

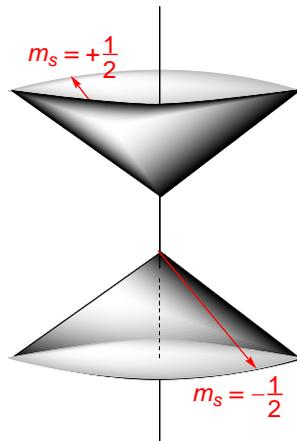
有關單重態和三重態

蔡蘊明(2015/3/13)

我們談到包力(Pauli)不相容原理以及洪德(Hund)定則時，提到兩個電子自旋(spin)態搭配的問題，若兩個電子位於同軌域時，我們稱二者的自旋是配對的(spin paired)，這種關係被稱為是單重態(singlet state)，但若兩個電子位於不同軌域，而且自旋狀態相同時，稱之為三重態(triplet state)。單重態的角動量(angular momentum)之和為零，其波函數(σ)的數學型式如下：

$$\sigma_-(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2) \}$$

其中 α 與 β 代表 spin +1/2 和 spin -1/2，括號裡面的 1 和 2 代表電子的人為標籤，所以 $\alpha(1)$ 代表電子 1 在 α state，依此類推。其相對應的物理圖像如下：



此圖中畫的軸是 z 軸，紅色向量是電子的角動量，加註的標籤 m_s 是角動量在 z 軸上的分量。此二向量為平行(parallel)的關係，會位於同一平面但方向相反，其角動量的向量和為零，而且於 z 軸上的分量和亦為零。

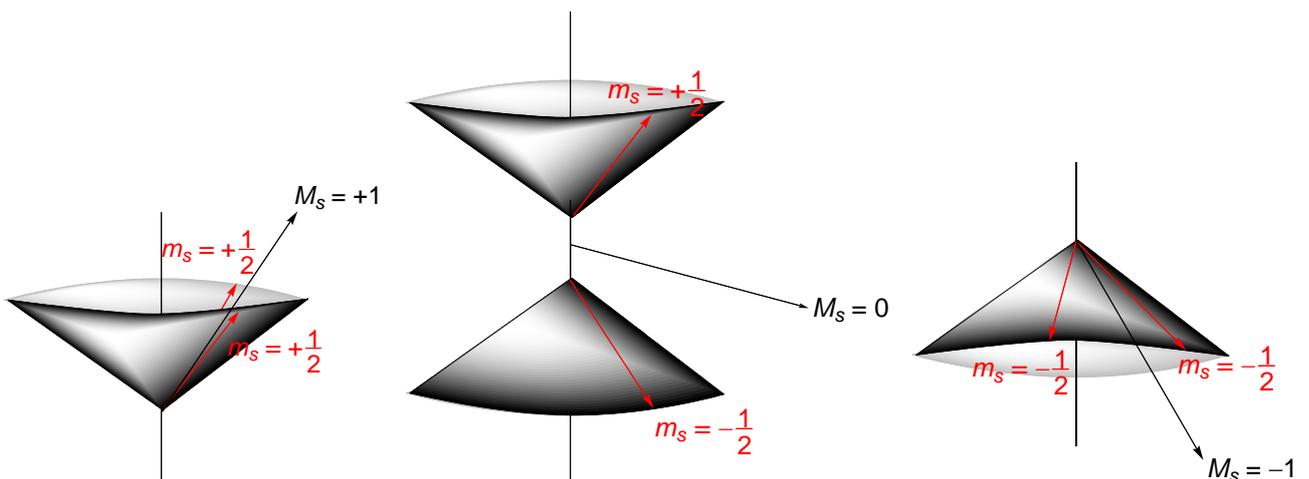
三重態的角動量之和為 1，有三個對應的波函數(這是稱為三重態的原因)，個別的波函數型式如下：

$$\alpha(1)\alpha(2)$$

$$\sigma_+(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2) \}$$

$$\beta(1)\beta(2)$$

其中 $\alpha(1)\alpha(2)$ 代表電子 1 和 2 都在 α state 而 $\beta(1)\beta(2)$ 代表電子 1 和 2 都在 β state。其相對應的物理圖像(由上而下對應由左而右)如下：



此圖中 M_s 是在 z 軸上的分量和，這三種狀態在 z 軸上的分量和分別為 $+1$ 、 0 、和 -1 。此外請注意三重態雖然對應到兩個 **parallel spin**，但是在向量上並無平行關係，而且 σ_+ 的兩個自旋態是相反的，與單重態的波函數在數學上的組合方式不同，但是單重態角動量的和為零(不僅是分量)，而三重態角動量的和不為零。