回転行列

3 次元ユークリッド空間でのベクトルを回転させる行列を求めます。一般的な回転軸として求めますが、x, y, z 軸周りの回転だけ知っておけば困らないです。
小文字のローマ文字の添え字は 1 から 3 とし、アインシュタインの規約を使っています。

3 次元ユークリッド空間でのベクトルの回転を与える行列を求めます。ベクトルの回転は図 1 のようにある回転軸を設定し、その軸周りで回転させることです。通常は回転変換と言っているときの回転方向は右ねじです。例えば、x, y, z 軸のデカルト座標で z 軸を回転軸とするなら、x 軸から y 軸方向へ角度 α で回転させます。

任意の回転軸の単位ベクトルを $\boldsymbol{n}$ ($|\boldsymbol{n}| = 1$) とし、原点から点 P へのベクトル $\boldsymbol{r}$ を角度 α で回転させるとします。回転後の $\boldsymbol{r}'$ を $\boldsymbol{r}$ と行列の積の形として求めます。$\boldsymbol{r}$ の $\boldsymbol{n}$ 方向の成分は $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n} = |\boldsymbol{r}|\cos\theta$ (θ は $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{n}$ の間の角度) なので、$\boldsymbol{n}$ から点 P へ垂直なベクトル $\boldsymbol{a}$ は

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{r} - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}$$

$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}$ は、$|\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}| = |\boldsymbol{r}|\sin\theta = |\boldsymbol{a}|$ で、$\boldsymbol{n}$ と $\boldsymbol{r}$ による平面に垂直なので、$\boldsymbol{a}$ を 90 度回転させた位置にいます。円周上にいるので

$$|\boldsymbol{a}| = |\boldsymbol{a}'| = |\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}|$$

となっており、$\boldsymbol{a}$ 方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}$ 方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{e}_2$ とすれば

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}' = |\boldsymbol{a}|\cos\alpha\boldsymbol{e}_1 + |\boldsymbol{a}|\sin\alpha\boldsymbol{e}_2 = |\boldsymbol{a}|\frac{\boldsymbol{a}}{|\boldsymbol{a}|}\cos\alpha + |\boldsymbol{a}|\frac{\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}|}\sin\alpha = \boldsymbol{a}\cos\alpha + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})\sin\alpha \\ = (\boldsymbol{r} - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n})\cos\alpha + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})\sin\alpha\end{aligned}$$

よって、回転後の $\boldsymbol{r}'$ は

$$\boldsymbol{r}' = (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n} + \boldsymbol{a}' = (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n} + (\boldsymbol{r} - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n})\cos\alpha + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})\sin\alpha$$

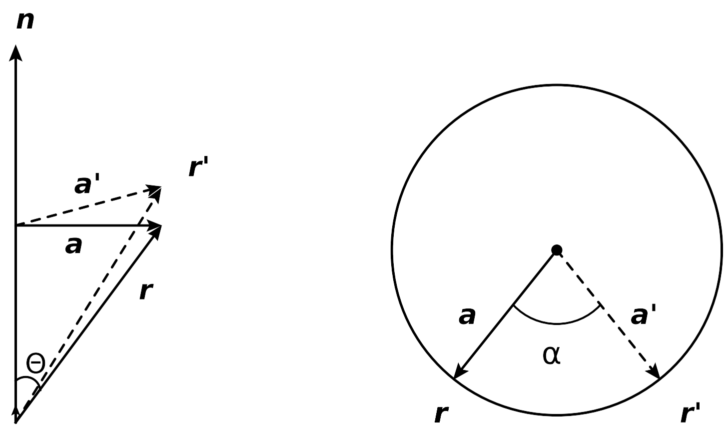

図 1

と求まります。

成分で書くためにレヴィ・チビタ記号 ϵ_{ijk} ($\epsilon_{123} = +1$) を使います。これは

$$
\begin{aligned}
&\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = \cdots = +1 \\
&\epsilon_{132} = \epsilon_{213} = \epsilon_{321} = \cdots = -1 \\
&\epsilon_{111} = \epsilon_{222} = \epsilon_{333} = \epsilon_{122} = \epsilon_{133} = \epsilon_{211} = \cdots = 0
\end{aligned}
$$

となっていて、ϵ_{ijk} の i, j, k の並びの入れ替えが偶数回なら $+1$、奇数回なら -1、同じ添え字が 2 個以上あるときは 0 となる記号です。レヴィ・チビタ記号によってベクトル積は

$$
(\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{w})_i = \sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} v_j w_k
$$

と書けます。

ついでに、和の Σ 記号を書くと煩わしいのでアインシュタインの規約を使います。アインシュタインの規約は 1 つの項に同じ文字の添え字があるとき、Σ 記号が書いてなくても和を取るというものです。例えば

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{3} v_i w_i &\ \Rightarrow\ v_i w_i \qquad (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = v_i w_i) \\
\sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} v_j w_k &\ \Rightarrow\ \epsilon_{ijk} v_j w_k \\
\sum_{i=1}^{3} v_i A_{ij} &\ \Rightarrow\ v_i A_{ij} \\
\sum_{i=1}^{3} A_{ij} v_j &\ \Rightarrow\ A_{ij} v_j \\
\sum_{i=1}^{3} A_{ij} B_{jk} &\ \Rightarrow\ A_{ij} B_{jk}
\end{aligned}
$$

と書いていきます。

レヴィ・チビタ記号を使うことで、成分で書くと

$$
\begin{aligned}
r'_i &= r_a n_a n_i + (r_i - r_a n_a n_i) \cos\alpha + \epsilon_{iab} n_a r_b \sin\alpha \\
&= (n_a n_i + (\delta_{ia} - n_a n_i) \cos\alpha + \epsilon_{iba} n_b \sin\alpha) r_a \\
&= (\delta_{ia} \cos\alpha + n_i n_a (1 - \cos\alpha) + \epsilon_{iba} n_b \sin\alpha) r_a \\
&= R_{ia}(\boldsymbol{n}, \alpha) r_a
\end{aligned} \tag{1}
$$

δ_{ij} ($i = j$ なら 1、$i \neq j$ なら 0) はクロネッカーデルタです。ローマ文字の添え字は 1 から 3 とし、アインシュタインの規約を使っています。

$R(\boldsymbol{n}, \alpha)$ が $\boldsymbol{n}$ 方向を回転軸とする回転変換を与える 3×3 行列です。$R(\boldsymbol{n}, \alpha)$ の成分 (i, j) は

$$(1,1):\delta_{11}\cos\alpha+(1-\cos\alpha)n_1n_1+\epsilon_{1b1}n_b\sin\alpha=\cos\alpha+n_1^2(1-\cos\alpha)$$

$$(1,2):\delta_{12}\cos\alpha+(1-\cos\alpha)n_1n_2+\epsilon_{1b2}n_b\sin\alpha=n_1n_2(1-\cos\alpha)-n_3\sin\alpha$$

$$(1,3):\delta_{13}\cos\alpha+(1-\cos\alpha)n_1n_3+\epsilon_{1b3}n_b\sin\alpha=n_1n_3(1-\cos\alpha)+n_2\sin\alpha$$

$$(2,1):\delta_{21}\cos\alpha+(1-\cos\alpha)n_2n_1+\epsilon_{2b1}n_b\sin\alpha=n_1n_2(1-\cos\alpha)+n_3\sin\alpha$$

$$(2,2):\delta_{22}\cos\alpha+(1-\cos\alpha)n_2n_2+\epsilon_{2b2}n_b\sin\alpha=\cos\alpha+n_2^2(1-\cos\alpha)$$

$$(2,3):\delta_{23}\cos\alpha+(1-\cos\alpha)n_2n_3+\epsilon_{2b3}n_b\sin\alpha=n_2n_3(1-\cos\alpha)-n_1\sin\alpha$$

$$(3,1):\delta_{31}\cos\alpha+(1-\cos\alpha)n_3n_1+\epsilon_{3b1}n_b\sin\alpha=n_1n_3(1-\cos\alpha)-n_2\sin\alpha$$

$$(3,2):\delta_{32}\cos\alpha+(1-\cos\alpha)n_3n_2+\epsilon_{3b2}n_b\sin\alpha=n_2n_3(1-\cos\alpha)+n_1\sin\alpha$$

$$(3,3):\delta_{33}\cos\alpha+(1-\cos\alpha)n_3n_3+\epsilon_{3b3}n_b\sin\alpha=\cos\alpha+n_3^2(1-\cos\alpha)$$

行列で書けば

$$R(\boldsymbol{n},\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha+n_1^2(1-\cos\alpha) & n_1n_2(1-\cos\alpha)-n_3\sin\alpha & n_1n_3(1-\cos\alpha)+n_2\sin\alpha\\ n_1n_2(1-\cos\alpha)+n_3\sin\alpha & \cos\alpha+n_2^2(1-\cos\alpha) & n_2n_3(1-\cos\alpha)-n_1\sin\alpha\\ n_1n_3(1-\cos\alpha)-n_2\sin\alpha & n_2n_3(1-\cos\alpha)+n_1\sin\alpha & \cos\alpha+n_3^2(1-\cos\alpha)\end{pmatrix}$$

$\alpha=0$ のときは単位行列になります。$\alpha=0$ は回転させないことなので、何も変化させない単位行列になるというだけです。

$\boldsymbol{n}$ がデカルト座標での x 軸 , y 軸 , z 軸なら、それぞれの $\boldsymbol{n}$ は

$$\boldsymbol{e}_x=(1,0,0)\ ,\ \boldsymbol{e}_y=(0,1,0)\ ,\ \boldsymbol{e}_z=(0,0,1)$$

なので

$$R(\boldsymbol{e}_x,\alpha)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos\alpha&-\sin\alpha\\0&\sin\alpha&\cos\alpha\end{pmatrix},\ R(\boldsymbol{e}_y,\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha&0&\sin\alpha\\0&1&0\\-\sin\alpha&0&\cos\alpha\end{pmatrix},\ R(\boldsymbol{e}_z,\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha&-\sin\alpha&0\\\sin\alpha&\cos\alpha&0\\0&0&1\end{pmatrix}\tag{2}$$

$R(\boldsymbol{e}_z,\alpha)$ は覚えておくと便利です。また、2 次元での回転は z 軸周りの回転のことなので

$$R^{(2)}(\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha&-\sin\alpha\\\sin\alpha&\cos\alpha\end{pmatrix}\tag{3}$$

となります。

回転行列は指数関数の形にできるので、それを求めます。レヴィ・チビタ記号から

$$(M_1)_{ik}=i\epsilon_{i1k}\ ,\ (M_2)_{ik}=i\epsilon_{i2k}\ ,\ (M_3)_{ik}=i\epsilon_{i3k}$$

として 3×3 行列 $(M_j)_{ik}$ を作ります。$(M_1)_{ik}$ は行列 M_1 の i,k 成分という意味です。i を付けているのは便利だからというだけです (i を省いている場合も多い)。行列の形で書けば

$$M_1=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}\ ,\ M_2=\begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}\ ,\ M_3=\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

この行列を使うと

$$\begin{aligned} i\epsilon_{i1k}n_1 &= (M_1)_{ik}n_1=(n_1M_1)_{ik} \\ i\epsilon_{i2k}n_2 &= (M_2)_{ik}n_2=(n_2M_2)_{ik} \\ i\epsilon_{i3k}n_3 &= (M_3)_{ik}n_3=(n_3M_3)_{ik} \end{aligned}$$

と書けるので

$$i\epsilon_{ijk}n_j=(n_1M_1)_{ik}+(n_2M_2)_{ik}+(n_3M_3)_{ik}=(n_aM_a)_{ik}$$

n_aM_a をベクトルのように

$$n_aM_a=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}\ ,\ (n_aM_a)_{ik}=(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}$$

と表記します。これの 2 乗は

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}=(n_aM_a)_{ij}(n_bM_b)_{jk}=n_an_b(M_a)_{ij}(M_b)_{jk} &= -n_an_b\epsilon_{iaj}\epsilon_{jbk} \\ &= -n_an_b(\delta_{ib}\delta_{ak}-\delta_{ik}\delta_{ab}) \\ &= -n_in_k+n_an_a\delta_{ik} \\ &= -n_in_k+\delta_{ik} \end{aligned}$$

2 行目へは下の補足 1 を見てください。3 乗は

$$(n_aM_a)_{ij}(n_bM_b)_{jl}(n_cM_c)_{lk}=-in_c(\delta_{il}-n_in_l)\epsilon_{lck}=-in_c\epsilon_{ick}+in_in_ln_c\epsilon_{lck}=-in_c\epsilon_{ick}=(n_aM_a)_{ik} \tag{4}$$

最右辺から 2 番目の第 2 項は、レヴィ・チビタ記号の添え字の入れ替えと和を取る添え字の付け替えで

$$n_in_ln_c\epsilon_{lck}=-n_in_ln_c\epsilon_{clk}=-n_in_cn_l\epsilon_{lck}=-n_in_ln_c\epsilon_{lck}$$

となるので、0 です。添え字の付け替えは、Σ 記号を省かずに書けば

$$\sum_{l=1}^{3}\sum_{c=1}^{3} n_i n_l n_c \epsilon_{clk} = \sum_{c=1}^{3}\sum_{l=1}^{3} n_i n_l n_c \epsilon_{clk} = \sum_{a=1}^{3}\sum_{b=1}^{3} n_i n_b n_a \epsilon_{abk}$$

のように、和を取る添え字の文字は自由につけられることを利用したものです。添え字の付け替えは頻繁に出てくるので慣れておくと便利です。

これらを使うと

$$\begin{aligned}
R_{ia} &= \delta_{ia}\cos\alpha + n_i n_a(1-\cos\alpha) + \epsilon_{iba} n_b \sin\alpha \\
&= \delta_{ia}\cos\alpha + n_i n_a - n_i n_a\cos\alpha + \epsilon_{iba} n_b \sin\alpha \\
&= \delta_{ia} - (\delta_{ia} - n_i n_a) + (\delta_{ia} - n_i n_a)\cos\alpha - i(i\epsilon_{iba} n_b)\sin\alpha \\
&= \delta_{ia} - i(i\epsilon_{iba} n_b)\sin\alpha + (\delta_{ia} - n_i n_a)(\cos\alpha - 1) \\
&= \delta_{ia} - i(n_j M_j)_{ia}\sin\alpha + (n_j M_j)_{ib}(n_k M_k)_{ba}(\cos\alpha - 1) \\
&= \delta_{ia} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ia}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ia}(\cos\alpha - 1) \qquad (5)
\end{aligned}$$

ここで捻ったことをします。α で微分すると

$$\frac{dR}{d\alpha} = -i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ia}\cos\alpha - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ia}\sin\alpha$$

これの右辺は

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ib}R_{ba} &= (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ib}(\delta_{ba} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ba}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ba}(\cos\alpha - 1)) \\
&= (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ia} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ib}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ba}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ib}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ba}(\cos\alpha - 1) \\
&= (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ia} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ia}\sin\alpha + ((\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^3_{ia}(\cos\alpha - 1) \\
&= (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ia} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ia}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ia}(\cos\alpha - 1) \\
&= \ -i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ia}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ia}\cos\alpha \\
-i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ib}R_{ba} &= \ -(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ia}\sin\alpha - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ia}\cos\alpha
\end{aligned}$$

と同じなので

$$\frac{dR}{d\alpha} = -i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})R$$

より簡単な求め方は下の補足 2 で示しています。これは行列であることを無視すれば単純な 1 階微分方程式なので、$\alpha = 0$ で単位行列 I になることを初期条件として

$$R(\boldsymbol{n}, \alpha = 0) = I$$

と与えれば

$$R(\boldsymbol{n},\alpha)=\exp[-i\alpha\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}]$$

これが $R(\boldsymbol{n},\alpha)$ と一致することは展開すれば分かります。行列による指数関数の定義から

$$\exp[-i\alpha\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}]=I+(-i\alpha)(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})+\frac{1}{2!}(-i\alpha)^2(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2+\frac{1}{3!}(-i\alpha)^3(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^3+\cdots$$

$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}$ は (4) のために

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}\ ,\ (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2\ ,\ (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^3=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}\ ,\ (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^4=(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2\ ,\ (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^5=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}\ ,\ \ldots$$

と続くので

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^{2k}=(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2\ ,\ (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^{2k-1}=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}\qquad(k=1,2,\ldots)$$

これらから

$$\begin{aligned}\exp[-i(\alpha\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})]&=I+\frac{-i\alpha}{1!}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})+\frac{(-i\alpha)^3}{3!}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})+\cdots\\&\quad+\frac{(-i\alpha)^2}{2!}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2+\frac{(-i\alpha)^4}{4!}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2+\cdots\\&=I+(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2k+1}}{(2k+1)!}+(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2k}}{(2k)!}\end{aligned}$$

$-i$ は

$$-i\ ,\ (-i)^2=-1\ ,\ (-i)^3=i\ ,\ (-i)^4=1\ ,\ (-i)^5=-i\ ,\ (-i)^6=-1\ ,\ \ldots$$

なので

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2k+1}}{(2k+1)!}=-i\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i)^{2k}}{(2k+1)!}\alpha^{2k+1}=-i\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\alpha^{2k+1}=-i\sin\alpha$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2k}}{(2k)!}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-i)^{2k}}{(2k)!}\alpha^{2k}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k)!}\alpha^{2k}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k)!}\alpha^{2k}-1=\cos\alpha-1$$

となり

$$R=I-i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})\sin\alpha+(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2(\cos\alpha-1)$$

$$R_{ij}=\delta_{ij}-i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\alpha+(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha-1)$$

これは (5) と一致しています。

角度が微小なときでは、角度 α の 1 次までで展開した形が使われます。α が微小なら、1 次までの展開は

$$
R = I - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2(\cos\alpha - 1) \simeq I - i\alpha(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}) \quad (\sin\alpha \simeq \alpha\ ,\ \cos\alpha \simeq 1)
$$
$$
R = \exp[-i\alpha(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})] \simeq I - i\alpha(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})
$$

M をレヴィ・チビタ記号に戻すと

$$
R_{ij} \simeq \delta_{ij} - i\alpha(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij} = \delta_{ij} - i\alpha n_k(M_k)_{ij} = \delta_{ij} + \alpha n_k\epsilon_{ikj}
$$

これから、ベクトルの微小回転は

$$
r'_i = R_{ij}r_j = (\delta_{ij} + \alpha\epsilon_{ikj}n_k)r_j = r_i + \alpha\epsilon_{ikj}n_k r_j \ \Rightarrow\ \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \alpha(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})
$$

と与えられます。図 1 から分かるように、α が微小なら $\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r} \simeq \alpha(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r})$ となるからです。

ここでは関係ない話ですが、M_i は回転変換の生成子と呼ばれます。M_i を特徴づけているのは

$$
M_1M_2 - M_2M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = iM_3
$$
$$
M_1M_3 - M_3M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -iM_2
$$
$$
M_2M_3 - M_3M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = iM_1
$$

となっていることで、まとめて

$$
M_iM_j - M_jM_i = i\epsilon_{ijk}M_k
$$

と書けます。この関係は群論の話をするときに重要になります。

回転行列の性質を求めます。角度 α で回転させた後に角度 β で回転させることは角度 $\alpha+\beta$ での回転と同じです。これを R が持っているのか確かめます。2 回回転させることは R を 2 回作用させることなので

$$
\begin{aligned}
R_{ik}(\boldsymbol{n},\alpha)R_{kj}(\boldsymbol{n},\beta) &= \big(\delta_{ik} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}(\cos\alpha - 1)\big)\big(\delta_{kj} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{kj}\sin\beta + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{kj}(\cos\beta - 1)\big) \\
&= \delta_{ik}\delta_{kj} + \delta_{ik}\big(-i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{kj}\sin\beta + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{kj}(\cos\beta - 1)\big) \\
&\quad + \big(-i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}(\cos\alpha - 1)\big)\delta_{kj} \\
&\quad + \big(-i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}(\cos\alpha - 1)\big)\big(-i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{kj}\sin\beta + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{kj}(\cos\beta - 1)\big) \\
&= \delta_{ij} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\beta + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\beta - 1) - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha - 1) \\
&\quad - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{kj}\sin\alpha\sin\beta + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{kj}(\cos\alpha - 1)(\cos\beta - 1) \\
&\quad - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{kj}\sin\alpha(\cos\beta - 1) - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{kj}(\cos\alpha - 1)\sin\beta \\
&= \delta_{ij} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\beta + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\beta - 1)) - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha - 1) \\
&\quad - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}\sin\alpha\sin\beta + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha - 1)(\cos\beta - 1) \\
&\quad - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\alpha(\cos\beta - 1) - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}(\cos\alpha - 1)\sin\beta \\
&= \delta_{ij} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}(\sin\alpha + \sin\beta) - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}(\sin\alpha(\cos\beta - 1) + (\cos\alpha - 1)\sin\beta) \\
&\quad + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha + \cos\beta - 2) - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}\sin\alpha\sin\beta + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha - 1)(\cos\beta - 1) \\
&= \delta_{ij} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}(\sin\alpha + \sin\beta + \sin\alpha\cos\beta - \sin\alpha + \cos\alpha\sin\beta - \sin\beta) \\
&\quad + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha + \cos\beta - 2 - \sin\alpha\sin\beta + \cos\alpha\cos\beta - \cos\alpha - \cos\beta + 1) \\
&= \delta_{ij} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}(\sin\alpha\cos\beta + \cos\alpha\sin\beta) + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha\cos\beta - \sin\alpha\sin\beta - 1) \\
&= \delta_{ij} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin(\alpha+\beta) + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos(\alpha+\beta) - 1) \\
&= R_{ij}(\boldsymbol{n},\alpha+\beta)
\end{aligned}
$$

となり、$\alpha+\beta$ での回転と同じになっています。これから

$$
R(\boldsymbol{n},-\alpha)R(\boldsymbol{n},\alpha) = R(\boldsymbol{n},\alpha)R(\boldsymbol{n},-\alpha) = I
$$

となっているのも分かり、α の回転の後に $-\alpha$ で回転させればもとに戻ることに対応します。積が単位行列になるので、$R(\boldsymbol{n},-\alpha)$ は $R(\boldsymbol{n},\alpha)$ の逆行列 $R^{-1}(\boldsymbol{n},\alpha)$ です。$\boldsymbol{n}$ の符号を反転させると (回転軸の向きを反転させた場合)

$$
\sin(-\alpha) = -\sin\alpha,\ \cos(-\alpha) = \cos\alpha
$$

から

$$
R(\boldsymbol{n},-\alpha) = R(-\boldsymbol{n},\alpha)
$$

なので、$R(-\boldsymbol{n},\alpha)$ も逆行列です。

$R(\boldsymbol{n},\alpha)R(\boldsymbol{n},\beta) = R(\boldsymbol{n},\alpha+\beta)$ を使えば微小な角度による変換から有限の変換が求められます。微小な角度 $\Delta\alpha = \alpha/N$ での回転行列は

$$R(\boldsymbol{n}, \Delta\alpha) = I - i\Delta\alpha(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}) = I - i\frac{\alpha}{N}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})$$

これを N 回行うことで角度は α になるので

$$R(\boldsymbol{n}, \alpha) = R^N(\boldsymbol{n}, \Delta\alpha) = (I - i\frac{\alpha}{N}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}))^N$$

$N\to\infty$ の極限を取ると

$$R(\boldsymbol{n}, \alpha) = \lim_{N\to\infty}(I - i\frac{\alpha}{N}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}))^N$$

これは指数関数そのものなので

$$R(\boldsymbol{n}, \alpha) = \exp[-i\alpha(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})]$$

となり、有限の角度での回転行列となります。

回転行列は直交行列になっていることを示します。転置を t で表すことにして、転置の定義から行列 A, B の和に対して転置は

$$(A+B)^t = A^t + B^t$$

なので

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^t = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}^t = n_1M_1^t + n_2M_2^t + n_3M_3^t = -\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M} \\
&((\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2)^t = ((\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}))^t = (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^t(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^t = (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}) = (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2
\end{aligned}$$

M_i は $M_i^t = -M_i$ です。これらを使うと

$$\begin{aligned}
(R^t)_{ik}R_{kj} &= \big(\delta_{ik} + i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}(\cos\alpha - 1)\big)\big(\delta_{kj} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{kj}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{kj}(\cos\alpha - 1)\big) \\
&= \delta_{ik}\delta_{kj} - i\delta_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{kj}\sin\alpha + \delta_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{kj}(\cos\alpha - 1) + i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}\delta_{kj}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}\delta_{kj}(\cos\alpha - 1) \\
&\quad + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{kj}\sin^2\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{kj}(\cos\alpha - 1)^2 \\
&\quad + i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{kj}\sin\alpha(\cos\alpha - 1) - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ik}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{kj}\sin\alpha(\cos\alpha - 1) \\
&= \delta_{ij} - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha - 1) \\
&\quad + i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha - 1) \\
&\quad + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}\sin^2\alpha + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha - 1)^2 \\
&\quad + i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\alpha(\cos\alpha - 1) - i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})_{ij}\sin\alpha(\cos\alpha - 1) \\
&= \delta_{ij} + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2_{ij}(\cos\alpha - 1 + \cos\alpha - 1 + \sin^2\alpha + (\cos\alpha - 1)^2) \\
&= \delta_{ij}
\end{aligned}$$

RR^t でも同様なので $R^t = R^{-1}$ となり、直交行列と分かります。もしくは

$$\begin{aligned}
R^{\boldsymbol{t}} = (\exp[-i\alpha\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}])^t &= \big(I + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2k+1}}{(2k+1)!} + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M})^2\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2k}}{(2k)!}\big)^t \\
&= I + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}^t)\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2k+1}}{(2k+1)!} + (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}^t)^2\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^{2k}}{(2k)!} \\
&= \ \exp[-i\alpha\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}^t] \\
&= \ \exp[i\alpha\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}]
\end{aligned}$$

なので

$$R^t R = \exp[i\alpha\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}]\exp[-i\alpha\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}] = I$$

行列 A, B が $AB = BA$ のとき $e^{A+B} = e^A e^B$ となることを使っています (量子力学の「ベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式」参照)。

回転変換の行列は直交行列でなければいけないことは簡単に示せます。回転変換の特徴はベクトルの長さを変えないことなので、回転前を $\boldsymbol{v}$、回転後を $\boldsymbol{v}'$ とすれば

$$\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v} = v_i v_i = v'_i v'_i = \boldsymbol{v}'\cdot\boldsymbol{v}'$$

ベクトル成分の回転を

$$v'_i = R_{ij}v_j$$

と与えれば

$$v'_i v'_i = R_{ij}v_j R_{ik}v_k = R_{ij}R_{ik}v_j v_k = v_i v_i$$

これが成立するには

$$R_{ij}R_{ik} = \delta_{jk} \quad (R_{ij}R_{ik}v_j v_k = \delta_{jk}v_j v_k = v_j v_j)$$

行列の積にするには片方を転置すればいいので

$$R_{ij}R_{ik} = (R^t)_{ji}R_{ik} = (R^t R)_{jk} = \delta_{jk} \quad (R^t R = I)$$

これから R^t は R の逆行列と予想できるので R は直交行列になりますが、一応示します。$RA = I$ となる行列 A があるとして

$$R^t R = I$$
$$R^t R A = A$$
$$R^t = A$$

これに R を左からかけると

$$RR^t = RA = I$$

よって、$R^t R = RR^t = I$ から、R^t は R の逆行列 R^{-1} となるので、R は直交行列です。

ベクトル成分の変換として見てきましたが、基底の変換とどう関係しているのかにも触れておきます。適当な基底を $\boldsymbol{e}_i$ $(i = 1, 2, 3)$、これとは別の基底を $\boldsymbol{e}'_i$ とします。$\boldsymbol{e}'_i$ はベクトルなので、$\boldsymbol{e}_i$ による線形結合として

$$\boldsymbol{e}'_1 = S_{11}\boldsymbol{e}_1 + S_{12}\boldsymbol{e}_2 + S_{13}\boldsymbol{e}_3$$
$$\boldsymbol{e}'_2 = S_{21}\boldsymbol{e}_1 + S_{22}\boldsymbol{e}_2 + S_{23}\boldsymbol{e}_3$$
$$\boldsymbol{e}'_3 = S_{31}\boldsymbol{e}_1 + S_{32}\boldsymbol{e}_2 + S_{33}\boldsymbol{e}_3$$

S_{ij} は係数です。これらはまとめて

$$\boldsymbol{e}'_i = S_{ij}\boldsymbol{e}_j \tag{6}$$

と書け、$\boldsymbol{e}_i$ から $\boldsymbol{e}'_i$ への変換の式で、それは 3×3 行列 S で与えられます。

$\boldsymbol{e}'_i$ から $\boldsymbol{e}_i$ への変換として書いた場合を、T_{ij} として

$$\boldsymbol{e}_i = T_{ij}\boldsymbol{e}'_j \tag{7}$$

とすると、ベクトル $\boldsymbol{v}$ はそれぞれの基底に対して

$$\boldsymbol{v} = v'_i\boldsymbol{e}'_i = v'_i S_{ij}\boldsymbol{e}_j = v'_i S_{ij}\boldsymbol{e}_j$$
$$\boldsymbol{v} = v_i\boldsymbol{e}_i = v_i T_{ij}\boldsymbol{e}'_j = v_i T_{ij}\boldsymbol{e}'_j$$

これらから

$$v_j = v'_i S_{ij}\ ,\ v'_j = v_i T_{ij}$$

となり、ベクトル成分の変換の式になります。

S と T の関係を求めます。(6) に T_{ki} をかけて和を取ると

$$T_{ki}\boldsymbol{e}'_i = T_{ki}S_{ij}\boldsymbol{e}_j$$

$$\boldsymbol{e}_k = T_{ki}S_{ij}\boldsymbol{e}_j$$

なので、例えば $k=1$ のとき

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}_1 = T_{1i}S_{ij}\boldsymbol{e}_j &= (T_{11}S_{1j}\boldsymbol{e}_j + T_{12}S_{2j}\boldsymbol{e}_j + T_{13}S_{3j}\boldsymbol{e}_j)\\ &= (T_{11}S_{11} + T_{12}S_{21} + T_{13}S_{31})\boldsymbol{e}_1 + (T_{11}S_{12} + T_{12}S_{22} + T_{13}S_{32})\boldsymbol{e}_2 + \cdots\\ &= T_{1i}S_{i1}\boldsymbol{e}_1 + T_{1i}S_{i2}\boldsymbol{e}_2 + T_{1i}S_{i3}\boldsymbol{e}_3\end{aligned}$$

これから

$$T_{1i}S_{i1} = 1\ ,\ T_{1i}S_{i2} = 0\ ,\ T_{1i}S_{i3} = 0$$

$k=2,3$ の場合も同様なので

$$T_{1i}S_{i1} = T_{2i}S_{i2} = T_{3i}S_{i3} = 1$$

$$T_{1i}S_{i2} = T_{1i}S_{i3} = T_{2i}S_{i1} = T_{2i}S_{i3} = \cdots = 0$$

これらはクロネッカーデルタによって

$$T_{ki}S_{ij} = \delta_{kj} \quad (\boldsymbol{e}_k = T_{ki}S_{ij}\boldsymbol{e}_j = \delta_{kj}\boldsymbol{e}_j)$$

とまとめて書けます。また、(7) に S_{ki} をかけて同じことをすれば $S_{ki}T_{ij}$ として出てきます。というわけで、T_{ij} は S_{ij} の逆行列 $(S^{-1})_{ij}$ です。

このように、基底の変換に対してベクトル成分はその逆行列で変換されます。そして、回転のときは直交行列でないといけないので、変換は

$$\boldsymbol{e}_i = (S^{-1})_{ij}\boldsymbol{e}'_j\ ,\ \boldsymbol{e}'_i = S_{ij}\boldsymbol{e}_j \tag{8}$$

$$v_i = v'_jS_{ji} = (S^t)_{ij}v'_j = (S^{-1})_{ij}v'_j\ ,\ v'_i = v_j(S^{-1})_{ji} = S_{ij}v_j \tag{9}$$

となります。

最初に見た場合は基底を固定してベクトルを回転させたのに対して今は基底を回転させているので、状況が異なっています。別の言い方をすれば、最初の場合はベクトルから別のベクトルへの変換として回転を与え、今の場合は同じベクトルを異なる基底から見ることで回転を与えます。ベクトルそのものを回転させる場合を active point of view、基底を回転させる場合を passive point of view と言い、回転行列 R に対してそれぞれ

$$\text{active} : \boldsymbol{r} = r_1\boldsymbol{e}_1 + r_2\boldsymbol{e}_2 + r_3\boldsymbol{e}_3\ \Rightarrow\ \boldsymbol{r}' = r'_1\boldsymbol{e}_1 + r'_2\boldsymbol{e}_2 + r'_3\boldsymbol{e}_3 \quad (r'_i = R_{ij}r_j)$$

$$\text{passive} : \boldsymbol{r} = r_1\boldsymbol{e}_1 + r_2\boldsymbol{e}_2 + r_3\boldsymbol{e}_3\ \Rightarrow\ \boldsymbol{r} = r'_1\boldsymbol{e}'_1 + r'_2\boldsymbol{e}'_2 + r'_3\boldsymbol{e}'_3 \quad (\boldsymbol{e}'_i = R_{ij}\boldsymbol{e}_j)$$

となっています。回転後のベクトル成分はどちらも同じ (r'_1, r'_2, r'_3) です。

状況が異なっていても同じベクトル成分を与える理由は、2 次元で具体的に見ると分かりやすいです。2 次元デカルト座標での x 軸、y 軸で基底 $\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y$ を与えたとします。2 次元のベクトル成分に対する回転行列は (3) なので、$S = R^{(2)}(\alpha)$ として基底を変換すると

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{e}'_x \\ \boldsymbol{e}'_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_x \\ \boldsymbol{e}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_x\cos\alpha - \boldsymbol{e}_y\sin\alpha \\ \boldsymbol{e}_x\sin\alpha + \boldsymbol{e}_y\cos\alpha \end{pmatrix}$$

これは x, y 軸を右回転（時計回りで回転）させたことに対応します。x, y 軸を角度 α で右回転させたとき、x 軸上のベクトル $\boldsymbol{x} = |\boldsymbol{x}|\boldsymbol{e}_x$ は $\boldsymbol{x}' = |\boldsymbol{x}|\boldsymbol{e}'_x$ になるので

$$\boldsymbol{x}' = |\boldsymbol{x}'|\cos\alpha\boldsymbol{e}_x - |\boldsymbol{x}'|\sin\alpha\boldsymbol{e}_y = |\boldsymbol{x}|\cos\alpha\boldsymbol{e}_x - |\boldsymbol{x}|\sin\alpha\boldsymbol{e}_y \ \Rightarrow\ \boldsymbol{e}'_x = \boldsymbol{e}_x\cos\alpha - \boldsymbol{e}_y\sin\alpha$$

同様に、y 軸に対しては

$$\boldsymbol{y}' = |\boldsymbol{y}|\sin\alpha\boldsymbol{e}_x + |\boldsymbol{y}|\cos\alpha\boldsymbol{e}_y \ \Rightarrow\ \boldsymbol{e}'_y = \boldsymbol{e}_x\sin\alpha + \boldsymbol{e}_y\cos\alpha$$

となるからです。

回転後の基底に対するベクトル成分は

$$r'_i = R_{ij}r_j \ \Rightarrow\ \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\cos\alpha - y\sin\alpha \\ x\sin\alpha + y\cos\alpha \end{pmatrix}$$

これはベクトルを左回転（反時計回りで回転）させた場合になります。例えば $x, y > 0$ として角度 α で x 軸から y 軸方向に回転させたとき、$\boldsymbol{r} = (x, y)$ と x 軸の間の角度を θ とすれば

$$x' = |\boldsymbol{r}|\cos(\alpha+\theta) = |\boldsymbol{r}|\cos\alpha\cos\theta - |\boldsymbol{r}|\sin\alpha\sin\theta = x\cos\alpha - y\sin\alpha$$

$$y' = |\boldsymbol{r}|\sin(\alpha+\theta) = |\boldsymbol{r}|\sin\alpha\cos\theta + |\boldsymbol{r}|\cos\alpha\sin\theta = x\sin\alpha + y\cos\alpha$$

となるからです。加法定理を使っていることから分かるように、幾何学的に示すなら加法定理の証明と同じことをすればいいです。

このベクトル成分と基底の動きは、ベクトルが固定されているとき、回転軸上にいる人が右回転すればベクトルは左回転して見えるということに対応します。このため、右回転させた基底におけるベクトル成分は、固定された基底においてベクトルを左回転させることと同じになります。

ほとんどの場合で active か passive のどちらか片方だけが使われるので混乱することはほぼないですが、同じ回転行列に対してベクトル成分と基底が反対の回転になるのには注意しておくといいです。また、基底の変換を $R_{ij}\boldsymbol{e}_j$ と $\boldsymbol{e}_jR_{ji}$ で書いている場合があり、R_{ij} が (3) なら $R_{ij}\boldsymbol{e}_j$ は基底の右回転、$\boldsymbol{e}_jR_{ji} = \boldsymbol{e}_j(R^t)_{ij} = (R^{-1})_{ij}\boldsymbol{e}_j$ は左回転になります。前者は上で見てきた表記、後者では

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{e}_ir_i = \boldsymbol{e}'_ir'_i = \boldsymbol{e}_jR_{ji}r'_i = \boldsymbol{e}_jR_{ji}(R^{-1})_{ik}r_k$$

という書き方になります。

基底を回転させる例として、極座標 (r,θ,ϕ) での ∇ を回転させることで (x,y,z) との関係を求めます。それぞれの ∇ は、極座標の基底を $\boldsymbol{e}_r,\boldsymbol{e}_\theta,\boldsymbol{e}_\phi$、$x,y,z$ 軸の単位ベクトルを $\boldsymbol{e}_x,\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{e}_z$ として

$$\nabla=\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}=(\frac{\partial}{\partial r},\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta},\ \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi})\begin{pmatrix}\boldsymbol{e}_r\\ \boldsymbol{e}_\theta\\ \boldsymbol{e}_\phi\end{pmatrix}$$

$$\nabla=\boldsymbol{e}_x\frac{\partial}{\partial x}+\boldsymbol{e}_y\frac{\partial}{\partial y}+\boldsymbol{e}_z\frac{\partial}{\partial z}$$

基底に微分は作用しないとして書いています。極座標の基底を $\boldsymbol{e}_x,\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{e}_z$ になるように回転させます。$\boldsymbol{e}_r$ を $\boldsymbol{e}_z$、$\boldsymbol{e}_\theta$ を $\boldsymbol{e}_x$、$\boldsymbol{e}_\phi$ を $\boldsymbol{e}_y$ に重ねるように回転させるなら、$\boldsymbol{e}_\phi$ 軸周りに $-\theta$ 方向へ回転させて $\boldsymbol{e}_r$ を z 軸に一致させ、その $\boldsymbol{e}_r$ 軸周りに $-\phi$ 方向に回転させればいいです。この対応のために基底の並びを変えて

$$\nabla=(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta},\ \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi},\ \frac{\partial}{\partial r})\begin{pmatrix}\boldsymbol{e}_\theta\\ \boldsymbol{e}_\phi\\ \boldsymbol{e}_r\end{pmatrix}$$

と書きます。

極座標にいるとして、その座標軸を回転させます。極座標にいる人からすれば、$\boldsymbol{e}_\theta$ は x 軸、$\boldsymbol{e}_\phi$ 軸は y 軸、$\boldsymbol{e}_r$ 軸は z 軸として見えるので、$\boldsymbol{e}_\phi$ 軸周りの回転は y 軸周りの回転、$\boldsymbol{e}_r$ 軸周りの回転は z 軸周りの回転と同じです。このことから、$\boldsymbol{e}_\theta=\boldsymbol{e}'_x,\ \boldsymbol{e}_\phi=\boldsymbol{e}'_y,\ \boldsymbol{e}_r=\boldsymbol{e}'_z$ と書いて

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{e}_x\\ \boldsymbol{e}_y\\ \boldsymbol{e}_z\end{pmatrix}=R(\boldsymbol{e}''_z,\phi)R(\boldsymbol{e}'_y,\theta)\begin{pmatrix}\boldsymbol{e}'_x\\ \boldsymbol{e}'_y\\ \boldsymbol{e}'_z\end{pmatrix}\qquad(R^{-1}(\boldsymbol{e}''_z,-\phi)R^{-1}(\boldsymbol{e}'_y,-\theta)=R(\boldsymbol{e}''_z,\phi)R(\boldsymbol{e}'_y,\theta))$$

基底の $-\theta,-\phi$ 方向の回転は R において $+\theta,+\phi$ です。$\boldsymbol{e}''_z$ としているのは $\boldsymbol{e}'_y$ 軸周りで回転させると $\boldsymbol{e}'_x,\boldsymbol{e}'_z$ は動くからです。(3) を入れて計算すると

$$\begin{aligned}R(\boldsymbol{e}''_z,\phi)R(\boldsymbol{e}'_y,\theta)&=\begin{pmatrix}\cos\phi&-\sin\phi&0\\ \sin\phi&\cos\phi&0\\ 0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\theta&0&\sin\theta\\ 0&1&0\\ -\sin\theta&0&\cos\theta\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}\cos\theta\cos\phi&-\sin\phi&\sin\theta\cos\phi\\ \cos\theta\sin\phi&\cos\phi&\sin\theta\sin\phi\\ -\sin\theta&0&\cos\theta\end{pmatrix}\end{aligned}$$

これが極座標での ∇ に左から作用するので

$$
\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi & -\sin\phi & \sin\theta\cos\phi \\ \cos\theta\sin\phi & \cos\phi & \sin\theta\sin\phi \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial\theta} \\ \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi} \\ \dfrac{\partial}{\partial r} \end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi\dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi} + \sin\theta\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial r} \\ \cos\theta\sin\phi\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \cos\phi\dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi} + \sin\theta\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial r} \\ -\sin\theta\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r} \end{pmatrix}
$$

よって、微分の関係が

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\
\frac{\partial}{\partial y} &= \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\
\frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}
\end{aligned}
$$

と求まります。

最後にオイラー角を見ておきます。$R(\boldsymbol{n},\alpha)$ は $\boldsymbol{n}$ 軸周りの回転なので、任意の地点 (ベクトルの長さを変えずに動ける範囲内の地点) への回転とはなっていません。任意の位置への回転行列として

$$
\begin{aligned}
R(\alpha,\beta,\gamma) &= R(\boldsymbol{e}_z,\alpha)R(\boldsymbol{e}_y,\beta)R(\boldsymbol{e}_z,\gamma) \\
&= \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta & -\sin\alpha & \cos\alpha\sin\beta \\ \sin\alpha\cos\beta & \cos\alpha & \sin\alpha\sin\beta \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma - \sin\alpha\cos\gamma & \cos\alpha\sin\beta \\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\sin\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma & \sin\alpha\sin\beta \\ -\sin\beta\cos\gamma & -\sin\beta\sin\gamma & \cos\beta \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

と与えた形があり、α,β,γ $(0 \le \alpha < 2\pi,\ 0 \le \beta \le \pi,\ 0 \le \gamma < 2\pi)$ をオイラー角 (Euler angles) と言います。これはベクトルを、まず z 軸周りに γ 回転させ、その次に y 軸周りに β 回転させ、最後に z 軸周りに α 回転させています。これで任意の位置へ行けることは回転の順番を追って見ていけば分かります。

例として、(x_0,y_0,z_0) $(x_0,y_0,z_0>0)$ のベクトルを $(-x,0,-z)$ $(x,z>0)$ へ移動させてみます。まず、z 軸周りの回転で $(x,0,z_0)$ の地点に移動させます。これを y 軸周りに回転させて $(x,0,-z)$ へ移動させ、z 軸周りに回転させれば $(-x,0,-z)$ へ移動できます。この動きを最初の z 軸周りでは 2π まで、y 軸周りでは π まで、最後の z 軸周りでは 2π までとして動かすと、ベクトルの長さを半径とする球を作るように動かせます。このため、$R(\alpha,\beta,\gamma)$ は任意の位置への回転行列となります。

今は z 軸、y 軸、z 軸の回転としてオイラー角を与えましたが、球において x, y, z 軸周りの回転は見方の違いでしかないので、回転の順序を $(z; y; z)$ のように書けば

$$(x; y; x)\ ,\ (x; z; x)\ ,\ (y; x; y)\ ,\ (y; z; y)\ ,\ (z; x; z)\ ,\ (z; y; z)$$

とした回転は全て任意の地点へ移動させます。他にも $(z; y; x)$ としている場合もあり、このときもオイラー角と言っていることがありますが、大抵はタイト・ブライアン角 (Tait-Bryan angles) やカルダン角 (Cardan angles) と呼ばれます。このように、定義がいくつもあるので、オイラー角による回転と言っているときはどの順序の回転なのかを確かめる必要があります。

ちなみに、オイラー角は固定された座標軸に対して物体がどの方向を向いているのかを表すために導入されたので、ベクトルの回転でなく座標軸の回転として出てくることが多いです。

・補足 1

$\epsilon_{abi}\epsilon_{ijk}$ は、a, b と j, k が同じ組み合わせになっていないと 0 になるので、0 にならないのは

$$\epsilon_{12i}\epsilon_{i12} = \epsilon_{123}\epsilon_{312} = +1\ ,\ \epsilon_{21i}\epsilon_{i21} = \epsilon_{213}\epsilon_{321} = +1$$

$$\epsilon_{21i}\epsilon_{i12} = \epsilon_{213}\epsilon_{312} = -1\ ,\ \epsilon_{12i}\epsilon_{i21} = \epsilon_{123}\epsilon_{321} = -1$$

$$\epsilon_{23i}\epsilon_{i23} = \epsilon_{231}\epsilon_{123} = +1\ ,\ \epsilon_{32i}\epsilon_{i32} = \epsilon_{321}\epsilon_{132} = +1$$

$$\epsilon_{32i}\epsilon_{i23} = \epsilon_{321}\epsilon_{123} = -1\ ,\ \epsilon_{23i}\epsilon_{i32} = \epsilon_{231}\epsilon_{132} = -1$$

これらから、$a = j, b = k$ なら $+1$、$a = k, b = j$ なら -1 と分かります。そして、これら以外は 0 なので、クロネッカーデルタによって

$$\epsilon_{abi}\epsilon_{ijk} = \epsilon_{abi}\epsilon_{jki} = \delta_{aj}\delta_{bk} - \delta_{ak}\delta_{bj}$$

と書けます。

・補足 2

回転行列 R の α 微分は微分の定義から簡単に求まります。R は $R(\boldsymbol{n}, \alpha)R(\boldsymbol{n}, \beta) = R(\boldsymbol{n}, \alpha + \beta)$ なので、微小な ϵ のとき ($\boldsymbol{n}$ は省きます)

$$\begin{aligned}
R(\alpha + \epsilon) &= R(\epsilon)R(\alpha) \\
&= (I - i\epsilon(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{M}))R(\alpha) \\
\frac{R(\alpha + \epsilon) - R(\alpha)}{\epsilon} &= -i(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{M})R(\alpha) \\
\lim_{\epsilon \to 0} \frac{R(\alpha + \epsilon) - R(\alpha)}{\epsilon} &= -i \lim_{\epsilon \to 0}(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{M})R(\alpha) \\
\frac{dR}{d\alpha} &= -i(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{M})R
\end{aligned}$$

となります。