

スピン，一般化角運動量と角運動量の合成^{1 2}

1 スピンとその性質

1.1 スピン自由度の導入の歴史と意味と応用

1. Na原子からのスペクトルの二重線³の観測
2. 1925年，ハウシュミット⁴とウーレンベック⁵によるスピン自由度の導入：
「電子は，その空間座標や運動量など（の外部自由度）では表現できない，新しい自由度（内部自由度）とそれに付随する角運動量を持っている」.
3. 1927年，パウリ⁶によるスピン行列（またはパウリ行列）の導入
4. 1932年，ディラック⁷の相対論的電子論（＝量子力学と特殊相対論の結合）：
スピン自由度の起源は相対論にあること．マイナス・エネルギーをもつ「海」として「真空」という解釈．電子の反粒子としての陽電子⁸の発見.
5. 物質構成粒子としてのフェルミ型粒子（フェルミオン⁹）と相互作用媒介粒子としてのボース型粒子（ボソン¹⁰），それらを区別する半整数スピン値と整数スピン値
6. 多電子原子や分子の量子力学的な理解のためには，スピン自由度およびそれと軌道角運動量の結合，複数の電子スピンの合成が不可欠である.
7. 物質の磁性の起源としての電子スピン [6]
8. 測定技術，診断技術への応用：電子スピン共鳴¹¹
9. 化学反応へのスピンの影響も研究されつつある [14].

¹filename=spin-angular-momentum-coupling20200719B.tex

²作成者：岡本良治（九州工業大学名誉教授）．誤り，説明など分かりにくいことがあれば本ファイル名と該当箇所を明記して，okamoto.ryoji.munakata_at_gmail.com（_at_を@に修正後）にメールで連絡願います。

³doublet

⁴Goudsmit

⁵Uhlenbeck

⁶Pauli

⁷Dirac

⁸positron

⁹fermion

¹⁰boson

¹¹electron-spin resonance, ESR,.

スピンと角運動量についての入門的理解のためには量子力学の教科書か [1] などを参照のこと。角運動量と関連した詳細な事項についての成書としては [2], [3], [4] などを参照のこと。

1.2 スピン演算子とその交換関係

電子は空間座標 (x, y, z) という外部自由度のほかに、スピン (spin) と呼ばれる内部自由度をもつ。このスピン自由度はスピン角運動量を伴い、それは量子力学においてはスピン演算子 \hat{s} となる。スピンの大きさは $\hbar/2$ であり、その z 成分の大きさを m_s であらわし、その値は $\hbar/2$ と $-\hbar/2$ であり。スピン座標 σ が取り得る値はこの2つのみである。

スピンに関する現象は理論的にはスピン演算子 $\hat{s} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$ により表現される。スピン演算子の間に次の交換関係が成立する。

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar\hat{s}_z, \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hbar\hat{s}_x, \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hbar\hat{s}_y. \quad (1.1)$$

スピン二乗演算子を次のように定義する。

$$\hat{s}^2 \equiv \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 \quad (1.2)$$

このとき、スピン演算子とスピン二乗演算子は可換である。

$$[\hat{s}^2, \hat{s}_x] = [\hat{s}^2, \hat{s}_y] = [\hat{s}^2, \hat{s}_z] = 0 \quad (1.3)$$

式 (1.1) と (1.3) より、スピン二乗演算子と3つのスピン演算子の1つだけが交換するので、同時固有状態が可能である。通常、同時固有状態を可能にする可換な演算子としてスピン二乗演算子とスピン演算子の z 成分を考える。このとき、スピン演算子の量子化軸を z 軸に選ぶという。スピン演算子の z 成分は、スピン演算子の x, y 成分と比べて特殊ではない。系の外部から磁場をかけるときに、磁場の方向を z 軸にする。

また、軌道角運動量と同様にして、スピン昇降演算子を次のように定義する。

$$\hat{s}_{\pm} \equiv \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y, \quad (1.4)$$

$$\rightarrow \hat{s}_x = \frac{\hat{s}_+ + \hat{s}_-}{2}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hat{s}_+ - \hat{s}_-}{2i} \quad (1.5)$$

すると

$$[\hat{s}_z, \hat{s}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{s}_{\pm}, \quad (1.6)$$

$$[\hat{s}_+, \hat{s}_-] = 2\hbar\hat{s}_z \quad (1.7)$$

という交換関係が成立する。もちろん

$$[\hat{s}^2, \hat{s}_{\pm}] = 0 \quad (1.8)$$

である。

1.3 スピン演算子の固有値, 固有ベクトル

スピン二乗演算子とスピン演算子の z 成分の同時固有状態を 2 成分のケット・ベクトル (ket vector) (スピナー, スピノール, spinor と呼ばれる) で次のように表わす.

$$|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, |\beta\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (1.9)$$

これらのベクトルの間に直交規格性

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = [1, 0] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 1, \quad (1.10)$$

$$\langle\beta|\beta\rangle = [0, 1] \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 1, \quad (1.11)$$

$$\langle\alpha|\beta\rangle = [1, 0] \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 = \langle\beta|\alpha\rangle \quad (1.12)$$

がある. また完備性 (完全性) も次のように成り立つ.

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle\langle\alpha| + |\beta\rangle\langle\beta| &= [1, 0] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + [0, 1] \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \hat{1}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

完全性により, 2次元の任意のケット・ベクトルは $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$ によって展開される. 2次元の任意の複素列ベクトル $|A\rangle$ に対して

$$\begin{aligned} |A\rangle &= (|\alpha\rangle\langle\alpha| + |\beta\rangle\langle\beta|)|A\rangle \\ &= (\langle\alpha|A\rangle)|\alpha\rangle + (\langle\beta|A\rangle)|\beta\rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

と展開される.

これらのケット・ベクトルは次の固有値方程式を満たす.

$$\hat{s}_z|\alpha\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle, \quad (1.15)$$

$$\hat{s}_z|\beta\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\beta\rangle, \quad (1.16)$$

$$\hat{s}^2|\alpha\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\alpha\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\alpha\rangle, \quad (1.17)$$

$$\hat{s}^2|\beta\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\beta\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\beta\rangle. \quad (1.18)$$

また、固有ベクトルを $|sm\rangle$, すなわち $|\alpha\rangle = |1/2, 1/2\rangle, |\beta\rangle = |1/2, -1/2\rangle$ と表すと、交換関係と演算子のエルミート性から

$$\langle sm'|\hat{s}_z|sm\rangle = m\hbar\delta_{m'm}, \quad (1.19)$$

$$\langle sm'|\hat{s}^2|sm\rangle = \hbar^2s(s+1)\delta_{m'm}, \quad (1.20)$$

$$\langle sm'|\hat{s}_\pm|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1)-m(m\pm 1)}\delta_{m'm\pm 1} \quad (1.21)$$

が得られる。この導出は軌道角運動量の場合と同様にして行われる。

1.4 スピン演算子の行列表現とパウリのスピン行列

行列要素の式 (1.19), (1.20), (1.21) において, $m = 1/2$ を状態 $|\alpha\rangle$ に対応させるように, 行列要素を構成すれば, スピン演算子 \hat{s} の x, y, z 成分 $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ の行列表現はパウリのスピン行列またはパウリ行列 ($\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$)¹² を用いて, 次のように与えられる。

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z, \quad (1.22)$$

$$\hat{\sigma}_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

スピン昇降演算子の行列表現は

$$\hat{s}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.24)$$

$$\hat{s}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

となる。

これらをスピン固有ベクトルに演算すると, 図1に示されるように

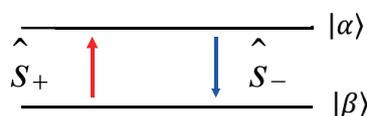


図 1: スピン二重項状態と昇降演算子。

$$\hat{s}_+|\beta\rangle = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

¹²($\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$) に単位行列 $\hat{1}$ を加えた 4 つの (2×2) 行列の組をパウリ行列という場合もある。

$$= \hbar|\alpha\rangle, \quad (1.26)$$

$$\begin{aligned} \hat{s}_-|\alpha\rangle &= \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= \hbar|\beta\rangle, \end{aligned} \quad (1.27)$$

$$\hat{s}_+|\alpha\rangle = \hat{s}_-|\beta\rangle = 0 \quad (1.28)$$

となるので，昇降演算子の意味も理解しやすいであろう。

パウリのスピン行列の性質とその有用性については附録 A を参照。

2 一般化角運動量

あるエルミート（ベクトル）演算子 $\hat{\mathbf{j}} = (\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z)$ がその x, y, z 成分について次の交換関係を満たすとする。

$$[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hbar\hat{j}_z, \quad [\hat{j}_y, \hat{j}_z] = i\hbar\hat{j}_x, \quad [\hat{j}_z, \hat{j}_x] = i\hbar\hat{j}_y, \quad (2.1)$$

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_x] = [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_y] = [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_z] = 0. \quad (2.2)$$

ここで，定義

$$\hat{\mathbf{j}}^2 \equiv \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 \quad (2.3)$$

を用いた。さらに，対応する昇降演算子 \hat{j}_\pm

$$\hat{j}_\pm \equiv \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y, \quad (2.4)$$

$$\hat{j}_x \equiv \frac{\hat{j}_+ + \hat{j}_-}{2}, \quad \hat{j}_y \equiv \frac{\hat{j}_+ - \hat{j}_-}{2i} \quad (2.5)$$

を定義すると，角運動量 2 乗演算子 (2.3) は，その行列要素の計算に便利な形に書き直される。

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \frac{1}{2}(\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+) + \hat{j}_z^2. \quad (2.6)$$

さらに，角運動量の x, y 成分演算子の行列要素の計算に必要な交換関係

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hbar\hat{j}_\pm, \quad (2.7)$$

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hbar\hat{j}_z \quad (2.8)$$

が成立する。

$\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_z$ を同時に対角化する固有関数 ψ_{jm} (または，対応する量子状態 $|jm\rangle$ (ディラックのブラケット表示参照)) に作用させると，

$$\hat{\mathbf{j}}^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle, \quad (2.9)$$

$$\hat{j}_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle, \quad (2.10)$$

$$\hat{j}_\pm|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|jm \pm 1\rangle \quad (2.11)$$

が得られる。これらの演算子の行列要素の値は

$$\langle j'm'|\hat{j}^2|jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \hbar^2 j(j+1), \quad (2.12)$$

$$\langle j'm'|\hat{j}_z|jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \hbar m, \quad (2.13)$$

$$\langle j'm'|\hat{j}_\pm|jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{m',m\pm 1} \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} \quad (2.14)$$

のように求まる。このような演算子 \hat{J} を一般化された角運動量という。軌道角運動量 $\hat{\ell}$ 、スピン角運動量 \hat{s} もその一例である。上記の性質は交換関係とエルミート性だけから導出されることに注意する。

3 スピン軌道相互作用，それによる軌道角運動量の非保存と全角運動量の保存

3.1 スピン軌道相互作用-その起源と事例-

原子(元素)の周期律の背景としての電子系の独立粒子模型(殻模型)が成立することは、原子が芯としての原子核からのクーロン力に支配される量子系であるために、理解されやすい。(ファインマン物理学5(量子力学), 岩波書店, 1979年, 15章)。ここで、原子の中の電子に対する相対論的な効果のひとつとしてスピン軌道結合効果が存在することもよく知られている。原子におけるスピン軌道結合は励起スペクトルの微細構造の原因の一つとして現れる。

しかし、陽子同士、中性子同士及び両者の間に強い相互作用の働く原子核においても殻模型が成立し、最初の数個の魔法の数(原子核が安定になる陽子数、中性子数)が説明されたときには人々は大いに驚いた。(前掲書)。原子とは異なり、原子核におけるスピン軌道結合効果は非常に重要な役割を果たしている。まず、その効果の向きは、電子の場合には軌道角運動量とスピンの逆向きの状態を低くするが、原子核ではその逆である。次に、その効果の大きさは励起スペクトルの微細構造ではなく、主要な構造と見なせる程度にも達する。実は、陽子数や中性子数が特別な数(魔法数)の原子核がより安定になる理由などを説明するために、原子核におけるスピン軌道結合が現象論的に導入されたのである。これは原子核の殻構造に関する発見として、1963年、マイヤー(Maria Goeppert-Mayer)とイェンゼン(Johannes Hans Daniel Jensen)のノーベル物理学賞受賞につながった。しかし、その微視的な仕組みについては、相対論的な効果、多体相関、3体力などの可能性が研究されているが、現在も十分な理解には達していない。

3.2 スピン軌道相互作用と全角運動量の保存

ハミルトニアン \hat{H} がクーロン力のような中心力しか含まない場合、軌道角運動量演算子 $\hat{\ell}$ と交換する、すなわち $[\hat{H}, \hat{\ell}] = 0$ となり、軌道角運動量は保存され、量

子状態を指定する量子数となる。

しかし、ハミルトニアン \hat{H} にスピン軌道相互作用

$$\hat{H}_{so} \equiv \lambda \hat{\ell} \cdot \hat{s} \quad (\lambda : \text{定数}) \quad (3.1)$$

も含まれる場合には、以下述べるように、軌道角運動量は保存されない。

まず軌道角運動量演算子との交換関係を計算する。

$$\begin{aligned} [\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \hat{\ell}_x] &= [\hat{\ell}_x \hat{s}_x + \hat{\ell}_y \hat{s}_y + \hat{\ell}_z \hat{s}_z, \hat{\ell}_x] \\ &= [\hat{\ell}_y \hat{s}_y, \hat{\ell}_x] + [\hat{\ell}_z \hat{s}_z, \hat{\ell}_x] \\ &= [\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_x] \hat{s}_y + [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] \hat{s}_z \\ &= i\hbar \hat{\ell}_y \hat{s}_z - i\hbar \hat{\ell}_z \hat{s}_y. \end{aligned} \quad (3.2)$$

同様に、添え字についての輪環の順 ($x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$) を考慮すれば

$$[\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \hat{\ell}_y] = i\hbar \hat{\ell}_z \hat{s}_x - i\hbar \hat{\ell}_x \hat{s}_z, \quad (3.3)$$

$$[\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \hat{\ell}_z] = i\hbar \hat{\ell}_x \hat{s}_y - i\hbar \hat{\ell}_y \hat{s}_x \quad (3.4)$$

が得られる。このように、スピン軌道相互作用に対して、軌道角運動量演算子 $\hat{\ell}$ は交換しない、すなわち保存しないことが証明された。

スピンは保存されるだろうか。スピン演算子 \hat{s} との交換関係は、新たに計算する必要はなく、前の結果において、 $\hat{\ell}$ と \hat{s} の役割を入れ替えればよい。すなわち

$$[\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \hat{s}_x] = i\hbar \hat{s}_y \hat{\ell}_z - i\hbar \hat{s}_z \hat{\ell}_y, \quad (3.5)$$

$$[\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \hat{s}_y] = i\hbar \hat{s}_z \hat{\ell}_x - i\hbar \hat{s}_x \hat{\ell}_z, \quad (3.6)$$

$$[\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \hat{s}_z] = i\hbar \hat{s}_x \hat{\ell}_y - i\hbar \hat{s}_y \hat{\ell}_x \quad (3.7)$$

が容易に得られる。スピン軌道相互作用に対して、スピン角運動量演算子 \hat{s} も交換しない、すなわち保存しないことが証明された。

それでは軌道角運動量とスピン角運動量の和は保存されるだろうか。式 (3.2) と式 (3.5) を辺々加えれば

$$[\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \hat{\ell}_x + \hat{s}_x] = 0 \quad (3.8)$$

が得られる。同様に、 y, z 成分についても交換関係はゼロとなる。すなわち、 $[\hat{\ell} \cdot \hat{s}, \hat{\ell}_x + \hat{s}_x] = 0$ となる。ゆえに、スピン軌道相互作用がある場合は、全角運動量 $\hat{j} \equiv \hat{\ell} + \hat{s}$ が保存される。

4 角運動量の合成

水素原子は一つの電子しかないが、多電子原子の性質、例えば、元素の周期律などを理解するためには、1電子の軌道角運動量とスピン、2電子のスピンの取

り扱う必要がある。軌道角運動量演算子の交換関係を基礎にして軌道角運動量の種々の性質を導いたように、角運動量概念を一般化し、1電子のスピン軌道結合効果、多電子原子の全角運動量とそれに関連した物理的性質を定量的に議論するには複数の一般化角運動量を系統的な方法で合成する必要がある。

2つの可換な角運動量演算子 \hat{j}_1, \hat{j}_2 が与えられているとする。

$$[\hat{j}_1, \hat{j}_2] = 0 \quad ([\hat{j}_a, \hat{j}_b] = 0, \{a, b\} = x, y, z) \quad (4.1)$$

式 (4.1) はベクトル演算子 \hat{j}_1, \hat{j}_2 の各成分間はずべて可換であることを意味する。

ここで、これらの角運動量演算子の合成 (ベクトル和)

$$\hat{J} \equiv \hat{j}_1 + \hat{j}_2$$

を以下の二つの方法で考える。

4.1 角運動量の合成 (1) : ベクトル模型による直観的方法

角運動量演算子 $\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z}$ の同時固有関数を $\psi_{j_1 m_1}$, 同じく $\hat{j}_2^2, \hat{j}_{2z}$ の同時固有関数を $\psi_{j_2 m_2}$ と表す。合成角運動量の2乗演算子 $\hat{J}^2 (\equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2)$ の固有値を $\hbar^2 J(J+1)$ と記す場合、 J として、離散的な値

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2| \quad (4.2)$$

だけが可能である。(角運動量の量子化)。演算子 \hat{J}_z の固有値を $\hbar M$ とすると、それぞれの J の値に対して、

$$M = J, J - 1, \dots, -J + 1, -J \quad (4.3)$$

となる。これを図2に示す。ここで M のとりうる値を調べる。($j_1 \leq j_2$ と考えて

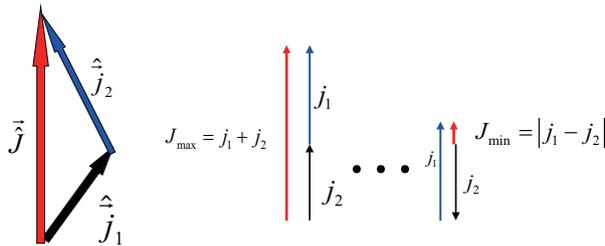


図 2: 角運動量の合成。

も一般性を失わないので、そう考えると)、ある J の値に対して、とりうる M の値は $2J + 1$ 個だから、合計

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = [2(j_1-j_2)+1] + [2(j_1-j_2+1)+1] + \dots + [2(j_1+j_2)+1] \quad (4.4)$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{2j_2} [2(j_1 - j_2 + n) + 1] &= 2(j_1 - j_2)(2j_2 + 1) + (2j_2)(2j_2 + 1) + 2j_2 + 1 \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \end{aligned} \quad (4.5)$$

が得られる。この値は、合成する前の、 m_1 のとりうる場合の数 $(2j_1 + 1)$ と m_2 のとりうる場合の数 $(2j_2 + 1)$ の積に一致する。

可換な二つの角運動量 (演算子) について有用な公式として

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{J}})^2 &= \hat{\mathbf{j}}_1^2 + \hat{\mathbf{j}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2 \\ &= \hat{\mathbf{j}}_1^2 + \hat{\mathbf{j}}_2^2 + 2\hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z} + (\hat{j}_{1+}\hat{j}_{2-} + \hat{j}_{1-}\hat{j}_{2+}), \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\rightarrow \hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2 = \frac{1}{2}[\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{j}}_1^2 - \hat{\mathbf{j}}_2^2] \quad (4.7)$$

$$\rightarrow \hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2 = \frac{1}{2}(\hat{j}_{1+}\hat{j}_{2-} + \hat{j}_{1-}\hat{j}_{2+}) + \hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z} \quad (4.8)$$

がある。式 (4.7) は右辺のそれぞれの角運動量の固有状態に演算させたと考えれば

$$\hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2 = \frac{\hbar^2}{2}[J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]. \quad (4.9)$$

と表現してもよい。

4.2 角運動量の合成 (2) 量子力学的方法

2つの角運動量の和の演算子の固有状態を求めるときは、次の性質が有用である。

1. 合成された角運動量の成分はふたつの角運動量の成分の和に等しい。
2. 合成された角運動量の値 J に対して、対応する z 成分の値 M は $M = J, J-1, \dots, -J+1, -J$ という $(2J+1)$ 通りの値をとる。
3. J または M の異なる固有状態同士は直交する。

演算子 $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{j}_z$ の固有値が、それぞれ $\hbar^2 J(J+1), \hbar M$ である固有状態 $|JM\rangle$ は、直積状態 $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ ($m_1 = -j_1, -j_1+1, \dots, j_1-1, j_1; m_2 = -j_2, -j_2+1, \dots, j_2-1, j_2$) の一次結合で次のように書かれる。

$$|JM\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle. \quad (4.10)$$

ただし、 $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle$ は重ね合わせの係数であり、クレブシュ・ゴルダン係数¹³と呼ばれる。式 (4.10) の意味は何か。2つの角運動量演算子の固有状態の組

¹³Clebsch-Gordan coefficient

$\{|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle (m_1 = -j_1, -j_1+1, \dots, j_1-1, j_1; m_2 = -j_2, -j_2+1, \dots, j_2-1, j_2)\}$ が完全系をなす, すなわち

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle\langle j_1 m_1|\langle j_2 m_2| = \hat{1} \quad (4.11)$$

が成り立ち,

$$\begin{aligned} |JM\rangle &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle\langle j_1 m_1|\langle j_2 m_2|JM\rangle \\ &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} [\langle j_1 m_1|\langle j_2 m_2|JM\rangle]|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle \end{aligned} \quad (4.12)$$

において, $[\langle j_1 m_1|\langle j_2 m_2|JM\rangle] \equiv \langle j_1 m_1 j_2 m_2|JM\rangle$ であるとみなせば, クレブシュ・ゴルダン係数はまさに固有状態 $|JM\rangle$ の展開係数とみなしてよい.

クレブシュ・ゴルダン係数の具体例を次にまとめる.

1. 2つの電子のスピン角運動量 ($s = 1/2$) の合成におけるクレブシュ・ゴルダン係数

$$\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ 1/2 | 1 \ 1 \rangle = 1, \quad (4.13)$$

$$\langle 1/2 \ \bar{1}/2 \ 1/2 \ \bar{1}/2 | 1 \ \bar{1} \rangle = 1, \quad (4.14)$$

$$\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ \bar{1}/2 | 1 \ 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (4.15)$$

$$\langle 1/2 \ \bar{1}/2 \ 1/2 \ 1/2 | 1 \ 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (4.16)$$

$$\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ \bar{1}/2 | 0 \ 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (4.17)$$

$$\langle 1/2 \ \bar{1}/2 \ 1/2 \ 1/2 | 0 \ 0 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (4.18)$$

これらのクレブシュ・ゴルダン係数を持ちいて合成スピン状態は次のように表される.

$$|1 \ 1\rangle = |\alpha_1\alpha_2\rangle, \quad (4.19)$$

$$|1 \ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha_1\beta_2\rangle + |\beta_1\alpha_2\rangle), \quad (4.20)$$

$$|1 \ \bar{1}\rangle = |\beta_1\beta_2\rangle, \quad (4.21)$$

$$|0 \ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha_1\beta_2\rangle - |\beta_1\alpha_2\rangle). \quad (4.22)$$

スピン状態ベクトルの直交規格性, $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij} = \langle\beta_i|\beta_j\rangle, \langle\alpha_i|\beta_i\rangle, (i, j) = 1, 2$ を用いれば, 以上に得られた合成スピン状態も直交規格性

$$\langle 1 \ 1 | 1 \ 1 \rangle = \langle 1 \ 0 | 1 \ 0 \rangle = \langle 1 \ \bar{1} | 1 \ \bar{1} \rangle = \langle 0 \ 0 | 0 \ 0 \rangle = 1, \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned}
\langle 1\ 1|1\ 0\rangle &= \langle 1\ 1|1\ \bar{1}\rangle = \langle 1\ 1|0\ 0\rangle = \langle 1\ 0|1\ \bar{1}\rangle = \langle 1\ 0|0\ 0\rangle \\
&= \langle 1\ \bar{1}|0\ 0\rangle = 0
\end{aligned} \tag{4.24}$$

を満たすことが分かる。

ここで、式(4.19), (4.20) と(4.21) で表される3つ組の状態をスピン三重項¹⁴, 式(4.22) で表される状態をスピン一重項¹⁵と呼ぶ。式(4.20) で表される状態はスピン交換という演算に対して符号を変えない(スピン対称状態である)が、式(4.22) で表される状態はスピン交換という演算に対して符号を変える(スピン反対称状態である)ことに注意しよう。

2. スピン角運動量 (s=1/2) と軌道角運動量の合成

後述のように、スピン軌道相互作用により、軌道角運動量が保存しなくなるが、スピン角運動量 (s=1/2) と軌道角運動量の合成された全角運動量が保存される。

$$\langle \ell\ m_\ell\ 1/2\ 1/2|\ell + 1/2\ m\rangle = \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}, (m = m_\ell + 1/2), \tag{4.25}$$

$$\langle \ell\ m_\ell\ 1/2\ \bar{1}/2|\ell + 1/2\ m\rangle = \sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}, (m = m_\ell - 1/2), \tag{4.26}$$

$$\langle \ell\ m_\ell\ 1/2\ 1/2|\ell - 1/2\ m\rangle = -\sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}, (m = m_\ell + 1/2), \tag{4.27}$$

$$\langle \ell\ m_\ell\ 1/2\ 1/2|\ell - 1/2\ m\rangle = \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}, (m = m_\ell - 1/2). \tag{4.28}$$

これらのクレブシュ・ゴルダン係数は三角条件, 規格直交性, 対称性を満たす。これらのクレブシュ・ゴルダン係数を用いると、軌道角運動量とスピン角運動量と結合した状態は次のように表される：

$$|\ell + \frac{1}{2}\ m\rangle = \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}|\ell m_\ell\rangle|\alpha\rangle + \sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}|\ell m_\ell\rangle|\beta\rangle, \tag{4.29}$$

$$|\ell - \frac{1}{2}\ m\rangle = -\sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}|\ell m_\ell\rangle|\alpha\rangle + \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}|\ell m_\ell\rangle|\beta\rangle. \tag{4.30}$$

すぐ分かるように、これらの状態は規格直交性を満たす。

5 半整数スピンと整数スピン-フェルミオンとボゾン-

本稿では電子のように、スピンの大きさが、 \hbar の単位で、1/2の場合だけを説明した。しかし、量子力学の上位理論である場の量子論(場の量子力学)によれば、ミク

¹⁴spin triplet

¹⁵spin singlet

口の粒子は自己同一性をもたないこと、すなわち、同種の量子的粒子は区別がつかないことが示される。その性質により、さらに、スピンの大きさは $s = 1/2, 3/2, \dots$ のように半整数の値をもつ量子的粒子と、ゼロを含む整数の値 $s = 0, 1, 2, \dots$ をもつ量子的粒子が存在し、それぞれフェルミ粒子（フェルミオン）およびボース粒子（ボソン）とよばれ、それぞれ対応する量子統計に従うことが導かれる。たとえば、電子、陽子、中性子などは $s = 1/2$ のフェルミオンであり、フェルミ・ディラック統計に従い、パイ中間子は $s = 0$ 、光子は $s = 1$ をもつボース粒子で、ボーズ・アインシュタイン統計に従う。フェルミオンは自然の骨格を作り、ボソンは量子的粒子間の相互作用を媒介する役割をもつ。ミクロの粒子の量子統計性は理論が相対性理論と矛盾しないという条件からきれいに導かれる [15]。場の量子論から導かれることは、光速に比べてずっと遅い粒子を扱っている場合には、天下一に受け入れればよい。しかし、たとえば、電子がフェルミ・ディラック統計に従うことは非常に重要である。これにより、原子中の電子は、1つの量子状態には高々1個しか占有できないというパウリの排他原理が成立し、原子のいろいろな性質や元素の周期律が導かれるからである。

附録

A パウリ行列と2量子状態系

パウリ行列は次の性質をもつ。

$$\hat{\sigma}_k^\dagger = \hat{\sigma}_k, \quad (k = x, y, z), \quad (\text{A.31})$$

$$\text{Tr } \hat{\sigma}_k = 0, \quad (k = x, y, z), \quad (\text{A.32})$$

$$\det \hat{\sigma}_k = -1, \quad (k = x, y, z), \quad (\text{A.33})$$

$$\hat{\sigma}_k^2 = \hat{1}, \quad (k = x, y, z), \quad (\text{A.34})$$

$$\hat{\sigma}_k^\dagger \hat{\sigma}_k = \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_k^\dagger = \hat{1}, \quad (k = x, y, z), \quad (\text{A.35})$$

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i = 2\delta_{ij} \hat{1}, \quad (i, j = x, y, z), \quad (\text{A.36})$$

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 2i\hat{\sigma}_z, \quad \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = 2i\hat{\sigma}_x, \quad \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = 2i\hat{\sigma}_y; \quad (\text{A.37})$$

$$[(\hat{\sigma} \times \hat{\sigma}) = 2i\hat{\sigma}], \quad (\text{A.38})$$

$$e^{i\theta\hat{\sigma}_y} = \cos \theta \cdot \hat{1} + i \sin \theta \cdot \hat{\sigma}_y \quad (\text{A.39})$$

式 (A.32) において、 Tr は行列の対角和 (trace) を意味する。式 (A.37) がスピン演算子の間の交換関係に対応する。

式 (A.39) の証明：まず左辺を偶数冪と奇数冪に分けてテイラー展開する。

$$e^{i\theta\hat{\sigma}_y} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta\hat{\sigma}_y)^n}{n!} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta\hat{\sigma}_y)^{2m}}{(2m)!} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta\hat{\sigma}_y)^{2m+1}}{(2m+1)!}. \quad (\text{A.40})$$

ここで

$$(i\hat{\sigma}_y)^{2m} = (-1)^m (\hat{\sigma}_y^2)^m = (-1)^m (\hat{1})^m = (-1)^m \hat{1} \quad (\text{A.41})$$

$$(i\hat{\sigma}_y)^{2m+1} = i(-1)^m (\hat{\sigma}_y)^{2m} \hat{\sigma}_y = i(-1)^m (\hat{1}) \hat{\sigma}_y = i(-1)^m \hat{\sigma}_y \quad (\text{A.42})$$

および

$$\cos\theta = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{\theta^{2m}}{(2m)!} \quad (\text{A.43})$$

$$\sin\theta = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{\theta^{2m+1}}{(2m+1)!} \quad (\text{A.44})$$

という関係式を用いると証明される。

パウリのスピン行列またはパウリ行列が有用な理由の1つは、全く任意の2行2列の行列を $(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ に単位行列 $\hat{1}$ を加えた4つの (2×2) 行列により書き表すことができるからである.[8] 任意の (2×2) 行列の行列要素を a, b, c, d とすると、

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + d \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.45})$$

と書ける。さらに、右辺のそれぞれの行列が単位行列とパウリ行列を用いて表される：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\hat{1}^{(2)} + \hat{\sigma}_z), \quad (\text{A.46})$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y), \quad (\text{A.47})$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y), \quad (\text{A.48})$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\hat{1}^{(2)} - \hat{\sigma}_z) \quad (\text{A.49})$$

したがって、 (2×2) の任意の行列は

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} &= a \frac{1}{2}(\hat{1}^{(2)} + \hat{\sigma}_z) + b \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y) + c \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y) + d \frac{1}{2}(\hat{1}^{(2)} - \hat{\sigma}_z) \\ &= \frac{(a+d)}{2} \hat{1}^{(2)} + \frac{(b+c)}{2} \hat{\sigma}_x + \frac{i(b-c)}{2} \hat{\sigma}_y + \frac{(a-d)}{2} \hat{\sigma}_z. \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

となり、単位行列と3つのパウリ行列による一次結合として表された。

このように、全く任意の2行2列の行列を $(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ に単位行列 $\hat{1}$ を加えた4つの (2×2) 行列により書き表すことができるから、任意の2量子状態系にとって必要な数学的道具は全部そろっていることになる [8]。

2量子状態系はもっとも単純な量子系である。多くの系が適当な理想化の下で2量子状態系として扱うことができる。非常に簡単な系であるが、量子系の本質の

多くの部分がすでにここに現れている [9]. 2量子状態系の例としては, アンモニア分子, マゼンタ染料¹⁶, 陽子と中性子を総称する核子のアイソスピン状態¹⁷, 光子の偏り (偏光) の状態, 中性 K 中間子などが 1960 年代から知られていた [8].

その後も, マッハツェンダー干渉計 [9], 原子 1 個と光子 1 個の相互作用模型 (2準位原子近似) [10], 量子情報科学に関連した話題 [10][1] が紹介されている.

B クレブシュ・ゴルダン係数, 3 j 記号, 6j 記号

B.1 クレブシュ・ゴルダン係数とその性質

クレブシュ・ゴルダン係数には $\langle j_1 j_2 m_2 m_2 | JM \rangle$ など, 他の表現がある. その求め方はつぎの通りである.

1. J の最大値は $j_1 + j_2$ であり, そのときの M の最大値も $j_1 + j_2$ である. この場合は, m_1 がその最大値 j_1 をとり, m_2 がその最大値 j_2 を取るという組み合わせのみで生じるから

$$|j_1 + j_2 j_1 + j_2\rangle = |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle \quad (\text{B.51})$$

となる.

2. 次に, 式 (B.51) の両辺に, 演算子 $\hat{J}_- = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ を作用させると

$$\hat{J}_- |j_1 + j_2 j_1 + j_2\rangle = (\hat{j}_{1-} |j_1 j_1\rangle) |j_2 j_2\rangle + |j_1 j_1\rangle (\hat{j}_{2-} |j_2 j_2\rangle) \quad (\text{B.52})$$

となる. まず左辺を計算すると, 公式 (2.11) の下符合の場合を用いて

$$\text{式 (B.52) の左辺} = \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 + j_2 j_1 + j_2 - 1\rangle \quad (\text{B.53})$$

を得る. 同様にして

$$\text{式 (B.52) の右辺} = \sqrt{2j_1} |j_1 j_1 - 1\rangle |j_2 j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2 - 1\rangle \quad (\text{B.54})$$

を得る. 式 (B.53) と式 (B.54) を等しい置くと

$$\begin{aligned} & |j_1 + j_2 j_1 + j_2 - 1\rangle \\ &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1 - 1\rangle |j_2 j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2 - 1\rangle \quad (\text{B.55}) \end{aligned}$$

が得られる.

¹⁶紫がかった赤い色のマゼンタと呼ばれる染料で, 現在の多くのプリンターで使用されている.

¹⁷isotropic spin state

3. 一方, $M = j_1 + j_2 - 1$ を持つ状態として, $J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 1$ という量子数を持つ状態 $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$ も可能であり, それは状態 $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$ と直交するので, 係数 x, y を用いて

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = x|j_1, j_1 - 1\rangle|j_2, j_2\rangle + y|j_1, j_1\rangle|j_2, j_2 - 1\rangle \quad (\text{B.56})$$

と置ける. 規格化条件 $x^2 + y^2 = 1$ を考慮して, 直交性 $\langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle = 0$ より

$$\begin{aligned} & |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle \\ &= \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle \quad (\text{B.57}) \end{aligned}$$

が得られる.

4. 以下, この操作を繰り返して, 1つずつ M の値が小さい固有状態をつくることが出来る.

クレブシュ・ゴルダン係数の一般公式は歴史的にいくつかの表現があるが [4], Wigner による表現 [2][4] を紹介する:

$$\begin{aligned} & \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_3, m_3 \rangle \\ &= \delta_{m_1+m_2, m_3} \sqrt{\frac{(j_1 + j_2 - j_3)!(j_1 - j_2 + j_3)!(-j_1 + j_2 + j_3)!}{(j_1 + j_2 + j_3 + 1)!}} \\ & \quad \times \sqrt{\frac{(j_3 + m_3)!(j_3 - m_3)!(2j_3 + 1)}{(j_1 + m_1)!(j_1 - m_1)!(j_2 + m_2)!(j_2 - m_2)!}} \\ & \quad \times \sum_z \frac{(-1)^{j_2+m_2+z} (j_3 + j_2 + m_1 - z)!(j_1 - m_1 + z)!}{z!(j_3 - j_1 + j_2 - z)!(j_3 + m_3 - z)!(j_1 - j_2 - m_3 + z)!} \quad (\text{B.58}) \end{aligned}$$

ここで, 和は階乗の自変数が負にならない範囲で行う.

コメント:

式 (B.58) は [2] の p. p.38-39 の式, [4] の p.238 の式と同じである. しかし, [5] の p.282 の式とは一見すると同じには見えないが, 同じであることが証明できるかもしれない. }

しかし, この一般式では後述の対称性の証明などには不向きであるので, Racah [2][4] による一般式を以下に示す.

$$\begin{aligned} & \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_3, m_3 \rangle \\ &= \delta_{m_1+m_2, m_3} \sqrt{(2j_3 + 1) \frac{(j_1 + j_2 - j_3)!(j_1 - j_2 + j_3)!(-j_1 + j_2 + j_3)!}{(j_1 + j_2 + j_3 + 1)!}} \\ & \quad \times \sqrt{\frac{(j_1 + m_1)!(j_1 - m_1)!(j_2 + m_2)!(j_2 - m_2)!(j_3 + m_3)!(j_3 - m_3)!}{(-1)^z}} \\ & \quad \sum_z \frac{(-1)^z}{z!(j_1 + j_2 - j_3 - z)!(j_1 - m_1 - z)!(j_2 + m_2 - z)!(j_3 - j_2 + m_1 + z)!(j_3 - j_1 - m_2 + z)!} \quad (\text{B.59}) \end{aligned}$$

ここで、和は階乗の自変数が負にならない範囲で行う。

クレブシュ・ゴールドン係数の基本的な性質を次にまとめる。以下、表現の体裁を考慮して、 $-1/2 \equiv \overline{1/2}$, $-1 \equiv \overline{1}$ など、負値の場合に上線を引くことにする。

1. 三角条件

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = 0 \quad (m_1 + m_2 \neq M), \quad (\text{B.60})$$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = 0 \quad (j_1 + j_2 \leq J, |j_1 - j_2| \geq J). \quad (\text{B.61})$$

2. 規格直交性

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \cdot \delta_{MM'}, \quad (\text{B.62})$$

$$\sum_J \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | JM \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \cdot \delta_{m_2 m'_2}. \quad (\text{B.63})$$

3. 対称性

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_2 m_2 j_1 m_1 | JM \rangle \quad (\text{B.64})$$

$$= (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_1 \overline{m_1} j_2 \overline{m_2} | J \overline{M} \rangle \quad (\text{B.65})$$

$$= (-1)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{2J+1}{2j_1+1}} \langle j_1 m_1 J \overline{M} | j_2 \overline{m_2} \rangle \quad (\text{B.66})$$

$$= (-1)^{j_2 + m_2} \sqrt{\frac{2J+1}{2j_2+1}} \langle J \overline{M} j_2 m_2 | j_1 \overline{m_1} \rangle. \quad (\text{B.67})$$

三角条件が成立することは一般式 (B.58) より明らかである。

規格直交性 (B.62) が成立することは次のようにして分かる。クレブシュ・ゴールドン係数の定義式 (4.10) より

$$\begin{aligned} \langle JM | J' M' \rangle &= \sum_{m_1 = -j_1}^{j_1} \sum_{m_2 = -j_2}^{j_2} \sum_{m'_1 = -j_1}^{j_1} \sum_{m'_2 = -j_2}^{j_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | J' M' \rangle \\ &\quad \times \langle j_1 m_1 | j_1 m'_1 \rangle \langle j_2 m_2 | j_2 m'_2 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.68})$$

を得る。左辺と右辺の内積について、状態ベクトルの規格直交性、 $\langle JM | J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}$, $\langle j_1 m_1 | j_1 m'_1 \rangle = \delta_{m_1 m'_1}$, $\langle j_2 m_2 | j_2 m'_2 \rangle = \delta_{m_2 m'_2}$ を用いれば、式 (B.62) が導かれる。

規格直交性 (B.63) が成立することも次のようにして分かる。クレブシュ・ゴールドン係数の定義式 (4.10) の両辺に $\langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | JM \rangle$ をかけて、 J について和を取り、規格直交性 (B.62) を用いると、直積状態ベクトル

$$|j_1 m_1 \rangle |j_2 m_2 \rangle = \sum_J \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle |JM \rangle \quad (\text{B.69})$$

が得られる。この直積状態ベクトルの内積を考えると

$$\langle j_1 m_1 | j_1 m'_1 \rangle \langle j_2 m_2 | j_2 m'_2 \rangle = \sum_J \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | J' M' \rangle \times \langle JM | J' M' \rangle \quad (\text{B.70})$$

となり，直交規格性 (B.62) を用いると

$$\sum_J \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | JM \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (\text{B.71})$$

が得られる。

対称性は式 (B.59) を用いると，証明される [3].

B.2 3j 記号-準備中-

B.3 6j 記号-準備中-

参考文献

- [1] 岡本良治「スピンと角運動量—量子の世界の回転運動を理解するために」共立出版，2014 年.
- [2] M. E. ローズ「角運動量の基礎理論」(みすず書房)，1974 年.
- [3] A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1957.
- [4] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum*, World Scientific, 1988.
- [5] 小出昭一郎「量子力学 (II)」裳華房，1974 年. 10 節.
- [6] 中山正敏「物質中の量子力学」(岩波書店)，1996 年. 特に，5 章.
- [7] R.P. ファインマン「光と物質のふしぎな理論—私の量子電磁力学」岩波書店. 1987 年. 特に 1，3 章.
- [8] R.P. ファインマン「ファインマン物理学 V」岩波書店. 1979 年. 8-11 章.
- [9] 北野正雄「量子力学の基礎」共立出版，2010 年. 第 8 章.
- [10] 上田正仁「現代量子物理学」倍風館，2007 年. 5 章.
- [11] J.H. ディヴィス「低次元半導体の物理」(シュプリンガーフェアラーク東京)，pp.403-407

- [12] 浜口智尋「半導体の物理」朝倉書店, pp.31-40
- [13] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, (Springer), 2003, pp.403-407.
- [14] 坂口喜生「スピン化学ー化学結合再入門ー」裳華房, 2005年.
- [15] R.F. Streater, A.S. Wightman, *PCT, Spin and Statics, and All That*, chap.4, Some General Theorems of Relativistic Quantum Field Theory, Princeton University Press (2000).