

Systemy více částic

motivace:

- zacházení se systémy, které se nedají redukovat na pohyb jedné částice v poh. (jako např. u atomu H)

Př. atom He - 2 elektrony v obalu s coulombovskou interakcí

jádra atomů - soubory protonů a neutronů držené pohromadě silnou jadernou interakcí

pevná látka - soubor elektronů a jader s coulombovskou interakcí

- částice obvykle interagují, ale i soubory neinteragujících částic jsou v QM netriviální,

pokud jde o částice **nerozlišitelné/identické** → kvantová statistika pro bosony a fermiony

1 Vícečásticové vlnové funkce a vícečásticové operátory (souřadnicová reprezentace)

• vícečásticové vlnové funkce Ψ (zatím nezahrneme spin, čas a případnou nerozlišitelnost)

- pro každou částici v systému je mezi argumenty Ψ sada souřadnic příslušné částice

→ $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ pro N částic

• interpretace: $|\Psi|^2$ je hustota pravděpodobnosti současného nalezení částic v daných pozicích pro 1 částici ve 3D (opakování jednočásticového případu)

$P(\text{částice nalezena v objemu } d^3\vec{r} \text{ okolo pozice } \vec{r}) = |\Psi(\vec{r})| d^3\vec{r}$

pro N částic v 3D

$P(\text{částice 1 nalezena v objemu } d^3\vec{r}_1 \text{ okolo } \vec{r}_1 \wedge \dots$

$\dots \wedge \text{částice } N \text{ nalezena v objemu } d^3\vec{r}_N \text{ okolo } \vec{r}_N) = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_N$

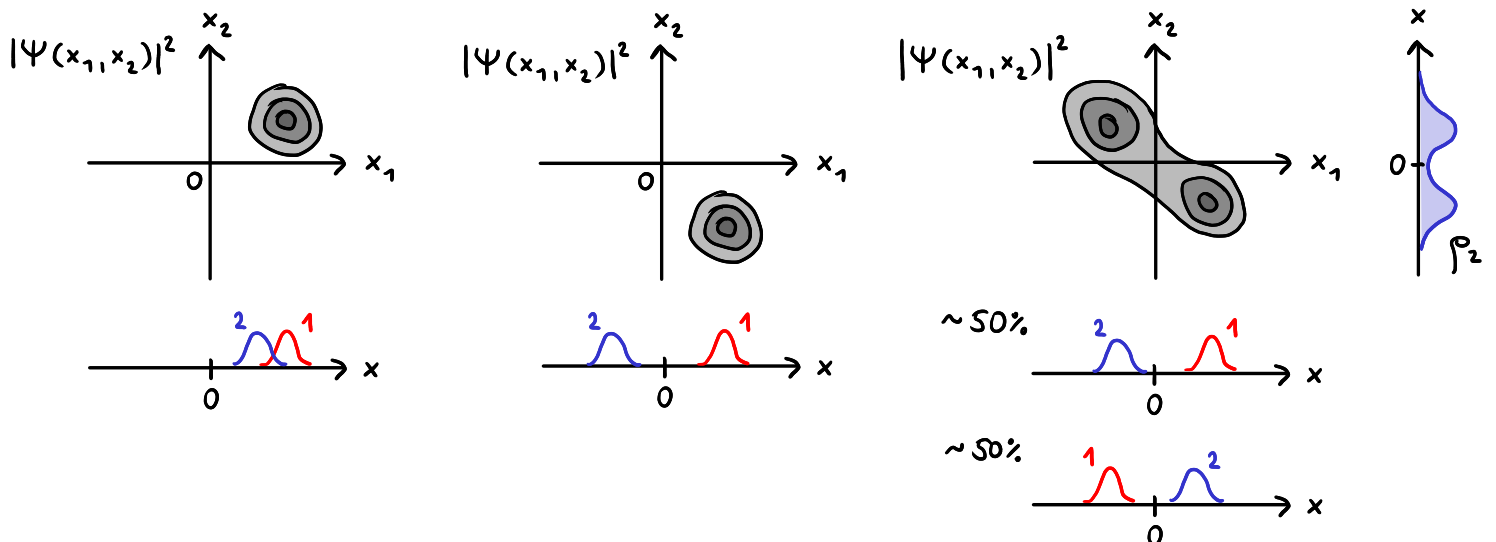
• normování $\int |\Psi|^2 = 1$ explicitně: $\int d^3\vec{r}_1 \dots \int d^3\vec{r}_N |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 = 1$

• hustoty pravděpodobnosti nalezení jednotlivých částic bez ohledu na ostatní

$\rho_j(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}_1 \dots \int d^3\vec{r}_{j-1} \int d^3\vec{r}_{j+1} \dots \int d^3\vec{r}_N |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2$ ($\int d^3\vec{r} \rho(\vec{r}) = 1$)

Př. dvě částice v 1D popsane stacionární $\Psi(x_1, x_2)$

$P(\text{částice 1 v intervalu } [x_1, x_1+dx_1] \wedge \text{částice 2 v intervalu } [x_2, x_2+dx_2]) = |\Psi(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2$



- vícečásticové operátory - nutno specifikovat, které souřadnice jsou relevantní

Př. atom vodíku - dvoučásticová soustava protonu a elektronu popsána vln. funkcí $\Psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e)$

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_{\vec{r}_p}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}_e}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_p - \vec{r}_e|} \right) \Psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e)$$

zde možno převést na dvě jednočásticové úlohy separovaním pohybu těžiště a relativního

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{r}_M}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}_{rel}}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_{rel}|} \right) \underbrace{\chi(\vec{r}_M) \phi(\vec{r}_{rel})}_{\Psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e)} = E \chi(\vec{r}_M) \phi(\vec{r}_{rel})$$

Př. elektronový obal atomu hélia - dva elektrony s polohami \vec{r}_1, \vec{r}_2 vystupujícími v $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2}_{\text{kinetická energie}} - \underbrace{\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}}_{\text{energie v poli jádra}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{\text{odpuzování mezi elektrony}} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

2) Vícečásticové Hilbertovy prostory a vícečásticové operátory (abstraktní popis)

- Hilbertův prostor je tenzorovým součinem Hilbertových prostorů jednotlivých částic

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_2 \otimes \mathcal{X}_3 \dots \otimes \mathcal{X}_N, \text{ kde } \mathcal{X}_j \text{ je Hilbertův prostor částice } j$$

tj. prvky \mathcal{X} jsou všechny možné vektory typu $|\psi\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_N\rangle$
a jejich lineární kombinace

- vícečásticový operátor - zobrazení vektorů z \mathcal{X} na vektory z \mathcal{X} , značení $|\eta\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ jako dříve

Př. dvě fixní částice se spinem $\frac{1}{2}$ - \mathcal{X}_1 i \mathcal{X}_2 jsou vyplněny vektory typu $\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_2 \text{ je vyplněn vektory } |\psi\rangle = c_1|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + c_2|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + c_3|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + c_4|\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

- čtyři báze vektory $|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle, \dots$ zachycují všechny kombinace báze vektorů \mathcal{X}_1 a \mathcal{X}_2

(dimenze \mathcal{X} pro obecně N spinů je $\dim \mathcal{X} = 2^N$)

- význam např. c_3 : $|c_3|^2 = P(\text{u částice 1 detekujeme } S_z = -\frac{\hbar}{2} \text{ a zároveň u částice 2 } S_z = +\frac{\hbar}{2})$

- ukázka působení operátoru:

$$\begin{aligned} S_1^+ S_2^z |\psi\rangle &= c_1 S_1^+ S_2^z |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + c_2 S_1^+ S_2^z |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + c_3 S_1^+ S_2^z |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + c_4 S_1^+ S_2^z |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ &= c_3 \hbar \left(\frac{\hbar}{2}\right) |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + c_4 \hbar \left(-\frac{\hbar}{2}\right) |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

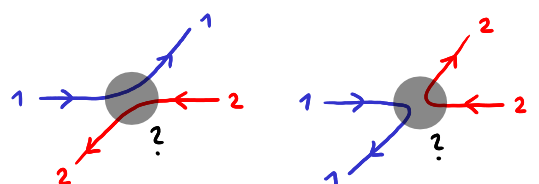
3) Nerozlišitelné / identické částice

- v klasické mechanice sledujeme trajektorie jednotlivých částic

- v kvantové mechanice nelze sledovat beze změny stavu

a vlnové funkce se mohou navíc překrývat

(viz rozptyl identických částic)



→ předpoklad: $|\Psi(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N)|^2$ se nezmění při záměně souřadnic $\bar{r}_i \leftrightarrow \bar{r}_j$ identických částic

- Formální zpracování předpokladu o $|\Psi|^2$, symetrické a antisymetrické vlnové funkce

permutační operátor $(\hat{P}\Psi)(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \Psi(\bar{r}_2, \bar{r}_1)$ (lze zavést i v abstraktním \mathcal{X} : $\hat{P}|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$)
 pro N částic máme $\binom{N}{2}$ různých permutačních operátorů \hat{P}_{ij}

a) $|\Psi(\bar{r}_1 \dots \bar{r}_N)|^2$ se nezmění při záměně \bar{r}_i a \bar{r}_j → $\hat{P}_{ij}\Psi = \eta_{ij}\Psi$, kde $|\eta_{ij}| = 1$

Ψ je vlastní stav všech \hat{P}_{ij} s vlastními hodnotami η_{ij} , možné hodnoty η_{ij} určíme opakovaným působením \hat{P}_{ij} , které vrátí vše do původního stavu → $\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}\Psi = \Psi \rightarrow \eta_{ij}^2 \rightarrow \eta_{ij} = \pm 1$

b) všechny η_{ij} (pro všechny páry ij) jsou stejné

důkaz: $\hat{P}_{ij}\Psi = \hat{P}_{1i}\hat{P}_{2j}\hat{P}_{12}\hat{P}_{1i}\hat{P}_{2j}\Psi \rightarrow \eta_{ij} = \eta_{1i}\eta_{2j}\eta_{12}\eta_{1i}\eta_{2j} = \eta_{12}\eta_{1i}^2\eta_{2j}^2 = \eta_{12}$

c) Je-li $\hat{P}_{ij}|\psi(t)\rangle = \eta_{ij}|\psi(t)\rangle$, pak to platí i v ostatních časech díky $[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0$ (tj. $\hat{P}^{-1}\hat{H}\hat{P} = \hat{H}$)

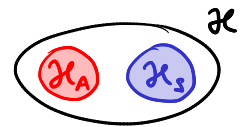
ze Sch.r. $i\hbar\partial_t|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ plyne $|\psi(t+dt)\rangle = (1 + \frac{1}{i\hbar}\hat{H})|\psi(t)\rangle$ pro $dt \rightarrow 0$

$\hat{P}_{ij}|\psi(t+dt)\rangle = \hat{P}_{ij}(1 + \frac{1}{i\hbar}\hat{H})|\psi(t)\rangle = (1 + \frac{1}{i\hbar}\hat{H})\hat{P}_{ij}|\psi(t)\rangle = \eta_{ij}(1 + \frac{1}{i\hbar}\hat{H})|\psi(t)\rangle = \eta_{ij}|\psi(t+dt)\rangle$

závěr: buď $\hat{P}_{ij}\Psi = +\Psi$ pro všechny páry ij , nebo $\hat{P}_{ij}\Psi = -\Psi$ pro všechny páry ij , obojí navždy

postulát o identických částicích

Stavy identických částic jsou buď zcela symetrické (bosony) nebo zcela antisymetrické (fermiony) vzhledem k permutaci částic.



Pauli 1940 dokázal přiřazení: poločíselný spin → fermiony, celočíselný spin → bosony

symetrizace a antisymetrizace

obecná vlnová funkce $\Psi(\bar{r}_1 \dots \bar{r}_N) \in \mathcal{X} \rightarrow$ fyzikální $\hat{S}\Psi \in \mathcal{X}_s$ nebo $\hat{A}\Psi \in \mathcal{X}_A$

pro dvě částice: bosony $\hat{S}\Psi = \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) + \Psi(\bar{r}_2, \bar{r}_1)$, fermiony $\hat{A}\Psi = \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) - \Psi(\bar{r}_2, \bar{r}_1)$

pro N částic: je třeba sčítat přes všechny permutace argumentů, u fermionů s přísl. znaménky

např. pro tři fermiony $\hat{A}\Psi = \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \bar{r}_3) + \Psi(\bar{r}_2, \bar{r}_3, \bar{r}_1) + \Psi(\bar{r}_3, \bar{r}_1, \bar{r}_2)$ sude' permut.
 $- \Psi(\bar{r}_2, \bar{r}_1, \bar{r}_3) - \Psi(\bar{r}_3, \bar{r}_2, \bar{r}_1) - \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_3, \bar{r}_2)$ liche' permut.

Př. aplikace - dva elektrony v elektronovém obalu atomu He

- úvahy o symetrii

\hat{H} neobsahuje spin → stav se separovanou prostorovou a spinovou částí

$\Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) (\alpha|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 + \beta|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 + \gamma|\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 + \delta|\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2)$

\hat{H} komutuje s \hat{P}_{12} → prostorové část sama o sobě vlastní stavem \hat{P}_{12}

celkově musí být stav antisymetrický - vznikne kombinací symetrické a antisym. části

→ tzv. singlet $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2)$ přičemž $\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

tzv. triplet $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2)$ přičemž $\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = -\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$
nebo s $|\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2$ nebo $|\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2$

• ilustrace: variační snahy E. Hylleraase v letech 1928-9

(v přednášce o přibližných metodách pro stacionární problémy)

$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ se hledá variační metodou, vhodná zkušební funkce pro singletní stav je

například $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{-\zeta r_1} e^{-\zeta r_2} (1 + A |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$, kde ζ, A jsou variační parametry

4) Nezávislé částice

- chybí vzájemná interakce (nebo ji ignorujeme): $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots + \hat{H}_N$

→ vlnové funkce lze hledat v separované tvaru

(= součin funkcí souřadnic jednotlivých částic, analogií je separace x, y, z pohybů u 3D harm. osc.)

- zaměříme se pro konkrétnost na řešení vlastního problému $\hat{H}\Psi = E\Psi$ a případ $N=2$

• rozlišitelné částice

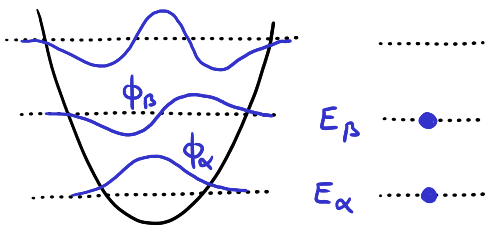
částice 1 v jednočásticovém stavu $\phi_{1\alpha}$: $\hat{H}_1 \phi_{1\alpha} = E_{1\alpha} \phi_{1\alpha}$
částice 2 v jednočásticovém stavu $\phi_{2\beta}$: $\hat{H}_2 \phi_{2\beta} = E_{2\beta} \phi_{2\beta}$

řešením $\hat{H}\Psi = E\Psi$ je $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_{1\alpha}(\vec{r}_1) \phi_{2\beta}(\vec{r}_2)$
s celkovou energií $E = E_{1\alpha} + E_{2\beta}$

• identické částice - bosony (pro jednoduchost zatím ignorujeme spin)

- všechny \hat{H}_i jsou stejné, máme jednu univerzální jednočástic. Sch. r. $\hat{H}_1 \phi = E \phi$

- vlnovou funkci lze založit na součinech jednoč. vlastních funkcí, ale musí být symmetrizována!



$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{S} [\phi_\alpha(\vec{r}_1) \phi_\beta(\vec{r}_2)]$
 $= \phi_\alpha(\vec{r}_1) \phi_\beta(\vec{r}_2) + \phi_\alpha(\vec{r}_2) \phi_\beta(\vec{r}_1)$ & normovat
celková energie je opět součet jednočásticových: $E = E_\alpha + E_\beta$

- bosonů může být v daném jednočásticovém stavu kolik chce, klidně i všechny

• identické částice - Fermiony

- opět lze vícečásticové vlastní stavy založit na řešeních jednočástic. Sch. r., ale je třeba antisymmetrizovat

$\phi_\alpha(\vec{r}_1) \phi_\beta(\vec{r}_2) \xrightarrow{\text{antisymmetrizace}} \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_\alpha(\vec{r}_1) \phi_\beta(\vec{r}_2) - \phi_\alpha(\vec{r}_2) \phi_\beta(\vec{r}_1)]$ (spin nyní ignorujeme)

$\phi_\alpha(\vec{r}_1) \phi_\alpha(\vec{r}_2) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_\alpha(\vec{r}_1) \phi_\alpha(\vec{r}_2) - \phi_\alpha(\vec{r}_2) \phi_\alpha(\vec{r}_1)] = 0 \leftarrow$

chceme-li použít pro oba Fermiony stejný stav, dojde k odečtení!

obrazkově i se spinem:

$$\hat{A} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle - |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = 0$$

$$\hat{A} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

→ **Pauliho princip**: Dva (nebo více) identické fermiony nemohou zaujmout stejný jednočásticový stav.

Pozn. Vlnové funkce více nezávislých identických fermionů výhodně zachycují Slaterovy determinanty (viz doplněk 1)

Př. Struktura atomových jader

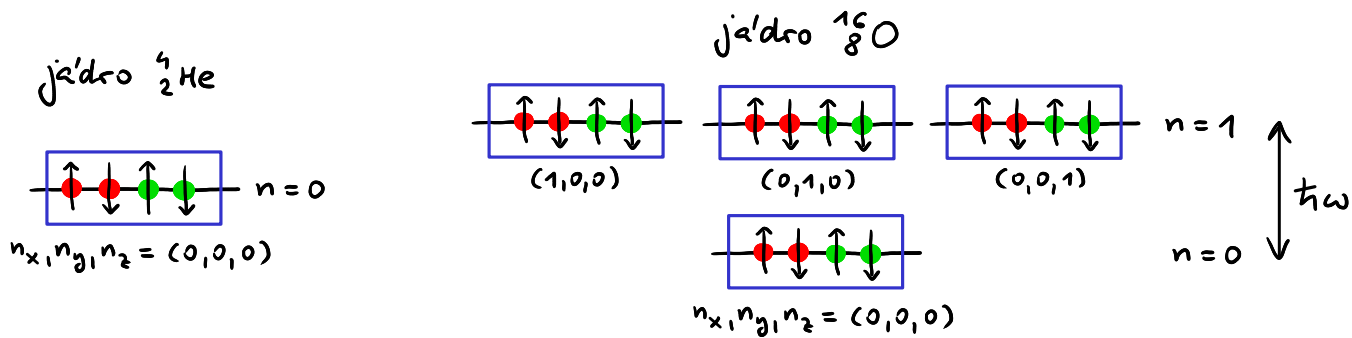
model: protony a neutrony v harmonické'm potenciálu, obsazování hladin jako n nezáv. částic

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) \text{ umožňuje separaci proměnných na tři 1D HO pro pohyb v } x, y, z$$

→ energie' hladiny $E = \hbar \omega (n + \frac{3}{2})$, kde $n = n_x + n_y + n_z$ s libovolnými $n_j \in 0, 1, 2, 3, \dots$

hladina $n =$	0	1	2	3	4	
degenerace	1	3	6	10	15	obecně $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$

každý stav 3D HO mohou obsadit až dva protony (spin \uparrow, \downarrow) a dva neutrony:



izotop ${}^A_Z X$: A ... nukleonové číslo; Z ... protonové (určuje prvek); $N = A - Z$... neutronové

magická' protonová a neutronová' čísla: 2, 8, 20, 28, 50, 82, ... → zde již jednoduchý 3D HO nestačí

Z nebo N magické' → zvýšená' stabilita' jádra

Z i N magická' → velmi stabilní' jádro (např. ${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{40}_{20}\text{Ca}$, ${}^{48}_{20}\text{Ca}$)

Pozn.: laureáti' NC 1963: Wigner Jenö Pál } za přínos k teorii jader a elem. částic,
 Maria Göppert-Mayer } Fundam. principy symetrie
 J. Hans D. Jensen } za slopkovou strukturu jader

Doplňek 1

Slaterův determinant - úplně antisymetrizovaný součin jednočasticových vlnových funkcí

příklad pro N identických fermionů (spin ignorujeme), které obsadí jednočasticové stavy popsané ortogonálními vlnovými funkcemi $\phi_{\alpha_1}(\vec{r}), \phi_{\alpha_2}(\vec{r}), \dots, \phi_{\alpha_N}(\vec{r})$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{\alpha_1}(\vec{r}_1) & \phi_{\alpha_1}(\vec{r}_2) & \dots & \phi_{\alpha_1}(\vec{r}_N) \\ \phi_{\alpha_2}(\vec{r}_1) & \phi_{\alpha_2}(\vec{r}_2) & \dots & \phi_{\alpha_2}(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{\alpha_N}(\vec{r}_1) & \phi_{\alpha_N}(\vec{r}_2) & \dots & \phi_{\alpha_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

- rozepsání determinantu vede na $N!$ součinů typu $\phi_{\alpha_1}(\vec{r}_1) \phi_{\alpha_2}(\vec{r}_2) \dots \phi_{\alpha_N}(\vec{r}_N)$ opatřených znaménky permutací, součiny jsou ortogonální, normované tedy zajišťuje prefaktor $\frac{1}{\sqrt{N!}}$
- zaměna libovolných dvou $\vec{r}_i \leftrightarrow \vec{r}_j$ odpovídá prohozením příslušných sloupců i a j v determinantu a je tak doprovázena změnou znaménka \rightarrow plně antisymetrická Ψ

Doplňek 2

Heisenbergův Hamiltonián - ukázka zacházení se systémem s více spiny

- popisuje izotropní interakci dvou spinů $s = \frac{1}{2}$ (tj. rotačně invariantní)
- po rozšíření na mřížku atomů základním modelem pro popis magnetických materiálů

$$\hat{H} = \frac{J}{\hbar^2} \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{J}{\hbar^2} (\hat{S}_1^x \hat{S}_2^x + \hat{S}_1^y \hat{S}_2^y + \hat{S}_1^z \hat{S}_2^z)$$

přepsání do žebříkových operátorů $\hat{S}^{\pm} = \hat{S}^x \pm i \hat{S}^y \rightarrow \hat{S}^x = \frac{\hat{S}^+ + \hat{S}^-}{2} \quad \hat{S}^y = \frac{\hat{S}^+ - \hat{S}^-}{2i}$

$$\hat{S}_1^x \hat{S}_2^x + \hat{S}_1^y \hat{S}_2^y = \frac{\hat{S}_1^+ + \hat{S}_1^-}{2} \frac{\hat{S}_2^+ + \hat{S}_2^-}{2} + \frac{\hat{S}_1^+ - \hat{S}_1^-}{2i} \frac{\hat{S}_2^+ - \hat{S}_2^-}{2i}$$

$$= \frac{1}{4} (\hat{S}_1^+ \hat{S}_2^+ + \hat{S}_1^- \hat{S}_2^- + \hat{S}_1^+ \hat{S}_2^- + \hat{S}_1^- \hat{S}_2^+) - \frac{1}{4} (\hat{S}_1^+ \hat{S}_2^+ + \hat{S}_1^- \hat{S}_2^- - \hat{S}_1^+ \hat{S}_2^- - \hat{S}_1^- \hat{S}_2^+)$$

$$= \frac{1}{2} (\hat{S}_1^+ \hat{S}_2^- + \hat{S}_1^- \hat{S}_2^+) \rightarrow \frac{\hbar^2}{J} \hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{S}_1^+ \hat{S}_2^- + \hat{S}_1^- \hat{S}_2^+) + \hat{S}_1^z \hat{S}_2^z$$

matice Hamiltoniánu v bázi: $|\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2$

$$H = J \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

nediagonální prvky spojují $\uparrow_1 \downarrow_2$ a $\downarrow_1 \uparrow_2$
a odpovídají působení $\hat{S}_1^+ \hat{S}_2^-$ a $\hat{S}_1^- \hat{S}_2^+$
diagonální prvky odpovídají působení $\hat{S}_1^z \hat{S}_2^z$

diagonalizaci' ziska'me vlastni' stavy se strukturou

$$E = -\frac{3}{4}J : \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2) \quad \text{singlet}$$

$$E = +\frac{1}{4}J : \left. \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2) \\ |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \\ |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{tři degenerované' vlastni' stavy} \\ \text{tvorí'ci' triplet} \end{array}$$