第12回　　20181087?　古内 健太郎

2つの $S=\frac{1}{2}$ スピンの作る一重項と三重項.　　角運動量の合成の例

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

$$[S_{i\mu}, S_{j\nu}] = 0 \quad , i \neq j$$

$$[S_{1x}, S_{2x}] = 0$$
$$[S_{1x}, S_{2y}] = 0$$

$$[S_{1x}, S_{1y}] = i\hbar S_{1z}$$
$$[S_{1y}, S_{1z}] = i\hbar S_{1x}$$
$$[S_{1z}, S_{1x}] = i\hbar S_{1y}$$

$$[S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar S_{2z}$$
$$[S_{2y}, S_{2z}] = i\hbar S_{2x}$$
$$[S_{2z}, S_{2x}] = i\hbar S_{2y}$$

$$[S_x, S_y] = [\underbrace{S_{1x} + S_{2x}, S_{1y}}_{可換} + S_{2y}]$$
$$= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}]$$
$$= i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z}$$
$$= i\hbar (S_{1z} + S_{2z})$$
$$= i\hbar S_z \quad !$$

$$S = S_1 + S_2$$

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

S も角運動量

状態は?

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

既知!

$$S_{1z} |m_1\rangle_1 = \hbar m_1 |m_1\rangle_1 \quad , m_1 = \pm 1/2$$
$$S_{2z} |m_2\rangle_2 = \hbar m_2 |m_2\rangle_2 \quad , m_2 = \pm 1/2$$

$$S_{1,2}^2 |m_{1,2}\rangle = \hbar^2 S(S+1) |m_{1,2}\rangle$$

$$|m_1 m_2\rangle = |m_1\rangle_1 |m_2\rangle_2 \quad 全4状態$$

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

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.

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

$S = ?\quad M = ?$

$|\uparrow\uparrow\rangle = |m_1 = 1/2, m_2 = 1/2\rangle = |\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\rangle$

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

$$S_+|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1+} + S_{2+})|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1+}|\uparrow\rangle_1)|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1(S_{2+}|\uparrow\rangle_2) = 0$$

$S_{1+}|\uparrow\rangle_1 = 0$

$S_{2+}|\uparrow\rangle_2 = 0$

もう増やせない！　$m=S$ は最大のはず！

$|\uparrow\uparrow\rangle = |SM\rangle \quad M = S$

$S_z = S_{1z} + S_{2z}$ に対して

$$S_z|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1z} + S_{2z})|\uparrow\uparrow\rangle = (S_{1z}|\uparrow\rangle_1)|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1(S_{2z}|\uparrow\rangle_2)$$

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

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

$S_{1z}|\uparrow\rangle = S_{1z}|m = 1/2\rangle$

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

2についても同様

よって一般論から $|\uparrow\uparrow\rangle$ は $S = \hbar s$, $M = \hbar m$ とかいて $S=1, M=1$ の状態となる。

$|\uparrow\uparrow\rangle = |S, M\rangle$　　　$|11\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$　　　1つ決まった！

$|10\rangle$?　$|1-1\rangle$?　: $|11\rangle$ から M をどんどん減らせばいい！

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

$S_-|11\rangle \propto |10\rangle$

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

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

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$$　　1つ決まった！

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

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

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

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

$= |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}-1\rangle$

$= \hbar|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

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

$$|1-1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(s+m)(s-m+1)}} S_-|10\rangle, \quad s=1, m=0$$

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

$\hbar|\downarrow\downarrow\rangle$

もう減らせない　$S_{2-}|\uparrow\downarrow\rangle = 0$

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

もう減らせない　$S_{1-}|\downarrow\uparrow\rangle = 0$

$\hbar|\downarrow\downarrow\rangle$

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

$$= |\downarrow\downarrow\rangle$$　　1つ決まった！

もう減らせない！

まとめれば

$$|11\rangle = \psi_{m=1}\,(1)$$

$$|10\rangle = \psi_{m=0}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \quad = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

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

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

$$\psi_{-1} = \left(|-\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\right) = \left(|\downarrow\downarrow\rangle\right)$$ 1次元の基底

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

$M = m_1 + m_2 = 0$ の状態は2次元のψ_0で張られているから $|10\rangle$ 以外にもう1つ状態がつくれて、直交した状態をとれば

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

$$|t\rangle = \psi_0\,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$ $\quad S = M = 0$

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

$$S_+|t\rangle = (S_{1+} + S_{2+})\left(|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle,\ |-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\right)\frac{1}{\sqrt{2}} = 0$$

$$(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

よってこの状態は $S=0$ つまり

$$|t\rangle = |00\rangle$$ これで4つ決まった！

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

もう増やせない。 $\qquad$ もう増やせない。

一般に次のように書けば、

$$\underbrace{|Sm\rangle}_{} = \sum_{m_1 m_2} |m_1 m_2\rangle \underbrace{\langle m_1 m_2 | Sm\rangle}_{係数}$$

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

$|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$

$$|1,1\rangle = |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|1,1\rangle \quad = |\uparrow\uparrow\rangle\underbrace{\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|11\rangle}_{=1}$$

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

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

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

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

$\psi_0 = (|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle, |-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle)$

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

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

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

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

さらにまとめて

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

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

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

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

$(\langle m_1 m_2 | Sm\rangle)^\dagger \langle m_1 m_2 | Sm\rangle$

$=$

規格直交性

$$E_4 = \begin{pmatrix} \langle 11| \\ \langle 10| \\ \langle 01| \\ \langle 1-1| \end{pmatrix} (|11\rangle, |10\rangle, |00\rangle, |1-1\rangle) = [\langle m_1 m_2 | Sm\rangle]^\dagger \underbrace{\begin{pmatrix} \langle\uparrow\uparrow| \\ \langle\uparrow\downarrow| \\ \langle\downarrow\uparrow| \\ \langle\downarrow\downarrow| \end{pmatrix} (|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle)}_{=E_4} [\langle m_1 m_2 | Sm\rangle]$$

$$(|Sm\rangle) = (|m_1 m_2\rangle)(\langle m_1 m_2|Sm\rangle) \leftarrow \text{行列表示}$$

$$(|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle, |00\rangle) = (|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle)\left[\langle m_1 m_2|Sm\rangle\right]$$

$|Sm\rangle$, $|m_1 m_2\rangle$ の規格直交性

$\longrightarrow \left[\langle m_1 m_2|Sm\rangle\right]$: ユニタリ行列

よって、

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

$$= (|m_1 m_2\rangle)\underbrace{\left[\langle m_1 m_2|Sm\rangle\right]\left[\langle m_1 m_2|Sm\rangle\right]^\dagger}_{=E_4}(|m_1 m_2\rangle)^\dagger$$

$$= (|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle)\begin{pmatrix}\langle\uparrow\uparrow| \\ \langle\uparrow\downarrow| \\ \langle\downarrow\uparrow| \\ \langle\downarrow\downarrow|\end{pmatrix} = \sum_{m_1 m_2}|m_1 m_2\rangle\langle m_1 m_2| = 1$$

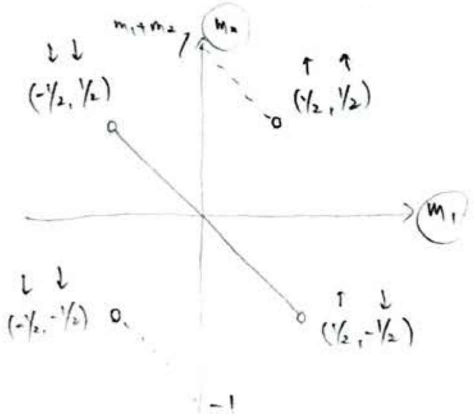
$\Rightarrow |Sm\rangle$ も完全！

$$(\langle m_1 m_2|Sm\rangle)_{m_1 m_2, Sm} = \langle m_1 m_2|Sm\rangle \quad : \text{ユニタリ} \quad \left((\langle m_1 m_2|Sm\rangle)^\dagger\right)_{Sm, m_1 m_2} \equiv \langle Sm|m_1 m_2\rangle$$

$$\begin{cases} \sum_{Sm}\langle m_1 m_2|Sm\rangle\langle Sm|m_1' m_2'\rangle = \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'} \\ \sum_{m_1 m_2}\langle Sm|m_1 m_2\rangle\langle m_1 m_2|S'm'\rangle = \delta_{SS'}\delta_{mm'} \end{cases}$$

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もある。

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



$|m_1\rangle_1$, $|m_2\rangle_2$

$|m_1 m_2\rangle = |m_1\rangle_1 |m_2\rangle_2$

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よう！

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

ここで次の関係式に注意すれば　$\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$ $S=1/2$ スピン $S=1/2$

$$(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2+\mathbf{S}_2^2+2\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$$

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

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

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

$$H=J\left(\frac{1}{2}\mathbf{S}^2-\frac{3}{4}\right)$$

よってこの系の基底状態は唯一であり、

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

で与えられ、そのエネルギーは

$$E_0 = J\left(\frac{1}{2}0(0+1)-\frac{3}{4}\right) = -\frac{3}{4}J$$

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

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

となる。この前者を（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。