No.

Date 量子力学3 第12回

201810861 高瀬皓介

角運動量の合成の例

→ 2つの $S=\frac{1}{2}$ スピンのつくる一重項と三重項

ここでは，特に2つのスピン S_1，S_2 を考える。ここで異なるスピンは無関係だから，お互いに可換であるとする。

$$
\begin{aligned}
&[S_x, S_y] \\
&= [S_{1x}+S_{2x}, S_{1y}+S_{2y}] \\
&= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] \\
&= i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z} \\
&= i\hbar (S_{1z}+S_{2z}) \\
&= i\hbar S_z
\end{aligned}
$$

ここで，

$$
\begin{aligned}
[S_{1x}, S_{1y}] &= i\hbar S_{1z} \\
[S_{1y}, S_{1z}] &= i\hbar S_{1x} \\
[S_{1z}, S_{1x}] &= i\hbar S_{1y} \\
[S_{2x}, S_{2y}] &= i\hbar S_{2z} \\
[S_{2y}, S_{2z}] &= i\hbar S_{2x} \\
[S_{2z}, S_{2x}] &= i\hbar S_{2y} \\
[S_{1x}, S_{2x}] &= 0 \\
[S_{1x}, S_{2y}] &= 0 \\
&\vdots \\
[S_{i\mu}, S_{j\nu}] &= 0 \quad i \neq j
\end{aligned}
$$

$$S = S_1 + S_2$$

$$[S_\mu, S_\nu] = i\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\hbar S_\lambda$$

S も角運動量

状態について考える。

S_1，S_2 の状態 $|m_1\rangle$，$(m_1=\pm)$ と $|m_2\rangle$，$(m_2=\pm)$

$$S_{1z}|m_1\rangle_1 = \hbar m_1 |m_1\rangle_1, \quad m_1 = \pm\frac{1}{2}$$

$$S_{2z}|m_2\rangle_2 = \hbar m_2 |m_2\rangle_2, \quad m_2 = \pm\frac{1}{2}$$

$$|m_1 m_2\rangle = |m_1\rangle_1 |m_2\rangle_2 \qquad \text{全4状態}$$

$$m_i = \begin{cases} +\frac{1}{2} \to \uparrow \\ -\frac{1}{2} \to \downarrow \end{cases}$$ として，

$$|\underset{S_1}{\uparrow}\underset{S_2}{\uparrow}\rangle, |\underset{S_1}{\uparrow}\underset{S_2}{\downarrow}\rangle, |\underset{S_1}{\downarrow}\underset{S_2}{\uparrow}\rangle, |\underset{S_1}{\downarrow}\underset{S_2}{\downarrow}\rangle$$

ここで，全スピン S に関して一般の角運動量について議論したような次のような状態を求めたい。

$$S^2|SM\rangle = \hbar^2 S(S+1)|SM\rangle$$
$$S_z|SM\rangle = \hbar M|SM\rangle$$

まず，$|\uparrow\uparrow\rangle$ を考えると，$S_+ = S_{1+} + S_{2+}$ に対して，

$$|\uparrow\uparrow\rangle = |m_1 = \tfrac{1}{2}, m_2 = \tfrac{1}{2}\rangle = |\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}\rangle$$
$$S_\pm = S_x \pm iS_y$$
$$S_+|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1+} + S_{2+})|\uparrow\uparrow\rangle$$
$$= (S_{1+}|\uparrow\rangle_1)|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1(S_{2+}|\uparrow\rangle_2) = 0$$

（スピン $S = \frac{1}{2}$ と仮定しているから，
$$S_{1+}|\uparrow\rangle_1 = 0$$
$$S_{2+}|\uparrow\rangle_2 = 0 \text{ ）}$$

$S_z = S_{1z} + S_{2z}$ に対して，

$$S_z|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1z} + S_{2z})|\uparrow\uparrow\rangle$$
$$= (S_{1z}|\uparrow\rangle_1)|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1(S_{2z}|\uparrow\rangle_2)$$
$$= S_{1z}|m = \tfrac{1}{2}\rangle$$
$$= \tfrac{1}{2}\hbar|\uparrow\rangle$$
$$= \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2}\right)|\uparrow\uparrow\rangle$$

よって，一般論から $|\uparrow\uparrow\rangle$ は，$S = \hbar s$，$M = \hbar m$ とおいて $s = 1$，$M = 1$ の状態となる。

$$|11\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = |S, M\rangle$$

となり，M が1つ決まった。

$$|10\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(s+m)(s-m+1)}} S_-|11\rangle, \quad s = 1, m = 1$$
$$= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} S_-|\uparrow\uparrow\rangle$$
$$= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(S_{1-} + S_{2-})|\uparrow\uparrow\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$$

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

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

$S_{1-}|\uparrow\rangle = ?$ ，$j = \frac{1}{2}$，$m = \pm\frac{1}{2}$

$$J_-|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2})(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}+1)} = \hbar|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle$$

つまり，$J_-|\uparrow\rangle = \hbar|\downarrow\rangle$

$$|1\,{-1}\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(s+m)(s-m+1)}}\,S_-|1\,0\rangle \quad , \; s=1,\ m=0$$

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

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

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

$$= |\downarrow\downarrow\rangle$$

まとめれば,

$$|1\,1\rangle = \psi_{m=1}\,(1)$$

$$|1\,0\rangle = \psi_{m=0}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

$$|1\,{-1}\rangle = \psi_{m=-1}\,(1)$$

$\psi_1 = \left(|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\right) = |\uparrow\uparrow\rangle$ …… 1次元の基底

$\psi_0 = \left(|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle,\ |-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\right) = \left(|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle\right)$ …… 2 〃

$\psi_{-1} = \left(|-\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\right) = |\downarrow\downarrow\rangle$ …… 1 〃

$m = m_1 + m_2 = 0$ の状態は2次元の ψ_0 で張られているから, $|1\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)$ 以外にもう1つ状態がつくれて, 直交した状態をつくれば.

$$|t\rangle = \psi_0\,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

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

となるが, $m=1$ に他の状態はつくれないはずだから, $S_+|t\rangle = 0$ のはず.
これを念のため確認すれば.

$$S_+|t\rangle = \left(S_{1+} + S_{2+}\right)\underbrace{\left(|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle, |-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\right)\frac{1}{\sqrt{2}}}_{\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)}$$

ここで,

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

もうふやせない

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

もうふやせない

したがって，

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

よって，この状態は $S=0$ つまり

$$|t\rangle = |00\rangle$$

一般に次のように書けば

$$|sm\rangle = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{|m_1, m_2\rangle}_{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle} \overbrace{\langle m_1, m_2 | sm\rangle}^{\text{係数}}$$

$$\langle m_1 m_2 | sm\rangle = 0 \quad , \quad m_1 + m_2 \neq m$$

$$|1,1\rangle = |\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle\underbrace{\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|1,1\rangle}_{=1}$$

$$|1,0\rangle = |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle\langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}|1,0\rangle + |-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle\langle -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|1,0\rangle$$
$$= |\uparrow\downarrow\rangle\underbrace{\langle \tfrac{1}{2} -\tfrac{1}{2}|10\rangle}_{=\frac{1}{\sqrt{2}}} + |\downarrow\uparrow\rangle\underbrace{\langle -\tfrac{1}{2} \tfrac{1}{2}|10\rangle}_{=\frac{1}{\sqrt{2}}}$$

$$|0,0\rangle = |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle\langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}|0,0\rangle + \langle -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle\langle -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|0,0\rangle$$
$$= |\uparrow\downarrow\rangle\underbrace{\langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}|0,0\rangle}_{=\frac{1}{\sqrt{2}}} + |\downarrow\uparrow\rangle\underbrace{\langle -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|00\rangle}_{=-\frac{1}{\sqrt{2}}}$$

$$|1,-1\rangle = |-\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle\langle -\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}|1,-1\rangle$$
$$= |\downarrow\downarrow\rangle\underbrace{\langle -\tfrac{1}{2} -\tfrac{1}{2}|1,-1\rangle}_{=1}$$

$$\Downarrow$$

$$|1,1\rangle = \psi_1(\langle \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|1,1\rangle)$$

$$(|1,0\rangle, |0,0\rangle) = \psi_0\begin{pmatrix} \langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}|1,0\rangle & \langle \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}|0,0\rangle \\ \langle -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|1,0\rangle & \langle -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|0,0\rangle \end{pmatrix}$$

$$|1,-1\rangle = \psi_{-1}(\langle -\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}|1,-1\rangle)$$

更にまとめて，

$$(|1,1\rangle, |1,0\rangle, |0,0\rangle, |1,-1\rangle) = \underbrace{(\psi_1, \psi_0, \psi_{-1})}_{=(|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle)} \overbrace{[\langle m_1, m_2 | sm\rangle]}^{\text{行列}}$$

$$= (\psi_1, \psi_0, \psi_{-1})\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

No.

Date

これらの係数 $\langle m_1 m_2 | s m \rangle$ をクレブシュ・ゴルダン係数という。

$$|sm\rangle = \sum_{m_1, m_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | s m\rangle$$

規格直交性

$$E_4 = \begin{pmatrix} \langle 11| \\ \langle 10| \\ \langle 01| \\ \langle 1-1| \end{pmatrix} (|11\rangle, |10\rangle, |00\rangle, |1-1\rangle)$$

$$= [\langle m_1 m_2 | s m\rangle]^\dagger \begin{pmatrix} \langle \uparrow\uparrow| \\ \langle \uparrow\downarrow| \\ \langle \downarrow\uparrow| \\ \langle \downarrow\downarrow| \end{pmatrix} (|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle) [\langle m_1 m_2 | s m\rangle]$$

$$(|sm\rangle) = (|m_1 m_2\rangle)\underbrace{(\langle m_1 m_2 | s m\rangle)}_{\text{行列表示}}$$

$(|m_1 m_2\rangle) = (|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle)$

$(|sm\rangle) = (|1.1\rangle, |1.0\rangle, |1.-1\rangle, |0.0\rangle)$

$|sm\rangle, |m_1 m_2\rangle$ の規格直交性

$\rightarrow [\langle m_1 m_2 | s m\rangle]$: ユニタリ行列

よって、

$$(|sm\rangle)(|sm\rangle)^\dagger = (|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle, |00\rangle) \begin{pmatrix} \langle 11| \\ \langle 10| \\ \langle 1-1| \\ \langle 00| \end{pmatrix} = \sum_{sm} |sm\rangle\langle sm|$$

$$= (|m_1 m_2\rangle) [\langle m_1 m_2 | s m\rangle] [\langle m_1 m_2 | s m\rangle]^\dagger (|m_1 m_2\rangle)^\dagger$$

$$= (|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle) \begin{pmatrix} \langle \uparrow\uparrow| \\ \langle \uparrow\downarrow| \\ \langle \downarrow\uparrow| \\ \langle \downarrow\downarrow| \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{m_1, m_2} |m_1 m_2\rangle\langle m_1 m_2|$$

$$= 1$$

$\rightarrow |sm\rangle$ も完全!

$$(\langle m_1 m_2 | s m \rangle)_{m_1 m_2 , sm} = \langle m_1 m_2 | s m \rangle \quad : \text{ユニタリ}$$

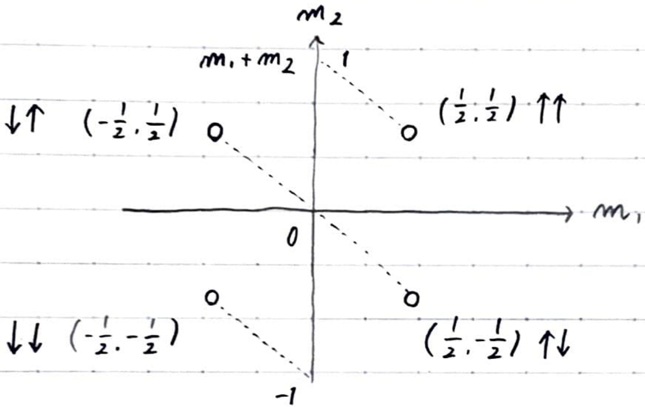
$$(\langle m_1 m_2 | s m \rangle)^{\dagger} \equiv \langle s m | m_1 m_2 \rangle$$

$$\sum_{sm} \langle m_1 m_2 | s m \rangle \langle s m | m_1' m_2' \rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}$$

$$\sum_{m_1 m_2} \langle s m | m_1 m_2 \rangle \langle m_1 m_2 | s' m' \rangle = \delta_{ss'} \delta_{mm'}$$

また，$|m_1 m_2\rangle$ がそれぞれスピン $\frac{1}{2}$ の状態から構成されていることを明示して次のように書くことがある。

$$\left|\tfrac{1}{2} m_1 , \tfrac{1}{2} m_2 \right\rangle = |m_1 m_2\rangle = |m_1\rangle |m_2\rangle$$



- 交換相互作用

2つのスピンとして以下の交換相互作用と呼ばれるハミルトニアンを考えてみる。

$$H = J \boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 \quad , \ J > 0$$

ここで，次の関係式に注意すれば

$$(\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2 = \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2 \boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$$
$$= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) + 2 \boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$$

$$H = J \left[\frac{1}{2} (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2 - \frac{3}{4} \right]$$

よって，この系の基底状態は唯一であり

$$|s=0 \ m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \qquad s=0 \quad s(s+1)=0$$

で与えられ，そのエネルギーは，

$$E = J\left(\frac{1}{2} \cdot 0 (0+1) - \frac{3}{4}\right) = -\frac{3}{4} J$$

励起状態は3重に縮退していて，

$$|11\rangle , |10\rangle , |1-1\rangle$$

であり，そのエネルギーは

$$E_1 = J\left(\frac{1}{2} \cdot 1 (1+1) - \frac{3}{4}\right) = \frac{1}{4} J$$

となる。前者を（スピン）一重項（シングレット），後者を（スピン）三重項（トリプレット）とよぶ。