

Spin aneb jak algebra vstupuje do kvantové mechaniky

Helena Kolečová

Kruh u Jilemnice
22.5.2014

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Různé pohledy na spin

- 1 Spin v nerelativistické kvantové mechanice
- nemá žádnou klasickou analogii, nevysvětlen!
(02KVAN)
- 2 Spin v relativistické kvantové mechanice a QED
- vysvětlení spinu, určení hodnoty magnetického momentu elektronu s přesností na 11 desetinných míst!
(02KTP)
- 3 Reprezentace Lieovy algebry $su(2)$
(02LIAG)
- 4 Částice jako reprezentace Poincarého grupy
(exkluzivně v Kruhu u Jilemnice!)

Periodická tabulka prvků a co na to Pauli

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18				
I A	II A	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII	VIII	VIII	I B	II B	III A	IV A	V A	VI A	VII A	0				
Hydrogen 1 H 1,00794(7)																	Helium 2 He 4,0026032(5)				
Lithium 3 Li 6,941(2)		Beryllium 4 Be 9,0121832(3)		<div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="margin-right: 10px;"> <p>Kyslík 8 O 15,999(4)</p> </div> <div> <p>název prvku protonové číslo značka prvku relativní atomová hmotnost</p> </div> </div>												Fluor 9 F 18,9984632(3)	Neon 10 Ne 20,1797(6)				
Sodík 11 Na 22,98976928(2)		Hořčík 12 Mg 24,30508(2)														Bor 5 B 10,811(7)	Uhlík 6 C 12,0107(8)	Dusík 7 N 14,00643(4)	Kyslík 8 O 15,999(4)	Fluor 9 F 18,9984632(3)	Neon 10 Ne 20,1797(6)
Dračík 19 K 39,0983(1)		Vápník 20 Ca 40,078(4)		Skandium 21 Sc 44,955910(8)	Titan 22 Ti 47,88(1)	Vanád 23 V 50,9415(1)	Chrom 24 Cr 51,9961(6)	Mangan 25 Mn 54,938045(3)	Železo 26 Fe 55,845(3)	Kobalt 27 Co 58,933195(5)	Nikl 28 Ni 58,6934(4)	Měď 29 Cu 63,546(3)	Cín 30 Zn 65,38(2)	Gallium 31 Ga 69,723(1)	Germanium 32 Ge 72,61(2)	Arzen 33 As 74,9216(2)	Selen 34 Se 78,96(1)	Brom 35 Br 79,904(1)	Krypton 36 Kr 83,80(1)		
Rubidiový 37 Rb 85,4678(3)		Stronciový 38 Sr 87,62(1)		Ytřium 39 Y 88,90585(2)	Zirkon 40 Zr 91,224(2)	Niob 41 Nb 92,90638(2)	Molibden 42 Mo 95,94(1)	Technecium 43 Tc 98,9063(5)	Ruthenium 44 Ru 101,07(2)	Rhodium 45 Rh 102,90550(2)	Pala듐 46 Pd 106,90509(2)	Sříbr 47 Ag 107,8682(1)	Kadmium 48 Cd 112,411(8)	Indium 49 In 114,818(3)	Cín 50 Sn 118,710(7)	Antimon 51 Sb 121,760(1)	Telur 52 Te 127,60(3)	Jod 53 I 126,90447(3)	Xenon 54 Xe 131,29(2)		
Cesium 55 Cs 132,9054519(2)		Baryum 56 Ba 137,327(1)		Lanthanoidy 57-70		Hafniový 72 Hf 178,48(2)	Tantal 73 Ta 180,9479(1)	Tungstén 74 W 183,84(1)	Rhenium 75 Re 186,207(1)	Osmium 76 Os 190,23(3)	Iridium 77 Ir 192,22(2)	Platina 78 Pt 195,078(2)	Hg 80 Hg 200,59(2)	Thalium 81 Tl 204,3833(2)	Cín 82 Pb 207,2(1)	Bismut 83 Bi 208,9804(2)	Po 84 Po (209,9824)	Astát 85 At (208,9804)	Radon 86 Rn (222,0176)		
Francium 87 Fr (223,0187)		Radium 88 Ra (226,0254)		88-102 Aktinoidy		Nobeliový 104 Rf (261,108)	Dubniový 105 Db (262,1144)	Seborgiový 106 Sg (263,1089)	Berkeliový 107 Bh (264,102)	Hassium 108 Hs (265,1085)	Mitlovium 109 Mt (266,1087)	Ununnilium 110 Uun (267,1087)	Ununbium 111 Uub (268,1087)	Ununtrium 112 Uut (269,1087)							
Lanthanoidy:		La 57 (138,90547)	Ce 58 (140,116(1))	Pr 59 (140,90766(2))	Nd 60 (144,9127(2))	Pm 61 (144,9127(2))	Sm 62 (150,36(2))	Eu 63 (151,964(1))	Gd 64 (157,25(1))	Tb 65 (158,925(2))	Dy 66 (162,50(2))	Ho 67 (164,93032(2))	Er 68 (167,26(2))	Tm 69 (168,93421(2))	Yb 70 (173,054(2))	Lu 71 (174,967(1))					
Aktinoidy:		Ac 89 (227,0371)	Th 90 (232,0371(1))	Pa 91 (231,036888(1))	U 92 (238,02891(3))	Np 93 (237,048173(3))	Pu 94 (244,06422(2))	Am 95 (243,061361(2))	Cm 96 (247,071251(2))	Bk 97 (247,071251(2))	Cf 98 (251,079588(2))	Es 99 (252,083858(2))	Fm 100 (257,085103(2))	Md 101 (258,103868(2))	No 102 (259,101861(2))	Lr 103 (260,101861(2))					

- Edmund C. Stoner (1924): Hladina energie elektronu ve vnější slupce atomu alkalických kovů (daná kvantovým číslem N) se ve vnějším magnetickém poli štěpí na určitý počet různých energetických hladin. Tento počet odpovídá počtu elektronů v uzavřené energetické slupce příslušné stejnému N .

Periodická tabulka prvků (*1869) a co na to Pauli

Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren.

Von W. Pauli jr. in Hamburg.

(Eingegangen am 16. Januar 1925.)

Es wird, namentlich im Hinblick auf den Millikan-Landéschen Befund der Darstellbarkeit der Alkalidubletts durch relativistische Formeln und auf Grund von in einer früheren Arbeit erhaltenen Resultaten, die Auffassung vorgeschlagen, daß in diesen Dubletts und ihrem anomalen Zeemaneffekt eine klassisch nicht beschreibbare Zweideutigkeit der quantentheoretischen Eigenschaften des Leuchtelektrons zum Ausdruck kommt, ohne daß hierbei die abgeschlossene Edelgaskonfiguration des Atomrestes in Form eines Rumpfpulses oder als Sitz der magneto-mechanischen Anomalie des Atoms beteiligt ist. Sodann wird versucht, diesen als provisorische Arbeitshypothese eingenommenen Standpunkt trotz ihm entgegenstehender prinzipieller Schwierigkeiten auch bei anderen Atomen als den Alkalien in seinen Konsequenzen möglichst weit zu verfolgen. Dabei zeigt sich zunächst, daß er es im Gegensatz zur üblichen Auffassung ermöglicht, im Falle eines starken äußeren Magnetfeldes, wo von den Kopplungskräften zwischen Atomrest und Leuchtelektron abgesehen werden kann, diesen beiden Teilsystemen hinsichtlich der Anzahl ihrer stationären Zustände sowie der Werte ihrer Quantenzahlen und ihrer magnetischen Energie keine anderen Eigenschaften zuzuschreiben als dem freien Atomrest bzw. dem Leuchtelektron bei den Alkalien. Auf Grund dieses Ergebnisses gelangt man ferner zu einer allgemeinen Klassifikation jedes Elektrons im Atom durch die Hauptquantenzahl n und zwei Nebenquantenzahlen k_1 und k_2 , zu denen bei Anwesenheit eines äußeren Feldes noch eine weitere Quantenzahl m_1 hinzutritt. In Anknüpfung an eine neuere Arbeit von E. C. Stoner führt diese Klassifikation zu einer allgemeinen quantentheoretischen Formulierung des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom.



- K vysvětlení stavby periodické tabulky prvků je třeba zavést čtvrté kvantové číslo popisující stav elektronu! (v dnešním značení kvantová čísla: hlavní N , vedlejší l , magnetické m a !spinové! s).

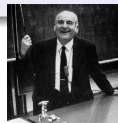
S. Goudsmit a G. Uhlenbeck: Zavedení veličiny "spin"

Samuel Goudsmit (1971):

"The Pauli principle was published early in 1925. I am convinced that although it is one of the most important publications in physics, who reads it now, of the younger generation, will find it hard to understand. Even that one will not understand it all. And I wrote a note in May that the Pauli principle became easier to understand when introducing different quantum numbers. The quantum numbers I used for Pauli's principle were m_l and m_s ; m_s being always the same, plus or minus $1/2$."... "As a mathematician said, the change amounted to a simple linear transformation - which is trivial, mathematically trivial of course, but not so for the understanding and in teaching."

...

"In these days Kronig came from America and he came to Leiden; we collaborated in spectroscopy and worked on the intensities in the Zeeman effect for which we found the exact expressions. Of course, it was quite different from today; there was no quantum mechanics at the time, don't forget that this did not yet exist! One had to guess these little formulae; one developed a feeling for them. It is just as with veterinary and human medicine. People can tell one where it hurts, but a veterinary doctor has to guess where it hurts. A horse or a cow cannot tell that. And so it is with these little formulae. It is really curious it was a kind of numerology, and it is a miracle that we arrived at the correct expressions which later could be derived by quantum mechanics."



Ale my kvantovou mechaniku známe!

- Elektron v atomu vodíku: $\{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_3\}$... ÚMP/ÚSKO
- $\hat{L}_j = \varepsilon_{jkl} \hat{x}_k \hat{p}_l$ - j-tá složka momentu hybnosti
- $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{L}_l$

Společné vlastní funkce $\psi_{N,l,m} \in \mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3, d^3x)$

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 \psi_{N,l,m} &= E_N \psi_{N,l,m} & E_N &= -\frac{R}{N^2} \\ \hat{L}^2 \psi_{N,l,m} &= l(l+1)\hbar^2 \psi_{N,l,m} & l &\in \{0, 1, \dots, N-1\} \\ \hat{L}_3 \psi_{N,l,m} &= m\hbar \psi_{N,l,m} & m &\in \{-l, -l+1, \dots, l\}\end{aligned}$$

Reprezentace Lieovské algebry $\mathfrak{su}(2)$

- Lieovou algebrou nazveme vektorový prostor \mathfrak{g} s binární operací $[\cdot, \cdot] : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ s jistými vlastnostmi, které v dalším nebudeme potřebovat :)
- Baze tohoto vektorového prostoru: $\{T_j\}_{j=1}^n$, uzavřenost $\Rightarrow [T_j, T_k] = if_{jkl}T_l$. Lieova algebra jednoznačně určena čísly f_{jkl} (strukturní konstanty). Pro $\mathfrak{su}(2)$: $f_{jkl} = \varepsilon_{jkl}$.

Def.: Nechť V je vektorový prostor. Reprezentace Lieovské algebry \mathfrak{g} je zobrazení $\rho : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{gl}(V)$ takové, že $\forall X, Y \in \mathfrak{g}$

$$\rho([X, Y]) = [\rho(X), \rho(Y)].$$

($\mathfrak{gl}(V)$ je algebra lineárních operátorů na V , pro kompaktní algebry lze volit $\rho(T_j)$ jako hermitovské matice).

- Spinové matice jsou reprezentace $\mathfrak{su}(2)$ na $V = \mathbb{C}^2$, $[S_j, S_k] = i\varepsilon_{jkl}S_l$

$$S_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad S_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Reprezentace Lieovské algebry $\mathfrak{su}(2)$

- **Cartanova podalgebra**: největší množina vzájemně komutujících (hermitovských) generátorů $\{H_j\}_{j=1}^m \subset \{T_j\}_{j=1}^n$.
- Mějme reprezentaci Lieovy algebry na vektorovém prostoru V .
Váhy (dle H. Georgi): vektor $\vec{\mu}$ vlastních čísel Cartanových generátorů příslušný společnému vlastnímu vektoru $|\mu\rangle \in V$:

$$H_j|\mu\rangle = \mu_j|\mu\rangle \quad j = 1, 2, \dots, m.$$

- Reprezentace je jednoznačně určena “nejvyšší” vahou, vektorový prostor, na kterém působí, lze vybudovat z vektorů $|\mu\rangle$.

$$\mathfrak{su}(2): [J_j, J_k] = i\epsilon_{jkl}J_l$$

- Pouze jeden Cartanův generátor: např. J_3 .
- Váhy 1-rozměrné, vl. čísla J_3 (různé hodnoty průmětu spinu do osy z !)
- Nejvyšší váha j může nabývat pouze polocelých hodnot (spin částice = j)
- Váhy v repre. s daným j : $-j, -j + 1, \dots, j \Rightarrow (2j + 1)$ -rozměrná repre.
- Částice se spinem 0, 1 opravdu později objeveny!

Částice jako reprezentace Poincarého algebry (à la J. F.)

- Hybnost a energie \Leftrightarrow translace v časoprostoru
- Moment hybnosti \Leftrightarrow prostorové rotace
- 10 generátorů Poincarého algebry ($\mu, \nu \in \{0, 1, 2, 3\}$):

P^μ (translace),

$M^{\mu\nu} = -M^{\nu\mu}$ (vlastní Lorentzovy transformace).

$J_k = \frac{1}{2}\varepsilon_{klm}M^{lm}$ (prostorové rotace), $K_j = M^{0j}$ (boosty)

$$[P^\mu, P^\nu] = 0$$

$$[M^{\mu\nu}, M^{\rho\sigma}] = i(g^{\mu\sigma}M^{\nu\rho} - g^{\mu\rho}M^{\nu\sigma} + g^{\nu\rho}M^{\mu\sigma} - g^{\nu\sigma}M^{\mu\rho})$$

$$[M^{\mu\nu}, P^\rho] = i(g^{\nu\rho}P^\mu - g^{\mu\rho}P^\nu)$$

- Casimirův operátor: komutuje se všemi generátory algebry $\xrightarrow{\text{Schurovo lemma}}$ v ireducibilní reprezentaci realizován násobkem operátoru identity. Ireducibilní reprezentace lze klasifikovat pomocí hodnot všech nezávislých Casimirových operátorů.
- Casimíry v Poincarého algebře: $P_\mu P^\mu$ a $W_\mu W^\mu$, kde

$$W^\mu = -\frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}M_{\nu\rho}P_\sigma \quad (\text{Pauli – Lubanského vektor})$$

Wignerova konstrukce unitárních ireducibilních reprezentací Poincaréovy grupy



třída	Vlastnosti 4-vektorů	4-vektor k^μ	Malá grupa
1	$p_\mu p^\mu = 0, p^0 = 0 \Leftrightarrow p^\mu = 0$	0, 0	$SO(3, 1)$
2	$p_\mu p^\mu = M^2, M > 0, p^0 > 0$	$M, 0$	$SO(3)$
3	$p_\mu p^\mu = 0, p^0 > 0$	1, 0, 0, 1	$ISO(2)$
4	$p_\mu p^\mu = M^2, M > 0, p^0 < 0$	$-M, 0$	$SO(3)$
5	$p_\mu p^\mu = 0, p^0 < 0$	$-1, 0, 0, 1$	$ISO(2)$
6	$p_\mu p^\mu = -M^2 < 0$	0, 0, 0, M	$SO(2, 1)$