Úvod

V tomto dokumentu naleznete zadání a vzorové řešení zápočtové písemky z přednášky ”Kvantová mechanika II” za LS 2018/19. Úlohy byly zamýšleny tak, že by je měl být schopen beze zbytku vyřešit každý, kdo absolvoval přednášku a cvičení pokud by měl dost času, ale k vyřešení úloh v časovém limitu (90min) je potřeba ještě trochu tvůrčí invence a porozumění různým souvislostem v látce přednášky.

Na získání zápočtu by vám mělo stačit získat pár bodů, k vykompenzování případných bodových ztrát z domácích úloh. Snažil jsem se úlohy volit tak, aby každý kdo se věnoval hlouběji přípravě a spočítal si předem pár úloh, byl v časovém limitu schopen získat alespoň polovinu bodů z maxima 50 bodů, což (spolu s domácími úlohami) stačí na odpuštění řešení dalších úloh při zkoušce. V tomto semestru jsem umožnil studentům řešit písemku na zápočet doma, ale pokud se chtěli kvalifikovat na ulehčení praktické části zkoušky, museli písemku řešit pod dohledem ve stanoveném limitu. Nakonec se o to pokusilo 13 lidí a průměrný zisk bodů byl 21,4 a zkouškové počítání jsem odpustil těm, kteří tuto hranici překročili. Nejlepší řešitel dosáhl 43 bodů.

V následujícím textu naleznete vzorové řešení. Doporučuji si je pečlivě přečíst pro přípravu ke zkoušce. Pokud to bylo možné, snažil jsem ukázat, nebo alespoň naznačit několik postupů vedoucích k řešení a rovněž poukázat na různé souvislosti.

Úloha 1(10 bodů)
Uvažujme dvě (rozlišitelné) částice na kroužku popsané hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi_1^2} + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi_2^2}\right] + \lambda\cos(\varphi_1 - \varphi_2).$$

Pomocí variačního principu najděte nejlepší odhad energie základního stavu. Testovací funkci berte ve tvaru $\psi(\varphi_1, \varphi_2) = \alpha + \beta\cos(\varphi_1 - \varphi_2)$, kde α, β jsou variační parametry. Pro finální výsledek volte $\lambda = 1/\sqrt{2}$.

Řešení: Nejsnazší cesta k řešení je vzpomenout si na teorii z přednášky a uvědomit si, že navržená testovací funkce je lineární kombinací dvou funkcí $\psi_0 = 1$ a $\psi_1 = \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$, které jsou navzájem ortogonální, takže minimum funkcionálu energie odpovídá nejnižšímu vlastnímu číslu matice hamiltoniánu vyjádřené v této bázi testovacího podprostoru. Nejdříve spočteme normovací konstanty těchto funkcí

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} |\psi_0|^2 \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 &= \int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} 1 \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 = (2\pi)^2, \\
\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} |\psi_1|^2 \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 &= \int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \cos^2(\varphi_1 - \varphi_2)\, \mathrm{d}\varphi_1 \mathrm{d}\varphi_2 = \int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \cos^2\varphi\, \mathrm{d}\varphi\ \mathrm{d}\varphi_2 = \pi(2\pi),
\end{aligned}$$

kde druhý integrál jsme spočetli tak, že jsme si uvědomili, že ve vnitřním integrálu lze udělat substituci $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$, kde φ_2 chápeme jako konstantu a vnitřní integrál tudíž je prostě integrál z $\cos(\varphi)^2$ což je π. Meze integrálu se substitucí nezmění, protože integrujeme periodickou funkci přes periodu. Vnější integrál pak přispěje dalším faktorem 2π. Takže máme normovanou bázi testovacího podprostoru $\psi_0 = \frac{1}{2\pi}$ a $\psi_1 = \frac{1}{\pi\sqrt{2}}\cos(\varphi_1 - \varphi_2)$. Matici hamiltoniánu $H_{ij} = \langle\psi_i|H|\psi_j\rangle$ si rozdělíme na kinetickou a potenciální energii (člen úměrný λ). Z matice T_{ij} kinetické energie je nenulový jen člen T_{11}, protože $\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi_0(\varphi) = 0$. Tento člen snadno spočteme

$$\begin{aligned}
\langle\psi_1|T|\psi_1\rangle &= -\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \cos(\varphi_1 - \varphi_2)\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi_1^2} + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi_2^2}\right]\cos(\varphi_1 - \varphi_2)\mathrm{d}\varphi_1\mathrm{d}\varphi_2 \\
&= \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2\pi^2}\int\int 2\cos(\varphi_1 - \varphi_2)^2 \mathrm{d}\varphi_1\mathrm{d}\varphi_2 = 1,
\end{aligned}$$

kde jsme se setkali se stejným integrálem jako při normalizaci, takže jej už známe. V matici pro kinetickou energii jsou nenulové jen členy, které obsahují sudé mocniny cosinu, takže $V_{00} = V_{11} = 0$ a vypočteme

$$V_{01} = V_{10} = \tfrac{\lambda}{2\sqrt{2}\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \cos(\varphi_1 - \varphi_2)^2 = \frac{\lambda}{\sqrt{2}},$$

kde jsme narazili opět na náš známý integrál. Takže matice hamiltoniánu je

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \lambda/\sqrt{2} \\ \lambda/\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}.$$

Jejím charakteristickým polynomem je

$$(0 - E)(1 - E) - \lambda^2/2 = E^2 - E - \lambda^2/2$$

s kořeny $E = \frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{1 + 2\lambda^2})$, takže pro $\lambda = 1/\sqrt{2}$ ze zadání úlohy je menší z nich $E = (1 - \sqrt{2})/2$ hledaným variačním odhadem energie základního stavu.

Další varianty řešení:
Bohužel nikdo z řešitelů si nevzpomněl na možnost diagonalizovat matici hamiltoniánu pro variační funkci ve tvaru lineární kombinace a používali jste přímočařejší postup, který ale vedl na obtížnější minimalizaci. Ukážeme si tedy, jak by se dalo postupovat v tomto případě. Přímý výpočet využívající stejné integrály jako výše dá pro $\psi(\varphi_1, \varphi_2) = \alpha + \beta\cos(\varphi_1 - \varphi_2)$

$$\begin{aligned} n = \langle\psi|\psi\rangle &= 4\pi^2\alpha^2 + 2\pi^2\beta^2, \\ h = \langle\psi|H|\psi\rangle &= 4\pi^2\lambda\alpha\beta + 2\pi^2\beta^2. \end{aligned}$$

Nyní lze postupovat několika různými způsoby

1. minimalizace $\langle H\rangle$ za podmínky $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ metodou Lagrangeových multiplikátorů vede na rovnice

$$\begin{aligned} \partial h/\partial\alpha - E\partial n/\partial\alpha &= 2\pi^2(2\lambda\beta - E4\alpha) = 0, \\ \partial h/\partial\beta - E\partial n/\partial\beta &= 2\pi^2(2\lambda\alpha + 2\beta - E2\alpha) = 0, \end{aligned}$$

   přičemž Lagrangeův multiplikátor je E. Tato soustava rovnic má netrivialní řešení jen pokud je determinant soustavy roven nule. To dá podmínku na E a ukazuje se, že toto E je rovněž stacionární hodnotou podílu h/n. Podmínka na determinant dá stejný charakteristický polynom jako na předchozí straně.

2. jinou alternativou je splnit normalizační podmínku položením $\alpha = \cos\gamma/2\pi$ a $\beta = \sin\gamma/\sqrt{2}\pi$. Potom platí (s dosazenim $\lambda = 1/\sqrt{2}$ a užitím goniometrických identit)

$$\langle H\rangle = \sin^2\gamma + \lambda\sqrt{2}\sin\gamma\cos\gamma = \tfrac{1}{2}[1 - \cos 2\gamma + \sin 2\gamma] = \tfrac{1}{2}(1 + \sqrt{2}\sin(2\gamma - \pi/4)),$$

   přičemž minimum této funkce evidentně je $E = (1 - \sqrt{2})/2$.

3. prakticky všichni řešitelé volili nejhorší variantu, udělat si z lineární úlohy nelineární tím, že budeme hledat přímo minimum funkce

$$E(\alpha, \beta) = \frac{\langle H\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{2\alpha^2 + \beta^2}{2\lambda\alpha\beta + \beta^2}.$$

   Najít toto pomocí analýzy parciálních derivací této funkce je v čase vymezeném pro písemku prakticky nemožné (zkuste si vypočíst α a β nezávisle z vlastních vektorů matice na předchozí straně - nevyjdou moc hezky a přitom pro skutečné nalezení energie je ani nepotřebujete).

Poznámka: Porovnejte tuto úlohu s úlohou 1 ze cvičení 2. Zjistíte, že jsou prakticky totožné, takže mne trochu zklamalo, že nikdo nevyužil zkušeností z té úlohy pro minimalizaci.

Úloha 2(10 bodů)
Vyjádřete všechny maticové elementy složek operátoru hybnosti $\langle nlm|\hat{p}_i|nl'm'\rangle$ mezi stacionárními stavy $|nlm\rangle$ atomu vodíku pro $n=2$, pokud víte, že $\langle 210|\hat{p}_z|200\rangle = C$.

Řešení:

Nejdříve si ujasněme o jakých stavech mluvíme. Pro hladinu $n=2$ připadá v úvahu $l=0$ - s-stav $|200\rangle$ a $l=1$ - p-stavy, tj. $|21m\rangle$ (tři stavy $m=-1,0,1$). Dohromady jde tedy o 4 stavy, tj. úloha žádá celkem výpočet 4x4x3=48 maticových elementů! Je jasné že musíme nejdříve trochu přemýšlet.

Hodně maticových elementů můžeme vyloučit díky paritě. Na přednášce jsme si říkali, že maticový element typu $\langle\psi|\hat{A}|\psi'\rangle$ je nulový pokud součin parity operátoru $\hat{A}$, a vlnových funkcí $|\psi\rangle$ a $|\psi'\rangle$ je záporný. Parita funkce $|nlm\rangle$ je $(-1)^l$ a parita složek hybnosti je -1 (polární vektor). Takže maticové elementy typu $\langle 200|\hat{p}_i|200\rangle$ a $\langle 21m|\hat{p}_i|21m'\rangle$ jsou nulové. Zbývají $\langle 21m|\hat{p}_i|200\rangle = \langle 200|\hat{p}_i|2lm\rangle^*$, takže už jen 9 nezávislých čísel. Wignerova-Eckartova věta říká, že

$$\langle 21m|\hat{p}^{(1)}_M|200\rangle = \langle 1M00|1m\rangle C = \delta_{mM} C,$$

kde jsme využili obzvláště jednoduchého tvaru Clebsch-Gordanových koeficientů pro skládání momentu hybnosti 1+0 a $C = (21||p||20)/\sqrt{3}$. Navíc ireducibilní komponenta operátoru hybnosti $\hat{p}^{(1)}_0 = \hat{p}_z$ takže konstanta C ve Wignerově-Eckartově větě je totožná s konstantou C v zadání (potřebný Clebsch-Gordanův koeficient $\langle 1000|10\rangle = 1$)

$$\langle 210|\hat{p}^{(1)}_0|200\rangle = \langle 210|\hat{p}_z|200\rangle = C$$

a ostatní dva maticové elementy z-složky jsou nulové ($\langle 1000|11\rangle = \langle 1000|1-1\rangle = 0$)

$$\langle 211|p_z|200\rangle = \langle 21\text{-}1|p_z|200\rangle = 0.$$

Jak jsme si říkali na přednášce další dvě ireducibilní komponenty operátoru hybnosti jsou

$$\hat{p}^{(1)}_1 = -\tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p}_x + i\hat{p}_y), \qquad \hat{p}^{(1)}_{-1} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)$$

(vzpomeňte si jak lze pro odvození těchto vztahů použít tabulku sférických harmonik). Tyto vztahy snadno invertujeme což nám umožní spočíst zbývající elementy

$$\begin{aligned}
\langle 21\text{-}1|p_x|200\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\langle 21\text{-}1|(\hat{p}^{(1)}_{-1} - \hat{p}^{(1)}_1)|200\rangle = \tfrac{C}{\sqrt{2}},\\
\langle 211|p_x|200\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\langle 211|(\hat{p}^{(1)}_{-1} - \hat{p}^{(1)}_1)|200\rangle = -\tfrac{C}{\sqrt{2}},\\
\langle 210|p_x|200\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\langle 210|(\hat{p}^{(1)}_{-1} - \hat{p}^{(1)}_1)|200\rangle = 0,\\
\langle 21\text{-}1|p_y|200\rangle &= \tfrac{i}{\sqrt{2}}\langle 21\text{-}1|(\hat{p}^{(1)}_{-1} + \hat{p}^{(1)}_1)|200\rangle = \tfrac{iC}{\sqrt{2}},\\
\langle 211|p_y|200\rangle &= \tfrac{i}{\sqrt{2}}\langle 211|(\hat{p}^{(1)}_{-1} + \hat{p}^{(1)}_1)|200\rangle = \tfrac{iC}{\sqrt{2}},\\
\langle 210|p_y|200\rangle &= \tfrac{i}{\sqrt{2}}\langle 210|(\hat{p}^{(1)}_{-1} + \hat{p}^{(1)}_1)|200\rangle = 0,
\end{aligned}$$

kde při výpočtu maticových elementů na pravé straně vycházejí vždy jen Clebsch-Gordanovy koeficienty, které jsou buď 0 nebo 1. Mimochodem pozor na komplexní sdružování, kdybyste chtěli napsat maticové elementy obráceně jako $\langle 200|p_i|21m\rangle$, protože zadaná konstanta se dá snadno vypočíst a vyjde $C = -\frac{i\hbar}{360a_0}$, tedy ryze imaginární. Řešitelé si občas neuvědomili, že hledané maticové elementy jsou kontrolovány čtyřmi různými redukovanými elementy $(20||p||20) = (21||p||21) = 0$ (zdůvodnili jsme výše paritou), $(21||p||20) = C\sqrt{3}$ a $(20||p||21) = C^*\sqrt{3}$. Jinak tato úloha patřila k nejméně úspěšným navzdory tomu, že se dala zodpovědět téměř bez počítání.

Úloha 3(10 bodů)
Protónium je vázaným stavem protonu a antiprotonu. Když nebudeme uvažovat možnost anihilace a započteme jen Coulombickou interakci jde vlastně o vodíku-podobný atom. Označme celkový moment hybnosti $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{2}$, kde $\vec{L}$ je orbitální moment hybnosti a $\vec{S}^{(1)}$ a $\vec{S}^{(2)}$ jsou spinové momenty protonu a antiprotonu (částice se spinem 1/2). Uvažujte první dvě energetické hladiny a najděte mezi stavy těchto dvou hladin stav $|\psi\rangle$ s největším celkovým momentem hybnosti $\vec{J}^2$ a nulovou projekcí $\hat{J}_z$ na osu z. Jaká je pravděpodobnost naměřit ve stavu $|\psi\rangle$ nulovou projekci orbitálního momentu hybnosti $\vec{L}$ na osu z.

Řešení:
Nejdříve je potřeba zjistit jaký je největší moment hybnosti. Jde o skládání tří momentů, takže můžeme začít třeba spinem $S = S^{(1)} + S^{(2)} = 1/2 + 1/2$. Podle pravidel skládání momentu hybnosti dostáváme spinový singlet $s = 0$ a spinový triplet $s = 1$ a k těmto hodnotám je potřeba přičíst orbitální moment hybnosti. V případě singletu bude celkový moment hybnosti prostě roven $0 + l$ orbitálnímu momentu hybnosti. První dvě energetické hladiny $n = 1$ a $n = 2$ mají povolené orbitální momenty hybnosti $l = 0, 1$ což jsou tedy také možné hodnoty celkového momentu hybnosti J. Pro tripletní stavy musíme sečíst spinový $s = 1$ a orbitální moment hybnosti. Největší hodnota odpovídající skládání momentu hybnosti $1 + 1$ tedy je $J = 2$. Stav $|\psi\rangle$ bychom určili pomocí pravidel skládání momentu hybnosti a Clebsch-Gordanových koeficientů, ale lze jej také získat dvojnásobným působením posunovacího operátoru $\hat{J}_- = \hat{L}_- + \hat{S}_-^{(1)} + \hat{S}_-^{(2)}$ na stav s největší možnou z-složkou momnetu hybnosti což je stav $|M\rangle|s_1\rangle|s_2\rangle \equiv |Ms_1s_2\rangle$ pro $M = 1$ a $s_1 = s_2 = +$, takže

$$\begin{aligned}
\hat{J}_-|1{+}{+}\rangle &= \sqrt{2}|0{+}{+}\rangle + |1{-}{+}\rangle + |1{+}{-}\rangle \\
(\hat{J}_-)^2|1{+}{+}\rangle &= (2|\text{-}1{+}{+}\rangle + \sqrt{2}|0{-}{+}\rangle\sqrt{2}|0{+}{-}\rangle) + (\sqrt{2}|0{-}{+}\rangle + |1{-}{-}\rangle) + (\sqrt{2}|0{+}{-}\rangle + |1{-}{-}\rangle),
\end{aligned}$$

neboli po normování

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[|\text{-}1{+}{+}\rangle + \sqrt{2}|0{-}{+}\rangle + \sqrt{2}|0{+}{-}\rangle + |1{-}{-}\rangle].$$

Odtud je již vidět hledaná pravděpodobnost, která je součtem kvadrátů koeficientů u druhého a třetího členu, tj. $p = 2/3$.

Další varianty řešení:
V řešení výše jsem zkonstruoval hledaný vektor $|\psi\rangle = |JM\rangle$ pro $j = 2$ a $M = 0$ přímo posunovacím operátorem na stav tří spinů. Ve většíně z vašich správných řešení jste předpokládali, že už máte poskládané spiny do spinového tripletu $|s\mu\rangle$, kde $s = 1$ a $\mu = -, 0, +$ a ten jste pak složili s orbitálním momentem s bází stavů $|lm\rangle$, kde $l = 1$ a $m = -, 0, +$. Hledaný vektor pak vychází (opět dvojnásobným působením posunovacího operátoru J_- tentokrát na vektor $|1+\rangle|1+\rangle$)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[|1+\rangle|1-\rangle + 2|10\rangle|10\rangle + |1-\rangle|1+\rangle],$$

kde kvadrát prostřeního koeficientu dá opět hledanou pravděpodobnost $p = 4/6$.

Toto číslo je rovněž možno napsat rovnou jako kvadrát příslušného Clebschova-Gordanova koeficientu, který odpovídá tomu, že chceme složením "1+1" dostat $J = 2$ a $M = 0$, který je rozvinutý do faktorizované báze

$$|JM\rangle = \sum_{m\mu} \langle lms\mu|JM\rangle|lm\rangle|s\mu\rangle,$$

přičemž se ptáme na člen s $m = 0$ a tudíž, abychom splnili $m + \mu = M = 0$, musí být rovněž $\mu = 0$, tj. zajímá nás koeficient

$$p = |\langle 1010|20\rangle|^2.$$

Úloha 4(10 bodů)
Částice v kvantové trojtečce má hamiltonián

$$\hat{H} = -\beta(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 1|) + h.c.,$$

kde $\beta > 0$ jen konstanta. Uvažujte takovou trojtečku zaplněnou třemi navzájem neiteragujícími nerozlišitelnými fermiony se spinem 1/2. Jaký je rozdíl energií stavu s nejnižší a nejvyšší energií?

Řešení:
Najdeme nejdříve jednočásticové stavy zadaného hamiltoniánu. Ten lze napsat v bázi $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ jako β-násobek matice

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Charakteristickým polynomem této matice je $\lambda^3 - 3\lambda + 2$ jehož kořeny jsou $\lambda = -2, 1, 1$. Energie jednočásticových stavů tedy jsou $E_1 = -2\beta$ a $E_2 = \beta$ (dvakrát degenerovaná hladina). Označme příslušné stacionární jednočásticové stavy $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ a $|\psi_3\rangle$. Pro tři částice máme k dispozici dohromady 6 stavů $|\psi_k\rangle|s\rangle$, kde $k = 1, 2, 3$ a spin $s = \pm$ a každému z nich odpovídá obsazovací číslo N_{ks}, které může být 0 nebo 1. Nejnižší energii bude mít stav, kde dvě částice jsou ve stavu ψ_1 a mají opačný spin a třetí částice je v některém ze zbývajících stavů (nezapomeňme, že jde o fermiony a v každém stavu smí být nejvýše jeden). Energie tohoto stavu je součtem jednočásticových energií tj. -3β (mimochodem tato hladina je 4krát degenerovaná). Naopak nejvyšší energii má stav v němž jsou všechny tři částice v některém ze 4 stavů s energií β tj. celkem energie 3β (rozmyslete, že tato hladina je rovněž 4krát degenerovaná). Hledaný rozdíl energií tedy je 6β.

Úloha 5(10 bodů)
V systému z předchozí úlohy definujeme kreační operátor $\hat{c}^\dagger_{ns}$, který kreuje částici v tečce $|n\rangle$ se spinem $|s\rangle$, kde $n = 1, 2, 3$ značí tečku a $s = \pm$ značí spin $\pm\hbar/2$. Najděte vyjádření operátoru $\hat{H}$ ve druhém kvantování (5 bodů). Najděte ve druhém kvantování vyjádření operátoru kvadrátu celkového spinu všech částic v tečce (5 bodů).

Řešení:
Odpověď na **první část** najdeme přímočarou aplikací teorie z přednášky. Operátor $\hat{H}$ je jednočásticový operátor a jeho zápis ve druhém kvantování najdeme ze znalosti maticových elementů (porovnejte s maticovým zápisem v předchozí úloze)

$$\langle m|\hat{H}|n\rangle = -\beta(1 - \delta_{m,n}).$$

Navíc je potřeba vzít v úvahu, že operátor nepůsobí na spinové stupně volnosti, takže ve spinových proměnných je to jednotkový operátor. Zápis tohoto operátoru ve Fockově prostoru tedy bude

$$\hat{H} = \sum_{m,n}\sum_{s,s'}\langle m|\hat{H}|n\rangle\delta_{s,s'}\hat{c}^\dagger_{ms}\hat{c}_{ns'} = -\beta\sum_{m,n}\sum_{s}(1-\delta_{m,n})\hat{c}^\dagger_{ms}\hat{c}_{ns}. = \beta\left[\hat{N} - \sum_{m,n}\sum_{s}\hat{c}^\dagger_{ms}\hat{c}_{ns}\right],$$

kde v poslední rovnosti jsme využili toho, že část výrazu je operátorem celkového počtu částic. Někteří jste zapsali výsledek ve tvaru

$$\hat{H} = -\beta\sum_{s}\left[\hat{c}^\dagger_{1s}\hat{c}_{2s} + \hat{c}^\dagger_{2s}\hat{c}_{3s} + \hat{c}^\dagger_{3s}\hat{c}_{1s} + \hat{c}^\dagger_{2s}\hat{c}_{1s} + \hat{c}^\dagger_{3s}\hat{c}_{1s} + \hat{c}^\dagger_{1s}\hat{c}_{3s}\right]$$

který je samozřejmě rovněž správně.

Druhá část je trochu komplikovanější. Složka celkového spinu $\hat{S}_\alpha$ je jednočásticový operátor, který je dán součtem spinu jednotlivých částic $\hat{S}_\alpha = \sum_i \hat{s}^{(i)}_\alpha$. Jednotlivé spiny i-té částice pak mají maticové elementy dané Pauliho maticemi σ a proto

$$\hat{S}_\alpha = \frac{\hbar}{2}\sum_{n}\sum_{ss'}\sigma_{ss'}\hat{c}^\dagger_{ns}\hat{c}_{ns'},$$

takže

$$\hat{S}_x = \tfrac{\hbar}{2}\sum_n\left[\hat{c}^\dagger_{n+}\hat{c}_{n-} + \hat{c}^\dagger_{n-}\hat{c}_{n+}\right], \qquad \hat{S}_y = \tfrac{i\hbar}{2}\sum_n\left[\hat{c}^\dagger_{n-}\hat{c}_{n+} - \hat{c}^\dagger_{n+}\hat{c}_{n-}\right], \qquad \hat{S}_z = \tfrac{\hbar}{2}\sum_n\left[\hat{c}^\dagger_{n+}\hat{c}_{n+} - \hat{c}^\dagger_{n-}\hat{c}_{n-}\right].$$

Operátor kvadrátu momentu hybnosti pak je

$$\hat{S}^2 = \hat{S}^2_x + \hat{S}^2_y + \hat{S}^2_z.$$

Do tohoto výrazu by pak šlo dále dosadit předchozí výrazy v druhém kvantování a upravit do pěknějšího tvaru, ale to už není nezbytné.

Poznámka: Rozepsáním definice

$$\hat{S}^2 = \left[\sum_i \vec{\hat{s}}^{(i)}\right]^2 = \sum_i \hat{s}^{2(i)} + 2\sum_{i>j}\vec{\hat{s}}^{(i)}\cdot\vec{\hat{s}}^{(j)}$$

je vidět, že operátor kvadrátu celkového spinu je součtem jednočásticového a dvoučásticového operátoru, takže by šlo použít vzorečky pro takové operátory z přednášky, ale to by bylo na možnosti písemného testu dosti zdlouhavé.