

4 元数とパウリ行列

秋田工業高等専門学校 吉井洋二

普通、以下の 3 つの行列

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

をパウリ行列という。これらの行列の数学的位置付けを与える。この考察は、線形代数習得後のよき教材になる（トポロジーの教材にもよい）と思われる。

数の世界では、方程式

$$x^2 = -1 \quad (1)$$

の解は $x = \pm i$ である。

では、 $M_2(\mathbb{R})$ の世界で (1) を解くとどうなるか？

（もちろん、1 は単位行列 I と思おう。）

解は無数にある !!

たとえば、

$$\tau = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$$

は (1) の解である。（勝手な正則行列 P に対して、 $x = P^{-1}\tau P$ も (1) の解である。）

代数的に

$$\{a + b\tau \mid a, b \in \mathbb{R}\}$$

は複素数体 $\mathbb{C} = \{a + bi \mid a, b \in \mathbb{R}\}$ と同一視できる。

何故通常の教科書では、

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

を (1) の解に選ぶのだろうか？

最初から 90 度回転を見据えて τ_1 を選んだと考えてもよいが、単に直交変換（長さを変えない変換）という仮定だけで (1) を解いても、 $x = \pm\tau_1$ を得

るのである。実際、直交変換は

$$A := \left\{ \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \mid \theta \in \mathbb{R} \right\} \quad \text{or} \quad B := \left\{ \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \mid \theta \in \mathbb{R} \right\}$$

とかける。 B の元 (鏡像行列) は 2 乗すると I になるので (1) を満たさない。 A は回転行列だから、2 乗して $-I$ (180 度回転) になるのは、90 度回転 $\pm \tau_1$ だけである。

では直交変換で

$$x^2 = 1 \quad (2)$$

の解はどうだろう？

再び上記直交行列の表現から、 B の元全部と $\pm I$ であることがわかる。この場合は、直交変換という制限下でも解が無数にあるのである。

ここで、 A と B がどんな集合かを考えたい。

まず 4 次元空間 $M_2(\mathbb{R})$ に距離を入れる： $\sigma, \tau \in M_2(\mathbb{C})$ に対して

$$(\sigma, \tau) := \frac{1}{2} \text{tr}(\sigma^* \tau) \quad (3)$$

と定義すると ($*$ は転置共役) これは内積となり、これを $M_2(\mathbb{R})$ に制限しても内積となる。この内積から自然に距離を入れると、直交行列は長さ 1 となる。

さて、

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

であり、

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\}$$

は 1 次独立なので、 A は平面

$$\left\langle \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle$$

上の単位円、 B は平面

$$\left\langle \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle$$

上の単位円と考えてよい。

さらに興味深いのは、これら二つの円の位置ベクトルが常に直交している (内積が 0) ということである (4 次元ならではの現象)。

(注1) A も B も連結で、直交行列全体の連結成分は2つである。

(注2) パウリ行列 σ_1 と σ_2 は B の元である。

同様の考察を $M_2(\mathbb{C})$ の世界 (8次元!) で行くとどうなるだろう?

$\mathbb{R}$ を $\mathbb{C}$ に代えることで、見えない部分がはっきりし、よりすっきりする、あるいはより興味深い対象が見つかる、といった数学的現象はよく起きる。これもその例と言ってよいだろう。

まず計量空間 $\mathbb{C}^2$ での長さを変えない線形変換はユニタリー変換であるが、 $M_2(\mathbb{C})$ に上記内積 (3) を入れると、ユニタリー行列も長さ1となる。

前述の、2次直交行列全体を O_2 、2次ユニタリー行列全体を U_2 で表せば、 $O_2 \subset U_2$ であり、 O_2 は連結成分2の1次元多様体 (直交する2つの円) である。一方、 U_2 は連結な4次元多様体である。(O_2 も U_2 もリー群である。)

さて、 U_2 の元で (1) を満たすものは、

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \tau_3 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$

で生成される3次元空間 (虚空間と呼ぼう) の中の単位球、または $\pm iI$ であることが示される。

また、 U_2 の元で (2) を満たすものは、パウリ行列 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ で生成される3次元空間 (パウリ空間と呼ぼう) の中の単位球、または $\pm I$ であることが示される。特に、3つのパウリ行列はこの単位球上の点であり、パウリ空間の正規直交基底になっている。(パウリ空間の任意の正規直交基底をパウリ行列と呼ぶ立場もある。実際、正規直交基底であれば、パウリ行列が持つ、反交換関係等の基本関係式を満たすことが証明できる。)

最後に $M_2(\mathbb{C})$ をよく知られた二つの4次元空間に分解する。これは、虚空間の仲間であった iI とパウリ空間の仲間であった I を入れ換えることで実現できる。

具体的に述べると、まず、

$$\mathbb{H} := \mathbb{R}I + \mathbb{R}\tau_1 + \mathbb{R}\tau_2 + \mathbb{R}\tau_3$$

が積について閉じることが入れ換えの主な理由である。そしてこの $\mathbb{H}$ は有名な (ハミルトンの) 4元数体と同一視できる。

次に、

$$\mathbb{H}' := \mathbb{R}iI + \mathbb{R}\sigma_1 + \mathbb{R}\sigma_2 + \mathbb{R}\sigma_3$$

とおけば、まず、 $\mathbb{H}' = i\mathbb{H}$ となることがわかる。ところが、 $\mathbb{H}'$ はすぐにわかるように、積について閉じていない。そこで、 $x, y \in \mathbb{H}'$ に対して、新しい積・を

$$x \cdot y := ixy$$

で定義すると (i -isotope 積) この積に関して、 $\mathbb{H}'$ は 4 元数体と同型になることが証明できる。従って、 $M_2(\mathbb{C})$ は二つの 4 元数体の直和 (ベクトル空間としての直和) で書けているのである：

$$M_2(\mathbb{C}) = \mathbb{H} \oplus \mathbb{H}'$$

(もちろん、 $\{I, iI, \tau_1, \tau_2, \tau_3, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ が 1 次独立であるという事実も使っている。)

(注 3) 有名なリー群 $SU_2 = \{\tau \in U_2 \mid \det \tau = 1\}$ (special unitary group) は、この $\mathbb{H}$ の中の 3 次元単位超球 $S^3 \approx \{x \in \mathbb{H} \mid |x| = 1\}$ のことである。

(注 4) パウリ行列 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ で生成される U_2 の部分群

$$P = \langle \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \rangle = \{\pm I, \pm iI, \pm \tau_1, \pm \tau_2, \pm \tau_3, \pm \sigma_1, \pm \sigma_2, \pm \sigma_3\}$$

(位数 16) をパウリ群といい、初等群論的にも幾何学的にも非常に興味深い。(たとえば、 P は $\mathbb{Z}_8$ 以外のすべての位数 8 の群を正規部分群として含む。)

(注 5) 興味深いオブジェクトの包含関係等を書いておく。

$$M_2(\mathbb{C}) \supset S^7 \supset (S^7 \cap U_2) \supset (SU_2 \cup iSU_2) \supset P \supset D_8, Q_8, \mathbb{Z}_2^3, \mathbb{Z}_4 \times \mathbb{Z}_2$$

$$\mathbb{H} \supset SU_2 \approx S^3 \approx iSU_2 \subset \mathbb{H}', \quad P \cap \mathbb{H} = Q_8, \quad P = Q_8 \cup iQ_8$$

$$U_2 \approx S^3 \times S^1 \quad (4 \text{ 次元多様体 } U_2 \text{ に穴あり!})$$

但し、 S^n は n 次元単位 (超) 球、 D_8 は 4 次の二面体群、 Q_8 は 4 元数群であり、ここでは $Q_8 = \langle \tau_1, \tau_2 \rangle = \{\pm I, \pm \tau_1, \pm \tau_2, \pm \tau_3\}$ のことである。

参考文献

1. T. F. Jordan: Quantum mechanics in simple matrix form, Dover Publ., Inc., 1985
2. 吉井洋二, 上林一彦: パウリ行列と 4 元数, 投稿予定