Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

（復習）

スピン角運動量：大きさ $\frac{\hbar}{2}$ → z成分は $\pm\frac{\hbar}{2}$

$$|\tfrac{\hbar}{2}\ \tfrac{\hbar}{2}\rangle \equiv |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$|\tfrac{\hbar}{2}\ -\tfrac{\hbar}{2}\rangle \equiv |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$$

$$[\hat{S}_i, \hat{S}^2] = 0$$

$$\underbrace{(S_x \pm i S_y)}_{\equiv\ S_\pm} |S\, S_z\rangle = \hbar\sqrt{S(S+1) - S_z(S_z \pm 1)} \times |S_z\ S_z - 1\rangle$$

$$\hat{S}^2|\uparrow\rangle = \hbar^2 \cdot \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)|\uparrow\rangle = \tfrac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \tfrac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}^2|\downarrow\rangle = \tfrac{3}{4}\hbar^2|\downarrow\rangle, \quad \hat{S}_z|\downarrow\rangle = -\tfrac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$$

$$\hat{S}_+|\uparrow\rangle = \hat{S}_-|\downarrow\rangle = 0$$

$$\hat{S}_+|\downarrow\rangle = \hbar\sqrt{\underbrace{\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1) - (-\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2}+1)}_{=\frac{3}{4} - (-\frac{1}{4}) = 1}}\ |\uparrow\rangle$$

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

$$\hat{S}_-|\uparrow\rangle = \hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1) - \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}-1)}\ |\downarrow\rangle = \hbar|\downarrow\rangle$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

・行列表示

$$\hat{A} = \{ \langle i | \hat{A} | j \rangle \}$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{S}_k$ となるには

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

(note) $\hat{S}_x^2 = \hat{S}_y^2 = \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \mathbb{1}$

$$\rightarrow \hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbb{1}$$

(note) $\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = \frac{\hbar^2}{4}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right]$

$$= \frac{\hbar^2}{4}\left[\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}\right]$$

$$= \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i\hbar \hat{S}_z$$

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right]$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ |\uparrow\rangle = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar |\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right] = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

パウリ行列

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\, \varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

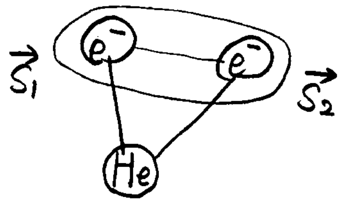
$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 = 3.$$

$$S_{1z}|\uparrow\downarrow\rangle = (S_{1z}|\uparrow\rangle)|\downarrow\rangle$$

$$S_{2z}|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle(S_{2z}|\downarrow\rangle)$$

5.3. 2スピン系

例）ヘリウム原子



2電子系

それぞれの電子のスピン角運動量を $\mathbf{S}_1$, $\mathbf{S}_2$ とする。

$\mathbf{S}_1$ と $\mathbf{S}_2$ はお互いに独立：

$$[S_{1i}, S_{1j}] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} S_{1k}$$

$$[S_{2i}, S_{2j}] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} S_{2k}$$

$$[S_{1i}, S_{2j}] = 0$$

2電子系の状態：

$$|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 = |\uparrow\uparrow\rangle$$
$$|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 = |\uparrow\downarrow\rangle$$
$$|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 = |\downarrow\uparrow\rangle$$
$$|\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 = |\downarrow\downarrow\rangle$$

$S_z = S_{1z} + S_{2z}$ を作用させると、

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

など。

Department of Physics
Tohoku University

Sendai, Japan

$$\begin{cases} m=1 : & |\uparrow\uparrow\rangle \\ m=0 : & |\uparrow\downarrow\rangle,\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ m=-1 : & |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

$m=\pm 1$ の状態は 2つのスピンの入れかえに対して対称

→ $m=0$ でも 対称な状態を作ってみる。

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

同様に反対称な状態も作れる：

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

↓

$$\begin{cases} m=1 : & |\uparrow\uparrow\rangle \\ m=0 : & \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ m=-1 : & |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

これらはどのような状態なのか？

→ $\boldsymbol{S}^2 = (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2$ を作用させてみる。

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

$$\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}|\uparrow\downarrow\rangle = (\hat{S}_{1z}|\uparrow\rangle)(\hat{S}_{2z}|\downarrow\rangle)$$

(note)

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{S}^2 &= \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 \\
&= \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + (S_{1x}+iS_{1y})(S_{2x}-iS_{2y}) \\
&\quad + (S_{1x}-iS_{1y})(S_{2x}+iS_{2y}) \\
&= \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{S}^2|\uparrow\uparrow\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2\times 2 + 2\cdot\frac{\hbar}{2}\cdot\frac{\hbar}{2}\right)|\uparrow\uparrow\rangle \\
&= 2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle = 1\cdot(1+1)\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle
\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{S}_1^2|\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle$$
$$S_{1z}|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$$
$$S_{1+}|\uparrow\rangle = 0$$

同様に $\boldsymbol{S}^2|\downarrow\downarrow\rangle = 1\cdot(1+1)\hbar^2|\downarrow\downarrow\rangle$

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

$$S_{1-}S_{2+}|\uparrow\downarrow\rangle = \hbar^2|\downarrow\uparrow\rangle$$
$$S_{1+}S_{2-}|\downarrow\uparrow\rangle = \hbar^2|\uparrow\downarrow\rangle$$

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

入れかえに対し対称な状態
$|\uparrow\uparrow\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$, $|\downarrow\downarrow\rangle$
は $S=1$, $S_z=+1, 0, -1$ の3つの状態
(スピン三重項)。

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

$$S^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right)$$

$$= \left(2 \times \frac{3}{4}\hbar^2 + 2 \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right)$$

$$+ \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle - \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle$$

$$= \hbar^2 \left(2 \cdot \frac{3}{4} - 2 \cdot \frac{1}{4} - 1 \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right)$$

$$= 0$$

↳ $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right)$ は $S=0,\ S_z=0$ の状態（スピン1重項）。

まとめ：

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

$S=1$: ↑ 3重項（トリプレット）

$S=0$: ↑ 1重項（シングレット）