ウィグナーの D 行列

回転演算子を角運動量演算子の固有状態で挟むと出てくるウィグナーの D 行列を求めます。
最初に回転演算子を求め、その後にウィグナーの D 行列を与えます。最後に数学の話を簡単にしています。
「角運動量演算子」での結果を使っています。

量子力学での回転変換を求めます。力学などでは 3 次元ユークリッド空間を使うのでベクトルの回転は視覚的に求められますが、波動関数やブラケットはそうなっていないので、微分による微小変化として求めます。

3 次元ユークリッド空間での回転行列は直交行列で、ベクトルの内積を不変にする性質を持っています。これは量子力学でも同じように成立していると考えます。そうすると、物理的な状態 (期待値) を変更しない演算子はユニタリー演算子なので、状態の位置を回転させる演算子 $\hat{U}$ をユニタリー演算子として

$$|\boldsymbol{x}'\rangle = \hat{U}|\boldsymbol{x}\rangle \ , \ \langle\boldsymbol{x}'| = \langle\boldsymbol{x}|\hat{U}^\dagger \qquad (\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1})$$

と与えます。$\boldsymbol{x}'$ は回転後の位置です。回転させて逆回転させればもとに戻るので、$\hat{U}^\dagger$ は $\hat{U}$ の逆回転を与えます。$\hat{U}$ を状態 $|\psi\rangle$ に作用させた状態を $|\psi'\rangle$ として

$$\hat{U}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$$
$$\hat{U}\int d^3x|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle = \int d^3x|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|\psi'\rangle$$
$$\int d^3x\hat{U}|\boldsymbol{x}\rangle\psi(\boldsymbol{x}) = \int d^3x|\boldsymbol{x}\rangle\psi'(\boldsymbol{x})$$

位置の状態 $|\boldsymbol{x}\rangle$ の完全性を挟んでいます。左辺は

$$\int d^3x\hat{U}|\boldsymbol{x}\rangle\psi(\boldsymbol{x}) = \int d^3x|\boldsymbol{x}'\rangle\psi(\boldsymbol{x}) = \int d^3x|\boldsymbol{x}'\rangle\psi(R^{-1}\boldsymbol{x}') = \int d^3x'|\boldsymbol{x}'\rangle\psi(R^{-1}\boldsymbol{x}')$$

$\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{x}'$ への回転行列を R とし、その逆回転を $R^{-1}\boldsymbol{x}'$ と書いています。$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'$ には定数の角度の違いしかないので、今の 3 次元空間全体を囲む積分では変数変換に影響しません (極座標で書けばはっきりする)。変数が全て $\boldsymbol{x}'$ になっているので、$\boldsymbol{x}$ と書いても問題ないことから

$$\psi'(\boldsymbol{x}) = \psi(R^{-1}\boldsymbol{x}) \tag{1}$$

と分かります。

右辺で R^{-1} になることは 3 次元ユークリッド空間上の関数として見ると分かりやすいです。3 次元ユークリッド空間にある点 a があり、それを回転させた点 a' があるとします。関数 F が a で $F(a)$ の値を持つとき、一般的に

$$F(a') \neq F(a)$$

これに対して、$F'(a') = F(a)$ となる関数が変換 $\hat{O}F$ で与えられるなら

$$\hat{O}F(a') = F(a)$$

a' は a を回転させた位置なので $a = R^{-1}a'$ とすれば

$$F'(a') = \hat{O}F(a') = F(R^{-1}a')$$

a' を最初の点と見るなら、任意の点なので

$$F'(a) = F(R^{-1}a)$$

となり、(1) と同じになります。

ブラケットの変換から見るのも分かりやすいです。$\hat{U}^\dagger$ を $|\boldsymbol{x}\rangle$ に作用させると逆回転した位置の状態 $|R^{-1}\boldsymbol{x}\rangle$ になることから

$$\langle\boldsymbol{x}|\hat{U} = (\hat{U}^\dagger|\boldsymbol{x}\rangle)^\dagger = (|R^{-1}\boldsymbol{x}\rangle)^\dagger = \langle R^{-1}\boldsymbol{x}|$$

ブラケットへの演算子の作用は右側、左側のどちらでもいいので

$$\langle\boldsymbol{x}|\hat{U}|\psi\rangle = \langle\boldsymbol{x}|\psi'\rangle = \psi'(\boldsymbol{x})$$
$$\langle\boldsymbol{x}|\hat{U}|\psi\rangle = \langle R^{-1}\boldsymbol{x}|\psi\rangle = \psi(R^{-1}\boldsymbol{x})$$

となり、(1) になります。

ここから z 軸周りの回転として見ていきますが、一般的な回転でも同様の話になります。3 次元ユークリッド空間における位置 $\boldsymbol{x}$ の z 軸周りでの角度 θ の反時計回りの回転（z 軸を中心にした左回転）は成分に対して

$$R_z(\theta)\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

回転行列 R_z は直交行列 $R_z^t = R_z^{-1}$ (t は転置) です。角度が微小なら $\cos\theta \simeq 1, \sin\theta \simeq \theta$ なので

$$R_z(\theta) \simeq \begin{pmatrix} 1 & -\theta & 0 \\ \theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となります。

波動関数に作用する微分演算子として回転変換の演算子の形を与えます。波動関数に作用する演算子を

$$\psi'(\boldsymbol{x}) = \hat{U}_z\psi(\boldsymbol{x}) = \psi(R_z^{-1}\boldsymbol{x})$$

とします。R_z で回転した位置は

$$(x', y', z') = (x\cos\theta - y\sin\theta,\ x\sin\theta + y\cos\theta, z)$$

θ が微小なら 1 次までを拾って

$$(x', y', z') \simeq (x - \theta y,\ \theta x + y, z)$$

$R_z^{-1}\boldsymbol{x}$ はこれの逆回転なので $-\theta$ にして

$$\psi(R_z^{-1}\boldsymbol{x}) = \psi(x + \theta y, -\theta x + y, z)$$

展開すると

$$\psi(x + \theta y, -\theta x + y, z) \simeq \psi(x, y, z) + y\theta\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial x} - x\theta\frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial y} = \psi(x, y, z) + \theta(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y})\psi(x, y, z)$$

第 2 項が位置の微小な回転変換に対する波動関数の変化部分です。この変化部分は運動量演算子を使うと

$$-x\frac{\partial}{\partial y} + y\frac{\partial}{\partial x} = -\frac{i}{\hbar}x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}) + \frac{i}{\hbar}y(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) = -\frac{i}{\hbar}(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)$$

位置と運動量のベクトル積 $\boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}$ の z 成分の形になっているので、位置演算子と運動量演算子を使って角運動量演算子

$$\hat{J}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

にします。というわけで

$$\psi'(\boldsymbol{x}) = \psi(R_z^{-1}\boldsymbol{x}) \simeq (1 - \frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_z)\psi(\boldsymbol{x}) = \hat{U}_z\psi(\boldsymbol{x}) \tag{2}$$

として、波動関数の位置の微小回転 (時計周り) を与える回転演算子 $\hat{U}_z$ が作れます。エルミート共役を取れば角度の項の符号が反転するので反時計周りの回転になります (θ の符号を反転させることに対応)。エルミート共役が逆回転になることから予想できるように、θ の 1 次までで

$$\hat{U}_z^\dagger\hat{U}_z = (1 + \frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_z)(1 - \frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_z) = 1 + \frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_z - \frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_z = 1$$

となるので、ユニタリー演算子になっています。同様に計算すれば

$$\hat{U}_z(\theta_1)\hat{U}_z(\theta_2) = (1 - \frac{i}{\hbar}\theta_1\hat{J}_z)(1 - \frac{i}{\hbar}\theta_2\hat{J}_z) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar}\theta_1\hat{J}_z - \frac{i}{\hbar}\theta_2\hat{J}_z = 1 - \frac{i}{\hbar}(\theta_1 + \theta_2)\hat{J}_z = \hat{U}_z(\theta_1 + \theta_2)$$

となっているのも分かります。これは回転の性質そのものです。

回転演算子 $\hat{U}$ は x, y 軸周りでも同様に求められ

$$\hat{U}_x = (1 - \frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_x)\ ,\ \hat{J}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$$

$$\hat{U}_y = (1 - \frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_y)\ ,\ \hat{J}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$$

$$\hat{U}_z = (1 - \frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_z)\ ,\ \hat{J}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

となります。

より一般的に、単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ の方向を軸とする時計回りの回転に対しては

$$\hat{U}_n = 1 - \frac{i}{\hbar}\theta\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}$$

となります。これは

$$\begin{aligned}
\hat{U}_n\psi(\boldsymbol{x}) = (1 - \frac{i}{\hbar}\theta\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}})\psi(\boldsymbol{x}) &= (1 - \frac{i}{\hbar}\theta\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{x}\times(-i\hbar\nabla))\psi(\boldsymbol{x}) \\
&= \psi(\boldsymbol{x}) - \theta\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{x}\times\nabla\psi(\boldsymbol{x})) \\
&= \psi(\boldsymbol{x}) - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{x}) \\
&= \psi(\boldsymbol{x}) - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})_x\frac{\partial}{\partial x}\psi(\boldsymbol{x}) - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})_y\frac{\partial}{\partial y}\psi(\boldsymbol{x}) - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})_z\frac{\partial}{\partial z}\psi(\boldsymbol{x}) \\
&\simeq \psi(x - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})_x, y - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})_y, z - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})_z) \\
&= \psi(\boldsymbol{x} - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x}))
\end{aligned}$$

として、$\boldsymbol{n}$ 軸周りの微小な回転による $\boldsymbol{x} - \theta(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})$ になるからです。

微小な回転としてきましたが、有限の角度の場合は簡単に求まります。ある有限な角度 θ から N を大きな正の整数として微小な角度 $\Delta\theta = \theta/N$ とすれば

$$\hat{U}_z(\Delta\theta) = 1 - \frac{i}{\hbar}\frac{\theta}{N}\hat{J}_z$$

$\hat{U}$ は $\hat{U}(\theta_1)\hat{U}(\theta_2) = \hat{U}(\theta_1 + \theta_2)$ なので、これを N 回作用させれば

$$\hat{U}_z(\theta) = \hat{U}_z(N\Delta\theta) = (1 - \frac{i}{\hbar}\Delta\theta\hat{J}_z)^N$$

N の無限大の極限において $\Delta\theta \to 0$ になりますが、N 乗がいるために指数関数の定義から

$$\hat{U}_z(\theta) = \lim_{N\to\infty}(1 - \frac{i}{\hbar}\Delta\theta\hat{J}_z)^N = \exp[-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{J}_z]$$

として、有限の角度での回転演算子になります。一般的な回転軸の場合でも同様に

$$\hat{U}_n(\theta) = \exp[-\frac{i}{\hbar}\theta \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}]$$

となります。

ここから、微小な変換と言わないときの $\hat{U}$ は有限の角度の場合とします。

回転演算子 $\hat{U}$ の表現行列を求めます。回転演算子には運動量演算子が含まれているので、基底には角運動量演算子の固有状態を使います。ここからの話は「角運動量演算子」の続きです。

量子力学の単語を使っていきますが、ここからの話は線形代数の単語に置き換えたほうが分かりやすいかもしれません。

任意の回転とするために、オイラー角 α, β, γ による回転演算子を

$$\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma) = \hat{U}_z(\alpha)\hat{U}_y(\beta)\hat{U}_z(\gamma) = e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar}$$

と定義します。ユニタリー演算子なので

$$(\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma))^\dagger = (\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma))^{-1} = e^{i\gamma\hat{J}_z/\hbar}e^{i\beta\hat{J}_y/\hbar}e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar} = \hat{U}(-\gamma,-\beta,-\alpha)$$

となっています。

$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ と z 成分の角運動量演算子 $\hat{J}_z$ の固有状態を $|j,m\rangle$ と書きます。j は固定された整数か半整数、固有値は

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,m\rangle \hat{J}_z|j,m\rangle = \hbar m|j,m\rangle \quad (m=-j,-j+1,\dots,j)$$

この固有状態は m を成分とする完全性を持つので

$$\begin{aligned}\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle &= \sum_{m'=-j}^{j}|j,m'\rangle\langle j,m'|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle \\ &= \sum_{m'=-j}^{j}D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m'\rangle \quad (D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle j,m'|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle)\end{aligned} \tag{3}$$

とすれば、固有状態の変換を回転演算子 $\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)$ の表現行列としての $(2j+1)\times(2j+1)$ 行列 $D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ で書けます。$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ をウィグナーの D 行列 (Wigner D matrix) やウィグナー関数と言います。$|j,m\rangle$ は z 成分の固有状態なので

$$\begin{aligned}D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle j,m'|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle &= \langle j,m'|e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}e^{-i\gamma\hat{J}_z/\hbar}|j,m\rangle \\ &= e^{-i\alpha m'}e^{-i\gamma m}\langle j,m'|e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}|j,m\rangle \\ &= e^{-i(\alpha m'+\gamma m)}d^{(j)}_{m'm}(\beta)\end{aligned}$$

と書け、$d^{(j)}_{m'm}(\beta)$ を d 行列と言っていきます。$\alpha=0, \beta=0$ で D 行列と一致するので

$$D^{(j)}_{m'm}(0,\beta,0)=d^{(j)}_{m'm}(\beta)$$

となっています。このような行列を作る理由は最後に触れます。

D 行列の重要な特徴は $\langle j',m'|,\ |j,m\rangle$ として j が区別されるように作られていないことです。これは、$\hat{J}_i$ は $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と交換するので

$$\langle j',m'|\hat{\boldsymbol{J}}^2\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle=\langle j',m'|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)\hat{\boldsymbol{J}}^2|j,m\rangle$$

$$\hbar^2 j'(j'+1)\langle j',m'|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle=\hbar^2 j(j+1)\langle j',m'|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle$$

となり、$j=j'$ になるためです。このため、(3) から分かるように、$|j,m\rangle$ は例えば $|2,m\rangle$ と $|3,m\rangle$ が混ざるような変換になってなく、$|2,m\rangle$ と $|3,m\rangle$ はそれぞれ別に変換されます。

D 行列の一般的な形はウィグナーによって求められていて

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=e^{-i(\alpha m'+\gamma m)}\sum_k\frac{\sqrt{(j+m')!(j-m')!(j+m)!(j-m)!}}{(j-m'-k)!(j+m-k)!(k+m'-m)!k!}$$
$$\times(-1)^{k+m'-m}(\cos\frac{\beta}{2})^{2j+m-m'-2k}(\sin\frac{\beta}{2})^{m'-m+2k}\tag{4}$$

となっています。k は分母の階乗の括弧内が負にならない整数の範囲で取ります。これの導出は省きます (場の量子論の「リー代数」参照)。

D 行列の性質を示していきます。まず、D 行列は直交関係を求めます。D 行列の複素共役は、$\langle\psi|\phi\rangle^*=\langle\phi|\psi\rangle$ と $\hat{U}^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)=\hat{U}(-\gamma,-\beta,-\alpha)$ から

$$(D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma))^*=\langle j,m|\hat{U}^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)|j,m'\rangle=\langle j,m|\hat{U}(-\gamma,-\beta,-\alpha)|j,m'\rangle=D^{(j)}_{mm'}(-\gamma,-\beta,-\alpha)$$

となって、角度の符号を反転させて並びを逆にし、成分を入れ替えたものになります。これを使えば

$$\begin{aligned}\sum_{k=-j}^{j}(D^{(j)}_{km'}(\alpha,\beta,\gamma))^*D^{(j)}_{km}(\alpha,\beta,\gamma)&=\sum_{k=-j}^{j}\langle j,m'|\hat{U}^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)|j,k\rangle\langle j,k|\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle\\&=\langle j,m'|\hat{U}^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle\\&=\langle j,m'|j,m\rangle\\&=\delta_{m'm}\end{aligned}$$

となるのが分かります。また、エルミート共役にすると m,m' に対する転置が加わるので

$$(D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma))^\dagger=D^{(j)}_{m'm}(-\gamma,-\beta,-\alpha)=(D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma))^{-1}$$

となり、ユニタリー行列なのが分かります (ユニタリー演算子の行列だからユニタリー行列)。

d 行列が直交行列なのも簡単に分かります。後で求めている (7) から $\hat{J}_y$ の表現行列は純虚数です。このため、$i\hat{J}_y$ による $d^{(j)}_{m'm}$ は実数の行列です。そして、D 行列がユニタリー行列なので

$$(D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma))^{-1} = (e^{i(\alpha m'+\gamma m)/\hbar}d^{(j)}_{m'm}(\beta))^{-1}$$
$$(D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma))^{\dagger} = e^{i(\alpha m'+\gamma m)/\hbar}(d^{(j)}_{m'm}(\beta))^{\dagger}$$

から、d 行列もユニタリー行列で、実数のユニタリー行列は直交行列です。直交行列なので、転置は (t は転置)

$$(d^{(j)}_{m'm}(\beta))^t = (d^{(j)}_{m'm}(\beta))^{-1} = d^{(j)}_{m'm}(-\beta) \quad (d^{(j)}_{m'm}(\beta) = d^{(j)}_{mm'}(-\beta))$$

となります。

d 行列は

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = d^{(j)}_{-m,-m'}(\beta) \tag{5a}$$
$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = (-1)^{m-m'}d^{(j)}_{mm'}(\beta) \tag{5b}$$
$$d^{(j)}_{m'm}(0) = \delta_{m',m} \tag{5c}$$
$$d^{(j)}_{m'm}(\pi) = (-1)^{j-m}\delta_{m',-m} \tag{5d}$$
$$d^{(j)}_{m'm}(2\pi) = (-1)^{2j}\delta_{m'm} \tag{5e}$$

という性質を持っています。

(5a) と (5b) は (4) を使わずに示してみます。$\hat{J}_y$ の行列の関係が必要になるので、先に求めておきます。

「角運動量演算子」で求めたように、角運動量演算子 $\hat{J}_x, \hat{J}_y$ から

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$$

とした上昇、下降演算子は $|j,m\rangle$ を

$$\hat{J}_{\pm}|j,m\rangle = C^{\pm}_{j,m}|j,m\pm1\rangle \quad (C^{\pm}_{j,m} = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)})$$

と変化させます。固有状態の直交性から

$$\langle j',m'|\hat{J}_{\pm}|j,m\rangle = C^{\pm}_{j,m}\langle j',m'|j,m\pm1\rangle$$
$$\langle j',m'|\hat{J}_x|j,m\rangle \pm i\langle j',m'|\hat{J}_y|j,m\rangle = C^{\pm}_{j,m}\delta_{jj'}\delta_{m',m\pm1}$$

なので

$$\langle j',m'|\hat{J}_x|j,m\rangle = \frac{1}{2}(C^{+}_{j,m}\delta_{m',m+1} + C^{-}_{j,m}\delta_{m',m-1})\delta_{j'j} \tag{6}$$
$$\langle j',m'|\hat{J}_y|j,m\rangle = \frac{1}{2i}(C^{+}_{j,m}\delta_{m',m+1} - C^{-}_{j,m}\delta_{m',m-1})\delta_{j'j} \tag{7}$$

として、$\hat{J}_x, \hat{J}_y$ の行列 J_x, J_y が求まります。
　$j' = j$ として

$$
\begin{aligned}
J_y = \langle j, m'|\hat{J}_y|j, m\rangle &= \frac{\hbar}{2i}(\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\delta_{m',m+1} - \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\delta_{m',m-1})\\
&= \frac{\hbar}{2i}(\sqrt{j(j+1)-(m'-1)m'}\delta_{m'-1,m} - \sqrt{j(j+1)-(m'+1)m'}\delta_{m'+1,m})
\end{aligned}
$$

第 1 項は $m' = m+1$、第 2 項は $m' = m-1$ のときに 0 でないことを使っています。これは

$$
-\langle j, m|\hat{J}_y|j, m'\rangle = -\frac{\hbar}{2i}(\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\delta_{m,m'+1} - \sqrt{j(j+1)-m'(m'-1)}\delta_{m,m'-1})
$$

と同じなので

$$
(J_y)_{m'm} = -(J_y)_{mm'}
$$

これから、$(J_y)_{m'm}$ は行列成分が $m' - m = \pm 1$ のときだけ 0 でない反対称行列です。
　m, m' を入れ替えて符号を反転させたときの行列は

$$
\langle j, -m|\hat{J}_y|j, -m'\rangle = \frac{\hbar}{2i}(\sqrt{j(j+1)+m'(-m'+1)}\delta_{-m,-m'+1} - \sqrt{j(j+1)+m'(-m'-1)}\delta_{-m,-m'-1})
$$

第 1 項と第 2 項のクロネッカーデルタは $m' = m+1,\ m' = m-1$ なので

$$
\begin{aligned}
\langle j, -m|\hat{J}_y|j, -m'\rangle &= \frac{\hbar}{2i}(\sqrt{j(j+1)+m'(-m'+1)}\delta_{m',m+1} - \sqrt{j(j+1)+m'(-m'-1)}\delta_{m',m-1})\\
&= \frac{\hbar}{2i}(\sqrt{j(j+1)-(m+1)m}\delta_{m',m+1} - \sqrt{j(j+1)-(m-1)m}\delta_{m',m-1})
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{gathered}
\langle j, m'|\hat{J}_y|j, m\rangle = \langle j, -m|\hat{J}_y|j, -m'\rangle\\
(J_y)_{m'm} = (J_y)_{-m,-m'} \qquad (8)
\end{gathered}
$$

となっています。
　必要なものは求まったので、d 行列を見ていきます。d 行列の展開は

$$
\begin{aligned}
d^{(j)}_{m'm} &= \langle j, m'|e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}|j, m\rangle\\
&= \langle j, m'|j, m\rangle + (-\frac{i}{\hbar}\beta)\langle j, m'|\hat{J}_y|j, m\rangle + \frac{1}{2}(-\frac{i}{\hbar}\beta)^2\langle j, m'|\hat{J}_y^2|j, m\rangle + \cdots\\
&= \delta_{m'm} + (-\frac{i}{\hbar}\beta)(J_y)_{m'm} + \frac{1}{2}(-\frac{i}{\hbar}\beta)^2\langle j, m'|\hat{J}_y^2|j, m\rangle + \cdots
\end{aligned}
$$

第 3 項は

$$\langle j,m'|\hat{J}_y^2|j,m\rangle = \langle j,m'|\hat{J}_y\hat{J}_y|j,m\rangle = \sum_{k=-j}^{j}\langle j,m'|\hat{J}_y|j,k\rangle\langle j,k|\hat{J}_y|j,m\rangle = \sum_{k=-j}^{j}(J_y)_{m'k}(J_y)_{km} = (J_y^2)_{m'm}$$

3 乗以降も同様なので

$$d^{(j)}_{m'm} = \delta_{m'm} + (-\frac{i}{\hbar}\beta)(J_y)_{m'm} + \frac{1}{2}(-\frac{i}{\hbar}\beta)^2(J_y^2)_{m'm} + \frac{1}{3!}(-\frac{i}{\hbar}\beta)^3(J_y^3)_{m'm} + \cdots \tag{9}$$

m, m' を入れ替えて符号を反転させたときでは、(8) から

$$\begin{aligned} d^{(j)}_{-m,-m'} &= \langle j,-m|e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}|j,-m'\rangle \\ &= \delta_{m'm} + (-\frac{i}{\hbar}\beta)(J_y)_{-m,-m'} + \frac{1}{2}(-\frac{i}{\hbar}\beta)^2(J_y^2)_{-m,-m'} + \frac{1}{3!}(-\frac{i}{\hbar}\beta)^3(J_y^3)_{-m,-m'} + \cdots \\ &= \delta_{m'm} + (-\frac{i}{\hbar}\beta)(J_y)_{m'm} + \frac{1}{2}(-\frac{i}{\hbar}\beta)^2(J_y^2)_{m'm} + \frac{1}{3!}(-\frac{i}{\hbar}\beta)^3(J_y^3)_{m'm} + \cdots \\ &= d^{(j)}_{m'm} \end{aligned}$$

なので、(5a) になります。2 乗の項は

$$(J_y^2)_{-m,-m'} = \sum_{k=-j}^{j}(J_y)_{-m,k}(J_y)_{k,-m'} = \sum_{k=-j}^{j}(J_y)_{-k,m}(J_y)_{m',-k} = \sum_{k=-j}^{j}(J_y)_{m',k}(J_y)_{k,m} = (J_y^2)_{m'm}$$

となっていて、3 乗以降も同じです。

(5b) を示します。$m'-m=\pm1$ のとき J_y の成分は 0 でないので、0 でない成分は

$$(i+1,i)\ ,\ (i-1,i)\ ,\ (i,i+1)\ ,\ (i,i-1)$$

積の規則

$$\sum_k M_{ik}M_{kj} = M_{i1}M_{1j} + M_{i2}M_{2j} + \cdots$$

から、J_y の積では

$$\begin{aligned} &(J_y)_{i,i-1}(J_y)_{i-1,j} \quad (i-1=j\pm1) \\ &(J_y)_{i,i+1}(J_y)_{i+1,j} \quad (i+1=j\pm1) \end{aligned}$$

となる場合が 0 にならないです。このため、J_y を 2 乗した行列 A_{ij} で 0 でない成分は

$$(i,i)\ ,\ (i,i-2)\ ,\ (i,i+2)\ ,\ (i-2,i)\ ,\ (i+2,i-2) \quad (i-j=0,\pm2)$$

反対称行列同士の積は対称行列なので、A は対称行列です。A の積も見ると

$$A_{ii}A_{ij} \quad (i=j,\ i=j\pm 2)$$

$$A_{i,i-2}A_{i-2,j} \quad (i-2=j\ ,\ i-2=j\pm 2)$$

$$A_{i,i+2}A_{i+2,j} \quad (i+2=j\ ,\ i+2=j\pm 2)$$

となり、$i-j=0,\pm 2,\pm 4$ のときに 0 でなくなります。同じように続くので、$(J_y)^{2n}_{m'm}$ $(n=1,2,\ldots)$ は $|m'-m|$ が偶数の成分が 0 でないです（対称行列同士の積は対称行列）。よって、クロネッカーデルタも対称行列なので、展開 (9) における対称行列部分において (5b) が成立します。

3 乗では

$$A_{ii}(J_y)_{ij} \quad (i=j\pm 1)$$

$$A_{i,i-2}(J_y)_{i-2,j} \quad (i-2=j\pm 1)$$

$$A_{i,i+2}(J_y)_{i+2,j} \quad (i+2=j\pm 1)$$

となるので、$i-j=\pm 1,\pm 3$ の成分が 0 でないです。これも後は同様に続くので、$(J_y)^{2n+1}_{m'm}$ では $|m'-m|$ が奇数の成分が 0 でないです。よって、(9) の反対称行列部分においても (5b) が成立します。このように、対称、反対称部分は $|m'-m|$ が偶数か奇数かで区別されているので、(5b) になります。

(5c) から (5e) を (4) を使って示します。$\beta=\pi$ のとき、(4) は $(\cos\pi/2)^0$ でないと 0 になってしまうので

$$2j+m-m'-2k=0$$

$$k=\frac{1}{2}(2j+m-m')$$

k は整数なので $m=-m'$ でないといけなく、$k=j+m$ と分かります。そうすると

$$\sqrt{(j+m')!(j-m')!(j+m)!(j-m)!}=\sqrt{((j-m)!)^2((j+m)!)^2}=(j-m)!(j+m)!$$

$$(j-m'-k)!(j+m-k)!(k+m'-m)!k!=(j+m-k)!(j+m-k)!(k-2m)!k!=(j-m)!(j+m)!$$

$$(-1)^{k+m'-m}=(-1)^{j-m}$$

なので

$$d^{(j)}_{m'm}(\pi)=(-1)^{j-m}\delta_{m,-m'}$$

となります。

$\beta=2\pi$ では $\sin$ が消えないように

$$m'-m+2k=0$$

$$k=\frac{1}{2}(m-m')$$

このときは、k が整数になるには $m=m'$ と $m=-m'>0$ の場合があります。しかし、$m=-m'$ だと分母に

$$(j+m-m)!(j+m-m)!(m-m-m)!m! = j!j!(-m)!m!$$

として負の階乗が現れるので、この場合は k の和に出てきません。というわけで、$m=m'$ の場合だけになり、このときは

$$\sqrt{(j+m')!(j-m')!(j+m)!(j-m)!} = (j+m)!(j-m)!$$
$$(j-m'-k)!(j+m-k)!(k+m'-m)!k! = (j-m)!(j+m)!$$
$$(-1)^{k+m'-m} = 1$$
$$(\cos\pi)^{2j+m-m'-2k} = (-1)^{2j}$$

なので

$$d^{(j)}_{m'm}(2\pi) = (-1)^{2j}\delta_{m'm}$$

となります。$\beta=0$ では $\cos 0 = 1$ になるだけなので

$$d^{(j)}_{m'm}(0) = \delta_{m'm}$$

となります。

D 行列が必要になる物理の事情を簡単に言っておきます。具体的にするために、ハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ をクーロンポテンシャル $V=-c/r$ $(c>0)$ を含む

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V$$

とします。これは「中心力でのシュレーディンガー方程式」での結果から、固有関数と固有値は

$$\psi_{l,m,n}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(\rho)Y_{l,m}(\theta,\phi)\ ,\ E_n = -\frac{c}{2a_0}\frac{1}{n^2}$$

今の話で必要なのはエネルギー固有値 E_n が n にしか依存しないこと、l は 0 以上の整数、$-l\leq m\leq l$ ということだけです。適当な n_0, l_0 に固定し、ブラケットで書くと

$$\hat{H}|l_0,m,n_0\rangle = E|l_0,m,n_0\rangle$$

m で区別される状態に対して全て E なので、$2l_0+1$ 個に縮退しています。V は交換関係とは無関係なので、角運動量演算子 $\hat{J}_z$ はこのハミルトニアン演算子と交換するのは簡単に確かめられます (ベクトル積をレヴィ・チビタ記号で書くと計算が簡単)。交換するので

$$\hat{J}_z\hat{H}|l_0,m,n_0\rangle = E\hat{J}_z|l_0,m,n_0\rangle$$

$$\hat{H}(\hat{J}_z|l_0,m,n_0\rangle) = E(\hat{J}_z|l_0,m,n_0\rangle)$$

となり、$\hat{J}_z|l_0,m,n_0\rangle$ はハミルトニアン演算子の固有状態です。一方で、$\hat{J}_z$ の固有状態として $|l_0,m,n_0\rangle$ を見ると、$2l_0+1$ 次元ベクトル空間の基底になれるので

$$\hat{J}_z|l_0,m,n_0\rangle = \sum_{m'=-l_0}^{l_0}|l_0,m',n_0\rangle\langle l_0,m',n_0|\hat{J}_z|l_0,m,n_0\rangle = \sum_{m'=-l}^{l}(J_z)_{m'm}|l_0,m',n_0\rangle$$

として、ハミルトニアン演算子の固有状態を行列 $(J_z)_{m'm}$ を係数とする線形結合で書けます。

これが言っているのは、シュレーディンガー方程式の解はハミルトニアン演算子の固有状態なので、$\hat{J}_z$ の表現行列が分かればシュレーディンガー方程式を解いたのと同じ情報が手に入るということです。これを回転演算子で行っているのが D 行列で、実際に解が求まることは「D 行列と球面調和関数」で示しています。

この話で重要なのは、ハミルトニアン演算子と交換する演算子 $\hat{A}$(保存量) が存在すること、ハミルトニアン演算子の k 個に縮退している固有状態 $|\psi_i\rangle$ が k 次元ベクトル空間の基底になれること、$|\psi_i\rangle$ から作られる $\hat{A}$ の表現行列が k 次元ベクトル空間内のみの変換になっていることです。これらが揃っているときに、シュレーディンガー方程式の解の情報を取り出せます。そして、この状況を数学的に扱うのが群論で、このことは群論での $\hat{A}$ の既約表現 (irreducible representation) を求める話に対応します。

簡単に数学の単語にも触れておきます (行列に限定した場合)。話を簡単にするために $\hat{J}_z$ を使いましたが、群論として扱うには回転演算子のように $\hat{U}(\theta_1)\hat{U}(\theta_2) = \hat{U}(\theta_1+\theta_2)$ となっている必要があり、大雑把にはこの関係を持つ集合を群 (group) と言います。

ここでしてきた話は $SO(3)$ として分類される群です。SO は特殊直交群 (special orthogonal group) のことで、special は行列式が 1、orthogonal は直交行列を指し、3 は取りあえずは 3 次元の 3 と思えば良いです。3 次元ユークリッド空間での回転行列は行列式が 1 の 3×3 直交行列なので、$SO(3)$ に分類されます。

既約表現は表現行列が相似変換 (基底の変換によって表現行列が受ける変換) によってブロック行列が対角的に入った行列にならない場合のことです。具体的に D 行列で言えば、$(2j+1)\times(2j+1)$ 行列 $D^{(j)}$ が相似変換 (基底を別の基底に変換したときに表現行列 $D^{(j)}$ が受ける変換) によって

$$\begin{pmatrix} (k_1\times k_1) & 0 & 0 \\ 0 & (k_2\times k_2) & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

という形に変換できないとき、$D^{(j)}$ は既約表現と言われます。$(k\times k)$ は $k\times k$ 行列で、この形はブロック行列が対角的に入っている行列です。このように変換できると、$2j+1$ 次元ベクトルに作用させたとき

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} (k_1\times k_1) & 0 & 0 \\ 0 & (k_2\times k_2) & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} (k_1\times 1) \\ (k_2\times 1) \\ \vdots \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} (k_1\times k_1)(k_1\times 1) \\ (k_2\times k_2)(k_2\times 1) \\ \vdots \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} (k_1\times k_1)(k_1\times 1) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ (k_2\times k_2)(k_2\times 1) \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} + \cdots \\
&\Rightarrow (k_1\times k_1)(k_1\times 1)\ ,\ (k_2\times k_2)(k_2\times 1)\ ,\ \cdots
\end{aligned}$$

として、k_1 次元ベクトルだけの計算、k_2 次元ベクトルだけの計算、として分解できます。このように分解できると、$2j+1$ 次元ベクトルでの変換と見る必要がなくなります。相似変換でこのような状況にできない行列を既約表現と言っています。既約でないなら可約 (reducible) と言われます。

既約表現でない分かりやすい例が 2 次元回転行列 $R^{(2)}$ で (2 次元回転行列による群は $SO(2)$ に分類される)、ユニタリー行列 T による相似変換によって

$$
\begin{aligned}
T^{-1}R^{(2)}(\theta)T &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\theta - i\sin\theta & \cos\theta + i\sin\theta \\ \sin\theta + i\cos\theta & \sin\theta - i\cos\theta \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-i\theta} & e^{i\theta} \\ ie^{-i\theta} & -ie^{i\theta} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

とできます。よって、$R^{(2)}$ は既約表現ではなく、2 つの 1 次元ベクトルに分解されます。ちなみに、T の成分を縦に取り出してベクトルとした $(1,i),(1,-i)$ は $e^{\pm i\theta}$ を固有値とする $R^{(2)}$ の固有ベクトルです (直交行列での相似変換の行列を作る方法)。

既約表現において重要なのは Schur の補題と呼ばれるものです。角運動量演算子の場合、同じベクトル空間内のみの変換になることは $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ と交換する $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ が存在していることが対応します。$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値が $\hbar j(j+1)$ のために、固定された j_0 における $2j_0+1$ 個の固有ベクトル $|j_0, m\rangle$ に対して全て同じ固有値を持つので、単位行列に固有値をかけたものになっています。このような演算子がいることで、D 行列は $2j+1$ 次元ベクトル空間内の変換になっています。

これを数学的に示しているのが Schur の補題で、表現行列が既約表現で、それと交換する行列があるとき、交換する行列は単位行列の定数倍になる、というものです。また、$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ のように群を構成する全ての演算子と交換する演算子をカシミール演算子 (Casimir operator) と呼びます。