第12回　量子力学3

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$\mathbb{S}_1, \mathbb{S}_2$を考えよう。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しよう。

$[S_{1x}, S_{1y}] = i\hbar S_{1z}$
$[S_{1y}, S_{1z}] = i\hbar S_{1x}$
$[S_{1z}, S_{1x}] = i\hbar S_{1y}$
$[S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar S_{2z}$
$[S_{2y}, S_{2z}] = i\hbar S_{2x}$
$[S_{2z}, S_{2x}] = i\hbar S_{2y}$
$[S_{1x}, S_{2x}] = 0$
$[S_{1x}, S_{2y}] = 0$

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

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

$\mathbb{S} = \mathbb{S}_1 + \mathbb{S}_2$

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

$\mathbb{S}$も角運動量

状態は？

一般論は後で整理することにしてまずやってみよう。

$\mathbb{S}_1, \mathbb{S}_2$の状態 $|m_1\rangle, (m_1 = \pm)$と$|m_2\rangle, (m_2 = \pm)$

既知!

$S_1|m_1\rangle_1 = \hbar m_1 |m_1\rangle_1,\ m_1 = \pm 1/2$
$S_2|m_2\rangle_2 = \hbar m_2 |m_2\rangle_2,\ m_2 = \pm 1/2$

$\mathbb{S}^2_{\substack{1\\2}}|m_{\substack{1\\2}}\rangle = \hbar^2 S(S+1)|m_{\substack{1\\2}}\rangle$

どうやってつくる？

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

$$m_i = \begin{cases} +\frac{1}{2} \to \uparrow \\ -\frac{1}{2} \to \downarrow \end{cases}$$ として $|\underset{S_1 S_2}{\uparrow\uparrow}\rangle, |\underset{S_1 S_2}{\uparrow\downarrow}\rangle, |\underset{S_1 S_2}{\downarrow\uparrow}\rangle, |\underset{S_1 S_2}{\downarrow\downarrow}\rangle$

ここで全スピン$\mathbb{S}$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。

$|SM\rangle$?

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

$S = ?$　$M = ?$

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

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

もう増やせない！　$m = S$は最大のはず！

$S_z = S_{1z} + S_{2z}$に対して

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

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。

$|11\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ 一つ決まった！

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

$|10\rangle$？ $|1\ -1\rangle$？ $|11\rangle$からMをどんどん減らせば良い！

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

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

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

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$$ 一つ決まった

$$\boxed{\begin{aligned} J_+|jm\rangle &= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|j,m+1\rangle \\ J_-|jm\rangle &= \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|j,m-1\rangle \end{aligned}}$$

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

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

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

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

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

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

もうへらせない

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

もうへらせない

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

$$= |\downarrow\downarrow\rangle$$ 一つ決まった！

もう減らせない

まとめれば

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

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

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

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

$\psi_0 = (|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle, |-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle) = (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ 2次元の基底

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

$m = m_1 + m_2 = 0$ の状態は2次元のψ_0で張られているから $|10\rangle$ 以外にもう一つ状態がつくれて、直交した状態をとれば、

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

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

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

$$S_+|t\rangle = (S_{1+}+S_{2+})(|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle, |-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle \overset{\wedge}{\,}) = 0$$

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

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

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

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!

一般に次のように書けば

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

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

$$|1.1\rangle = |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|1.1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|11\rangle \quad {}^{〃}1$$

$$\quad {}^{〃}\frac{1}{\sqrt{2}} \qquad {}^{〃}\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|1.0\rangle = |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|1.0\rangle + |-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\langle-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|1.0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle\langle\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|1.0\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\langle-\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|10\rangle$$

$$|0.0\rangle = |\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\rangle\langle\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|00\rangle + |-\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\rangle\langle-\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|00\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle\langle\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|00\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\langle-\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|00\rangle$$

$$|1-1\rangle = |-\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\rangle\langle-\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|1-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle\langle-\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|1-1\rangle \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}{}^{〃} \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}{}^{〃}$$

$${}^{〃}1$$

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

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

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

$$|11\rangle = \psi_1(\langle\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|11\rangle), \quad \psi_1 = (|\uparrow\uparrow\rangle)$$

$$(|1.0\rangle, |00\rangle) = \psi_0\begin{pmatrix}\langle\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|1.0\rangle & \langle\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}|00\rangle \\ \langle-\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}|10\rangle & \langle-\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|00\rangle\end{pmatrix} \quad \psi_0 = (|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle)$$

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

更にまとめて

$$(|1.1\rangle, |1.0\rangle, |0.0\rangle, |1,-1\rangle) = (\psi_1, \psi_0, \psi_{-1})[\langle m_1, m_2|Sm\rangle]$$

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

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。

$$|Sm\rangle = \sum_{m_1 m_2}|m_1 m_2\rangle\langle m_1 m_2|Sm\rangle \qquad (\langle m_1 m_2|Sm\rangle)^\dagger\langle m_1 m_2|Sm\rangle$$

$$〃$$

規格直交性

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

$$(|Sm\rangle)=(|m_1m_2\rangle)(\langle m_1m_2|Sm\rangle) \leftarrow \text{行列表示}$$

$$\| \quad = \quad (|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle)\left[\langle m_1m_2|Sm\rangle\right]$$

$$(|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle, |00\rangle)$$

$|Sm\rangle, |m_1m_2\rangle$の規格直行性

$\rightarrow \left[\langle m_1m_2|Sm\rangle\right]$: ユニタリ行列

よって

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

$$= (|m_1m_2\rangle)\underbrace{\left[\langle m_1m_2|Sm\rangle\right]\left[\langle mm_2|Sm\rangle\right]^\dagger}_{E_4}(|m_1m_2\rangle)^\dagger$$

$$= (|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle)\begin{pmatrix}|\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle\end{pmatrix} = \sum_{m_1m_2}|m_1m_2\rangle\langle m_1m_2| = 1$$

$\Rightarrow |Sm\rangle$も完全！

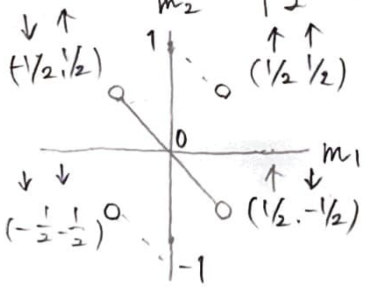
$$(\langle m_1m_2|Sm\rangle)_{m_1m_2Sm} = \langle m_1m_2|Sm\rangle \quad : \text{ユニタリ} \quad (\langle m_1m_2|Sm\rangle^\dagger)_{Sm,m_1m_2} \fallingdotseq \langle Sm|m_1m_2\rangle$$

$$\sum_{Sm}\langle m_1m_2|Sm\rangle\langle Sm|m_1'm_2'\rangle = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}$$

$$\sum_{m_1m_2}\langle Sm|m_1m_2\rangle\langle m_1m_2|S'm'\rangle = \delta_{SS'}\delta_{mm'}$$

また、$|m_1m_2\rangle$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。

$$|\tfrac{1}{2}m_1\,\tfrac{1}{2}m_2\rangle = |m_1m_2\rangle = |m_1\rangle|m_2\rangle$$



$|m_1\rangle_1, |m_2\rangle_2$

$|m_1m_2\rangle$
$= |m_1\rangle_1|m_2\rangle_2$

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。

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

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

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

$$= \underbrace{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)}_{3/2}+2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$$

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

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

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

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)と呼ぶ。