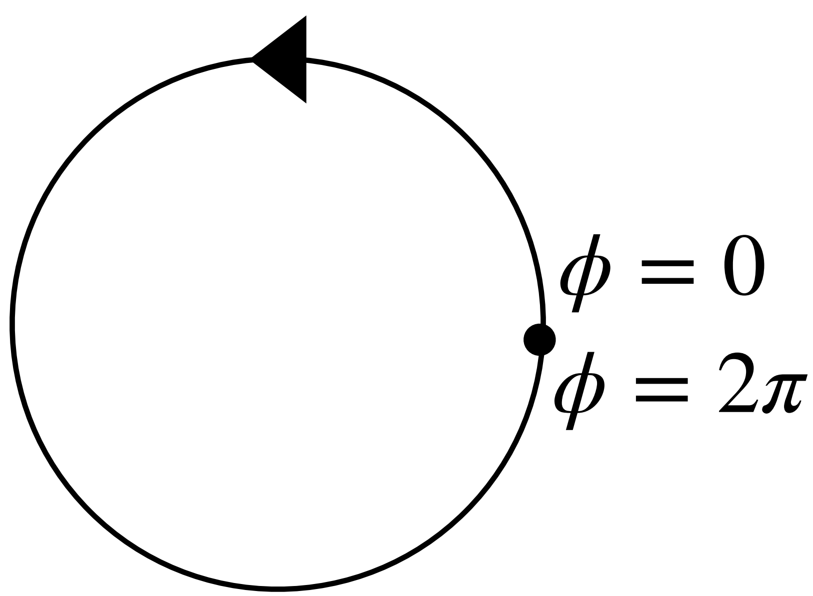
どんな変換か？

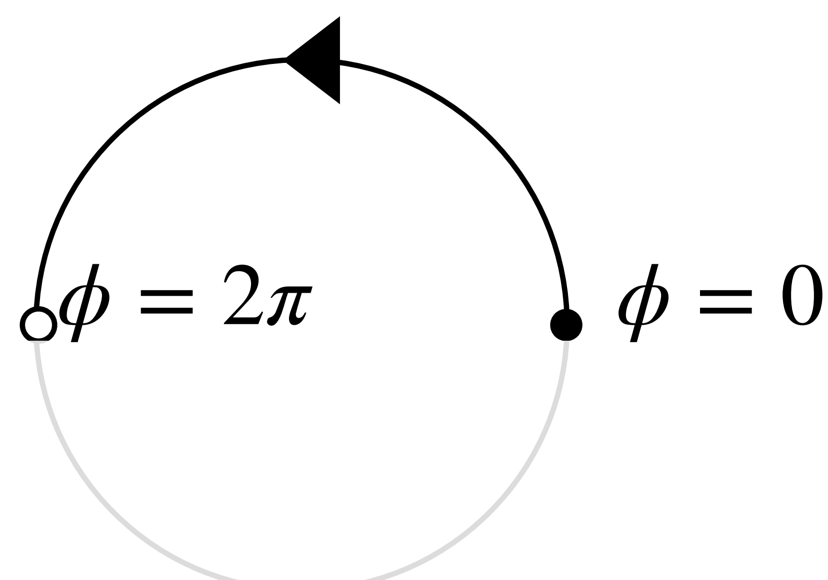
$r = 1,\ \theta = 0,\ \ \sigma = 0$ で固定して考える

$$x_1 = 0$$

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

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





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.

→ こういった状況を記述するのが**ファイバー束**

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

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

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

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 $\mathbb{R}^n$

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

（反対称テンソル代数）

$\downarrow$

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）

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

$$e_i e_j = -e_j e_i\ (i \neq j)$$ （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

$$e_i e_j = -e_j e_i \ (i \ne j)$$ （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 $\bigwedge(\mathbb{R}^n)$

（量子化）

$\{e_{i_1} e_{i_2} \cdots e_{i_k} \,|\, 0 \le k \le n,\ 1 \le i_1 \le i_2 \le \cdots \le i_k \le n\}$ 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）

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,

$$e_1^2 = -1 \text{（量子化の式）}$$

が成立する.

例えば，以下のようにとると矛盾がない.

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

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

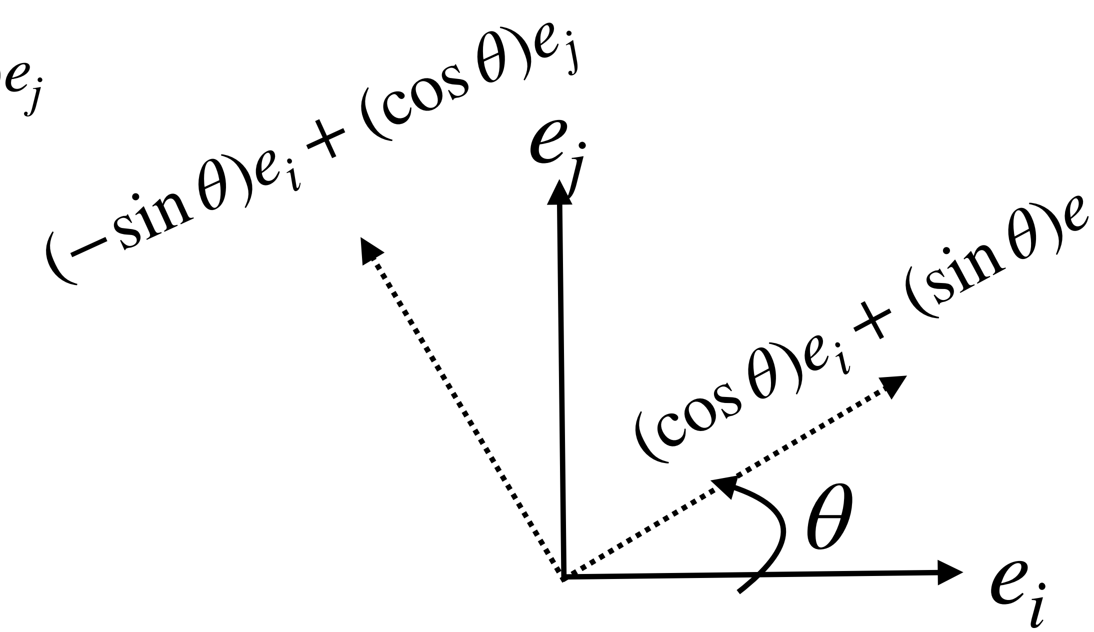
Clifford 代数	同型な代数
Cl_0	$\mathbb{R}$
Cl_1	$\mathbb{C}$
Cl_2	$\mathbb{H}$
Cl_3	$\mathbb{H} \oplus \mathbb{H}$
Cl_4	$\mathbb{H}(2)$
Cl_5	$\mathbb{C}(4)$
Cl_6	$\mathbb{R}(8)$
Cl_7	$\mathbb{R}(8) \oplus \mathbb{R}(8)$
Cl_8	$\mathbb{R}(16)$

代表的な応用：回転の表現

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

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

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



1重ベクトル e_i は n 次元ベクトル

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

$\exp(e_ie_j/2)$ 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）

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

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

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

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

と書ける.

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.

$$\bar{Q}\mathrm{k}Q = -\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi \mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi \mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right)\mathrm{k}\left(\sin\frac{\theta}{2}\cos\phi \mathrm{i} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\phi \mathrm{j} + \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{k}\right)$$
$$= \sin\theta\cos\phi \mathrm{i} + \sin\theta\sin\phi \mathrm{j} + \cos\theta \mathrm{k} \longrightarrow \text{三次元極座標}$$
$$0 \le \phi \le 2\pi,\ 0 \le \theta \le \pi$$

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.

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

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

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

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

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,

$$G \geq H \geq K, G \triangleright K, H \triangleright K \Rightarrow G/K \overset{\text{微分同相}}{\simeq} (G/H)/(K/H)$$

で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.