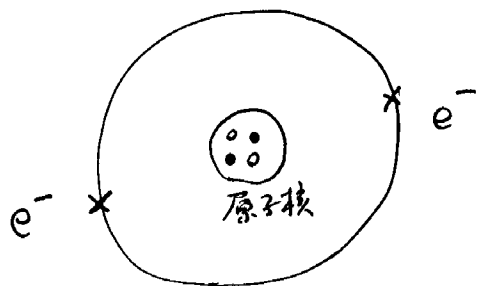


7-3-2 2電子系のゼーヴ

51

He - 原子 を 考へる



(原子核の回りへ
2個の電子が回っている)

① 2電子系のゼーヴの波動関数

$$S = S_1 + S_2$$

このとき $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$ 等が成立する

また $[S^2, S_z] = 0$ が示される

よって S^2, S_z の同時固有関数が求められる



$$\text{よって } \begin{cases} S_1^2 \chi_m^{(1)} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_m^{(1)}, & S_{z1} \chi_m^{(1)} = m \hbar \chi_m^{(1)} \\ S_2^2 \chi_m^{(2)} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_m^{(2)}, & S_{z2} \chi_m^{(2)} = m \hbar \chi_m^{(2)} \end{cases}$$

よって $\chi_m^{(1)} \chi_m^{(2)}$ の波動関数が得られる

(注) 1の電子のゼーヴは $\chi_m^{(1)}$ 2の " $\chi_m^{(2)}$ } 2の4々作用する

$$(a) \quad \Psi^{(1)} = \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \text{ の状態}$$

52

$$\left. \begin{array}{l} 1 \text{ の電子は } \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \\ 2 \text{ " } \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \end{array} \right\} \text{ 2 粒子系}$$

$$\bullet \quad S_z \Psi^{(1)} = (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} = \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2}\right) \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)}$$

$$\therefore \boxed{S_z \Psi^{(1)} = \hbar \Psi^{(1)}}$$

$$\bullet \quad S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2$$

$$\text{よって } \left\{ \begin{array}{l} S_1^2 \Psi^{(1)} = \frac{3}{4} \hbar^2 \Psi^{(1)} \\ S_2^2 \Psi^{(2)} = \frac{3}{4} \hbar^2 \Psi^{(2)} \end{array} \right. \quad \text{よって}$$

$$\begin{aligned} \text{また } S_1 \cdot S_2 \Psi^{(1)} &= \frac{\hbar^2}{4} \left[\sigma_{1x} \sigma_{2x} + \sigma_{1y} \sigma_{2y} + \sigma_{1z} \sigma_{2z} \right] \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left[\chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} + i^2 \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} + \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \Psi^{(1)} \end{aligned}$$

よって 7 粒子系

$$\begin{aligned} S^2 \Psi^{(1)} &= \left(\frac{3}{4} \hbar^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 + 2 \cdot \frac{\hbar^2}{4} \right) \Psi^{(1)} = 2 \hbar^2 \Psi^{(1)} \\ &= \hbar^2 S(S+1) \Psi^{(1)} \quad \text{よって} \end{aligned}$$

$$\boxed{S=1} \quad \text{よって } \Psi^{(1)} \text{ は } S=1, S_z=1 \text{ の固有状態}$$

(b) $\Psi^{(2)} = \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)}$ 9 状態

同様にして

$$\begin{aligned} S^2 \Psi^{(2)} &= 2\hbar^2 \Psi^{(2)} \\ S_z \Psi^{(2)} &= -\hbar \Psi^{(2)} \end{aligned}$$

よって 2 粒子. $S=1, S_z=-1$.

(c) $\Psi^{(3)} = \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)}$ 9 状態

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2$$

S_1^2, S_2^2 (2 粒子に作用). const

$$\begin{aligned} S_1 \cdot S_2 \Psi^{(3)} &= \frac{\hbar^2}{4} [S_{1x} S_{2x} + S_{1y} S_{2y} + S_{1z} S_{2z}] \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} [2 \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} - \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)}] \neq \Psi^{(3)} \end{aligned}$$

2 粒子, (b) 有 12 状態 (24, 7 状態!!)
(S^2)

(d) $\Psi^{(4)} = \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)}$ 9 状態

これは 同様 12 12

S^2 9 (b) 有 12 状態ではない

固有関数の作り方:

54

$$\begin{cases} \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} & \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)} \\ \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} & \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \end{cases}$$

この2つを $\left\{ \begin{array}{l} \text{対称な関数} \\ \text{反対称な関数} \end{array} \right\}$ とする

$\left\{ \begin{array}{l} \text{対称} : 1 \text{ と } 2 \text{ の入れかえて} \text{符号は} \\ \text{変わらない} \\ \text{反対称} : 1 \text{ と } 2 \text{ の入れかえて} \text{符号が} \\ \text{かわる} \end{array} \right.$

$$\left\{ \begin{array}{l} \cdot \quad \Psi^{(1,0)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)} + \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \right] \quad (\text{対称}) \\ \cdot \quad \Psi^{(0,0)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)} - \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \right] \quad (\text{反対称}) \end{array} \right.$$

これは S^2, S_z の固有関数となっている

$$\left\{ \begin{array}{l} S^2 \Psi^{(1,0)} = 2\hbar^2 \Psi^{(1,0)} \\ S_z \Psi^{(1,0)} = 0 \end{array} \right. \quad (S=1, S_z=0)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} S^2 \Psi^{(0,0)} = 0 \\ S_z \Psi^{(0,0)} = 0 \end{array} \right. \quad (S=0, S_z=0)$$

① 対称性 $\alpha \neq \beta$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi^{(1,1)} \equiv \Psi^{(1)} = \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{\frac{1}{2}}^{(2)} \\ \Psi^{(1,-1)} \equiv \Psi^{(2)} = \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(2)} \\ \Psi^{(1,0)} \end{array} \right.$$

2粒子 $1 \leftrightarrow 2$ 対称、

$$\Psi^{(0,0)}$$

$1 \leftrightarrow 2$ 反対称、

$$\left\{ \begin{array}{l} P_{12} \Psi^{(1,1)} = \Psi^{(1,1)} \\ P_{12} \Psi^{(1,-1)} = \Psi^{(1,-1)} \\ P_{12} \Psi^{(1,0)} = \Psi^{(1,0)} \end{array} \right. \quad \text{対称}$$

$$P_{12} \Psi^{(0,0)} = -\Psi^{(0,0)} \quad \text{反対称}$$

$$\left[\text{例} \quad P_{12} f(1,2) \equiv f(2,1) \right]$$

P_{12} と σ^2 は交換する $\Leftrightarrow$ 同時固有関数となる