■12 群（電子情報通信基礎）－ 5 編（量子力学・電子物理・相対論）

5 章 角運動量の合成

（執筆者：清水清孝）[2009 年 1 月 受領]

■概要■

ここでは第 3 章で学んだ角運動量の，合成及び合成された状態の記述の仕方について考察する．また電子や陽子などはスピンと呼ばれる大きさが 1/2 の固有角運動量をもっているが，スピン角運動量と軌道角運動量の合成についても議論する．また第 3 章では軌道空間の回転で不変な中心ポテンシャルのみについて議論したがスピンの自由度をもつ粒子では，スピン・軌道相互作用と呼ばれるスピンと軌道空間の同時回転では不変となる相互作用が存在する．それらの一般的な形について議論する．

【本章の構成】

■12 群 - 5 編 - 5 章

5-1 2 個の角運動量の合成

（執筆者：清水清孝）［2009 年 1 月 受領］

5-1-1 角運動量の和

まずはじめに 2 個の角運動量の和について考えてみよう．角運動量には軌道角運動量とスピン角運動量があるのでここでは一般的に角運動量を $\boldsymbol{j}_1$，$\boldsymbol{j}_2$ とし，全角運動量を $\boldsymbol{J}$ とする．

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 \tag{5・1}$$

角運動量 $\boldsymbol{j}_1$ と角運動量 $\boldsymbol{j}_2$ は交換するとし，各角運動量は通常の下記の交換関係に従う．

$$[j_{1x}, j_{1y}] = ij_{1z}, \qquad [j_{1y}, j_{1z}] = ij_{1x}, \qquad [j_{1z}, j_{1x}] = ij_{1y} \tag{5・2}$$

$$[j_{2x}, j_{2y}] = ij_{2z}, \qquad [j_{2y}, j_{2z}] = ij_{2x}, \qquad [j_{2z}, j_{2x}] = ij_{2y} \tag{5・3}$$

これらの交換関係と角運動量 $\boldsymbol{j}_1$ と $\boldsymbol{j}_2$ が交換することを使うと角運動量 $\boldsymbol{J}$ に対して次の通常の交換関係が成り立つことが分かる．

$$[J_x, J_y] = iJ_z \qquad [J_y, J_z] = iJ_x \qquad [J_z, J_x] = iJ_y \tag{5・4}$$

この結果から，一般論より角運動量 $\boldsymbol{J}$ の $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有状態が作れる．

$$\boldsymbol{J}^2 \mid JM >= J(J+1) \mid JM > \qquad J_z \mid JM >= M \mid JM > \tag{5・5}$$

さてここで演算子 $\boldsymbol{J}^2$ と J_z は共に各粒子の角運動量の 2 乗である $\boldsymbol{j}_1^2$ と $\boldsymbol{j}_2^2$ と交換することが簡単に示せる．

$$[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{j}_1^2] = 0, \qquad [\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{j}_2^2] = 0, \qquad [J_z, \boldsymbol{j}_1^2] = 0, \qquad [J_z, \boldsymbol{j}_2^2] = 0 \tag{5・6}$$

したがってこれらの同時固有状態を $\mid j_1 j_2 JM >$ と書くと次のようになる．

$$\boldsymbol{j}_1^2 \mid j_1 j_2 JM > = j_1(j_1+1) \mid j_1 j_2 JM > \tag{5・7}$$

$$\boldsymbol{j}_2^2 \mid j_1 j_2 JM > = j_2(j_2+1) \mid j_1 j_2 JM > \tag{5・8}$$

5-1-2 全角運動量の大きさ

以上のように状態を書く場合問題となるのは，j_1, j_2 を決めてから合成する場合全角運動量 $\boldsymbol{J}$ がどのような値をとれるかということである．全角運動量 $\boldsymbol{J}$ は各粒子の角運動量のベクトル和だから，大きさは各々の粒子の角運動量の方向に依存するであろう．量子力学では各粒子の角運動量の固有状態は大きさと z 方向への射影の同時固有状態だから $\mid j_1 m_1 >$ と $\mid j_2 m_2 >$ と書け，2 粒子系の状態はこの状態の直積となるから，全角運動量の固有状態は以下のような線型結合で与えられることになる．

$$\mid j_1 j_2 JM >= \sum_{m_1 m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM) \mid j_1 m_1 >\mid j_2 m_2 > \tag{5・9}$$

この係数をクレプシュ・ゴルダン係数（Clebsch-Gordan 係数）と呼ぶ．ここで $J_z = j_{1z} + j_{2z}$ を式 (5･9) にかけると次式を得る．

$$M \mid j_1 j_2 JM >= \sum_{m_1 m_2} (j_1 j_2 m_1 m_2 \mid JM)(m_1 + m_2) \mid j_1 m_1 >\mid j_2 m_2 > \tag{5･10}$$

状態 $\mid j_1 m_1 >\mid j_2 m_2 >$ は線型独立だから，以下の関係が成立する．

$$M = m_1 + m_2 \tag{5･11}$$

このことより，どのような J が可能かについて考えてみよう．$j_1 \geq j_2$ として一般性を失わないので，$j_1 \geq j_2$ として話を進めていこう．まず M が最大になる場合は $m_1 = j_1$ で $m_2 = j_2$ であるから，$M = j_1 + j_2$ である．一般論よりある J に対して M は $J, J-1, \ldots$ となるから，この $M = j_1 + j_2$ に対して $J = j_1 + j_2$ でなければならない．

さて上記の式より同じ J で M が違う状態は，第 3 章で議論したように角運動量の昇降演算子 $J_- = j_{1-} + j_{2-}$ を順次かけることで求めることができる．以上で $J = j_1 + j_2$ の状態は求められたのであるが，ほかにどのような J があるだろうか．まず $M = j_1 + j_2 - 1$ の状態をみてみよう．

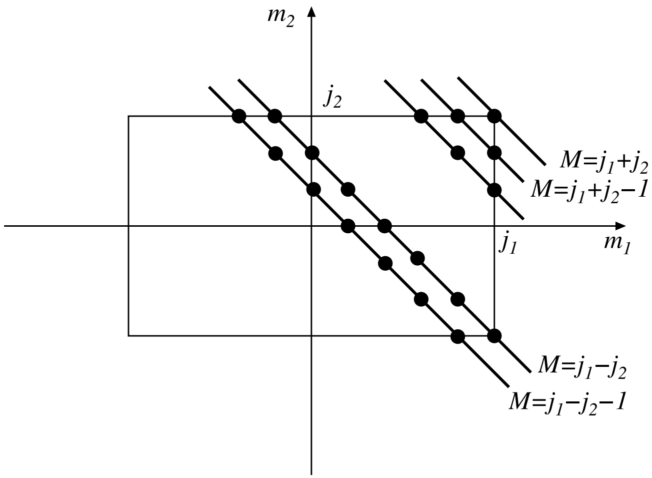

図 5･1　斜線が $M =$ 一定で，・が可能な m_1, m_2

図 5･1 に示されているように，状態として $m_1 = j_1 - 1$，$m_2 = j_2$ と $m_1 = j_1$，$m_2 = j_2 - 1$ の 2 個の状態がある．その内の 1 個は $J = j_1 + j_2$ で $M = j_1 + j_2 - 1$ の状態である．すると残りの 1 個はこの状態と直交する $J = j_1 + j_2 - 1$ の状態でなければならないことは明らかであろう．このようにして $J = j_1 + j_2 - 1$ の状態が求まれば，$J = j_1 + j_2$ の場合と同じようにして，M が違う状態は角運動量の昇降演算子 $J_- = j_{1-} + j_{2-}$ を順次かけることで求めることができる．同じ手順を $M = j_1 + j_2 - 2$ の状態に適用すると，J として，$J = j_1 + j_2$，

$J = j_1 + j_2 - 1$ 以外に $J = j_1 + j_2 - 2$ があることが分かる．以上の方法を繰り返すことで，$M = j_1 - j_2$ までは，$M = m_1 + m_2$ を満たす m_1 と m_2 の組が 1 個ずつ増加するから，1 ずつ小さくなった J が可能な全角運動量の大きさとして現れてくる．しかし図 5･1 から分かるように，それ以降，つまり $M = j_1 - j_2 - 1$ 以下の M 対しては可能な m_1 と m_2 の組は増加しない．これより J として $M = j_1 - j_2$ より小さな値は作れないことが分かる．

以上の結果をまとめると, 可能な J としては, $J = j_1 + j_2$ から 1 ずつ小さくなって $J =| j_1 - j_2 |$ までの値が一度ずつ現れることになる．

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \cdots | j_1 - j_2 | \tag{5･12}$$

このことは，ベクトルの和として考えると，2 個のベクトル $\boldsymbol{j}_1$ と $\boldsymbol{j}_2$ が平行になった場合が $J = j_1 + j_2$ で反平行の場合が $J =| j_1 - j_2 |$ に対応すると解釈できる．

ここで元の状態 $| j_1 m_1 >| j_2 m_2 >$ と全角運動量の固有状態である $| j_1 j_2 J M >$ との比較を行ってみよう．まず独立な状態の数は $| j_1 m_1 >| j_2 m_2 >$ の場合は各々が $2j_1 + 1$ と $2j_2 + 1$ だから全体で $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ 個となる．それでは $| j_1 j_2 J M >$ の場合はいくらになるのだろうか．ある J に対して $2J + 1$ だから，可能な J について和をとり，次のようになる．

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J + 1) = (j_1 + j_2 + 2)(j_1 + j_2) - (| j_1 - j_2 | -1)(| j_1 - j_2 | +1) \tag{5･13}$$

$$= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \tag{5･14}$$

したがってどちらの量子数を使っても独立な状態の数は $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ となる．

■12 群 － 5 編 － 5 章

5-2 軌道角運動量とスピン角運動量

（執筆者：清水清孝）[2009 年 1 月 受領]

5-2-1 1 粒子状態の記述

電子や陽子はスピンと呼ばれる固有の角運動量をもち，軌道角運動量との和が全角運動量となる．物理的意味の詳細は第 10 章に回すとしてここでは軌道角運動量とスピン角運動量の和の取り扱いについて考察しよう．軌道角運動量を $\boldsymbol{l}$，スピンを $\boldsymbol{s}$ そして全角運動量を $\boldsymbol{j}$ とする．

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s} \tag{5・15}$$

全角運動量の固有状態は次のように書く．

$$|\, l\frac{1}{2}jm > = \sum_{m_l m_s} \left(l\frac{1}{2}m_l m_s \mid jm \right) |\, lm_l > |\, \frac{1}{2}m_s > \tag{5・16}$$

全角運動量の大きさ j は一般論より次の 2 通りが可能である．

$$j = l + \frac{1}{2} \qquad \text{及び} \qquad j = l - \frac{1}{2} \qquad (l \neq 0) \tag{5・17}$$

通常は上記の状態は l_j と略記され，また l については第 3 章で説明したように $l = 0, 1, 2, 3, 4, \cdots$ に対して，$s, p, d, f, g, \cdots$ が使われる．具体例を以下にあげる．

$$s_{\frac{1}{2}}, p_{\frac{1}{2}}, p_{\frac{3}{2}}, d_{\frac{3}{2}}, d_{\frac{5}{2}}, f_{\frac{5}{2}}, f_{\frac{7}{2}}, \cdots \tag{5・18}$$

5-2-2 スピン軌道相互作用

第 3 章で扱った中心力ポテンシャルは軌道角運動量と交換した．ここではスピン軌道相互作用と呼ばれる中心力ではない相互作用について考察しよう．動径座標 r に依存する部分を除くと，スピン軌道相互作用の演算子は $\boldsymbol{l}$ と $\boldsymbol{s}$ の内積で $\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}$ となる．まずはじめにこの演算子と角運動量演算子の交換関係について調べてみよう．$\boldsymbol{l}^2$ 及び $\boldsymbol{s}^2$ と交換することは明らかであり，また簡単な計算で $[\boldsymbol{l}, \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}] = -i(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{s})$，$[\boldsymbol{s}, \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}] = -i(\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{l})$ となるので全角運動量とも交換する．

$$[\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}] = [\boldsymbol{s}^2, \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}] = 0, \qquad [\boldsymbol{j}, \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}] = [\boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}, \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}] = 0 \tag{5・19}$$

したがって演算子 $\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}$ は軌道角運動量の大きさ l を変えない．演算子 $\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}$ の固有値は次のようにして簡単に求められる．

$$\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s} \,|\, l\frac{1}{2}jm > \;=\; \frac{1}{2}(\boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{s}^2)\,|\, l\frac{1}{2}jm > \tag{5・20}$$

$$\;=\; \frac{1}{2}\left\{ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right\} |\, l\frac{1}{2}jm > \tag{5・21}$$

■12 群－5 編－5 章

5-3 2 粒子のスピン角運動量

（執筆者：清水清孝）[2009 年 1 月 受領]

電子や陽子，中性子は大きさ 1/2 のスピンをもちフェルミ粒子と呼ばれる．このような粒子が 2 個存在する場合について考えてみよう．粒子 1 のスピンを $\boldsymbol{s}_1$，粒子 2 のスピンを $\boldsymbol{s}_2$ とし，全スピンを $\boldsymbol{S}$ とする．

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2), \quad \text{ただし} \quad s_1 = s_2 = \frac{1}{2} \tag{5・22}$$

全スピンの大きさを S とし，z 成分 S_z の固有値を M とすると次のようになる．

$$\boldsymbol{S}^2 \,|\, \frac{1}{2}\frac{1}{2}SM> \;=\; S(S+1) \,|\, \frac{1}{2}\frac{1}{2}SM> \tag{5・23}$$

$$S_z \,|\, \frac{1}{2}\frac{1}{2}SM> \;=\; M \,|\, \frac{1}{2}\frac{1}{2}SM> \tag{5・24}$$

ここで角運動量の合成の一般則より，全スピンの大きさ S は $S=0$ と $S=1$ の 2 通りが可能である．上記の全スピンの固有状態は既に議論した一般的な方法で簡単に求めることができ，結果は以下のようになる．

$$\begin{aligned}
&|\, S=1, M=1 >=|\, u >|\, u > \\
&|\, S=1, M=0 >= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\, u >|\, d > + |\, d >|\, u >) \\
&|\, S=1, M=-1 >=|\, d >|\, d > \\
&|\, S=0, M=0 >= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\, u >|\, d > - |\, d >|\, u >)
\end{aligned} \tag{5・25}$$

ここで 1 粒子のスピンの固有状態を，スピン上向き（up）と下向き（down）の状態と呼び，以下のように略記した．

$$|\, u >=|\, s=\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2} > \qquad |\, d >=|\, s=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2} > \tag{5・26}$$

また状態を $|\, u >|\, d >$ と書いたとき，粒子 1 の状態が u で，粒子 2 の状態が d であることを意味するように順序で区別した．式 (5・25) より明らかなように，スピン $S=1$ の状態は，3 重（triplet）と呼ばれ，粒子の交換で状態が変化しないので対称な状態という $S=0$ の状態は 1 重（singlet）で，粒子の交換で－符号が付くので反対称な状態という．

次に 2 粒子間の相互作用で現れるスピン・スピン相互作用について調べてみよう．通常はパウリのスピン行列を使って $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ と書かれる．まずこの演算子は以下のように全スピン $\boldsymbol{S}$ と交換する．

$$[\boldsymbol{S}, \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2] = 0 \tag{5・27}$$

したがって固有値は全スピンの固有状態では磁気量子数 M に依存しない．$\boldsymbol{S}^2$ を計算することにより固有値は次のようになる．

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \mid SM> \quad = \quad \frac{1}{2}(4\boldsymbol{S}^2 - \boldsymbol{\sigma}_1^2 - \boldsymbol{\sigma}_2^2) \mid SM> \tag{5・28}$$

$$= \quad \{2S(S+1) - 3\} \mid SM> = \begin{cases} 1 & (S=1) \\ -3 & (S=0) \end{cases} \tag{5・29}$$

さてここで上記の結果を使うと次の演算子 $P_{12}^{(s)}$ は $S = 1$ の状態に演算すると $+1$, $S = 0$ の状態に演算すると -1 となる.

$$P_{12}^{(s)} = \frac{1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2}{2} \tag{5・30}$$

ここで $S = 1$ の状態がスピンの交換で対称, $S = 0$ の状態が反対称であることを思い出せば, 演算子 $P_{12}^{(s)}$ はスピン座標の交換の演算子であることが分かる.