群表現と原子及び分子

理學博士
犬井鐵郎
理學士
柳川禎章
共著

東京 裳華房 發行

著作者　犬井鐵郎　柳川禎章
發行者　吉野兵作

不許複製

群表現と原子及び分子
Group Representation and Atoms and Molecules

定價　金六百八拾圓也

發行元　東京都千代田區四番町八番地ノ一
振替口座 東京一〇七番
電話九段 {二八一一番 / 六四一〇番}
合名會社 裳華房

活版所　東京都新宿區山吹町三〇五
帝都第一印刷株式會社　石井完一

自然科學書協會會員
弊社ハ貼紙並ニ捺印ニヨル定價變更ハ致シマセン。

印刷・政弘社　製本・板倉

昭和二十五年二月二十日　第一版印刷
昭和二十五年二月二十五日　第一版發行

序

本書は原子及び分子の問題を，量子力學を使つて論ずるときに應用される群論的方法を說明する目的をもつて書かれたものである．量子力學に對する群論の應用に關しては，その構成等に關する基礎的問題もあるが，本書で對象とするものは原子，分子の構造に基ずく具體的問題に關するものである．從つて特に理論的興味で群論の應用を學ぼうという學徒のみを對象とは考えず，分光學，化學結合等の具體的問題にたずさわつている實驗家おも考慮に入れて基礎概念については勿論途中の計算等も相當懇切に述べてある．

近代物性論の課題は物質の構造單位である原子核と電子とを與えてその集合體たる原子の，分子の，結晶の物性を演繹することにある．然るにそのとき現われる體系の微分方程式を嚴密に解くことは水素原子の場合を除いては不可能のことに屬する．ここで用いられる近似法に統計力學の方法と本書の主題である群論の方法とがある．群論の方法は體系が有する何等かの對稱性に着目して群論特に表現論を利用して攝動論により近似計算を遂行するにある．前者が統計的平均のみを論じ得るに反し，この方法は各狀態に關して個々の値を計算することが可能である．現われる主な群は置換群，廻轉群及び結晶族群である．これらはそれぞれ素粒子の同一性，原子の中心對稱性及び分子並びに結晶の有する對稱性に對應する．

上述のように本書の主眼とする所は第三章以下にあるが，順序として第一章には行列の基礎的性質を說明し關連した事項を述べ，第二章では抽象群の概要を述べてある．既にこれにつき概念を有する讀者は，この二章を省略して直ちに第三章に入り必要に應じて參照される程度で十分と考える．第三章は Frobenius–Schur の群表現の理論である．解說については常に數學的美しさよりも理解の容易な點に意を用いた．しかし非理論家には多少の忍耐の要請される一章である．第四章は置換群の表現に關するものである．これは歷史的には重要な役割を演じたが第八章で說明する置換群と廻轉群の表現の關係によつて應用だけの立場からは直接必要がなくなつたから省略して第五章に進まれても差支えない．第五章は結晶族群を論ずる．結晶族群は結晶自身というよりは多原子分子の有する對稱性として甚だ重要である．まず幾何學的直觀的に論じ，解析的には理解の容易な 3 次元表現を詳しく述べてある．第六章では分子振動の型につき述べ，第七章では一般角運動量演算子を中心に廻轉群の表現を論じ攝動論による Zeeman, Stark 效果並びに結晶内の電子項の分離の問題が併せて述べてある．第八章は電子の置換に

對する多重項の一般論を述べ，第九章に於ては化學結合に對する應用を，第十章には多原子分子の一般電子狀態の群論的分類法につき調べ，多原子分子に於ける選擇則を導き又對稱性の低下に伴う項の分離の一般的取扱が述べられている．これに空間結晶群及びその表現，特に Brillouin 區域の取扱を述べる豫定であつたが，紙面の都合から割愛することとなつた．

本書の刊行が企てられたのは昭和 22 年，出版界は戰後異常の活況を呈し乍ら，なお本格的な科學書の出版物は殆んど現われていない狀態であつた．當時海外からの文獻もまだ全然入手できず戰前の文獻の範圍でまとめて應用上出てくる主要の群に關する種々の表を收錄した本書の程度でも學習者のみでなく研究者のためにも相當裨益するという秘かな期待を有していた．然るにその後の出版界の事情は本書の如き專門書の出版には幸せす校了後空しく時を經過している間に數多のアメリカの文獻，若干の英獨の文獻も入手できる狀態になつた．專門的良心に從うならば早くも修正增補も望ましい狀態に至らうとしている．しかし多原子分子及び結晶格子の振動の問題を除いては幸にして質的にみて大きな進展は見當らないのでそのまま上梓する次第である．本書で全然觸れなかつた核の構造に關する應用は寧ろ學會今後の問題であつて一應は，原子の問題で現われた廻轉群の應用という形式で發展してゆくであらう．

本書の校正中に我が國でも畏友山內恭彥教授の手になる廻轉群に關する新著が現われ，早速御惠與を受け中途からではあるが參考にさせて頂いた．又畏友小谷正雄教授の原子價の理論に關する著書も本書の該當する章を草するに當つて幾度か參考させて頂いた．東京工業大學助教授新樂和夫氏は校正刷を讀んで下さつて校正のみならず種々御注言を賜つた．此所に厚く御禮申上げる次第である．

なおこの出版界の危機に本書の上梓を敢行された書肆裳華房，特にこの衝に當つてなみなみならぬ努力を拂われた遠藤恭平氏に敬意を表したい．

昭和 24 年 1 月

東京大學第一工學部力學教室に於て　　著　者

主な記號

$\underset{mn}{\boldsymbol{A}}\ (=(a_{ik}))$ m行n列行列 1
$a_{ik}\ (\boldsymbol{A}={}_{ik})$ 行列$\boldsymbol{A}$のik要素 1
$\underset{n}{\boldsymbol{A}}$ n行n列の正方行列 2
$|\boldsymbol{A}|\ (=|a_{ik}|)$ 行列式 3
$|\widetilde{\boldsymbol{A}}|\ (=|\widetilde{a_{ik}}|)$ 轉置行列式 3
A_{ik} a_{ik}の餘因子 4
A 群元素 20
$\mathfrak{A}$ 群 24
$\boldsymbol{A}(R)$ 元素Rの表現行列 27
$\mathfrak{A}_3, \mathfrak{A}_4$ 3次, 4次の交代群 55
$A_{1(g,u)}$ 既約表現の記號 (1次元) 97
$A_{2(g,u)}$ 〃 97
$B_{1(g,u)}$ 〃 97
$B_{2(g,u)}$ 〃 97
$B_{3(g,u)}$ 〃 97
$\boldsymbol{c}$ 偏極率テンソルの變化 131
$C(\alpha)$ 角αの廻轉操作 71
$\boldsymbol{C}_n$ n位循環廻轉群 71
$\boldsymbol{C}_{ni}$ 結晶族群 (基礎群$\boldsymbol{C}_n$) 80
$\boldsymbol{C}_{nh}$ 〃 80
$\boldsymbol{C}_{nv}$ 〃 80
$\boldsymbol{C}_{\infty v}$ 線型分子群 107
det $\boldsymbol{A}$ 行列式 3
$\mathfrak{D}$ 一般表現 32
$\boldsymbol{D}_n$ 二面體群 71
$\boldsymbol{D}_2\ (=\boldsymbol{V})$ 四元群 75
$\boldsymbol{D}_{nv}$ 結晶族群 (基礎群$\boldsymbol{D}_n$) 81
$\boldsymbol{D}_{nh}$ 〃 81
$\boldsymbol{D}_d$ 〃 82
$\boldsymbol{D}_\infty$ 線形分子群 107
$\boldsymbol{D}_{\infty i}\ (=\boldsymbol{D}_{\infty h})$ 〃 108
D_l $2l+1$次元の廻轉群の表現 150
$\boldsymbol{E}$ 單位行列 2
E 群の單位元素 3
$\boldsymbol{e}_n$ 基底 10
$E_{n(g,u)}$ 既約表現の記號 (2次元) 98
$f(R)$ 群函數 50
$F_{(g,u)}$ 既約表現の記號 (3次元) 104
$\mathfrak{H}$ 群 20
$\bar{\mathfrak{H}}$ $\mathfrak{H}$に類型な群 24
$\boldsymbol{H}$ エルミート行列 17
$\boldsymbol{H}$ ハミルトニアン演算子 133
H 磁場 167
I 反像 80
$\boldsymbol{J}$ 全角運動量演算子 165
J_{ij} 交換積分 207
l 異値既約表現の數 49
$\boldsymbol{L}$ 軌道角運動量演算子 157
$\mathfrak{M}$ 集合 9
$\mathfrak{M}$ 双極子能率の變化 130
$\mathfrak{M}_A$ 群元素Aを含む剩餘類 22
M_A $\mathfrak{M}_A$の中の元素 23
$\mathfrak{N}$ 不變部分群 23
O 零行列 1
$\boldsymbol{O}$ 正八面體群 76
$\boldsymbol{O}_h$ 結晶族群 85
P 置換群の元素 2
$\mathfrak{P}$ 双極子能率 130
Q 置換群の元素 2
$\boldsymbol{R}$ 無限小廻轉演算子 148
R 置換群の元素 2
R_k 2電子間の動徑函數の積分 226
r 群元素の位數 21
$\mathfrak{S}_3$ 3次の置換群 29
$\mathfrak{S}_4$ 4次の置換群 56
$\boldsymbol{S}_4$ 結晶族群 86
$\boldsymbol{S}$ スピン演算子 148
S_{ij} 重疊積分 206
$\boldsymbol{T}$ 直交變換行列 12, 18
$\boldsymbol{T}$ 正四面體群 76
$\boldsymbol{T}_d, \boldsymbol{T}_h$ 結晶族群 84
$\mathfrak{U}$ 部分群 21
U 覆轉 71
V 零ベクトル 136
V ポテンシアル・エネルギー 158
$\boldsymbol{x}$ ベクトル 9
$\boldsymbol{y}$ 〃 9
Z 第二種の對稱操作 80
α 偏極率テンソル 130
Γ_n 二重結晶族群の既約表現の記號 170
$\Delta_{(g,u)}$ 既約表現の記號 108
μ_B ボーアの磁子 262
$\Pi_{(g,u)}$ 既約表現の記號 108
σ 鏡映 80
σ_v 主軸を含む面での鏡映 80
σ_h 主軸に垂直な面での鏡映 80
σ_d 主軸と副軸との對角線を含む面での鏡映 80
ρ 階位數 7
$\Sigma^{(\pm)}_{(g,u)}$ 既約表現の記號 108
χ 指標
Ψ 波動函數 133

主な表及び圖

置換群の類の表 (第1表) 27

C_n を基礎群とする擴大群の表 (第2表) 81

D_4 を基礎群とする擴大群の表 (第3表) 83

結晶族群とその對稱要素の圖 (第14～17圖) 87～88

結晶族群に對する3次元の表現行列 (第4表) 94

結晶族群の單純指標の表 (第8,9,10,11表) 100～103

正規狀態の原子の電子配置 (第15表) 161～163

多電子問題の $V(P)$ の表現行列 192～199

對稱性の低下に伴う既約表現の分解及び分子の電子項の表 (第22表～34表) 289～295

目　　次

第一章　行列及び行列式

§ 1　行列，置換，行列式……………………… 1
§ 2　一次形式及びベクトルの線型的獨立性… 7
§ 3　線型變換……………………………………10
§ 4　行列の特有方程式及び特有根……………14
§ 5　二次形式，エルミート形式及び主軸問題… ………………………………………16

第二章　抽　象　群

§ 6　群の定義………………………………… 20
§ 7　不變部分群……………………………… ·22
§ 8　類型と同型…………………………………24

第三章　群の表現論

§ 9　置換群とその類……………………………26
§ 10　表現行列の概念……………………… … ·28
§ 11　同値な表現，既約表現，指標……………32
§ 12　表現行列の既約性，Schur の補題…… 37
§ 13　既約表現行列の直交性定理· … · · ·……40
§ 14　Burnside の定理，Frobenius-Schur の定理，可約表現の簡約…………………41
§ 15　單純指標に關する直交性定理……………44
§ 16　類函數，單純指標による完全展開，廣義の指標……………………………………50
§ 17　單純指標を求める方法（部分群の指標との關係）……………………………53
§ 18　Kronecker の積表現 ………………… 56
§ 19　群の直積に對する表現の指標……………57

第四章　置　換　群

§ 20　n 次置換群 $\mathfrak{S}_n$ の類函數…………………58
§ 21　對稱函數の導入…………………………… 63
§ 22　代數的解法…………………………………66

第五章　結　晶　族　群

§ 23　廻轉群………………………………………71
§ 24　新對稱操作の添加…………………………77
§ 25　第二種の對稱操作の添加，種々の結晶族群…………………………………………80
§ 26　3 次元空間に於ける表現……………………89
§ 27　單純指標……………………………………96

第六章 分子の振動

§ 28 變位ベクトル空間 ……………………109
§ 29 基準振動に屬する變位ベクトル ………112
§ 30 表現の簡約，基準振動の型の決定 ……114
§ 31 基準振動の完全決定 ……………………115
§ 32 基準振動數の決定に對する簡便法 ・・ 128
§ 33 選擇則 ……………………………………130

第七章 廻 轉 群

§ 34 量子力學的體系に對する對稱演算子 …133
§ 35 廻轉群の2次元表現 ……………………136
§ 36 廻轉群のパラメタ空間，無限小廻轉，二價表現 ……………………146
§ 37 2次元特殊ウニテール群の表現と廻轉群 ……………………150
§ 38 連續群に於ける積分定理，指標，直交性定理と完全性定理 ……………152
§ 39 角運動量 ……………………156
§ 40 單原子の波動函數 ……………………158
§ 41 攝動論への應用 ……………………166

第八章 多電子問題

§ 42 一般論 ……………………………………173
§ 43 スピン固有函數 …………………………174
§ 44 廻轉群と置換群 …………………………180
§ 45 表現行列 $V(P)$ の構成 ……………………185
§ 46 多電子系の波動函數と永年方程式の構造 ……………………201
§ 47 原子エネルギーの計算 …………… 222

第九章 化學結合(原子價)の理論

§ 48 一般論 ……………………………………232
§ 49 H_2 分子と電子對結合理論 ……………236
§ 50 原子價の理論 ……………………… 242
§ 51 原子軌道函數法 ……………………… 263

第十章 分子の電子狀態と選擇則

§ 52 多原子分子の電子狀態 ………………… 269
§ 53 多原子分子に於けるスペクトルの選擇則 ……………………… 281
§ 54 振動項による縮重電子狀態の分離 ・・ 286

結 び……………………………………295
索 引（人名・事項）……………………296

第一章　行列及び行列式

§1. 行列，置換，行列式

（i）行列　mn 箇の要素 a_{ik} $(i=1,2,\cdots,m;\ k=1,2,\cdots,n)$ を次の矩形の形に書きならべたものを**行列**と呼び，これを

$$\underset{mn}{A}\equiv(a_{ik})\equiv\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12}\cdot\cdot\cdot a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}\cdot\cdot\cdot a_{2n} \\ \cdot\cdot\cdot & \cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot \\ a_{m1} & a_{m2}\cdot\cdot\cdot a_{mn} \end{pmatrix} \tag{1.1}$$

と書き表わす．a_{ik} を行列 A の ik 成分 A_{ik} ともいう．横にならんだ $(a_{i1}, a_{i2},\cdots,a_{in})$ の組を i 行，縦にならんだ $(a_{1k}, a_{2k},\cdots,a_{mk})$ の組を k 列と名付ける．

行列の對應する要素がすべて等しいとき即ち $a_{ik}=b_{ik}$ なるとき $\underset{mn}{A}\equiv(a_{ik})$, $\underset{mn}{B}\equiv(b_{ik})$ は等しいと定義しこれを

$$\underset{mn}{A}=\underset{mn}{B} \tag{1.2}$$

と書き表わす．

和ならびに**差**は $\underset{mn}{A}=(a_{ik})$, $\underset{mn}{B}=(b_{ik})$ ならば

$$\underset{mn}{A}\pm\underset{mn}{B}=(a_{ik}\pm b_{ik}) \tag{1.3}$$

即ち對應する要素の和ならびに差を要素とする行列と定義する．

すべての要素が 0 である行列を**零行列**と呼びこれを $\mathbf{O}$ で表わす．そのときは明らかに

$$\underset{mn}{A}\pm\underset{mn}{\mathbf{O}}=\underset{mn}{A} \tag{1.4}$$

が成立つ．

行列 $\underset{mn}{A}$ のすべての要素を共通に λ 倍したものを要素とする行列を $\lambda\underset{mn}{A}$ で表わす．

m 行 n 列の行列 $\underset{mn}{A}=(a_{ik})$ と n 行 l 列行列 $\underset{nl}{B}=(b_{jh})$ の**積**は

$$c_{ih}=\sum_{r=1}^{n}a_{ir}b_{rh},\qquad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12}\cdot\cdot\cdot a_{1n} \\ \cdot\cdot\cdot & \cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot \\ \boxed{a_{i1} \quad a_{i2}\cdot\cdot\cdot a_{in}} \\ \cdot\cdot\cdot & \cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot \\ a_{m1} & a_{m2}\cdot\cdot\cdot a_{mn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_{11}\cdot\cdot\cdot & b_{1h} & \cdot\cdot\cdot b_{1l} \\ b_{21}\cdot\cdot\cdot & b_{2h} & \cdot\cdot\cdot b_{2l} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{n1}\cdot\cdot\cdot & b_{nh} & \cdot\cdot\cdot b_{nl} \end{pmatrix} \tag{1.5}$$

を要素とする m 行 l 列の行列として定義しこれを

$$\underset{ml}{C} = \underset{mn}{A}\,\underset{nl}{B} = \left(\sum_{r=1}^{n} a_{ir} b_{rk}\right) \tag{1.6}$$

と書き表わす.

行列 (a_{ik}) の要素 a_{ik} が $i \neq k$ の場合には0で $i=k$ のときには1となるような場合は記號 δ_{ik} を用いて $(a_{ik})=(\delta_{ik})$ と書く.

$$(\delta_{ik}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \tag{1.7}$$

を $\underset{n}{E}$ で表わしこれを**單位行列**と稱する. E に關しては任意の行列 $\underset{mn}{A}, \underset{mn}{B}$ に對し

$$\underset{mn}{A}\,\underset{n}{E} = \underset{mn}{A} \qquad \underset{m}{E}\,\underset{mn}{B} = \underset{mn}{B} \tag{1.8}$$

が成立する.

實際我々が取扱う行列は例外的な場合を除けば, 以上の特殊の場合として $m=n$ 即ち行の數と列の數とが等しく正方形の形を有する場合である. この場合を $\underset{n}{A}$ 或は單に A と書き $m \neq n$ の場合は特に m 行 n 列の**矩形行列**と呼んで通常の場合と區別することにする.

(ii) 置換　n 箇のもの例えば $1, 2, 3, \cdots, n$ を $1', 2', 3', \cdots, n'$ に置き換える操作を**置換**と稱しこれを

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ 1' & 2' & 3' & \cdots & n' \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

で表わす. このとき數字の順序は任意であり, 唯 $p \to p'$ ということだけに意味があるものである.

今 Q を別の一つの置換とし適當に順序を換えて

$$Q = \begin{pmatrix} 1' & 2' & 3' & \cdots & n' \\ 1'' & 2'' & 3'' & \cdots & n'' \end{pmatrix} \tag{1.10}$$

と表わされるものとすれば, 先ず P を行つてからこれに續いて Q を行えば(**合成**), その結果は

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ 1'' & 2'' & 3'' & \cdots & n'' \end{pmatrix}$$

となり又一つの置換となる. これを積 QP として表わす. このとき**結合則**

$$R(QP) = (RQ)P \tag{1.11}$$

が成立する. n 箇の物の置換に關しては獨立なものが $n!$ 箇だけ存在しその中には **恒等置換** E 及び **逆置換** P^{-1} が含まれる. 置換の中で特に例えば $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & p \\ 2 & 3 & \cdots & p\,1 \end{pmatrix}$ のように $1\to 2$, $2\to 3$, $\cdots$, $p\to 1$ となつて再びもとの出發點 1 に戻るようなものを **循環** と名付ける. 一つの循環を表わすには

$$(1\,2\cdot\cdot\cdot p) \tag{1.12}$$

と書き, この數字の箇數 (p 箇) を循環の **長さ** という. これは $(2\,3\cdot\cdot\cdot p\,1)$ 等と書いても同じである. 任意の置換はこれを分解して, いくつかの循環の積に分解して表わすことができる. 長さ 1 の循環 $p\to p$ は之を省略する.

循環 (ijk) は $(ik)(ij)$ と同等である. (ij) のように長さ 2 よりなる循環を **交換** という. 從つて任意の置換は交換の積で表わし得ることになる. この分解は一義的ではないが, 一定の置換に對してはその交換の因子 (ij) の箇數は偶數か奇數かで一義的に決まる. 偶數のものを **偶置換** といい, 然らざるものを **奇置換** という.

(iii) 行列式 正方行列 (a_{ik}) $i, k=1, 2, \cdots, n$ 即ち

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{1.13}$$

の各行から1箇宛代表要素 $a_{1p_1}, a_{2p_2}, \cdots, a_{np_n}$ を選び, 同じ列に屬するものが 1 箇以上はないように, $p_1, p_2, \cdots, p_n$ はすべて異なるものとすれば, このような選び方は置換 $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_n \end{pmatrix}$ の數即ち $n!$ 箇だけある. これが偶置換であれば $+1$ を, 奇置換であれば -1 を表わす因子 $\varepsilon(p_1p_2\cdots p_n)$ を乘じて得られる表式

$$\sum_{(p_1p_2\cdots p_n)} \varepsilon(p_1p_2\cdots p_n)a_{1p_1}a_{2p_2}\cdots a_{np_n}$$

(但し $\sum_{(p_1p_2\cdots p_n)}$ は $n!$ 箇の置換 $(p_1p_2\cdots p_n)$ についての和を表わす) を行列 A に屬する **行列式** と稱しこれを $|A|\equiv|a_{ik}|$ 又は $\det A\equiv\det(a_{ik})$ と書き表わす.

$$\det A=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}=\sum_{(p_1p_2\cdots p_n)} \varepsilon(p_1p_2\cdots p_n)a_{1p_1}a_{2p_2}\cdots a_{np_n}. \tag{1.14}$$

上述の定義から右邊のある項に a_{ik} を含むときには, 他の因子は a_{ik} になることはないから結局行列式は, ある行又は列の要素につき一次式の形となる. 故に行列式は

$$|a_{ik}|=a_{1k}A_{1k}+a_{2k}A_{2k}+\cdots+a_{nk}A_{nk} \tag{1.15}$$

の形に展開されることが判る．A_{ik} を行列式 $|a_{ik}|$ に於ける要素 a_{ik} の**餘因子**という．

（定理） n^2 箇の x_{ik} の整函數 $F(x_{ik})$ でこれを $x_{i1}=x_1$, $x_{i2}=x_2$, $\cdots$, $x_{in}=x_n$ の函數即ち $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)=F(x_{ik})$ と見るとき

$$\left.\begin{array}{ll}(1) & f(x_1,x_2,\cdot\cdot\cdot,x_n)+f(y_1,y_2,\cdot\cdot\cdot,y_n)=f(x_1+y_1, x_2+y_2,\cdot\cdot\cdot,x_n+y_n)\\ (2) & F(x_{ik}) \text{ は } x_{i1}\cdot\cdot\cdot x_{in} \text{ と } x_{k1}\cdot\cdot\cdot x_{kn} \text{ との入れ換えに對して符號を變える}\\ (3) & x_{ii}=1,\ x_{ik}=0 \text{ のとき } F(x_{ik})=1\end{array}\right\} \tag{1.16}$$

ならば

$$F(x_{ik})=|x_{ik}| \tag{1.17}$$

（證明） 整函數 $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ は $\sum Mx_1^{\alpha_1}x_2^{\alpha_2}\cdots x_n^{\alpha_n}$ の形である．故に (1) が成立つとすれば $f(x_1+y_1,\ x_2+y_2,\ \cdots,\ x_n+y_n)$ を展開して y_i を含まない項を集めると $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ であり，從つてこの展開に於ける y_i の係數 $\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ は $x_1, x_2, \cdots, x_n$ を含まないことになるから $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ は一般に $a_1x_1+a_2x_2+\cdots+a_nx_n$ の形である．從つて n^2 箇の x_{ik} の整函數である $F(x_{ik})$ は $x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{in}$ についての一次式で表わされるから

$$F(x_{ik})=\sum\alpha(p_1\, p_2\ \cdot\cdot\cdot\ p_n)x_{1p_1}x_{2p_2}\cdot\cdot\cdot x_{np_n} \tag{1.18}$$

(2) により入れ換えると $(p_1p_1\cdots p_n)$ に交換 (p_ip_k) を施したものを $(q_1q_2\cdots q_n)$ とすれば

$$-F(x_{ik})=\sum\alpha(p_1p_2\cdot\cdot\cdot p_n)x_{1q_1}x_{2q_2}\cdot\cdot\cdot x_{nq_n}$$

となる． ところが $F(x_{ik})=\sum\alpha(q_1q_2\cdots q_n)x_{1q_1}x_{2q_2}\cdots x_{nq_n}$ であるから $\alpha(q_1q_2\cdots q_n)=-\alpha(p_1p_2\cdots p_n)$． 故に $F(x_{ik})$ の $x_{11}x_{22}\cdots x_{nn}$ の係數を $\alpha(12\cdots n)$ とすると

$$\begin{aligned}F(x_{ik})&=\alpha(12\cdot\cdot\cdot n)\sum\varepsilon(p_1p_2\cdot\cdot\cdot p_n)x_{1p_1}x_{2p_2}\cdot\cdot\cdot x_{np_n}\\&=\alpha(12\cdot\cdot\cdot n)|x_{ik}|=M|x_{ik}|\end{aligned} \tag{1.19}$$

となり (3) を適用すれば $F(x_{ik})=\alpha(12\cdots n)=1$ が成立つから

$$F(x_{ik})=|x_{ik}|. \qquad\text{（證明終）}$$

これより**轉置行列式** $(\widetilde{a_{ik}}=a_{ki})$ を $|\widetilde{a_{ik}}|=|\widetilde{A}|$ とすれば $|\widetilde{A}|=f(a_{i1}\cdots a_{in})$ に於て (1)，(2) は當然滿たされるから (1.19) が成立ち

$$F(a_{ik})=M|\widetilde{a_{ik}}|$$

特に $\widetilde{a_{ik}}=\delta_{ik}$ のときを考えると $M=1$ となり

$$F(a_{ik})=|A|=|\widetilde{A}| \tag{1.20}$$

で轉置行列式はもとの行列式に等しい．

今與えられた 2 箇の行列 A, B の積 AB に屬する行列式について考えよう．

$|AB|=|C|$ とすれば $|C|=|\sum_j a_{ij}b_{jk}|$. これを $F(a_{i1},\cdots,a_{in})$ と考えることにより $a_{ij}=a_{ij}'+a_{ij}''$ $(j=1,2,\cdots,n)$ とすれば

$$F(a_{i1},\cdot\cdot\cdot,a_{in})=F(a_{i1}',\cdot\cdot\cdot,a_{in}')+F(a_{i1}'',\cdot\cdot\cdot,a_{in}'') \tag{1.21}$$

で, (1.16) の (1) を滿たし $(a_{i1},\cdots,a_{in})$ と $(a_{k1},\cdots,a_{kn})$ の入れ換えにより, $|C|$ の列の入れ換えから當然符號を換えるので (2) を滿たす, 故に上述の定理より (1.19) が成立つ. 故に

$$|C|=M|a_{ik}| \tag{1.22}$$

ここで $a_{ik}=\delta_{ik}$ とおくことにより $|C|=|b_{ik}|=M$ となり M が求まり結局

$$|AB|=|A||B| \tag{1.23}$$

從つて行列の積の行列式は行列式の積に等しい.

m 行 n 列の矩形行列のものについては, $|\underset{mn}{A}\ \underset{nm}{B}|=|\underset{m}{C}|$ (但し $C_{ik}=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}b_{jk}$ $i,k=1,2,\cdots,m$) とすると左邊は,

$$\Bigl|\sum_j a_{ij}b_{j1},\cdot\cdot\cdot,\sum_j a_{ij}b_{jm}\Bigr|=\sum_{\substack{p_1=1,\cdots,n\\ \cdots\cdots\\ p_m=1,\cdots,n}}\bigl|a_{ip_1}b_{p_11},a_{ip_2}b_{p_22},\cdot\cdot\cdot,a_{ip_m}b_{p_mm}\bigr|$$

$j=1\cdots n$

$$=\sum_{\left(\substack{p_1=1,\cdots,n\\ \cdots\cdots\\ p_m=1,\cdots,n}\right)}b_{p_11}\cdot\cdot\cdot b_{p_mm}\bigl|a_{ip_1},\cdot\cdot\cdot,a_{ip_m}\bigr|. \tag{1.24}$$

この $\sum$ の中で $p_i=p_k$ なるような項は 0 であるから $(p_1,\cdots,p_m)$ の組はすべての p_i が異なるように選ばねばならぬから,

$m>n$ のときは m 箇の p_i は必ず何れかに一致するために $|AB|=0$.

$m<n$ のときは異なる $p_1,\cdots,p_m$ の組合せは $\binom{n}{m}$ 箇ありその各について和をとればよい. 從つて,

$$\Bigl|AB\Bigr|=\sum_{p_1<p_2<\cdots<p_m\leq n}\Bigl|A_{p_1p_2\cdots p_m}\Bigr|\Bigl|B_{p_1p_2\cdots p_m}\Bigr|,\qquad (m<n). \tag{1.25}$$

ここに $|A_{p_1p_2\cdots p_m}|$ は $|A|$ より p_1 列, p_2 列, …, p_m 列だけとつて作つた m 次行列式であり, $|B_{p_1p_2\cdots p_m}|$ は $|B|$ より p_1行, p_2 行, …, p_m 行だけとつて作つた m 次の行列式である. これを **Lagrange の恒等式**という.

n 次の正方行列式 $|A|=|a_{ik}|$ に於て $A_{ik}=\dfrac{\partial|A|}{\partial a_{ik}}=(-1)^{i+k}\begin{bmatrix}i\\k\end{bmatrix}$ が成立つ.

ここに $\begin{bmatrix}i\\k\end{bmatrix}$ は $|A|$ より i 行 k 列を除いて作つた $n-1$ 次の小行列式を表わす. 故に

$$|A|=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}A_{ik}=\sum_{k=1}^{n}(-1)^{i+k}a_{ik}\begin{bmatrix}i\\k\end{bmatrix}. \tag{1.26}$$

又,

$$|A| = \sum (-1)^{i+k+p+q} \begin{pmatrix} ik \\ pq \end{pmatrix} \begin{bmatrix} ik \\ pq \end{bmatrix} \tag{1.27}$$

なる展開式も成立つ. ここに $\begin{pmatrix} ik \\ pq \end{pmatrix}$ は $|A|$ の i 行 k 列と p 行 q 列の交點にある4箇の要素で作つた小行列式であり, $\begin{bmatrix} ik \\ pq \end{bmatrix}$ はその行と列とを除いて作つた $n-2$ 次の小行列式である. 更にこれらの一般化された展開式として

$$|A| = \sum (-1)^{\Sigma(i_r+p_s)} \begin{pmatrix} i_1 i_2 \cdot \cdot \cdot \cdot i_r \\ p_1 p_2 \cdot \cdot \cdot \cdot p_r \end{pmatrix} \begin{bmatrix} i_1 i_2 \cdot \cdot \cdot i_r \\ p_1 p_2 \cdot \cdot \cdot p_r \end{bmatrix} \tag{1.28}$$

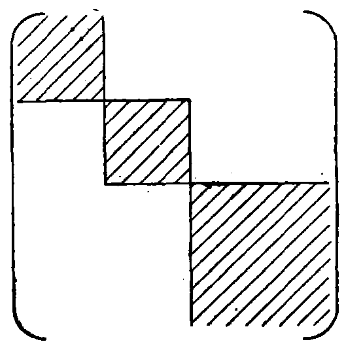
がある. 従つて階段行列式 (第1圖) は各の小行列式の積として展開される.

今, 二つの行列の積

$$\underset{n}{A} \underset{nr}{X} = \underset{nr}{C} \tag{1.29}$$

に於て A, C を知るときは, この關係を滿たす行列 $\underset{nr}{X}$ は $|\underset{n}{A}| \neq 0$ の條件のもとに一義的にきまる. 何故なら一次方程式を行列の形で書くと

$$\begin{pmatrix} a_{11} \cdot \cdot \cdot a_{1n} \\ \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \\ a_{n1} \cdot \cdot \cdot a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}. \tag{1.30}$$



第1圖

行列 A の第 k 列 $(a_{1k}, \cdots, a_{nk})$ を $(f_1, \cdots, f_n)$ でおき換えた行列を

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11} \cdot \cdot \cdot f_1 \cdot \cdot \cdot a_{1n} \\ \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \\ a_{n1} \cdot \cdot \cdot f_n \cdot \cdot \cdot a_{nn} \end{pmatrix}. \tag{1.31}$$

とすれば, その解は

$$x_k = \frac{|A^{(k)}|}{|A|} \qquad (\text{但し } |A| \neq 0) \tag{1.32}$$

で與えられる. もし $f_i=0$ $(i=1,2,\cdots,n)$ なら $|A| \neq 0$ のもとでは $x_k=0$ となり, 従つて $(x_1, \cdots, x_n)$ が恒等的に 0 ならざる解が存在するためには $|A| \neq 0$ が必要である. この定理より (1.29) を滿たす $\underset{nr}{X}$ なる行列要素 $(x_{11}, \cdots, x_{n1})$ は $|\underset{n}{A}| \neq 0$ の條件のもとに $c_{i1} \neq 0$ $(i=1,2,\cdots)$ に對し一義的に求まることが知れる.

従つて $\underset{nn}{A}\underset{n}{X}=\underset{n}{E}$ を滿たす $\underset{n}{X}$ の存在は $|\underset{n}{A}|\neq 0$ のもとに保證される．これを A の**逆行列**と呼び A^{-1} で表わす．定義により $\underset{nn}{A}A^{-1}=\underset{n}{E}$. 故に $|A||A^{-1}|=1$. これより

$$|A^{-1}| = \frac{1}{|A|} \tag{1.33}$$

なる關係があることが判る．

行列の積の逆行列に關しては次の關係がある．

$$(B\ A)^{-1} = A^{-1}\ B^{-1}, \qquad (|A|\neq 0,\ |B|\neq 0). \tag{1.34}$$

それは BA との積を作つて見ることにより直ちに確められる．

（定義） ある矩形行列に於て，その中の任意の行，列より作つた m 次の行列式に於て，0 にならないものがあるとし，その m の最大數を ρ とするとき，ρ の値を，その行列の**階位數**（Rang）という．即ち

$$\mathrm{Rang}\, A = \rho. \tag{1.35}$$

この定義によれば (1.30) で $f\equiv 0$ なる 齊次方程式が恒等的に 0 ならざる解をもつためには Rang $\underset{n}{A}=\rho<n$ が必要である，ということになる．

§2. 一次形式及びベクトルの線型的獨立性

（i） 一次形式の線型的獨立性

（定理）

$$\left.\begin{array}{l} a_{11}x_1+\cdot\cdot\cdot+a_{1n}x_n=f_1 \\ \cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot \\ a_{m1}x_1+\cdot\cdot\cdot+a_{mn}x_n=f_m \end{array}\right\} \qquad A=\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ & \cdots\cdots & \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn}\end{pmatrix} \tag{2.1}$$

に於て任意の x_i につき $f_1,\cdots,f_m$ が線型的に從屬する必要且つ十分な條件は，

$$\mathrm{Rang}\, A = \rho < m \tag{2.2}$$

なることである．

（證明） 必要條件であること．

$\lambda_1 f_1+\cdots+\lambda_m f_m=0$ は從屬條件より，すべては消えない $\lambda_1,\cdots,\lambda_m$ に對してこの式は成立するはずであるから，x_i の任意性より，

$$\left.\begin{array}{l} \lambda_1 a_{11}+\lambda_2 a_{21}+\cdot\cdot\cdot+\lambda_m a_{m1}=0 \\ \cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot \\ \lambda_1 a_{1n}+\lambda_2 a_{2n}+\cdot\cdot\cdot+\lambda_m a_{mn}=0 \end{array}\right\} \tag{2.3}$$

なる n 箇の式が得られる．$n \geqq m$ のとき，この n 箇の式の中の任意の m 箇を選んだとき，$\lambda_1, \cdots, \lambda_m$ が恒等的に消えない根を持つためには，その m 箇の式の λ_i の係数より作られる m 次の行列式 D_m について $D_m=0$ が成立つから

$$\mathrm{Rang}\, A = \rho < m$$

が必要である．

十分條件であること．

逆に $\mathrm{Rang}\, A = \rho$ で $\rho = r < m \leqq n$ とすれば A より作つた r 次の行列式の中，少くも一つは 0 にならないから，それを適當に行，列を入れ換えて

$$D_r = \begin{vmatrix} a_{11} \cdot \cdot \cdot a_{1r} \\ \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \\ a_{r1} \cdot \cdot \cdot a_{rr} \end{vmatrix} \neq 0 \qquad (2.4)$$

と書くことができる．この D_r に第 $r+1$ 行，$r+1$ 列をつけ加えて D_{r+1} を作れば

$$D_{r+1} = \begin{vmatrix} a_{11} \cdot \cdot \cdot a_{1r} & a_{1r+1} \\ \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot & \vdots \\ a_{r1} \cdot \cdot \cdot a_{rr} & \vdots \\ a_{r+11} \cdot \cdot \cdot & a_{r+1r+1} \end{vmatrix} = 0$$

今 a_{ir+1} の餘因子を C_i とすれば $C_{r+1} \neq 0$ である．行列式 D_{r+1} の第 $r+1$ 列をそれぞれ第1列，第2列，… 第 r 列に一致させた行列式を最後の列で展開すれば，

$$C_1 a_{11} + C_2 a_{21} + \cdot \cdot \cdot + C_{r+1} a_{r+11} = 0$$
$$\cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot$$
$$C_1 a_{1r} + C_2 a_{2r} + \cdot \cdot \cdot + C_{r+1} a_{r+1r} = 0$$

又 D_{r+1} 自身を最後の列で展開すれば，

$$C_1 a_{1r+1} + C_2 a_{2r+1} + \cdot \cdot \cdot + C_{r+1} a_{r+1r+1} = 0$$

又 D_{r+1} の最後の列を $a_{1k}, a_{2k}, \cdots, a_{r+1k}$ $(k=r+2, r+3, \cdots, n)$ で置換した式を考えると $\rho=r$ の假定から何れも 0 に等しい．これを最後の列で展開して

$$C_1 a_{1r+2} + C_2 a_{2r+2} + \cdot \cdot \cdot + C_{r+1} a_{r+1r+2} = 0$$
$$\cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot$$
$$C_1 a_{1n} + C_2 a_{2n} + \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot + C_{r+1} a_{r+1n} = 0.$$

以上の n 箇の式に上から順に x_i $(i=1,2,\cdots,n)$ を掛けて加えると，