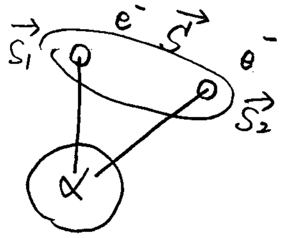
Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

6. 角運動量の合成

6.1. 2つの電子スピン ($S=\frac{1}{2}$)の合成

例) ヘリウム原子



2電子系
それぞれの電子のスピン角運動量 : $\mathbf{S}_1$, $\mathbf{S}_2$

$$[S_{1i}, S_{1j}] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} S_{1k}$$
$$[S_{2i}, S_{2j}] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} S_{2k}$$
$$[\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2] = 0$$

2電子系の全スピン(合成スピン)は?

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \qquad \text{(ベクトル和)}$$

(note) $[S_i, S_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} S_k$

2電子系の状態:
$|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2$, $|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2$, $|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2$, $|\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2$

(note)
$$\begin{aligned} S_z |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 &= (S_{1z} + S_{2z}) |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \\ &= (S_{1z} |\uparrow\rangle_1) |\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1 (S_{2z} |\uparrow\rangle_2) \\ &= \hbar\, |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \end{aligned}$$

など

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

$$\left\{\begin{array}{lll} |\uparrow\uparrow\rangle & : & m=1 \\ |\uparrow\downarrow\rangle & : & m=0 \\ |\downarrow\uparrow\rangle & : & m=0 \\ |\downarrow\downarrow\rangle & : & m=-1 \end{array}\right.$$

$$\updownarrow$$

これは $(S=1,\ m=0,\pm 1)$ と $(S=0, m=0)$
の組み合わせのように見える。

そうなのか？

(note) $\mathbb{S}^2 = \mathbb{S}_1^2 + \mathbb{S}_2^2 + 2\,\mathbb{S}_1\cdot\mathbb{S}_2$

$$= \mathbb{S}_1^2 + \mathbb{S}_2^2 + 2 S_{1z} S_{2z} + (S_{1x} + iS_{1y})(S_{2x} - iS_{2y}) + (S_{1x} - iS_{1y})(S_{2x} + iS_{2y})$$

$$= \mathbb{S}_1^2 + \mathbb{S}_2^2 + 2 S_{1z} S_{2z} + S_{1+} S_{2-} + S_{1-} S_{2+}$$

$$\mathbb{S}^2|\uparrow\uparrow\rangle = \left(\frac{3}{4}\hbar^2 \times 2 + 2\cdot\frac{\hbar}{2}\cdot\frac{\hbar}{2}\right)|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$= 2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle = 1\cdot(1+1)\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle$$

$\uparrow$

$$\mathbb{S}_1^2|\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle$$

$$S_{1z}|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$$

$$S_+|\uparrow\rangle = 0$$

同様に $\mathbb{S}^2|\downarrow\downarrow\rangle = 1\cdot(1+1)\hbar^2|\downarrow\downarrow\rangle$

Department of Physics
Tohoku University

Sendai, Japan.

$$S_- |\uparrow\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)}\,\hbar|\downarrow\rangle$$
$$= \hbar|\downarrow\rangle$$

↓

$$|\uparrow\uparrow\rangle = |S=1, m=1\rangle$$
$$|\downarrow\downarrow\rangle = |S=1, m=-1\rangle$$

- $|S=1, m=0\rangle$ は $|S=1, m=1\rangle$ に $\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$ を作用させて作ることができる：

$$|S=1, m=0\rangle \propto S_- |\uparrow\uparrow\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$$

$S_- |S=1, m=1\rangle$

規格化

- これと直交する状態は $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$.
これは $S=0$ の状態か？

$$\mathbf{S}^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$= \left(2\times\frac{3}{4}\hbar^2 + 2\cdot\frac{\hbar}{2}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\right)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$+ \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle - \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle$$

$$= \hbar^2\left(2\cdot\frac{3}{4} - 2\cdot\frac{1}{4} - 1\right)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$= 0$$

↓

$$|S=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

まとめ：

	$S=1$	$S=0$
$m=1$	$\|\uparrow\uparrow\rangle$	
$m=0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle+\|\downarrow\uparrow\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle-\|\downarrow\uparrow\rangle)$
$m=-1$	$\|\downarrow\downarrow\rangle$	
	↑ 3重項（トリプレット）	↑ 1重項（シングレット）

- $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ の適当な線形結合をとると合成角運動量の固有状態を作ることができる。

- S_{1z}, S_{2z} と $\boldsymbol{S}^2$ の同時固有状態は作れない

$$[\boldsymbol{S}^2, S_{1z}] \neq 0$$

ただし

$$[\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{S}_1^2] = 0$$

⤵ $(\boldsymbol{S}_1^2, \boldsymbol{S}_2^2, \boldsymbol{S}^2, S_z)$ の同時固有状態

- 3重項は2つのスピンの入れ換えに対して対称。1重項は反対称。