

7 角運動量の合成

7.1 目標

角運動量が複数存在する系を、全体の（合成された）角運動量で記述する。

- 水素原子中の電子：電子のスピンと軌道角運動量
- 2電子系：電子Aのスピンと電子Bのスピン（運動していれば軌道角運動量も）

基本的には**ベクトルの足し算**。群論ではSU(2)の表現の直積の規約分解に対応する。

角運動量 j_{cl}^A と j_{cl}^B をもつ2質点系の古典力学、系の全角運動量は

$$\mathbf{j}_{cl} = \mathbf{j}_{cl}^A + \mathbf{j}_{cl}^B$$

これを**角運動量の合成**と呼ぶ。合成角運動量 \mathbf{j}_{cl} の長さは

$$j_{cl} = \sqrt{(\mathbf{j}_{cl}^A + \mathbf{j}_{cl}^B)^2} = \sqrt{(j_{cl}^A)^2 + (j_{cl}^B)^2 + 2\mathbf{j}_{cl}^A \cdot \mathbf{j}_{cl}^B} = \sqrt{(j_{cl}^A)^2 + (j_{cl}^B)^2 + 2j_{cl}^A j_{cl}^B \cos \theta}$$

となり、最大値は $\theta = 0$ の場合（ベクトルを同じ向きで足す）で $j_{cl} = j_{cl}^A + j_{cl}^B$ 、最小値は $\theta = \pi$ の（反対向きで足す）で $j_{cl} = |j_{cl}^A - j_{cl}^B|$ となる。古典的には j_{cl} は最大と最小の間の任意の実数。

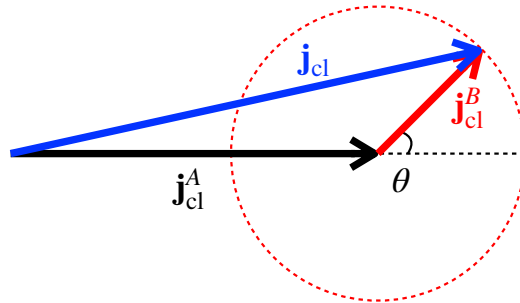


図 8: 古典的な角運動量の合成。

7.2 角運動量の合成

2つの独立な角運動量演算子 $\hat{\mathbf{j}}^A$ 、 $\hat{\mathbf{j}}^B$ を持つ系を考える。それぞれの交換関係と固有状態

$$[\hat{j}_i^A, \hat{j}_j^A] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k^A, \quad [\hat{j}_i^B, \hat{j}_j^B] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k^B \quad (260)$$

$$(\hat{\mathbf{j}}^A)^2 |j^A, m^A\rangle = j^A(j^A + 1) |j^A, m^A\rangle, \quad (\hat{\mathbf{j}}^B)^2 |j^B, m^B\rangle = j^B(j^B + 1) |j^B, m^B\rangle \quad (261)$$

$$\hat{j}_3^A |j^A, m^A\rangle = m^A |j^A, m^A\rangle, \quad \hat{j}_3^B |j^B, m^B\rangle = m^B |j^B, m^B\rangle \quad (262)$$

2つの角運動量が独立という仮定から、 A と B の角運動量は交換する

$$[\hat{j}_i^A, \hat{j}_j^B] = 0 \quad (\text{任意の } i, j = 1, 2, 3) \quad (263)$$

それぞれの角運動量の大きさと第3成分は相手に独立に選ぶことができるので、合成系の状態は両方の角運動量の大きさと第3成分 j^A, m^A, j^B, m^B で指定できる。この状態を直積表現と呼び、

$$|j^A, m^A, j^B, m^B\rangle = |j^A, m^A\rangle \otimes |j^B, m^B\rangle \quad (264)$$

と表記する。 j^A, j^B を固定すると、磁気量子数は $|m^A| \leq j^A, |m^B| \leq j^B$ の値をとるので

$$\begin{aligned} & |j^A, j^A, j^B, j^B\rangle, \quad |j^A, j^A, j^B, j^B - 1\rangle, \quad \dots, \quad |j^A, j^A, j^B, -j^B\rangle \\ & |j^A, j^A - 1, j^B, j^B\rangle, \quad |j^A, j^A - 1, j^B, j^B - 1\rangle, \quad \dots \\ & \vdots \\ & |j^A, -j^A, j^B, j^B\rangle, \quad |j^A, -j^A, j^B, j^B - 1\rangle, \quad \dots \end{aligned} \quad (265)$$

という状態が可能で、全体で $(2j^A + 1)(2j^B + 1)$ 個の状態が存在する。

角運動量はベクトルなので、**合成系の角運動量演算子**を

$$\hat{j} = \hat{j}^A + \hat{j}^B = \hat{j}^A \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{j}^B \quad (266)$$

と定義すると、 \hat{j} も角運動量の交換関係を満たす。

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k, \quad [\hat{j}^2, \hat{j}_3] = 0 \quad (267)$$

確認)

$$\begin{aligned} [\hat{j}_1, \hat{j}_2] &= [\hat{j}_1^A + \hat{j}_1^B, \hat{j}_2^A + \hat{j}_2^B] \\ &= [\hat{j}_1^A, \hat{j}_2^A] + [\hat{j}_1^B, \hat{j}_2^B] \\ &= i\hat{j}_3^A + i\hat{j}_3^B \\ &= i(\hat{j}_3^A + \hat{j}_3^B) = i\hat{j}_3 \end{aligned}$$

角運動量の一般論から、交換関係 (267) を満たす演算子の固有状態は

$$\hat{j}^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle, \quad \hat{j}_3|j, m\rangle = m|j, m\rangle \quad (268)$$

と量子数 j, m によって特定できる。合成系の任意の状態は j^A, m^A, j^B, m^B で表記した直積表現 (264) の線型結合で記述できるので、固有状態 $|j, m\rangle$ を展開すると

$$|j, m\rangle = \sum_{m^A, m^B} C_{j^A m^A j^B m^B}^{jm} |j^A, m^A, j^B, m^B\rangle \quad (269)$$

となる。展開係数 $C_{j^A m^A j^B m^B}^{jm}$ を**クレプシュ-ゴルダン (Clebsch-Gordan) 係数**と呼ぶ。これは状態の完全性 $\sum_{m^A, m^B} |j^A, m^A, j^B, m^B\rangle \langle j^A, m^A, j^B, m^B| = 1$ より

$$C_{j^A m^A j^B m^B}^{jm} = \langle j^A, m^A, j^B, m^B | j, m \rangle \quad (270)$$

と表記できる。

合成系の j, m の決定

- 直積表現の状態 $|j^A, m^A, j^B, m^B\rangle$ に \hat{j}_3 を作用させると、

$$\begin{aligned}\hat{j}_3|j^A, m^A, j^B, m^B\rangle &= (\hat{j}_3^A + \hat{j}_3^B)|j^A, m^A, j^B, m^B\rangle \\ &= (\hat{j}_3^A \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{j}_3^B)(|j^A, m^A\rangle \otimes |j^B, m^B\rangle) \\ &= \hat{j}_3^A|j^A, m^A\rangle \otimes \hat{1}|j^B, m^B\rangle + \hat{1}|j^A, m^A\rangle \otimes \hat{j}_3^B|j^B, m^B\rangle \\ &= m^A|j^A, m^A\rangle \otimes |j^B, m^B\rangle + m^B|j^A, m^A\rangle \otimes |j^B, m^B\rangle \\ &= (m^A + m^B)|j^A, m^A, j^B, m^B\rangle\end{aligned}$$

である。つまりこの状態は $m = m^A + m^B$ を持つ。

- m の**最大値**は $m = j^A + j^B$ ($m^A = j^A$, $m^B = j^B$ のとき)、**最小値**は $m = -j^A - j^B$
- j は量子化された角運動量ベクトルの“長さ”。古典的な合成角運動量ベクトルの長さは、 $|j_{cl}^A - j_{cl}^B| \leq j_{cl} \leq j_{cl}^A + j_{cl}^B$ の任意の値を取りうるが、量子力学では j は離散的な値しか取れないので、**可能な j の値**として

$$j = j^A + j^B, j^A + j^B - 1, \dots, |j^A - j^B| \quad (271)$$

が得られる。確認：各 j について $2j + 1$ 個の m がとれるので、全ての状態の数は

$$\sum_{j=|j^A-j^B|}^{j^A+j^B} (2j+1)$$

で与えられる。この和を評価する上では一般性を失わず $j^A > j^B$ として良いので

$$\begin{aligned}\sum_{j=j^A-j^B}^{j^A+j^B} (2j+1) &= 2 \sum_{j=j^A-j^B}^{j^A+j^B} j + \sum_{j=j^A-j^B}^{j^A+j^B} 1 \\ &= 2 \frac{[j^A + j^B - (j^A - j^B) + 1](j^A - j^B + j^A + j^B)}{2} \\ &\quad + j^A + j^B - (j^A - j^B) + 1 \\ &= (2j^B + 1)2j^A + 2j^B + 1 \\ &= (2j^A + 1)(2j^B + 1)\end{aligned}$$

となり、式(265)の直積表現の状態数と一致する。

- $m = j^A + j^B$ の状態は $|j, m\rangle$ でも直積表現でも1通りしかないので

$$|j^A + j^B, j^A + j^B\rangle = |j^A, j^A, j^B, j^B\rangle \quad (272)$$

となる。消滅演算子

$$\hat{j}_- = \hat{j}_1 - i\hat{j}_2 = \hat{j}_1^A + \hat{j}_1^B - i\hat{j}_2^A - i\hat{j}_2^B = \hat{j}_-^A + \hat{j}_-^B \quad (273)$$

を定義し両辺に作用させることでクレプシュ-ゴルダン係数が決定できる。¹

¹ただし位相に不定性があり、通常使われるクレプシュ-ゴルダン係数の表は Condon-Shortley の規約に基づく。

7.3 2電子系のスピン

スピン 1/2 を持った電子 A と電子 B、軌道角運動量は考えない。直積表現の状態は

$$|s^A, m_s^A, s^B, m_s^B\rangle \in \{ |\uparrow^A, \uparrow^B\rangle, |\uparrow^A, \downarrow^B\rangle, |\downarrow^A, \uparrow^B\rangle, |\downarrow^A, \downarrow^B\rangle \} \quad (274)$$

の4つが可能 ($s^A = s^B = 1/2$ は省略し m_s^A, m_s^B のみを矢印で表記)。これは式 (265) に対応し、状態数は $(2 \times \frac{1}{2} + 1)(2 \times \frac{1}{2} + 1) = 4$ である。それぞれのスピン演算子を \hat{s}^A 、 \hat{s}^B と書くと、合成系のスピン演算子は (式 (266) に対応)

$$\hat{s} = \hat{s}^A + \hat{s}^B \quad (275)$$

合成系のスピンの大きさ s の取りうる値は、 $s_A = s_B = 1/2$ なので、

$$s = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1, \quad s = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \quad (276)$$

つまり**スピン1とスピン0の2通り** (式 (271) に対応)。スピン1の磁気量子数 m_s は ± 1 と 0 がとれるので、合成系のスピンの状態は

$$|s, m_s\rangle \in \{ |0, 0\rangle, |1, +1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle \} \quad (277)$$

の4つが可能。これが式 (274) の状態の線型結合で書かれる。式 (274) の状態を m_s で分類すると、 $m_s = m_s^A + m_s^B$ なので

$$m_s = +1 \quad : \quad |\uparrow^A, \uparrow^B\rangle, \quad (278)$$

$$m_s = 0 \quad : \quad |\uparrow^A, \downarrow^B\rangle, |\downarrow^A, \uparrow^B\rangle, \quad (279)$$

$$m_s = -1 \quad : \quad |\downarrow^A, \downarrow^B\rangle, \quad (280)$$

よって m_s が最大 (+1) と最小 (-1) の状態は

$$|1, +1\rangle = |\uparrow^A, \uparrow^B\rangle, \quad \text{式 (272) に対応} \quad (281)$$

$$|1, -1\rangle = |\downarrow^A, \downarrow^B\rangle \quad (282)$$

$m_s = 0$ の状態を得るには、

$$\hat{j}_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \quad (283)$$

の関係を使う。スピンの消滅演算子は $\hat{s}_- = \hat{s}_-^A + \hat{s}_-^B$ 。 $|1, +1\rangle$ に消滅演算子を作用させると、

$$\hat{s}_- |1, +1\rangle = \sqrt{(1+1)(1-1+1)} |1, 0\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle \quad (284)$$

一方それぞれのスピンを用いて表現すると

$$\begin{aligned} \hat{s}_- |1, +1\rangle &= (\hat{s}_-^A + \hat{s}_-^B) |\uparrow^A, \uparrow^B\rangle \\ &= \hat{s}_-^A |\uparrow^A\rangle \otimes |\uparrow^B\rangle + |\uparrow^A\rangle \otimes \hat{s}_-^B |\uparrow^B\rangle \\ &= |\downarrow^A, \uparrow^B\rangle + |\uparrow^A, \downarrow^B\rangle \end{aligned}$$

より

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow^A, \uparrow^B\rangle + |\uparrow^A, \downarrow^B\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow^A, \uparrow^B\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow^A, \downarrow^B\rangle \quad (285)$$

となる。この計算で得られたクレブシュ-ゴルダン係数は、式 (269) と比較して

$$C_{1/2, -1/2, 1/2, +1/2}^{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C_{1/2, +1/2, 1/2, -1/2}^{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (286)$$

である。状態 $|0, 0\rangle$ は、 $|1, 0\rangle$ に直交し、 $|\downarrow^A, \uparrow^B\rangle$ と $|\uparrow^A, \downarrow^B\rangle$ の線型結合で書かれる状態なので、

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow^A, \downarrow^B\rangle - |\downarrow^A, \uparrow^B\rangle) \quad (287)$$

とできる。まとめると、

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow^A, \downarrow^B\rangle - |\downarrow^A, \uparrow^B\rangle) \quad (288)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow^A, \uparrow^B\rangle + |\uparrow^A, \downarrow^B\rangle) \quad (289)$$

$$|1, +1\rangle = |\uparrow^A, \uparrow^B\rangle, \quad |1, -1\rangle = |\downarrow^A, \downarrow^B\rangle, \quad (290)$$

スピン 0 の状態はスピン A と B の**入れ替えに対して反対称** (符号が反転する)

$$|0, 0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow^A, \uparrow^B\rangle - |\uparrow^A, \downarrow^B\rangle) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow^A, \downarrow^B\rangle - |\downarrow^A, \uparrow^B\rangle) = -|0, 0\rangle$$

スピン 1 の状態は**入れ替えに対して対称** (符号が変わらない)。

応用：スピン間相互作用によるエネルギー

$$\hat{H} = -J \hat{s}^A \cdot \hat{s}^B \quad (291)$$

定義を利用して

$$\begin{aligned} \hat{s}^2 &= (\hat{s}^A + \hat{s}^B)^2 = (\hat{s}^A)^2 + (\hat{s}^B)^2 + 2\hat{s}^A \cdot \hat{s}^B \\ \hat{s}^A \cdot \hat{s}^B &= \frac{\hat{s}^2 - (\hat{s}^A)^2 - (\hat{s}^B)^2}{2} \end{aligned}$$

と書けるので、

$$\begin{aligned} \hat{H}|0, 0\rangle &= -J \frac{\hat{s}^2 - (\hat{s}^A)^2 - (\hat{s}^B)^2}{2} |0, 0\rangle \\ &= -J \frac{0(0+1) - 1/2(1/2+1) - 1/2(1/2+1)}{2} |0, 0\rangle \\ &= \frac{3J}{4} |0, 0\rangle \\ \hat{H}|1, m_s\rangle &= -J \frac{1(1+1) - 1/2(1/2+1) - 1/2(1/2+1)}{2} |1, m_s\rangle \\ &= -\frac{J}{4} |1, m_s\rangle \end{aligned}$$

となり、スピン 0 と 1 でエネルギーが異なる。 $J > 0$ の場合、スピンの揃った状態の方がエネルギーが低い。スピン 1 の状態は第 3 成分 m_s の値に依らずに同じ固有値を持つ。