パウリ行列と 4 元数

吉 井 洋 二・上 林 一 彦

Pauli matries and Quaternions

Yoji YOSHII and Kazuhiko UEBAYASHI

（平成21年11月27日受理）

We review Pauli matrices used in quantum physics. They sit in $M_2(\mathbb{C})$ together with quaternions. We find two interesting spheres in the 8-dimensional space $M_2(\mathbb{C})$. One comes from Pauli matrices. The other consists of unit imaginary numbers in quaternions. This topic is an instructive material in linear algebra.

KEYWORDS: Pauli matrices, complex numbers, quaternions, Lie groups

1 緒言

量子力学では，電子の運動を記述するのに，最も簡単な場合でも，複素数を成分とする 2 × 2 行列が使われる。2 × 2 行列は線型変換と見れば，2 次元複素ベクトル空間に作用しているわけである。これは実数上では 4 次元空間に作用していることになる。このように量子力学では，時間軸を考えなくても既に 4 次元必要である。加えて，複素数を成分とする 2 × 2 行列全体は，実数上 8 次元のベクトル空間になる。（量子力学では，8 次元空間をも自然に考えているのである。）この 8 次元のうち 4 次元は 4 元数が作る空間で，残りの 4 次元が量子力学で登場するパウリ行列を含む空間である。この空間を我々は擬 4 元数と呼ぶ。この 4 次元空間である擬 4 元数の中に，3 次元空間であるパウリ空間を定義する。そして，パウリ空間における単位球をパウリ球面と呼び，パウリ行列はパウリ球面上の自然な 3 つの行列と考えてよいことや，パウリ球面上の元はどれもパウリ行列になり得ることなどを説明する。また，擬 4 元数は，行列で表現された 4 元数に虚数単位 i を掛けてできる集合であり，行列の積を少し変形することで，擬 4 元数は 4 元数と同一視できることも解説する。パウリ行列を紹介する際，4 元数との関係を説明するのが普通だが，本論文のように，8 次元空間の中で 4 元数とパウリ行列を含む擬 4 元数との関係を幾何学的に説明しているものはないように思われる。

この内容は線形代数の一教材としても新しく，高専・大学等でも取り上げていくべきと考える。特に線形代数を十分教える時間的余裕を持たない高等教育において，物理・工学との連携を保ちながら教えることができる，よき線形代数の教材例になると筆者は考える。

2 パウリ球面とパウリ空間

量子力学では電子を記述するのに，$\sigma \in M_2(\mathbb{C})$（複素数成分の 2 × 2 行列全体）で

$$\sigma^2 = I \tag{1}$$

となるものが使われる。（I は単位行列とする。）これは電子の運動を記述するディラック方程式からの要請である。さて

$$\sigma = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

とおけば，Cayley-Hamilton の定理により，

$$\sigma^2 - (\alpha+\delta)\sigma + (\alpha\delta - \beta\gamma)I = O. \tag{2}$$

（O は零行列とする。）（1）を（2）へ代入すれば，$(\alpha+\delta)\sigma = (\alpha\delta - \beta\gamma + 1)I$ となり，$\sigma \neq \pm I$ ならば

$$\mathrm{tr}(\sigma) = \alpha + \delta = 0 \tag{3}$$
$$\det(\sigma) = \alpha\delta - \beta\gamma = -1 \tag{4}$$

を得る。もちろん $\pm I$ は(3)も(4)も満たさないので，

$\pm I$は（1）を満たす行列の中で特別なものと言える。（1）を満たす行列全体を考察したいが，この集合は簡単のようでいて，実は大きすぎて，目に見えにくい。量子力学では運動を記述する行列はobservableであるという要請から，固有値は実数であるべきとしている。ところが，（1）を満たす行列の固有値は必ず1か-1なので，observableなる条件は既に満たしている。それでは他にどんな仮定をすれば目に見える集合になるのだろう。運動を記述したいのだから，ユークリッド空間なら直交行列を仮定するのが自然である。ここでは複素数成分で行列を考えているので，複素ベクトル空間での長さを変えない変換（複素内積を変えない変換と言ってもよい），即ち，ユニタリー行列$\sigma\sigma^*=I$であると仮定するのが自然だろう。ここで，$*$は転置共役の意である。さて，エルミート行列，即ち$\sigma^*=\sigma$を満たす行列を思い出されたい。実は$\mathrm{tr}(\sigma)=0$と$\det(\sigma)=-1$の条件下においては，σがユニタリー行列であることとσがエルミート行列であることとは同値である。そこで，エルミート行列であって，（3）と（4）を満たす行列全体の集合即ち，

$$\mathcal{S}_{\mathcal{P}} := \{\sigma \in M_2(\mathbb{C}) \mid \mathrm{tr}(\sigma)=0,\ \det(\sigma)=-1,\ \sigma^*=\sigma\}$$

を考えると，これがとても興味深い集合であることがわかる。（もちろん$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$の元は(1)を満たしている）この$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$は目に見えるのである。実際，$\sigma\in\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$なら$a, b, c\in\mathbb{R}$を使って

$$\sigma=\begin{pmatrix} a & b-ci \\ b+ci & -a \end{pmatrix} \tag{5}$$

と書け，その行列式が-1だから$a^2+b^2+c^2=1$となる。従って，$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$は

$$\mathcal{S}_{\mathcal{P}} \approx \{(a,b,c)\in\mathbb{R}^3 \mid a^2+b^2+c^2=1\}$$

なる球面と考えることができる。そこで我々は$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$をパウリ球面と呼ぶことにする。

さらに，

$$\mathcal{P} := \{\sigma\in M_2(\mathbb{C}) \mid \mathrm{tr}(\sigma)=0,\ \sigma^*=\sigma\} \approx \mathbb{R}^3$$

をパウリ空間と呼べば，パウリ球面$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$はパウリ空間$\mathcal{P}$における球面とみなすことができる。（次節で紹介する$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$の特別な3つの元がパウリ行列と呼ばれていることから命名した。）

2×2のユニタリー行列全体は普通$U(2)$で表し，行列式が1のユニタリー行列をspecialと呼び，$SU(2)$で表す。即ち，

$$SU(2) = \{\sigma\in M_2(\mathbb{C}) \mid \sigma\sigma^* = I,\ \det(\sigma)=1\}$$

これは最も有名なリー群（あるいはは古典群）と言ってよいだろう。$SU(2)$は4次元における3次元球面と見ることができる。実際，

$$A=\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \in SU(2)$$

とすれば，$\delta=\overline{\alpha}$と$\gamma=-\overline{\beta}$を得る。従って，$\alpha=a+bi,\ \beta=c+di\ (a,b,c,d\in\mathbb{R})$とすれば

$$A=\begin{pmatrix} a+bi & c+di \\ -c+di & a-bi \end{pmatrix} \tag{6}$$

となり，この行列式が1であるから，$a^2+b^2+c^2+d^2=1$を得る。即ち，

$$SU(2)\approx S^3=\{(a,b,c,d)\in\mathbb{R}^4 \mid a^2+b^2+c^2+d^2=1,\ a,b,c,d\in\mathbb{R}\}$$

また，行列式が-1のユニタリー行列は

$$iSU(2) := \{i\sigma \mid \sigma\in SU(2)\}$$

と書けることは明らかであろう。（$iSU(2)$は群ではないが，$SU(2)$の元とiをかけることで1:1対応する。）従って

$$iSU(2)\cap\mathcal{P}=\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$$

という関係がわかる。実際，$iSU(2)\cap\mathcal{P}$は行列式が-1，トレースゼロのエルミート行列だから，$iSU(2)\cap\mathcal{P}\subset\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$が言える。逆に$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$はトレースゼロで行列式が$-1$のエルミート行列でもユニタリー行列でもあるわけだから$iSU(2)\cap\mathcal{P}\supset\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$が言える。

幾何的には，3次元球$iSU(2)$をパウリ空間で切った切り口がパウリ球面$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$（通常の2次元球面）なのである。

3　パウリ行列

量子力学では電子を記述するのに，パウリ球面$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$上の特別な3つの元が使われる。それらの行列を$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$とすれば，反交換関係

$$\sigma_2\sigma_1=-\sigma_1\sigma_2 \tag{7}$$

を満たしている。

さらに，ベクトルのように$\vec{\sigma}=(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)$で表し，このベクトルが角運動量の交換関係から

$$\vec{\sigma}\times\vec{\sigma}=2i\,\vec{\sigma}$$

をも満たしている。ここで演算×は空間ベクトルで使われる通常の外積と同じルールで計算するという意味である。$\vec{a}$を通常の空間ベクトルとすれば，もちろん$\vec{a}\times\vec{a}=\vec{0}$であるが，行列の積は非可環なので，同じ演算でもゼロにならないのである。実際，

$$\vec{\sigma}\times\vec{\sigma}=(\sigma_2\sigma_3-\sigma_3\sigma_2,\ \sigma_3\sigma_1-\sigma_1\sigma_3,\ \sigma_1\sigma_2-\sigma_2\sigma_1) \tag{8}$$

なので，特に第３座標に着目すると，

$$\sigma_1\sigma_2-\sigma_2\sigma_1=2i\sigma_3$$

が成り立つ。これに（7）を代入すれば

$$\sigma_1\sigma_2=i\sigma_3 \tag{9}$$

を得る。まとめると，$\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3$はパウリ球面$\mathcal{S_P}$の元で，（7），（9）を満たす行列であるということである。同様に，（8）の第１座標，第２座標に注目すると$\sigma_2\sigma_3=i\sigma_1$と$\sigma_1\sigma_2=i\sigma_3$を得るが，実は（7），（9）と$\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3$が$\mathcal{S_P}$の元であることだけを使って，これら２式や（7）以外の反交換関係$\sigma_2\sigma_3=-\sigma_3\sigma_2$，$\sigma_1\sigma_2=-\sigma_2\sigma_1$も代数的に導ける。従ってこれらの等式をわざわざ言う必要はない。

さて，この$\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3$をパウリ行列と呼ぶ立場もあるが，通常はもっと具体的な３つの行列を指してパウリ行列と呼んでいる。それを紹介する前に，$\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3\in\mathcal{S_P}$で（7），（9）を満たす行列がどのくらいあるのかを線形代数の言葉で記述してみる。まず，$\sigma,\tau\in\mathcal{P}$に対して

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

と定義すると，これは$\mathcal{P}$における内積（Hilbert-Schmidt内積）となる。$\mathcal{P}$の元は$\sigma^*=\sigma$を満たすので，

$$\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\begin{pmatrix} a & b-ci \\ b+ci & -a\end{pmatrix}\begin{pmatrix} a' & b'-c'i \\ b'+c'i & -a'\end{pmatrix}\right)$$
$$=aa'+bb'+cc'\in\mathbb{R}$$

となり，$\mathcal{P}$と$\mathbb{R}^3$の

$$\begin{pmatrix} a & b-ci \\ b+ci & -a\end{pmatrix}\leftrightarrow(a,b,c)$$

による同一視は単にベクトル空間としてではなく，ユークリッド空間として（内積も込めて）同一視できるのである。

（7）と（9）を満たす$\mathcal{S_P}$の元のトリプル$\vec{\sigma}$はこの内積に関して$\mathcal{P}$の正規直交基底であることがわかる。実際，$(\sigma_s,\sigma_s)=1$は（1）より明らか（$s=1,2,3$）。また，反交換関係（7）から$\mathrm{tr}(\sigma_1\sigma_2)=-\mathrm{tr}(\sigma_1\sigma_2)$だから$2\mathrm{tr}(\sigma_1\sigma_2)=0$となり，$(\sigma_1,\sigma_2)=0$を得る。さらに（7）と（9）から他の反交換関係も導けるので，$(\sigma_2,\sigma_3)=(\sigma_3,\sigma_1)=0$を得る。注意として，$\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3\in\mathcal{S_P}$を仮定したわけだが，$\sigma_1,\sigma_2\in\mathcal{S_P}$と（7），（9）を仮定するだけでもよいのである（$\sigma_3$は自動的に$\mathcal{S_P}$に入る）。

逆に，$\{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3\}$を$\mathcal{P}$の勝手な正規直交基底とすれば，これらはパウリ球面$\mathcal{S_P}$の元で，（7），（9）又は$\sigma_1\sigma_2=-i\sigma_3$を満たす。実際，

$$\sigma=\begin{pmatrix} a & b-ci \\ b+ci & -a\end{pmatrix}\in\mathcal{P}$$

において，$(\sigma,\sigma)=1\Leftrightarrow a^2+b^2+c^2=1\Leftrightarrow\det\sigma=-1$なので，$\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3\in\mathcal{S_P}$を得る。（特に（1）も満たす。）また，$\mathcal{P}$の元$\sigma,\tau$に対して，$(\sigma,\tau)=0$ならば，再びCayley-Hamiltonの定理から，

$$(\sigma+\tau)^2-\mathrm{tr}(\sigma+\tau)(\sigma+\tau)+\det(\sigma+\tau)I=O.$$

よって，ある$u\in\mathbb{C}$があって，$\sigma\tau+\tau\sigma=uI$. ところが，両辺のトレースを取れば，$0=2u$. よって$u=0$，即ち$\sigma\tau+\tau\sigma=O$となるから，$\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3$のどのペアにも反交換関係がある。

さて，（1）より$(\pm i\sigma_1\sigma_2,\sigma_1)=(\pm i\sigma_1\sigma_2,\sigma_2)=0$が言え（$\sigma_1\sigma_2$は$\mathcal{P}$の元ではないが$\pm i\sigma_1\sigma_2$は$\mathcal{P}$の元），$(\pm i\sigma_1\sigma_2,\pm i\sigma_1\sigma_2)=1$なので，３次元ユークリッド空間$\mathcal{P}$において，$\sigma_3$は$i\sigma_1\sigma_2$か又は$-i\sigma_1\sigma_2$のどちらかとなる。即ち，$\sigma_3=i\sigma_1\sigma_2$又は$\sigma_3=-i\sigma_1\sigma_2$を得る。

さて，もちろん$\mathcal{S_P}$上に正規直交基底はいくらでも取れるわけだが，電子の記述に使われるパウリ行列は，その中で標準的な行列３つに対して使うのが普通である。まず，$\sigma\in\mathcal{S_P}$ならばσの固有値は１と-1とである。従って，σがある平面に作用していると考えれば（σを平面の線型変換と考えるということ，

$$\sigma\sim\tau:=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

（σとτは相似，即ち，これらは線型変換としては同じ）となる。（$\mathcal{S_P}$の元はすべて線型変換としてτに等しいのである！）さらに詳しく言えば，σの固有ベクトルをその平面の基底に取れば，変換σを表す行列はτになるということである。しかも，σはエルミート行列なので，それらの固有ベクトルは直交している。（固有値が１と-1である行列はすべてτに相似であるわけだが，もちろんそれらの行列がすべて$\mathcal{S_P}$の元というわけではない。）ここでの直

交とは，複素内積が0という意味である。よって τ のこの実平面への作用は，上記直交基底に関して上下を入れ換える変換と考えてよい。量子力学では通常これを σ_3 と置く：

$$\sigma_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$$

次に，上記固有ベクトルを交換する行列を σ_1, 即ち，

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$$

とする。この σ_1 も $\mathcal{S_P}$ の元であり，σ_3 と直交していることはすぐにわかる。最後に σ_2 は（9）を使って確定する。即ち，

$$\sigma_2=\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}$$

となる。もちろんこの σ_2 も $\mathcal{S_P}$ の元で，σ_3 にも σ_1 にも直交している。これら3つを量子力学ではパウリ行列と呼んでいる。

量子力学では行列を変換と考えているので，最初の σ_3 は，上記のようにパウリ球面 $\mathcal{S_P}$ のどの元を取ってきてもいいわけである。こう考えると，パウリ空間 $\mathcal{P}$ の勝手な正規直交基底をパウリ行列と呼ぶのが自然であろう。

$\mathcal{S_P}$ の元を行列の成分で表そうとすれば，（5）のように表すのは自然である。実はその座標系（a, b, c）（パウリ空間の自然な座標系）の基本ベクトルは順に上記 $\sigma_3, \sigma_1, \sigma_2$ になっている（数学的には $\sigma_3\mapsto\sigma_1$, $\sigma_1\mapsto\sigma_2$, $\sigma_2\mapsto\sigma_3$ に変えた方が自然だが）。従って，パウリ空間の自然な基本ベクトルがパウリ行列と言える。

また，2次行列 σ が，上記のように平面へ作用していると考え，次の要求をする：その平面のある直交基底に対して，作用 σ の表現行列が上下変換 τ であると要求する。

すると，あるユニタリー行列 U があって $U^*\sigma U=\tau$ とできるわけだから，$\mathrm{tr}(\sigma)=0$，$\det(\sigma)=-1$，$\sigma^*=\sigma$ なり，$\sigma\in\mathcal{S_P}$ となる。よって，もしこの要求を満たしている2次行列をパウリ行列と呼ぶとするならば，それらは $\mathcal{S_P}$ のどの元であっても構わない。

4　虚球面と虚空間

前節までの議論では，行列が（1）を満たすことから始め，そこから量子力学で使うパウリ行列を再認識した。では，（1）の代わりに

$$\sigma_2=-I$$

を仮定して前節と同じ考察を行うと，どんな行列の集合を得るのだろう。まず，Cayley-Hamiltonの定理により，今度は $\sigma\neq\pm iI$ ならば

$$\mathrm{tr}(\sigma)=0,\ \det(\sigma)=1 \qquad (10)$$

を得る。ここでも，（10）を満たす集合は大きすぎるので，またユニタリー行列を仮定する。すると今度は（10）の条件下において，σ がユニタリー行列であることと σ が反エルミート行列，即ち，$\sigma^*=-\sigma$ であることとは同値となる。さて，

$$\mathcal{S_I}:=\{\sigma\in M_2(\mathbb{C})\mid \mathrm{tr}(\sigma)=0, \det(\sigma)=1, \sigma^*=-\sigma\}$$

とおくと，これがまた球面になる。実際，$\sigma\in\mathcal{S_I}$ なら $a, b, c\in\mathbb{R}$ を使って

$$\sigma=\begin{pmatrix}ai & -b+ci\\b+ci & -ai\end{pmatrix}$$

と書け，その行列式が1だから $a^2+b^2+c^2=1$ となる。従って，$\mathcal{S_I}$ は

$$\mathcal{S_I}\approx\{(a,b,c)\in\mathbb{R}^3\mid a^2+b^2+c^2=1\}\approx\mathcal{S_P}$$

なる球面と考えることができる。$\sigma\in\mathcal{S_P}$ が $\sigma^2=I$ を満たしたように，$\sigma\in\mathcal{S_I}$ は $\sigma^2=-I$ を満たす。そこで我々は $\mathcal{S_I}$ を虚球面と呼ぶことにする。さらに，

$$\mathcal{I}:=\{\sigma\in M_2(\mathbb{C})\mid \mathrm{tr}(\sigma)=0, \sigma^*=-\sigma\}$$

とおけば，$\mathcal{I}=\mathbb{R}^3$ であり，$\mathcal{I}$ を虚空間と呼べば，虚球面 $\mathcal{S_I}$ は虚空間 $\mathcal{I}$ における球面とみなすことができる。さらに前節と同様，$\mathcal{I}$ におけるHilbert-Schmidt内積を考えれば，

$$(\sigma,\tau)=\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\sigma^*\tau)=-\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\sigma\tau)$$

となり，

$$-\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\begin{pmatrix}ai & -b+ci\\b+ci & -ai\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a'i & -b'+c'i\\b'+c'i & -a'i\end{pmatrix}\right)$$
$$=aa'+bb'+cc'\in\mathbb{R}$$

から，$\mathcal{I}$ は $\mathcal{P}$ 同様，ユークリッド空間として $\mathbb{R}^3$ と同一視できるわけである。

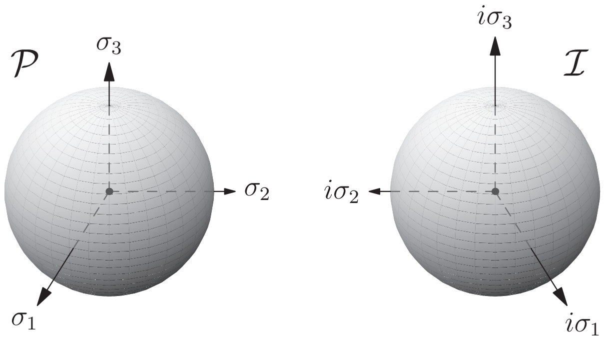

図 1: $M_2(\mathbb{C})$ におけるパウリ球面と虚球面パウリ空間$\mathcal{P}$における単位球がパウリ球面であり，虚空間$\mathcal{I}$における単位球が虚球面である。パウリ空間と虚空間は互いに鏡像のような関係にあり，共通部分は原点だけである。

第２節で定義したリー群$SU(2)$ に関して，

$$SU(2) \cap \mathcal{I} = \mathcal{S}_{\mathcal{I}}$$

という関係もわかる。幾何的には，３次元球$SU(2)$を虚空間$\mathcal{I}$で切った切り口が虚球面$\mathcal{S}_{\mathcal{I}}$である。リー理論の記号を使えば，$\mathcal{I}$はリー群$SU(2)$ のリー環$su(2)$ に等しいので，

$$SU(2) \cap su(2) = \mathcal{S}_{\mathcal{I}}$$

とも書ける。

5　4 元数

さて，パウリ空間$\mathcal{P}$も虚空間$\mathcal{I}$も（図 1），さらに$\mathbb{R}I$を足すことにより，４次元ベクトル空間となり，どちらも$\mathbb{R}^4$と同一視できる。即ち，

$$\mathcal{P} + \mathbb{R}I \approx \mathbb{R}^4, \quad \tilde{\mathcal{I}} := \mathcal{I} + \mathbb{R}I \approx \mathbb{R}^4$$

と書ける。$I^2 = I$よりIはパウリ球面$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$の仲間として，$\mathcal{P} + \mathbb{R}I$を考えるのが自然という見方もあるが，$\tilde{\mathcal{I}}$が決定的に素晴らしいのは，積について閉じているということである。これを示すために，まず虚空間$\mathcal{I}$のよい基底を見つけたい。そこで，前節のパウリ行列 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$に$i$を掛けてみると，

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

は$\mathcal{I}$の正規直交基底になっていることがわかる。さらに前節から，$i\sigma_1 i\sigma_2 = -i\sigma_3$と$i\sigma_1 i\sigma_2 = -i\sigma_2 i\sigma_1$が成り立つから，ハミルトンの４元数を

$$\mathbb{H} = \{a + bi + cj + dk \,|\, a, b, c, d \in \mathbb{R}\}$$

で表せば，

$$I \leftrightarrow 1, \ i\sigma_1 \leftrightarrow i, \ i\sigma_2 \leftrightarrow j, \ i\sigma_3 \leftrightarrow k$$

の対応で$\tilde{\mathcal{I}}$は$\mathbb{H}$と同一視できることが確認できる。故に$\tilde{\mathcal{I}}$は積について閉じているのである。（直交する２元σ, τを$\mathcal{S}_{\mathcal{I}}$上に勝手に取っても，必ず$\sigma\tau = -\tau\sigma$が成り立ち，$\{\sigma, \tau, \sigma\tau\}$ が正規直交基底になることを前節と同様にして示すことができる。）さらに，$\sigma = aI + bi\sigma_1 - ci\sigma_2 + d\sigma_3$とすれば，

$$|\sigma| = \sqrt{(\sigma, \sigma)} = |a + bi + cj + dk|$$

となるので，$\tilde{\mathcal{I}}$と$\mathbb{H}$は上記対応でノルム（絶対値）も等しいのである。通常$\tilde{\mathcal{I}}$は４元数$\mathbb{H}$の行列表現と呼ぶが，$\tilde{\mathcal{I}}$自身を４元数と呼んでもいいわけである。因みに，$\sigma' = a'I + b'i\sigma_1 - c'i\sigma_2 + d'\sigma_3$とすれば，$(\sigma, \sigma') = aa' + bb' + cc' + dd'$となるから，

$$aI + bi\sigma_1 - ci\sigma_2 + d\sigma_3 \leftrightarrow (a, b, c, d)$$

なる対応で，$\tilde{\mathcal{I}}$と$\mathbb{R}^4$はユークリッド空間として同型である。４元数$\mathbb{H}$でこの内積を記述したければ，$x, y \in \mathbb{H}$に対して，xとyの共役を掛けて，その実部をとればよい：$(x, y) := Re(x\bar{y})$。

$\mathbb{H}$の自然な部分集合である複素数の行列表現について考察しておく。通常は$-i\sigma_2 = \left(\begin{smallmatrix} 0 & -0 \\ 1 & 0 \end{smallmatrix}\right)$を使って，

$$\{aI - bi\sigma_2 \,|\, a, b \in \mathbb{R}\} = \left\{ \begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix} \middle| \, a, b \in \mathbb{R} \right\}$$

を複素平面$\mathbb{C} = \{a + bi \,|\, a, b \in \mathbb{R}\}$ と同一視するわけである。ところが，$\sigma_2 = -I$なる行列を取ってくれば常に平面$P_\sigma := \{aI + b\sigma \,|\, a, b \in \mathbb{R}\}$ は，複素平面$\mathbb{C} = \{a + bi \,|\, a, b \in \mathbb{R}\}$ に代数的に等しい。何も$M_2(\mathbb{C})$まで考えなくても，$M_2(\mathbb{R})$の中で複素平面はいくらでも実現できるのである。たとえば$\tau = \left(\begin{smallmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -1 \end{smallmatrix}\right)$でもよいわけである。ただ，$M_2(\mathbb{R})$の中で４元数$\mathbb{H}$を実現できないことは明らかだろう。なぜなら$M_2(\mathbb{R})$は$\mathbb{R}$上既に４次元でなので，実現できるなら$M_2(\mathbb{R})$そのものが$\mathbb{H}$に同型でなければならない。ところが，$M_2(\mathbb{R})$は零因子を持つのでそれは不可能なのである。もちろん，代数を専門とするの人にとっては$M_2(\mathbb{R})$も４元数と呼ぶので，専門家の間では，$\mathbb{H}$をハミルトンの４元数と強調して言うのが普通である。

さて，$-i\sigma_2$は虚球面$\mathcal{S}_{\mathcal{I}}$の元であることに注意されたい。実は$\sigma \in \mathcal{S}_{\mathcal{I}}$を一つ固定すると，$\sigma^2 = -I$であり，$\mathbb{R}I$と$\mathcal{I}$は直交していて，$(\sigma, \sigma) = 1$だから，$|\sigma| = \sqrt{(aI + b\sigma, aI + b\sigma)} = \sqrt{a^2 + b^2} = |a + bi|$となり，$P_\sigma$はノルムも込めて複素平面に等しいのである（行

列のノルムあるいは長さとはHilbert-Schmidt内積から定義される概念である）。これを，単なる複素平面P_τと区別して幾何学的複素平面と呼ぶことにすれば，勝手な元$\sigma\in\mathcal{S}_{\mathcal{I}}$が4元数$\tilde{\mathcal{I}}$に含まれる幾何学的複素平面$P_\sigma$をいくらでも生み出すと言える。ここで幾何学的と言ったのは，上記τを取った場合，$P_\tau=\{aI+b\tau\,|\,a, b\in\mathbb{R}\}$は代数的には複素平面と同じだが，ノルムは違ってくるのである。実際，複素平面P_τの元$aI+b\tau$のノルムは$\sqrt{a^2+\frac{7}{2}b^2}$となる。

ここでもう少し話を掘り下げておこう。上の考察から，$\sigma\in M_2(\mathbb{C})$の元で，$\sigma^2=-I$と（$\sigma,\sigma$）=1を満たせば，$P_\sigma$はノルムも込めて複素平面に等しいと言える。まず，（σ,σ）=1を満たしていても$\sigma^2=-I$を満たすとは限らないことは明らかだろう。たとえば，$\pm\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}$はその例である。

それでは$\sigma^2=-I$と$(\sigma,\sigma)=1$を満たせば$\sigma\in\mathcal{S}_{\mathcal{I}}$は言えるだろうか？まず，$\sigma^2=-I$から$\sigma=\pm iI$又は$\mathrm{tr}(\sigma)=0$, $\det(\sigma)=1$である。いずれにしても$\det(\sigma^*\sigma)=\det(\sigma^*)\det(\sigma)=|\det(\sigma)|=1$である。さらに（$\sigma,\sigma$）=1から$\mathrm{tr}(\sigma^*\sigma)=2$が言えるから，Cayley-Hamiltonの定理から（$(\sigma^*\sigma)^2-2\sigma^*\sigma+I=O$となり，$(\sigma^*\sigma-\mathrm{I})^2=O$を得る。ここで$\sigma^*\sigma-I$はエルミート行列なので，$\sigma^*\sigma-I=O$を得る。（$A$が対角化可能で$A^2=O$ならば$A=O$である。）従って$\sigma$はユニタリー行列となり，$\sigma\in\mathcal{S}_{\mathcal{I}}\cup\{\pm iI\}\subset U(2)$を得る。これによって，$\mathcal{S}_{\mathcal{I}}$の新たな特徴付けを得たわけである。即ち，虚球面$\mathcal{S}_{\mathcal{I}}$は$\sigma^2=-I$を満たす長さ1の行列$\sigma$の集まりから$\{\pm iI\}$を除いた集合である。長さ1の行列全体は7次元球$S^7$と考えてよいので，$\sigma^2=-I$なる条件でかなり小さく（$S^2$と2点に）なったわけである。

また，$\sigma^2=I$なら，$(i\sigma)^2=-I$だから，σの長さが1なら$i\sigma\in\mathcal{S}_{\mathcal{I}}\cup\{\pm iI\}$となり，$\sigma\in i\mathcal{S}_{\mathcal{I}}\cup\{\pm I\}$となる。ところが，

$$i\mathcal{S}_{\mathcal{I}}=\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$$

だから，パウリ球面$\mathcal{S}_{\mathcal{P}}$は$\sigma^2=I$を満たす長さ1の行列$\sigma$の集まりから$\{\pm I\}$を除いた集合である。

6　擬4元数

前節で定義した$\mathcal{P}+\mathbb{R}I$は積について閉じていないので無視すべきか。前節で，単位行列Iを虚空間$\mathcal{I}$の仲間とすることで素晴らしい数，4元数$\tilde{\mathcal{I}}$を生んだのである。次元で考えると，4元数$\tilde{\mathcal{I}}$で4次元，そして，$\mathcal{P}$で3次元を使い，全体の8次元を埋めるにはもう一つ標準的な行列が必要である。iIはどうだろう。$\mathcal{P}$の仲間にiIを入れれば，

$$\tilde{\mathcal{P}}:=\mathcal{P}+\mathbb{R}\,iI$$

も4次元になり，4元数$\tilde{\mathcal{I}}$にiを掛けることで構成されるという点からもしっくりくる。即ち，

$$\tilde{\mathcal{P}}=i\,\tilde{\mathcal{I}}$$

とかけるわけである。さて，$\tilde{\mathcal{P}}$は依然積については閉じていないわけだが，σ，$\tau\in\tilde{\mathcal{P}}$に対して，新しい積を

$$\sigma\cdot\tau:=-i\sigma\tau$$

で定義すると，$\tilde{\mathcal{P}}$はこの積に関して，4元数と全く同じになる（代数として同型）。実際，$\tilde{\mathcal{P}}$はパウリ行列$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$を使って，

$$\tilde{\mathcal{P}}=\mathbb{R}iI+\mathbb{R}\sigma_1+\mathbb{R}\sigma_2+\mathbb{R}\sigma_3$$

と書けるので，まずiIがこの新しい積の単位元になっていることがわかる。また，この積に関して，$\sigma_s^2=\sigma_s\cdot\sigma_s=-i\sigma_s^2=-iI(s=1,2,3)$も満たす。さらに，$\sigma_1\sigma_2=-\sigma_2\sigma_1$だから$\sigma_1\cdot\sigma_2=-\sigma_2\cdot\sigma_1$も満たす。最後に関係式(9)から，$\sigma_1\cdot\sigma_2=-i\sigma_1\sigma_2=-i^2\sigma_3=\sigma_3$を満たす。従って，$\tilde{\mathcal{P}}$はこの新しい積・と

$$iI\leftrightarrow 1,\quad \sigma_1\leftrightarrow i,\quad \sigma_2\leftrightarrow j,\quad \sigma_3\leftrightarrow k$$

なる対応で4元数$\mathbb{H}=\{a+bi+cj+dk\,|\,a, b, c, d\in\mathbb{R}\}$と同一視できるわけである。この意味で我々は$\tilde{\mathcal{P}}$を擬4元数と呼ぶ。（積を少し変形すれば4元数と同じという意味でこう呼んだ。）

7　まとめ

量子力学で頻繁に登場する$M_2(\mathbb{C})$は実数上8次元であり，その部分斜体（部分環であって斜体であること）である4元数$\tilde{\mathcal{I}}$に注目すると，その補空間が擬4元数$\tilde{\mathcal{P}}$である。

$$\begin{aligned}M_2(\mathbb{C})=&\\ &\mathbb{R}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}+\mathbb{R}\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}+\mathbb{R}\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}+\mathbb{R}\begin{pmatrix}i&0\\0&-i\end{pmatrix}\\ &+\mathbb{R}\begin{pmatrix}i&0\\0&i\end{pmatrix}+\mathbb{R}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}+\mathbb{R}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}+\mathbb{R}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\\ &=\tilde{\mathcal{I}}\oplus i\tilde{\mathcal{I}}=\tilde{\mathcal{I}}\oplus\tilde{\mathcal{P}}\end{aligned}$$

後半は4次元同士の分解だが，直交補空間ではない。

$\tilde{\mathcal{P}}$はパウリ空間$\mathcal{P}=\mathbb{R}\sigma_1+\mathbb{R}\sigma_2+\mathbb{R}\sigma_3$に$iI$を加えた空間であり，積を少し変形して4元数になる。代数

の言葉を用いれば，$\tilde{\mathcal{I}}$は４元数と同型な$M_2(\mathbb{C})$の部分斜体であり，$\tilde{\mathcal{P}}$も４元数と同型な$M_2(\mathbb{C})$の（$-i$）-isotope部分斜体である。（一般に環Aの単元uに対して，新たな環u-isotopeとはAの積だけを少し変えた環のことである。少し変えるとは，Aの元x, yの積xyをxuyに置き換えるのである。この積に関して，単位元はu^{-1}であるのは明らかであろう。）リー群$SU(2)$が４元数$\tilde{\mathcal{I}}$に含まれていることは（6）よりわかる。これにより$iSU(2)$が擬４元数$\tilde{\mathcal{P}}$に含まれることもわかる。さらに

$$\begin{aligned} SU(2) &= \{\sigma \in \tilde{\mathcal{I}} \mid \det(\sigma) = 1\} \\ &= \{\sigma \in \tilde{\mathcal{I}} \mid (\sigma, \sigma) = 1\} \\ iSU(2) &= \{\sigma \in \tilde{\mathcal{P}} \mid \det(\sigma) = -1\} \\ &= \{\sigma \in \tilde{\mathcal{P}} \mid (\sigma, \sigma) = 1\} \end{aligned}$$

なる等式も明らかだろう。

本研究では，秋田高専自然科学系成田章教授より，多岐にわたってご教授頂きました。ここに感謝の意を表します。

参考文献

1. T.F. Jordan: Quantum mechanics in simple matrix form, *Dover Pub., Inc.*（1985）
2. J. Baez: The octonions, *Bulletin of the American Mathematical Society* **39** pp.145-205（2006）
3. J.H.コンウェイ：四元数と八元数―幾何，算術，そして対称性，培風館（2006）
4. 堀源一郎：ハミルトンと四元数，海鳴社（2007）
5. 吉井洋二，上林一彦：数としての４元数，秋田高専紀要 **43** pp.136-139（2008）