量子力学3 まとめレポート 6/9分

201310899 渡辺展正

☆ Addition of angular momentum 角運動量の合成

☆ spin $(s=1/2)$ $\vec{S}=\vec{S_1}+\vec{S_2}$

$\vec{S_1}$: $S=1/2$

$\vec{S_1}^2 = S(S+1) = 1/2(1/2+1) = \frac{3}{4}$

$\vec{S}^2|SM\rangle = \hbar^2 S(S+1)|SM\rangle$ $(j,m)=(S,M)$

$\vec{S}^2 = S_x^2+S_y^2+S_z^2 = \frac{1}{2}(S_+S_- + S_-S_+)+S_z^2$

$S_z|SM\rangle = \hbar M|SM\rangle$ $|SM\rangle = |M\rangle$ とするなら,
$S_z|M\rangle = \hbar M|M\rangle$

$M=-S,-S+1,\cdots S-1,S$ だが, $S=1/2$ より $M=-1/2, 1/2 = \downarrow,\uparrow$

S_1, S_2 について

$$S_1^z|\uparrow\rangle_1 = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle_1 \ , \quad S_1^z|\downarrow\rangle_1 = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle_1$$
$$S_2^z|\uparrow\rangle_2 = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle_2 \ , \quad S_2^z|\downarrow\rangle_2 = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle_2$$

$\vec{S}=\vec{S_1}+\vec{S_2}$ としてみると,

$$\vec{S}^2 = \vec{S_1}^2+\vec{S_2}^2+2\vec{S_1}\cdot\vec{S_2} = \frac{3}{4}+\frac{3}{4}+2\vec{S_1}\cdot\vec{S_2} = \frac{3}{2}+2\vec{S_1}\cdot\vec{S_2}$$

$S_\pm = S_1^\pm + S_2^\pm$, $S_z = S_1^z+S_2^z$ でもあるから,

$$[S_\alpha^i, S_\beta^j] = i\hbar\varepsilon^{ijk}S^k\delta_{\alpha\beta} \longrightarrow [S_i,S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k$$

つまり, $\vec{S}, \vec{S_1}, \vec{S_2}$: Angular momentum

$$\begin{cases} S^2|SM\rangle = \hbar^2 S(S+1)|SM\rangle \\ S_z|SM\rangle = \hbar M|SM\rangle \end{cases}$$ となる状態 $|SM\rangle$とは? また, Sは何か?

$|\uparrow\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$ として出発する。

$$S^+|\uparrow\uparrow\rangle = (S_1^+ + S_2^+)|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2 = \underbrace{S_1^+|\uparrow\rangle_1}_{=0}|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1\underbrace{S_2^z|\uparrow\rangle_2}_{=0} = 0$$
(∵これ以上増やすことができない)

$\therefore |\uparrow\uparrow\rangle = |S, M=S\rangle \longrightarrow S$ はどのような値か?

$$S_z|\uparrow\uparrow\rangle = (S_1^z + S_2^z)|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$

$$= \underbrace{S_1^z|\uparrow\rangle_1}_{=\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle_1}|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1\underbrace{S_2^z|\uparrow\rangle_2}_{=\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle_2}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2\right) = \hbar|\uparrow\uparrow\rangle$$

前の結果から $|SM\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ であったから.

$$S^z|\uparrow\uparrow\rangle = S^z|SM\rangle = \hbar M|SM\rangle = \hbar M|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$= \hbar|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$\therefore M=1,\quad S=1 \quad\rightarrow\quad |S=1, M=1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$

formula

$$J_-|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|j\,m-1\rangle$$

$$J_+|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,|j\,m+1\rangle$$ を用いれば,

$$S_-\underbrace{|11\rangle}_{=|\uparrow\uparrow\rangle} = \hbar\sqrt{2\cdot 1}\,|10\rangle \longrightarrow |1.0\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S_-|\uparrow\uparrow\rangle$$

$S=1/2$ であるから,

$$S_1^-|\uparrow\rangle_1 = \hbar\sqrt{\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}\right)\left(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}+1\right)}\,|\downarrow\rangle_1 = \hbar|\downarrow\rangle_1 \qquad (S=1/2, M=1/2)$$

$$S_2^-|\uparrow\rangle_2 = \hbar|\downarrow\rangle_2$$

$$\vdots$$

となるので,

$$|1.0\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S_-|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(S_1^- + S_2^-)|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2 = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}\left\{\underbrace{(S_1^-|\uparrow\rangle_1)}_{=\hbar|\downarrow\rangle_1}|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1\underbrace{(S_2^-|\uparrow\rangle_2)}_{=\hbar|\downarrow\rangle_2}\right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle\right)$$

上と同様に $|1.0\rangle$ にも S_- を作用させてみると,

$$S_-|1.0\rangle = \hbar\sqrt{(1+0)(1-0+1)}\,|1.-1\rangle$$

$$\rightarrow |1,-1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S_-|1.0\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S_-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{2\hbar}(S_1^- + S_2^-)\left(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2\right) - (*)$$

$$(*) = \frac{1}{2\hbar}\left\{\underbrace{(S_1^-|\uparrow\rangle_1)}_{=\hbar|\downarrow\rangle_1}|\downarrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1\underbrace{(S_2^-|\downarrow\rangle_2)}_{=0} + \underbrace{(S_1^-|\downarrow\rangle_1)}_{=0}|\uparrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1\underbrace{(S_2^-|\uparrow\rangle_2)}_{=\hbar|\downarrow\rangle_2}\right\}$$

$$= \frac{1}{2\hbar}\left(\hbar|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 + \hbar|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2\right) = |\downarrow\downarrow\rangle$$

まとめると，

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

状態 $|SM\rangle$ $S=1$, $M=-1.0\,1 \rightarrow 3$

対応していない。

ところが，

$$\left.\begin{array}{ll} |\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2 & |\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2 \\ |\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 & |\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 \end{array}\right\} \rightarrow 4$$

→ まだ導かれていない状態が存在する。

ここで $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = |X\rangle$ とすると，これが他の3つと直交であるものが求めたい状態である。

$$\langle 1\,1|X\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\uparrow\uparrow|\,(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\uparrow\uparrow|\uparrow\downarrow\rangle - \langle\uparrow\uparrow|\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}({}_1\langle\uparrow|\uparrow\rangle_1\,\underbrace{{}_2\langle\uparrow|\downarrow\rangle_2}_{=0} - \underbrace{{}_1\langle\uparrow|\downarrow\rangle_1}_{=0}\,{}_2\langle\uparrow|\uparrow\rangle_2) = 0.$$

同様の議論から，$\langle 1,-1|X\rangle = 0$.

$$\langle 1.0|X\rangle = \frac{1}{2}(\langle\uparrow\downarrow| + \langle\downarrow\uparrow|)(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\left(\begin{array}{l} \langle\alpha\beta|\alpha'\beta'\rangle \qquad \alpha,\beta,\alpha',\beta' = \uparrow,\downarrow \\ = {}_1\langle\alpha|\,{}_2\langle\beta|\,(|\alpha'\rangle_1|\beta'\rangle_2) \\ = \underbrace{{}_1\langle\alpha|\alpha'\rangle_1}_{=\delta_{\alpha\alpha'}}\,\underbrace{{}_2\langle\beta|\beta'\rangle_2}_{\delta_{\beta\beta'}} \qquad \langle\alpha\beta|\alpha'\beta'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'} \\ \qquad\qquad \rightarrow \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}. \end{array}\right)$$

$$= \frac{1}{2}(\underbrace{\langle\uparrow\downarrow|\uparrow\downarrow\rangle}_{=1} - \underbrace{\langle\uparrow\downarrow|\downarrow\uparrow\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle\downarrow\uparrow|\uparrow\downarrow\rangle}_{=0} - \underbrace{\langle\downarrow\uparrow|\downarrow\uparrow\rangle}_{=1})$$
$$= \frac{1}{2}(1-1) = 0.$$

∴ $|X\rangle$ は他の3つと直交 ⟶ $|X\rangle$ は4つ目の状態

$$\left(|\uparrow\uparrow\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), |\downarrow\downarrow\rangle \right)$$

$$= \left(|1.1\rangle, |1.0\rangle, |X\rangle, |1.-1\rangle \right)$$

$$= \left(|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$ base change 基底変換.

$|X\rangle$ とは何か?

S_z を作用させて確かめる。

$$S_z|X\rangle = (S_1^z + S_2^z)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\underbrace{S_1^z|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2}_{\frac{\hbar}{2}} + \underbrace{|\uparrow\rangle_1 S_2^z|\downarrow\rangle_2}_{\frac{\hbar}{2}} \underbrace{- S_1^z|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2}_{-\frac{\hbar}{2}} \underbrace{- |\downarrow\rangle_1 S_2^z|\uparrow\rangle_2}_{\frac{\hbar}{2}}\Big)$$

$$= 0$$

$M=0$ であることがわかった。 $\longrightarrow$ では S はどうであるか?

S_+ を作用させると、

$$S_+|X\rangle = (S_1^+ + S_2^+)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\underbrace{S_1^+|\uparrow\rangle_1}_{=0}|\downarrow\rangle_2 + \underbrace{|\uparrow\rangle_1 S_2^+|\downarrow\rangle_2}_{=\hbar|\uparrow\uparrow\rangle} \underbrace{- S_1^+|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2}_{=-\hbar|\uparrow\uparrow\rangle} - |\downarrow\rangle_1 \underbrace{S_2^+|\uparrow\rangle_2}_{=0}\Big)$$

$$= (\hbar - \hbar)|\uparrow\uparrow\rangle = 0$$

$\therefore S = M = 0 \iff M : \max$ ($\because$ $|X\rangle$ は S_+ で増加しない)

$|1\,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$

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

$|1.-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$

$\underbrace{\qquad\qquad}_{S=1,\quad M=1.0.-1}$

$|0.0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$

$\underbrace{|0.0\rangle}_{= |X\rangle}$

$\underbrace{\qquad\qquad}_{S=M=0}$

$S=1/2$ spin (2) $\longrightarrow$ $S=1.0$

今まで自然に使ってきたが、改めて、 $\underset{\substack{\uparrow \\ \text{state}}}{\frac{1}{2}} \otimes \frac{1}{2} = 1 \oplus 0$ である。

$$|M_1\rangle_1|M_2\rangle_2 = |M_1\rangle_1 \otimes |M_2\rangle_2 = |M_1\rangle \otimes |M_2\rangle$$ tensor product
direct product

今まで行ってきたことを基底変換と思うと,

$$\left(|\uparrow\uparrow\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle), |\downarrow\downarrow\rangle\right)$$

$$=\left(|1,1\rangle, |1,0\rangle, |0,0\rangle, |-1,-1\rangle\right)$$

$$=\left(|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\right)\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

Clebsh-Gordon coefficient
クレブシューゴルダン 係数.

$$=\left(\underbrace{|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\rangle}_{|S_1M_1,\,S_2M_2\rangle}, |\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\rangle, |\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\rangle, |\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\rangle\right)$$

$(2S_1+1)(2S_2+1)=2\times 2=\underset{\sim}{4}$

$$|S_1M_1,S_2M_2\rangle=\underset{2S_1+1}{|S_1M_1\rangle}\otimes\underset{2S_2+1}{|S_2M_2\rangle}$$

$\downarrow$ base change

$|S,M\rangle$ total angular momentum 全角運動.

$S=1,0 \longrightarrow \underset{\sim}{4}$

$\langle SM|S_1M_1,S_2M_2\rangle$: CG 係数.

$$\frac{1}{2}\otimes\frac{1}{2}=\underset{2S+1=3}{\underset{\sim}{1}}\oplus\underset{2S+1=1}{\underset{\sim}{0}}$$

triplet 三重項　　singlet 一重項　　$\Longleftrightarrow$ 分光学における ◯重線 と対応.