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) の表現のテンソル積の規約分解に対応する。

角運動量 $\boldsymbol{j}_{\rm cl}^A$ と $\boldsymbol{j}_{\rm cl}^B$ をもつ 2 質点系の古典力学、系の全角運動量は

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

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

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

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 $j_{\rm cl} = j_{\rm cl}^A + j_{\rm cl}^B$、最小値は $\theta = \pi$ の（反対向きで足す）で $j_{\rm cl} = |j_{\rm cl}^A - j_{\rm cl}^B|$ となる。古典的には $j_{\rm cl}$ は最大と最小の間の任意の実数。

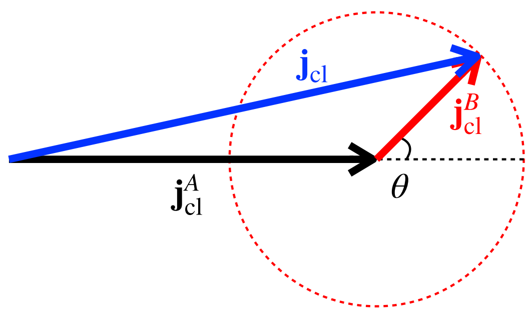

図 10:　古典的な角運動量の合成。

7.2　角運動量の合成

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

$$[\hat{j}_a^A, \hat{j}_b^A] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_c^A, \qquad [\hat{j}_a^B, \hat{j}_b^B] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_c^B \tag{255}$$

$$(\hat{\boldsymbol{j}}^A)^2 \left|j^A, m^A\right\rangle = j^A(j^A+1)\left|j^A, m^A\right\rangle, \qquad (\hat{\boldsymbol{j}}^B)^2 \left|j^B, m^B\right\rangle = j^B(j^B+1)\left|j^B, m^B\right\rangle \tag{256}$$

$$\hat{j}_3^A \left|j^A, m^A\right\rangle = m^A \left|j^A, m^A\right\rangle, \qquad \hat{j}_3^B \left|j^B, m^B\right\rangle = m^B \left|j^B, m^B\right\rangle \tag{257}$$

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

$$[\hat{j}^A_a, \hat{j}^B_b] = 0 \quad (\text{任意の } a, b = 1, 2, 3) \tag{258}$$

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。合成系をテンソル積表現と呼び、

$$|j^A, m^A, j^B, m^B\rangle = |j^A, m^A\rangle \otimes |j^B, m^B\rangle \tag{259}$$

と表記する（補足 A.22 参照)。固定した j^A, j^B に対し、磁気量子数は $|m^A| \leq j^A, |m^B| \leq j^B$ なので

$$\begin{aligned} &|j^A, j^A, j^B, j^B\rangle, \quad |j^A, j^A, j^B, j^B - 1\rangle, \quad \cdots, \quad |j^A, j^A, j^B, -j^B\rangle \\ &|j^A, j^A - 1, j^B, j^B\rangle, \quad |j^A, j^A - 1, j^B, j^B - 1\rangle, \quad \cdots \\ &\qquad\qquad\vdots \\ &|j^A, -j^A, j^B, j^B\rangle, \quad |j^A, -j^A, j^B, j^B - 1\rangle, \quad \cdots \end{aligned} \tag{260}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{j}}^A + \hat{\boldsymbol{j}}^B = \hat{\boldsymbol{j}}^A \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{\boldsymbol{j}}^B \tag{261}$$

と定義すると、$\hat{\boldsymbol{j}}$ も角運動量の交換関係を満たす。

$$[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_c, \quad [\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_3] = 0 \tag{262}$$

確認）

$$\begin{aligned} [\hat{j}_1, \hat{j}_2] &= [\hat{j}^A_1 + \hat{j}^B_1, \hat{j}^A_2 + \hat{j}^B_2] \\ &= [\hat{j}^A_1, \hat{j}^A_2] + [\hat{j}^B_1, \hat{j}^B_2] \\ &= i\hat{j}^A_3 + i\hat{j}^B_3 \\ &= i(\hat{j}^A_3 + \hat{j}^B_3) = i\hat{j}_3 \end{aligned}$$

角運動量の一般論から、交換関係 (262) を満たす演算子の固有状態は

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle, \quad \hat{j}_3 |j, m\rangle = m |j, m\rangle \tag{263}$$

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 で表記したテンソル積表現 (259) の線形結合で記述できるので、固有状態 $|j, m\rangle$ を展開すると

$$|j, m\rangle = \sum_{m^A, m^B} C^{jm}_{j^A m^A j^B m^B} |j^A, m^A, j^B, m^B\rangle \tag{264}$$

となる。展開係数 $C^{jm}_{j^A m^A j^B m^B}$ 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

$$C^{jm}_{j^A m^A j^B m^B} = \langle j^A, m^A, j^B, m^B | j, m\rangle \tag{265}$$

と表記できる。

合成系の j, m の決定

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

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

  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、$|j_{\rm cl}^A - j_{\rm cl}^B| \leq j_{\rm cl} \leq j_{\rm cl}^A + j_{\rm cl}^B$ 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

$$j = j^A + j^B,\ j^A + j^B - 1, \cdots, |j^A - j^B| \tag{266}$$

  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 (260) のテンソル積表現の状態数と一致する。

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

$$|j^A + j^B, j^A + j^B\rangle = |j^A, j^A, j^B, j^B\rangle \tag{267}$$

  となる。消滅演算子

$$\hat{j}_- = \hat{j}_1 - i\hat{j}_2 = \hat{j}_1^A + \hat{j}_1^B - i\hat{j}_2^A - i\hat{j}_2^B = \hat{j}_-^A + \hat{j}_-^B \tag{268}$$

  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。テンソル積表現の状態は

$$|s^A, m_s^A, s^B, m_s^B\rangle \in \{\ |{\uparrow^A}, {\uparrow^B}\rangle, \quad |{\uparrow^A}, {\downarrow^B}\rangle, \quad |{\downarrow^A}, {\uparrow^B}\rangle, \quad |{\downarrow^A}, {\downarrow^B}\rangle\ \} \tag{269}$$

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 (260) 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 $\hat{\boldsymbol{s}}^A$、$\hat{\boldsymbol{s}}^B$ と書くと、合成系のスピン演算子は（式 (261) に対応）

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \hat{\boldsymbol{s}}^A + \hat{\boldsymbol{s}}^B \tag{270}$$

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、

$$s = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1, \quad s = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \tag{271}$$

つまり**スピン 1 とスピン 0 の 2 通り**（式 (266) 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、合成系のスピンで表した状態は

$$|s, m_s\rangle \in \{\ |0, 0\rangle, \quad |1, +1\rangle, \quad |1, 0\rangle, \quad |1, -1\rangle\ \} \tag{272}$$

の 4 つが可能。これが式 (269) の状態の線形結合で書かれる。式 (269) の状態を m_s で分類すると、$m_s = m_s^A + m_s^B$ なので

$$m_s = +1 \quad : \quad |{\uparrow^A}, {\uparrow^B}\rangle, \tag{273}$$

$$m_s = 0 \quad : \quad |{\uparrow^A}, {\downarrow^B}\rangle, \quad |{\downarrow^A}, {\uparrow^B}\rangle, \tag{274}$$

$$m_s = -1 \quad : \quad |{\downarrow^A}, {\downarrow^B}\rangle, \tag{275}$$

よって m_s が最大（$+1$）と最小（-1）の状態は

$$|1, +1\rangle = |{\uparrow^A}, {\uparrow^B}\rangle, \quad \text{式 (267) に対応} \tag{276}$$

$$|1, -1\rangle = |{\downarrow^A}, {\downarrow^B}\rangle \tag{277}$$

$m_s = 0$ の状態を得るには、

$$\hat{j}_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\, |j, m-1\rangle \tag{278}$$

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、

$$\hat{s}_- |1, +1\rangle = \sqrt{(1+1)(1-1+1)}\, |1, 0\rangle = \sqrt{2}\ |1, 0\rangle \tag{279}$$

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

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{\downarrow^A},{\uparrow^B}\rangle + |{\uparrow^A},{\downarrow^B}\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}|{\downarrow^A},{\uparrow^B}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|{\uparrow^A},{\downarrow^B}\rangle \tag{280}$$

となる。この計算で得られたクレプシュ-ゴルダン係数は、式 (264) と比較して

$$C^{1,0}_{1/2,-1/2,1/2,+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C^{1,0}_{1/2,+1/2,1/2,-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{281}$$

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

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{\uparrow^A},{\downarrow^B}\rangle - |{\downarrow^A},{\uparrow^B}\rangle\right) \tag{282}$$

とできる。まとめると、

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{\uparrow^A},{\downarrow^B}\rangle - |{\downarrow^A},{\uparrow^B}\rangle\right) \tag{283}$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{\downarrow^A},{\uparrow^B}\rangle + |{\uparrow^A},{\downarrow^B}\rangle\right) \tag{284}$$

$$|1,+1\rangle = |{\uparrow^A},{\uparrow^B}\rangle, \quad |1,-1\rangle = |{\downarrow^A},{\downarrow^B}\rangle, \tag{285}$$

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）

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

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

$$\hat{H} = -J\hat{\boldsymbol{s}}^A \cdot \hat{\boldsymbol{s}}^B \tag{286}$$

定義を利用して

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2 = (\hat{\boldsymbol{s}}^A + \hat{\boldsymbol{s}}^B)^2 = (\hat{\boldsymbol{s}}^A)^2 + (\hat{\boldsymbol{s}}^B)^2 + 2\hat{\boldsymbol{s}}^A \cdot \hat{\boldsymbol{s}}^B$$

$$\hat{\boldsymbol{s}}^A \cdot \hat{\boldsymbol{s}}^B = \frac{\hat{\boldsymbol{s}}^2 - (\hat{\boldsymbol{s}}^A)^2 - (\hat{\boldsymbol{s}}^B)^2}{2}$$

と書けるので、

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

となり、スピン 0 と 1 でエネルギーが異なる。$J > 0$ の場合、スピンが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。