任意の方向を回転軸とする 3 次元の回転を表す回転行列について

2014.8.12　　鈴木　実

[1] 任意方向の回転軸とは

3 次元の回転を回転行列で表そうとする時，回転軸が座標軸の場合には基本的に 2 次元座標軸の回転と同じであるから，簡単に表すことができる．オイラーの角の場合においても，任意の回転軸の回りの 3 次元の回転であるが，座標軸の回りの回転を組み合わせることで構成できるので，回転行列も行列の積の形で簡単に導くことができる．ところが，回転軸が任意に与えられた場合，この回転軸の回りの回転を座標軸の回転に分解して，対応するオイラーの角を知ることは簡単ではない．

そこで，図形的に任意の方向を回転軸とする場合の 3 次元の回転を表す回転行列 $\widetilde{R}$ を直接求めてみよう．このような回転行列は，たとえば，点群の指標表を作るときに役に立つ．同じ類の対称回転操作を行列にするために，基底関数 $f(x, y, z)$ を用いる．$\mathbf{r} = (x, y, z)$ が対称操作の後に $\mathbf{r}' = (x', y', z')$ に変わったとすると，対称操作後に $\mathbf{r} = \widetilde{R}\mathbf{r}'$ となるので，基底関数は $f(\widetilde{R}\mathbf{r})$ となり，$f(\mathbf{r})$ の 1 次結合係数を調べれば良い．このような時に，たとえば，$< 111 >$ 方向を回転軸とする $\pi/6$ 回転の回転行列 $\widetilde{R}$ というのは必ずしも自明というわけではない．したがって，ここでいう，任意方向の回転軸の周りの回転行列という一般式を求めておけば，このような場合に有用ということがわかる．

3 次元空間の点 $\mathbf{r}$ を，回転軸 $\mathbf{n}$ の回りに θ だけ回転した点を $\mathbf{r}'$ とする．$\mathbf{r}$ の $\mathbf{n}$ 方向成分 (射影) を $\mathbf{p}$ とする．そのとき，

$$\mathbf{u} = \mathbf{r} - \mathbf{p} \tag{1}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{r}' - \mathbf{p} \tag{2}$$

としよう．原点 O に対し $\mathbf{p}$ の先端の点を P とすると，図 1 に示すように，$\mathbf{r}'$ は，P を含み $\mathbf{n}$ に垂直な平面内において，P を中心とする半径 $|\mathbf{u}|$ の円 P の円周上に位置する．

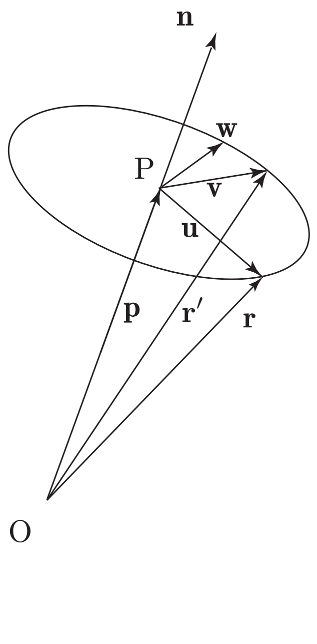

図 1

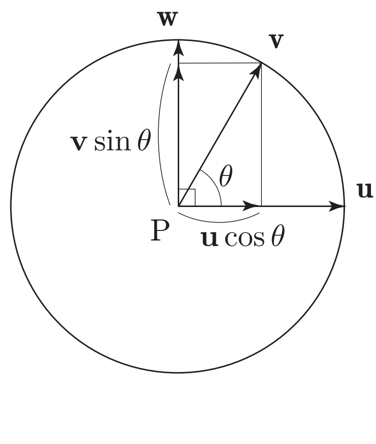

図 2

$\mathbf{u}$ を円 P がある面内で点 P の回りに $\pi/2$ 回転させたベクトルを $\mathbf{w}$ としよう．明らかに，$\mathbf{n}$ は単位ベクトル

であるから，$\mathbf{w}$ はベクトル積を用いて次のように表すことができる．

$$\mathbf{w} = \mathbf{n} \times \mathbf{u} \tag{3}$$

$\mathbf{v}$ は $\mathbf{u}$ を θ 回転させたベクトルであるから，図 2 のような配置をしていて，これから次のように表すことができる．

$$\mathbf{v} = \mathbf{u}\cos\theta + \mathbf{w}\sin\theta \tag{4}$$

一方，$\mathbf{p}$ は次のように表すことができる．

$$\mathbf{p} = \mathbf{n}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}) = (\mathbf{n}\circ\mathbf{n})\mathbf{r} \tag{5}$$

$\mathbf{n}\circ\mathbf{n} = \mathbf{n}\,{}^{\mathrm{t}}\mathbf{n}$ は dyad である．式 (4) と式 (5) を式 (2) に代入すると，

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= (\mathbf{n}\circ\mathbf{n})\mathbf{r} + \mathbf{u}\cos\theta + \mathbf{n}\times\mathbf{u}\sin\theta \\ &= (\mathbf{n}\circ\mathbf{n})\mathbf{r} + [\mathbf{r} - (\mathbf{n}\circ\mathbf{n})\mathbf{r}]\cos\theta + \mathbf{n}\times[\mathbf{r} - (\mathbf{n}\circ\mathbf{n})\mathbf{r}]\sin\theta \end{aligned} \tag{6}$$

となる．これを整理すると，$\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\circ\mathbf{n})\mathbf{r} = 0$ であるから，

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r}\cos\theta + (\mathbf{n}\circ\mathbf{n})\,\mathbf{r}(1-\cos\theta) + \mathbf{n}\times\mathbf{r}\sin\theta \tag{7}$$

となる．ベクトル積は $\mathbf{n}$ の成分 n_x，n_y，n_z を用いて次のように 2 階のテンソル $\widetilde{N}$ で表すことができる．

$$\widetilde{N} = \begin{pmatrix} 0 & -n_z & n_y \\ n_z & 0 & -n_x \\ -n_y & n_x & 0 \end{pmatrix} \tag{8}$$

単位行列を $\widetilde{I}$ とすると，

$$\mathbf{r}' = \cos\theta\,\widetilde{I}\,\mathbf{r} + (1-\cos\theta)\,(\mathbf{n}\circ\mathbf{n})\,\mathbf{r} + \sin\theta\,\widetilde{N}\mathbf{r} \tag{9}$$

とすることができる．これから，回転行列 $\widetilde{R}$ は

$$\widetilde{R} = \cos\theta\,\widetilde{I} + (1-\cos\theta)\,(\mathbf{n}\circ\mathbf{n}) + \sin\theta\,\widetilde{N} \tag{10}$$

となる．これを行列表示すれば，

$$\widetilde{R} = \begin{pmatrix} \cos\theta + n_x^2(1-\cos\theta) & n_x n_y(1-\cos\theta) - n_z\sin\theta & n_x n_z(1-\cos\theta) + n_y\sin\theta \\ n_x n_y(1-\cos\theta) + n_z\sin\theta & \cos\theta + n_y^2(1-\cos\theta) & n_y n_z(1-\cos\theta) - n_x\sin\theta \\ n_x n_z(1-\cos\theta) - n_y\sin\theta & n_y n_z(1-\cos\theta) + n_x\sin\theta & \cos\theta + n_z^2(1-\cos\theta) \end{pmatrix} \tag{11}$$

となる．式 (11) はロドリゲスの公式 (Rodrigues's formula) と呼ばれる．