量子力学補足問題

中心力ポテンシャルのなかにいくつかの電子があるとき, それぞれの電子の角運動量は厳密な意味では保存しない. 保存するのは全角運動量である. 角運動量の合成の問題は, 全角運動量の固有値, 固有状態を, 個々の粒子のもつ角運動量の固有値, 固有状態を用いてどのように表わすことができるかという問題である.

ここでは特定の量子数 j_1, j_2 をもつ 2 粒子系を考える. それぞれの粒子の角運動量演算子を $\hat{\boldsymbol{J}}_1$, $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ とする. これらはそれぞれ別の自由度に属する演算子であるから交換可能

$$[\hat{\boldsymbol{J}}_1, \hat{\boldsymbol{J}}_2] = 0$$

1. 全角運動量演算子は $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{J}}_1 + \hat{\boldsymbol{J}}_2$ であるが, これが $\hat{\boldsymbol{J}}_1$, $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ の満す交換関係と同じ形の交換関係

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z \ , \qquad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x \ , \qquad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y \tag{1}$$

を満すことを示せ.

$\hat{\boldsymbol{J}}_1^2$, $\hat{J}_{1z}$ の同時固有ケットを $|j_1, m_1\rangle$, $\hat{\boldsymbol{J}}_2^2$, $\hat{J}_{2z}$ の同時固有ケットを $|j_2, m_2\rangle$ とかくことにすると, これらの直積による $(2j_1+1)\times(2j_2+1)$ 個のケット

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \equiv |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

に対して $\hat{\boldsymbol{J}}$ は次のように作用する

$$\hat{\boldsymbol{J}}|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \Big[\hat{\boldsymbol{J}}_1|j_1, m_1\rangle\Big] \otimes |j_2, m_2\rangle + |j_1, m_1\rangle \otimes \Big[\hat{\boldsymbol{J}}_2|j_2, m_2\rangle\Big]$$

2. 次の関係

$$\hat{J}_z|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = (m_1+m_2)\hbar|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \tag{2}$$

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j_1, j_2; j_1, j_2\rangle = (j_1+j_2)(j_1+j_2+1)\hbar^2|j_1, j_2; j_1, j_2\rangle \tag{3}$$

を示せ.

しかし $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ は $\hat{J}_z$ と $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有ケットになっているとはいえない. (3) が一般の m_1, m_2 ではなく, $m_1 = j_1$, $m_2 = j_2$ に限定された式[1] であったことに気づいただろう. 一般の m_1, m_2 について

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = (j_1+j_2)(j_1+j_2+1)\hbar^2|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

のように表わされるなら, 角運動量の合成の問題はここで終了である. しかしそうはなっていないので多少工夫が必要である. そこで (1) の交換関係を満すことに注目して $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有ケット $|j, m\rangle$

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle \tag{4}$$

$$\hat{J}_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle \qquad [\ m = -j, -j+1, \cdots, j\ ] \tag{5}$$

$$\hat{J}_\pm|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\,\hbar|j, m\pm 1\rangle \tag{6}$$

を最初につくっておいて, これを $|j_1, m_1\rangle$, $|j_2, m_2\rangle$ を用いて表わすことを考える.

3. $\hat{\boldsymbol{J}}_1^2$, $\hat{\boldsymbol{J}}_2^2$, $\hat{\boldsymbol{J}}^2$, $\hat{J}_z$ に対する同時固有ケットが存在することを示せ.

[1] (3) の計算を実際に行なえば, その他に $m_1 = -j_1$, $m_2 = -j_2$ の場合でも成り立つことが, またそれ以外の m_1, m_2 では一般には成り立たないことに気づくだろう.

$|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ は $\hat{\boldsymbol{J}}_1^2$, $\hat{\boldsymbol{J}}_2^2$ に対する同時固有ケットになっている. $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有ケット $|j,m\rangle$ は, $\hat{\boldsymbol{J}}_1^2$, $\hat{\boldsymbol{J}}_2^2$ の固有ケットでもあるから, 次のように展開してよい

$$
\begin{aligned}
|j,m\rangle &= \Big[\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle\langle j_1,j_2;m_1,m_2|\Big]|j,m\rangle \\
&= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2} C^j_{m_1m_2}|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle \qquad (7)
\end{aligned}
$$

$$
C^j_{m_1m_2} \equiv \langle j_1,j_2;m_1,m_2|j,m\rangle \qquad : \text{ Clebsch-Gordan 係数}
$$

まず j と m のとる値を調べたい.

4. Clebsch-Gordan 係数 $C^j_{m_1m_2}$ が

$$
m=m_1+m_2 \quad \text{なら} \quad C^j_{m_1m_2}\neq 0\ , \qquad m\neq m_1+m_2 \quad \text{なら} \quad C^j_{m_1m_2}=0
$$

を満すことを示せ.

m_1, m_2 は

$$
m_1=-j_1,-j_1+1,\cdots,j_1\ , \qquad m_2=-j_2,-j_2+1,\cdots,j_2
$$

を満すので, $m=m_1+m_2$ を並べて書き出すと

$j_1 \geq j_2$

$m_2 \backslash m_1$	j_1	j_1-1	$\cdots$	j_1-2j_2	$\cdots$	$-j_1$
j_2	j_1+j_2	j_1+j_2-1	$\cdots$	j_1-j_2	$\cdots$	$-j_1+j_2$
j_2-1	j_1+j_2-1	j_1+j_2-2	$\cdots\cdots$			$-j_1+j_2-1$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots\cdots$			$\vdots$
$-j_2+1$	j_1-j_2+1	j_1-j_2	$\cdots\cdots$			$-j_1-j_2+1$
$-j_2$	j_1-j_2	j_1-j_2-1	$\cdots\cdots$			$-j_1-j_2$

これを次のように見てみる

$m_2 \backslash m_1$	j_1	j_1-1	$\cdots$	j_1-2j_2	$\cdots$	$-j_1$	
j_2	j_1+j_2	j_1+j_2-1	$\cdots$	j_1-j_2	$\cdots$	$-j_1+j_2$	$\cdots$ [1]
j_2-1	j_1+j_2-1	j_1+j_2-2	$\cdots\cdots$			$\vdots$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots\cdots$			$\vdots$	
$-j_2+1$	j_1-j_2+1	j_1-j_2	$\cdots\cdots$			$-j_1-j_2+1$	$\cdots$ [2]
$-j_2$	j_1-j_2	j_1-j_2-1	$\cdots\cdots$			$-j_1-j_2$	$\cdots$ [3]

つまり $m = m_1 + m_2$ を満しながら $m = -j, -j+1 \cdots, j$ を満す組み合せがきれいにとれる

$$
\begin{array}{llcl}
[1]\ :\ m = -j_1 + j_2\ ,\ -j_1 + j_2 + 1\ ,\ \cdots\ ,\ j_1 - j_2 & & \longrightarrow & j = j_1 - j_2 \\
\qquad\qquad \cdots\cdots\cdots & & & \quad \cdots\cdots \\
[2]\ :\ m = -j_1 - j_2 + 1\ ,\ -j_1 - j_2 + 2\ ,\ \cdots\ ,\ j_1 + j_2 - 1 & & \longrightarrow & j = j_1 + j_2 - 1 \\
[3]\ :\ m = -j_1 - j_2\ ,\ -j_1 - j_2 + 1\ ,\ \cdots\ ,\ j_1 + j_2 & & \longrightarrow & j = j_1 + j_2
\end{array}
$$

$j_1 \leq j_2$ の場合も考え合わせれば, 合成された j の値は

$$
j = j_1 + j_2 \ \ j_1 + j_2 - 1 \ \ \cdots\ ,\ |j_1 - j_2| \tag{8}
$$

をとるであろうことが示唆された. ただしこの正当性は, 実際に $|j, m\rangle$ が表に対応する $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ を用いて構成できることを確認して, はじめて保証される. 実際に計算してみよう.

まずは j, m の最大値 $j_{\max} = j_1 + j_2$, $m_{\max} = j_1 + j_2$ の状態から考える. (7) より

$$
|j, m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} C^{j}_{m_1 m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle
$$

$$
\longrightarrow \qquad |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = C^{j_1+j_2}_{j_1 j_2} |j_1, j_2; j_1, j_2\rangle \qquad [\ m = m_1 + m_2\ \rightarrow\ C_{m_1 m_2} \neq 0\ ]
$$

$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle$ の規格化条件より, Clebsch-Gordan 係数は $C^{j_1+j_2}_{j_1 j_2} = 1$ であることがわかる[2] , つまり

$$
|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2; j_1, j_2\rangle \tag{9}
$$

これは (2), (3) より確かに

$$
\begin{aligned}
\hat{J}_z |j_1, j_2; j_1, j_2\rangle &= (j_1 + j_2)\hbar |j_1, j_2; j_1, j_2\rangle \\
\hat{\boldsymbol{J}}^2 |j_1, j_2; j_1, j_2\rangle &= (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1)\hbar^2 |j_1, j_2; j_1, j_2\rangle
\end{aligned}
$$

を満している.

5. (a) : (9) の両辺に $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ を作用させることで

$$
|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle \tag{10}
$$

となることを示し, Clebsch-Gordan 係数 $C^{j_1+j_2}_{j_1-1 j_2}$, $C^{j_1+j_2}_{j_1 j_2-1}$ を求めよ.

(b) : また (10) が確かに次の関係式

$$
\begin{aligned}
\hat{J}_z |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= (j_1 + j_2 - 1)\hbar |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \\
\hat{\boldsymbol{J}}^2 |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1)\hbar^2 |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle
\end{aligned}
$$

を満していることを示せ.

同様にすれば, $j = j_1 + j_2$ に対する系列 (表の [3]) を構成できるのがわかるであろう. それらが (4) , (5) を満すことも証明できる.

j を $j = j_1 + j_2$ に 固定した系列が構成できるのはわかったが, $j = j_1 + j_2 - 1$ に固定した系列 (表の [2]) を構成するにはどうしたらよいだろうか. 具体的には $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$ の構成のしかたが

[2] 実際は, $C^{j_1+j_2}_{j_1 j_2} = e^{i\delta}$ (δ : 不定の位相) であるが, $C^{j_1+j_2}_{j_1 j_2} = 1$ となるような位相を選んだということ. 以後もこのような位相で考える.

わかればよいということだ. というのは, 先と同様に $|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle$ に $\hat{J}_-$ を作用させていけば $|j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle, \cdots, |j_1+j_2-1, -j_1-j_2+1\rangle$ を求めることができるからである.

$|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle$ は (7) より

$$|j,m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2} C^{j}_{m_1m_2}|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$$

$$\longrightarrow \qquad |j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = C^{j_1+j_2-1}_{j_1-1j_2}|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle + C^{j_1+j_2-1}_{j_1j_2-1}|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle \tag{11}$$

6. (a) これが (10) と直交することから Clebsch-Gordan 係数 $C^{j_1+j_2-1}_{j_1-1j_2}$, $C^{j_1+j_2-1}_{j_1j_2-1}$ の比を求めよ.
   (b) $|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle$ に対する規格化条件を考慮することで Clebsch-Gordan 係数を求め, その値を用いて $|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle$ を表わせ.
   (c) (11) は全角運動量 $j=j_1+j_2-1$ の系列を考えているのであるが, 右辺の各ケットにおいては単純に直積の j 成分を足し合わせると j_1+j_2 になることに気づいたであろう. しかし (6.b) で求めた $|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle$ は確かに (4) に矛盾していないことを示せ.

よって, 全ての $|j,m\rangle$ [$j=j_1+j_2 \sim |j_1-j_2|$, $m=j\sim\ -j$] を表に対応する $|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle$ を用いて構成する規則がわかった. そのように構成された全ての $|j,m\rangle$ で (4), (5) に矛盾がないことも証明できることが知られている.

これまでは, j_1, j_2 は一般的なものであったが, どちらか一方が比較的小さい数であれば, 全ての Clebsch-Gordan 係数 は簡単に求まる. そこでまずは $j_2=\frac{1}{2}$ の場合を考えてみる. これは, $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{s}$ 別々には保存せず, 全角運動量 $\boldsymbol{L}+\boldsymbol{s}$ が保存するスピン-軌道相互作用がある場合や, Dirac 方程式の場合など対応する状況が多数あり応用上重要である.

7. $j_1=J$, $j_2=\frac{1}{2}$ の場合の Clebsch-Gordan 係数を全て求めよ.

   合成された j は (8) より $j=J+\frac{1}{2}, J-\frac{1}{2}$ の 2 つしかない, つまり 2 つの系列しかもたない. これまでと同様にまずは, 最大の j をもつ $j=J+\frac{1}{2}$ の系列から考える.

   (a) : (7) より $|J+\frac{1}{2}, m_1+\frac{1}{2}\rangle$ の形を示せ[3].
   (b) : (7.a) で求めた式の両辺に $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ を作用させ, (4) の規則に従って右辺を求めよ.
   (c) : (7.b) と同様の場合を今度は (2) などの規則に従って右辺を求めよ.
   (d) : (7.b), (7.c) の左辺が同じであることより (7.b)=(7.c) として, その両辺に左から $\langle j_1,j_2;m,\frac{1}{2}|$ を作用させることによって Clebsch-Gordan 係数 の比を求めよ.
   (e) : (7.d) と $|J+\frac{1}{2}, m_1+\frac{1}{2}\rangle$ の規格化条件より $j=J+\frac{1}{2}$ の系列の Clebsch-Gordan 係数を全て求めて, その値を用いて $|J+\frac{1}{2}, m_1+\frac{1}{2}\rangle$ を表わせ.
   (f) : (7.e) で特に $m_1=J$ の場合 (9) に一致することを確認せよ.
   (g) : (7.e) で特に $m_1=J-1$ の場合 (10) に一致することを確認せよ.

   次に $J-\frac{1}{2}$ の系列について計算したい.

   (h) : (7) より $|J-\frac{1}{2}, m_1+\frac{1}{2}\rangle$ の形を示せ.
   (i) : (7.h) が (7.e) で求めた $|J+\frac{1}{2}, m_1+\frac{1}{2}\rangle$ と直交することを利用して $j=J-\frac{1}{2}$ の系列の Clebsch-Gordan 係数を全て求めて, その値を用いて $|J-\frac{1}{2}, m_1+\frac{1}{2}\rangle$ を表わせ.

[3] 以前とは異なり, 最大の m_1 ($=J$) ではなく一般の m_1 から考えることができるのがポイントであろう.

これで, $j_1 = J$, $j_2 = \frac{1}{2}$ の場合の Clebsch-Gordan 係数が全て求まった.

(j) : (7.i) で特に $m_1 = J - 1$ の場合, (6.b) で求めた結果と一致することを確認せよ.

8. $j_1 = J$, $j_2 = 1$ の場合の Clebsch-Gordan 係数を全て求めよ.

合成された j は (8) より $j = J+1, J, J-1$ の 3 つしかない, つまり 3 つの系列しかもたない. これまでと同様にまずは, 最大の j をもつ $j = J+1$ の系列から考える.

(a) : (7) より $|J+1, m_1+1\rangle$ の形を示せ.

(b) : (8.a) で求めた式の両辺に $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ を作用させ, (4) の規則に従って右辺を求めよ.

(c) : (8.b) と同様の場合を今度は (2) などの規則に従って右辺を求めよ.

(d) : (8.b),(8.c) の左辺が同じであることより (8.b)=(8.c) として, その両辺に左から $\langle J, 1; m_1, 1|$, $\langle J, 1; m_1+2, -1|$ を作用させることにより Clebsch-Gordan 係数の比を求めよ.

(e) : (8.d) と $|J+1, m_1+1\rangle$ の規格化条件から $j = J+1$ の系列の Clebsch-Gordan 係数を求めよ.

次に $j = J$ の系列について考える.

(f) : (7) より $|J, m_1+1\rangle$ の形を示せ.

(g) : (8.f) で求めた式の両辺に $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ を作用させ, (4) の規則に従って計算せよ.

(h) : (8.g) と同様の場合を今度は (2) などの規則に従って計算せよ.[4]

(i) : (8.g)=(8.h) として両辺に左から $\langle J, 1; m_1, 1|$, $\langle J, 1; m_1+2, -1|$ を作用させることにより Clebsch-Gordan 係数の比を求めよ.

(j) : $|J, m_1+1\rangle$ の規格化条件と (8.i) より $j = J$ の系列の Clebsch-Gordan 係数を全て求めよ.

最後に $j = J-1$ の系列について考える.

(k) : これまでの方法と同様にして $j = J-1$ の系列の Clebsch-Gordan 係数を全て求めよ.

[4]計算する必要がないことがわかるだろう.