

数学・物理通信

4卷4号 2014年6月

編集 新関章三・矢野 忠

2014年6月23日

目次

分数式の対称和に対する不等式	3
1.1 はじめに	3
1.2 3変数不等式の証明	4
1.3 n 変数の場合への拡張	4
1.4 不等式 (1.3.1) の特殊性	5
Bessel 関数, Neumann 関数 および Struve 関数	7
2.1 はじめに	7
2.2 Bessel 関数と Neumann 関数	7
2.2.1 Neumann 関数について	7
2.2.2 ガンマ関数とディ・ガンマ関数	8
2.2.3 整数次の Neumann 関数の導出	9
2.3 Bessel 関数の直交性と完全性	10
2.3.1 第1種 Bessel 関数の場合	10
2.3.2 Neumann 関数の場合	12
2.4 Neumann 関数と Struve 関数	13
2.5 おわりに	16
空間回転と SU(2)	18
3.1 はじめに	18
3.2 SU(2) の表現	19
3.3 SO(3) との同等性	21
3.4 おわりに	24
3.5 付録 3	24
3.5.1 付録 3.1 Pauli 行列の求め方	24
3.5.2 付録 3.2 (3.2.3) の行列の由来	24
3.5.3 付録 3.3 2行2列のユニタリ行列	25
3.5.4 付録 3.4 i, j, k と $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ の対応	26
3.5.5 付録 3.5 トレースとエルミート	27
編集後記	29

Contents

1. Noboru Nakanshi: An Inequality between Symmetric Sums of
Fractional Expressions
2. Kenji SETO: Bessel Function, Neumann Function and Struve Function
3. Tadashi YANO: Rotatinos and $SU(2)$
4. Tadashi YANO: Editorial Comments

分数式の対称和に対する不等式

An Inequality between Symmetric Sums of Fractional Expressions

中西 襄¹

Noboru NAKANSHI²

1.1 はじめに

もう3年くらい前のことになるか、京大の入学試験で、受験生が出題された数学の問題の解答を受験中にインターネットを使って教えてもらったという事件があった。これは不特定の善意の第三者が不正行為に加担させられたという、これまでになかった珍しいカンニングであるので、マスコミでも話題となった。これに利用されたのが「YAHOO!JAPAN 知恵袋」というサイトで、いろんな話題について誰でも勝手に質問し、興味を持った人はそれに回答するというシステムである。「数学」というカテゴリーを見ると、大半の質問はくだらないもので、学校の宿題の無料解答サービスとして利用している不埒者も多いようだ。しかしごくまれに面白い質問がなされることもある。先日たまたま、次のような問題の質問を見つけた。

a, b, c を正数, $s = a + b + c$ とするとき,

$$\frac{s-a}{a} + \frac{s-b}{b} + \frac{s-c}{c} \geq 4 \left[\frac{a}{s-a} + \frac{b}{s-b} + \frac{c}{s-c} \right]. \quad (1.1.1)$$

右辺に因子4がかかっていることに注意！ この因子は $a = b = c$ のとき等号が成立するために必要である。回答はなされなかったようなので、証明を考えてみた。

絶対不等式はコーシー（・シュヴァルツ）の不等式、ヘルダーの不等式、ミンコフスキーの不等式などが有名である。これらの不等式はいずれも、変数がすべて相等しいときに等号が成立し、そうでないときは同一変数の高い冪乗を含む側が大きいというタイプの不等式である。したがって、これらの不等式から(1.1.1)が導かれるという事はあり得ないだろう。また、平均値に関する不等式では、各変数の関数値の相加平均と、全変数の相加平均の同じ関数の値とを比較するというタイプで、使われる関数は1変数関数である。しかし、(1.1.1)の各項は多変数関数であるから、そのタイプには還元できない³。

証明は最初、対称性を尊重するようにやろうとしたが、どうしてもうまくいかない。等号は $a = b = c$ のときに成立するが、このとき両辺はとも最小になっている。しかし、両辺の差がその点で最小になっていなければならないという明白な理由はないわけだ。次節で証明を与えるが、3変数の対称性は破った形で行う。

¹ 京都大学名誉教授

² nbr-nak@trio.plala.or.jp

³ $a/s = a'$ などとおけば1変数関数にできるが、そうすると付加条件 $a' + b' + c' = 1$ がついてしまう。

1.2 3変数不等式の証明

(1.1) の証明は,

$$F(a, b, c) \equiv \frac{s-a}{a} + \frac{s-b}{b} + \frac{s-c}{c} - 4 \left[\frac{a}{s-a} + \frac{b}{s-b} + \frac{c}{s-c} \right] \geq 0 \quad (1.2.1)$$

をいえばよい.

第1段: c を固定して $a = \frac{s-c}{2} + x$, $b = \frac{s-c}{2} - x$ を代入し, $x=0$ が最小値を与えることを示す.

$$\begin{aligned} F(a, b, c) &= \frac{\frac{1}{2}(s+c) - x}{\frac{1}{2}(s-c) + x} + \frac{\frac{1}{2}(s+c) + x}{\frac{1}{2}(s-c) - x} + \frac{s-c}{c} - 4 \left[\frac{\frac{1}{2}(s-c) + x}{\frac{1}{2}(s+c) - x} + \frac{\frac{1}{2}(s-c) - x}{\frac{1}{2}(s+c) + x} + \frac{c}{s-c} \right] \\ &= \frac{\frac{1}{2}(s^2 - c^2) + 2x^2}{\frac{1}{4}(s-c)^2 - x^2} - 4 \cdot \frac{\frac{1}{2}(s^2 - c^2) + 2x^2}{\frac{1}{4}(s+c)^2 - x^2} + \frac{s-c}{c} - 4 \cdot \frac{c}{s-c} \\ &= \frac{[\frac{1}{2}(s^2 - c^2) + 2x^2][\frac{1}{4}(s+c)^2 - (s-c)^2 + 3x^2]}{[\frac{1}{4}(s-c)^2 - x^2][\frac{1}{4}(s+c)^2 - x^2]} + \frac{s-c}{c} - 4 \cdot \frac{c}{s-c}. \end{aligned} \quad (1.2.2)$$

この第1項の分数式は, 分子の因子では x^2 の係数は正, 分母の因子では x^2 の係数は負だから, x^2 の単調増加関数である. したがって, $x=0$ の場合に最小になる. 残りの項は定数だから, $F(a, b, c)$ は c を固定したとき, $a=b$ で最小になる.

第2段: $a=b$ のもとで, c に関する最小値が $c=a$ で与えられることを示す.

$b=a$, $c=x$ とおくと, $F(a, a, x) \equiv f(x)$ は

$$f(x) = 2 \cdot \frac{x+a}{a} + \frac{2a}{x} - 4 \left[2 \cdot \frac{a}{x+a} + \frac{x}{2a} \right] = \frac{2a}{x} - \frac{8a}{x+a} + 2 \quad (1.2.3)$$

となる. したがって,

$$f'(x) = -\frac{2a}{x^2} + \frac{8a}{(x+a)^2} = \frac{2a(3x+a)(x-a)}{x^2(x+a)^2}. \quad (1.2.4)$$

つまり, $0 < x < a$ で単調減少, $x > a$ で単調増大である. ゆえに, $x=a$ で最小となる.

以上により $a=b=c=s/3$ のとき $F(a, b, c)$ は最小になる. 他方, $F(s/3, s/3, s/3) = 0$ であるから, $F(a, b, c) \geq 0$ を得る. \square

1.3 n 変数の場合への拡張

(1.2.1) の $\{a, b, c\}$ を $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ に拡張すると次のようになる.

$n \geq 3$, $a_k > 0$ ($k=1, 2, \dots, n$), $\sum_{k=1}^n a_k = s$ のとき, 次の不等式が成立する.

$$\sum_{k=1}^n \frac{s-a_k}{a_k} \geq (n-1)^2 \sum_{k=1}^n \frac{a_k}{s-a_k}, \quad (1.3.1)$$

すなわち

$$F(a_1, \dots, a_n) \equiv \sum_{k=1}^n \frac{s-a_k}{a_k} - (n-1)^2 \sum_{k=1}^n \frac{a_k}{s-a_k} \geq 0. \quad (1.3.2)$$

証明は本質的に $n=3$ の場合の第1段の議論を繰り返していけばいいが, 論理としては帰謬法を使うのがスマートである.

[証明] $F(a_1, \dots, a_n)$ の最小は対称中心点 $a_1 = \dots = a_n$ において実現されることを帰謬法によって証明する. すなわち, もしある i, j があって, $a_i \neq a_j$ であるような点で最小が実現されたとするならば, 矛盾が生ずることを示す. この2つ以外の変数はすべて固定し, $a_i = a = \frac{1}{2}(s-c) + x$, $a_j = b = \frac{1}{2}(s-c) - x$, $\sum_{k \neq i, j} a_k = c$ とすると,

$$\begin{aligned}
F(a_1, \dots, a_n) &= \frac{s-a}{a} + \frac{s-b}{b} + \sum_{k \neq i, j} \frac{s-a_k}{a_k} - (n-1)^2 \left[\frac{a}{s-a} + \frac{b}{s-b} + \sum_{k \neq i, j} \frac{a_k}{s-a_k} \right] \\
&= \frac{\frac{1}{2}(s+c) - x}{\frac{1}{2}(s-c) + x} + \frac{\frac{1}{2}(s+c) + x}{\frac{1}{2}(s-c) - x} + \sum_{k \neq i, j} \frac{s-a_k}{a_k} \\
&\quad - (n-1)^2 \left[\frac{\frac{1}{2}(s-c) + x}{\frac{1}{2}(s+c) - x} + \frac{\frac{1}{2}(s-c) - x}{\frac{1}{2}(s+c) + x} + \sum_{k \neq i, j} \frac{a_k}{s-a_k} \right] \\
&= \frac{\frac{1}{2}(s^2 - c^2) + 2x^2}{\frac{1}{4}(s-c)^2 - x^2} - (n-1)^2 \cdot \frac{\frac{1}{2}(s^2 - c^2) + 2x^2}{\frac{1}{4}(s+c)^2 - x^2} + C \\
&= \frac{[\frac{1}{2}(s^2 - c^2) + 2x^2][\frac{1}{4}(s+c)^2 - \frac{1}{4}(n-1)^2(s-c)^2 + n(n-2)x^2]}{[\frac{1}{4}(s-c)^2 - x^2][\frac{1}{4}(s+c)^2 - x^2]} + C,
\end{aligned} \tag{1.3.3}$$

ただし

$$C \equiv \sum_{k \neq i, j} \frac{s-a_k}{a_k} - (n-1)^2 \sum_{k \neq i, j} \frac{a_k}{s-a_k} \tag{1.3.4}$$

は x に無関係である. 前節と同様にして, (1.3.3) の分数式は x^2 について単調増加関数であることが分かる. したがって, $x=0$ の場合に最小になる. つまり, $x=0$ のときの値は $x \neq 0$ のときの値より小さい. これは $a_i \neq a_j$ のときに最小が実現したという仮定と矛盾する. したがって, 最小点では a_k はすべて相等しくなければならない.

ゆえに $F(a_1, \dots, a_n) \geq F(s/n, \dots, s/n) = 0$ を得る. \square

1.4 不等式 (1.3.1) の特殊性

(1.3.1) は, $\phi(x) = \frac{s-x}{(n-1)x}$ とおけば, $a_k > 0$, $\sum_{k=1}^n a_k = s$ のとき,

$$\sum_{k=1}^n \phi(a_k) \geq \sum_{k=1}^n \frac{1}{\phi(a_k)} \tag{1.4.1}$$

と書ける. ここに $\phi(x)$ は,

$$\phi(s/n) = 0, \quad \phi(0) = \infty, \tag{1.4.2}$$

$$\phi(x) > 0, \quad \phi'(x) < 0, \quad \phi''(x) > 0 \quad \text{for } 0 < x < s \tag{1.4.3}$$

のような性質を持つ. しかしこのような性質をもつ関数に対して, この不等式は一般に成立するとはいえない.

実際 $\phi(x) = \left(\frac{s-x}{(n-1)x}\right)^2$ で $n=3$, $a > 0$, $b > 0$, $c > 0$, $a+b+c=s$ の場合,

$$\left(\frac{s-a}{a}\right)^2 + \left(\frac{s-b}{b}\right)^2 + \left(\frac{s-c}{c}\right)^2 \geq 16 \left[\left(\frac{a}{s-a}\right)^2 + \left(\frac{b}{s-b}\right)^2 + \left(\frac{c}{s-c}\right)^2 \right] \tag{1.4.4}$$

は不成立であることが分かる.

[反例] $a=b=1$, $c=2$ とすると, 左辺 $= 9+9+1=19$, 右辺 $= 16(\frac{1}{9} + \frac{1}{9} + 1) = 19\frac{5}{9}$ である.

このように, 1次分数関数の特殊性に強く依存した不等式であることが分かる.

不等式 (1.2.1) を基本対称式 $s_1 \equiv a+b+c$, $s_2 \equiv ab+bc+ca$, $s_3 \equiv abc$ を用いて書き直すと, $a > 0, b > 0, c > 0$ のとき,

$$s_1^2 s_2^2 - 4s_1^3 s_3 + 4s_1 s_2 s_3 - 9s_3^2 \geq 0 \quad (1.4.5)$$

という 6 次の不等式が得られる. もちろんこれは絶対不等式ではない. 実際, たとえば $a = b = -1, c = 2$ ならば不成立である. したがって, この不等式は, 2 次の絶対不等式 $s_1^2 - 3s_2 \geq 0$, および 4 次の絶対不等式 $s_2^2 - 3s_1 s_3 \geq 0$ からは導けない独立な不等式である.

このように, 全変数を正に限定すると, 基本対称式の間には通常知られている以外の不等式 (対称中心点でのみ等号が成立するようなもの) が成立することがわかる. このような不等式の, n 変数の場合の一般論は研究されているのだろうか.

Bessel 関数, Neumann 関数 および Struve 関数

Bessel Function, Neumann Function and Struve Function

世戸 憲治⁴
Kenji SETO⁵

2.1 はじめに

Bessel の微分方程式は線形 2 階の常微分方程式なので 2 個の独立解が存在する。その一つは狭義の Bessel 関数でもう一つは Neumann 関数である。これら 2 個の関数を合わせて広義の Bessel 関数とも呼ばれる。狭義の Bessel 関数の方は物理学の種々の分野で広く使われる馴染みのものである。ところが、一方の Neumann 関数の方は、変数がゼロのところで発散する関数のため数学的には存在価値があるのかもしれないが、物理学ではほとんどお目にかかることはなく、いわば忘れられた関数といってもよいほどである。今回もほとんど新しいことはないのであるが、この忘れられた Neumann 関数に焦点をあて解説するものである。次節では Neumann 関数の導出方法、3 節で Bessel 関数の直交性は出せるが、Neumann 関数ではうまくいかないことを述べる。4 節では、Neumann 関数と Struve 関数を組み合わせるとうまく直交性の式を導くことができることを示す。

2.2 Bessel 関数と Neumann 関数

2.2.1 Neumann 関数について

Bessel の微分方程式

$$\frac{d^2U}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dU}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right)U = 0 \quad (2.2.1)$$

の解は良く知られている第 1 種 Bessel 関数

$$J_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(\nu + k + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k} \quad (2.2.2)$$

と ν の符号を替えた $J_{-\nu}(z)$ の 2 個がある。 ν が非整数の場合は、これら 2 つの解 $J_\nu(z)$, $J_{-\nu}(z)$ は独立な解となるが、 ν が整数の場合はそう簡単にことは運ばない。 $\nu = 0$ の場合は $J_\nu(z)$ と $J_{-\nu}(z)$ は同じものになってしまうし、 n を非負整数として $\nu = -n$ の場合は

$$J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z) \quad (2.2.3)$$

⁴ 北海学園大学名誉教授

⁵ seto@pony.ocn.ne.jp

と、これら2つの解は従属なものになってしまう。そこで、第2種 Bessel 関数をつぎのように

$$N_\nu(z) = \frac{\cos(\nu\pi)J_\nu(z) - J_{-\nu}(z)}{\sin(\nu\pi)} \quad (2.2.4)$$

と定義する。この関数は Neumann 関数とも呼ばれる。この関数で $\nu = n$ のときは $0/0$ の不定形になってしまうので、この式で $\nu \rightarrow n$ の極限をとることで整数 n に対する第2種 Bessel 関数を定義する。その形は

$$N_n(z) = \frac{2}{\pi} J_n(z) \left(\gamma + \log \frac{z}{2} \right) - \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \left(\frac{z}{2} \right)^{n+2k} \left(\sum_{r=1}^k \frac{1}{r} + \sum_{r=1}^{n+k} \frac{1}{r} \right) - \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n-k-1)!}{k!} \left(\frac{z}{2} \right)^{-n+2k} \quad (2.2.5)$$

と非常に複雑な形のものになる。ここで、 γ は Euler 定数で

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \cdots + \frac{1}{n} - \log n \right) = 0.57721 \cdots \quad (2.2.6)$$

と定義される。また、この式に含まれる和 $\sum_{r=1}^k$, $\sum_{r=1}^{n+k}$, $\sum_{k=0}^{n-1}$ の上限が下限より小さいときは、これらの和はゼロと見做す。この式を初めて見たときは極限をとるだけで、どうしてこんな煩雑なものになるのか不思議であった。以下では、この式がでてくる所以を必要最小限の形でまとめておく。

2.2.2 ガンマ関数とディ・ガンマ関数

まず、ガンマ関数の定義

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt \quad (2.2.7)$$

から始める。この定義で $\lim_{n \rightarrow \infty} (1 - \frac{t}{n})^{n-1} = e^{-t}$ を利用して、

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^n \left(1 - \frac{t}{n} \right)^{n-1} t^{z-1} dt \quad (2.2.8)$$

と書き直す。ここで、 $t/n = s$ と変数変換すると

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} n^z \int_0^1 (1-s)^{n-1} s^{z-1} ds \quad (2.2.9)$$

となり、この積分はベータ関数なので、

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} n^z B(n, z) \quad (2.2.10)$$

となる。ここで、ベータ関数をガンマ関数で表す公式を用いると

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^z \Gamma(n) \Gamma(z)}{\Gamma(n+z)} \quad (2.2.11)$$

となり、さらに、ガンマ関数の公式 $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ を繰り返し使うと、

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^z (n-1)!}{(n-1+z)(n-2+z) \cdots (z)} \quad (2.2.12)$$

とガンマ関数を無限乗積で表すことができる。この式の対数をとると

$$\log \Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(z \log n + \log(n-1)! - \sum_{r=0}^{n-1} \log(r+z) \right) \quad (2.2.13)$$

となる。さらに、この式を z で微分したものをディ・ガンマ関数 $\psi(z)$ と言い、それは、

$$\psi(z) \equiv \frac{d}{dz} \log \Gamma(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{d\Gamma(z)}{dz} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\log n - \sum_{r=0}^{n-1} \frac{1}{r+z} \right) \quad (2.2.14)$$

と表される. ここで, $z = 1$ とすると Euler 定数 γ の定義 (2.2.6) 式から

$$\psi(1) = -\gamma \quad (2.2.15)$$

となる. また, k を 1 以上の整数として, $\psi(k+1)$ を考えると,

$$\psi(k+1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\log n - \sum_{r=0}^{n-1} \frac{1}{r+k+1} \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\log n - \sum_{r=1}^n \frac{1}{r} + \sum_{r=1}^k \frac{1}{r} - \sum_{r=1}^k \frac{1}{n+r} \right) \quad (2.2.16)$$

となるが, この最右辺の括弧中, 1,2 項目が符号を替えた Euler 定数 $-\gamma$ となり, 4 項目はゼロと見なされるので,

$$\psi(k+1) = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \cdots + \frac{1}{k} - \gamma \quad (2.2.17)$$

という式を得る. あるいは, k を非負整数として

$$\psi(k+1) = \left(\sum_{r=1}^k \frac{1}{r} \right) - \gamma \quad (2.2.18)$$

と書き表わす. ただし, $k=0$ のときこの和はゼロとするものとする. 以後, この書き方に倣う.

つぎに, ガンマ関数, デイ・ガンマ関数は共に, k を非負整数として $z = -k$ で 1 位の極を持つが, この点での留数を求めておく. まず簡単なデイ・ガンマ関数 $\psi(z)$ の方から, (2.2.14) 式から明らかのように

$$\lim_{z \rightarrow -k} (z+k)\psi(z) = -1 \quad (2.2.19)$$

となる. また, ガンマ関数の方は, 先に用いた公式 $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ を繰り返し使うと,

$$\Gamma(z) = \frac{\Gamma(z+k+1)}{z(z+1)(z+2)\cdots(z+k)} \quad (2.2.20)$$

となるので, $\Gamma(1) = 1$ を使うと,

$$\lim_{z \rightarrow -k} (z+k)\Gamma(z) = \frac{1}{-k(-k+1)(-k+2)\cdots(-1)} = \frac{(-1)^k}{k!} \quad (2.2.21)$$

となる.

2.2.3 整数次の Neumann 関数の導出

以上で準備が終わったので, ここから整数次 n の Neumann 関数 $N_n(z)$ を求めていく. (2.2.4) 式で $\nu \rightarrow n$ の極限をとると

$$N_n(z) = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\partial J_\nu(z)}{\partial \nu} - (-1)^n \frac{\partial J_{-\nu}(z)}{\partial \nu} \right]_{\nu=n} = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\partial J_\nu(z)}{\partial \nu} \right]_{\nu=n} + \frac{(-1)^n}{\pi} \left[\frac{\partial J_\nu(z)}{\partial \nu} \right]_{\nu=-n} \quad (2.2.22)$$

となるので, ここで, $\partial J_\nu(z)/\partial \nu$ を求めておく. (2.2.2) 式を微分して, (2.2.14) 式のデイ・ガンマ関数を用いると

$$\frac{\partial J_\nu(z)}{\partial \nu} = J_\nu(z) \log \frac{z}{2} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \psi(\nu+k+1)}{k! \Gamma(\nu+k+1)} \left(\frac{z}{2} \right)^{\nu+2k} \quad (2.2.23)$$

と書ける. ここで $\nu = n$ とし, (2.2.18) 式を用いると

$$\left[\frac{\partial J_\nu(z)}{\partial \nu} \right]_{\nu=n} = J_n(z) \left(\gamma + \log \frac{z}{2} \right) - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \left(\frac{z}{2} \right)^{n+2k} \left(\sum_{r=1}^{n+k} \frac{1}{r} \right) \quad (2.2.24)$$

となる. もう一つの $\nu = -n$ とした方は, (2.2.23) 式における k の和を, ガンマ関数およびディ・ガンマ関数が極を持つ部分とそうでない部分に分離して,

$$\frac{\partial J_\nu(z)}{\partial \nu} = J_\nu(z) \log \frac{z}{2} - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(-1)^k \psi(\nu+k+1)}{k! \Gamma(\nu+k+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k} - \sum_{k=n}^{\infty} \frac{(-1)^k \psi(\nu+k+1)}{k! \Gamma(\nu+k+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k} \quad (2.2.25)$$

と書いておく. ここで, $\nu \rightarrow -n$ とすると, 右辺の 2 項目, すなわち初めの和の部分ではすべての項で, ディ・ガンマ関数, ガンマ関数ともに極となっていて, そこでの留数は, (2.2.19) (2.2.21) 式より

$$\begin{aligned} \lim_{\nu \rightarrow -n} (\nu+n) \psi(\nu+k+1) &= \lim_{z \rightarrow -(n-k-1)} (z+n-k-1) \psi(z) = -1, \\ \lim_{\nu \rightarrow -n} (\nu+n) \Gamma(\nu+k+1) &= \lim_{z \rightarrow -(n-k-1)} (z+n-k-1) \Gamma(z) = \frac{(-1)^{n-k-1}}{(n-k-1)!} \end{aligned} \quad (2.2.26)$$

となるが, これらを比にしたときは, 互いの極が相殺されて,

$$\lim_{\nu \rightarrow -n} \frac{\psi(\nu+k+1)}{\Gamma(\nu+k+1)} = (-1)^{n-k} (n-k-1)! \quad (2.2.27)$$

と見積もられる. したがって, ここでの和は,

$$(2.2.25) \text{ 式の右辺 2 項目} = -(-1)^n \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n-k-1)!}{k!} \left(\frac{z}{2}\right)^{-n+2k} \quad (2.2.28)$$

となる. また, (2.2.25) 式右辺最後の項は, $\nu = -n$ としてから k 番号を付け替え, (2.2.18) 式を用いると

$$(2.2.25) \text{ 式の右辺 3 項目} = (-1)^n \gamma J_n(z) - (-1)^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \left(\frac{z}{2}\right)^{n+2k} \left(\sum_{r=1}^k \frac{1}{r}\right) \quad (2.2.29)$$

となる. 少し計算が長くなったが, 結局のところ (2.2.25) 式で $\nu = -n$ としたものは,

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial J_\nu(z)}{\partial \nu}\right]_{\nu=-n} &= (-1)^n \left[J_n(z) \left(\gamma + \log \frac{z}{2}\right) - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \left(\frac{z}{2}\right)^{n+2k} \left(\sum_{r=1}^k \frac{1}{r}\right) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n-k-1)!}{k!} \left(\frac{z}{2}\right)^{-n+2k} \right] \end{aligned} \quad (2.2.30)$$

となる. これらの結果 (2.2.24) と (2.2.30) 式を (2.2.22) 式に代入すると初めに述べた整数 n 次の Neumann 関数 $N_n(z)$ の式 (2.2.5) が導出されたことになる.

2.3 Bessel 関数の直交性と完全性

2.3.1 第 1 種 Bessel 関数の場合

k, k' を正のパラメータとする 2 個の Bessel 関数 $J_\nu(kx), J_\nu(k'x)$ が満たす Bessel の微分方程式を

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} + \left(k^2 - \frac{\nu^2}{x^2}\right)\right] J_\nu(kx) = 0, \quad \left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} + \left(k'^2 - \frac{\nu^2}{x^2}\right)\right] J_\nu(k'x) = 0 \quad (2.3.1)$$

と書いておき, この第 1 式に $J_\nu(k'x)$ を, また, 第 2 式に $J_\nu(kx)$ を掛けて差をとり, 全体に x を掛けると,

$$\frac{d}{dx} \left[x \left(J_\nu(k'x) \frac{dJ_\nu(kx)}{dx} - J_\nu(kx) \frac{dJ_\nu(k'x)}{dx} \right) \right] + (k^2 - k'^2) J_\nu(kx) J_\nu(k'x) x = 0 \quad (2.3.2)$$

という式を得る. さらに, Bessel 関数の微分公式

$$\frac{dJ_\nu(z)}{dz} = \frac{\nu}{z}J_\nu(z) - J_{\nu+1}(z), \quad \text{or} \quad = J_{\nu-1}(z) - \frac{\nu}{z}J_\nu(z) \quad (2.3.3)$$

の初めの等式を用いて大括弧中を変形すると

$$\frac{d}{dx} \left[k'xJ_\nu(kx)J_{\nu+1}(k'x) - kxJ_\nu(k'x)J_{\nu+1}(kx) \right] + (k^2 - k'^2)J_\nu(kx)J_\nu(k'x)x = 0 \quad (2.3.4)$$

となる. この式を x について 0 から ∞ まで積分すると

$$\int_0^\infty J_\nu(kx)J_\nu(k'x)xdx = \frac{1}{k^2 - k'^2} \left[kxJ_\nu(k'x)J_{\nu+1}(kx) - k'xJ_\nu(kx)J_{\nu+1}(k'x) \right]_0^\infty \quad (2.3.5)$$

となる. (2.2.2) 式より $J_\nu(z)$ は z^ν から始まる級数で表されるので, この式の右辺は,

$$\nu > -1 \quad (2.3.6)$$

であれば $x = 0$ でゼロとなることがわかる. つぎに, $x \rightarrow \infty$ での値を見積もるために, 十分大きな z に対する Bessel 関数の漸近形

$$J_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos \left(z - \frac{(2\nu + 1)\pi}{4} \right) \quad (2.3.7)$$

を利用し, 三角関数の積和公式を用いると, 十分大きな x を M と書くことにして,

$$(2.3.5) \text{ 式の右辺} = \frac{1}{\pi\sqrt{kk'}} \left[\frac{\sin((k - k')M)}{k - k'} + \frac{\sin((k + k')M - (2\nu + 1)\pi/2)}{k + k'} \right] \quad (2.3.8)$$

と書き表わされる. ここで δ -関数に関する超関数公式

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\sin(kM)}{\pi k} = \delta(k), \quad \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\cos(kM)}{\pi k} = 0 \quad (2.3.9)$$

を用いると (2.3.5) 式の積分結果は

$$\int_0^\infty J_\nu(kx)J_\nu(k'x)xdx = \frac{1}{k} \delta(k - k') \quad (2.3.10)$$

となる. ただし, ここで, $\delta(k + k')$ という余計な項も出るがこれは正の k, k' に対しては効力を持たないので無視することにした. これが第 1 種 Bessel 関数の直交性の式である. また, この式は変数の役目を入れ変えると

$$\int_0^\infty J_\nu(kx)J_\nu(k'x)kdk = \frac{1}{x} \delta(x - x') \quad (2.3.11)$$

と書くこともでき, これが第 1 種 Bessel 関数の完全性の式となる. この式を用いると, $(0, \infty)$ で定義され積分可能な任意の連続関数 $f(x)$ に対し, 条件式 (2.3.6) を満たす積分核 $J_\nu(kx)$ を用いて

$$g(k) = \int_0^\infty J_\nu(kx)f(x)xdx \quad (2.3.12)$$

と変換すると, 元の関数は逆変換

$$f(x) = \int_0^\infty J_\nu(kx)g(k)kdk \quad (2.3.13)$$

と与えられる. これは Fourier-Bessel 変換, または, Hankel 変換と呼ばれる.

2.3.2 Neumann 関数の場合

Neumann 関数の場合にも同じような直交式ができるだろうか. 当然のことながら, Neumann 関数が満たす微分方程式は Bessel 関数と同じ (2.3.1) 式なので J_ν を N_ν に替えた (2.3.2) 式が成立し, また, 微分公式も (2.3.3) 式と同じ

$$\frac{dN_\nu(z)}{dz} = \frac{\nu}{z}N_\nu(z) - N_{\nu+1}(z), \quad \text{or} \quad = N_{\nu-1}(z) - \frac{\nu}{z}N_\nu(z) \quad (2.3.14)$$

となるので, この第 2 式の方を使ってから, 積分形に変えると

$$\int_0^\infty N_\nu(kx)N_\nu(k'x)xdx = \frac{1}{k^2 - k'^2} \left[k'xN_\nu(kx)N_{\nu-1}(k'x) - kxN_\nu(k'x)N_{\nu-1}(kx) \right]_0^\infty \quad (2.3.15)$$

という式を得る. ここで問題なのは $x=0$ で右辺が発散してしまわないかということである. Neumann 関数の定義式 (2.2.4) をこの右辺に代入し, x の最低次の項の次数が正になる条件を求めると, 積 $J_{-\nu}J_{\nu-1}$ の項を除いて, 他の項は

$$0 < \nu < 1 \quad (2.3.16)$$

であれば次数が正となり, $x=0$ のときゼロとなる. しかし, 積 $J_{-\nu}J_{\nu-1}$ の項の次数はゼロとなってしまうので, $x=0$ としたとき定数項が残ることになる. その結果は,

$$(2.3.15) \text{ 式の右辺で } x=0 \text{ としたもの} = \frac{2 \cos(\nu\pi)}{\pi \sin(\nu\pi)} \frac{1}{k^2 - k'^2} \left[\left(\frac{k}{k'}\right)^\nu - \left(\frac{k'}{k}\right)^\nu \right] \quad (2.3.17)$$

となる. ここで, ガンマ関数の公式

$$\Gamma(1-\nu)\Gamma(\nu) = \frac{\pi}{\sin(\nu\pi)} \quad (2.3.18)$$

を用いた. (2.3.15) 式で $x \rightarrow \infty$ としたときは, Neumann 関数の漸近公式

$$N_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin\left(z - \frac{(2\nu+1)\pi}{4}\right) \approx J_{\nu+1}(z) \quad (2.3.19)$$

を用いて Bessel 関数のときと同様に, $\delta(k-k')/k$ となることがわかる. 以上の結果をまとめると (2.3.16) 式の条件の基に

$$\int_0^\infty N_\nu(kx)N_\nu(k'x)xdx = \frac{1}{k} \delta(k-k') - \frac{2 \cos(\nu\pi)}{\pi \sin(\nu\pi)} \frac{1}{k^2 - k'^2} \left[\left(\frac{k}{k'}\right)^\nu - \left(\frac{k'}{k}\right)^\nu \right] \quad (2.3.20)$$

ということになり, 残念ながら直交性の式にはなっていない.

ついでながら, Neumann 関数を微分するとき, (2.3.14) の第 1 式を使ったらどうなるかも計算してみる. このときは, (2.3.15) に相当する式は,

$$\int_0^\infty N_\nu(kx)N_\nu(k'x)xdx = \frac{1}{k^2 - k'^2} \left[kxN_\nu(k'x)N_{\nu+1}(kx) - k'xN_\nu(kx)N_{\nu+1}(k'x) \right]_0^\infty \quad (2.3.21)$$

となる. ここで右辺の $x=0$ で振る舞いを, 前と同じようにして調べると, 条件

$$-1 < \nu < 0 \quad (2.3.22)$$

であれば, 積 $J_\nu J_{-\nu-1}$ 以外の項の x の冪はすべて正となるので, $x=0$ でゼロとなる. 残る定数項を前と同じく求めると (2.3.17) 式と同じ結果になる. したがって, (2.3.22) の条件式の場合も (2.3.20) 式と同じ積分式になり, 直交性の式にはならない. ちなみに, $\nu=0$ の場合をこの式右辺の 2 項目で, $\nu \rightarrow 0$ の極限で定義することにすると,

$$\int_0^\infty N_0(kx)N_0(k'x)xdx = \frac{1}{k} \delta(k-k') - \frac{4 \log(k/k')}{\pi^2(k^2 - k'^2)} \quad (2.3.23)$$

となる.

その他の例として, $N_\nu(kx)$ と $J_\nu(k'x)$ が直交するかを調べてみると, $\nu > -1$ に対し,

$$\int_0^\infty N_\nu(kx)J_\nu(k'x)xdx = \frac{2}{\pi(k^2 - k'^2)} \left(\frac{k'}{k}\right)^\nu \quad (2.3.24)$$

となって, 直交性とは程遠いものになる. しかし, この式と (2.3.20) 式を組み合わせると,

$$E_\nu(z) \equiv \sin(\pi\nu)N_\nu(z) - \cos(\pi\nu)J_\nu(z) \quad (2.3.25)$$

と定義したとき, この新しく定義した関数では,

$$\int_0^\infty E_\nu(kx)E_\nu(k'x)xdx = \frac{1}{k}\delta(k - k') \quad (2.3.26)$$

と直交性の式を導くことができる. ここではわざわざ Neumann 関数を含む形で議論してきた. しかし良く考えてみると, ここで定義した関数 $E_\nu(z)$ は, Neumann 関数の定義 (2.2.4) 式を考慮すると $E_\nu(z) = -J_{-\nu}(z)$ となり, 単に $J_{-\nu}(z)$ を Neumann 関数を使って表しただけのものなので, この式が $|\nu| < 1$ で成立するのは全くあたりまえのことである. ついでながら, $J_\nu(kx)$ と $J_{-\nu}(k'x)$ の場合は,

$$\int_0^\infty J_\nu(kx)J_{-\nu}(k'x)xdx = \frac{\cos(\pi\nu)}{k}\delta(k - k') + \frac{2\sin(\pi\nu)}{\pi(k^2 - k'^2)} \left(\frac{k}{k'}\right)^\nu, \quad |\nu| < 1 \quad (2.3.27)$$

となる.

2.4 Neumann 関数と Struve 関数

ここでは, 公式集にもある Neumann 関数と Struve 関数を用いた Y 変換, \mathbf{H} 変換 (Struve 変換) について述べる⁶. Struve 関数 $\mathbf{H}_\nu(z)$ は

$$\mathbf{H}_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(k + \frac{3}{2})\Gamma(\nu + k + \frac{3}{2})} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2k+1} \quad (2.4.1)$$

で定義され, つぎの非斉次 Bessel 微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) \right] \mathbf{H}_\nu(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + \frac{1}{2})} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu-1} \quad (2.4.2)$$

を満たす. また, この関数は, (2.3.3) 第 2 式と同じ形の微分公式

$$\frac{d\mathbf{H}_\nu(z)}{dz} = \mathbf{H}_{\nu-1}(z) - \frac{\nu}{z}\mathbf{H}_\nu(z) \quad (2.4.3)$$

を持ち, 十分大きな z に対する漸近展開は

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_\nu(z) &\approx N_\nu(z) + \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{M-1} \frac{\Gamma(k + \frac{1}{2})}{\Gamma(\nu - k + \frac{1}{2})} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu-1-2k} + O(|z|^{\nu-1-2M}) \\ \text{or} \quad &\approx N_\nu(z) + \frac{\cos(\nu\pi)}{\pi^{3/2}} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu-1} \sum_{k=0}^{M-1} \frac{(-2)^k (2k-1)!! \Gamma(k - \nu + \frac{1}{2})}{z^{2k}} + O(|z|^{\nu-1-2M}) \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

で与えられる⁷.

⁶ 「数学公式 2」(岩波全書) p.313

⁷ 「数学公式 3」(岩波全書) p.228 に載っている漸近展開の式はおそらく間違いと思われる. ここでの記述は “Higher Transcendental Functions” Vol.2, Bateman Manuscript Project, McGraw-Hill p.39 (63) による. また, ここで挙げた Struve 関数が満たす微分方程式 (2.4.2) に関しては, Bateman の p.39 (62) に載っているものは間違いで, 「数学公式 3」 p.227 の一番下の式で dz/dz を du/dz に直したものが正しい. Struve 関数に関しては公式集もあまりチェックしていないのか間違いが多くて困る.

2個の正のパラメータ k, k' を用いて, $N_\nu(kx)$ と $\mathbf{H}_\nu(k'x)$ を考える. Neumann 関数 $N_\nu(kx)$ が満たす微分方程式は

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} + \left(k^2 - \frac{\nu^2}{x^2} \right) \right] N_\nu(kx) = 0 \quad (2.4.5)$$

であり, 一方 $\mathbf{H}_\nu(k'x)$ は (2.4.2) 式より,

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} + \left(k'^2 - \frac{\nu^2}{x^2} \right) \right] \mathbf{H}_\nu(k'x) = \frac{k'^{\nu+1}}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + \frac{1}{2})} \left(\frac{x}{2} \right)^{\nu-1} \quad (2.4.6)$$

となる. ここで, (2.4.5) 式に $\mathbf{H}_\nu(k'x)$ を掛け, (2.4.6) 式に $N_\nu(kx)$ を掛けたものとの差をとり, 全体に x を掛けると

$$\frac{d}{dx} F_\nu(x, k, k') + (k'^2 - k^2) N_\nu(kx) \mathbf{H}_\nu(k'x) x = \frac{2^{1-\nu} k'^{\nu+1}}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + \frac{1}{2})} x^\nu N_\nu(kx) \quad (2.4.7)$$

となる. ここで数式簡略化のため

$$F_\nu(x, k, k') \equiv x \left(N_\nu(kx) \frac{d\mathbf{H}_\nu(k'x)}{dx} - \mathbf{H}_\nu(k'x) \frac{dN_\nu(kx)}{dx} \right) \quad (2.4.8)$$

と定義した. さらにこの式を 0 から ∞ まで積分すると

$$\int_0^\infty N_\nu(kx) \mathbf{H}_\nu(k'x) x dx = \frac{1}{k^2 - k'^2} \left[F_\nu(x, k, k') \right]_0^\infty - \frac{1}{k^2 - k'^2} \frac{2^{1-\nu} k'^{\nu+1}}{\sqrt{\pi}\Gamma(\nu + \frac{1}{2})} \int_0^\infty x^\nu N_\nu(kx) dx \quad (2.4.9)$$

となる. (2.4.8) 式で定義した $F_\nu(x, k, k')$ は, さらに, Neumann 関数に対する微分式 (2.3.14) の第2式, および Struve 関数に関する (2.4.3) 式を用いると

$$F_\nu(x, k, k') = k' x N_\nu(kx) \mathbf{H}_{\nu-1}(k'x) - k x \mathbf{H}_\nu(k'x) N_{\nu-1}(kx) \quad (2.4.10)$$

と書き直される. ここで, この関数の $x=0, x \rightarrow \infty$ の様子を調べてみる. 初めに $x=0$ の方から, Neumann 関数の定義 (2.2.4) 式と Bessel 関数および Struve 関数の展開式 (2.2.2) (2.4.1) を代入してみると x の冪がすべて正となるためには

$$\nu > -1/2 \quad (2.4.11)$$

であれば良いことがわかる. すなわち, この条件が満たされるときは

$$F_\nu(0, k, k') = 0 \quad (2.4.12)$$

が成立する. つぎに, $x \rightarrow \infty$ のときどうなるかであるが, Struve 関数の漸近公式 (2.4.4) の使用には注意が必要である. この式から明らかなように, ν の値が大きいときは, 第1項よりも第2項の方が主要項となってしまうからである. 第1項のほうが主要項であるためには, 条件

$$\nu < 1/2 \quad (2.4.13)$$

が必要となる. つまり, (2.4.11) 式と合わせると

$$|\nu| < 1/2 \quad (2.4.14)$$

となる. このときは, (2.4.4) 式の第2項目以降が無視できて, Neumann 関数の漸近公式 (2.3.19) 式と合わせて, 十分大きな x を M と書くことにして, $F_\nu(M, k, k')$ が

$$F_\nu(M, k, k') \approx \frac{1}{\pi} \left(\sqrt{\frac{k'}{k}} - \sqrt{\frac{k}{k'}} \right) \sin [(k + k')M - (2\nu + 1)\pi/2] + \frac{1}{\pi} \left(\sqrt{\frac{k'}{k}} + \sqrt{\frac{k}{k'}} \right) \sin [(k - k')M] \quad (2.4.15)$$

となる. これを (2.4.9) 式の第1項目に代入し, 超関数公式 (2.3.9) を用いると,

$$(2.4.9) \text{ 式右辺の 1 項目} = \frac{1}{k} \delta(k - k') \quad (2.4.16)$$

となる。残る問題はこの (2.4.9) 式右辺の 2 項目はどうなるかであるが、この積分はゼロとなる。すなわち、

$$\int_0^{\infty} x^{\nu} N_{\nu}(kx) dx = 0, \quad \text{or} \quad \int_0^{\infty} x^{\nu} N_{\nu}(x) dx = 0 \quad (2.4.17)$$

が成立する⁸。その理由は、(2.4.7) 式で $k = k' = 1$ と置くと、

$$\frac{d}{dx} F_{\nu}(x, 1, 1) = \frac{2^{1-\nu}}{\sqrt{\pi} \Gamma(\nu + \frac{1}{2})} x^{\nu} N_{\nu}(x) \quad (2.4.18)$$

となり、これを x で 0 から ∞ まで積分すると

$$\int_0^{\infty} x^{\nu} N_{\nu}(x) dx = 2^{\nu-1} \sqrt{\pi} \Gamma(\nu + \frac{1}{2}) \left[F_{\nu}(x, 1, 1) \right]_0^{\infty} \quad (2.4.19)$$

となるが、(2.4.14) 式の条件の基で

$$F_{\nu}(0, 1, 1) = 0, \quad F_{\nu}(\infty, 1, 1) = 0 \quad (2.4.20)$$

となるので、(2.4.17) の積分式が成立することになる。以上の結果から、直交性を示す式

$$\int_0^{\infty} N_{\nu}(kx) \mathbf{H}_{\nu}(k'x) x dx = \frac{1}{k} \delta(k - k') \quad (2.4.21)$$

が成立することになる。また、この式は x と k の役割を入れ替えると

$$\int_0^{\infty} N_{\nu}(kx) \mathbf{H}_{\nu}(kx') k dk = \frac{1}{x} \delta(x - x') \quad (2.4.22)$$

なってこれは完全性の式となるので、 $(0, \infty)$ で定義された積分可能な任意関数 $f(x)$ に対し変換

$$g(k) = \int_0^{\infty} \mathbf{H}_{\nu}(kx) f(x) x dx \quad (2.4.23)$$

を施すと元の関数 $f(x)$ はこの逆変換で

$$f(x) = \int_0^{\infty} N_{\nu}(kx) g(k) k dk \quad (2.4.24)$$

と求められることになる。また、この変換は $f(x)$ と $g(k)$ を入れ替えると

$$\begin{aligned} g(k) &= \int_0^{\infty} N_{\nu}(kx) f(x) x dx \\ f(x) &= \int_0^{\infty} \mathbf{H}_{\nu}(kx) g(k) k dk \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

とも書ける。ここで $N_{\nu}(kx)$ を用いた変換を Y 変換⁹、 $\mathbf{H}_{\nu}(kx)$ を用いた変換を \mathbf{H} 変換 (Struve 変換) という。これらの変換は互いに逆の変換になっている。ただし、ここで ν は (2.4.14) の条件式 $|\nu| < \frac{1}{2}$ を満たす範囲内のものとする。

Bessel 関数、Neumann 関数のグラフはそれなりの本を見ればよく出ているが、Struve 関数のグラフは見たことがない。そこで、この関数 $\mathbf{H}_{\nu}(x)$ を数値的に求め描いたものを以下に示す。図 1 の上段には、 $\nu = 0, 0.5, 1.0, 1.5$ の場合、また、下段には $\nu = -1.5, -1.0, -0.5, 0$ の場合のグラフを示す。各グラフとも x の範囲は $0 \leq x \leq 40$ の範囲で求めたが、このうち、 $0 \leq x \leq 35$ の領域では (2.4.1) 式の級数展開を用い、また、 $35 < x$ では、級数展開は数値的に不安定な振動が発生してしまうため、(2.4.4) 式の漸近展開を用いた。さらに、図 2 は、水平右方向に x 軸、左斜め上方向に ν 軸、上方向に関数値を取り 3 次的に描いたものである。

⁸ 「数学公式 3」(岩波全書) p.193 上から 2 番目の式

⁹ Neumann 関数 $N_{\nu}(z)$ を $Y_{\nu}(z)$ とも書くので、これを用いた変換を Y 変換という。

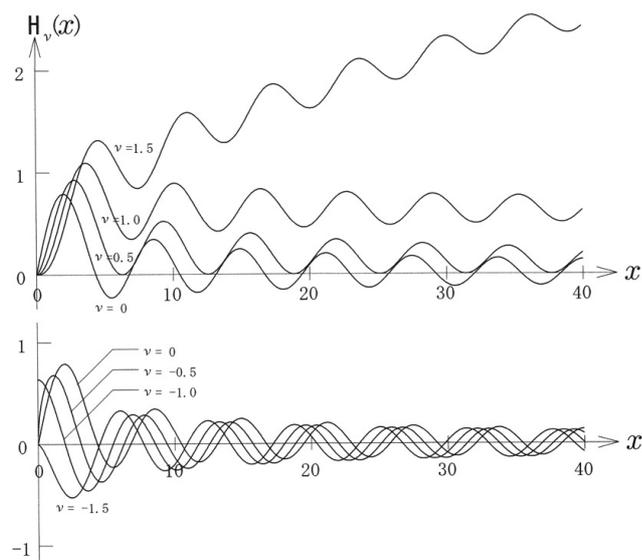


図 1 Struve 関数

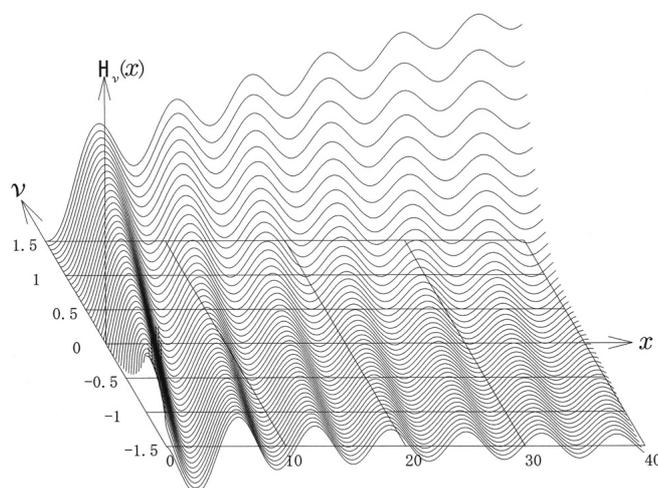


図 2 Struve 関数

図 1 の下段に示すように $\nu < 0$ の場合の Struve 関数のグラフは、Bessel 関数のそれとよく似ていることがわかる。これは (2.4.2) 式からわかるように、 n を非負整数として、 $\nu = -n - \frac{1}{2}$ とした場合、Struve 関数は斉次型の Bessel 微分方程式を満たすことになるので、通常 Bessel あるいは Neumann 関数で表されることになる。実際、(2.4.1) 式からつぎの式が容易に証明される。

$$\mathbf{H}_{-n-\frac{1}{2}}(x) = (-1)^n J_{n+\frac{1}{2}}(x). \quad (2.4.26)$$

2.5 おわりに

恥ずかしながら私は、ここで扱った Neumann 関数の Neumann というのは、かの有名な数学者、ハンガリー生まれでアメリカで活躍した John von Neumann(1903-1957) のことだと長いあいだ勝手に思い込んでいた。ところがこれは全くの誤解であり、Neumann 関数の Neumann は、J. von Neumann よりはるか前の人で、ドイツの数学者 Karl(Carl) Gottfried Neumann(1832-1925) という人であった。この人の父も鉱物学者、物理学者、数学者で、個体のモル比熱に関する Neumann-Kopp の法則を発見した人である。また、彼の母親は Bessel 関数の Bessel とは義理の妹にあたる。Neumann 関数なるものは、現在使われているものとは少し

づつ違った形のものが, Hankel, Weber, Schläfli らによっても考えられていたようだが, この K. G. Neumann が書いた本 “*Theorie der Bessel’schen Funktionen*” (Leipzig, 1867) によって広く一般に知れ渡り, 彼の名を冠した関数名になったということである.

ついでながら, Struve 関数の Struve はロシア生まれで主としてドイツで活躍した数学者, 物理学者, 天文学者の Karl Hermann Struve(1854-1920) という人で, Struve 関数は光の輝線スペクトルの強度を記述する関数として導入したということである.

この原稿を書く最初の目的は, Struve 変換が主要な役割を果たす力学モデルを考えることであつたが, うまいものが思いつかずに単に既成の事実を述べるだけのものになってしまった. しかし, 物理屋としてはこれは本末転倒で, やはり「先に物理ありき」で「それに合う数学を作る」というのでなければいけないはずである.

空間回転と SU(2)

Rotations and SU(2)

矢野 忠¹⁰
Tadashi YANO¹¹

3.1 はじめに

このエッセイはすでにこの「数学・物理通信」3巻2号に掲載された「四元数と空間回転4」を「空間回転とSU(2)」と改題して改訂したものである。主に3.3節と付録3.4とを改変している。この改訂によって行列による回転のSO(3)による表現との一致が簡単にわかるようになった。

すでにエッセイ「四元数と空間回転3」（「数学・物理通信」3巻1号）で行列による回転の表示としてSO(3)による表現を述べた。このSO(3)の表現に対応したSU(2)の表現をこのエッセイで述べたい¹²。

SO(3)による表現として3次元のベクトル $x^1 e_1 + x^2 e_2 + x^3 e_3$ を考えるとき、ここで基底ベクトル e_1, e_2, e_3 を

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

ととる。

すなわち、

$$\begin{bmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{bmatrix} = x^1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + x^2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + x^3 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = x^1 e_1 + x^2 e_2 + x^3 e_3 \quad (3.1.1)$$

このようにして3次元のベクトルを3行1列の列ベクトルとして表すことができる。

成分が (x^1, x^2, x^3) のベクトルは回転してそのベクトルの成分が (x'^1, x'^2, x'^3) になったとしよう。このときに (x^1, x^2, x^3) と (x'^1, x'^2, x'^3) との関係は3行3列の行列で表される。

これが前回に取り扱った回転のSO(3)表現であった。次節ではSO(3)表現に対応したSU(2)の表現を述べよう。

つぎの節に行く前に一つ注意をしておきたい。次節以下で少しこみいったことはすべて付録3に回した。だから読んで途中で気になったところがあっても、まずは話の筋を優先してほしい。その後で気になったところは付録3の説明で補うか、またはそこに挙げられた参考文献を参照してほしい。それらを参照すれば、納得をして頂けるであろう。

¹⁰元愛媛大学工学部

¹¹yanotad@earth.ocn.ne.jp

¹²SU(2)とは要素が複素数の2行2列の行列のつくるユニタリー群、その元 U のエルミート共役行列 U^\dagger が U の逆行列となり、すなわち、 $U^\dagger = U^{-1}$ が成立し、かつその行列式 $\det U = 1$ であるものをいう。[1]を参照せよ

3.2 SU(2) の表現

いま, $x^1 e_1 + x^2 e_2 + x^3 e_3$ で基底ベクトル e_1, e_2, e_3 を 2 行 2 列の行列

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.2.1)$$

に変えると

$$x^1 \sigma_1 + x^2 \sigma_2 + x^3 \sigma_3 \quad (3.2.2)$$

が得られる [2]. この $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ は Pauli 行列といい, 量子力学で電子にスピン (電子の固有角運動量) を導入するために考えられたものである¹³.

上に与えた Pauli 行列の表現を用いると

$$\begin{aligned} x^1 \sigma_1 + x^2 \sigma_2 + x^3 \sigma_3 &= x^1 \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + x^2 \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} + x^3 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & -x^3 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

となる¹⁴.

SO(3) のときに

$$\begin{bmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{bmatrix} \text{ と } \begin{bmatrix} x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{bmatrix}$$

とを 3 行 3 列の行列で関係づけたが, SU(2) では

$$P = \begin{bmatrix} x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & -x^3 \end{bmatrix} \quad (3.2.4)$$

と

$$P' = \begin{bmatrix} x'^3 & x'^1 - ix'^2 \\ x'^1 + ix'^2 & -x'^3 \end{bmatrix} \quad (3.2.5)$$

との関係をつける変換の 2 行 2 列のユニタリ行列 Q を考える.

すなわち, P と P' とはユニタリ行列 Q で

$$P' = QPQ^\dagger \quad (3.2.6)$$

と関係付けられる. このユニタリ変換 (3.2.6) はここでは天下りだが, すぐ後で四元数の回転の表現から導く. ユニタリ行列 Q とはそのエルミート共役行列 Q^\dagger が逆行列 Q^{-1} となる行列のことである. すなわち,

$$Q^\dagger = Q^{-1}$$

この行列がユニタリであるという条件を用いれば, Q は一般に

$$Q = \begin{bmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{bmatrix}, \quad \text{where } |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (3.2.7)$$

と表される (付録 3.3 参照). ここで \bar{a} は a の共役複素数である. \bar{b} も同様である.

¹³ この Pauli 行列の求め方を述べた文献を付録 3.1 で紹介する.

¹⁴ なぜ (3.1.1) の代わりに (3.2.2) をとるのか, それは 2 行 2 列の任意の行列を単位行列 1 と Pauli 行列 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ の 1 次結合として表すことができるからである. 立ち入った説明は付録 3.2 で述べる.

このとき

$$P' = QPQ^\dagger = \begin{bmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & -x^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{a} & -b \\ \bar{b} & a \end{bmatrix} \quad (3.2.8)$$

となる.

いま (3.2.8) をあまりはつきり理由を述べないで示したが, これを四元数の空間回転の表現

$$u = qv\bar{q} \quad (3.2.9)$$

から導いてみよう. エッセイ「四元数と空間回転 3」では

$$v = x^1i + x^2j + x^3k \quad (3.2.10)$$

と表したが¹⁵, このとき i, j, k と Pauli の行列との対応を

$$i \rightarrow -i\sigma_1, \quad j \rightarrow -i\sigma_2, \quad k \rightarrow -i\sigma_3 \quad (3.2.11)$$

ととれば

$$ij = -ji = k, \quad jk = -kj = i, \quad ki = -ik = j \quad (3.2.12)$$

が成り立つ¹⁶.

(3.2.11) の置き換えをすると

$$u \rightarrow (-i)P', \quad q \rightarrow Q, \quad v \rightarrow (-i)P, \quad \bar{q} \rightarrow Q^\dagger$$

となるから,

$$u = qv\bar{q} \rightarrow (-i)P' = Q(-i)PQ^\dagger$$

と置き換えられる.

ではつぎに個々の因子がどのように行列を用いて表されるか見てみよう. まず $(-i)P$ は

$$(-i)P = (-i)(x^1\sigma_1 + x^2\sigma_2 + x^3\sigma_3) = -i \begin{bmatrix} x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & -x^3 \end{bmatrix}$$

となる¹⁷.

同様に $(-i)P'$ は

$$(-i)P' = -i(x'^1\sigma_1 + x'^2\sigma_2 + x'^3\sigma_3) = -i \begin{bmatrix} x'^3 & x'^1 - ix'^2 \\ x'^1 + ix'^2 & -x'^3 \end{bmatrix}$$

となる.

つづいて, $q = q^0 + q^1i + q^2j + q^3k$ は

$$Q = q^0 - i(q^1\sigma_1 + q^2\sigma_2 + q^3\sigma_3) = \begin{bmatrix} q^0 - iq^3 & -i(q^1 - iq^2) \\ -i(q^1 + iq^2) & q^0 + iq^3 \end{bmatrix}$$

となる. また $\bar{q} = q^0 - (q^1i + q^2j + q^3k)$ は

$$Q^\dagger = q^0 + i(q^1\sigma_1 + q^2\sigma_2 + q^3\sigma_3) = \begin{bmatrix} q^0 + iq^3 & i(q^1 - iq^2) \\ i(q^1 + iq^2) & q^0 - iq^3 \end{bmatrix}$$

¹⁵前のエッセイでは下付の添字で $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$ と表されている.

¹⁶(3.2.12) を成り立たせる i, j, k と $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ の対応は (3.2.11) だけではない. それについては付録 3.4 で述べる. このことを指摘して頂いた大槻俊明氏に感謝する.

¹⁷この行列はトレース=0 で, エルミートである. この 2 つの性質は相似変換で不変である. トレースとエルミートの定義は付録 3.5 で述べる.

となる.

したがって,

$$qv\bar{q} \rightarrow (-i)P' = Q(-iP)Q^\dagger$$

と変換された式の両辺に因子 i をかけて, $P' = QPQ^\dagger$ に変換されるといってもよい. 今後 $P' = QPQ^\dagger$ を取り扱う.

$$P' = QPQ^\dagger \quad (3.2.13)$$

$$\begin{aligned} &= \begin{bmatrix} q^0 - iq^3 & -i(q^1 - iq^2) \\ -i(q^1 + iq^2) & q^0 + iq^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & -x^3 \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} q^0 + iq^3 & i(q^1 - iq^2) \\ i(q^1 + iq^2) & q^0 - iq^3 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

となる.

さて行列 Q の要素 a, b, c, d を q^0, q^1, q^2, q^3 で表しておこう.

$$Q = \begin{bmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q^0 - iq^3 & -i(q^1 - iq^2) \\ -i(q^1 + iq^2) & q^0 + iq^3 \end{bmatrix} \quad (3.2.15)$$

であるから, $a = q^0 - iq^3$ であるから, $\bar{a} = q^0 + iq^3$ であり, $b = -i(q^1 - iq^2)$ であるから, $\bar{b} = i(q^1 + iq^2)$ である. したがって

$$Q^\dagger = \begin{bmatrix} \bar{a} & -b \\ \bar{b} & a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q^0 + iq^3 & i(q^1 - iq^2) \\ i(q^1 + iq^2) & q^0 - iq^3 \end{bmatrix} \quad (3.2.16)$$

となる.

したがって $qv\bar{q}$ から $P' = QPQ^\dagger$, すなわち (3.2.9) から (3.2.8) が導かれる. Q がユニタリ行列, すなわち $QQ^\dagger = 1$ を満たすことはいうまでもない.

形式的には上の説明でいいのだが, 実際に (3.2.14) の行列の演算を行って, それが $SO(3)$ の表現と一致することを次節で確かめよう.

3.3 $SO(3)$ との同等性

では (3.2.14) の演算にとりかかろう. その前に (3.2.14) は計算が面倒なので, 記号をいくつか導入しておこう.

$$\begin{aligned} x_- &= x^1 - ix^2 \\ x_+ &= x^1 + ix^2 \\ q_- &= q^1 - iq^2 \\ q_+ &= q^1 + iq^2 \end{aligned}$$

と略記する. これらの記号を用いて $P' = QPQ^\dagger$ を計算する. すなわち

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x'^3 & x'_- \\ x'_+ & -x'^3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} q^0 - iq^3 & -iq_- \\ -iq_+ & q^0 + iq^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^3 & x_- \\ x_+ & -x^3 \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} q^0 + iq^3 & iq_- \\ iq_+ & q^0 - iq^3 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

この計算を一度にするのは大変なので, まず

$$\begin{bmatrix} x^3 & x_- \\ x_+ & -x^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q^0 + iq^3 & iq_- \\ iq_+ & q^0 - iq^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$$

と表すことにしよう. ここで,

$$\begin{aligned} A &= x^3(q^0 + iq^3) + ix_-q_+ \\ B &= ix^3q_- + x_-(q^0 - iq^3) \\ C &= x_+(q^0 + iq^3) - ix^3q_+ \\ D &= ix_+q_- - x^3(q^0 - iq^3) \end{aligned}$$

である.

したがって

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x'^3 & x'_- \\ x'_+ & -x'^3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} q^0 - iq^3 & -iq_- \\ -iq_+ & q^0 + iq^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (q^0 - iq^3)A - iq_-C & (q^0 - iq^3)B - iq_-D \\ -iq_+A + (q^0 + iq^3)C & -iq_+B + (q^0 + iq^3)D \end{bmatrix} \end{aligned}$$

となる.

まず, 簡単に求められる x'^3 は

$$\begin{aligned} x'^3 &= (q^0 - iq^3)A - iq_-C \\ &= G_3x^3 + G_-x_- - G_+x_+ \\ &= G_1x^1 + G_2x^2 + G_3x^3 \end{aligned} \tag{3.3.2}$$

である. ここで

$$\begin{aligned} G_3 &= (q^0)^2 + (q^3)^2 - (q^1)^2 - (q^2)^2 \\ G_- &= i(q^0 - iq^3)q_+ \\ G_+ &= iq_-(q^0 + iq^3) \end{aligned}$$

ところで

$$G_-x_- - G_+x_+ = G_1x_1 + G_2x_2 \tag{3.3.3}$$

であるから,

$$\begin{aligned} G_1 &= G_- - G_+ = 2(q^1q^3 - q^0q^2) \\ G_2 &= -i(G_+ + G_-) = 2(q^0q^1 + q^2q^3) \\ G_3 &= (q^0)^2 + (q^3)^2 - (q^1)^2 - (q^2)^2 \end{aligned}$$

である.

つぎに

$$\begin{aligned} x'^1 - ix'^2 &= (q^0 - iq^3)B - iq_-D \\ &= R_3x^3 + R_-x_- + R_+x_+ \end{aligned} \tag{3.3.4}$$

である. ここで

$$\begin{aligned} R_3 &= 2iq_-(q^0 - iq^3) \\ R_- &= (q^0 - iq^3)^2 \\ R_+ &= (q_-)^2 \end{aligned}$$

である。また

$$\begin{aligned} x'^1 + ix'^2 &= -iq_+A + (q^0 + iq^3)C \\ &= S_3x^3 + S_-x_- + S_+x_+ \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

である。ここで

$$\begin{aligned} S_3 &= -2iq_+(q^0 + iq^3) \\ S_- &= (q_+)^2 \\ S_+ &= (q^0 + iq^3)^2 \end{aligned}$$

である。

(3.3.2)-(3.3.5) から

$$x'^1 = E_1x^1 + E_2x^2 + E_3x^3 \quad (3.3.6)$$

$$x'^2 = F_1x^1 + F_2x^2 + F_3x^3 \quad (3.3.7)$$

$$x'^3 = G_1x^1 + G_2x^2 + G_3x^3 \quad (3.3.8)$$

と表すことにしよう。ここで

$$E_1 = \frac{1}{2}(R_+ + R_- + S_+ + S_-) = (q^0)^2 + (q^1)^2 - (q^2)^2 - (q^3)^2$$

$$E_2 = \frac{i}{2}(R_+ + S_+ - R_- - S_-) = 2(q^1q^2 - q^0q^3)$$

$$E_3 = \frac{1}{2}(R_3 + S_3) = 2(q^0q^2 + q^1q^3)$$

$$F_1 = \frac{1}{2i}(S_+ + S_- - R_+ - R_-) = 2(q^0q^3 + q^1q^2)$$

$$F_2 = \frac{1}{2}(S_+ + R_- - R_+ - S_-) = (q^0)^2 + (q^2)^2 - (q^1)^2 - (q^3)^2$$

$$F_3 = \frac{1}{2i}(S_3 - R_3) = 2(q^2q^3 - q^0q^1)$$

$$G_1 = G_- - G_+ = 2(q^1q^3 - q^0q^2)$$

$$G_2 = -i(G_+ + G_-) = 2(q^0q^1 + q^2q^3)$$

$$G_3 = (q^0)^2 + (q^3)^2 - (q^1)^2 - (q^2)^2$$

である。これらの $E_1, E_2, \dots, G_2, G_3$ に

$$q^0 = \cos \frac{\theta}{2}$$

$$q^1 = n_1 \sin \frac{\theta}{2}$$

$$q^2 = n_2 \sin \frac{\theta}{2}$$

$$q^3 = n_3 \sin \frac{\theta}{2}$$

を代入すれば

$$E_1 = \cos \theta + n_1^2(1 - \cos \theta) \quad (3.3.9)$$

$$E_2 = n_1 n_2(1 - \cos \theta) - n_3 \sin \theta \quad (3.3.10)$$

$$E_3 = n_1 n_3(1 - \cos \theta) + n_2 \sin \theta \quad (3.3.11)$$

$$F_1 = n_1 n_2(1 - \cos \theta) + n_3 \sin \theta \quad (3.3.12)$$

$$F_2 = n_2^2(1 - \cos \theta) + \cos \theta \quad (3.3.13)$$

$$F_3 = n_2 n_3(1 - \cos \theta) - n_1 \sin \theta \quad (3.3.14)$$

$$G_1 = n_1 n_3(1 - \cos \theta) - n_2 \sin \theta \quad (3.3.15)$$

$$G_2 = n_2 n_3(1 - \cos \theta) + n_1 \sin \theta \quad (3.3.16)$$

$$G_3 = n_3^2(1 - \cos \theta) + \cos \theta \quad (3.3.17)$$

これで、得られた x^1, x^2, x^3 の係数を「四元数と空間回転 3」に与えられた $E_1, E_2, \dots, G_2, G_3$ と比べてみれば、すべてそこに与えられた式と一致することがわかる。

したがって、 $SU(2)$ の表現と $SO(3)$ の表現とが一致していることが示された。

3.4 おわりに

このエッセイでは四元数の空間回転から、行列による空間回転の $SU(2)$ 表現を導き、かつそれが行列のよく知られた $SO(3)$ 表現と一致をすることを述べた。

つぎのエッセイでは空間回転のベクトル表現を導き、これが行列の $SO(3)$ 表現と同等であることを示すことにしたい。

3.5 付録 3

3.5.1 付録 3.1 Pauli 行列の求め方

Pauli 行列はとても有名なものであり、いまさらその形が (3.2.1) のように求められることを示す必要もないだろう。その求め方を示した文献だけを挙げておきたい。

求め方として一番簡単なのは文献 [3] であろう。また同じくらい簡単な求め方が [4] にある。それよりは少し複雑だが、やはり求め方の説明は [5] にもある。

もちろん大多数の量子力学の書は角運動量の一般的な行列の式の求め方の説明があり、その特殊な場合として Pauli 行列が与えられている。

3.5.2 付録 3.2 (3.2.3) の行列の由来

(3.2.2) または (3.2.3) はきわめて形式的に導出されたので、その由来をみておく。

一般的な 2 行 2 列の行列は

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

と表せる。ここで a, b, c, d は任意の複素数とする。

このときこの4つの行列要素の1つのみがゼロではない、1次独立な4つの行列

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

を用いれば,

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + c \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + d \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

と表すことができる.

ところで、これらの4つの行列は Pauli 行列 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ に単位行列 1 を加えた4つの行列で

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2}[1 - i(i\sigma_3)], & \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2}[1 + i(i\sigma_3)], \\ \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2) = \sigma_+, & \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2) = \sigma_- \end{aligned}$$

と表すことができる. ここで σ_+, σ_- は電子のスピン成分 σ_3 の固有値を1だけ上げたり, 下げたりする演算子で昇降演算子といわれている¹⁸.

単位行列 1 に対して Pauli 行列にいつも因子 i をかけることにすれば,

$$1, \quad i\sigma_1, \quad i\sigma_2, \quad i\sigma_3$$

となり、これらで2行2列の複素行列を表せば、つぎの2行2列の任意な行列

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} x^0 + ix^3 & ix^1 + x^2 \\ ix^1 - x^2 & x^0 - ix^3 \end{bmatrix} \\ &= x^0 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + i \begin{bmatrix} x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & -x^3 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.5.1)$$

が得られるが、右辺の第2項の因子 i を除いた部分が (3.2.3) に与えた2行2列の行列であり、(3.2.3) の第2行、第2列の要素 x^3 での前の負号はこのようにして現れている.

3.5.3 付録 3.3 2行2列のユニタリ行列

ユニタリ行列 Q が (3.2.7) のように表されることは

$$Q = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

とにおいて Q がユニタリである条件 $QQ^\dagger = 1$ と $\det Q = 1$ という条件

$$\det Q = ad - bc = 1$$

を使えば、簡単に導くことができる.

参考文献を上げる必要もないであろうが、あえて一つだけあげれば、[6]がある. この書は現在第3版となっているが、むしろ参考文献として挙げた第2版の方がこの点に関しては詳しい.

¹⁸電子のスピンは $1/2$ で 1 ではないから、正しくは電子のスピン演算子は $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ である.

3.5.4 付録 3.4 i, j, k と $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ の対応

本文でも示したように (3.2.11) に示された対応は確かに (3.2.12) の関係を満たす, 四元数の元 i, j, k と Pauli 行列との 1 つの対応である. しかし, (3.2.11) だけが唯一の対応のさせ方ではなく, 別の対応のさせ方もある.

いま四元数の i, j, k と Pauli の行列 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ とを

$$i \rightarrow a\sigma_1, \quad j \rightarrow b\sigma_2, \quad k \rightarrow c\sigma_3$$

と対応させ,

$$ij = -ji = k, \quad jk = -kj = i, \quad ki = -ik = j \quad (3.2.11)$$

が成り立つような定数 a, b, c を探してみよう.

すなわち,

$$\begin{aligned} ij &= (a\sigma_1)(b\sigma_2) \\ &= ab\sqrt{-1}\sigma_3 \\ &= \frac{\sqrt{-1}ab}{c}(c\sigma_3) \\ &= \frac{\sqrt{-1}ab}{c}k \\ &= k \end{aligned}$$

となるように $\frac{\sqrt{-1}ab}{c}$ を決めることを考えよう¹⁹. そのためには

$$\frac{\sqrt{-1}ab}{c} = 1$$

でなければならないから²⁰,

$$c = iab \quad (3.5.2)$$

が得られる.

同様に $jk = i$ から

$$a = ibc \quad (3.5.3)$$

が得られ, また $ki = j$ から

$$b = iac \quad (3.5.4)$$

が得られる.

この 3 つの a, b, c についての 3 元連立方程式 (3.5.2)-(3.5.4) を解けば, つぎの 4 つの解が得られる.

$$a = i, \quad b = -i, \quad c = i \quad (3.5.5)$$

$$a = i, \quad b = i, \quad c = -i \quad (3.5.6)$$

$$a = -i, \quad b = -i, \quad c = -i \quad (3.5.7)$$

$$a = -i, \quad b = i, \quad c = i \quad (3.5.8)$$

解 (3.5.5) はどこにも採用されているのをまだ見たことがないが, 解 (3.5.6) は [7] でとられた値である. つぎに解 (3.5.7) は [8] で採用されている. 最後の解 (3.5.8) は [9] で採用されたものと同一であろうと思われる.

四元数の i, j, k と Pauli の行列 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ との対応をこの順序から入れ替えたものを考えてみよう. 一例として

$$i \rightarrow a\sigma_3, \quad j \rightarrow b\sigma_2, \quad k \rightarrow c\sigma_1$$

¹⁹虚数単位 i と四元数の元 i との混同を避けるためにわざと複素数の虚数単位 i を $\sqrt{-1}$ と書いた.

²⁰以下では再び $\sqrt{-1} = i$ と表す.

と対応させると、上に行ったと同様な手続きから、今度は

$$c = -iab \quad (3.5.9)$$

$$a = -ibc \quad (3.5.10)$$

$$b = -iac \quad (3.5.11)$$

が得られる.

この a, b, c に関する, 3つの連立方程式 (3.5.9)-(3.5.11) を解けば, 4つの解

$$a = i, \quad b = i, \quad c = i \quad (3.5.12)$$

$$a = i, \quad b = -i, \quad c = -i \quad (3.5.13)$$

$$a = -i, \quad b = -i, \quad c = -i \quad (3.5.14)$$

$$a = -i, \quad b = i, \quad c = -i \quad (3.5.15)$$

が得られる. この中で解 (3.5.12) は [10] で採用されている.

ここでは文献 [8] において採られた対応 (3.2.11) を用いた. この対応で, この Pauli 行列の前の負号 $-$ が対応を複雑にしていると思われたが, 負号 $-$ のついていない理由がこれでわかった.

3.5.5 付録 3.5 トレースとエルミート

トレースとは行列 A の対角要素の和である. n 行 n 列の行列なら, その対角要素は $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$ と n 個あるが,

$$\text{Tr}A = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}$$

と表される.

行列 A の各要素の共役複素数を取り, その行列の各行を各列にした行列をエルミート共役行列 A^\dagger という. エルミート共役行列 A^\dagger がエルミート共役をとる前の元の行列 A と等しいとき, すなわち

$$A^\dagger = A$$

のとき, その行列 A はエルミートであるという.

参考文献

- [1] 山内恭彦, 杉浦光夫, 『連続群論入門』(培風館, 1960) 30
- [2] 金谷一朗, 『ベクトル・複素数・クォータニオン』(2003) 45-51, www.nishilab.sys.es.osaka-u.ac.jp
- [3] 朝永振一郎, 『角運動量とスピン』(みすず書房, 1989) 33-43
- [4] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (John Wiley and Sons, 1961) 251-275
- [5] マージナウ・マーフィ (佐藤次彦, 国宗 真訳) 『物理学と化学のための数学 II』(共立出版, 1961) 440-450, 621-626

- [6] ゴールドスタイン (瀬川, 矢野, 江沢訳), 『古典力学』 (第2版) 上 (吉岡書店, 1983) 193-196
- [7] 『理化学辞典』 第5版 (岩波書店, 1998) 580
- [8] E. Cartan, *The Theory of Spinors* (Dover, 1981) 44-45
- [9] E. P. Wigner, *Group Theory* (Academic Press, 1959) 157-161
- [10] 志村五郎, 『数学をいかに使うか』 (ちくま学芸文庫, 2010) 55

編集後記

皆様，お元気でお過ごしのことと存じます。

さて，私たちはサッカーワールドカップの喧騒からも離れて，数学や物理の世界に沈潜しましょうか。

先日4巻3号を発行したと思ったのに，すぐまた4号を発行できるのは投稿して下さる方々のお蔭です。深く感謝致します。もっとも私としても別に強迫観念に囚われたようにこのサキュラーを発行しているわけではないのですが。

たまたま原稿がそこにあるから発行しているだけです。こんな幸せなことが編集発行人としてまたあるでしょうか。

(矢野 忠)