

TILLEGG 13

13 Addisjon av dreieimpulser

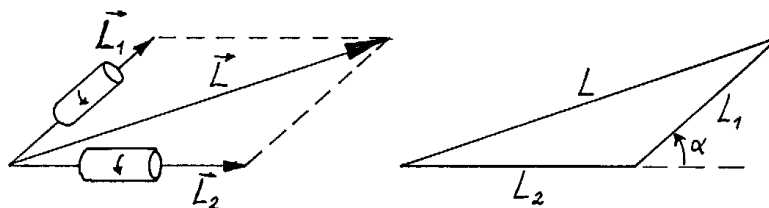
(8.4 i Hemmer, 6.10 i B&J, 4.4 i Griffiths)

Begrepet **Addisjon av dreieimpulser** kommer inn i bildet når vi ser på et system der det er mer enn ett bidrag til den totale dreieimpulsen. Ser vi f.eks på et hydrogenatom, så har vi ved siden av en mulig banedreieimpuls også elektronets spinn. Selv uten banedreieimpuls har vi to bidrag til den totale dreieimpulsen, for vi kan selvsagt ikke se bort fra protonspinn. Nedenfor skal vi se *hvordan* disse dreieimpulsbidragene kan “slå seg sammen”, dvs vi skal utlede reglene for “addisjon” av dreieimpulser. Det viser seg at summen av disse dreieimpulsene kvantiseres etter de samme reglene som ble utledet i Tillegg 11.

13.1 Innledning

Klassisk addisjon av dreieimpulser

I klassisk mekanikk er den samlede dreieimpulsen til to systemer med dreieimpulser \mathbf{L}_1 og \mathbf{L}_2 gitt ved vektorsummen $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$:



Her kan størrelsen $L = |\mathbf{L}|$ av den samlede dreieimpulsen variere kontinuerlig fra $L_1 + L_2$ til $|L_1 - L_2|$, avhengig av vinkelen (α) mellom de to dreieimpulsvektorene \mathbf{L}_1 og \mathbf{L}_2 . Klassisk oppfyller altså $L = |\mathbf{L}|$ ”trekant-ulikheten”

$$|L_1 - L_2| \leq L \leq L_1 + L_2. \quad (\text{T13.1})$$

Vi skal nå se at **samlet dreieimpuls** eller **total dreieimpuls** er et meningsfylt begrep også kvantemekanisk.

Kvantemekanisk addisjon av dreieimpulser

Spinnene til elektronet og protonet i et hydrogenatom har samme størrelse, $|\mathbf{S}_e| = |\mathbf{S}_p| = \hbar\sqrt{3/4}$. Om vi tenker oss et H-atom i grunntilstanden, med null banedreieimpuls, hvordan er det da med den samlede dreieimpulsen pga de to spinnene, $|\mathbf{S}| = |\mathbf{S}_e + \mathbf{S}_p|$? Vil denne variere kontinuerlig mellom 0 og $2\hbar\sqrt{3/4}$, slik vi ville vente ut fra den klassiske trekant-ulikheten ovenfor?

Nøkkelen til det *kvantemekaniske* svaret på dette spørsmålet (som definitivt er nei) ligger i at de to dreieimpulsene (spinnene) som skal adderes er kompatible observable. Derfor kommuterer de tilhørende operatorene, som vi kan kalle $\hat{\mathbf{S}}_1$ og $\hat{\mathbf{S}}_2$:

$$[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{2j}] = 0, \quad i, j = x, y, z. \quad (\text{T13.2})$$

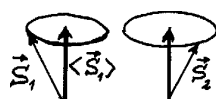
Siden operatorene $\hat{\mathbf{S}}_1$ og $\hat{\mathbf{S}}_2$ hver for seg er dreieimpulsoperatorene (dvs oppfyller dreieimpulsalgebraen) er det da lett å se at også operatoren $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ er en dreieimpulsoperator (dvs oppfyller dreieimpulsalgebraen). Vi har f.eks

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= [\hat{S}_{1x} + \hat{S}_{2x}, \hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y}] \\ &= [\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1y}] + [\hat{S}_{2x}, \hat{S}_{2y}] + 0 + 0 \\ &= i\hbar\hat{S}_{1z} + i\hbar\hat{S}_{2z} = i\hbar\hat{S}_z. \end{aligned} \quad (\text{T13.3})$$

Men da kommer “teorien” vår for dreieimpulser inn med full tyngde. Ifølge denne er de mulige *egenverdiene* til $\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2$ begrenset til $\hbar^2 s(s+1)$, der alt annet enn helt og halvtallige kvantetall s er utelukket (generelt). I dette tilfellet skal vi se at de mulige verdiene begrenser seg til $s = 0$ og $s = 1$. En *måling* av $|\mathbf{S}_e + \mathbf{S}_p|$ for H-atomet må altså ifølge målestipulatet gi enten 0 eller $\hbar\sqrt{2}$, i skarp kontrast til det en ville vente fra den klassiske trekantulikheten ovenfor. I neste avsnitt skal vi *vise* hvorfor en “addisjon” av to spinn $\frac{1}{2}$ må gi enten $s = 0$ eller $s = 1$.

13.2 Addisjon av to spinn $\frac{1}{2}$

I stedet for å måle totalspinnet $|\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2|$ og eventuelt z -komponenten S_z av dette, kan vi godt velge å måle z -komponentene av hvert av de to spinnene. (Disse er kompatible; de fire operatorene \hat{S}_{1z} , \hat{S}_{2z} , $\hat{\mathbf{S}}_1^2$ og $\hat{\mathbf{S}}_2^2$ kommuterer alle innbyrdes.) En slik måling vil preparere systemet i én av fire tilstander, som vi kan representere ved abstrakte vektorer på følgende måte:

	$ \uparrow_1 \uparrow_2\rangle$	m_1	m_2	m
\uparrow	\uparrow	$1/2$	$1/2$	1
\uparrow	\downarrow	$1/2$	$-1/2$	0
\downarrow	\uparrow	$-1/2$	$1/2$	0
\downarrow	\downarrow	$-1/2$	$-1/2$	-1

Her står f.eks $|\uparrow\downarrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \equiv |\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle$ for en tilstand der spinn nr 1 er **opp** og spinn nr 2 er **ned**, dvs vi har

$$\hat{S}_{1z}|\uparrow\downarrow\rangle = (\hat{S}_{1z}|\uparrow_1\rangle)|\downarrow_2\rangle = \frac{1}{2}\hbar|\uparrow\downarrow\rangle, \quad (m_1 = \frac{1}{2})$$

$$\hat{S}_{2z}|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow_1\rangle(\hat{S}_{2z}|\downarrow_2\rangle) = -\frac{1}{2}\hbar|\uparrow\downarrow\rangle \quad (m_2 = -\frac{1}{2}).$$

Vi kan også legge merke til at

$$\hat{S}_z|\uparrow\downarrow\rangle = (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z})|\uparrow\downarrow\rangle = 0 \quad (m = m_1 + m_2 = 0).$$

De fire tilstandene er altså også egentilstander til $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$, med kvantetall $m = m_1 + m_2 = 1, 0, 0$ og -1 , som indikert i illustrasjonen ovenfor.

De fire tilstandene ovenfor danner et fullstendig sett av tilstander for dette to-spinn-systemet. De kan derfor godt brukes som en firedimensjonal basis når en skal beskrive en vilkårlig tilstand for dette systemet. De mulige egentilstandene $|s, m\rangle$ til operatorene $\hat{\mathbf{S}}^2$ og \hat{S}_z for totalspinnet kan derfor utvikles i de fire “gamle” tilstandene ovenfor. Vi må vente å finne fire slike “nye” tilstander $|s, m\rangle$, som kan uttrykkes som lineærkombinasjoner av de gamle tilstandene $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$ og $|\downarrow\downarrow\rangle$.

Med m -kvantetallene ovenfor er vi langt på vei mot en løsning av dette “mysteriet”. Disse forteller nemlig at det er mulig å konstruere én “ny” tilstand med $m = 1$, én med $m = -1$ og to med $m = 0$. Og da skal det ikke mye fantasi til for å skjønne at det dreier seg om en **triplett** av tilstander med $s = 1$: $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle$ og $|1, -1\rangle$, samt en **singlett** med $s = 0$: $|0, 0\rangle$.

Alt dette er lett å bekrefte. Fordi den “gamle” tilstanden $|\uparrow\uparrow\rangle$ er den eneste med $m = 1$, må vi vente at denne faktisk er øverste trinn i en tripletstige, med $s = 1$, dvs er en egentilstand til $\hat{\mathbf{S}}^2$ med egenverdi $2\hbar^2$. Dette viser vi vha ligning (T11.37) fra Tillegg 11, på formen

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_z^2 + \hbar\hat{S}_z + \hat{S}_-\hat{S}_+ = \hat{S}_z^2 - \hbar\hat{S}_z + \hat{S}_+\hat{S}_-. \quad (\text{T13.4})$$

Den første av disse variantene gir

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^2|\uparrow\uparrow\rangle &= (\hat{S}_z^2 + \hbar\hat{S}_z + \hat{S}_-\hat{S}_+)|\uparrow\uparrow\rangle \\ &= (\hbar^2 + \hbar\hbar)|\uparrow\uparrow\rangle + \hat{S}_-(\hat{S}_{1+} + \hat{S}_{2+})|\uparrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle \\ &= 2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle, \quad \text{q.e.d.}, \end{aligned} \quad (\text{T13.5})$$

idet $\hat{S}_{1+}|\uparrow_1\rangle = 0$ og $\hat{S}_{2+}|\uparrow_2\rangle = 0$. (Se figuren side 11 i Tillegg 12.) Så om vi preparerer tilstanden $|\uparrow\uparrow\rangle$ ved å måle S_{1z} og S_{2z} , så har vi faktisk også preparert en tilstand med $s = 1$ og $m = 1$. Øverste trinn i tripletstigen er altså $|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$.

Tilsvarende har vi at

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^2|\downarrow\downarrow\rangle &= (\hat{S}_z^2 - \hbar\hat{S}_z + \hat{S}_+\hat{S}_-)|\downarrow\downarrow\rangle \\ &= [\hbar^2 - \hbar(-\hbar)]|\downarrow\downarrow\rangle + \hat{S}_+(\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-})|\downarrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle \\ &= 2\hbar^2|\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (\text{T13.6})$$

Så nederste trinn i tripletstigen er $|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$.

Moralen så langt er at de to gamle tilstandene $|\uparrow\uparrow\rangle$ og $|\downarrow\downarrow\rangle$ med “ekstreme” m -verdier ($m = 1$ og $m = -1$) blir egentilstander også til $\hat{\mathbf{S}}^2$ og \hat{S}_z (i tillegg til at de er egentilstander til $\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{S}_{1z}$ og \hat{S}_{2z}), og danner øverste og nederste trinn i en tripletstige.

Det midterste trinnet i denne stigen kan vi finne ved å bruke stigeoperatoren \hat{S}_- . Fra (T11.52) har vi at

$$\hat{S}_\pm |s, m\rangle = \hbar \sqrt{(s \mp m)(s + 1 \pm m)} |s, m \pm 1\rangle, \quad (\text{T13.7})$$

som gir oss noen nyttige hjelpeformler:

$$\hat{S}_- |1, 1\rangle = \hbar \sqrt{2} |1, 0\rangle \quad (\text{T13.8})$$

og [jf (T12.21)]

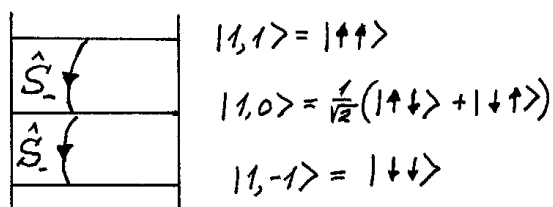
$$\hat{S}_{1-} |\uparrow_1\rangle \equiv \hat{S}_{1-} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \hbar |\downarrow_1\rangle \quad \text{og} \quad \hat{S}_{2-} |\uparrow_2\rangle = \hbar |\downarrow_2\rangle. \quad (\text{T13.9})$$

Dette gir for det midterste trinnet:

$$\begin{aligned} |1, 0\rangle &\stackrel{(8)}{=} \frac{1}{\hbar \sqrt{2}} \hat{S}_- |1, 1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{2}} (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) |\uparrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2}} [(\hat{S}_{1-} |\uparrow_1\rangle) |\uparrow_2\rangle + |\uparrow_1\rangle (\hat{S}_{2-} |\uparrow_2\rangle)] \\ &\stackrel{(9)}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} [|\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle + |\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle] \end{aligned} \quad (\text{T13.10})$$

$$\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (\text{T13.11})$$

Som vi ser er dette en 50/50 lineærkombinasjon av de “gamle” tilstandene med $m = 0$. Dermed er triplettstigen komplett.



En liten oppgave: (1) Sjekk at $|1, 0\rangle$ er normert. (2) Ifølge (T13.7) er $|1, -1\rangle = \hat{S}_- |1, 0\rangle / (\hbar \sqrt{2})$. Sjekk at denne formelen virker som den skal. (3) Dersom tilstanden $|1, 0\rangle$ prepareres vha en måling av \mathbf{S}^2 og S_z , hva er da sannsynligheten for at en påfølgende måling av S_{1z} gir $+\frac{1}{2}\hbar$?

Da gjenstår det bare å finne singletten, den enslige tilstanden med $s = m = 0$ (en stige med bare ett trinn). Også denne må være en lineærkombinasjon av de to tilstandene $|\uparrow\downarrow\rangle$ og $|\downarrow\uparrow\rangle$ med $m = 0$, samtidig som den er ortogonal på $|1, 0\rangle$ (fordi s -kvantetallene er forskjellige). Ortogonalitet oppnås ganske enkelt ved å bytte ut plusstegnet mellom de to leddene i formelen ovenfor med et minustegn:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (\text{T13.12})$$

En liten oppgave: Kontrollér at denne er en egentilstand til $\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_z^2 + \hbar \hat{S}_z + \hat{S}_- \hat{S}_+$ med egenverdi lik null. [Hint: $\hat{S}_+ = \hat{S}_{1+} + \hat{S}_{2+}$.]

Konklusjon og kommentarer

(i) Ved å måle både S_{1z} og S_{2z} kan vi preparere de to spinnene i en av de “gamle” tilstandene, $|\uparrow_1\uparrow_2\rangle$, $|\uparrow_1\downarrow_2\rangle$, $|\downarrow_1\uparrow_2\rangle$, $|\downarrow_1\downarrow_2\rangle$. I disse tilstandene er da S_{1z} og S_{2z} skarpe, og dermed også S_z .

(ii) For disse “gamle” tilstandene er \mathbf{S}^2 uskarp, unntatt for $|\uparrow_1\uparrow_2\rangle$ og $|\downarrow_1\downarrow_2\rangle$, som jo er øverste og nederste trinn i triplettstigen. Grunnen til at \mathbf{S}^2 er uskarp for de øvrige “gamle” ($|\uparrow_1\downarrow_2\rangle$ og $|\downarrow_1\uparrow_2\rangle$) er at $\hat{\mathbf{S}}^2$ ikke kommuterer med \hat{S}_{1z} og \hat{S}_{2z} .

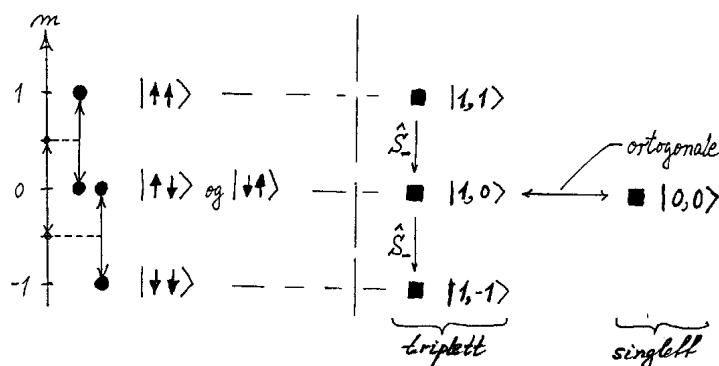
(iii) Måler vi i stedet S_z og $|\mathbf{S}|$, prepareres dette spinsystemet i en av de “nye” tilstandene, enten i en av triplettstilstandene

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |\uparrow_1\uparrow_2\rangle, \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\uparrow_2\rangle), \\ |1, -1\rangle &= |\downarrow_1\downarrow_2\rangle, \end{aligned} \quad (\text{triplett}) \quad (\text{T13.13})$$

eller i singletten,

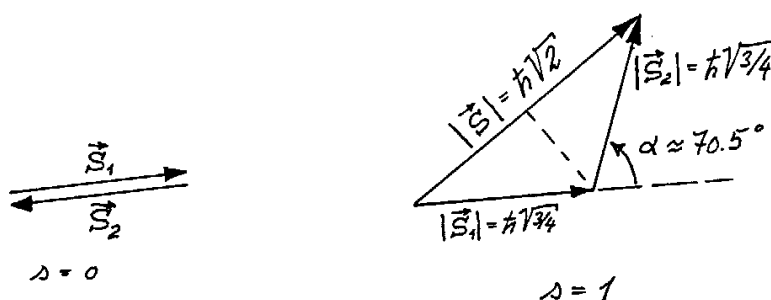
$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle). \quad (\text{singlett}) \quad (\text{T13.14})$$

Unntatt for de to tilstandene $|\uparrow_1\uparrow_2\rangle$ og $|\downarrow_1\downarrow_2\rangle$ er S_{1z} og S_{2z} her uskarpe. Figuren nedenfor gir en illustrasjon av både de gamle og de nye tilstandene.



Husk: De “gamle” tilstandene til venstre prepareres ved å måle S_{1z} og S_{2z} separat. De “nye” til høyre prepareres ved å måle størrelsen $|\mathbf{S}|$ og z -komponenten S_z av total-spinnet.

(iv) Singletten svarer til $\mathbf{S} = 0$, dvs at de to like store spinnene \mathbf{S}_1 og \mathbf{S}_2 er antiparallele. Tripletten svarer til at \mathbf{S}_1 og \mathbf{S}_2 danner en vinkel $\alpha = 2 \arccos \sqrt{2/3} \approx 70.5^\circ$ med hverandre. Dette er det beste de to spinnene kan klare når det gjelder å være parallelle.



(v) De gamle og de nye settene av tilstander er begge brukbare som basis-sett for dette spinnsystemet. Vi merker oss imidlertid at tripllett- og singllett-tilstandene er hhvis symmetriske og antisymmetriske mhp ombytte av partikkelindeksene 1 og 2. Dette har betydning når de to partiklene (fermionene) er identiske. Den totale bølgefunksjonen skal da være antisymmetrisk mhp ombytte. Dette kan oppnås ved å kombinere en tripllett spinnstilstand med en romlig bølgefunksjon som er antisymmetrisk mhp ombytte av partikkelindeksene. Alternativt krever den antisymmetriske singllett-spinnstilstanden en romlig bølgefunksjon som er symmetrisk med hensyn på ombytte av partikkelindeksene.

En liten oppgave: Uttrykk de “gamle” tilstandene $|\uparrow_1\downarrow_2\rangle$ og $|\downarrow_1\uparrow_2\rangle$ ved de “nye” tilstandene $|0,0\rangle$ og $|1,0\rangle$. Hvis vi preparerer $|\uparrow_1\downarrow_2\rangle$ ved en måling av S_{1z} og S_{2z} , hva er da de mulige målesresultatene ved en påfølgende måling av S_z og S^2 , og hva er sannsynlighetene for disse måleresultatene?

13.3 Addisjon av dreieimpulser generelt

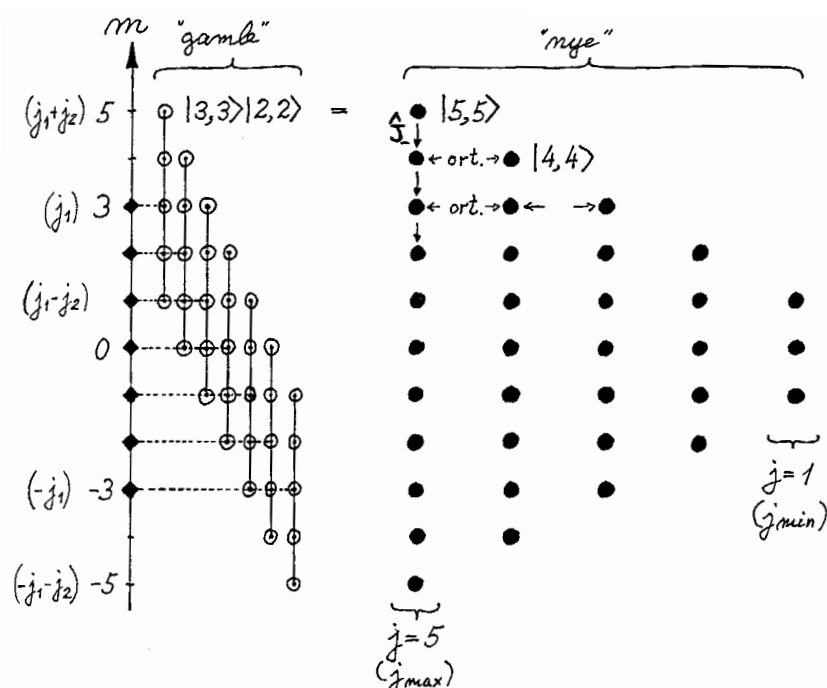
Det er ganske enkelt å generalisere opplegget ovenfor til å kombinere dreieimpulser i sin alminnelighet. Dersom

$$|j_1, m_1\rangle \quad (m_1 = -j_1, -j_1 + 1, \dots, j_1)$$

er en multipllett av egentilstander til dreieimpulsoperatorene $\hat{\mathbf{J}}_1^2$ og \hat{J}_{1z} , og

$$|j_2, m_2\rangle \quad (m_2 = -j_2, -j_2 + 1, \dots, j_2)$$

er en multipllett av egentilstander til $\hat{\mathbf{J}}_2^2$ og \hat{J}_{2z} , så har vi et sett med $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ “gamle” tilstander av typen $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$. Kvantetallene m_1, m_2 og $m = m_1 + m_2$ til disse tilstandene er illustrert til venstre i figuren nedenfor for tilfellet $j_1 = 3, j_2 = 2$, som gir $7 \times 5 = 35$ gamle tilstander.



De “ekstreme” verdiene av m er her $m = j_1 + j_2 = 3 + 2 = 5$ for tilstanden $|3, 3\rangle|2, 2\rangle$ og $m = -j_1 - j_2 = -3 - 2 = -5$ for tilstanden $|3, -3\rangle|2, -2\rangle$. Det er enkelt kontrollere at begge disse tilstandene er egentilstander til $\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2)^2$ med kvantetall $j = j_1 + j_2 = 5$. (Analogt med (T13.5) og (T13.6) trenger en bare å operere med $\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_z^2 \pm \hbar\hat{J}_\pm + \hat{J}_\mp\hat{J}_\pm$.) Følgelig er disse to tilstandene henholdsvis øverste trinn ($|5, 5\rangle$), og nederste trinn ($|5, -5\rangle$) i en stige for $j = j_1 + j_2 = 5$. De øvrige trinnene i denne stigen kan vi finne ved å operere med \hat{J}_- .

Det nest øverste trinnet i denne stigen, $|5, 4\rangle$, må være en lineærkombinasjon av de to gamle tilstandene med $m = 4$, som er $|3, 3\rangle|2, 1\rangle$ og $|3, 2\rangle|2, 2\rangle$. Den andre lineærkombinasjonen av disse to — ortogonal på den første — blir toppen av en stige for $j = j_1 + j_2 - 1 = 4$, altså $|4, 4\rangle$. Dette kan kontrolleres ved å operere med $\hat{\mathbf{J}}^2$. Så er det bare å bruke \hat{J}_- til å finne de øvrige trinnene i denne stigen.

Vi har nå “brukt opp” de gamle tilstandene med $|m| \geq 4$. For $m = 3$ har vi tre gamle tilstander. De nye tilstandene $|5, 3\rangle$ og $|4, 3\rangle$ er lineærkombinasjoner av disse tre gamle. Den tredje lineærkombinasjonen av disse tre — ortogonal på $|5, 3\rangle$ og $|4, 3\rangle$ — er toppen av en stige med $j = j_1 + j_2 - 2 = 3$.

For $m = 2$ har vi fire gamle. Tre lineærkombinasjoner av disse går med til de tre stigenes for $j = 5, 4$ og 3 . Den fjerde lineærkombinasjonen blir toppen av en stige med $j = 2$.

Som figuren viser, øker antall gamle til 5 for $m = j_1 - j_2 = 1$, slik at det også her dukker opp en ny stige, med $j = j_1 - j_2$. Men dette er siste gang det dukker opp en ny stige; for $m = j_2 - j_1 - 1 = 0$ er antallet gamle uendret og det dukker ikke opp flere stiger. Da er alle de gamle tilstandene oppbrukt. I dette eksemplet ender vi derfor opp med 5 multipletter med hhvis 11, 9, 7, 5 og 3 nye tilstander, som alle er egentilstander til $\hat{\mathbf{J}}^2$ og \hat{J}_z . Som figuren illustrerer er antallet nye lik antallet gamle.

Det hører med i bildet at bruken av stigeoperatoren \hat{J}_- bestemmer koeffisientene i de nevnte lineærkombinasjonene, som utgjør de “nye” tilstandene uttrykt ved de gamle. Dette så vi et eksempel på ved addisjonen av to spinn $\frac{1}{2}$. Disse koeffisientene kalles **Clebsch–Gordan-koeffisienter**.

Vi får her illustrert de generelle reglene for addisjon av dreieimpulser, som er: Ved “addisjon av j_1 og j_2 ” er

$$j_{\max} = j_1 + j_2, \quad (T13.15)$$

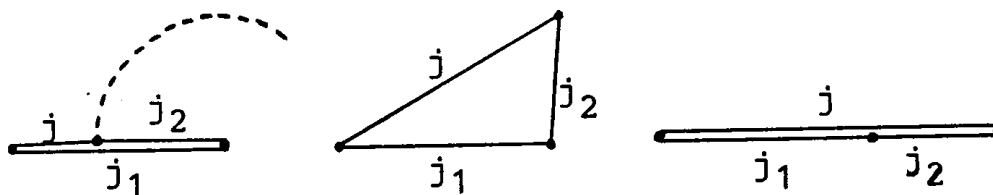
$$j_{\min} = |j_1 - j_2|,$$

og de tillatte j -verdiene i dette intervallet er

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2. \quad (T13.16)$$

Vi merker oss at dersom j_1 og j_2 begge er halvtallige, eller hvis begge er heltallige, så blir de mulige j -kvantetallene heltallige. I motsatt fall, dersom det ene er heltallig og det andre halvtallig, blir det resulterende kvantetallet j halvtallig. Merk også at det er *kvantetallene* som oppfyller en trekantulikhets denne gangen (ikke størrelsene $|\hat{\mathbf{J}}_1|$ og $|\hat{\mathbf{J}}_2|$, slik vi hadde klassisk):

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2. \quad \left(\begin{array}{l} \text{(trekant-} \\ \text{ulikheten)} \end{array} \right) \quad (T13.17)$$



Denne metoden lar seg lett generalisere til mer enn to dreieimpulser. En kombinerer da først \mathbf{J}_1 og \mathbf{J}_2 , deretter resultatanten \mathbf{J}_{12} av disse med \mathbf{J}_3 , osv.

13.4 Kommuteringsregler

La oss summere opp kommuteringsreglene for de to dreieimpulsene som ble addert. Analogt med (T13.2) kommuterer de to operatorene $\hat{\mathbf{J}}_1$ og $\hat{\mathbf{J}}_2$. Siden de tre operatorene $\hat{\mathbf{J}}_1$, $\hat{\mathbf{J}}_2$ og $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ alle oppfyller dreieimpulsalgebraen, følger det på vanlig måte at

$$[\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_1] = 0, \quad [\hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{\mathbf{J}}_2] = 0 \quad \text{og} \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}] = 0.$$

Det er et poeng at også $\hat{\mathbf{J}}_1^2$ og $\hat{\mathbf{J}}_2^2$ kommuterer med $\hat{\mathbf{J}}^2$ og \hat{J}_z :

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}_1^2] = [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2] = 0, \quad [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}_1^2] = [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}_2^2] = 0.$$

[Vis dette ved å bruke bl.a at $\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2$.] I de “nye” tilstandene $|j, m\rangle$ er altså ikke bare $\mathbf{J}^2 = \hbar^2 j(j+1)$ og $J_z = \hbar m$ skarpe, men også $\mathbf{J}_1^2 = \hbar^2 j_1(j_1+1)$ og $\mathbf{J}_2^2 = \hbar^2 j_2(j_2+1)$. En sier gjerne at j_1 og j_2 er “gode kvantetall” i de nye tilstandene, i tillegg til j og m .

Vi skal også merke oss at “koblingsleddet” $\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2$ vil ha skarpe verdier i de “nye” tilstandene. Vha relasjonen $\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{J}}_1^2 - \hat{\mathbf{J}}_2^2)$ finner vi at dette koblingsleddet kommuterer med alle operatorene $\hat{\mathbf{J}}_1^2$, $\hat{\mathbf{J}}_2^2$, $\hat{\mathbf{J}}^2$ og \hat{J}_z :

$$[\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{\mathbf{J}}_1^2] = [\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{\mathbf{J}}_2^2] = [\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{\mathbf{J}}^2] = [\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_z] = 0. \quad (\text{T13.18})$$

Og for en tilstand med kvantetall j, m, j_1 og j_2 er da

$$\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{J}_1^2 - \mathbf{J}_2^2) = \frac{1}{2}\hbar^2[j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)] \quad (\text{T13.19})$$

skarp.

Side 4 ble det understreket at $\hat{\mathbf{S}}^2$ ikke kommuterer med \hat{S}_{1z} og \hat{S}_{2z} . Dette viser vi slik:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_{1z}] &= [\hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + 2(\hat{J}_{1x}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1y}\hat{J}_{2y} + \hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}), \hat{J}_{1z}] \\ &= 0 + 0 + 2[\hat{J}_{1x}, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2x} + 2[\hat{J}_{1y}, \hat{J}_{1z}]\hat{J}_{2y} + 0 \\ &= -2i\hbar\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2x} + 2i\hbar\hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y} = 2i\hbar(\hat{\mathbf{J}}_1 \times \hat{\mathbf{J}}_2)_z. \end{aligned} \quad (\text{T13.20})$$

Denne kan generaliseres til

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}_1] = 2i\hbar(\hat{\mathbf{J}}_1 \times \hat{\mathbf{J}}_2), \quad (\text{T13.21})$$

og da kan du sikkert finne et enkelt argument for at

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}_2] = -2i\hbar(\hat{\mathbf{J}}_1 \times \hat{\mathbf{J}}_2). \quad (\text{T13.22})$$

Fra $\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2$ følger det da at

$$[\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{\mathbf{J}}_1] = i\hbar(\hat{\mathbf{J}}_1 \times \hat{\mathbf{J}}_2) \quad \text{og} \quad [\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{\mathbf{J}}_2] = -i\hbar(\hat{\mathbf{J}}_1 \times \hat{\mathbf{J}}_2), \quad (\text{T13.23})$$

slik at

$$[\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{\mathbf{J}}] = 0. \quad (\text{T13.24})$$

Dette ble mange formler, men det kan være greit å ha dem samlet på et brett, slik at vi bare kan henvise til dette avsnittet når vi får bruk for dem.

13.5 Addisjon av bandedreieimpuls og spinn

Et viktig eksempel (bl.a når vi skal se nærmere på hydrogenatomet) er addisjon av bandedreieimpulsen \mathbf{L} og spinnnet \mathbf{S} til elektronet:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (\text{T13.25})$$

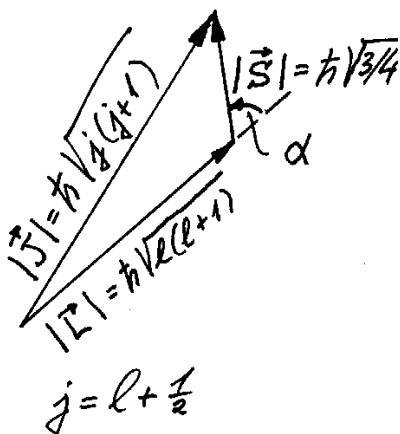
Trekantulikheten (T13.17) gir da *halvtallige* verdier for kvantetallet j for total-dreieimpulsen $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$:

$$|l - \frac{1}{2}| \leq j \leq l + \frac{1}{2}.$$

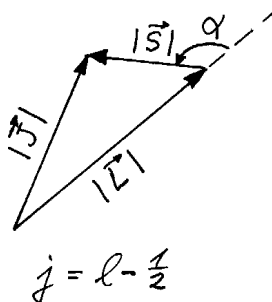
For $l = 0$ er $\mathbf{J} = \mathbf{S}$ og $j = s = \frac{1}{2}$, slik at vi har to tilstander, med $J_z = \hbar m = \pm \frac{1}{2}\hbar$. (Vi bruker her kvantetallet m for å angi z -komponenten av den totale dreieimpulsen.)

For $l \geq 1$ har vi *to* muligheter for j , nemlig $j = l + \frac{1}{2}$ og $j = l - \frac{1}{2}$.

$j = l + \frac{1}{2}$: I dette tilfellet er \mathbf{L} og \mathbf{S} så "parallele" som det går an (for en gitt l). Som illustrert i figuren, blir vinkelen α mellom \mathbf{L} og \mathbf{S} slett ikke lik null:



$j = l - \frac{1}{2}$: I dette tilfellet er \mathbf{L} og \mathbf{S} så "antiparallele" som det går an (for en gitt l):



I begge disse tilfellene er både j og l gode kvantetall. Dette betyr bl.a at vinkelen α mellom \mathbf{L} og \mathbf{S} kan beregnes med utgangspunkt i relasjonen $\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + 2\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} + \mathbf{S}^2$, som gir

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) = \frac{1}{2}\hbar^2[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]. \quad (\text{T13.26})$$

Denne relasjonen (som er et spesialtilfelle av (T13.19)) får vi bruk for senere.

13.6 Addisjon av flere dreieimpulser

Reglene ovenfor for addisjon av dreieimpulser kan også brukes når det er mer enn to bidrag til den totale dreieimpulsen for et system:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_3 + \dots$$

Vi kan da starte med å kombinere \mathbf{J}_1 og \mathbf{J}_2 til $\mathbf{J}_{12} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$. De mulige kvantetallene j_{12} begrenses da av trekant-ulikheten:

$$|j_1 - j_2| \leq j_{12} \leq j_1 + j_2.$$

Deretter kombinerer vi \mathbf{J}_{12} med \mathbf{J}_3 , og bruker igjen trekant-ulikheten. Slik kan vi fortsette, og vil ende opp med å finne alle mulige verdier av det resulterende j -kvantetallet. Et eksempel er

Kjernespin

Med unntak av vanlig hydrogen er alle atomkjerner sammensatt av Z protoner og $N = A - Z$ nøytroner, der A er massetallet. Den totale dreieimpulsen til en kjerne A_ZX kalles kjernespinnet og angis med et spinnkvantetall I . Hver for seg har altså protonet og nøytronet begge $I = \frac{1}{2}$.

La oss se hva reglene for addisjon av dreieimpulser har å si om spinnkvantetallet I for den neste i rekken, **deuteronet** — den stabile kjernen i **deuterium**, 2_1H , “tungt” hydrogen.

Det er i prinsippet tre bidrag til den totale dreieimpulsen \mathbf{I} (spinn) til deuteronet, nemlig spinnene \mathbf{S}_p og \mathbf{S}_n til protonet og nøytronet og en eventuell banedreieimpuls \mathbf{L} til proton-nøytron-systemet:

$$\mathbf{I} = \mathbf{S}_p + \mathbf{S}_n + \mathbf{L}.$$

Om vi først tenker oss de to spinnene kombinert til $\mathbf{S} = \mathbf{S}_p + \mathbf{S}_n$, så kan dette resultere i enten en triplett, karakterisert ved kvantetallet $S = 1$, eller en singlett med $S = 0$.¹ Her er det altså to muligheter. Ut fra reglene for addisjon av dreieimpulser kan vi dessuten ikke utelukke at proton-nøytron-systemet i grunntilstanden har en banedreieimpuls, karakterisert ved et heltallig kvantetall L . Når denne kombineres med $S = 0$ eller $S = 1$, følger det at deuteronet må ha et *heltallig* kvantetall I . Lenger enn dette kommer vi ikke med disse reglene.

¹Når spinnene eller banedreieimpulsene til flere partikler adderes, er det vanlig å bruke store bokstaver for kvantetallene,

$$|\mathbf{S}| = \hbar\sqrt{S(S+1)}, \quad |\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)}.$$

Det er også vanlig å bruke bokstavene S,P,D,F,G,H for tilstander med $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, analogt med betegnelsene s,p,d,f,g,h for énpartikkeltilstander med $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

Eksperimentelt viser det seg at spinnene til protonet og nøytronet danner en triplet, $S = 1$, mens det resulterende dreieimpulskvantetallet for deuteronet er $I = 1$ (spinn 1). Addisjonsregelen begrenser da banedreieimpulskvantetallet til verdiene $L = 0, 1, 2$. (Alle disse kan kombineres med $S = 1$ til resultanten $I = 1$.) Her er det slik at $L = 1$ utelukkes av andre grunner (som vi ikke kan gå inn på her). Dermed gjenstår to mulige tilstander, én med $L = 0$ og en med $L = 2$. Eksperimentelt viser det seg at deuteronet er en superposisjon av disse to; $L = 0$ er det dominerende bidraget, men det er også et lite innslag av $L = 2$, som gjør at grunntilstanden for deuteronet avviker svakt fra å være kulesymmetrisk. Dette avviket fra kulesymmetri er et eksperimentelt faktum.²

Ut fra diskusjonen ovenfor skjønner vi nå at spinnkvantetallene (I) for tyngre kjerner må være heltallige for like massetall A og halvtallige for odde A .

Av kjernene med like massetall viser det seg at nesten alle har $I = 0$. Unntakene er kjerner hvor både N og Z er odde. Ved siden av deuteronet ${}^2_1\text{H}$ ($I = 1$) er det bare noen få slike kjerner som er stabile. To av disse er ${}^6_3\text{Li}$ ($I = 1$) og ${}^{14}_7\text{N}$ ($I = 1$). Men det finnes selvsagt mange *ustabile* "odde-odde"-kjerner. Et eksempel er kobolt-isotopen ${}^{60}_{27}\text{Co}$ med en levetid på vel 5 år, som har $I = 5$.

Eksempler på kjerner med odde massetall er jern-isotopene ${}^{55}_{26}\text{Fe}$ ($I = 3/2$, $\tau = 2.7$ år) og ${}^{57}_{26}\text{Fe}$ ($I = 1/2$, stabil), og den stabile kobolt-isotopen ${}^{59}_{27}\text{Co}$, som har $I = 7/2$. Et annet eksempel er den nokså sjeldne helium-isotopen ${}^3_2\text{He}$ (helium-3) som har $I = 1/2$.

Av det som er sagt ovenfor følger det at alle kjerner hvor både Z og N er like har spinn null ($I = 0$). Et eksempel er α -partikkelen, kjernen i ${}^4_2\text{He}$.

Resulterende spinn, banedreieimpuls og total dreieimpuls for atomære elektroner

Som et eksempel kan vi se på karbon, med elektronkonfigurasjonen $1s^2 2s^2 2p^2$ i grunntilstanden. Spinnene og banedreieimpulsene i de lukkede $1s$ - og $2s$ -skallene adderer begge til null. Kvantetallene S , P og J for totalt spinn, total banedreieimpuls og total dreieimpuls for de seks elektronene i karbon bestemmes altså av de to elektronene i $2p$ -skallet.

For de to spinnene er det to muligheter; de kan enten danne en singlett ($S = 0$) eller en triplet ($S = 1$). Dersom de er i singlett-tilstanden, så husker vi fra den eksplisitte konstruksjonen av denne tilstanden at den er antisymmetrisk med hensyn på ombytte av de to elektronene. Pauli-prinsippet krever da at den *romlige* tilstanden er symmetrisk. (Tilstanden for de to identiske elektronene skal som vi husker totalt sett være antisymmetrisk med hensyn på ombytte.) Ved den eksplisitte koblingen av dreieimpulsene $l_1 = 1$ og $l_2 = 1$ finner en at de romlige tilstandene for $L = 1$ er antisymmetriske, mens en for $L = 0$ og $L = 2$ har ombytte-*symmetri*. De to siste er altså forenlige med singlett spinn. De resulterende tilstandene betegnes med henholdsvis

$${}^1S_0 \quad \text{og} \quad {}^1D_2.$$

Her angir den øvre indeksen spinn-multiplisiteten $2S + 1$. Bokstavene S og D angir at det totale banedreieimpulskvantetallet L er henholdsvis null og 2. Den nedre indeksen angir J -kvantetallet, som her er lik L , siden $S = 0$. Mønsteret er altså

$${}^{2S+1}(L - \text{bokstav})_J.$$

²Det kan kanskje virke litt forvirrende at banedreieimpulsene ikke er skarpt definert. Dette henger sammen med at den sterke kraften beskrives av en modell med et ikke-sentralt potensial. Da kommuterer ikke \hat{L} med Hamilton-operatoren, og L blir ikke et såkalt "godt kvantetall".

Den andre muligheten er at spinnene danner en ombytte-symmetrisk triplet ($S = 1$). Den eneste muligheten for L er da $L = 1$, slik at tilstanden karakteriseres ved 3P_J . Kombinering av $S = 1$ og $L = 1$ gir tre muligheter, $J = 0, 1, 2$. Eksperimenter viser at den laveste energien for karbonatomet (og dermed grunntilstanden) svarer til kvantetallene $S = 1$, $L = 1$ og $J = 0$. Så grunntilstanden for karbon kan betegnes som 3P_0 .

Tabellen nedenfor viser konfigurasjon og resulterende kvantetall L, S og J for et utvalg av grunnstoffer. Her ser vi blant annet at helium, neon og alle de andre edelgassene har 1S_0 ,

Grunntilstandskonfigurasjon for noen grunnstoffer

Z	Grunnstoff	Konfigurasjon	Betegnelse
1	H	1s	${}^2S_{1/2}$
2	He	(1s) ²	1S_0
3	Li	[He](2s)	${}^2S_{1/2}$
4	Be	[He](2s) ²	1S_0
5	B	[He](2s) ² (2p)	${}^2P_{1/2}$
6	C	[He](2s) ² (2p) ²	3P_0
7	N	[He](2s) ² (2p) ³	${}^4S_{3/2}$
8	O	[He](2s) ² (2p) ⁴	3P_2
9	F	[He](2s) ² (2p) ⁵	${}^2P_{3/2}$
10	Ne	[He](2s) ² (2p) ⁶	1S_0
11	Na	[Ne](3s)	${}^2S_{1/2}$

altså totalspinn $S = 0$, total banedreieimpuls $L = 0$ og dermed også total dreieimpuls $J = 0$. Ut fra dette er det kanskje ikke så rart at alkalimetallene natrium og kalium osv, med ett elektron i en s-tilstand utenfor fulle skall, får samme kvantetall som hydrogen, nemlig ${}^2S_{1/2}$.