

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 (doublet) の観測
2. 1925 年、ハウシュミット (Goudsmit) とウーレンベック (Uhlenbeck) 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. 1932 年、ディラック (Dirac) 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 (positron) の発見。
4. 物質の磁性の起源としての電子スピン
5. 測定技術への応用 : 電子スピン共鳴 (ESR, electron-spin resonance)
6. 物質構成粒子としてのフェルミ型粒子 (フェルミオン、fermion) と相互作用媒介粒子としてのボース型粒子 (ボソン、boson)、それらを区別する半整数スピン値と整数スピン値

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

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

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

がある。また完備性 (完全性) も次のように成り立つ。

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

これらのケット・ベクトルは次の固有値方程式を満たす。

$$\hat{s}_z|\alpha\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle, \quad (1.13)$$

$$\hat{s}_z|\beta\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\beta\rangle, \quad (1.14)$$

$$\hat{s}^2|\alpha\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\alpha\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\alpha\rangle, \quad (1.15)$$

$$\hat{s}^2|\beta\rangle = \hbar^2 s(s+1)|\beta\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\beta\rangle. \quad (1.16)$$

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

$$\langle sm'|\hat{s}_z|sm\rangle = m\hbar\delta_{m'm}, \quad (1.17)$$

$$\langle sm'|\hat{s}^2|sm\rangle = \hbar^2s(s+1)\delta_{m'm}, \quad (1.18)$$

$$\langle sm'|\hat{s}_\pm|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1)-m(m\pm 1)}\delta_{m'm\pm 1} \quad (1.19)$$

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行列

行列要素の式 (1.17), (1.18), (1.19) 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行列 ($\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$) を用いて、次のように与えられる。

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z, \quad (1.20)$$

$$\hat{\sigma}_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.21)$$

スピン昇降演算子の行列表現とそれらをスピン固有ベクトルに演算すると

$$\hat{s}_+ = \hat{s}_x + i\hat{s}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.22)$$

$$\hat{s}_- = \hat{s}_x - i\hat{s}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.23)$$

$$\hat{s}_+|\beta\rangle = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \hbar|\alpha\rangle, \quad (1.24)$$

$$\hat{s}_-|\alpha\rangle = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \hbar|\beta\rangle, \quad (1.25)$$

$$\hat{s}_+|\alpha\rangle = \hat{s}_-|\beta\rangle = 0 \quad (1.26)$$

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は次の性質をもつ。

$$\hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j \cdot \hat{\sigma}_i = 2\delta_{ij}\hat{1}, \quad (\hat{\sigma} \times \hat{\sigma}) = 2i\hat{\sigma}, \quad \hat{\sigma}_k^2 = \hat{1}, \quad (i, j, k = x, y, z), \quad (1.27)$$

$$e^{i\theta\hat{\sigma}_y} = \cos\theta \cdot \hat{1} + i\sin\theta \cdot \hat{\sigma}_y \quad (1.28)$$

式 (1.28) の証明：まず左辺を偶数ベキと奇数ベキに分けてテーラー展開する。

$$e^{i\theta\hat{\sigma}_y} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta\hat{\sigma}_y)^n}{n!} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta\hat{\sigma}_y)^{2m}}{(2m)!} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\theta\hat{\sigma}_y)^{2m+1}}{(2m+1)!}. \quad (1.29)$$

ここで

$$(i\hat{\sigma}_y)^{2m} = (-1)^m (\hat{\sigma}_y^2)^m = (-1)^m (\hat{1})^m = (-1)^m \hat{1} \quad (1.30)$$

$$(i\hat{\sigma}_y)^{2m+1} = i(-1)^m (\hat{\sigma}_y^2)^m \hat{\sigma}_y = i(-1)^m (\hat{1})^m \hat{\sigma}_y = i(-1)^m \hat{\sigma}_y \quad (1.31)$$

および

$$\cos\theta = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{\theta^{2m}}{(2m)!} \quad (1.32)$$

$$\sin\theta = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{\theta^{2m+1}}{(2m+1)!} \quad (1.33)$$

という関係式を用いると証明される。

2 一般角運動量

あるエルミート（ベクトル）演算子 \hat{j} 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。

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

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

ここで、定義

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

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。

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

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{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、

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

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

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

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 角運動量の合成

軌道角運動量演算子の交換関係を基礎にして、角運動量の概念を一般化できる。一粒子のスピン軌道結合効果、多粒子系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一般化角運動量を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。

$$[\hat{j}_1, \hat{j}_2] = 0 \quad ([\hat{j}_a, \hat{j}_b] = 0, \{a, b\} = x, y, z) \quad (3.1)$$

式(3.1)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。

3.1 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, \hat{j}_{1z} の同時固有関数を $\psi_{j_1 m_1}$ 、同じく \hat{j}_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

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2| \quad (3.2)$$

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、

$$M = J, J-1, \dots, -J+1, -J \quad (3.3)$$

となる。ここで M のとりうる値を調べる。 $(j_1 \leq j_2)$ と考えて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

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = [2(j_1-j_2)+1] + [2(j_1-j_2+1)+1] + \dots + [2(j_1+j_2)+1] \quad (3.4)$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{2j_2} [2(j_1-j_2+n)+1] &= 2(j_1-j_2)(2j_2+1) + (2j_2)(2j_2+1) + 2j_2+1 \\ &= (2j_1+1)(2j_2+1) \end{aligned} \quad (3.5)$$

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。

3.2 (*) 角運動量の合成 (2) 量子力学的方法

角運動量の和演算子の固有関数を求めるときは、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 の異なる固有関数 (または固有状態) 同士は直交する。

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

$$\Psi_{JM} = \sum_{m_1=j_1}^{-j_1} \sum_{m_2=j_2}^{-j_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2, JM} \psi_{j_1, m_1} \cdot \psi_{j_2, m_2} \quad (3.6)$$

ただし、 $C_{j_1 m_1 j_2 m_2, JM}$ は重ね合わせの係数であり、クレブシュ・ゴルダン係数 (Clebsch-Gordan coefficient) と呼ばれ、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

$$\Psi_{j_1+j_2, j_1+j_2} = \psi_{j_1, j_1} \cdot \psi_{j_2, j_2} \quad (3.7)$$

となる。

2. 次に、式(3.7)の両辺に、演算子 $\hat{J}_- = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ を作用させると、関連する z 成分の量子数がひとつずつ減少するから、

$$\begin{aligned}\hat{J}_- \Psi_{j_1+j_2, j_1+j_2-1} &= (\hat{j}_{1-} \psi_{j_1, j_1}) \psi_{j_2, j_2} + \psi_{j_1, j_1} (\hat{j}_{2-} \psi_{j_2, j_2}) \\ \rightarrow \Psi_{j_1+j_2, j_1+j_2-1} &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \psi_{j_1, j_1-1} \psi_{j_2, j_2} + \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \psi_{j_1, j_1} \psi_{j_2, j_2-1}\end{aligned}\quad (3.8)$$

が得られる。ここで、式(2.11)を用いた。

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 $\Psi_{j_1+j_2-1, j_1+j_2-1}$ も可能であり、それは状態 $\Psi_{j_1+j_2, j_1+j_2-1}$ と直交するので、

$$\Psi_{j_1+j_2-1, j_1+j_2-1} = -\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \psi_{j_1, j_1-1} \psi_{j_2, j_2} + \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \psi_{j_1, j_1} \psi_{j_2, j_2-1}\quad (3.9)$$

が得られる。(右辺のマイナス符号は第二項につけてもよい。)

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・ゴルダン係数の基本的な性質を次にまとめる。

1. 三角条件

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = 0 \quad (m_1 + m_2 \neq M),\quad (3.10)$$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = 0 \quad (j_1 + j_2 < J, |j_1 - j_2| > J).\quad (3.11)$$

2. 直交規格性

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \cdot \delta_{MM'},\quad (3.12)$$

$$\sum_J \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | JM \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \cdot \delta_{m_2 m'_2}.\quad (3.13)$$

3. 対称性

$$\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | JM \rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} \langle j_2, m_2, j_1, m_1 | JM \rangle\quad (3.14)$$

$$= (-1)^{j_1+j_2-J} \langle j_1, -m_1, j_2, -m_2 | J, -M \rangle\quad (3.15)$$

$$= (-1)^{j_1-m_1} \sqrt{\frac{2J+1}{2j_1+1}} \langle j_1, m_1, J, -M | j_2, -m_2 \rangle\quad (3.16)$$

$$= (-1)^{j_2+m_2} \sqrt{\frac{2J+1}{2j_2+1}} \langle J, -M, j_2, m_2 | j_1, -m_1 \rangle.\quad (3.17)$$

クレブシュ・ゴルダン係数の具体例を次にまとめる。

1. 2つのスピン角運動量 ($S=1/2$) の合成

$$\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ 1/2 | 1 \ 1 \rangle = 1, \quad (3.18)$$

$$\langle 1/2 \ -1/2 \ 1/2 \ -1/2 | 1 \ -1 \rangle = 1, \quad (3.19)$$

$$\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ -1/2 | 0 \ 0 \rangle = 1/\sqrt{2}, \quad (3.20)$$

$$\langle 1/2 \ -1/2 \ 1/2 \ 1/2 | 0 \ 0 \rangle = -1/\sqrt{2}, \quad (3.21)$$

$$\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ -1/2 | 1 \ 0 \rangle = 1/\sqrt{2}, \quad (3.22)$$

$$\langle 1/2 \ -1/2 \ 1/2 \ 1/2 | 1 \ 0 \rangle = 1/\sqrt{2}. \quad (3.23)$$

2. スピン角運動量 ($s=1/2$) と軌道角運動量 の合成

$$\langle \ell \ m_\ell, \ 1/2 \ 1/2 | \ell + 1/2, \ m \rangle = \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}, \quad (m = m_\ell + 1/2), \quad (3.24)$$

$$\langle \ell \ m_\ell, \ 1/2 \ -1/2 | \ell + 1/2, \ m \rangle = \sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}, \quad (m = m_\ell - 1/2), \quad (3.25)$$

$$\langle \ell \ m_\ell, \ 1/2 \ 1/2 | \ell - 1/2, \ m \rangle = -\sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}, \quad (m = m_\ell + 1/2), \quad (3.26)$$

$$\langle \ell \ m_\ell, \ 1/2 \ -1/2 | \ell - 1/2, \ m \rangle = \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}, \quad (m = m_\ell - 1/2). \quad (3.27)$$

これらの係数はクレブシュ・ゴルダン係数の基本的な性質を満たしている。

3.3 角運動量の合成の実例

1. 1 電子の軌道角運動量 $\hat{\ell}$ とスピン角運動量 \hat{s} の合成による全角運動量 $\hat{j} \equiv \hat{\ell} + \hat{s}$ を考える場合：全角運動量の大きさ j の値は、 $\ell \neq 0$ のとき、 $j = \ell \pm 1/2$ だけが可能である。
2. 2 電子のスピン合成の場合：合成スピンの大きさ $S = 0, 1$ が可能である。 $S = 1$ に対しては、 z 成分 $M = -1, 0, +1$ が可能で、 $S = 0$ に対しては $M = 0$ のみが可能である。
3. 多電子原子における全電子の角運動量の合成には次の二つの方法がある。
 - (a) まず最初に、それぞれの電子の軌道角運動量の和 $\hat{L} = \sum_{i=1}^2 \hat{\ell}_i$ とそれぞれのスピン角運動量の和 $\hat{S} = \sum_{i=1}^2 \hat{s}_i$ を考える。次に、全角運動量 $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ を考える。(LS 結合 (LS -coupling) または Russel-Saunders 結合という。)
 - (b) 最初に、それぞれの電子の全角運動量の和 $\hat{J} = \sum_{i=1}^2 \hat{j}_i$ を考える。次に、個々の電子の全角運動量の和を考える。 $\hat{J} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$ を考える。(JJ 結合 (JJ -coupling) という。)
4. 3 個の電子の角運動量の合成する場合には、まず 2 つの角運動量を合成し、その結果、生じた合成角運動量 \hat{J}_{12} と 3 つ目の角運動量 \hat{j}_3 を合成をするという過程を反復すればよい。

3.4 角運動量の合成に関連するベクトル公式

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

$$\begin{aligned}(\hat{\mathbf{J}})^2 &= \hat{\mathbf{j}}_1^2 + \hat{\mathbf{j}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2 \\ &= \hat{\mathbf{j}}_1^2 + \hat{\mathbf{j}}_2^2 + 2\hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z} + (\hat{j}_{1+}\hat{j}_{2-} + \hat{j}_{1-}\hat{j}_{2+}),\end{aligned}\tag{3.28}$$

$$2\hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2 = (\hat{\mathbf{J}})^2 - \hat{\mathbf{j}}_1^2 - \hat{\mathbf{j}}_2^2\tag{3.29}$$

$$\hat{\mathbf{j}}_1 \cdot \hat{\mathbf{j}}_2 = \frac{1}{2}(\hat{j}_{1+}\hat{j}_{2-} + \hat{j}_{1-}\hat{j}_{2+}) + \hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z}\tag{3.30}$$

がある。