

Két 1/2-es spinből álló rendszer teljes spinje (spinek összeadása)

Két darab 1/2 spinű részecskéből álló rendszert írunk le. Ezek lehetnek elektronok, vagy protonok, vagy akármilyen elemi vagy nem elemi részecskék. A spin a saját perdületüket jelenti. A spin eredete és elméleti bevezetése a kvantummechanika órák anyaga.

Egy 1/2-es spinű részecske olyan kvantumrendszer, melynek hullámfüggvényének a térbeli viselkedését leíró részén túl van még két állapota. Jelen esetben a térfüggést nem vizsgáljuk és gyakran nem is lényeges. Ilyenkor a feles spin olyan rendszer melynek két állapota van. Ezeket a következőképpen jelöljük:

$$\text{egyik állapot} = |\uparrow\rangle \text{ vagy } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{másik állapot} = |\downarrow\rangle \text{ vagy } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Ezen állapotok valamilyen külső kölcsönhatás nélkül azonos energiájúak, de külső térben (pl. a perdülethe mindig kapcsolódó mágneses momentum miatt mágneses térben) ez a degeneráció felbomlik. Továbbá a két állapot azonos perdület nagysággal rendelkezik. A spinek kvantummechanikai vektoroperátorok, ezért kezelésük elég bonyolult, de ebben a szövegben ezt a lehető legegyszerűbben kezeljük. A vektoroperátor nagyságát az abszolútérték négyzet operátor sajátértékét jelenti.

1. Egy egykettedes spin vektoroperátorának matematikai leírása

röviden:

Egy spin állapotai az \vec{S}^2 és az S_z operátorok sajátfüggvényei lehetnek, melyeket a fent leírt módon jelölünk. Ezért a spin leírásához ezen két operátor sajátértékeit elég megadni a legtöbb esetben. Ez kihagyja a hullámfüggvények leírását, de sokszor elegendő. Az 1/2-es spin típusa, vagy kvantumszáma = 1/2. Ez a szám minden további sajátértéket meghatároz, ahogy a kvantummechanika órán tanultuk:

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 |\uparrow\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2 |\uparrow\rangle & \vec{S}^2 |\downarrow\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2 |\downarrow\rangle \\ S_z |\uparrow\rangle &= \frac{1}{2}\hbar |\uparrow\rangle & S_z |\downarrow\rangle &= -\frac{1}{2}\hbar |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

részletesen:

Számolásaink alapja az, hogy egy 1/2-es spin vektoroperátorát a Pauli-mátrixokkal írjuk le.

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) = \frac{\hbar}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$$

Ezen ismeretek alapján ki lehet számolni, hogyan hatnak az egykettedes spin egyes komponensei a két

állapotra.

$$\begin{aligned}
 S_x |\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle & S_x |\downarrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \\
 S_y |\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = i\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle & S_y |\downarrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -i\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -i\frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \\
 S_z |\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle & S_z |\downarrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle
 \end{aligned}$$

Ebből az látszik, hogy a két állapot az S_z operátor sajátállapota $\frac{1}{2}$ és $-\frac{1}{2}$ sajátértékkel, de az S_x és S_y operátorok egyiket a másik számszorosába viszik át (billentik a spint).

A spin vektoroperátor négyzete a Pauli-mátrixok négyzeteinek összegével lesz arányos. A Pauli-mátrixok négyzete, viszont, mindig az egységoperátor, ezért az

$$\vec{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbf{1} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \mathbf{1}.$$

Általában az \vec{S}^2 sajátértéke $s(s+1)\hbar^2$, az $s = 1/2$ eseten kívül is. Mostantól \vec{S} a kétrészecskes spin operátort fogja jelenteni.

2. Két egykettedes spinből álló rendszer

Az állapotok jelölése

A két egyrészecske spin állapotait, azaz a két egykettedes spinű részecske állapotait külön-külön jelöljük $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1$, $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1$ és $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2$, $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2$ -vel. Az alsó index jelöli a részecske sorszámát. Az egyes részecskék térbeli viselkedését ismét elhagyjuk.

A kétrészecske állapotot egy *ket* típusú jeöléssel is leírhatjuk: $|s_{1z}, s_{2z}\rangle$. Ilyenkor egy jelölésbe helyezük mindkét spint, az első helyen beírt jel jelöli az első részecskét, a második helyen leírt a második részecskét. s_{1z} lehet \uparrow vagy \downarrow , és a második spin z -komponense is ugyanígy.

Logikailag a két egykettedes spin egyenként két irányban állhat, így összesen négy állapotot lehet előállítani. Ezek kétszines hullámfüggvények. Egyszerűen ezek: $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$, $|\downarrow\downarrow\rangle$.

A kétrészecskes állapotok előállításának elve

Ilyenkor a teljes rendszer spinje, azaz sajátperdülete (másfajta perdület nincs is most, hiszen nincs térfüggés):

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2.$$

Ez a perdület megmaradó mennyiség. Ezért ennek abszolútérték négyzete és z -komponense felcserélhető a Hamilton-operátorral, ezért sajátfüggvényei a Hamilton-operátor sajátfüggvényei is, legalábbis annak spintől függő részét megadják. Ezért meg kell keressük a teljes spin négyzetének \vec{S}^2 és a harmadik komponensének, az $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ -nek a sajátfüggvényeit.

A kétrészecske-sajátállapotok keresése

Az $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ állapotok sajátállapotai a teljes spinnek is (négyzet és z-komponens). A $|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$ viszont nem. De egy kvantumrendszerben az állapotok lineáris kombinációi is lehetséges állapotok, ezért a kétrészecskés sajátállapotokat ezen egyrészecskés sajátállapotokból egyszerűen képzett kétrészecskés állapotok lineáris kombinációjaként fogjuk előállítani.

Annak belátásához, hogy a $Az |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ állapotok sajátállapotai a spin négyzet és a z-komponens operátoroknak, meg kell nézni hogyan hat S^2 és S_z ezekre az állapotokra.

Az első spinre ható operátorok nem hatnak a másodikra, és a második helyen álló részecske spinjének operátorai pedig csak a második spinre hatnak, az elsőre nem.

A teljes spin z-komponense ($S_{1z} + S_{2z}$)

Az S_z a két egyrészecskés operátor összege, $S_z = S_{1z} + S_{2z}$. A tagok csak egy részecske spinállapotára hatnak, de arra pedig úgy hogy egy számmal megszorozzák (jelen esetben $\pm 1/2$ -del). A másik részét a kétszines hullámfüggvénynek nem bántja. Ezért az S_z -nek a fenti 4 állapot (kétszines hullámfüggvény) mind sajátállapota.

$$\begin{aligned} (S_{1z} + S_{2z})|\uparrow\uparrow\rangle &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\hbar|\uparrow\uparrow\rangle = 1 \cdot \hbar|\uparrow\uparrow\rangle & (S_{1z} + S_{2z})|\uparrow\downarrow\rangle &= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)\hbar|\uparrow\downarrow\rangle = 0 \cdot \hbar|\uparrow\downarrow\rangle \\ (S_{1z} + S_{2z})|\downarrow\uparrow\rangle &= \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\hbar|\downarrow\uparrow\rangle = 0 \cdot \hbar|\downarrow\uparrow\rangle & (S_{1z} + S_{2z})|\downarrow\downarrow\rangle &= \left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)\hbar|\downarrow\downarrow\rangle = -1 \cdot \hbar|\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

A teljes spin négyzete ($\vec{S}_1 + \vec{S}_2$)²

Kicsit bonyolultabb a helyzet az abszolútérték négyzet operátor esetén.

$$\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = S_1^2 + 2\vec{S}_1\vec{S}_2 + S_2^2 = S_1^2 + 2(S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}) + S_2^2.$$

Itt a két egyrészecske abszolútérték négyzet operátor ismét csak az egyik részecske-részre hat és arra pedig sajátállapotot talál. S_1^2 és S_2^2 is $\frac{3}{4}\hbar^2$ -szer az egységoperátor azon a részen, ahol hat (arra a részecskére, amir hat). Ezt az előzőekben már láttuk. A vegyszorzat azonban egyrészt mindkét részre hat, másrészt az x és y komponensek billentik az egyrészecske spineket. Az S_{nx} a kötelező ($\hbar/2$ szorzás mellett) szimplán billent, az S_{ny} lefelé i -vel szorozva, felfelé $-i$ -vel szorozva billent. ($n = 1, 2$ a részecske sorszámát jelenti.) Ezért ezt végigszámoljuk az egyes tagok hatásait.

$$\begin{aligned} S_1^2 &= \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_{1x}^2 + \sigma_{1y}^2 + \sigma_{1z}^2) = \frac{\hbar^2}{4} 3 \cdot \mathbb{1} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_1 \\ S_2^2 &= \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_2 \end{aligned}$$

Az S_{nx} operátorok külön-külön billentik a spineket:

$$\begin{aligned} S_{1x}S_{2x}|\uparrow\uparrow\rangle &= S_{1x}\frac{\hbar}{2}|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\downarrow\rangle & S_{1x}S_{2x}|\uparrow\downarrow\rangle &= S_{1x}\frac{\hbar}{2}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\uparrow\rangle \\ S_{1x}S_{2x}|\downarrow\uparrow\rangle &= S_{1x}\frac{\hbar}{2}|\downarrow\downarrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\downarrow\rangle & S_{1x}S_{2x}|\downarrow\downarrow\rangle &= S_{1x}\frac{\hbar}{2}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

Az S_{ny} operátorok külön-külön billentik a spineket és még bejönnek az i -s szorzók:

$$\begin{aligned} S_{1y}S_{2y}|\uparrow\uparrow\rangle &= iS_{1y}\frac{\hbar}{2}|\uparrow\downarrow\rangle = i^2\frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\downarrow\rangle = -\frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\downarrow\rangle & S_{1y}S_{2y}|\uparrow\downarrow\rangle &= -iS_{1y}\frac{\hbar}{2}|\uparrow\uparrow\rangle = i(-i)\frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\uparrow\rangle \\ S_{1y}S_{2y}|\downarrow\uparrow\rangle &= iS_{1y}\frac{\hbar}{2}|\downarrow\downarrow\rangle = (-i)i\frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\uparrow\rangle & S_{1y}S_{2y}|\downarrow\downarrow\rangle &= -iS_{1y}\frac{\hbar}{2}|\downarrow\uparrow\rangle = (-i)(-i)\frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\uparrow\rangle = -\frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

Az S_{nz} sajátállapotokat fog találni:

$$\begin{aligned} S_{1z}S_{2z}|\uparrow\uparrow\rangle &= S_{1z}\frac{\hbar}{2}|\uparrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\uparrow\rangle & S_{1z}S_{2z}|\uparrow\downarrow\rangle &= -1S_{1z}\frac{\hbar}{2}|\uparrow\downarrow\rangle = 1(-1)\frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\downarrow\rangle = -\frac{\hbar^2}{4}|\uparrow\downarrow\rangle \\ S_{1z}S_{2z}|\downarrow\uparrow\rangle &= S_{1z}\frac{\hbar}{2}|\downarrow\uparrow\rangle = -\frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\uparrow\rangle & S_{1z}S_{2z}|\downarrow\downarrow\rangle &= -1S_{1z}\frac{\hbar}{2}|\downarrow\downarrow\rangle = (-1)(-1)\frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\downarrow\rangle = \frac{\hbar^2}{4}|\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Ezekkel ki tudjuk számolni az \vec{S}^2 hatását az egyrészecske sajátállapotokból összeállított állapotokra.

$$\begin{aligned} S^2 &= S_1^2 + 2(S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}) + S_2^2 \\ S^2|\uparrow\uparrow\rangle &= \frac{\hbar^2}{4}(3|\uparrow\uparrow\rangle + 2(|\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\rangle) + 3|\uparrow\uparrow\rangle) = 2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle \\ S^2|\uparrow\downarrow\rangle &= \frac{\hbar^2}{4}(3|\uparrow\downarrow\rangle + 2(|\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle) + 3|\uparrow\downarrow\rangle) = \hbar^2|\uparrow\downarrow\rangle + \hbar^2|\downarrow\uparrow\rangle \\ S^2|\downarrow\uparrow\rangle &= \frac{\hbar^2}{4}(3|\downarrow\uparrow\rangle + 2(|\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) + 3|\downarrow\uparrow\rangle) = \hbar^2|\downarrow\uparrow\rangle + \hbar^2|\uparrow\downarrow\rangle \\ S^2|\downarrow\downarrow\rangle &= \frac{\hbar^2}{4}(3|\downarrow\downarrow\rangle + 2(|\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) + 3|\downarrow\downarrow\rangle) = 2\hbar^2|\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Ezek szerint $|\uparrow\downarrow\rangle$ és $|\downarrow\uparrow\rangle$ nem sajátállapotai a kétszín-négyzet operátornak.

Keverék állapotok

Ha viszont összeadjuk a két állapotot, ahol az egyrészecske spinek ellentétesen állnak:

$$S^2(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = 2\hbar^2(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

már sajátállapot lesz. Továbbá ha kivonjuk őket egymásból, akkor is, hiszen ekkor a nulla állapotot kapjuk, ami bármelyik állapot 0-szorosa:

$$S^2(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = |0\rangle = 0\hbar^2(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Ezzel találtunk három olyan állapotot, melyek a kétrészecske spin négyzetének sajátállapotai és $2\hbar^2$ sajátértékkel rendelkeznek: $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$

Az S_z operátor hatását is ki lehet a keverék állapotokon számolni. Mint láttuk $S_{1z} + S_{2z}$ egyenként $|\uparrow\downarrow\rangle$ -t és $|\downarrow\uparrow\rangle$ -t is a nullába viszi, ezért összegüket és különbségüket is.

$$\begin{aligned} S_z|\uparrow\downarrow\rangle &= (S_{1z} + S_{2z})|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2}(1 - 1)|\uparrow\downarrow\rangle = |0\rangle = 0\hbar|\uparrow\downarrow\rangle \\ S_z|\downarrow\uparrow\rangle &= (S_{1z} + S_{2z})|\downarrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}(-1 + 1)|\downarrow\uparrow\rangle = |0\rangle = 0\hbar|\downarrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

Ezért az összeg és a különbség állapotokra:

$$\begin{aligned} (S_{1z} + S_{2z})(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) &= 0\hbar(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ (S_{1z} + S_{2z})(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) &= 0\hbar(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned}$$

Keverék állapotok normálása

Ezek a keverék állapotok még nem normáltak. Ha önmagukkal skalárszorozzuk őket, akkor az eredmény 2. A számolást kezdjük az egyes z -irányban ellentétesen beálló állapotok skalárszorozatainak kiszámolásával, melyek nem túl meglepő módon a következő eredményt adják:

$$\langle \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow \rangle = (1, 0)_1 (0, 1)_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 = (1, 0)_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 (0, 1)_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 = 1 \cdot 1 = 1$$

$$\langle \uparrow\downarrow | \downarrow\uparrow \rangle = (1, 0)_1 (0, 1)_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = (1, 0)_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 (0, 1)_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = 0 \cdot 0 = 0$$

$$\langle \downarrow\uparrow | \downarrow\uparrow \rangle = (0, 1)_1 (1, 0)_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = (0, 1)_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 (1, 0)_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = 1 \cdot 1 = 1$$

$$\langle \downarrow\uparrow | \uparrow\downarrow \rangle = 0$$

Ez utóbbi a skalárszorzat kommutativitása miatt is például fennáll. Ezt a két keverék állapotot vagy $(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle)$ -lel jelöljük, vagy (ami ugyanazt jelenti) $|\uparrow\downarrow \pm \downarrow\uparrow\rangle$ -lel. Ezzel a keverékállapotok skalárszorzata saját magukkal:

$$\langle \uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow | \uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow \rangle = \langle \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow \rangle + \langle \uparrow\downarrow | \downarrow\uparrow \rangle + \langle \downarrow\uparrow | \uparrow\downarrow \rangle + \langle \downarrow\uparrow | \downarrow\uparrow \rangle = 1 + 0 + 0 + 1 = 2$$

$$\langle \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow | \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow \rangle = \langle \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow \rangle - \langle \uparrow\downarrow | \downarrow\uparrow \rangle - \langle \downarrow\uparrow | \uparrow\downarrow \rangle + \langle \downarrow\uparrow | \downarrow\uparrow \rangle = 1 - 0 - 0 + 1 = 2$$

Ezért $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ és $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ normált kétrészecskés spin-sajátállapotok. Az S^2 és S_z operátorok ezekhez tartozó sajátértékei a normálástól nem változnak. Az S^2 sajátértékei $2\hbar^2$ és $0\hbar^2$ a felírt sorrendben. Az S_z -é $0\hbar$ mindkét esetben.

Általános állapotok

Ha nemcsak a sajátállapotokat vizsgáljuk, akkor ezek lineáris kombinációi fordulhatnak elő. Ez a kvantummechanika alappillére, a Hilbert-tér konstrukciója. A két feles spin általános állapotainak leírásához a négy eddig is tárgyalt sajátállapotot használjuk fel, ezt másképpen úgy mondjuk, hogy a rendszer állapotait leíró tér négy dimenziós. Az könnyen elképzelhető vektorterekben minden dimenzióhoz egy koordinátatengely tartozik, melyhez egy tengely-irányú egységvektor. Jelen esetben ezeket a normált kétrészecskés sajátállapotok helyettesítik, amit először úgy építettünk fel hogy az egyrészecskés sajátállapotokat tettük egymás mellé. Ezt a négy dimenziós teret hívjuk a két egyrészecskés spin, külön-külön kétdimenziós tereinek direkt-szorzat térének. Azért direkt-szorzat tér, mert minden kétrészecskés állapotban (a szorzat-vektortér minden pontjában) mindkét összeszorozott tér állapota, mindkét egyrészecské állapot, beleszámít, ahogy ezt eddig is láttuk.

Vizsgáljuk meg azt, hogy az S^2 és az S_z operátorok hatását hogyan lehet leírni egy általános (nem saját-) állapot esetén. Az általános állapot felírása:

$$|\Psi\rangle = \alpha |\uparrow\uparrow\rangle + \beta |\uparrow\downarrow\rangle + \gamma |\downarrow\uparrow\rangle + \delta |\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix}$$

Az előzőekben tárgyaltak alapján a két perdület-operátor hatását kifejező mátrixok így írhatók:

$$\begin{aligned}
S^2 |\Psi\rangle &= S^2 (\alpha |\uparrow\uparrow\rangle + \beta |\uparrow\downarrow\rangle + \gamma |\downarrow\uparrow\rangle + \delta |\downarrow\downarrow\rangle) = \\
&= \alpha S^2 |\uparrow\uparrow\rangle + \beta S^2 |\uparrow\downarrow\rangle + \gamma S^2 |\downarrow\uparrow\rangle + \delta S^2 |\downarrow\downarrow\rangle = \\
&= \alpha 2\hbar^2 |\uparrow\uparrow\rangle + \beta \hbar^2 (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) + \gamma \hbar^2 (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) + \delta 2\hbar^2 |\downarrow\downarrow\rangle = \\
&= \hbar^2 (2\alpha |\uparrow\uparrow\rangle + (\beta + \gamma) |\uparrow\downarrow\rangle + (\beta + \gamma) |\downarrow\uparrow\rangle + 2\delta |\downarrow\downarrow\rangle) = \\
&= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} |\Psi\rangle \\
S_z |\Psi\rangle &= \hbar (\alpha S_z |\uparrow\uparrow\rangle + \beta S_z |\uparrow\downarrow\rangle + \gamma S_z |\downarrow\uparrow\rangle + \delta S_z |\downarrow\downarrow\rangle) = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Ezen bázis használatával az S_z diagonális, de az S^2 nem. Ellenben ha nem így adjuk meg az általános állapotokat, hanem az S^2 sajátállapotai szerint kifejtve, azaz a két keverék állapotot használva:

$$|\Psi\rangle = a |\uparrow\uparrow\rangle + b \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) + c |\downarrow\downarrow\rangle + d \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}$$

akkor S^2 is diagonális lesz. Ez az új koordinátarendsze egy főtengeleytranszformációval állt elő az előzőből, szemléletesen azon kétdimenziós altérben, ahol az egymással ellentétesen álló egyrészesecskes spinekből álló kétrészesecskes állapotok a bázisok, ott egy 90° -os forgatást hajtottunk végre.

$$S^2 |\Psi\rangle = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} \text{ és } S_z |\Psi\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}$$

Az eredmény azt mutatja, hogy az első három bázisvektort érdemes összefogni egy altérbe (3 dimenziósba), és a negyediket pedig külön egy másikba (1 dimenziósba). Ekkor a négy dimenziós térünk két altér direkt összege lesz. Az első három dimenziós altér éppen egy 1-es spint ír le, a másik pedig egy 0-ás spint. Az elsőnek három állapota van, a másikkak pedig egy, ami minden irányból nézve 0 perdületű, és az abszolút értéke is 0. Ezt szokásosan így jelöljük:

$$|1\rangle \oplus |0\rangle$$

Ez azt jelenti, hogy a két egykettes spinből álló rendszer teljes állapota, amennyiben a perdület operátorok sajátállapota, akkor vagy egy 1-es vagy egy 0-ás spin egyik állapotában van:

$$|1/2\rangle \otimes |1/2\rangle = |1\rangle \oplus |0\rangle$$

Az $|\uparrow\uparrow\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$, $|\downarrow\downarrow\rangle$ állapotokat, és a hozzájuk tartozó három dimenziós alteret triplet állapotnak hívjuk, valamint a $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ állapotot pedig szinglet állapotnak hívjuk. Mindkettő kétrészesecskes spinállapotot jelent.