Onsager 論文の四元数演算子が構成する群の既約表現

2017.5.24　　鈴木　実

1　はじめに

Onsager の 2 次元イジングモデルの厳密解に関する論文 [1] では，1，s_j，C_j，s_jC_j という四元数演算子が現れる．この演算子は，スピン演算子を用いて表現された分配関数に s_js_{j+1} という非線形の演算子が現れるのを回避し，新しい演算子に関して線形にして分配関数の固有値を求める手段として考えだされたものである．

この演算子に関連して，論文の途中で (原著論文 [1] の p.122)，次のような 1，s_j，C_j，s_jC_j の既約表現 (irreducible representation) が出てくる．

$$\mathbf{D}_2(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_2(s_j) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_2(C_j) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_2(s_jC_j) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

これが確かに既約表現になっていることは自分で確認するしかない．独立な 2 次元の基底ベクトルとして，$\mathbf{u}_1$，$\mathbf{u}_2$ を

$$\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

のようにとって，$s_j\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_1$，$s_j\mathbf{u}_2 = -\mathbf{u}_2$，$C_j\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2$，$C_j\mathbf{u}_2 = \mathbf{u}_1$ となることから，基底ベクトルの係数から式 (1) と同じ (2×2) の行列表現を決定することができる．直感的には，これが既約表現になっていることは理解できるが，果たして有限群の既約表現の手続きを経ていないところに不満がある．ここでは群論に従って上記の群の既約表現を導いた時に，結果が式 (1) と同じ既約表現になることを確認してみることにする．(添字の j はここでは本筋に関係ないので以下省略する．)

2　群に関する定義および定理など

既約表現を得るには既約表現の数と次元を知ることが重要である．それは群の指標表を作成すれば求められる．以下では，群論の定義および定理をもとに指標表を導くことになるが，その証明等は適当な教科書など [2, 3, 4, 5] で述べられている．ここでは，以下の関係式および定理を用いる．

- 群の位数

  G を群 (group) とし，G の元の数を位数 (order) といい，g で表す．すなわち，G の元を R_i と書けば

  $$G = \{R_1, R_2, \ldots, R_g\} \tag{3}$$

  である．

- 類 (class)

  $$R_i = R^{-1}R_jR \tag{4}$$

  となるような G の元 R があるとき，R_i と R_i は共役 (conjugate) であるという．このような変換を相似変換 (similarity transformation) という．共役な元の集合を類 (class) という．類は複数存在し，k 番目の類を $\mathscr{C}_k$ と表す．群 G の類の数を n_c，類に含まれる元の数を h_k とする．

- 既約表現

群の元を演算可能な代数で表すことを表現といい，行列が用いられることが多く，行列による表現という．ここでは元 R_i の表現を $\mathscr{R}(R_i)$ と表す．

群を行列で表現したとき，あるユニタリー行列によって相似変換された群の元すべての表現がブロック対角化されて，それ以上対角ブロックの数が多くならない場合，各対角ブロックを既約表現 (irreducible representation) という．

μ 番目の既約表現を $\Gamma^{(\mu)}$ と表す．$\Gamma^{(\mu)}$ は $d_\mu \times d_\mu$，すなわち d_μ 次元の正方行列である．既約表現の数を n_r とする．

- 指標

行列表現のトレース（跡）を指標 (character) といい，χ で表す．元 R_i の指標は $\chi(R_i)$，既約表現 $\Gamma^{(\mu)}$ の指標は $\chi^{(\mu)}(R_i)$ である．すなわち，

$$\chi(R_i) = \mathrm{Tr}\,[\mathscr{R}(R_i)], \quad \chi^{(l)}(R_i) = \mathrm{Tr}\,[\Gamma^{(l)}(R_i)] \tag{5}$$

である．

共役な元の指標は等しい．すなわち，類の指標はすべて等しい．

類の数 n_c は既約表現の数と等しい．すなわち，

$$n_c = n_r \tag{6}$$

である．

- 大直交定理

α 番目，β 番目の既約表現において，

$$\sum_i \Gamma^{(\alpha)}_{\mu\nu}(R_i)^* \Gamma^{(\beta)}_{\mu'\nu'}(R_i) = \frac{g}{d_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'} \tag{7}$$

が成り立つ．これを大直交定理 (the great orthogonality theorem) という．これは，$\Gamma^{(\alpha)}_{\mu\nu}(R)$ と群の元 (R) を成分とするベクトルと考えたとき，α，μ，ν の対応する値のうち 1 つでも異なれば直交する，という意味である．

- 指標に関する第一直交定理

α 番目，β 番目の既約表現において，

$$\sum_{i=1}^{g} \chi^{(\alpha)}_{\mu\nu}(R_i)^* \chi^{(\beta)}_{\mu'\nu'}(R_i) = g\delta_{\alpha\beta} \tag{8}$$

が成り立つ．これを第一直交定理という．

類ごとに総和を取れば，

$$\sum_{k=1}^{n_c} h_k \chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_k)^* \chi^{(\beta)}(\mathscr{C}_k) = g\delta_{\alpha\beta} \tag{9}$$

が成り立つ．h_k は類 $\mathscr{C}_k$ に含まれる元の数である．

式 (9) は類の種類を成分とするベクトルは互いに直交することを示している．後に述べる指標表において，既約表現の指標の一つの行を横ベクトルとみなすと，各ベクトルは互いに直交することを意味している．

- 指標に関する第二直交定理

  i 番目，j 番目の類の既約表現の指標において，

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} \chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_i)^* \chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_j) = \frac{g}{h_i}\delta_{ij} \tag{10}$$

  が成り立つ．これを第二直交定理という．

  この式は，既約表現の種類を成分とするベクトルは互いに直交することを意味している．つまり，同じく指標表の列をベクトルと見た時に，第二直交定理は各列はベクトルとみなしたときに互いに直交しているという意味である．

  E を単位元とすると，単位元を含む類 $\mathscr{C}_1$ の元は 1 個のみであるから，$h_1 = 1$ となり，かつ $\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_1) = d_\alpha$ であるから，

$$\sum_{\alpha=1}^{n_r} d_\alpha^2 = g \tag{11}$$

  が成り立つ．

- 既約表現の数

  可約な行列表現を規約表現の直和に簡略化したときに，同じ既約表現が複数回現れる場合がある．μ 番目の既約表現が現れる回数を a_μ とすると，

$$a_\mu = \frac{1}{g}\sum_k h_k \chi^{(\mu)}(\mathscr{C}_k)^* \chi(\mathscr{C}_k) \tag{12}$$

  が成り立つ．

  後に述べる正規表現の行列の次数は群の位数 g に等しい．その場合，同じ既約表現が現れる数はその既約表現の次数に等しい．すなわち

$$a_\mu = d_\mu \tag{13}$$

  である．

3 演算表

s，C に関する演算は

$$sC = -Cs \tag{14}$$

$$s^2 = 1 \tag{15}$$

$$C^2 = 1 \tag{16}$$

である．論文 [1] にもあるように，1，s，C，sC のみでは群を構成しない．なぜなら，$sCsC = -ssCC = -1$ であるからこの 4 つの元のみでは演算に関して閉じていない．結局，群を構成するには 1，-1，s，$-s$，C，$-C$，sC，$-sC$ の 8 要素が必要であることがわかる．また，それぞれの逆元は 1，-1，s，$-s$，C，$-C$，$-sC$，sC である．$-sC$ と sC を除いてそれぞれの元自身が逆元である．行列表現に際して必要となるので演算表 (multiplication table) を作ると表 1 のようになる． ただし，表は左の項目行で示される元が左から演算し，上の項目列で示される元が左から演算されて結果が交点に表示されている．

表 1: 1, -1, s, $-s$, C, $-C$, sC, $-sC$ の演算表

	1	-1	s	$-s$	C	$-C$	sC	$-sC$
1	1	-1	s	$-s$	C	$-C$	sC	$-sC$
-1	-1	1	$-s$	s	$-C$	C	$-sC$	sC
s	s	$-s$	1	-1	sC	$-sC$	C	$-C$
$-s$	$-s$	s	-1	1	$-sC$	sC	$-C$	C
C	C	$-C$	$-sC$	sC	1	-1	$-s$	s
$-C$	$-C$	C	sC	$-sC$	-1	1	s	$-s$
sC	sC	$-sC$	$-C$	C	s	$-s$	-1	1
$-sC$	$-sC$	sC	C	$-C$	$-s$	s	1	-1

4　類の分類

表 1 により，G の一つの元 R について，G のもう一つの元 S を選んで $S^{-1}RS$ を調べると，R と共役な元がわかる．S として G のすべての元を当てはめれば R と共役な元の全てがわかる．つまり，一つの類が確定する．例えば，R が C の場合，$sCs = -C$ の相似変換演算により C と $-C$ が同じ類に属することがわかる．これを繰り返すことにより，結局次の 5 種類の類が存在することがわかる．すなわち，

$$\mathscr{C}_1 = \{1\}, \quad \mathscr{C}_2 = \{-1\}, \quad \mathscr{C}_3 = \{s, -s\}, \quad \mathscr{C}_4 = \{C, -C\}, \quad \mathscr{C}_5 = \{sC, -sC\} \tag{17}$$

となる．これから，$n_c = 5$ である．

5　群の指標表の作成

指標表 (character table) とは，既約表現の指標を各既約表現と類ごとに整理した表である．この表は指標に関する第一直交定理および第二直交定理が簡単に計算できるように各行，各列が直交関係を満たすベクトルに対応している．具体的には，列方向に類の種類 $\mathscr{C}_i$ を並べ，行方向に既約表現 $\Gamma^{(\alpha)}$ を並べる．計算の利便のため慣例として，列の内容を示す類の名の前にはその類に含まれる元の数 h_i を記すことになっている．

表 1 に示した群は，$g = 8$ である．一方，式 (10) を満たす解は

$$1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 = 8 \tag{18}$$

の 1 組しか無いことが明らかである．したがって，$d_1 = d_2 = d_3 = d_4 = 1$ および $d_5 = 2$ であることがわかる．また，$n_r = 5$ である．

式 (6) からも明らかなように，一般に，類の数 n_c と既約表現の種類の数 n_r は等しい．すなわち，

$$n_c = n_r = 5 \tag{19}$$

以上から，指標表の枠は次のように書くことができる．

$$
\begin{array}{c|ccccc}
 & \mathscr{C}_1 & \mathscr{C}_2 & 2\mathscr{C}_3 & 2\mathscr{C}_4 & 2\mathscr{C}_5 \\
 & \{1\} & \{-1\} & \{s,-s\} & \{C,-C\} & \{sC,-sC\} \\
\hline
\Gamma^{(1)} & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
\Gamma^{(2)} & 1 & & & & \\
\Gamma^{(3)} & 1 & & & & \\
\Gamma^{(4)} & 1 & & & & \\
\Gamma^{(5)} & 2 & & & & \\
\hline
\end{array}
\tag{20}
$$

$\mathscr{C}_1$ は単位元のみであるから，単位行列であり，指標 $\chi^{(i)}(1)$ は各既約表現の次元数 d_i に等しい．したがって，第 1 列は式 (20) に示す通りになる．一方，第 1 行は単位元に見られるような不変，あるいは同一を表す 1 次元既約表現であり，常に指標は 1 になる．したがって，ここまでで指標表のうち式 (20) のところまで決定することができた．

第一直交定理 (9) から，$\alpha = 2 \sim 4$ において，

$$
|\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_1)|^2 + |\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_2)|^2 + 2(|\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_3)|^2 + |\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_4)|^2 + |\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_5)|^2) = 8 \tag{21}
$$

となる．この式と，第 1 行が第 2-3 行と直交しなければならないことから，

$$
|\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_i)| = 1, \quad i = 2 \sim 5, \quad \alpha = 2 \sim 4 \tag{22}
$$

でなければならないことがわかる．

次に第二直交定理 (10) を第 3,4,5 列に適用する．$h_3 = h_4 = h_5 = 2$，$g = 8$ であるから，

$$
\sum_{\alpha=1}^{5} |\chi^{(\alpha)}(\mathscr{C}_i)|^2 = 4 \tag{23}
$$

となる．これと式 (22) から，

$$
\chi^{(5)}(\mathscr{C}_i) = 0, \quad i = 3 \sim 5 \tag{24}
$$

でなければならない．

さらに，第 1 列と第 2 列が直交することと，第 2 列の上から 4 項はたかだか ± 1 であることから，第 2 列の第 2 行から第 4 行まで 1，第 5 行は -2 であることがわかる．以上をまとめると，指標表は

$$
\begin{array}{c|ccccc}
 & \mathscr{C}_1 & \mathscr{C}_2 & 2\mathscr{C}_3 & 2\mathscr{C}_4 & 2\mathscr{C}_5 \\
 & \{1\} & \{-1\} & \{s,-s\} & \{C,-C\} & \{sC,-sC\} \\
\hline
\Gamma^{(1)} & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
\Gamma^{(2)} & 1 & 1 & & & \\
\Gamma^{(3)} & 1 & 1 & & & \\
\Gamma^{(4)} & 1 & 1 & & & \\
\Gamma^{(5)} & 2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
\end{array}
\tag{25}
$$

となる．

まだ決まっていない指標は 3 行 3 列存在するが，ここは ± 1 が入って，各行各列直交することから，各列各行に -1 が 2 つずつ入る．3 つの列うちどの行に入るのかはこれまでの議論からは一義的に決まらない．いまの場合は具体的な表現の中身に依存するので，ここでは仮に

$$
\begin{array}{c|ccccc}
 & \mathscr{C}_1 & \mathscr{C}_2 & 2\mathscr{C}_3 & 2\mathscr{C}_4 & 2\mathscr{C}_5 \\
 & \{1\} & \{-1\} & \{s,-s\} & \{C,-C\} & \{sC,-sC\} \\
\hline
\Gamma^{(1)} & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
\Gamma^{(2)} & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\
\Gamma^{(3)} & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\
\Gamma^{(4)} & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\
\Gamma^{(5)} & 2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
\end{array}
\tag{26}
$$

としておこう．結果は最後にわかる．

以上から求める既約表現の最大次数は 2×2 の行列で表されることがわかる．

6 正規表現の導出と簡約化

群の元の行列による表現を具体的に得るには，対称変換の群におけるような基底関数があれば便利である．一般には適切な基底関数が見つからない場合もある．その場合には群の元同士の演算のみで定義できる正規表現を出発点に用いることができる．ここでは，1，s，C，sC，および -1，$-s$，$-C$，$-sC$ の間の演算のみがわかっているものとして，正規表現から既約表現を導くことにする．

6.1 正規表現

演算子の正規表現 (regular representation) を得るには，表 1 の演算表で左側の行の演算子を逆元にした表を用いる．すなわち，最後の 2 行を表 1 と逆転した次の表をもとに正規表現を求めることができる．

各元の表現を $\mathscr{R}(R_j)$ のように表すと，$\mathscr{R}(R_j)$ は表 2 において，桝目が O に等しい成分は 1，それ以外は 0 にした表が元 R_j の正規表現になる．各元の正規表現を列記すると以下のようになるこのような行列による表現をしても，行列の積は群の演算に対応していることが簡単に証明される [2, 3].

正規表現を用いて各元の表現を具体的に求めると以下のようになる．

$$
\mathscr{R}(1) = \begin{pmatrix}
1&0&0&0&0&0&0&0\\
0&1&0&0&0&0&0&0\\
0&0&1&0&0&0&0&0\\
0&0&0&1&0&0&0&0\\
0&0&0&0&1&0&0&0\\
0&0&0&0&0&1&0&0\\
0&0&0&0&0&0&1&0\\
0&0&0&0&0&0&0&1
\end{pmatrix}
\qquad
\mathscr{R}(-1) = \begin{pmatrix}
0&1&0&0&0&0&0&0\\
1&0&0&0&0&0&0&0\\
0&0&0&1&0&0&0&0\\
0&0&1&0&0&0&0&0\\
0&0&0&0&0&1&0&0\\
0&0&0&0&1&0&0&0\\
0&0&0&0&0&0&0&1\\
0&0&0&0&0&0&1&0
\end{pmatrix}
\tag{27}
$$

表 2: 正規表現を求めるための演算表. 行成分は演算子 $[1]^{-1}$, $[-1]^{-1}$, $[s]^{-1}$, $[-s]^{-1}$, $[C]^{-1}$, $[-C]^{-1}$, $[sC]^{-1}$, $[-sC]^{-1}$. 列成分は演算子 1, -1, s, $-s$, C, $-C$, sC, $-sC$.

	1	-1	s	$-s$	C	$-C$	sC	$-sC$
$[1]^{-1}=1$	1	-1	s	$-s$	C	$-C$	sC	$-sC$
$[-1]^{-1}=-1$	-1	1	$-s$	s	$-C$	C	$-sC$	sC
$[s]^{-1}=s$	s	$-s$	1	-1	sC	$-sC$	C	$-C$
$[-s]^{-1}=-s$	$-s$	s	-1	1	$-sC$	sC	$-C$	C
$[C]^{-1}=C$	C	$-C$	$-sC$	sC	1	-1	$-s$	s
$[-C]^{-1}=-C$	$-C$	C	sC	$-sC$	-1	1	s	$-s$
$[sC]^{-1}=-sC$	$-sC$	sC	C	$-C$	$-s$	s	1	-1
$[-sC]^{-1}=sC$	sC	$-sC$	$-C$	C	s	$-s$	-1	1

$$\mathscr{R}(s)=\begin{pmatrix}0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&11&0&0&0\end{pmatrix}\qquad \mathscr{R}(-s)=\begin{pmatrix}0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\end{pmatrix}\tag{28}$$

$$\mathscr{R}(C)=\begin{pmatrix}0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\end{pmatrix}\qquad \mathscr{R}(-C)=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\end{pmatrix}\tag{29}$$

$$\mathscr{R}(sC)=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\end{pmatrix}\qquad \mathscr{R}(-sC)=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\end{pmatrix}\tag{30}$$

このような行列による表現を既約表現にする方法には特別な方法はないようである．ここでは，普通の直感的な行列の固有値と固有ベクトルを求め，1 つの固有値に属する部分空間が他の行列と一致する場合を探す．つまり，群の全ての元の表現に対し，不変な部分空間を探すのである．1 つの固有値のみでは不変部分空間が形成できない場合には，複数の一次独立な固有ベクトルによる不変部分空間を探すことになる．このようにして全ての固有ベクトルを用いて指標表に対応する不変部分空間とそれに対応する固有ベクトルを見出すことができれば，この固有ベクトルを並べて行列にしたものが，相似変換により同時ブロック対角化するユニタリー行列になることは明らかである．縮退している場合には固有ベクトルは一義的には決まらないので，具体的にどのような固有ベクトルを選ぶのかは試行錯誤によらざるを得ない．ここからは少しその試行錯誤ぶりを含めて書くことにしよう．

6.2 固有値及び固有ベクトル

$\mathscr{R}(s)$ の特性方程式は

$$\begin{aligned}&\begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -\lambda & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} \\ &=(\lambda+1)^4(\lambda-1)^4 = 0 \end{aligned} \tag{31}$$

となり，固有値として $\lambda = \pm 1$ の 4 重根として得られる．同様にして，$\mathscr{R}(C)$ も同じ固有値を持つことがわかる．$\mathscr{R}(sC)$ の固有値は各 $\lambda = \pm 1, \pm \mathrm{i}$ の 2 重根である．

まず，$\mathscr{R}(s)$ の固有ベクトルを求めよう．固有ベクトル $\mathbf{u}$ を

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ t \\ r \\ s \\ u \\ v \end{pmatrix} \tag{32}$$

とすると，$\mathscr{R}(s)\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$ より，$\lambda = 1$ の場合，

$$x = z, \quad y = t, \quad r = v, \quad s = u \tag{33}$$

となり，$\lambda = -1$ の場合，

$$x = -z, \quad y = -t, \quad r = -v, \quad s = -u \tag{34}$$

となる．

$\lambda = 1$ の場合に，意図的に簡単な 1 次独立な規格化した固有ベクトルを求めると，

$$\mathbf{u}'_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}'_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}'_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}'_4 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{35}$$

となるが，表現の具体的な形を見ると，実は

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{36}$$

が共通な固有ベクトルとなることがすぐにわかる．したがって，このような固有ベクトルを得るには上の固有ベクトルを $(\mathbf{u}'_1 \pm \mathbf{u}'_2)/\sqrt{2}$，$(\mathbf{u}'_3 \pm \mathbf{u}'_4)/\sqrt{2}$ のように組み換えればよい．そうすると，

$$\mathbf{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_4 = \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{37}$$

となる．式 (35) に対応する $\lambda = -1$ の直感的に考えられる固有ベクトルは以下のようになる．

$$\mathbf{u}'_5 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}'_6 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}'_7 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}'_8 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{38}$$

$(\mathbf{u}'_5 \pm \mathbf{u}'_6)/\sqrt{2}$，$(\mathbf{u}'_7 \pm \mathbf{u}'_8)/\sqrt{2}$ と組み換えれば固有ベクトルを求めると次のようになる．

$$\mathbf{u}_5 = \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_6 = \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_7 = \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_8 = \frac{1}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{39}$$

6.3 共通不変部分空間

ここで得られた $\mathbf{u}_j$ に $\mathscr{R}(R_i)$ を作用させた $\mathscr{R}(R_i)\mathbf{u}_j$ の結果をまとめると次表のようになる．

$$
\begin{array}{r|cccccccc}
\mathscr{R}(R_i)\backslash\mathbf{u}_j & \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \mathbf{u}_3 & \mathbf{u}_4 & \mathbf{u}_5 & \mathbf{u}_6 & \mathbf{u}_7 & \mathbf{u}_8 \\
\hline
\mathscr{R}(1) & \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \mathbf{u}_3 & \mathbf{u}_4 & \mathbf{u}_5 & \mathbf{u}_6 & \mathbf{u}_7 & \mathbf{u}_8 \\
\mathscr{R}(-1) & \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & -\mathbf{u}_3 & -\mathbf{u}_4 & \mathbf{u}_5 & -\mathbf{u}_6 & \mathbf{u}_7 & -\mathbf{u}_8 \\
\mathscr{R}(s) & \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \mathbf{u}_3 & \mathbf{u}_4 & -\mathbf{u}_5 & -\mathbf{u}_6 & -\mathbf{u}_7 & -\mathbf{u}_8 \\
\mathscr{R}(-s) & \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & -\mathbf{u}_3 & -\mathbf{u}_4 & -\mathbf{u}_5 & \mathbf{u}_6 & -\mathbf{u}_7 & \mathbf{u}_8 \\
\mathscr{R}(C) & \mathbf{u}_1 & -\mathbf{u}_2 & \mathbf{u}_6 & -\mathbf{u}_8 & \mathbf{u}_5 & \mathbf{u}_3 & -\mathbf{u}_7 & -\mathbf{u}_4 \\
\mathscr{R}(-C) & \mathbf{u}_1 & -\mathbf{u}_2 & -\mathbf{u}_6 & \mathbf{u}_8 & \mathbf{u}_5 & -\mathbf{u}_3 & -\mathbf{u}_7 & \mathbf{u}_4 \\
\mathscr{R}(sC) & \mathbf{u}_1 & -\mathbf{u}_2 & -\mathbf{u}_6 & \mathbf{u}_8 & -\mathbf{u}_5 & \mathbf{u}_3 & \mathbf{u}_7 & -\mathbf{u}_4 \\
\mathscr{R}(-sC) & \mathbf{u}_1 & -\mathbf{u}_2 & \mathbf{u}_6 & -\mathbf{u}_8 & -\mathbf{u}_5 & -\mathbf{u}_3 & \mathbf{u}_7 & \mathbf{u}_4
\end{array}
\tag{40}
$$

この表からわかることは，$\mathbf{u}_1$，$\mathbf{u}_2$，$\mathbf{u}_5$，$\mathbf{u}_7$ はそれぞれの基底ベクトル張る 1 次元の部分空間は群を構成する全ての元の行列表現に関して不変であることがわかる．つまり，$\mathbf{u}_1$，$\mathbf{u}_2$，$\mathbf{u}_5$，$\mathbf{u}_7$ を基底ベクトルにすると，対応する部分は対角化できる．一方，$\mathbf{u}_3$ と $\mathbf{u}_6$ で張る 2 次元の部分空間は行列表現に対して閉じていて不変部分空間になっている．したがって，$\mathbf{u}_3$ と $\mathbf{u}_6$ を隣り合う基底ベクトルに取ることにより，2×2 のブロック対角化が可能である．同様に，$\mathbf{u}_4$ と $\mathbf{u}_8$ で張る 2 次元の部分空間も不変部分空間になっており，$\mathbf{u}_4$ と $\mathbf{u}_7$ を隣り合う基底ベクトルに取ることにより，2×2 のブロック対角化が可能である．

6.4 既約表現

以上から，

$$T = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_5, \mathbf{u}_7, \mathbf{u}_3, \mathbf{u}_6, \mathbf{u}_4, \mathbf{u}_8\} \tag{41}$$

とすると，$T^{-1} = {}^{\mathrm{t}}T$ であるから，式 (38) の表から簡単に同時ブロック対角化することができる．つまり，表の列が $\mathbf{u}_j$ で，左の行の中から元に対応する行を選び左から $\mathbf{u}_i$ を作用させると対応する枠にある基底ベクトルと一致すれば 1 または -1，一致しない場合は 0 となってこれが T によって相似変換された行列の (i,j) 成分になる．このようにして得られた行列による既約表現を以下に示す．

$$
T^{-1}\mathscr{R}(1)T = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\quad
T^{-1}\mathscr{R}(-1)T = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1
\end{pmatrix}
\tag{42}
$$

$$T^{-1}\mathscr{R}(s)T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad T^{-1}\mathscr{R}(-s)T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{43}$$

$$T^{-1}\mathscr{R}(C)T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad T^{-1}\mathscr{R}(-C)T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{44}$$

$$T^{-1}\mathscr{R}(sC)T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad T^{-1}\mathscr{R}(-sC)T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{45}$$

これで正規表現のブロック対角化ができた．しかし，よく見ると，5 番目の既約表現 $\Gamma^{(5)}$ が第 5 行から第 8 行，第 5 列から第 8 列にあるが，前の既約表現と後ろの既約表現が異なる．第 2 節で述べたように，$\Gamma^{(5)}$ は $d_5 = 2$ であるから $\Gamma^{(5)}$ が 2 回現れないといけない．このような結果になったのは，第 7 列，第 8 列の符号が反対になっているからである．この符号を直すには例えば基底ベクトル $\mathbf{u}_8$ の符号を反対にすればよい．すなわち，

$$\mathbf{u}_8 = \frac{1}{\sqrt{8}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{46}$$

とすると，式 (41) の表で，$\mathbf{u}_4$ 列の $\mathbf{u}_8$ の符号と $\mathbf{u}_8$ 列の $\mathbf{u}_4$ の符号が反転する．その結果，同時ブロック対角化された行列は最終的に次のようになる．

$$T^{-1}\mathscr{R}(1)T = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix} \quad T^{-1}\mathscr{R}(-1)T = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&-1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&-1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&-1&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&-1 \end{pmatrix} \tag{47}$$

$$T^{-1}\mathscr{R}(s)T = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&-1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&-1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&-1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&-1 \end{pmatrix} \quad T^{-1}\mathscr{R}(-s)T = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&-1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&-1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&-1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&-1&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&1 \end{pmatrix} \tag{48}$$

$$T^{-1}\mathscr{R}(C)T = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&-1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&-1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&1\\ 0&0&0&0&0&0&1&0 \end{pmatrix} \quad T^{-1}\mathscr{R}(-C)T = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&-1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&-1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&-1&0&0\\ 0&0&0&0&-1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&-1\\ 0&0&0&0&0&0&-1&0 \end{pmatrix} \tag{49}$$

$$T^{-1}\mathscr{R}(sC)T = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&-1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&-1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&-1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&1\\ 0&0&0&0&0&0&-1&0 \end{pmatrix} \quad T^{-1}\mathscr{R}(-sC)T = \begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&-1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&-1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&-1&0&0\\ 0&0&0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&-1\\ 0&0&0&0&0&0&1&0 \end{pmatrix} \tag{50}$$

これから，Onsager の論文 [1] に記載されている 1，s，C，sC の既約表現が式 (1) の通りであることがわかる．

また，式 (26) で仮に決めておいた指標 $\chi^{(\mu)}(\mathscr{C}_i)$ $(\mu, i = 2, 3, 4)$ が結局正しかったこともわかる．

参考文献

[1] Lars Onsager, "Crystal Statitics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition", Phys. Rev. **65**, 117-149 (1944). `http://www.totoha.net/archiv/3582.pdf`

[2] Michael Tinkham, "Group Theory and Quantum Mechanics", McGraw-Hill, New York, (1964).

[3] M. S. Dresselhaus, "Application of Group Theory to the Physics of Solids", MIT, (2002).
この本は 787 頁もある．インターネットで無料でダウンロードできる．
`http://web.mit.edu/course/6/6.734j/www/group-full02.pdf`

[4] Dimitri Vvegensky, "Group Theory", Imperial College London.
`http://www.cmth.ph.ic.ac.uk/people/d.vvedensky/courses.html`

[5] 綿村哲, "群の表現",
`http://www.tuhep.phys.tohoku.ac.jp/~watamura/kougi/GP2012_3.pdf`