Algebraická teorie momentu hybnosti, systémy rozlišitelných částic

Martin Štefaňák

18. listopadu 2020

Přehled

Přehled

Spin a orbitální moment hybnosti

- Splňují stejné komutační relace

$$\left[\hat{L}_k, \hat{L}_l\right] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{L}_m, \quad \left[\hat{S}_k, \hat{S}_l\right] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{S}_m,$$

- Působí na jiných prostorech

$$\hat{L}_k \in \mathcal{L}\left(L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)\right), \qquad \hat{L}_k = \varepsilon_{klm}\hat{Q}_l\hat{P}_m = -i\hbar\varepsilon_{klm}x_l\frac{\partial}{\partial x_m}$$

$$\hat{S}_k \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^2), \qquad \mathbb{S}_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k$$

- Jde o různé reprezentace Lieovy algebry $su(2)$

Reprezentace Lievy algebry $su(2)$

- Jaká je možná velikost spinu kvantové částice?
- Jaký tvar mají matice operátorů složek spinu?

Ireducibilní reprezentace $su(2)$

- Lieova algebra g - vektorový prostor s Lieovou závorkou
- Definice Lieovy závorky v $su(2)$ (má dimenzi 3)

$$[j_k, j_l] = i\hbar\varepsilon_{klm} j_m$$

- Reprezentace Lieovy algebry g na $\mathscr{H}$

$$\rho \ : \ x \in g \longmapsto \hat{\rho}_x \in \mathcal{L}(\mathscr{H}), \quad \hat{\rho}_{[x,y]} = [\hat{\rho}_x, \hat{\rho}_y]$$

Ireducibilní reprezentace

- Operátory nemají společný netriviální invariantní podprostor
- Matice operátorů nelze současně blokově diagonalizovat
- $\hat{S}_k$ je ireducibilní reprezentace na $\mathbb{C}^2$
- $\hat{L}_k$ je reducibilní reprezentace na $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$

Obecný moment hybnosti

- Operátory obecného momentu hybnosti jsou reprezentace $su(2)$
- Splňují komutační relace

$$\left[\hat{J}_k, \hat{J}_l\right] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{J}_m$$

- Moment hybnosti je generátor rotací

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\alpha) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{n}\cdot\hat{\vec{J}}\right)$$

- Operátory $\hat{R}_{\vec{n}}(\alpha)$ představují reprezentaci Lieovy grupy $SO(3)$ - grupa rotací $\mathbb{R}^3$

Algebraická teorie momentu hybnosti

- $\hat{J}_k$ — reprezentace $su(2)$ na $\mathscr{H}$ konečné dimenze

$$\left[\hat{J}_k, \hat{J}_l\right] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{J}_m, \quad \hat{J}_k = \hat{J}_k^\dagger$$

- Komutační relace $\Longrightarrow$ $\hat{J}_3$ a $\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2$ jsou kompatibilní

$$\hat{J}^2|\lambda, \mu\rangle = \lambda|\lambda, \mu\rangle, \quad \hat{J}_3|\lambda, \mu\rangle = \mu|\lambda, \mu\rangle, \quad \lambda, \mu = ?$$

- Posunovací operátory $\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$

$$\left[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{J}_\pm, \quad \left[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm\right] = 0$$

- $\hat{J}_3$ má ekvidistantní spektrum, $\Delta\mu = \hbar$ (stejně pro $\hat{J}_k$)

$$\hat{J}_\pm|\lambda, \mu\rangle = \alpha^\pm_{\lambda,\mu}|\lambda, \mu \pm \hbar\rangle$$

Algebraická teorie momentu hybnosti

Vztah mezi λ a μ

$$\forall|\psi\rangle \in \mathscr{H}, \quad \langle\psi|\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2|\psi\rangle = \|\hat{J}_1\psi\|^2 + \|\hat{J}_2\psi\|^2 \geq 0$$

$$0 \leq \langle\lambda,\mu|\underbrace{\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2}_{\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2}|\lambda,\mu\rangle = \langle\lambda,\mu|\hat{J}^2|\lambda,\mu\rangle - \langle\lambda,\mu|\hat{J}_3^2|\lambda,\mu\rangle = \lambda - \mu^2$$

- Pro dané λ jsou hodnoty μ omezené — $\mu^2 \leq \lambda$
- Existují maximální a minimální hodnoty μ — μ_{max} a μ_{min}

$$\begin{aligned} |\lambda,\mu_{max}\rangle &\neq 0, \quad |\lambda,\mu_{min}\rangle \neq 0 \\ \hat{J}_+|\lambda,\mu_{max}\rangle &= 0, \quad \hat{J}_-|\lambda,\mu_{min}\rangle = 0 \end{aligned}$$

Algebraická teorie momentu hybnosti

$$\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3, \quad \hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 + \hbar\hat{J}_3$$

Hodnota μ_{max}

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{J}_+|\lambda,\mu_{max}\rangle = \hat{J}_-\hat{J}_+|\lambda,\mu_{max}\rangle = \left(\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3\right)|\lambda,\mu_{max}\rangle \\ &= (\lambda - \mu_{max}^2 - \hbar\mu_{max})|\lambda,\mu_{max}\rangle \quad \Longrightarrow \quad \lambda = \mu_{max}^2 + \hbar\mu_{max} \end{aligned}$$

Hodnota μ_{min}

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{J}_-|\lambda,\mu_{min}\rangle = \hat{J}_+\hat{J}_-|\lambda,\mu_{min}\rangle = \left(\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 + \hbar\hat{J}_3\right)|\lambda,\mu_{min}\rangle \\ &= (\lambda - \mu_{min}^2 + \hbar\mu_{min})|\lambda,\mu_{min}\rangle \quad \Longrightarrow \quad \lambda = \mu_{min}^2 - \hbar\mu_{min} \end{aligned}$$

$$\mu_{min} = -\mu_{max}$$

Algebraická teorie momentu hybnosti

- Existuje celé nezáporné k takové, že platí

$$\hat{J}_+^k|\lambda,\mu_{min}\rangle \sim |\lambda,\mu_{min}+k\hbar\rangle = |\lambda,\mu_{max}\rangle$$

$$\mu_{max} = \mu_{min}+k\hbar = -\mu_{max}+k\hbar \implies \mu_{max} = \frac{k}{2}\hbar$$

- Zavedeme $j=\frac{k}{2}$ — nezáporné polocelé číslo

$$\mu_{max} = -\mu_{min} = j\hbar, \quad \lambda = \hbar^2 j(j+1)$$

- Přeznačíme vlastní vektory pomocí kvantových čísel j, m

$$\begin{aligned} \hat{J}^2|j,m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|j,m\rangle, \quad \hat{J}_3|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle \\ \langle j,m|j,m'\rangle &= \delta mm', \quad m = j, j-1, \ldots -j \end{aligned}$$

Iredukcibilní reprezentace $su(2)$

- Fixní j — Hilbertův prostor $\mathscr{H}^{(j)}$ dimenze $2j+1$

$$\mathscr{H}^{(j)} = [|j,m\rangle | m = j, j-1, \ldots, -j]_\lambda \simeq \mathbb{C}^{2j+1}$$

- Matice operátorů $\hat{J}_3$ a $\hat{J}^2$ jsou v této bázi diagonální

$$\mathbb{J}_3 = \Big(\underbrace{\langle j,m|\hat{J}_3|j,n\rangle}_{m\hbar\delta_{mn}}\Big) = \begin{pmatrix} j\hbar & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & (j-1)\hbar & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & -j\hbar \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{J}^2 = \Big(\underbrace{\langle j,m|\hat{J}^2|j,n\rangle}_{\hbar^2 j(j+1)\delta_{mn}}\Big) = \hbar^2 j(j+1)\mathbb{I}$$

Matice operátorů $\hat{J}_1$ a $\hat{J}_2$

- Zkonstruujeme pomocí posunovacích operátorů

$$\hat{J}_1 = \frac{1}{2}\left(\hat{J}_+ + \hat{J}_-\right), \quad \hat{J}_2 = \frac{i}{2}\left(\hat{J}_- - \hat{J}_+\right), \quad \hat{J}_- = \hat{J}_+^\dagger$$

- Působení $\hat{J}_\pm$ na kety $|j,m\rangle$ známe

$$\hat{J}_\pm|j,m\rangle = \alpha^\pm_{j,m}|j,m\pm 1\rangle, \quad \alpha^\pm_{j,m} = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}$$

- Matice operátorů $\hat{J}_\pm$

$$\mathbb{J}_\pm = \left(\langle j,m|\hat{J}_+|j,n\rangle\right) = \left(\alpha^\pm_{j,n}\delta_{m,n\pm 1}\right)$$

- $\mathbb{J}_+$ má nenulové prvky v pásu nad diagonálou, $\mathbb{J}_-$ pod diagonálou
- Matice $\mathbb{J}_k$ tvoří ireducibilní reprezentaci $su(2)$ na $\mathscr{H}^{(j)}$

$j = \frac{1}{2}$ — odvození Pauliho matic

- Spin-$\frac{1}{2}$ — reprezentace $su(2)$ na $\mathscr{H}^{(\frac{1}{2})} = \left[|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\right]_\lambda \simeq \mathbb{C}^2$
- Matice $\hat{S}_3$ je diagonální

$$\mathbb{S}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_3$$

- Matice posunovacích operátorů $\hat{S}_\pm$

$$\mathbb{S}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \alpha^+_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\sigma_+, \quad \mathbb{S}_- = \mathbb{S}_+^\dagger = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\sigma_-$$

- Matice $\hat{S}_1 = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$ a $\hat{S}_2 = \frac{i}{2}(\hat{S}_- - \hat{S}_+)$

$$\mathbb{S}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_1, \quad \mathbb{S}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_2$$

Přehled

Rozlišitelné a nerozlišitelné částice

V kvantové mechanice neznáme trajektorie částice

Rozlišitelné částice

- Částice různého typu - liší se v nějakém parametru nezávislém na dynamickém stavu (hmotnost, náboj, velikost spinu, ...)
- Částice mohu očíslovat jako 1., 2. atd.

Nerozlišitelné částice

- Identické částice
- Označení částic ztrácí význam
- Předpovědi teorie na očíslování nesmí záviset

Složený systém N rozlišitelných částic

- Rozlišitelné částice s Hilbertovými prostory $\mathscr{H}^{(k)}$, $k = 1, \ldots N$
- Hilbertův prostor složeného systému $\mathscr{H}$ — tenzorový součin Hilbertových prostorů jednotlivých částic $\mathscr{H}^{(k)}$

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mathscr{H}^{(N)}$$

- Nemusí nutně jít o různé částice, ale obecněji o různé stupně volnosti

Elektron se spinem

- Orbitální prostor — $\mathscr{H}_{orb} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$
- Spinový prostor — $\mathscr{H}_s = \mathbb{C}^2$
- Popisujeme oba stupně volnosti současně — $\mathscr{H} = \mathscr{H}_{orb} \otimes \mathscr{H}_s$

Tenzorový součin dvou Hilbertových prostorů

- 2 rozlišitelné částice s Hilbertovými prostory $\mathscr{H}^{(k)}$, $k = 1, 2$
- ON báze v Hilbertových prostorech

$$\left\{|\psi_i^{(k)}\rangle\right\}, \quad \langle\psi_i^{(k)}|\psi_j^{(k)}\rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |\psi_i^{(k)}\rangle\langle\psi_i^{(k)}| = \hat{I}$$

- Hilbertův prostor složeného systému — tenzorový součin

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)}$$

- Množina $\left\{|\psi_i^{(1)}\rangle \otimes |\psi_j^{(2)}\rangle\right\}$ tvoří ON bázi $\mathscr{H}$

$$\left(\langle\psi_i^{(1)}| \otimes \langle\psi_j^{(2)}|\right)\left(|\psi_m^{(1)}\rangle \otimes |\psi_n^{(2)}\rangle\right) = \langle\psi_i^{(1)}|\psi_m^{(1)}\rangle\langle\psi_j^{(2)}|\psi_n^{(2)}\rangle = \delta_{im}\delta_{jn}$$

- Pokud $\dim \mathscr{H}^{(k)} = d_k < \infty \Longrightarrow \dim \mathscr{H} = d_1 \cdot d_2$

Separované stavy

- Částice jsou nezávisle na sobě ve stavech $|\phi^{(k)}\rangle$

$$|\Phi\rangle = |\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$$

- Rozpis stavů $|\phi^{(k)}\rangle$ do bazí

$$|\phi^{(1)}\rangle = \sum_i a_i |\psi_i^{(1)}\rangle, \quad |\phi^{(2)}\rangle = \sum_j b_j |\psi_j^{(2)}\rangle$$

- Separovaný stav složeného systému má tvar

$$|\Phi\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j |\psi_i^{(1)}\rangle \otimes |\psi_j^{(2)}\rangle$$

- Výsledky měření na 1. částici nezávisí na měření na 2. částici

Příklad — tenzorový součin prostorů dimenze 2 a 3

$$\mathscr{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3 \simeq \mathbb{C}^6$$

- Stavy 1. a 2. částice

$$\phi^{(1)} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \phi^{(2)} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

- Separovaný stav složeného systému

$$\Phi = \phi^{(1)} \otimes \phi^{(2)} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_1 b_3 \\ a_2 b_1 \\ a_2 b_2 \\ a_2 b_3 \end{pmatrix}$$

Obecný stav složeného systému

- Obecné vektory z $\mathscr{H}$ lze zapsat ve tvaru

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij}|\psi_i^{(1)}\rangle \otimes |\psi_j^{(2)}\rangle, \quad |\Phi\rangle = \sum_{m,n} d_{mn}|\psi_m^{(1)}\rangle \otimes |\psi_n^{(2)}\rangle$$

- Skalární součin vektorů

$$\langle\Psi|\Phi\rangle = \sum_{i,j} \overline{c}_{ij} d_{ij}$$

- Obecný stav $|\Phi\rangle$ nemusí být separovaný — provázaný stav

$$|\Phi\rangle \neq |\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$$

- Výsledky měření na jednotlivých částicích mohou být korelovány
- Korelace mohou být silnější než je možné v klasické fyzice

Pozorovatelné složeného systému

- Jednočásticové pozorovatelné — rozšíříme jednotkou

$$\hat{A}^{(1)} = \hat{A} \otimes \hat{I}, \quad \hat{B}^{(2)} = \hat{I} \otimes \hat{B}$$

- Spektra $\hat{A}$ a $\hat{A}^{(1)}$ jsou stejná

$$\hat{A}|\alpha_i^{(1)}\rangle = a_i|\alpha_i^{(1)}\rangle \implies \hat{A}^{(1)}|\alpha_i^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle = a_i|\alpha_i^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$$

- $\hat{A}^{(1)}$ a $\hat{B}^{(2)}$ jsou kompatibilní, spol. vl. vektory $|\alpha_i^{(1)}\rangle \otimes |\beta_j^{(2)}\rangle$

$$\hat{A}^{(1)}|\alpha_i^{(1)}\rangle\otimes|\beta_j^{(2)}\rangle = a_i|\alpha_i^{(1)}\rangle\otimes|\beta_j^{(2)}\rangle, \quad \hat{B}^{(1)}|\alpha_i^{(1)}\rangle\otimes|\beta_j^{(2)}\rangle = b_j|\alpha_i^{(1)}\rangle\otimes|\beta_j^{(2)}\rangle$$

- Interakce částic — působí netriviálně v obou prostorech

Úloha dvou těles

- Dvě rozlišitelné kvantové částice bez spinu v $\mathbb{R}^3$

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(1)} \otimes \mathscr{H}^{(2)} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \simeq L^2(\mathbb{R}^6, d^6x)$$

- Obecný stav složeného systému — vlnová funkce $\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$
- Interpretace stavu — amplituda pravděpodobnosti nalezení 1. částice v bodě $\vec{x}^{(1)}$ a 2. částice v bodě $\vec{x}^{(2)}$
- Interakce — potenciál závisející jen na rozdílu poloh

$$V(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = V(\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)})$$

- Hamiltonián složeného systému

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^{(1)2}}{2M_1} + \frac{\hat{P}^{(2)2}}{2M_2} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2M_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2M_1}\Delta_2 + V(\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)})$$

Úloha dvou těles

Stejně jako v klasické mechanice lze odseparovat pohyb těžiště

- Souřadnice těžiště a relativního pohybu

$$\vec{x}^{(t)} = \frac{M_1\vec{x}^{(1)} + M_2\vec{x}^{(2)}}{M_1 + M_2}, \quad \vec{x}^{(r)} = \vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}$$

- Přechod k novým proměnným

$$\Psi(\vec{x}^{(t)}, \vec{x}^{(r)}) \equiv \psi(\vec{x}^{(1)}(\vec{x}^{(t)}, \vec{x}^{(r)}), \vec{x}^{(2)}(\vec{x}^{(t)}, \vec{x}^{(r)}))$$

- Transformace parciálních derivací

$$\frac{\partial}{\partial x_j^{(t)}} = \frac{\partial}{\partial x_j^{(1)}} + \frac{\partial}{\partial x_j^{(2)}}, \quad \frac{\partial}{\partial x_j^{(r)}} = \frac{1}{M_1 + M_2}\left(M_1\frac{\partial}{\partial x_j^{(2)}} - M_2\frac{\partial}{\partial x_j^{(1)}}\right)$$

Úloha dvou těles

- Hamiltonián v nových proměnných

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2(M_1+M_2)}\Delta_t - \hbar^2\frac{M_1+M_2}{2M_1M_2}\Delta_r + V(\vec{x}^{(r)}) \\ &= \hat{H}_t + \hat{H}_r\end{aligned}$$

- Hamiltonián těžiště

$$\hat{H}_t = \frac{\hat{P}^{(t)2}}{2M}, \quad M = M_1 + M_2$$

- Hamiltonián relativního pohybu

$$\hat{H}_r = \frac{\hat{P}^{(r)2}}{2\mu} + V(\vec{x}^{(r)}), \quad \mu = \frac{M_1M_2}{M_1+M_2}$$

Atom vodíku jako systém dvou těles

- Nekonečně těžké jádro — $E_N = -\frac{R}{N^2}$, $\quad R = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2 (4\pi\varepsilon_0)^2}$
- Jádro vodíku - proton s hmotností $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$ kg $\doteq 1837 m_e$
- Úloha dvou těles — v R nahradit m_e redukovanou hmotností

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = m_e \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_p}} \approx m_e\left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \doteq (1 - 5 \cdot 10^{-4}) m_e$$

Izotopický jev

- Spektrum závisí na hmotnosti jádra
- Deuterium - v jádře je proton a neutron, $m_n \doteq m_p$

$$\mu = \frac{m_e 2m_p}{m_e + 2m_p} \approx m_e\left(1 - \frac{m_e}{2m_p}\right) \doteq (1 - 2,5 \cdot 10^{-4}) m_e$$

- Spektrální line deuteria jsou o malinko kratší než pro lehký vodík