正の整数と $1/2$ でのクレブシュ・ゴルダン係数

原子の話でよく出てくる正の整数 l と $1/2$ でのクレブシュ・ゴルダン係数を求めます。
「クレブシュ・ゴルダン係数の符号」で求めている漸化式を使っています。

正の整数 l と $1/2$ での合成系の状態を作ります。これは軌道角運動量とスピン $1/2$ による状態に対応します。電子はスピン $1/2$ を持ち、原子内の電子は軌道角運動量を持つのでこの状態が必要になります。スピンは「スピン」で触れています。

$l=0$ と $1/2$ では $1/2$ だけの状態と同じなので正の整数とします。$l>0$ なら、j に対しては

$$j = l + \frac{1}{2}\ ,\ l - \frac{1}{2}$$

として 2 つの場合が可能になります。角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\boldsymbol{B}}$ での固有値、固有状態を

$$\begin{aligned}
&\hat{A}_z|l, m_A\rangle = \hbar m_A|l, m_A\rangle \quad (-l \leq m_A \leq l) \\
&\hat{\boldsymbol{A}}^2|l, m_A\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m_A\rangle \\
&\hat{B}_z|\frac{1}{2}, m_B\rangle = \hbar m_B|l, m_A\rangle \quad (m_B = \pm\frac{1}{2}) \\
&\hat{\boldsymbol{B}}^2|\frac{1}{2}, m_B\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|l, m_A\rangle
\end{aligned}$$

と与えます。これらから

$$|l, m_A; \frac{1}{2}, m_B\rangle = |l, m_A\rangle \otimes |\frac{1}{2}, m_B\rangle$$

l と $1/2$ から作られる状態 $|(l, \frac{1}{2})j, m\rangle$ は、$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{A}} + \hat{\boldsymbol{B}}$ によって

$$\begin{aligned}
&\hat{J}_z|(l, \frac{1}{2})j, m\rangle = \hbar m|(l, \frac{1}{2})j, m\rangle \\
&\hat{\boldsymbol{J}}^2|(l, \frac{1}{2})j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|(l, \frac{1}{2})j, m\rangle \quad (j = l \pm \frac{1}{2}\ ,\ -j \leq m \leq j)
\end{aligned}$$

となっています。この状態は

$$\begin{aligned}
|(l, \frac{1}{2})j, m\rangle &= \sum_{m_A=-l}^{l}\sum_{m_B=-1/2}^{1/2}\langle l, m_A; \frac{1}{2}, m_B|(l, \frac{1}{2})j, m\rangle|l, m_A; \frac{1}{2}, m_B\rangle \\
&= \sum_{m_A=-l}^{l}\sum_{m_B=-1/2}^{1/2} C(l, \frac{1}{2}, j : m_A, m_B, m)|l, m_A; \frac{1}{2}, m_B\rangle
\end{aligned}$$

と展開されます。C はクレブシュ・ゴルダン係数です。

文字がゴチャゴチャするので

$$|(l, \frac{1}{2})j, m\rangle = |j, m\rangle$$

$$|l, m_A; \frac{1}{2}, m_B\rangle = |m_A; m_B\rangle$$

$$C(l, \frac{1}{2}, j : m_A, m_B, m) = C(j : m_A, m_B, m)$$

と書いていきます。

クレブシュ・ゴルダン係数が 0 でないためには $m = m_A + m_B$ でないといけないので

$$\begin{aligned}|j, m\rangle &= \sum_{m_A=-l}^{l} C(j : m_A, -\frac{1}{2}, m)|m_A; -\frac{1}{2}\rangle + \sum_{m_A=-l}^{l} C(j : m_A, \frac{1}{2}, m)|m_A; \frac{1}{2}\rangle \\ &= C(j : m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, m)|m + \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\rangle + C(j : m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m)|m - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\rangle \qquad (1)\end{aligned}$$

まずは $j = j^+ = l + 1/2$ として、クレブシュ・ゴルダン係数を漸化式を使って求めます。クレブシュ・ゴルダン係数の漸化式は

$$\begin{aligned}\sqrt{j(j+1) - m(m \mp 1)}C(j : m_A, m_B, m) = &\sqrt{j_A(j_A+1) - m_A(m_A \mp 1)}C(j : m_A \mp 1, m_B, m \mp 1) \\ &+ \sqrt{j_B(j_B+1) - m_B(m_B \mp 1)}C(j : m_A, m_B \mp 1, m \mp 1)\end{aligned}$$

となっています。これは

$$j(j+1) - m(m \mp 1) = (j \mp m + 1)(j \pm m)$$

から

$$\begin{aligned}\sqrt{(j \mp m + 1)(j \pm m)}C(j : m_A, m_B, m) = &\sqrt{(j_A \mp m_A + 1)(j_A \pm m_A)}C(j : m_A \mp 1, m_B, m \mp 1) \\ &+ \sqrt{(j_B \mp m_B + 1)(j_B \pm m_B)}C(j : m_A, m_B \mp 1, m \mp 1)\end{aligned}$$

と書けます。これの符号を

$$\begin{aligned}\sqrt{(j - m + 1)(j + m)}C(j : m_A, m_B, m) = &\sqrt{(j_A - m_A + 1)(j_A + m_A)}C(j : m_A - 1, m_B, m - 1) \\ &+ \sqrt{(j_B - m_B + 1)(j_B + m_B)}C(j : m_A, m_B - 1, m - 1) \qquad (2)\end{aligned}$$

とした場合を使えば、$m_B = -1/2$ では第 2 項が消えてくれます。これに (1) の第 1 項を当てはめると、$j = j^+ = l + 1/2,\ j_A = l,\ j_B = 1/2$ なので

$$\sqrt{(l+\frac{1}{2}-m+1)(l+\frac{1}{2}+m)}C(j^+:m_A,m_B,m) = \sqrt{(l-m_A+1)(l+m_A)}C(j^+:m_A-1,m_B,m-1)$$
$$+\sqrt{(\frac{1}{2}-m_B+1)(\frac{1}{2}+m_B)}C(j^+:m_A,m_B-1,m-1)$$
$$\sqrt{(l-m+\frac{3}{2})(l+m+\frac{1}{2})}C(j^+:m_A,m_B,m) = \sqrt{(l-m_A+1)(l+m_A)}C(j^+:m_A-1,m_B,m-1)$$
$$+\sqrt{(\frac{3}{2}-m_B)(\frac{1}{2}+m_B)}C(j^+:m_A,m_B-1,m-1)$$

$m_B=-1/2$ に選ぶと右辺の第 2 項は消え、$m_A=m+1/2$ となるので

$$\sqrt{(l-m+\frac{3}{2})(l+m+\frac{1}{2})}C(j^+:m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m) = \sqrt{(l-m+\frac{1}{2})(l+m+\frac{1}{2})}C(j^+:m-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m-1)$$
$$C(j^+:m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m) = \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{l-m+\frac{3}{2}}}C(j^+:m-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m-1) \tag{3}$$

漸化式を右辺に合わせるために、m を $m-1$ にして

$$\sqrt{(j-m+2)(j+m-1)}C(j:m_A,m_B,m-1) = \sqrt{(j_A-m_A+1)(j_A+m_A)}C(j:m_A-1,m_B,m-2)$$
$$+\sqrt{(j_B-m_B+1)(j_B+m_B)}C(j;m_A,m_B-1,m-2) \tag{4}$$

左辺を (3) の右辺に合わせるので、$j=l+1/2,\ j_A=l$、$m_A=m-1/2,\ j_B=1/2,\ m_B=-1/2$ として

$$\sqrt{(l-m+\frac{5}{2})(l+m-\frac{1}{2})}C(j^+:m-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m-1) = \sqrt{(l-m+\frac{3}{2})(l+m-\frac{1}{2})}C(j^+:m-\frac{1}{2}-1,-\frac{1}{2},m-2)$$
$$C(j^+:m-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m-1) = \sqrt{\frac{l-m+\frac{3}{2}}{l-m+\frac{5}{2}}}C(j^+:m-\frac{3}{2},-\frac{1}{2},m-2) \tag{5}$$

(3) と (5) だけから規則性を作ってしまいます。

右辺のクレブシュ・ゴルダン係数では 0 にならない条件 $m_A+m_B=m$ ($m_A=m+1/2$) になっており、係数の分子は $l-m_A$、分母はそれに 1 を引いたものとなっています。そうすると、$C(j:m_A,m_B,m)$ での m が $-l-1/2$ になるまで繰り返したとき

$$C(j^+:-l,-\frac{1}{2},-l+\frac{1}{2}) = \sqrt{\frac{l+l}{l+l+1}}C(j^+:-l,-\frac{1}{2},-l-\frac{1}{2}) = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}C(j^+:-l,-\frac{1}{2},-l-\frac{1}{2})$$

となるので

$$C(j^+:m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m) = \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{l-m+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{l-m+\frac{3}{2}}{l-m+\frac{5}{2}}}C(j^+:m-\frac{3}{2},-\frac{1}{2},m-2)$$
$$= \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{l-m+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{l-m+\frac{3}{2}}{l-m+\frac{5}{2}}}\cdots\sqrt{\frac{2l}{2l+1}}C(j^+:-l,-\frac{1}{2},-l-\frac{1}{2})$$

係数の積は

$$\frac{(l-m+\frac{1}{2})(l-m+\frac{3}{2})(l-m+\frac{5}{2})\cdots\times 2l}{(l-m+\frac{3}{2})(l-m+\frac{5}{2})(l-m+\frac{7}{2})\cdots\times(2l+1)}=\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}$$

となるので

$$C(j^+:m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m)=\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}C(j^+:-l,-\frac{1}{2},-l-\frac{1}{2})$$

$-l-1/2$ は今の $j=l+1/2$ での m の最小で、右辺のクレブシュ・ゴルダン係数はそのときの値です。j が最大で m がそのときの最小か最大なら、そのクレブシュ・ゴルダン係数は規格化から 1 です。実際に確かめておきます。クレブシュ・ゴルダン係数の規格化は

$$\sum_{m_A,m_B}|C(j:m_A,m_B,m)|^2=1$$

クレブシュ・ゴルダン係数は実数なので、絶対値でなくても同じです (括弧が重なって見づらそうだったから絶対値で書いただけ)。これを今の場合に当てはめれば

$$\sum_{m_A=-l}^{l}\sum_{m_B=-1/2}^{1/2}|C(j^+:m_A,m_B,m)|^2=\sum_{m_A=-l}^{l}|C(j^+:m_A,-\frac{1}{2},m)|^2+\sum_{m_A=-l}^{l}|C(j^+:m_A,\frac{1}{2},m)|^2$$

$m=-l-1/2$ なら $m_A=m-m_B=-l-1/2\pm 1/2$ になり

$$1=|C(j^+:-l-1,-\frac{1}{2},-l-\frac{1}{2})|^2+|C(j^+:-l,-\frac{1}{2},-l-\frac{1}{2})|^2$$

m_A の最小は $-l$ なので第 1 項は消えて

$$1=|C(j^+:-l,-\frac{1}{2},-l-\frac{1}{2})|^2$$

クレブシュ・ゴルダン係数は実数なので、符号の慣習から $+1$ にして

$$C(j^+:m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m)=C(l,\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}:m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2},m)=\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$$

となり、(1) の第 1 項が求まりました。

(1) の第 2 項も同様に求められます。m_B が $+1/2$ になるので、漸化式は符号を変えた

$$\begin{aligned}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}C(j_A,j_B,j:m_A,m_B,m)&=\sqrt{(j_A+m_A+1)(j_A-m_A)}C(j_A,j_B,j:m_A+1,m_B,m+1)\\&\quad+\sqrt{(j_B+m_B+1)(j_B-m_B)}C(j_A,j_B,j:m_A,m_B+1,m+1)\end{aligned}$$

を使うことにします。これの左辺を (1) の第 2 項に合わせるには、$j = l + 1/2,\ j_A = l,\ j_B = 1/2,\ m_B = 1/2$ とすればいいので

$$\begin{aligned}\sqrt{(l+m+\frac{3}{2})(l-m+\frac{1}{2})}C(j^+ : m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},m) &= \sqrt{(l+m+\frac{1}{2})(l-m+\frac{1}{2})}C(j^+ : m+\frac{1}{2},\frac{1}{2},m+1)\\ &\quad+\sqrt{(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+1)(\frac{1}{2}-\frac{1}{2})}C(j^+ : m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}+1,m+1)\\ C(j^+ : m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},m) &= \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}C(j^+ : m+\frac{1}{2},\frac{1}{2},m+1)\end{aligned}$$

右辺に合わせた漸化式は

$$\begin{aligned}\sqrt{(l+m+\frac{5}{2})(l-m-\frac{1}{2})}C(j^+ : m+\frac{1}{2},\frac{1}{2},m+1) &= \sqrt{(l+m+\frac{3}{2})(l-m-\frac{1}{2})}C(j^+ : m+\frac{3}{2},\frac{1}{2},m+2)\\ C(j^+ : m+\frac{1}{2},\frac{1}{2},m+1) &= \sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{l+m+\frac{5}{2}}}C(j^+ : m+\frac{3}{2},\frac{1}{2},m+2)\end{aligned}$$

クレブシュ・ゴルダン係数での m_A は条件 $m_A+m_B = m$ $(m_A = m-1/2)$ になっており、右辺の係数の分子は $l+m_A$、分母は $l + m_A + 1$ となっているので、これを $l + 1/2$ まで繰り返せば

$$C(j^+ : l,\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}) = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}C(j^+ : l,\frac{1}{2},l+\frac{1}{2})$$

となり、係数の積は

$$\frac{(l+m+\frac{1}{2})(l+m+\frac{3}{2})\cdots\times 2l}{(l+m+\frac{3}{2})(l+m+\frac{5}{2})\cdots\times(2l+1)} = \frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}$$

よって

$$C(j^+ : m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},m) = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}C(j^+ : l,\frac{1}{2},l+\frac{1}{2})$$

$l+1/2$ は j^+ での最大の m なので右辺のクレブシュ・ゴルダン係数は 1 です。これも一応確かめておきます。規格化から、$m = l + 1/2$ として

$$1 = \sum_{m_A=-l}^{l}|C(j^+ : m_A,-\frac{1}{2},m)|^2 + |C(j^+ : m_A,\frac{1}{2},m)|^2 = \sum_{m_A=-l}^{l}|C(j^+ : l+1,-\frac{1}{2},l+\frac{1}{2})|^2 + |C(j^+ : l,\frac{1}{2},l+\frac{1}{2})|^2$$

m_A は $+l$ までなので第 1 項は消えます。よって

$$C(j^+ : m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},m) = C(l,\frac{1}{2},l+\frac{1}{2} : m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},m) = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$$

と求まります。

というわけで、$j=j^+=l+1/2$ のときの (1) は

$$|l+\frac{1}{2},m\rangle=\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}|m+\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}|m-\frac{1}{2};\frac{1}{2}\rangle \tag{6}$$

表記を省略しないで書けば

$$|(l,\frac{1}{2})l+\frac{1}{2},m\rangle=\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}|l,m+\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}|l,m-\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$$

となります。

次に、$j=j^-=l-1/2$ の場合を求めます。j^- は j^+ から 1 つ下げた状態なので、$j^+,m=\pm(l+1/2)$ での状態以外と直交します。そうすると、(6) に直交するように与えればいいだけで

$$|l-\frac{1}{2},m\rangle=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}|m+\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\rangle-\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}|m-\frac{1}{2};\frac{1}{2}\rangle \tag{7}$$

符号は慣習に従うように選んでいます。(6) で $m=-l+1/2$ とすると

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

これに直交する状態は、$m_A=l$ となるときを正に取るとすれば

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

となり、(7) と符号が一致します。

まとめて書くと

$$|(l,\frac{1}{2})l\pm\frac{1}{2},m\rangle=\sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}}{2l+1}}|l,m+\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\pm\sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}}|l,m-\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$$

$$C(l,\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}:m+\frac{1}{2},\frac{1}{2},m)=\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\ ,\ C(l,\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}:m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},m)=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$$

$$C(l,\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}:m+\frac{1}{2},\frac{1}{2},m)=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\ ,\ C(l,\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}:m-\frac{1}{2},\frac{1}{2},m)=-\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}$$

また、右辺の状態は

$$|j_A,m_A;j_B,m_B\rangle=|j_A,m_A\rangle\otimes|j_B,m_B\rangle$$

なので、軌道角運動量に対応する A の状態に角度の状態をくっつければ球面調和関数にできます。極座標 (r,θ,ϕ) での角度による状態 $|\theta,\phi\rangle$ をくっつけて、球面調和関数 $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ に書き換えれば

$$
\begin{aligned}
\langle\theta,\phi|(l,\frac{1}{2})l\pm\frac{1}{2},m\rangle &= \sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\langle\theta,\phi|l,m+\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\langle\theta,\phi|l,m-\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle \\
&= \sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\langle\theta,\phi|l,m+\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\langle\theta,\phi|l,m-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle \\
&= \sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}}{2l+1}}Y_{l,m+1/2}(\theta,\phi)|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}}Y_{l,m-1/2}(\theta,\phi)|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle
\end{aligned}
$$

となります。