

スピン \hat{s}_1, \hat{s}_2 の 2 電子系のハミルトニアンが

$$\hat{H} \equiv \frac{2K}{\hbar^2} \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 - \frac{J}{\hbar} (\hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}) \quad (J, K > 0, \text{constant}) \quad (1)$$

で与えられるとき、合成スピンの大きさ S とその z 成分 M_S をもつ固有関数 χ_{SM_S} は次のように表される。

$$\chi_{11} = |\alpha_1 \alpha_2\rangle \quad (2)$$

$$\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\alpha_1 \beta_2\rangle + |\beta_1 \alpha_2\rangle \} \quad (3)$$

$$\chi_{1-1} = |\beta_1 \beta_2\rangle \quad (4)$$

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\alpha_1 \beta_2\rangle - |\beta_1 \alpha_2\rangle \} \quad (5)$$

ただし、1 電子のスピン上向き (下向き) 状態を $|\alpha\rangle (|\beta\rangle)$ とする。2 電子系のハミルトニアンに対する、それぞれの状態のエネルギー固有値を求め、エネルギーの順番にそれらの結果を図示せよ。ただし、2 つの定数の間には $J/2 > K$ の関係があるとする。

(解答例) 以下、スピン演算子の文字記号において、1 電子スピンには小文字の s 、2 電子の合成スピンには大文字の S を使用することに注意する。

$$\hat{S} \equiv \hat{s}_1 + \hat{s}_2 \quad (6)$$

$$\rightarrow 2\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 = \hat{S}^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2 \quad (7)$$

$$2\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 \chi_{SM_S} = (\hat{S}^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2) \chi_{SM_S} \quad (8)$$

$$= \left\{ S(S+1) - \frac{3}{2} \right\} \chi_{SM_S} \quad (9)$$

$$\hat{S}_z = \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z} \quad (10)$$

したがって、今

$$\hat{H} \chi_{SM_S} = \left[K \left\{ S(S+1) - \frac{3}{2} \right\} - J \hat{S}_z \right] \chi_{SM_S} \quad (11)$$

と書き直せる。

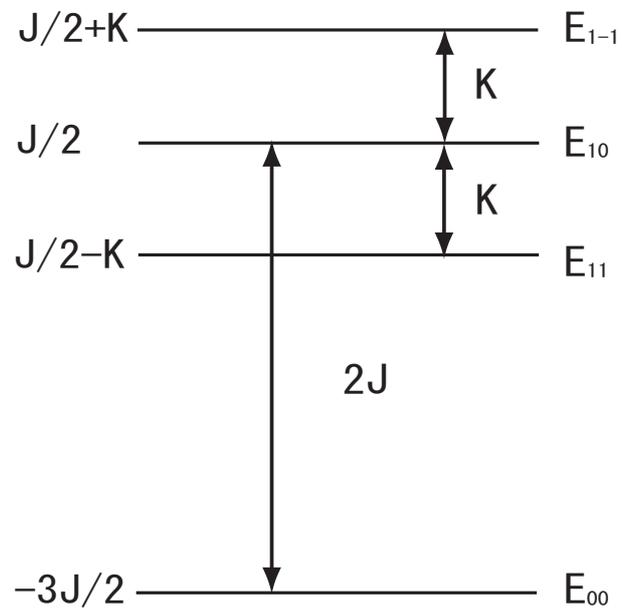
$$\rightarrow \hat{H} \chi_{11} = \left[K \left\{ 1 \cdot (1+1) - \frac{3}{2} \right\} - J \times 1 \right] \chi_{11} = \left[\frac{K}{2} - J \right] \chi_{11} \quad (12)$$

$$\hat{H} \chi_{10} = \left[K \left\{ 1 \cdot (1+1) - \frac{3}{2} \right\} - J \times 0 \right] \chi_{10} = \frac{K}{2} \chi_{10} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \hat{H} \chi_{1-1} &= \left[K \left\{ 1 \cdot (1+1) - \frac{3}{2} \right\} - J \times (-1) \right] \chi_{1,-1} \\ &= \left[\frac{K}{2} + J \right] \chi_{1,-1} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\hat{H} \chi_{00} = \left[K \left\{ 0 \cdot (1+1) - \frac{3}{2} \right\} - J \times 0 \right] \chi_{00} = -\frac{3}{2} K \chi_{00} \quad (15)$$

以上の結果を次に図示する。



補足：2つの定数の間に $J/2 > K$ の関係を要請したのは

$$\frac{J}{2} - K - \left(-\frac{3J}{2}\right) > 0 \quad (16)$$

である条件にしたからである。