励起状態は3重に縮退していて

$$|1,1\rangle,\ |1,0\rangle,\ |1,-1\rangle$$

であり、そのエネルギーは

$$E_1 = J\left(\frac{1}{2}1(1+1) - \frac{3}{4}\right) = \frac{1}{4}J$$

となる。

この前者を(スピン)一重項(シングレット)

後者を(スピン)三重項(トリプレット)

と呼ぶ。

量子力学3 第13回 角運動量の合成(2)　　201810874 西谷 尚生

① 角運動量の合成とは何か(復習)

ここでは $\mathbf{J}_1$ と $\mathbf{J}_2$ という2つの角運動量の合成について一般に議論しよう。まず、

$$[J_{ai}, J_{aj}] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_{ak}, \quad a=1,2$$

$$[J_{1i}, J_{2j}] = 0$$

であるから、次のように角運動量の和を定義すれば、

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$$

$$[J_i, J_j] = [J_{1i} + J_{2i}, J_{1j} + J_{2j}] = [J_{1i}, J_{1j}] + [J_{2i} + J_{2j}]$$

$$= i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_{1k} + i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_{2k} = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}(J_{1k} + J_{2k}) = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_k$$

$\boxed{\mathbf{J}\text{も角運動量}}$

② 角運動量の合成とテンソル積

◎ 角運動量の合成のより正確な意味

より正確には、角運動量1(2)に関する演算子 $A_{1(2)}$, $B_{1(2)}$ に対して、テンソル積 $\otimes$ とテンソル積で定義された演算子を次のように定義して

$$(A_1 \otimes A_2)(B_1 \otimes B_2) = A_1 B_1 \otimes A_2 B_2$$

1は1同士で
2は2同士で
計算する

合成角運動量 $\mathbf{J}$ とは次のようにかける。

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

たとえば、$[J_{1i}, J_{2j}] = 0$ は次のように書ける。

$$[J_{1i} \otimes 1_2, 1_1 \otimes J_{2j}] = J_{1i} 1_1 \otimes 1_2 J_{2j} - 1_1 J_{1i} \otimes J_{2j} 1_2$$
$$= J_{1i} \otimes J_{2j} - J_{1i} \otimes J_{2j}$$
$$= 0$$

同様に $[1_1 \otimes J_{2i}, J_{1j} \otimes 1_2] = 0$ となる。また

$$[J_{1i} \otimes 1_2, J_{1j} \otimes 1_2] = J_{1i} J_{1j} \otimes 1_2 - J_{1j} J_{1i} \otimes 1_2$$
$$= [J_{1i}, J_{1j}] \otimes 1_2 = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_{1k} \otimes 1_2$$
$$[1_1 \otimes J_{2i}, 1_1 \otimes J_{2j}] = i\hbar \varepsilon_{ijk} 1_1 \otimes J_{2k}$$

から、J も角運動量の交換関係を満たすことが分かる。

@ 角運動量の固有状態　　既知の状態

$$J_1^2 |j_1 m_1\rangle_1 = \hbar^2 j_1 (j_1 + 1) |j_1 m_1\rangle_1$$
$$J_2^2 |j_2 m_2\rangle_2 = \hbar^2 j_2 (j_2 + 1) |j_2 m_2\rangle_2$$
$$J_{1z} |j_1 m_1\rangle_1 = \hbar m_1 |j_1 m_1\rangle_1$$
$$J_{2z} |j_2 m_2\rangle_2 = \hbar m_2 |j_2 m_2\rangle_2$$

これから、J が作用する状態を次のように作る。

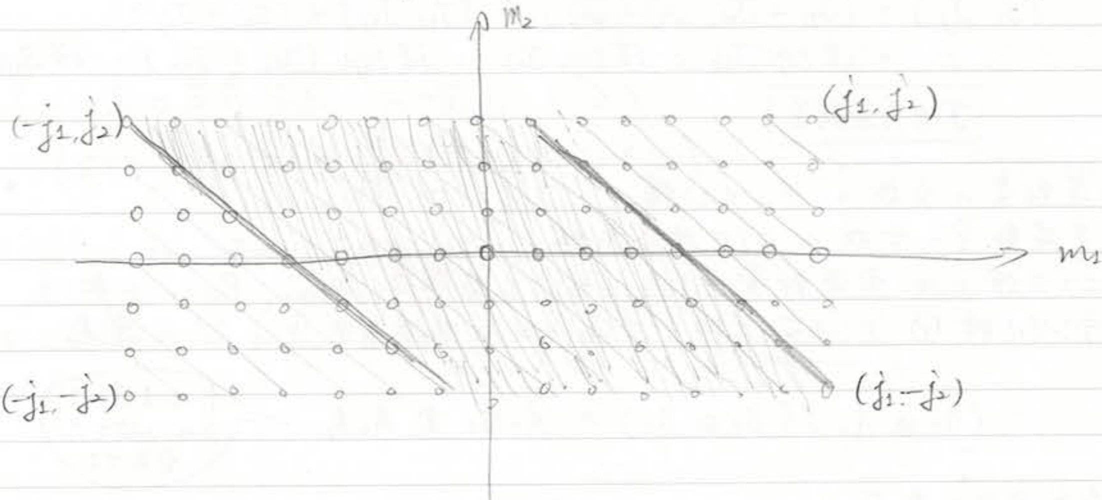
$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle_2$$　新しい状態

$|j_1 m_1\rangle_1 |j_2 m_2\rangle_2$ と略記することもある。

この状態にテンソル積で与えられる演算子 $A_1 \otimes A_2$ は次のように作用する。

$$(A_1 \otimes A_2) |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = A_1 |j_1 m_1\rangle_1 \otimes A_2 |j_2 m_2\rangle_2$$

このような状態は何個ある？



$$N_{j_1, j_2} = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \text{ 個}$$

この場合、$j_1 = 7$, $j_2 = 3$ で $N = 15 \times 7$ 個

No.

Date

③ クレブシュ・ゴルダン係数の性質

一方一般論に従えば

$$J^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle \qquad |jm\rangle：規格直交系$$
$$J_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle$$

となる $|jm\rangle$ が存在する。この間の線形関係を（重複添字に関しては和をとるアインシュタイン記法を用いて、

$$|jm\rangle = |j_1m_1j_2m_2\rangle C_{m_1,m_2,jm}$$

と書こう。左から $\langle j_1m_1'j_2m_2'|$ をかけて

$$\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle = C_{m_1m_2,jm}$$

この係数 $C_{m_1m_2,jm}$ がクレブシュ・ゴルダン係数である。

$|jm\rangle$, $|j_1m_1\rangle$, $|j_2m_2\rangle$
$|j_1m_1j_2m_2\rangle$ …
は規格直交系を作っているとする

$$|jm\rangle = |j_1m_1j_2m_2\rangle C_{m_1m_2,jm}$$

後述の手法で規格直交化された $|jm\rangle$ が $|j_1m_1j_2m_2\rangle$ と同じ $N_{j_1j_2}$ 個独立に作れることをみとめれば、これは行列表式で

$$\Phi = \Psi\mathbb{C} \quad \cdots$$

と書ける。ここで次の記法を用いた

$$(\Phi)_{jm} = |jm\rangle,\quad (\Psi)_{m_1m_2} = |j_1m_1j_2m_2\rangle$$
$$\mathbb{C}_{m_1m_2,jm} = \langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle$$

Φ, Ψ は固有状態を $N_{j_1j_2}$ 個並べた行ベクトルであり、

$\mathbb{C}$ は $N_{j_1j_2}\times N_{j_1j_2}$ の正方行列

$$\Phi = (|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle, |j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle, \cdots)$$
$$\Psi = (|j_1j_1j_2j_2\rangle, |j_1j_1j_2j_2-1\rangle, |j_1j_1j_2j_2-2\rangle, \cdots)$$

④ Clebsch – Gordan 係数の直交性

ここで、$|j_1m_1j_2m_2\rangle$ の規格直交性は $\Psi^\dagger\Psi = E_{N_{j_1j_2}}$ と表せ、

同様に $|jm\rangle$ の規格直交性も $\Phi^\dagger\Phi = E_{N_{j_1j_2}}$ と書けるから

$$E_{N_{j_1j_2}} = \Phi^\dagger\Phi = \mathbb{C}^\dagger\Psi^\dagger\Psi\mathbb{C} = \mathbb{C}^\dagger\mathbb{C} \qquad (\mathbb{C}\ はユニタリ)$$

よって

$$(\mathbb{C}^\dagger)_{jm,m_1m_2} = \langle jm|j_1m_1j_2m_2\rangle = \langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle^*$$

として、

和

$$\langle jm|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

また、$\mathbb{C}^\dagger = \mathbb{C}^{-1}$ だから $\mathbb{C}\mathbb{C}^\dagger = E_{N_{j_1j_2}}$ となり、これを成分で書けば、

$$\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle\langle jm|j_1m_1'j_2m_2'\rangle = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}$$

となる。（2種類の直交関係）

和

No.

Date

以下 $|jm\rangle$ を具体的に構成することを考えよう。まず

$$J_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle$$
$$= (J_{1z}+J_{2z})|j_1m_1j_2m_2\rangle\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle$$
$$= \hbar(m_1'+m_2')|j_1m_1'j_2m_2'\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle$$

から $\langle j_1m_1j_2m_2|$ として

$$\hbar m\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle$$
$$= \hbar(m_1'+m_2')\langle j_1m_1j_2m_2|j_1m_1'j_2m_2'\rangle\langle j_1m_1'j_2m_2'|jm\rangle$$
$$= \hbar(m_1+m_2)\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle$$

となるので、$(m_1+m_2-m)\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle = 0$

$$\therefore\ \boxed{\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle = 0 \quad : \text{if} \quad m \neq m_1+m_2}$$

に注意しよう。

④ 許される全角運動量

$j_1 \geq j_2$ として、$m_1+m_2 = j_1+j_2$ である場合を考える。

この状態 $|j_1j_1j_2j_2\rangle$ から J_+ $(J_{1+}+J_{2+})$ を増やして新しい状態は構成できないので

これは $|j_{max}j_{max}\rangle$, $j_{max} = j_1+j_2$ であり これに繰り返し J_- $(J_{1-}+J_{2-})$ を作用させることで

$|j_{max}m\rangle$, $m = -j_{max}, \cdots, j_{max}$ の $2j_{max}+1$ 個の状態が構成できる。

続いて $m_1+m_2 = j_1+j_2-1 = j_{max}-1$ の状態は

$$(m_1, m_2) = (j_1-1, j_2), (j_1, j_2-1)$$

の中で1つは $j = j_{max} = j_1+j_2$ の状態として使われているので

それと直交する状態が1つあり それが $|j_{max}-1\ j_{max}-1\rangle$ となる。

これに J_- を繰り返し作用させることで、$2(j_{max}-1)+1$ 個の状態を構成できる。

続いて $m_1+m_2 = j_1+j_2-2$ の状態は

$$(m_1, m_2) = (j_1-2, j_2), (j_1-1, j_2-1), (j_1, j_2-2)$$

から構成されるが、そのためには $j_2-2 \geq -j_2$ が必要である。

2個で打ち止めにならない条件 : 新しい状態が存在する条件

この条件が満たされていれば (m_1, m_2) は 3通りあるが

そのうち2個の状態は(先程と同様に) m が1つ大きい状態から

下降演算子を使うことで既に使われている。使っていない状態

つまり使った状態と直交する状態が新しい状態である。この状態は

$|j_{max}-2, j_{max}-2\rangle$ であり J_- を繰り返し作用させると

$2(j_{max}-2)+1$ 個の状態ができる。

続いて、$m_1+m_2 = j_1+j_2-5$ の状態で新しい $j = j_1+j_2-5$ である状態が現れるためには

$$j_2-5 \geq -j_2$$

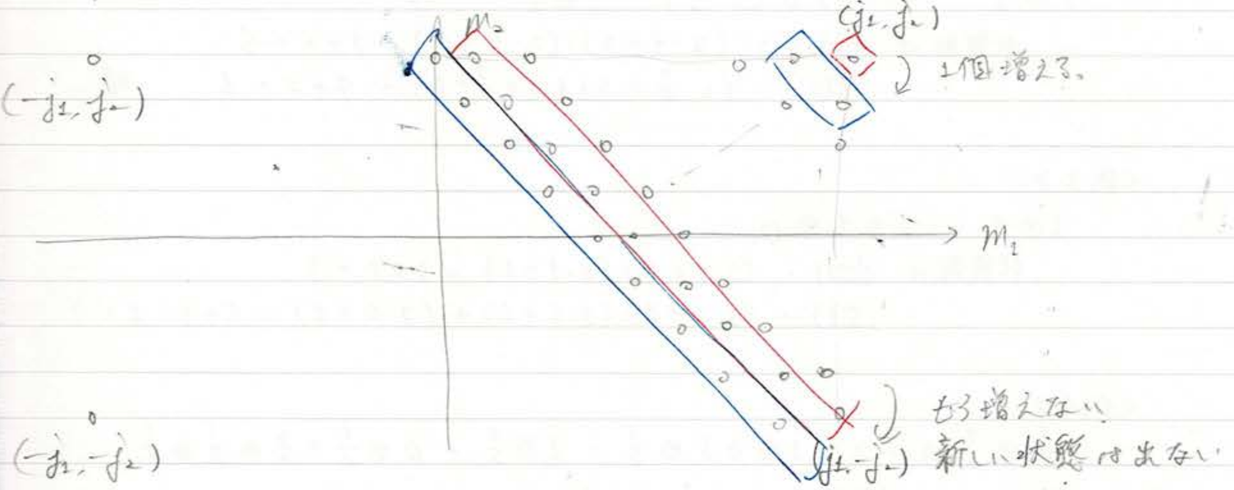
であることが必要であることを意味する。よって

$$j = j_1+j_2-5 \geq j_1-j_2$$

つまり可能な j の値としては、　$(j_1 \geq j_2)$

$$j = j_1+j_2, \cdots, j_1-j_2 = j_1-j_2$$

一般には　$j = j_1+j_2, \cdots, |j_1-j_2|$



なお、状態数を数えれば　$j_< = |j_1-j_2|$, $j_> = j_1+j_2$　として、

$$\sum_{j=j_<}^{j_>}(2j+1) = 2\frac{1}{2}(j_<+j_>)(j_>-j_<+1)+(j_>-j_<+1)$$
$$= (j_>+j_<+1)(j_>-j_<+1)$$
$$= (2j_1+1)(2j_2+1)$$

と図に示す全状態数（格子点の数）と整合的である。
これを

$$j_1 \otimes j_2 = |j_1-j_2| \oplus |j_1-j_2|+1 \oplus \cdots \oplus j_1+j_2$$

と表そう。

$j_1 \geq j_2$ とすると
$j_> + j_< = j_1+j_2+j_1-j_2 = 2j_1$
$j_> - j_< = j_1+j_2-(j_1-j_2) = 2j_2$

$$\begin{array}{r} n + n+1 + \cdots + m \\ +\ m + m-1 + \cdots + n \\ \hline \underbrace{n+m + n+m \cdots}_{m-(n-1) = m-n+1\text{ 個}} \end{array} = \frac{1}{2}(n+m)(m-n+1)$$

$n = j_<$, $m = j_>$

No.

Date

⑤合成角運動量の状態数についての具体例

$j_1 \otimes j_2 = j_1+j_2 \oplus j_1+j_2-1 \oplus \cdots \oplus |j_1-j_2|$

<例1>

$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = (\frac{1}{2}+\frac{1}{2}) \oplus (\frac{1}{2}-\frac{1}{2}) = 1 \oplus 0$

状態数は (左辺) $= (2\cdot\frac{1}{2}+1)(2\cdot\frac{1}{2}+1) = 2\times 2 = 4$

(右辺) $= (2\cdot\frac{1}{2}+1)+(2\cdot 0+1) = 3+1 = 4$ ok

<例2>

$1 \otimes \frac{1}{2} = (1+\frac{1}{2}) \oplus (1-\frac{1}{2}) = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2}$

状態数は (左辺) $= (2\cdot 1+1)(2\cdot\frac{1}{2}+1) = 3\times 2 = 6$

(右辺) $= (2\cdot\frac{3}{2}+1)+(2\cdot\frac{1}{2}+1) = 4+2 = 6$ ok

<例3>

$1 \otimes 1 = 2 \oplus 1 \oplus 0$

状態数は (左辺) $= (2\cdot 1+1)(2\cdot 1+1) = 3\times 3 = 9$

(右辺) $= (2\cdot 2+1)(2\cdot 1+1)+(2\cdot 0+1) = 5+3+1 = 9$ ok

<例4>

$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = (1 \oplus 0) \otimes \frac{1}{2} = 1 \otimes \frac{1}{2} + 0 \otimes \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2}$

(左辺) $= 2\times 2\times 2 = 8$

(右辺) $= (2\cdot\frac{3}{2}+1) + 2(2\cdot\frac{1}{2}+1) = 4+2\cdot 2 = 8$ ok

<例5>

$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = (\frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2}) \otimes \frac{1}{2}$

$= \frac{3}{2} \otimes \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2}$

$= 2 \oplus 1 \oplus (1 \oplus 0) \oplus (1 \oplus 0)$

$= 2 \oplus \underbrace{1 \oplus 1 \oplus 1}_{=3} + \underbrace{0 \oplus 0}_{=2}$

(左辺) $= 2^4 = 16$

(右辺) $= (2\cdot 2+1) + 3(2\cdot 1+1) + 2(2\cdot 0+1)$

$= 5 + 3\cdot 3 + 2 = 16$ ok