Spin aneb jak algebra vstupuje do kvantové mechaniky

Helena Kolešová

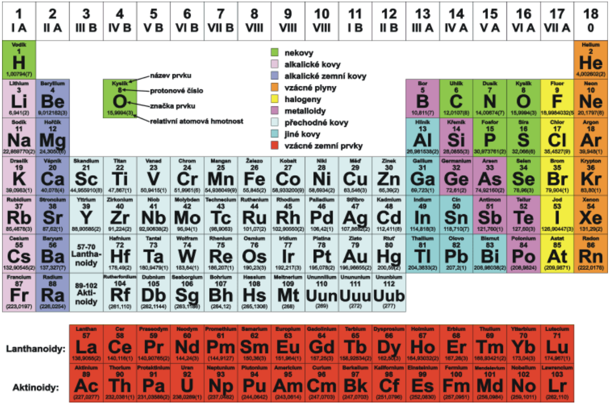
Kruh u Jilemnice
22.5.2014

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

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



- 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 Rumpfimpulses 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).

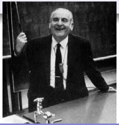
S. Goudsmit a G. Uhlenbeck: Zavedení veličiny “spin”

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 hybhosti
- $\left[\hat{L}_j, \hat{L}_k\right] = i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{L}_l$

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

$$\hat{H}_0\psi_{N,l,m} = E_N\psi_{N,l,m} \qquad E_N = -\frac{R}{N^2}$$

$$\hat{L}^2\psi_{N,l,m} = l(l+1)\hbar^2\psi_{N,l,m} \qquad l \in \{0, 1, \ldots, N-1\}$$

$$\hat{L}_3\psi_{N,l,m} = m\hbar\psi_{N,l,m} \qquad m \in \{-l, -l+1, \ldots, l\}$$

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

- Lieovou algebrou nazveme vektorový prostor $\mathfrak{g}$ s binární operací $[.,.] : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \to \mathfrak{g}$ 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 určenta čísly f_{jkl} (strukturní konstanty). Pro $\mathfrak{su}(2)$: $f_{jkl} = \varepsilon_{jkl}$.

Def.: Nechť V je vektorový prostor. Reprezentace Liovské algebry $\mathfrak{g}$ je zobrazení $\rho : \mathfrak{g} \to \mathfrak{gl}(V)$ 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 hermitovké matice).

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

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

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 $|\mu\rangle \in V$:
  $$H_j|\mu\rangle = \mu_j|\mu\rangle \qquad j = 1, 2 \ldots m.$$
- Reprezentace je jednoznačně určena "nejvyšší" vahou, vektorový prostor, na kterém působí, lze vybudovat z vektorů $|\mu\rangle$.

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

- 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: $-j, -j+1, \ldots, j \Rightarrow (2j+1)$-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)

$$
\begin{aligned}
[P^\mu, P^\nu] &= 0 \\
[M^{\mu\nu}, M^{\rho\sigma}] &= i\left(g^{\mu\sigma}M^{\nu\rho} - g^{\mu\rho}M^{\nu\sigma} + g^{\nu\rho}M^{\mu\sigma} - g^{\nu\sigma}M^{\nu\rho}\right) \\
[M^{\mu\nu}, P^\rho] &= i\left(g^{\nu\rho}P^\mu - g^{\mu\rho}P^\nu\right)
\end{aligned}
$$

- 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

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

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	$p_\mu p^\mu = -M^2 < 0$	$0, 0, 0, M$	$SO(2,1)$