Note.(3)

文責: 吉野 惇郎

2003-03-11

3.7　角運動量の合成 (つづき)

角運動量合成の形式論　異なる部分空間にある二つの角運動量演算子 $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ から全角運動量 $\mathbf{J}$ を

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{J}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{J}_2 = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$$

で定義する。

基底ケットの選び方として次の二通りがある:

(A) $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}$ の同時固有ケット $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$

(B) $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2$ の同時固有ケット $|j_1 j_2; jm\rangle$

ここで、基底変換

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1'} \sum_{m_2'} |j_1 j_2; m_1' m_2'\rangle\langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm\rangle \tag{3.7.33}$$

が成り立つ。ここで現れた変換行列の要素 $\langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm'\rangle$ は Clebsh-Gordan 係数である。

Clebsh-Gordan 係数の性質:

- $m = m_1' + m_2'$ でないと 0
- $|j_1 - J_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ でないと 0
- Clebsh-Gordan 係数はユニタリ行列をつくる。その行列要素は実にとることができ、このときは直交行列となる。
- 規格化条件 $\sum_{m_1'} \sum_{m_2'} |\langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm\rangle|^2 = 1$

note: $(J_z - J_{1z} - J_{2z})|jm\rangle = 0$

Clebsh-Gordan 係数に対する漸化式

$$
\begin{aligned}
\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j_1,j_2;j,m\pm1\rangle &= \\
\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1\mp1)}\langle j_1,j_2;m_1\mp1,m_2|j_1,j_2;j,m\rangle &+ \\
\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2\mp1)}\langle j_1,j_2;m_1,m_2\mp1|j_1,j_2;j,m\rangle &
\end{aligned}
$$

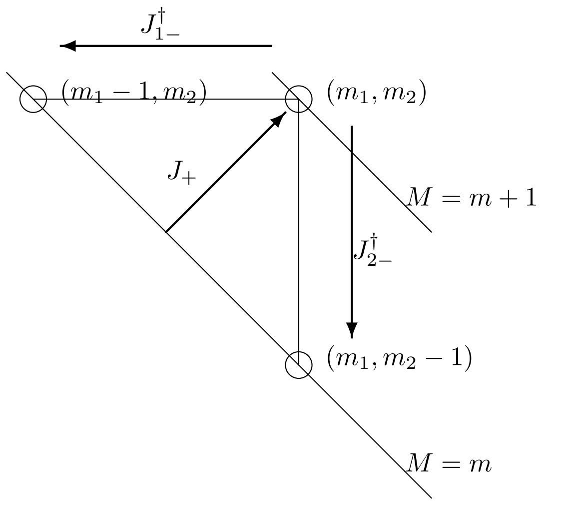
note: 式 (3.7.33) に左から $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|J_\pm, m_1+m_2=m\pm1$

j_1,j_2 が与えられると、j として意味のある値は

$$j=j_1+j_2, j_1+j_2-1, ..., |j_1-j_2|$$

に限られる。この中から j を一つ選び、その時の Clebsh-Gordan 係数の間の関係を図を用いて考える。

$m_1'm_2'$-平面を考える。ここで、m_1' と m_2' の和 $m_1'+m_2'$ の値を M と表記することにする。漸化式に対応する図を図 1, 図 2 に示した。



斜辺上の点の m_1' と m_2' の和が m.

$\langle j_1j_2;m_1m_2|j_1j_2;jm\rangle$ を考え、このブラやケットの部分に $J_+=J_{1-}^\dagger+J_{2-}^\dagger$ を作用させると漸化式の項と係数が得られる.

漸化式に現れる Clebsh-Gordan 係数では、$\langle j_1j_2;m_1'm_2'|j_1j_2;jm'\rangle$ の m_1',m_2' の和と m' が釣り合っていることに注意.

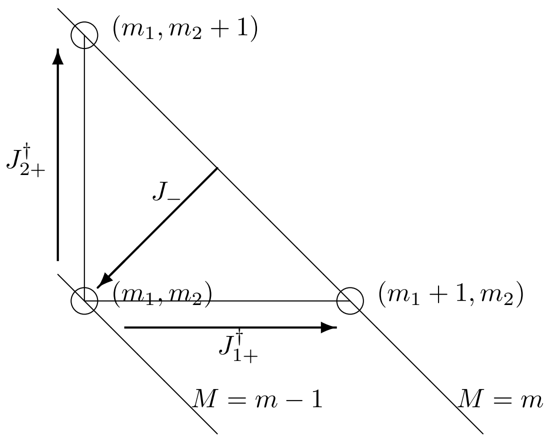
図 1: J_+ による Clebsh-Gordan 係数の関係

次に、j_1,j_2,j が与えられたときに関係する Clebsh-Gordan 係数 $\langle j_1j_2;m_1m_2|j_1j_2;jm\rangle$ をすべて求める方法を考える。このとき許容される m_1,m_2,m の範囲は

$$m_1=-j_1,-j_1+1,...,j_1$$

$$m_2=-j_2,-j_2+1,...,j_2$$

$$m=-j,-j+1,...,j$$



斜辺上の点の m_1' と m_2' の和が m.

$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle$ を考え、このブラやケットの部分に $J_- = J^\dagger_{1+} + J^\dagger_{2+}$ を作用させると漸化式の項と係数が得られる.

漸化式に現れる Clebsh-Gordan 係数では、$\langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm'\rangle$ の m_1', m_2' の和と m' が釣り合っていることに注意.

図 2: J_- による Clebsh-Gordan 係数の関係

であり、さらに

$$m = m_1 + m_2$$

となる Clebsh-Gordan 係数のみ意味を持つ。これは $m_1' m_2'$ 平面の図で示すと図 3 の太枠線の中ということになる。

また、規格化条件から、$m_1' + m_2'$ の値が等しい Clebsh-Gordan 係数 (図 3 では同一斜線上の点) の 2 乗和は 1 となる。

以上のことから、いくつかの任意性を除いて Clebsh-Gordan 係数を求めることができる。

以下に例をいくつか示した。

例 1: スピン 1/2 粒子 2 個のスピン角運動量の合成 具体例としては、He 原子の電子励起状態 $(1s)^1(2s)^1$ における任意のスピン状態に対応するケットを展開する 2 種類の基底ケット、即ち 1s 軌道および 2s 軌道でのスピン固有ケットの直積 $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$ と spin-orbit interaction を考慮した場合のエネルギー固有ケット $\{|0,0\rangle, |1,+1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$ の間の関係を検討することなどが挙げられる。

次の順に考えていくことができる:

1. 意味をもつ s, m と Clebsh-Gordan 係数は図 4.

2. 三角形 A を考えて漸化式をつくる. 禁止されている点に相当する Clebsh-Gordan 係数は 0 ととる.
   $0 = \sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \frac{1}{2}(-\frac{1}{2})}\langle \frac{1}{2}\frac{1}{2}; (-\frac{1}{2})(+\frac{1}{2}) | \frac{1}{2}\frac{1}{2}; 00\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \frac{1}{2}(-\frac{1}{2})}\langle \frac{1}{2}\frac{1}{2}; (+\frac{1}{2})(-\frac{1}{2}) | \frac{1}{2}\frac{1}{2}; 00\rangle.$

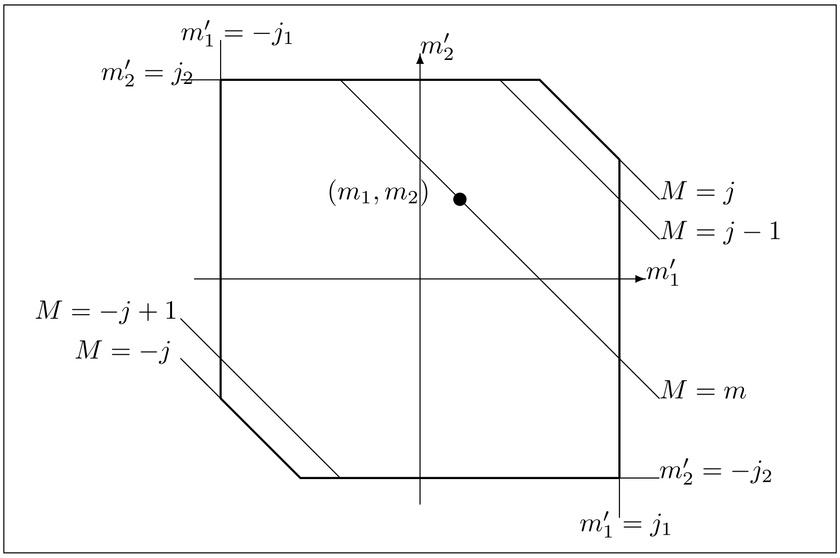


図 3: 許容される m_1, m_2, m の範囲

3. 整理すると、$\langle(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|00\rangle + \langle(+\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|00\rangle = 0.$
規格化条件 $|\langle(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|00\rangle|^2 + |\langle(+\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|00\rangle|^2 = 1.$
Clebsh-Gordan 係数を実に、また $\langle(+\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|00\rangle$ を正にとることにすると、$\langle(+\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|00\rangle = 1/\sqrt{2}, \quad \langle(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|00\rangle = -1/\sqrt{2}.$

4. 三角形 B, C, D を考えて漸化式をつくる.
$\sqrt{1\cdot 2-1\cdot 0}\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};10\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}-(-\tfrac{1}{2})\tfrac{1}{2}}\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};(+\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};11\rangle.$
$\sqrt{1\cdot 2-0\cdot 1}\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};(+\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};11\rangle =$
$\sqrt{\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}-\tfrac{1}{2}(-\tfrac{1}{2})}\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};10\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}-\tfrac{1}{2}(-\tfrac{1}{2})}\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};(+\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};10\rangle.$
$\sqrt{1\cdot 2-0\cdot(-1)}\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};(-\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};1(-1)\rangle =$
$\sqrt{\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}-(-\tfrac{1}{2})\tfrac{1}{2}}\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};(+\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};10\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2}-(-\tfrac{1}{2})\tfrac{1}{2}}\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2};10\rangle.$

5. 整理すると、$\sqrt{2}\langle(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|10\rangle = \langle(+\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|11\rangle.$
$\sqrt{2}\langle(+\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|11\rangle = \langle(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|10\rangle + \langle(+\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|10\rangle.$
$\sqrt{2}\langle(-\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|1(-1)\rangle = \langle(+\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|10\rangle + \langle(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|10\rangle.$
規格化条件 $|\langle(+\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|11\rangle|^2 = 1.$
Clebsh-Gordan 係数を実に、また $\langle(+\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|11\rangle$ を正にとることにすると、$\langle(+\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|11\rangle = 1, \quad \langle(-\tfrac{1}{2})(+\tfrac{1}{2})|10\rangle = 1/\sqrt{2}, \quad \langle(+\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|10\rangle = 1/\sqrt{2}, \quad \langle(-\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})|1(-1)\rangle = 1.$

例 2: スピン 1/2 粒子 1 個の軌道角運動量とスピン角運動量の合成　具体例としては、水素原子の電子の任意の軌道角運動量-スピン状態に対応するケッ

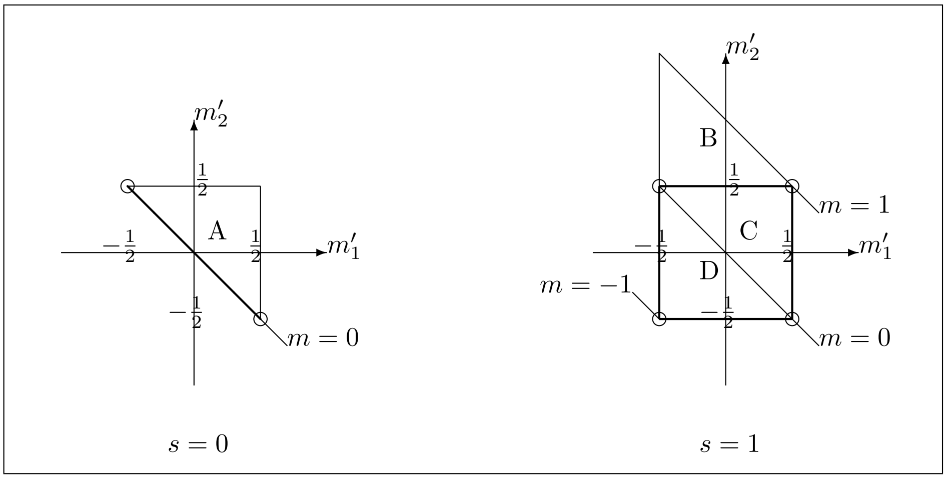


図 4: 2 つのスピン 1/2 粒子のスピン角運動量の合成

トを展開する 2 種類の基底のセット、即ちスピンを除いて構成したときのエネルギー固有ケットとスピン固有ケットの直積と spin-orbit interaction を考慮した場合のエネルギー固有ケットの間の関係を検討することなどが挙げられる。

この例では l, j, m_j で指定される基底ケット $|l, \frac{1}{2}; jm_j\rangle$ を l, m_l, m_s で指定される基底ケット $|l, \frac{1}{2}; m_l m_s\rangle$ で展開した式を求める。

$j = l + \frac{1}{2}$ のとき意味のある Clebsh-Gordan 係数の範囲は図 5.

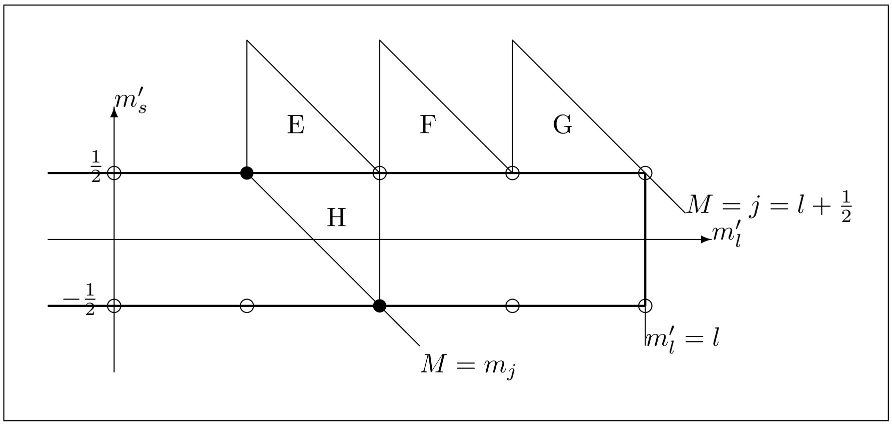


図 5: スピン 1/2 粒子の軌道角運動量とスピン角運動量の合成 ($j = l + \frac{1}{2}$)

1. m_j に対応するのは黒丸. 上段の黒丸から出発する.
   三角形 E,F,G と考えて、2 項づつの漸化式を M が最大になるまでつくる.
   $\sqrt{j(j+1) - (m_j+1)m_j}\langle l\frac{1}{2}; (m_j - \frac{1}{2})(+\frac{1}{2})|l\frac{1}{2}; jm_j\rangle$

$= \sqrt{l(l+1)-(m_j-\frac{1}{2})(m_j+\frac{1}{2})}\langle l\frac{1}{2};(m_j+\frac{1}{2})(+\frac{1}{2})|l\frac{1}{2};j(m_j+1)\rangle.$
$\sqrt{j(j+1)-(m_j+2)(m_j+1)}\langle l\frac{1}{2};(m_j+\frac{1}{2})(+\frac{1}{2})|l\frac{1}{2};j(m_j+1)\rangle$
$= \sqrt{l(l+1)-(m_j+\frac{1}{2})(m_j+\frac{3}{2})}\langle l\frac{1}{2};(m_j+\frac{3}{2})(+\frac{1}{2})|l\frac{1}{2};j(m_j+2)\rangle.$
...
$\sqrt{j(j+1)-j(j-1)}\langle l\frac{1}{2};(l-1)(+\frac{1}{2})|l\frac{1}{2};j(j-1)\rangle$
$= \sqrt{l(l+1)-(l-1)l}\langle l\frac{1}{2};l(+\frac{1}{2})|l\frac{1}{2};jj\rangle.$

2. 上段右隅の点に対応する $\langle l(+\frac{1}{2})|jj\rangle$ を実の正数 $(=1)$ に選ぶと、上段の Clebsh-Gordan 係数が決まる.
   $\langle(m_j-\frac{1}{2})(+\frac{1}{2})|jm_j\rangle = \frac{\sqrt{(l-m_j+\frac{1}{2})(l+m_j+\frac{1}{2})}\sqrt{(l-m_j-\frac{1}{2})(l+m_j+\frac{3}{2})}\ldots\sqrt{1\cdot(l+l)}}{\sqrt{(l+m_j+\frac{3}{2})(l-m_j+\frac{1}{2})}\sqrt{(l+m_j+\frac{5}{2})(l-m_j-\frac{1}{2})}\ldots\sqrt{(l+l+1)\cdot 1}}\langle l(+\frac{1}{2})|jj\rangle$
   $= \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}}\langle l(+\frac{1}{2})|jj\rangle = \sqrt{(j+m_j)/2j}.$

3. 三角形 H を考えて下段の黒丸に対応する Clebsh-Gordan 係数も決まる.
   $\sqrt{j(j+1)-m_j(m_j+1)}\langle l\frac{1}{2};(m_j+\frac{1}{2})(+\frac{1}{2})|l\frac{1}{2};j(m_j+1)\rangle$
   $= \sqrt{l(l+1)-(m_j+\frac{1}{2})(m_j-\frac{1}{2})}\langle l\frac{1}{2};(m_j-\frac{1}{2})(+\frac{1}{2})|l\frac{1}{2};jm_j\rangle$
   $+ \sqrt{\frac{1}{2}\frac{3}{2}-\frac{1}{2}(-\frac{1}{2})}\langle l\frac{1}{2};(m_j+\frac{1}{2})(-\frac{1}{2})|l\frac{1}{2};jm_j\rangle.$
   整理して $\langle(m_j+\frac{1}{2})(-\frac{1}{2})|jm_j\rangle = \sqrt{(j-m_j)/2j}.$

note: $j(j+1)-m(m+1) = (j-m)(j+m+1), j(j+1)-m(m-1) = (j+m)(j-m+1)$
以上より

$$|j=l+\frac{1}{2},m_j\rangle = \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}}|m_j-\frac{1}{2},+\rangle + \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}}|m_j+\frac{1}{2},-\rangle$$

また $j=l-\frac{1}{2}$ のとき意味のある Clebsh-Gordan 係数の範囲は図 6.

1. m_j に対応するのは黒丸. 上段の黒丸から出発する.
   $j=l+\frac{1}{2}$ のときと同様にして
   $\langle(m_j-\frac{1}{2})(+\frac{1}{2})|jm_j\rangle = \sqrt{j-m_j+1}\langle(l-1)(+\frac{1}{2})|jj\rangle.$

2. 三角形 Y について、$\sqrt{2l}\langle(l-1)(+\frac{1}{2})|jj\rangle + \langle l(-\frac{1}{2})|jj\rangle = 0.$
   規格化条件 $|\langle(l-1)(+\frac{1}{2})|jj\rangle|^2 + |\langle l(-\frac{1}{2})|jj\rangle|^2 = 1.$
   $\langle l(-\frac{1}{2})|jj\rangle$ を実かつ正にとることにすると、
   $\langle l(-\frac{1}{2})|jj\rangle = \sqrt{2l/(2l+1)},\quad \langle(l-1)(+\frac{1}{2})|jj\rangle = -\sqrt{1/(2l+1)}.$
   これより $\langle(m_j-\frac{1}{2})(+\frac{1}{2})|jm_j\rangle = -\sqrt{(j-m_j+1)/(2l+1)}.$

3. 三角形 Z について検討することにより、$\langle(m_j+\frac{1}{2})(-\frac{1}{2})|jm_j\rangle = \sqrt{(l+m+\frac{1}{2})/(2l+1)}.$

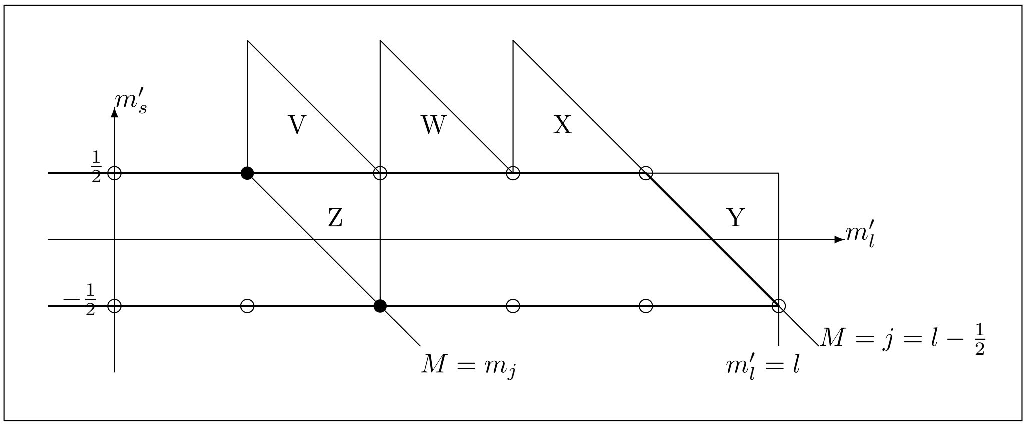


図 6: スピン 1/2 粒子の軌道角運動量とスピン角運動量の合成 ($j = l - \frac{1}{2}$)

以上より

$$|j = l - \frac{1}{2}, m_j\rangle = -\sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}|m_j - \frac{1}{2}, +\rangle + \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}|m_j + \frac{1}{2}, -\rangle$$

$l = 1$ のときの基底ケットの式:

$$\begin{aligned}
|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle &= |1, +\rangle \\
|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|0, +\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1, -\rangle \\
|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|-1, +\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|0, -\rangle \\
|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle &= |-1, -\rangle \\
|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{3}}|0, +\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -\rangle \\
|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}}|-1, +\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|0, -\rangle
\end{aligned}$$

Clebsh-Gordan 係数と回転行列