Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

$\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$, $\hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$

6. 角運動の合成

6.1. 2スピン系 (複習) ; $\mathbb{S} = \mathbb{S}_1 + \mathbb{S}_2$

2電子の状態 $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$, $|\downarrow\downarrow\rangle$

S_z	
$\hbar$	$\|\uparrow\uparrow\rangle$
0	$\|\uparrow\downarrow\rangle$, $\|\downarrow\uparrow\rangle$
$-\hbar$	$\|\downarrow\downarrow\rangle$

$$
\begin{aligned}
S_z|\uparrow\uparrow\rangle &= (S_{1z}+S_{2z})|\uparrow\uparrow\rangle \\
&= (S_{1z}|\uparrow\rangle)|\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle(S_{2z}|\uparrow\rangle) \\
&= \frac{\hbar}{2}\times 2|\uparrow\uparrow\rangle = \hbar|\uparrow\uparrow\rangle
\end{aligned}
$$

↓ 組み直し

S_z \ S	1	0
$\hbar$	$\|\uparrow\uparrow\rangle$	
0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle + \|\downarrow\uparrow\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle - \|\downarrow\uparrow\rangle)$
$-\hbar$	$\|\downarrow\downarrow\rangle$	
	↑ スピン3重項	↑ スピン1重項

$$
\begin{aligned}
\mathbb{S}^2|S=1, S_z\rangle &= 1\cdot(1+1)\hbar^2|S=1, S_z\rangle \\
&= 2\hbar^2|S=1, S_z\rangle \\
\mathbb{S}^2|S=0, S_z\rangle &= 0
\end{aligned}
$$

※ $|\uparrow\downarrow\rangle$ は単独では $\mathbb{S}^2$ の固有状態にはならないが、$|\downarrow\uparrow\rangle$ と線形結合をとれば $\mathbb{S}^2$ の固有状態を作れる。

$$L_\pm |\ell m\rangle = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m(m\pm 1)}\ |\ell\ m\pm 1\rangle$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

- S_{1z}, S_{2z} と S^2 の同時固有状態は作れない。（一般に）　ただし $S_{1z}+S_{2z}$ はOK

例）

$$S^2 \underbrace{|\uparrow\downarrow\rangle}$$

S_{1z}, S_{2z} の固有状態 → $S_{1z}|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\downarrow\rangle$, $S_{2z}|\uparrow\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\uparrow\downarrow\rangle$

$$
\begin{aligned}
&= (S_1+S_2)^2|\uparrow\downarrow\rangle \\
&= (S_1^2 + S_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})|\uparrow\downarrow\rangle \\
&= \left(\frac{3}{4}\hbar^2\times 2 + 2\cdot\frac{\hbar}{2}\cdot\frac{\hbar}{2}\right)|\uparrow\downarrow\rangle + \hbar^2|\downarrow\uparrow\rangle \\
&= 2\hbar^2|\uparrow\downarrow\rangle + \hbar^2|\downarrow\uparrow\rangle
\end{aligned}
$$

- $|S_{1z}\ S_{2z}\rangle$ 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。

- 一般的な組み立て方：

① $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ のうち、$S_z=\hbar$ なのは1つだけ：$|\uparrow\uparrow\rangle$

② この状態は $S^2|\uparrow\uparrow\rangle = 2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle$ を満たすので、$|S=1, S_z=1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$

③ これに $S_- = S_{1-}+S_{2-}$ を作用させると $|S=1, S_z=0\rangle$ を作れる：

$$
\begin{aligned}
S_-|S=1, S_z=1\rangle &= \hbar\sqrt{1\cdot 2 - 1\cdot 0}\ |S=1, S_z=0\rangle \\
&= \sqrt{2}\hbar\ |S=1, S_z=0\rangle
\end{aligned}
$$

一方
$$
\begin{aligned}
S_-|S=1, S_z=1\rangle &= (S_{1-}+S_{2-})|\uparrow\uparrow\rangle \\
&= (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)\cdot\hbar
\end{aligned}
$$

⇕

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

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

④ これに直交する状態を作れる：$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$

$\mathbf{S}^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = 0$　なので、この状態は
$|S=0, S_z=0\rangle$

⑤
$$S_- |S=1, S_z=0\rangle = \sqrt{2}\hbar\, |S=1, S_z=-1\rangle$$
$$\parallel$$
$$(S_{1-} + S_{2-}) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$\parallel$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 2\hbar\, |\downarrow\downarrow\rangle$$

$$\therefore\quad |S=1, S_z=-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

まとめ

S_z \ S	1		0
$\hbar$	$\|\uparrow\uparrow\rangle$		
	$\downarrow S_-$		
0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle + \|\downarrow\uparrow\rangle)$	$\xrightarrow{\text{直交化}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle - \|\downarrow\uparrow\rangle)$
	$\downarrow S_-$		
$-\hbar$	$\|\downarrow\downarrow\rangle$		

Department of Physics
Tohoku University

Sendai, Japan.

6.2. 一般の場合

$\mathbb{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2$

状態は $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$

(note) $J_z |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = (j_{1z} + j_{2z}) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$
$= (m_1 + m_2)\hbar\, |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$

○ これらを組み合わせて，$\mathbb{J}^2$, J_z の固有状態を作る。

記号的には

$$|JM\rangle = \sum_{m_1, m_2} C^{(JM)}_{m_1 m_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

$C^{(JM)}_{m_1 m_2}$ = クレブシュ・ゴルダン係数 $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM\rangle$

○

$$\mathbb{J}^2 |JM\rangle = J(J+1)\hbar^2 |JM\rangle$$
$$J_z |JM\rangle = M\hbar\, |JM\rangle$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

方針：

① Mの最大値は $M=j_1+j_2$。
これが成立するのは $m_1=j_1$, $m_2=j_2$ の時のみ。
すなわち $|j_1 j_1\rangle|j_2 j_2\rangle$

$$J^2|j_1 j_1\rangle|j_2 j_2\rangle=(j_1+j_2)(j_1+j_2+1)\hbar^2|j_1 j_1\rangle|j_2 j_2\rangle$$

を示すことができる。

$\rightarrow\quad |J=j_1+j_2, M=j_1+j_2\rangle=|j_1 j_1\rangle|j_2 j_2\rangle$

② $|J=j_1+j_2, M=j_1+j_2-1\rangle$ は $J_-|j_1 j_1\rangle|j_2 j_2\rangle$
より作れる。
すなわち

$$\begin{aligned}|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle &\propto (j_{1-}+j_{2-})|j_1 j_1\rangle|j_2 j_2\rangle\\ &\equiv \alpha|j_1 j_1-1\rangle|j_2 j_2\rangle\\ &\quad+\beta|j_1 j_1\rangle|j_1 j_2-1\rangle\end{aligned}$$

③ これに直交する状態：$\beta|j_1 j_1-1\rangle|j_2 j_2\rangle$
$\qquad\qquad -\alpha|j_1 j_1\rangle|j_1 j_2-1\rangle$
は $J=j_1+j_2-1$, $M=j_1+j_2-1$ であることを示せる。

④ $|j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle\propto J_-|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle$
$|j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle\propto J_-|j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle$
で作れる。

⑤ この2つに直交する状態は $|j_1+j_2-2, j_1+j_2-2\rangle$

（以下くり返し）

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

(note)

$$\mathbb{J} = j_1 + j_2$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbb{J}^2 = j_1^2 + j_2^2 + 2 j_{1z} j_{2z} + j_{1+} j_{2-} + j_{1-} j_{2+}$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbb{J}^2 |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle$$

$$= \hbar^2 \underbrace{\left(j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1) + 2 j_1 j_2 \right)}_{\begin{gathered} \parallel \\ j_1^2 + j_1 + j_2^2 + j_2 + 2 j_1 j_2 \\ \parallel \\ (j_1+j_2)^2 + j_1 + j_2 \\ \parallel \\ (j_1+j_2)(j_1+j_2+1) \end{gathered}} |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle$$

$j_+ |jj\rangle = 0$

Department of Physics
Tohoku University

Sendai, Japan.

まとめ：

J_z \ J	j_1+j_1		j_1+j_2-1		j_1+j_2-2
j_1+j_2	$\vert j_1 j_1\rangle \vert j_2 j_2\rangle$				
	$\downarrow J_- = j_{1-}+j_{2-}$				
j_1+j_2-1	$\vert j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle$	$\xrightarrow{\text{直交}}$	$\vert j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle$		
	$\downarrow J_-$		$\downarrow J_-$		
j_1+j_2-2	$\vert j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle$			$\xrightarrow{}$ 直交	
	$\downarrow$		$\downarrow J_-$		$\downarrow J_-$
					$\xrightarrow{}$ 直交 $\downarrow$
	⋮				$\to \cdots$

$$\left.\begin{array}{l} |j_1-j_2| \le J \le j_1+j_2 \\ -J \le M \le J \end{array}\right)$$ のすべての状態を作れる。

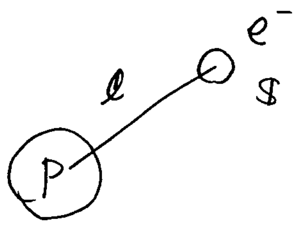
$$l_-|Y_{lm}\rangle = \sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\;|Y_{l\,m-1}\rangle$$

$$l_-|Y_{ll}\rangle = \sqrt{l(l+1)-l(l-1)}\;|Y_{l\,l-1}\rangle = \sqrt{2l}\;|Y_{l\,l-1}\rangle$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

6.3. スピンと軌道角運動量の合成

例) 水素原子



$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$$

$\mathbf{l}$: $|Y_{lm}\rangle$ 　 $\mathbf{s}$: $|\uparrow\rangle$ or $|\downarrow\rangle$

$$|l-s| \le j \le l+s$$

$s=\frac{1}{2}$ なので $j = l \pm \frac{1}{2}$ の2通り

j_z \ j	$l+\frac{1}{2}$		$l-\frac{1}{2}$
$l+\frac{1}{2}$	$\lvert Y_{ll}\rangle\lvert\uparrow\rangle$ $\downarrow j_-$		
$l-\frac{1}{2}$	$\sqrt{2l}\,\lvert Y_{l\,l-1}\rangle\lvert\uparrow\rangle + \lvert Y_{ll}\rangle\lvert\downarrow\rangle$ $\downarrow j_-$	$\xrightarrow{\text{直交}}$	$\lvert Y_{l\,l-1}\rangle\lvert\uparrow\rangle - \sqrt{2l}\,\lvert Y_{ll}\rangle\lvert\downarrow\rangle$ $\downarrow j_-$
$l-\frac{3}{2}$	 $\downarrow$ $\vdots$ $\downarrow$		 $\downarrow$ $\vdots$ $\downarrow$
$-l+\frac{1}{2}$	 $\downarrow$		 $\downarrow$
$-l-\frac{1}{2}$	$\lvert Y_{l\,-l}\rangle\lvert\downarrow\rangle$		×

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

(note) スピン・軌道力 $V = \alpha\, \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}$

$$\boldsymbol{j}^2 = (\boldsymbol{l} + \boldsymbol{s})^2 = \boldsymbol{l}^2 + 2\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s} + \boldsymbol{s}^2$$

$$\downarrow \quad V = \frac{\alpha}{2}\left(\boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{s}^2\right)$$

$\downarrow$

$$V\,|(l\tfrac{1}{2})\,j\,j_z\rangle = \frac{\alpha}{2}\hbar^2\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right)|(l\tfrac{1}{2})\,j\,j_z\rangle$$

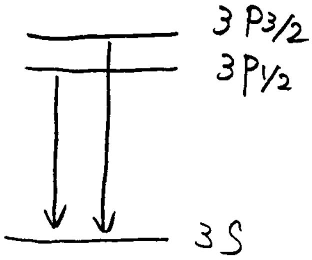
$j = l + \frac{1}{2}$ に対して

$$\begin{aligned} j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} &= \left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \\ &= l \end{aligned}$$

$j = l - \frac{1}{2}$ に対して

$$\begin{aligned} j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} &= \left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \\ &= -l - 1 \end{aligned}$$

(note) ナトリウム D線



$\vec{l}$ と $\vec{s}$ の合成で 3P 状態が 2本に分離 ($j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$)。

※ 3S 状態は分離しない。
($l = 0$ に対して
$|l - \frac{1}{2}| = l + \frac{1}{2}$ なので。)