UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU

Todor P. Dragoljević

PROUČAVANJE NISKOTEMPERATURSKIH OSOBINA XY-MODELA

- diplomski rad -

NOVI SAD

1983.

Zahvaljujem se mentoru, dr Darku Kaporu, na pomoći u izboru teme, kao i u vođenju prilikom izrade. Takođe se zahvaljujem i dr Mariju Škrinjaru, na ukazanoj pomoći prilikom izrade rada.

Todor P. Dragoljević

S A D R Ž A J

U V O D

Ovaj rad ima za cilj proučavanje XY-modela u teoriji magnetizma. Model spada u ređe proučavane i stoga ćemo se ograničiti samo proučavanjem niskotemperaturskih osobina: energije osnovnog stanja, energije elementarnih eksitacija i devijacije magnetizacije u osnovnom sistemu (T = OK). Posebna pažnja je posvećena primeni bozonskih reprezentacija.

Prva glava posvećena je teoriji faznih prelaza. U drugoj glavi su proučene različite bozonske reprezentacije spinskih operatora koje se koriste u teoriji Hajzenbergovog feromagnetika. Treća glava je posvećena XY modelu i u njoj se iznose rezultati koje daju različite bozonske reprezentacije.

I GLAVA

FAZNI PRELAZI

Mnoge eksperimentalne činjenice koje se odnose na fazne prelaze i kritične pojave, poznate su još otprilike prije 50 do 100 godina, dok su neke zapažene u posljednim godinama. Fazni prelazi mogu relativno lako da se definišu i razvrstaju. Za neki termodinamički sistem kažemo da ima fazni prelaz n-tog reda ($n = 1,2,3,\ldots$), za one vrednosti parametra za koje odgovarajući termodinamički potencijal ima n-1 neprekidnih izvoda, a n-ti izvod divergira. Pored velikog broja faznih prelaza koji su uočeni, utvrdilo se da u prirodi postoje uglavnom fazni prelazi prvog i drugog reda. Međutim danas govorimo o faznim prelazima prvog reda i kritičnim pojavama, gde su u kritične pojave uključeni fazni prelazi drugog reda.

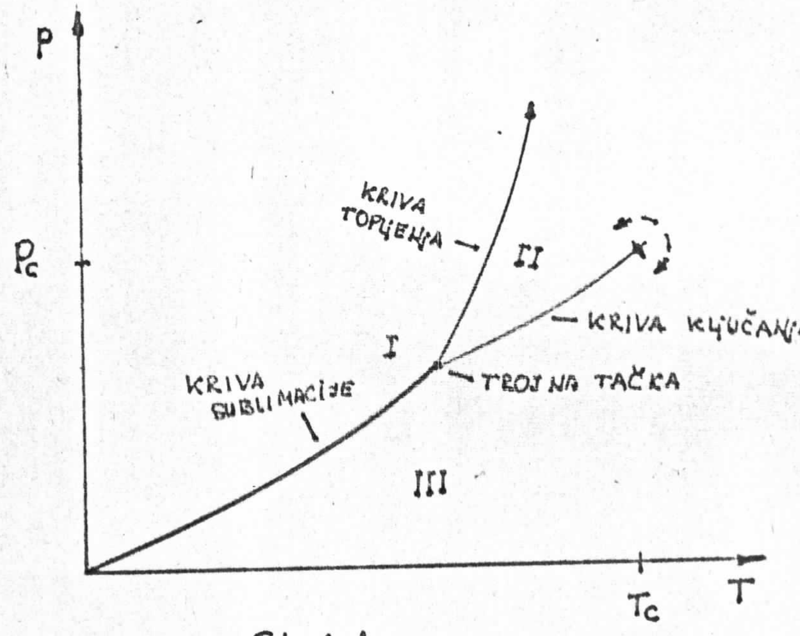
Tečni sistemi

Uzmimo tečne sisteme kao primer pomoću kojeg ćemo razjasniti osnovne pojmove u vezi faznih prelaza. Pođimo od funkcije stanja:

$$f(P,\rho,T) = 0 \tag{1.1}$$

koja povezuje termodinamičke parametre stanja: pritisak, zapreminsku masu i temperaturu i ovi parametri određuju površinu u prostoru sa kordinatama P,ρ,T. Površinu sa kordinatama P,ρ,T možemo da posmatramo preko projekcija na ravan PT, $P\rho$, ρT. Šemaski prikaz svih projekcija dat je na slikama (1.1),(1.2) i (1.3).

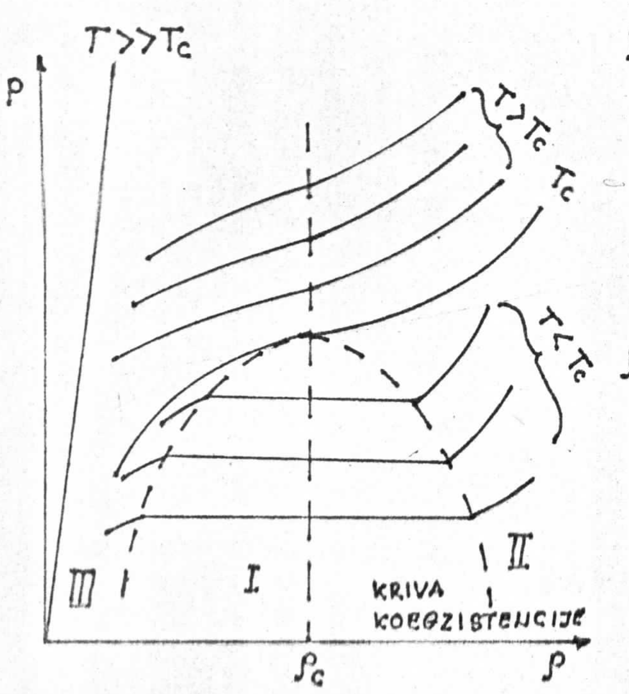
Sa slike (1.1) vidimo da projekcije na ravan PT obrazuje tri posebne oblasti koje odgovaraju agregatnim stanjima (fazama) materije: čvrstom (I), tečnom (II) i gasovitom (III). Čvrsta i gasovita faza nalaze se u ravnoteži duž krive sublimacije, čvrsta i tečna faza duž krive topljenja, a tečna i gasovita duž krive ključanja. Svaka tačka ovih triju krivih odgovara ravnotežnom stanju u kome mogu da postoje dve faze, a trojna tačka je jedino ravnotežno stanje u kom mogu postojati sve tri faze.



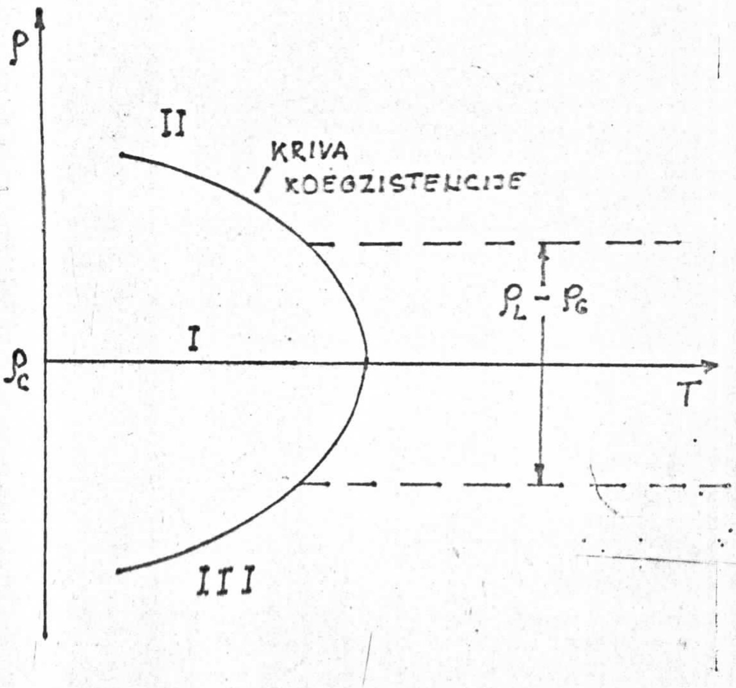
Sl. 1.1

Sa slike (1.1) vidimo da kriva ključanja završava u kritičnoj tački, znači da je moguće prevesti tečnost u gas bez prekida tj. ne presecajući liniju faznog prelaza, kao što je pokazano tačkastom linijom na sl. (1.1). Odavde vidimo da nema suštinske razlike između tečne i gasovite faze u okolini kritične tačke.

Sa sl.(1.2) i sl.(1.3) se vidi, da je razlika između zapreminske mase tečnosti ρ_L i gasa ρ_G pri niskim temperaturama dovoljno velika, ali ukoliko se približavamo kritičnoj tački, ova razlika teži nuli. Razlika $\rho_L - \rho_G$ se naziva parametar uređenosti u sistemu tečnost-gas. Parametar uređenosti u opštem slučaju je veličina koja je u jednoj fazi različita od nule, a drugoj jednaka nuli.



Sl. 1.2



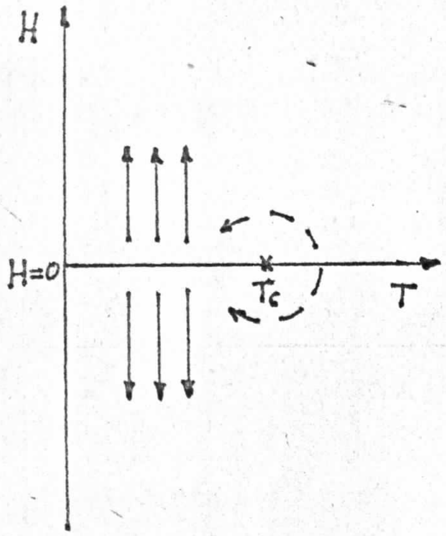
Sl. 1.3

M a g n e t n i   s i s t e m i

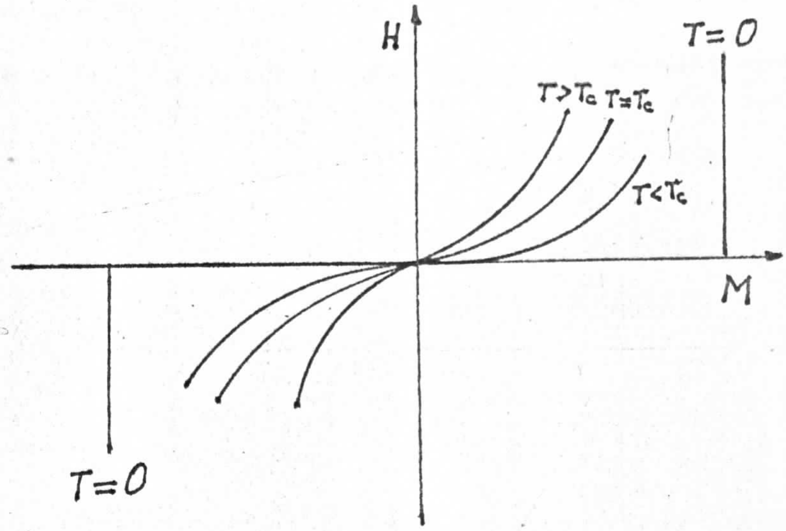
Iz metodskih razloga obično se ističe analogija između magnetnih i tečnih faznih prelaza. Evo te analogije. Ako tečnosti povećamo pritisak, tada će njena gustina porasti. Isto tako ako feromagnetni sistem postavimo u magnetno polje H, tada će njegova magnetizacija M da poraste.

Iz ovog slučaja vidimo da je polje H analogno pritisku P magnetizacija M - z.masi ρ , a ravnotežna površina $P\rho T$ tečnog sistema odgovaraće do izvesne mere površini HMT magnetnog sistema.

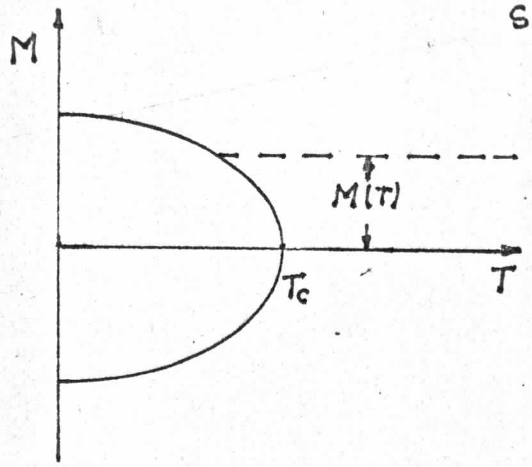
Projekcije površine HMT na ravan HT, HM i MT su prikazane na slikama (1.4), (1.5) i (1.6).



Sl. 1.4



sl. 1.5



sl. 1.6

Kao što postoji analogija napred pomenutih parametara, isto tako postoji analogija između izotermske stišljivosti tečnosti $k_T = \rho^{-1}\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T$ i izotermske supsceptibilnosti $\chi_T \equiv (\partial M/\partial H)_T$. Veličina χ takođe teži beskonačnosti u blizini T_c što se ogleda u "poravnavanju" kritične izoterme ($T \equiv T_c$) na slici (1.5).

K r i t i č n o p o n a š a n j e i k r i t i č n i e k s p o n e n t i

Posljednjih godina pri izučavanju kritičnih pojava sve veća pažnja se poklanja određivanju vrednosti kritičnih eksponenata, koji opisuju ponašanje parametara uređenosti, stišljivosti i supsceptibilnosti u blizini kritične tačke. Navest ćemo dva razloga zbog čega se poklanja tolika pažnja ispitivanju tih eksponenata:

Prvi razlog je taj da postoje određeni odnosi između eksponenata koji se dobijaju iz osnovnih termodinamičkih i statističkih razmišljanja i zato se javljaju kao opšti za svaki od razmatranih delova sistema.

Drugi razlog je da mnoge fizičke pojave odsustvuju kada se sistem nalazi daleko od kritične tačke (npr. korelacija neobično dalekog dejstva, koja se prostire na bilione čestica).

Pošto nas interesuju termodinamička stanja u neposrednoj blizini kritične tačke, umesto stalnih termodinamičkih parametara uvodimo veličine koje mere ostupanje od kritičnih vrednosti parametara. Za kritične tačke tečnost-gas definišemo sledeće veličine:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \qquad p = \frac{P - P_c}{P_c} \qquad v = \frac{V - V_c}{V_c} \tag{1.2}$$

gde je T_c, P_c, i V_c kritična temperatura, kritičan pritisak i kritična zapremina. Za kritične tačke feromagnetnog stanja sistem možemo opisati pomoću veličina:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}\,, \quad m = \frac{M}{M_\infty} \text{ i } h = \frac{\mu H}{kT_c} \tag{1.3}$$

gde je M_∞ maksimalna magnetizacija koju sistem može da ima, μ - intezitet elementarnog momenta sistema, a k - Bolcmanova konstanta.

Nastajanje razlike u zapreminskoj masi između tečne i gasovite faze i temperaturske zavisnosti nulte magnetizacije Mo(T) idealnog (jednodimenzionog)feromagnetika u stalnom magnetnom polju H = 0, u blizini kritične tačke možemo opisati pomoću stepene funkcije:

$$\frac{\rho_L(T) - \rho_G(T)}{2\rho_c} = \mathcal{B}(-t)^{\beta}, \quad T \to T_c^- \tag{1.4}$$

$$\frac{Mo(T)}{Mo(0)} = \mathcal{B}(-t)^{\beta}, \quad T \to T_c^- \tag{1.5}$$

gde je ρ_c kritična zapreminska masa odgovarajuće supstance; $\mathcal{B}$ - se naziva kritična amplituda, a β - je kritični eksponent i one su pozitivne konstante. $\mathcal{B}$, β imaju različite vrednosti za tečnosti i različite za magnetike.

Na slikama (1.2) i (1.5) prikazane su izoterme P(V) i H(M) za tečne i magnetne sisteme. Nagib ovih izotermi proporcionalan je inverznoj veličini izotermske stišljivosti K_T^{-1} i inverznoj veličini izotermske supsceptibilnosti χ_T^{-1}. Iako K_T i χ_T divergiraju kada $T \to T_c$ treba praviti razliku između približavanja kritičnoj tački sa strane visokih i niskih temperatura. Zbog toga određujemo dva eksponenta γ i γ' (koji nisu uvek isti).

1) Za tečnosti:

$$\frac{K_T}{K_T^0} = \begin{cases} \mathcal{C}'(-t)^{-\gamma'}, & T < T_c,\ \rho = \rho_L(T) \text{ ili } \rho = \rho_G(T) \\ \mathcal{C}\, t^{-\gamma}, & T > T_c,\ \rho = \rho_c \end{cases} \tag{1.6}$$

2) Za magnetike:

$$\frac{X_T}{X_T^0} = \begin{cases} \varphi'(-t)^{-\gamma'} & T < T_c,\ H=0 \\ \varphi t^{-\gamma} & T > T_c,\ H=0 \end{cases} \qquad (1.7)$$

ovde je $K_T^0 = \frac{m}{kT_c \rho_c}$

Kritična amplituda φ' i φ zavise od supstance do supstance, dok je γ skoro za sve tečnosti iznosi 1,2, dok kod magnetika γ je nešto veća od 1,3.

Promena termodinamičkih parametara duž kritične izoterme opisuje se u slučaju kritične tačke tečnost-gas relacijom:

$$p = \frac{p - p_c}{p_c^0} = D\left|\frac{\rho-\rho_c}{\rho_c}\right|^{\delta} sgn\,(\rho-\rho_c),\ T=T_c,\ \rho \to \rho_c \qquad (1.8)$$

$$h = \frac{H}{H_c} = D\left|\frac{M_H(T=T_c)}{M_0(T=T_c)}\right|^{\delta} = D|m|^{\delta} sgn\,(m),\ T=T_c,\ m \to 0, \qquad (1.9)$$

Pored kompresibilnosti i susceptibilnosti i toplotni kapacitet divergira u blizini kritične tačke pa imamo:

$$C_V = \begin{cases} A'(-t)^{-\alpha'}, & T<T_c,\ \rho=\rho_L(T) \text{ ili } \rho=\rho_G(T) \\ A\,t^{-\alpha}, & T>T_c,\ \rho=\rho_c \end{cases} \qquad (1.10)$$

Za magnetne sisteme:

$$C_H = \begin{cases} A'(-t)^{-\alpha'}, & T<T_c,\ H=0 \\ A\,t^{-\alpha}, & T>T_c,\ H=0 \end{cases} \qquad (1.11)$$

Kritične amplitude A' i A zavise od vrste supstance. Kritični indeksi α' i α su male i pozotivne veličine.

Pretpostavimo da je funkcija f(t) pozitivna i neprekidna za dovoljno male pozitivne vrednosti t, onda možemo napisati definiciju kritičnog indeksa x veličine f(t) data je relacijom

$$x = \lim_{t \to 0} \frac{\ln|f(t)|}{\ln|t|} \tag{1.12}$$

Ova definicija uključuje sve gore navedene slučajeve a i mogućnost da ova veličina logaritamski divergira (x = o).

M o d e l i   z a   f a z n e   p r e l a z e

Početkom dvadesetog veka bili su postignuti veliki uspjesi u teoriji magnetnih prelaza pri čemu teorijske aproksimacije nisu imale bitne razlike od klasičnih radova Van der Valsa za tečne sisteme 1907 godine. Posle radova Kiria, Hopkinsa i drugih, Pjer Vajs je dao teoriju feromagnetizma u kojoj je pretpostavio da elementarni magnetni momenti međusobno destvuju preko iskustveno pojmljivog "molekularnog polja" koje je proporcionalno srednjoj magnetizaciji. Posle nekoliko godina pojavili su se konkretniji modeli međusobno destvujućih magnetnih momenata. U njima se pretpostavljalo da su magnetni momenti lokalizovani u određenim čvorovima kristalne rešetke i da njihove interakcije imaju parni karakter, pri čemu energija izmene dostiže minimum - I, kada su momenti međusobno paralelni.

U tablici (1) se vidi nekoliko specijalnih modela sistema koje je moguće rešiti za jednodimenzionu i dvodimenzionu rešetku. Do sada nije se uspelo naći tačno rešenje za trodimenzionu rešetku. I pored toga ovi modeli pretstavljaju razumno teorijsko opisivanje određenih fizičkih sistema i pomažu pri shvatanju magnetnih faznih prelaza.

Tablica modela hamiltonijana

D	Hamiltonijan	Naziv modela	Sistem
1.	$\mathcal{H}=-J\sum_{\langle ij\rangle} S_{ix} S_{jx}$	Model Izinga	Jednokomponentna tečnost, binarna legura, mješavina
2.	$\mathcal{H}=-J\sum_{\langle ij\rangle}(S_{ix}S_{jx}+S_{iy}S_{jy})$	Model ravnog rotatora (Model Vaksa--Larkina)	λ - prelaz u boze--tečnosti
3.	$\mathcal{H}=-J\sum_{\langle ij\rangle}(S_{ix}S_{jx}+S_{iy}S_{jy}+S_{iz}S_{jz})$	Klasični model Hajzenberga	Feromagnetici i antiferomagnetici
⋮ ∞	$\mathcal{H}=-J\sum_{\langle ij\rangle}(\sum_{n=1}^{\infty} S_{in}S_{jn})$	Sferni model	Ne odgovara fizičkim sistemima

Parametar D - dimenzija spina

Tablica (1)

H a m i l t o n i j a n o p š t o g s i s t e m a

Mi vidimo da se hamiltonijan (1.13) svodi na četiri posebna slučaja odnosno na četiri opštepoznata modela. Složenije interakcije možemo izučavati pomoću sistemaskih modifikacija tog hamiltonijana. Modelni hamiltonijan možemo napisati u obliku:

$$\mathcal{H}^{(D)} = -J\sum_{\langle ij\rangle} \vec{S}_i^{(D)}\cdot \vec{S}_j^{(D)} \qquad (1.13)$$

gde je spin S_i^D - D - dimenzija jediničnog vektora, a J - energija interakcije para najbližih suseda $\langle ij\rangle$ s paralelnim spinovima, koji su lokalizovani u čvorovima i i j rešetke. Tada su $(S_{i1}, S_{i2}, \dots S_{iD})$ - dekartove komponente vektora $S_i^{(D)}$ i $\sum_{n=1}^{D} S_{in}^2 = 1$ za l i N, a skalarni proizvod u jednačini (1.13) označava veličinu $\sum_{n=1}^{D} S_{in}S_{jn}$.

Ako uzmemo da je parametar D = 1 onda taj spin prestavlja za sebe prostu jednodimenzionu "strelicu" koja može imati dve diskretne orjentacije +1 (gore) i -1 (dole). Tada se model hamiltonijana (1.13) svidi na prosti model Izinga (s polucelim spinom) Iako je model Izinga bio prvi uveden kao grubi model feromagnetizma, on je poslužio za kvalitativne praktične modele za mnoge sisteme. Npr. za jednokomponentne tečnosti i binarne legure.

Za D = 2 hamiltonijan (1.13) opisuje sistem izotropno međudejstvujućih dvodimenzionalnih jediničnih vektora i obično nosi naziv ravni model Hajzenberga, model ravnog rotatora ili klasični ravni model. Njega zovu još model Vaksa-Larkina zato što su ti autori primenuli njega u kvalitativni rešetkasti model za superfluidni prelaz u boze tečnosti.

I na kraju za slučaj trodimenzionalnog spina hamiltonijan (1.13) se svodi na klasičan model Hajzenberga. Klasičan model Hajzenberga moguće je takođe posmatrati kao granični slučaj kvantnomehaničkog modela Hajzenberga kada $S \to \infty$. Prema tome Hajzenbergov spin ima konačan broj (2S + 1) diskretnih orjentacija i mi ćemo smatrati da su te orjentacije stalne u prostoru. Međutim važno je napomenuti da čak i kvantnomehanički model Hajzenberga nepodesan za vrlo velik krug realnih magnetnih materijala.

Neophodno je obratiti pažnju na taj faktor da najniže energetsko stanje, opisano hamiltonijanom (1.13) zavisi od znaka promenljivog parametra J. Znak minus je uveden u (1.13) kao matematičko izražavanje uslova: Ako je parametar J pozitivan prije se javlja paralelna orjentacija spina. Obrnuto ako je parametar J negativan to susjedni spinovi teže da se orjentišu antiparalelno

To je moguće, ako su spinovi raspoređeni u rešetki s nekompaktnim pakovanjem tj. u rešetki koju možemo prestaviti u vidu dve uzajamno prodirujuće rešetke, tako što se svi najbliži susedi datog spina jedne podrešetke pripada drugoj podrešetki.

Za $D>3$ hamiltonijan (1.13) nastavlja opisivanje za određeni sistem, mada je prikazati sliku raspoređenosti spina jako teško.

U tablici (2) dat je kratak popis faznih prelaza i parametara uređenosti za svaki od njih.

PRELAZ	PARAMETAR UREĐENOSTI $\langle P \rangle$	MOGUĆNOST ZA IZBOR $\langle P \rangle$	TERMODINAMIČKE VEL. VEZANE sa $\langle P \rangle$
tečnost- -gas	$\rho - \rho_c$	$P>0$ (tečnost) $P<0$ (gas) 2. mogućnosti izbora	μ
feromagnetik	magnetizac. M	2n mogućnosti	magn. polje H
antiferomag.	magnetizacija podrešetke M	2n mogućnosti	vezanih veličina nema
Hajzenbergov model feromagnetika	magnetizacija M	pravac M (moguće je izabrati za svaku tačku na površini sfere)	H
Izingov model feromagnet.	S_j	2. mogućnosti	H
superprovod.	Δ (parametar praga)	faza Δ	nema
superfluidna tečnost	$\langle \Psi \rangle$ talasna funkcija kondezata	faza $\langle \Psi \rangle$	nema
feroelektrik	polarizacija rešetke	konačan broj mogućnosti	električno polje

Tablica (2)

U ovom radu bavićemo se kvantnomehaničkom verzijom nekih modela sa strane 10. U tom slučaju, komponente spina su operatori sa određenim komutacionim relacijama. Ovaj problem je složeniji i za njega su razvijeni posebni metodi, od kojih ćemo neke opisati u narodnoj glavi.

II GLAVA

BOZONSKE REPREZENTACIJE SPINSKIH OPERATORA

Analizu osobina feromagnetika i magnetnih dielektrika vršimo najčešće u okviru Hajzenbergovog izotropnog modela. Hamiltonijan sistema spinova je dat sa (2.1)

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}}\, \vec{S}_{\vec{n}}\vec{S}_{\vec{m}}\,; \quad I_{\vec{n}\vec{m}} = I_{\vec{n}-\vec{m}}\,; \quad I_0 = 0 \tag{2.1}$$

gde su $\vec{S}_{\vec{n}}$ i $\vec{S}_{\vec{m}}$ spinovi u čvorovima $\vec{n}$ i $\vec{m}$. Ako je feromagnetik u vanjskom magnetnom polju $\mathcal{H}$ tada kod hamiltonijana imamo još jedan član,

$$-\mu\mathcal{H}\sum_{\vec{n}} S^{z}_{\vec{n}} \tag{2.2}$$

gde je μ magnetni moment atoma izražen u Borovim magnetonima. Spinovi se orjentišu duž polja i za ovu osu orjentacije spinova ili češće osu kvantizacije uzima se z-osa Dekartovog sistema.

Osnovna postavka kvantne teorije feromagnetizma je u tome da su svi spinovi na apsolutnoj nuli paralelno orjentisani i da za z-projekciju spinova uzima maksimalna vrednost spina S. Tada magnetizacija kristala ima maksimalnu vrednost $M(o)=\mu NS$ gde je N broj atoma u kristalu. Porast temperature dovodi do otklanjanja z-projekcije spinova od njihove maksimalne vrednosti S, a ovo izaziva smanjenje magnetizacije, tako da ona na temperaturi Θ_c (Kirijeva temperatura) postaje jednaka nuli i feromagnetik prelazi u paramagnetnu fazu.

Znamo da operatori $S^+ = S^x + iS^y$ povećavaju z projekciju za jedinicu (delujući na vektor stanja $|S^z\rangle$ prevodi ga u $|S^z+1\rangle$) a operator $S^- = S^x - iS^y$ je smanjen za jedinicu i uzimamo da S^- kreira pobuđena stanja (pobuđenje se sastoji u smanjivanju vrednosti z projekcije) dok ih S^+ anihilira.

Vektor $\vec{S}$ možemo napisati u sledećem obliku:

$$\vec{S} = S_{\vec{i}}^{x} + S_{\vec{j}}^{y} + S_{\vec{k}}^{z} = \frac{S^+ + S^-}{2}\vec{i} + \frac{S^+ - S^-}{2i}\vec{j} + (S - (S - S^z))\vec{k} \qquad (2.3)$$

i kako spinski operatori na različitim čvorovima rešetke komutiraju tada (2.1) postaje

$$\hat{H} = S J_0 \sum_{\vec{n}} (S - S_{\vec{n}}^{z}) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^{-} S_{\vec{m}}^{+} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S_{\vec{n}}^{z})(S - S_{\vec{m}}^{z}) \qquad (2.4)$$

a ako uvrstimo član (2.2) tada hamiltonijan ima oblik

$$\hat{H} = (S J_0 + \mu \mathcal{H}) \sum (S - S_{\vec{n}}^{z}) - \frac{1}{2} \sum I_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}}^{-} S_{\vec{m}}^{+} - \frac{1}{2} \sum I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S_{\vec{n}}^{z})(S - S_{\vec{m}}^{z}) \qquad (2.5)$$

Opšte komutacione relacije spinskih operatora su:

$$[S_{\vec{n}}^{x}, S_{\vec{n}}^{y}] = i S_{\vec{n}}^{z} \, ; \; [S_{\vec{n}}^{z}, S_{\vec{n}}^{x}] = i S_{\vec{n}}^{y} \, ; \; [S_{\vec{n}}^{y}, S_{\vec{n}}^{z}] = i S_{\vec{n}}^{x} \qquad (2.6)$$

odnosno

$$[S_{\vec{n}}^{+}, S_{\vec{n}}^{-}] = 2 S_{\vec{n}}^{z} \, ; \; [S_{\vec{n}}^{+}, S_{\vec{n}}^{z}] = - S_{\vec{n}}^{+} \, ; \; [S_{\vec{n}}^{-}, S_{\vec{n}}^{z}] = S_{\vec{n}}^{-} \qquad (2.7)$$

Sobzirom da je $(S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 = S(S+1)$ i $\{\frac{1}{2} S^+, S^-\} = (S^x)^2 + (S^y)^2$ dobijamo još jednu relaciju koja je važna pri analizi spinskog sistema

$$\{S_{\vec{n}}^{+}, S_{\vec{n}}^{-}\} = 2S(S+1) - 2(S_{\vec{n}}^{z})^2 \qquad (2.8)$$

Iz ovih relacija se vidi da operatori koji se odnose na različite čvorove kristala komutiraju, a za dozvoljene vrednosti

z projekcije spina -S, -S+1, ... S-1, S, operator $S-S^z$ ima konačan skup svojstvenih vrednosti: 0, 1, 2, ... 2S.
Iz gore navedenih razloga vidimo da komutacione relacije za spinske operatore nisu ni bozonskog ni fermionskog tipa.
Baš zbog toga se vrše razne aproksimacije preko Boze-operatora i Pauli-operatora.

P r e l a z s a s p i n s k i h n a P a u l i - o p e r a t o r e

Za slučaj spina $S = \frac{1}{2}$ umesto operatora spina mogu se koristiti tkz. Pauli-operatori $P_{\vec{n}}$ i $P^+_{\vec{n}}$, a veze između Pauli-operatora /4/ i spinskih operatora date su relacijom (2.9)

$$S^-_{\vec{n}} = P^+_{\vec{n}} \; ; \; S^+_{\vec{n}} = P_{\vec{n}} \; ; \; \frac{1}{2} - S^z_{\vec{n}} = P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} \qquad (2.9)$$

Pauli-operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$[P_{\vec{n}}, P^+_{\vec{m}}] = (1 - 2P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}})\delta_{\vec{n},\vec{m}} ; [P_{\vec{n}}, P_{\vec{m}}] = [P^+_{\vec{n}}, P^+_{\vec{m}}] = 0 ; P^2_{\vec{n}} = P^{+2}_{\vec{n}} = 0 \qquad (2.10)$$

a operator $P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}}$ ima samo dve svojstvene vrednosti i to 0 i 1.
Direktnom zamenom (2.9)u (2.4) hamiltonijan dobija novi oblik.

$$\hat{H} = S J_0 \sum_{\vec{n}} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum I_{\vec{n}\vec{m}} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{m}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P^+_{\vec{n}} P_{\vec{n}} P^+_{\vec{m}} P_{\vec{m}} \qquad (2.11)$$

B l o h o v a a p r o k s i m a c i j a

Spinske operatore u Blohovoj aproksimaciji /4/ zamenjujemo Boze-operatorima na sledeći način

$$S^+_{\vec{n}} = \sqrt{2S}\, B_{\vec{n}} \; ; \; S^-_{\vec{n}} = \sqrt{2S}\, B^+_{\vec{n}} \; ; \; S - S^z_{\vec{n}} = B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} \qquad (2.12)$$

Ova aproksimacija je utoliko bolja ukoliko je spin S veći odnosno ukoliko je manji broj pobuđenja $B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}}$, a to znači na niskim temperaturama. Fizički smisao aproksimacije je u tome da se zanemare interakcije spinskih talasa tj. zanemaruju se svi proizvodi tri ili više operatora.

Tada hamiltonijan postaje

$$H_{Bl} = (\mu \mathcal{H} + S J_0) \sum_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} - S \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} \tag{2.13}$$

Ovde su $B_{\vec{n}}$ i $B^+_{\vec{n}}$ Boze-operatori koji opisuju kreaciju i anhilaciju pobuđenja na n-tom čvoru kristalne rešetke. Njihove Furije-transforme definišemo na sledeći način:

$$B_{\vec{n}} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{n}} \; ; \; B^+_{\vec{n}} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\vec{k}} B^+_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{n}} ;$$
$$I_{\vec{n}\vec{m}} = N^{-1} \sum_{\vec{k}} J_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} \tag{2.14}$$

I hamiltonijan (2.13) posle dijagonalizacije Furijevom transformacijom Boze-operatora dobijamo oblik

$$H_{Bl} = \sum_{\vec{k}} \left[\mu \mathcal{H} + S(J_0 - J_k) \right] B^+_{\vec{k}} B_{\vec{k}} \tag{2.15}$$

H o l š t a j n - P r i m a k o v a t r a n s f o r m a c i j a

U ovoj transformaciji /5/ spinski operatori se izražavaju preko Boze operatora na sledeći način:

$$S^+_{\vec{m}} = \sqrt{2S - \hat{n}}\, B_{\vec{m}} ; \; S^-_{\vec{m}} = B^+_{\vec{m}} \sqrt{2S - \hat{n}} ; \; S^z_{\vec{m}} = S - \hat{n} \tag{2.16}$$

gde je $\hat{n} = B^+_{\vec{m}} B_{\vec{m}}$.

Pošto nam je $\langle \hat{n} \rangle \ll 1$, $2S \gg 1$ odnosno $\frac{\langle \hat{n} \rangle}{2S} \ll 1$ tada možemo da razvijemo:

$$\sqrt{2S-\hat{n}} = \sqrt{2S}\sqrt{1-\frac{\hat{n}}{2S}} \simeq \sqrt{2S}\left(1-\frac{1}{2}\frac{\hat{n}}{2S}\right) \simeq \sqrt{2S}\left(1-\frac{\hat{n}}{4S}\right) + \mathcal{O}(\hat{n}^2) \quad (2.17)$$

Kad zamenimo vrednosti za $\hat{n} = B^{+}_{\vec{m}}B_{\vec{m}}$ dobijamo sledeće spinske operatore izražene preko Boze-operatora.

$$S^{+}_{\vec{m}} = \sqrt{2S}\left(B_{\vec{m}} - \frac{B^{+}_{\vec{m}}B_{\vec{m}}B_{\vec{m}}}{4S}\right); \quad S^{-}_{\vec{m}} = \sqrt{2S}\left(B^{+}_{\vec{m}} - \frac{B^{+}_{\vec{m}}B^{+}_{\vec{m}}B_{\vec{m}}}{4S}\right) \quad (2.18)$$

Za spin $S = \frac{1}{2}$ Holštajn-Primakova transformacija ima oblik

$$S^{+}_{\vec{m}} = B_{\vec{m}} - \frac{1}{2}B^{+}_{\vec{m}}B_{\vec{m}}B_{\vec{m}}; \quad S^{-}_{\vec{m}} = B^{+}_{\vec{m}} - \frac{1}{2}B^{+}_{\vec{m}}B^{+}_{\vec{m}}B_{\vec{m}}; \quad S^{z}_{\vec{m}} = \frac{1}{2} - B^{+}_{\vec{m}}B_{\vec{m}} \quad (2.19)$$

Ova transformacija ima osnovni nedostatak što uvodi tzv. nefizička stanja. Kada deluje u dvodimenzionom prostoru stanja, rezultati su tačni, ali kinematička interakcija prouzrokuje "izlazak" iz ovog prostora, tako da više nije očuvana relacija $(S^{-}_{\vec{m}})^2 = 0$.

T r a n s f o r m a c i j a D a j s o n - - M a l j e j e v a

Kao moguće rešenje Dajson je predložio neermitsku reprezentaciju /6/,/7/ gde je spinske operatore zamenio na sledeći način:

$$S^{+}_{\vec{m}} = \sqrt{2S}\left(1-\frac{1}{2S}\hat{n}\right)B_{\vec{m}}; \quad S^{-}_{\vec{m}} = \sqrt{2S}B^{+}_{\vec{m}}; \quad S^{z}_{\vec{m}} = S - \hat{n} \quad (2.20)$$

Za spin $S = \frac{1}{2}$ dobijamo:

$$S^{+}_{\vec{m}} = B_{\vec{m}} - B^{+}_{\vec{m}}B_{\vec{m}}B_{\vec{m}}; \quad S^{-}_{\vec{m}} = B^{+}_{\vec{m}}; \quad S^{z}_{\vec{m}} = \frac{1}{2} - B^{+}_{\vec{m}}B_{\vec{m}} \quad (2.21)$$

Sa ovom transformacijom je uspio da ispita niskotemperatursko ponašanje Hajzenbergovog feromagnetika. Iako je u ovom slučaju dala dobre rezultate ona nije primenjiva u okolini faznog prelaza.

A g r a n o v i č - T o š i ć e v a t r a n s f o r m a c i j a

Transformacija Agranovič-Tošić /8/,/9/ je prvobitno formulisana za slučaj dvonivoske šeme eksitonskog sistema, stim što je spinske operatore zamenjivao na sledeći način:

$$S_{\vec n}^{+} = f_{\vec n}^{1/2} B_{\vec n}; \quad S_{\vec n}^{-} = B_{\vec n} f_{\vec n}^{1/2}; \quad S_{\vec n}^{z} = \frac{1}{2} - B_{\vec n}^{+} f_{\vec n} B_{\vec n} \tag{2.22}$$

za $S = \frac{1}{2}$ imamo da je $f_{\vec n} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_{\vec n}^{+\nu} B_{\vec n}^{\nu}$ (2.23)

Zbog konvergencije reda i uslova $\hat S_{\vec n}^{+}\hat S_{\vec n}^{-} + \hat S_{\vec n}^{-}\hat S_{\vec n}^{+} = 1$

dobijamo da je $a_\nu = \frac{(-2)^\nu}{(\nu+1)!}$ (2.24)

Ovako definisani operatori zadovoljavaju sve komutacione relacije, a jedan od problema ove teorije je nepogodnost rada sa kvadratnim korenom operatorskog reda.

$f_{\vec n}^{1/2} = \sum b_\nu B_{\vec n}^{+\nu} B_{\vec n}^{\nu}$, a koeficient $b_\nu = \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \sum_{k}^{\nu} \frac{1}{\sqrt{k+1}} \binom{\nu}{k}$ (2.25)

Ako uzmemo vrednosti za prve članove reda $b_0=1$, $b_0=-1$ i $a_0=1$, $a_0=-1$ tada za $S = \frac{1}{2}$ dobijamo transformaciju:

$$S_{\vec n}^{+} = B_{\vec n} - B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} B_{\vec n}; \quad S_{\vec n}^{-} = B_{\vec n}^{+} - B_{\vec n}^{+} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n}$$

$$S_{\vec n}^{z} = \frac{1}{2} - B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} + B_{\vec n}^{+} B_{\vec n}^{+} B_{\vec n} B_{\vec n} \tag{2.26}$$

Katriel /10/ je dalje generaliso Agranovič-Tošićevu transformaciju za opšti spin na sledeći način:

$$S_{\vec n}^{-} = B_{\vec n}^{+} \gamma_{\vec n}; \quad S_{\vec n}^{+} = \gamma_{\vec n} B_{\vec n}; \quad 2S_{\vec n}^{z} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu (\nu+1) B_{\vec n}^{+\nu} B_{\vec n}^{\nu} \tag{2.27}$$

gde $\gamma_{\vec n}$ ima vrednost $\gamma_{\vec n} = \sum_{\nu=0}^{\infty} b_\nu B_{\vec n}^{+\nu} B_{\vec n}^{\nu}$ (2.28)

Za članove a i b uzimamo sledeći red

$$a_\nu = \sum_{t=0}^{\nu} \frac{(-1)^{\nu-t}}{t!(\nu-t)!} \left(1 - \frac{2S+1}{t+1}\left[\frac{t+1}{2S+1}\right]\right) \times \left(2S - t + (2S+1)\left[\frac{t}{2S+1}\right]\right) \tag{2.30}$$

$$b_\nu = \sum_{\nu=0}^{\nu} \frac{(-1)^{\nu-t}}{(\nu-t)!} \left\{\left(1 - \frac{2S+1}{t+1}\left[\frac{t+1}{2S+1}\right]\right)\left(2S - t + (2S+1)\left[\frac{t}{2S+1}\right]\right)\right\}^{1/2} \tag{2.31}$$

$\left[\frac{t}{2S+1}\right]$ najveći ceo broj manji od izraza u zagradi.

Za $S > \frac{1}{2}$ transformacija ima oblik

$$\begin{aligned} \vec{S}^{-}_{\vec{n}} &= \vec{B}^{+}_{\vec{n}} \left\{\sqrt{2S} + \left(\sqrt{2S-1} - \sqrt{2S}\right)\vec{B}^{+}_{\vec{n}} \vec{B}_{\vec{n}}\right\} + \mathcal{O}\left(\vec{B}^{+2}_{\vec{n}} \vec{B}^{2}_{\vec{n}}\right) \\ \vec{S}^{+}_{\vec{n}} &= \left\{\sqrt{2S} + \left(\sqrt{2S-1} - \sqrt{2S}\right)\vec{B}^{+}_{\vec{n}} \vec{B}_{\vec{n}}\right\}\vec{B}_{\vec{n}} + \mathcal{O}\left(\vec{B}^{+2}_{\vec{n}} \vec{B}^{2}_{\vec{n}}\right) \\ \vec{S}^{z}_{\vec{n}} &= S - \vec{B}^{+}_{\vec{n}} B_{\vec{n}} + \mathcal{O}\left(\vec{B}^{+\,2S+1}_{\vec{n}} \vec{B}^{\,2S+1}_{\vec{n}}\right)! \end{aligned} \tag{2.32}$$

Pri ovim preslikavanjima se javljaju novi članovi bozonskog hamiltonijana, koje ne vode poreklo iz dinamike problema već su posledice različitih komutacionih relacija spinskih i Boze-operatora. Ove druge interakcije se nazivaju kinematičke interakcije.

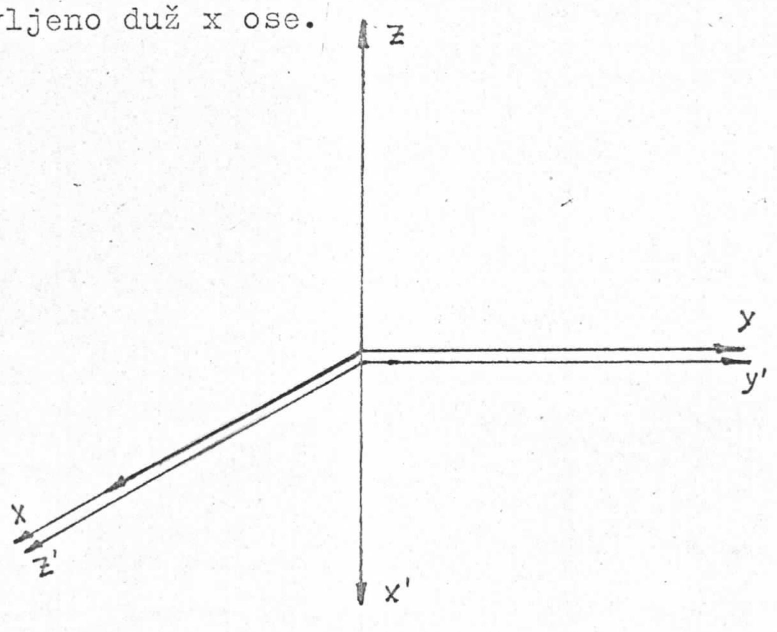
III GLAVA

XY - MODEL

XY-model se koristi za određene tipove feromagnetizma i antiferomagnetika, kao i za kvantni fluid. Definišemo ga kao sistem hamiltonijanom

$$H = -2J\sum_{\langle ij\rangle}\left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y\right) - g\mu_B \mathcal{H}\sum_j \vec{S}_j^x \qquad (3.1)$$

gde su S_i^x i S_i^y dekartove komponente spinskog operatora, J je parametar interakcije među spinovima, g označava Landeov faktor, μ_B Borov magneton a $\mathcal{H}$ je spoljašnje magnetno polje koje je upravljeno duž x ose.



Sl.(3.1) Transformacija kordinata (x,y,z) u kordinate (x',y',z')

Pogodno je izvršiti transformaciju kordinata (x,y,z) u nove kordinate (x',y',z') kao na sl.(3.1), tako da naš hamiltonijan možemo napisati u obliku (3.2).

$$H = -2J\sum_{\langle ij\rangle}\left(S_i^{z'}S_j^{z'} + S_i^{y'}S_j^{y'}\right) - g\mu_B\mathcal{H}\sum_j S_j^{z'} \qquad (3.2)$$

Veruje se da model trpi fazni prelaz na dovoljno niskoj temperaturi T_c tada se komponenta spina u xy ravni

$$S^x = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} S_j^x \qquad (3.3)$$

uzima kao parametar uređenosti.

Srednja vrednost $\langle S^x\rangle$ operatora (3.3) ima vrednost različitu od nule kada je ispod temperature prelaza T_c i izčezava iznad ove temperature. Rotaciona simetrija hamiltonijana oko z-ose je narušena uređivanjem i parametar uređenosti (3.3) ne komutira sa hamiltonijanom modela (3.1)

Parametar uređenosti u novim kordinatama ima oblik (3.4)

$$S^z = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} S_j^z \qquad (3.4)$$

Želimo da proučimo niskotemperaturske osobine osnovnog stanja odnosno energiju osnovnog stanja i devijaciju parametra uređenosti. Koristićemo različite bozonske reprezentacije i zanimaće nas uticaj članova četvrtog reda po Boze-operatorima, tj. zajednički uticaj rasejanja spinskih talasa i kinematičke interakcije.

Prvo prevodimo sistem na operatore $S^{\pm}, S^z$ gde je

$$S_{\vec{r}}^x = \frac{S_{\vec{r}}^+ + S_{\vec{r}}^-}{2}; \quad S_{\vec{r}}^y = \frac{S_{\vec{r}}^+ - S_{\vec{r}}^-}{2i}; \quad S_{\vec{r}}^z = S - (S - S_{\vec{r}}^z) \qquad (3.5)$$

Spinske operatore izražavamo na sledeći način preko Boze-operatora

$$S_i^- = \alpha B_i^+ + \beta B_i^+ B_i^+ B_i$$

$$S_i^+ = \alpha B_i + \beta B_i^+ B_i B_i \tag{3.6}$$

$$S_i^z = S - B_i^+ B_i + \gamma B_i^+ B_i^+ B_i B_i$$

Ovim načinom preslikavanja možemo izvoditi sve račune sa opštim formulama, a na kraju dobiti posebne slučajeve.

Za Holštajn-Primakovu /5/ transformaciju imamo:

$$S > \frac{1}{2}: \alpha_{HP} = \sqrt{2S}\,; \gamma_{HP} = 0\,; \beta_{HP} = -\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{2S}}\,,$$
$$S = \frac{1}{2}: \alpha_{HP} = 1\,; \beta_{HP} = \frac{1}{2}\,; \gamma_{HP} = 0 \tag{3.7}$$

a za Agranovič-Tošićevu /8/ transformaciju imamo:

$$S > \frac{1}{2}\,; \alpha_{AT} = \sqrt{2S}\,; \gamma_{AT} = 0\,; \beta_{AT} = -(\sqrt{2S} - \sqrt{2S-1})$$
$$S = \frac{1}{2}: \alpha_{AT} = 1\,; \gamma_{AT} = 1\,; \beta_{AT} = -1 \tag{3.8}$$

Nećemo koristiti reprezentaciju Dajson-Maljejeva /6/,/7/ zato što ona daje neermiski hamiltonijan, i ne može se tretirati jednoobrazno kao ove gore.

Zamenom transformacija (3.6) u (3.2) dobijamo hamiltonijan (3.9)

$$\begin{aligned}\hat{H} = &-2\sum_{\langle ij\rangle} J[S^2 - 2SB_i^+B_i + B_i^+B_j^+B_iB_j + 2S\gamma B_i^+B_i^+B_iB_i + \\ &+\frac{1}{2}(\alpha^2 B_i^+B_j + \alpha\beta B_i^+B_i^+B_iB_j + \alpha\beta B_i^+B_j^+B_jB_j) - \frac{1}{4}(\alpha^2 B_iB_j + \\ &+\alpha\beta B_i^+B_iB_iB_j + \alpha\beta B_iB_j^+B_jB_j + \alpha^2 B_i^+B_j^+ + \alpha\beta B_i^+B_i^+B_j^+B_i + \\ &+\alpha\beta B_i^+B_j^+B_j^+B_j)] - g\mu_B\mathcal{H}\sum_j (S - B_j^+B_j + \gamma B_j^+B_j^+B_jB_j)\end{aligned} \tag{3.9}$$

Hamiltonijan (3.9) smo podelili na tri dela

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_2 + \hat{H}_4 \tag{3.10}$$

ovde H_0 prestavlja energiju osnovnog stanja

$$\hat{H}_0 = -2\sum_{\langle ij\rangle} J S^2 - g\mu_B \mathcal{H}\sum_j S \tag{3.11}$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{\langle ij\rangle} J[4S B_i^+ B_i - \lambda^2 B_i^+ B_j + \frac{1}{2}\lambda^2 (B_i B_j + B_i^+ B_j^+)] + g\mu_B \mathcal{H}\sum_j B_j^+ B_j \tag{3.12}$$

$$\hat{H}_4 = -2\sum_{\langle ij\rangle} J[B_i^+ B_j^+ B_i B_j + 2S_\gamma B_i^+ B_i^+ B_i B_i + \frac{1}{2}\lambda\beta(B_i^+ B_i^+ B_i B_j + B_i^+ B_j^+ B_j B_j) - \frac{1}{4}\lambda\beta(B_i^+ B_i B_i B_j + B_j^+ B_i B_j B_j + B_i^+ B_i^+ B_j^+ B_i + B_i^+ B_j^+ B_j^+ B_j) - g\mu_B \mathcal{H}\sum_j \gamma B_j^+ B_j^+ B_j B_j \tag{3.13}$$

Prvi član u H_2 je energija i-tog čvora. S obzirom da se energija prenosi sa čvora na čvor, biće potrebno još transformisati. Hamiltonijan (3.13) se sastoji iz dva dela: Prvi deo je dinamički, koji vodi poreklo iz polaznog hamiltonijana, a drugi deo je kinematički i vodi poreklo iz različitih komutacionih relacija spinskih i Boze-operatora.

Dijagonalizaciju hamiltonijana vršimo pomoću Furijevih transformacija (2.14). Posle sređivanja dobijamo dijagonalizovani hamiltonijan:

$$\hat{H}_2 = \sum_{k}[4S J(0) + g\mu_B\mathcal{H} - \lambda^2 J(k)] B_k^+ B_k + \frac{1}{2}\lambda^2 \sum_{k} J(k)[B_{-k} B_k + B_k^+ B_{-k}^+] \tag{3.14}$$

U ovom hamiltonijanu postoji kvadratni deo po Boze-operatorima, zatim član sa neodržanjem kvazičestica, a član H_4 opisuje rasejanje spinskih talasa (kinematički i dinamički deo).

$$\hat{H}_4 = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3}\left\{-g\mu_B \mathcal{H} - 4S\gamma J(0) - 2J(\vec{k}_1-\vec{k}_2) - 2\beta J(\vec{k}_3) - 2\beta J(\vec{k}_1)\right\}\times$$
$$\times B^{+}_{\vec{k}_1} B^{+}_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} J(\vec{k}_1)\Big[2\beta B^{+}_{\vec{k}_1} B^{+}_{\vec{k}_2} B^{+}_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3} + \qquad (3.15)$$
$$+ 2\beta B^{+}_{\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_1}$$

gde je $\vec{k}_4 = \vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3$ i $\vec{k}_4 = \vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3$

Prvi cilj nam je da u hamiltonijanu (3.14) eliminišemo deo koji ne održava ukupan broj kvazičestica, a to postižemo primenom teorije Bogoljubovljeve. U teoriji Bogoljubova se hamiltonijan dalje dijagonalizuje kanoničnom transformacijom na nove Boze-operatore $C_{\vec{k}}$, $C^{+}_{\vec{k}}$ na sledeći način:

$$B_{\vec{k}} = U_{\vec{k}} C_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} C^{+}_{-\vec{k}}$$
$$B^{+}_{\vec{k}} = U_{\vec{k}} C^{+}_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} C_{-\vec{k}} \qquad (3.16)$$

gde su $U_{\vec{k}}$ i $V_{\vec{k}}$ parne i realne funkcije.

$$U_{\vec{k}} = U_{-\vec{k}}\ ;\ V_{\vec{k}} = V_{-\vec{k}}\ ;\ U^{*}_{\vec{k}} = U_{\vec{k}}\ ;\ V^{*}_{\vec{k}} = V_{\vec{k}}$$

Uslov $U^2_{\vec{k}} - V^2_{\vec{k}} = 1$ sledi iz zahteva da operatori $C^{+}_{\vec{k}}$ i $C_{\vec{k}}$ zadovoljavaju bozonske komutacione relacije

$$1 = [B_{\vec{k}}, B^{+}_{\vec{k}}] = U^2_{\vec{k}}[C_{\vec{k}}, C^{+}_{\vec{k}}] + V^2_{\vec{k}}[C^{+}_{-\vec{k}}, C_{-\vec{k}}] +$$
$$+ U_{\vec{k}} V_{\vec{k}}\left([C^{+}_{-\vec{k}}, C^{+}_{\vec{k}}] + [C_{\vec{k}}, C_{-\vec{k}}]\right) = U^2_{\vec{k}} - V^2_{\vec{k}} \qquad (3.17)$$

Ova transformacija meša kreacione i anhilacione Boze-amplitude i dovodi do toga da normalni produkti višeg reda u operatorima B, prestaju da budu normalni produkti u novim operatorima C. Svođenje novodobijenih formula na normalne produkte po operatorima C, daje nam dodatne članove nižeg reda po tim operatorima.

Zamenom (3.16) u hamiltonijan (3.14) dobijamo sledeći dijagonalizovani hamiltonijan (3.18)

$$\hat{H}_2=\sum_{\vec{k}}\left[(SJ(0)-\mathcal{L}^2J(\vec{k})+g\mu_B\mathcal{H})V_{\vec{k}}^2+\mathcal{L}^2J(\vec{k})V_{\vec{k}}U_{\vec{k}}\right]+\sum_{\vec{k}}\left[(SJ_0-\right.$$
$$\left.-\mathcal{L}^2J(\vec{k})+g\mu_B\mathcal{H})(U_{\vec{k}}^2+V_{\vec{k}}^2)+2\mathcal{L}^2J(\vec{k})U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}\right]C_{\vec{k}}^+C_{\vec{k}}+\sum_{k}\left[(SJ_0-\right. \tag{3.18}$$
$$\left.-\mathcal{L}^2J(\vec{k})+g\mu_B\mathcal{H})U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}+\tfrac{1}{2}\mathcal{L}^2J(\vec{k})(U_{\vec{k}}^2+V_{\vec{k}}^2)\right]\left[C_{\vec{k}}^+C_{-\vec{k}}^+ +C_{-\vec{k}}C_{\vec{k}}\right]$$

Funkcije $U_{\vec{k}}$ i $V_{\vec{k}}$ se mogu odrediti tako da četvrti član u (3.18) postane jednak nuli. Time hamiltonijan postaje dijagonalan i održava se broj čestica $\sum_{k\neq 0}C_{\vec{k}}^+C_{\vec{k}}$. Iz uslova eliminacije četvrtog člana iz (3.18)

$$(SJ(0)-\mathcal{L}^2J(\vec{k})+g\mu_B\mathcal{H})U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}+\tfrac{1}{2}\mathcal{L}^2J(\vec{k})(U_{\vec{k}}^2+V_{\vec{k}}^2)$$

i $\quad U_{\vec{k}}^2+V_{\vec{k}}^2=1 \quad$ dobija se

$$U_{\vec{k}}^2=\frac{1}{2}\left(\frac{(4SJ(0)-\mathcal{L}^2J(\vec{k})+g\mu_B\mathcal{H})}{\sqrt{(4SJ(0)-\mathcal{L}^2J(\vec{k})+g\mu_B\mathcal{H})^2-(\mathcal{L}^2J(\vec{k}))^2}}+1\right)$$

$$V_{\vec{k}}^2=\frac{1}{2}\left(\frac{(4SJ(0)-\mathcal{L}^2J(\vec{k})+g\mu_B\mathcal{H})}{\sqrt{(4SJ(0)-\mathcal{L}^2J(\vec{k})+g\mu_B\mathcal{H})^2-(\mathcal{L}^2J(\vec{k}))^2}}-1\right) \tag{3.19}$$

$$U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}=-\frac{1}{2}\,\frac{\mathcal{L}^2J(\vec{k})}{\sqrt{(4SJ(0)-\mathcal{L}^2J(\vec{k})+g\mu_B\mathcal{H})^2-(\mathcal{L}^2J(\vec{k}))^2}}$$

Posle uvrštavanja (3.19) u (3.18) hamiltonijan smo dobili

$$\hat{H}_2 = E_3^{(0)} + \sum_{\vec{k}} \sqrt{(4SJ(0) - \mathcal{L}^2 J(\vec{k}) + g\mu_B \mathcal{H})^2 - (\mathcal{L}^2 J(\vec{k}))^2}\, C_{\vec{k}}^{+} C_{\vec{k}} \tag{3.20}$$

$$E_3^{(0)} = \sum_{\vec{k}} \Big[\frac{1}{2} \sqrt{(4SJ(0) - \mathcal{L}^2 J(\vec{k}) + g\mu_B \mathcal{H})^2 - (\mathcal{L}^2 J(\vec{k}))^2} - \\ -(4SJ(0) - \mathcal{L}^2 J(\vec{k}) + g\mu_B \mathcal{H}) \Big] \tag{3.21}$$

Za $S = \frac{1}{2}$, $\mathcal{L} = 1$ i $\mathcal{H} = 0$ dobijamo sledeće vrednosti:

$$U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} = -\frac{1}{4} \frac{\gamma(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}; \quad V_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \frac{2-\gamma(\vec{k})}{2\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}} - \frac{1}{2}$$

$$U_{\vec{k}}^2 + V_{\vec{k}}^2 = \frac{2-\gamma(\vec{k})}{2\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}} \tag{3.22}$$

Za $S = \frac{1}{2}$, $\mathcal{L} = 1$ i $\mathcal{H} = 0$, Holštajn-Primakova i Agranovič-Tošićeva transformacija su jednake i sledi

$$E_3^{(0)} = -J(0) \sum_{\vec{k}} \left[1 - \sqrt{1-\gamma(k)}\right] \tag{3.23}$$

$$E(\vec{k}) = 2J(0)\sqrt{1-\gamma(\vec{k})} \tag{3.24}$$

gde je $\gamma(\vec{k}) = \frac{J(\vec{k})}{J(0)}$

Ovaj rezultat se može uporediti sa rezultatom iz /11/ i razlikuje se samo za faktor 2, zbog drukčijeg definisanja sumiranja po najbližim susedima.

Ako izvršimo Furije-transform (2.14) tada hamiltonijan (3.13) postaje

$$\hat{H}_4 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} \left\{ -g\mu_B \mathcal{H} - 4SJ(0) - 2J(\vec{k}_1 - \vec{k}_3) - \mathcal{L}\beta J(\vec{k}_3) - \mathcal{L}\beta J(\vec{k}_1) \right\} \times \\ \times B_{\vec{k}_1}^{+} B_{\vec{k}_2}^{+} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} J(\vec{k}_1) \mathcal{L}\beta B_{\vec{k}_1}^{+} B_{\vec{k}_2}^{+} B_{\vec{k}_3}^{+} B_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3} + \\ + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} \mathcal{L}\beta J(\vec{k}_1) B_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3}^{+} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_1} \tag{3.25}$$

Hamiltonijan (3.25) smo podelili u tri dela:

$$H_4^{(1)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} J(\vec{k}_1)\,\alpha\beta\, B^+_{\vec{k}_1} B^+_{\vec{k}_2} B^+_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3} \tag{3.26}$$

$$H_4^{(2)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} \Big\{ -g\mu_B\mathcal{H} - 4S\gamma J(0) - 2J(\vec{k}_1-\vec{k}_2) - \alpha\beta J(\vec{k}_3) - \alpha\beta J(\vec{k}_1) \Big\} B^+_{\vec{k}_1} B^+_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \tag{3.27}$$

$$H_4^{(3)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} J(\vec{k}_1)\,\alpha\beta\, B^+_{\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_1} \tag{3.28}$$

Naš cilj je da odredimo popravke na kvadratni hamiltonijan, koje postaju od članova četvrtog reda.

Svaki od ova tri hamiltonijana ćemo posebno analizirati. U hamiltonijan (3.25) ćemo uvrstiti formule (3.16) tako ćemo dobiti operatore četvrtog reda i njih odbacujemo, ali pre nego što ih odbacimo, svedemo ih na normalni poredak. Operatore C^+C ostavljamo, a sve ostale odbacujemo. Pošto imamo četiri operatora, doprinos nam daju dva kreaciona i dva anhilaciona operatora koji nisu u normalnom poretku jer dva komutiraju i daju kroneker, a druga dva daju C^+C. Ako sa + označimo kreacione, a sa - anhilacione operatore tada imamo 16 kombinacija:

$$\begin{array}{llllll} ++++, & ++-+, & ++--, & \boxed{+--+} & -+++, & \boxed{-+-+} \\ -+--, & ---+, & +++-, & +-++, & \boxed{+-+-} & +---, \\ \boxed{--++} & \boxed{-++-} & --+-, & ---- & & \end{array} \tag{3.29}$$

Za nas su interesantni ovih pet koji imaju mogućnost da daju operatore C^+C ili konstantne popravke (uokvireni).

Ako u hamiltonijan (3.26)uvrstimo (3.16) dobijamo sledeće članove u normalnom poretku, bez operatora četvrtog reda

$$a)\quad V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} U_{\vec{k}_4} \left(C^+_{\vec{k}_3} C_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} + C^+_{\vec{k}_2} C_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_1} \right)$$

$$b)\quad U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} U_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_1} C_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_2}$$

$$c)\quad V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} \left(C^+_{-\vec{k}_4} C_{-\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_2} + \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4} \cdot \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_2} + \right.$$

$$\left. + C^+_{-\vec{k}_4} C_{-\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_1} + \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} \cdot \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_1} + C^+_{\vec{k}_3} C_{-\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} + C^+_{\vec{k}_3} C_{-\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4} \right)$$

$$d)\quad V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} \left(C^+_{-\vec{k}_4} C_{-\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} + \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} \cdot \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_4} + \right.$$

$$\left. + C^+_{\vec{k}_2} C_{-\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_4} + C^+_{\vec{k}_2} C_{-\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4} \right) \qquad (3.30)$$

$$e)\quad U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} \left(C^+_{\vec{k}_1} C_{-\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_4} + C^+_{\vec{k}_1} C_{-\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} \right)$$

Tada hamiltonijan (3.26) dobija sledeći oblik:

$$H_4^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} U_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_3} C_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} U_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_2} C_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_1} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} U_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_1} C_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_2} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} C^+_{-\vec{k}_4} C_{-\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_2} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} C^+_{-\vec{k}_4} C_{-\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_1} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_3} C_{-\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_3} C_{-\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} C^+_{-\vec{k}_4} C_{-\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_2} C_{-\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_4} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_2} C_{-\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_1} C_{-\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_4} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_1} C_{-\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_2} \cdot \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} \delta_{-\vec{k}_1,\vec{k}_3} \cdot \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} 2\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} \delta_{-\vec{k}_1,\vec{k}_2} \cdot \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_4} \qquad (3.31)$$

gde nam je $\vec{k}_4 = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3$

Posle sređivanja i skidanja sume po jednom $\vec{k}$ hamiltonijan (3.31) postaje

$$\begin{aligned}
H_4^{(1)} = {} & \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_1}^2 C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_2) U_{\vec{k}_1}^2 V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} C_{\vec{k}_1} C_{\vec{k}_1} + \\
& + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) U_{\vec{k}_1}^2 V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1}^2 V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \\
& + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_2) V_{\vec{k}_1}^2 V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2}^2 C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \\
& + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_2) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2}^2 C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_2) V_{\vec{k}_1}^2 V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \\
& + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_2) U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2}^2 C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2}^2 C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \\
& + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2}^2 C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2}^2 C_{\vec{k}_1}^+ C_{\vec{k}_1} + \\
& + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2}^2 + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1}^2 V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} + \\
& + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \alpha\beta J(\vec{k}_1) U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2}^2
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Ako uzmemo da je $\vec{k}_1 = \vec{k}$ i $\vec{k}_2 = \vec{q}$ dobijamo (3.33)

$$\begin{aligned}
H_4^{(1)} = {} & \alpha\beta \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}} \Big[2 U_{\vec{k}}^2 \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q}) U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} + J(\vec{k}) U_{\vec{k}}^2 \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} + \\
& + J(\vec{k}) V_{\vec{k}}^2 \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} + 2 V_{\vec{k}}^2 \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q}) U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} + 4 J(\vec{k}) V_{\vec{k}} U_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}}^2 + \\
& + 2 U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q}) V_{\vec{q}}^2 \Big] + \frac{1}{N}\alpha\beta \sum_{\vec{k},\vec{q}} J(\vec{k}) \Big[V_{\vec{k}}^2 U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} + 2 U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} V_{\vec{q}}^2 \Big]
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Isto smo radili i za hamiltonijan (3.27) kao i za hamiltonijan (3.26).

$$H_4^{(2)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3}\{-g\mu_B \mathcal{H} - 4S\gamma J(0) - 2J(\vec{k}_4-\vec{k}_3) - 1/3 J(\vec{k}_2) - 1/3 J(\vec{k}_1)\} \times$$

$$\times B^+_{\vec{k}_1} B^+_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3} \qquad (3.34)$$

Posle uvrštavanja smene (3.16) u hamiltonijan (3.34) smo dobili:

$$a)\ v_{\vec{k}_1} u_{\vec{k}_2} v_{\vec{k}_3} u_{\vec{k}_4} (C^+_{-\vec{k}_3} C_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} + C^+_{\vec{k}_2} C_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_3})$$

$$b)\ u_{\vec{k}_1} v_{\vec{k}_2} v_{\vec{k}_3} u_{\vec{k}_4} (C^+_{\vec{k}_1} C_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_3})$$

$$c)\ v_{\vec{k}_1} u_{\vec{k}_2} u_{\vec{k}_3} v_{\vec{k}_4} (C^+_{-\vec{k}_4} C_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} + \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1}\cdot\delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_4} + C^+_{\vec{k}_2} C_{-\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_4} +$$

$$+ C^+_{\vec{k}_2} C_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4}) \qquad (3.35)$$

$$d)\ u_{\vec{k}_1} v_{\vec{k}_2} u_{\vec{k}_3} v_{\vec{k}_4} (C^+_{\vec{k}_1} C_{-\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_4} + C^+_{\vec{k}_1} C_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4})$$

$$e)\ v_{\vec{k}_1} v_{\vec{k}_2} v_{\vec{k}_3} v_{\vec{k}_4} (C_{-\vec{k}_4} C_{-\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_3} + \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_3}\cdot\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4} + C^+_{-\vec{k}_4} C_{-\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_3} +$$

$$+ \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_3}\cdot\delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} + C^+_{-\vec{k}_3} C_{-\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} + C^+_{-\vec{k}_3} C_{-\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4})$$

ovde je $\vec{k}_4 = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3$.

Posle sređivanja i snimanja sume po $\vec{k}$ dobijamo (3.36).

$$H_4^{(2)} = -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} C^+_{\vec{k}_1} C_{\vec{k}_1} [\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_2-\vec{k}_1) + 1/3 J(\vec{k}_1) + 1/3 J(\vec{k}_2)\} v_{\vec{k}_1} u_{\vec{k}_1} v_{\vec{k}_2} u_{\vec{k}_2} +$$

$$+ \{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(0) + 1/3 J(\vec{k}_2) + 1/3 J(\vec{k}_2)\} u^2_{\vec{k}_1} v^2_{\vec{k}_2} +$$

$$+ \{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_1-\vec{k}_2) + 1/3 J(\vec{k}_2) + 1/3 J(\vec{k}_1)\} \cdot u^2_{\vec{k}_1} v^2_{\vec{k}_2} +$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_2-\vec{k}_1) + 1/3\,J(\vec{k}_1) + 1/3\,J(\vec{k}_2)\}\cdot U_{\vec{k}_1}V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}V_{\vec{k}_2} +$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_1-\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_1)\}\cdot U_{\vec{k}_1}V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}V_{\vec{k}_2} +$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_2-\vec{k}_1) + 1/3\,J(\vec{k}_1) + 1/3\,J(\vec{k}_2)\}\cdot U^2_{\vec{k}_1}V^2_{\vec{k}_2} +$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_1-\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_1)\}\cdot U_{\vec{k}_1}V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}V_{\vec{k}_2} +$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(0) + 1/3\,J(\vec{k}_1) + 1/3\,J(k_1)\}\cdot U^2_{\vec{k}_1}V^2_{k_2} + \qquad (3.36)$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_1-\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_1)\}\cdot V^2_{\vec{k}_1}V^2_{\vec{k}_2} +$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(0) + 1/3\,J(\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_2)\}\cdot V^2_{\vec{k}_1}V^2_{k_2}$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_2-\vec{k}_1) + 1/3\,J(\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_1)\}\cdot V^2_{\vec{k}_1}V^2_{\vec{k}_2} +$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(0) + 1/3\,J(\vec{k}_1) + 1/3\,J(\vec{k}_1)\}\cdot V^2_{\vec{k}_1}V^2_{\vec{k}_2}\Big] -$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}\Big[\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_1-\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_1)\}\cdot U_{\vec{k}_1}V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}V_{\vec{k}_2} +$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}_1-\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_2) + 1/3\,J(\vec{k}_1)\}\cdot V^2_{\vec{k}_1}V^2_{\vec{k}_2} +$$

$$+\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(0) + 1/3\,J(\vec{k}_1) + 1/3\,J(\vec{k}_1)\}\cdot V^2_{\vec{k}_1}V^2_{\vec{k}_2}\Big]$$

Ako stavimo da je $\vec{k}_1=\vec{k}$ i $\vec{k}_2=\vec{q}$, od (3.36) posle sredivanja ćemo dobiti (3.37)

$$H_4^{(2)} = -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k},\vec{q}} C^+_{\vec{k}}C_{\vec{k}}\Big[4V_{\vec{k}}U_{\vec{k}}V_{\vec{q}}U_{\vec{q}}\{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + J(\vec{q}-\vec{k}) +$$

$$+J(\vec{k}-\vec{q}) + 1/3\,J(\vec{k}) + 1/3\,J(\vec{q})\} + \{4(g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0)) + 4J(0) +$$

$$+ 2J(\vec{k}-\vec{g}) + 2J(\vec{g}-\vec{k}) + 4\alpha\beta J(\vec{g}) + 4\alpha\beta J(\vec{k})\Big\}\cdot U_{\vec{k}}^2 V_{\vec{g}}^2 + \tag{3.37}$$

$$+ \Big\{4(g\mu_B\mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0)) + 4J(0) + 2J(\vec{k}-\vec{g}) + 2J(\vec{g}-\vec{k}) + 4\alpha\beta J(\vec{g}) +$$

$$+ 4\alpha\beta J(\vec{k})\Big\} V_{\vec{k}}^2 V_{\vec{g}}^2\Big] - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k},\vec{g}}\Big[\Big\{g\mu_B\mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}-\vec{g}) +$$

$$+ \alpha\beta J(\vec{g}) + \alpha\beta J(\vec{k})\Big\}\cdot U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} U_{\vec{g}} V_{\vec{g}} + \Big\{2(+g\mu_B\mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}-\vec{g}) +$$

$$+ 2J(0) + \alpha\beta J(\vec{g}) + 3\alpha\beta J(\vec{k})\Big\} V_{\vec{k}}^2 V_{\vec{g}}^2\Big]$$

Sve isto radimo za (3.28) kao što smo radili za (3.27)

$$H_4^{(3)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} \alpha\beta J(\vec{k}_1) B^+_{\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3} B_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_2} B_{\vec{k}_1} \tag{3.38}$$

Posle uvođenja smene (3.16) u (3.38) i sređivanja na normalni poredak i posle odbacivanja svih članova četvrtog reda dobijemo (3.39).

a) $U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} U_{\vec{k}_4} C^+_{\vec{k}_4} C_{\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_2}$

b) $U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} (C^+_{-\vec{k}_4} C_{\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_3} + C^+_{-\vec{k}_3} C_{\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4})$

c) $V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} U_{\vec{k}_4} (C^+_{\vec{k}_4} C_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} + C^+_{\vec{k}_4} C_{\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_1})$

$$\text{d)}\; V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} (C^+_{-\vec{k}_1} C_{\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_3} + \delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_3}\cdot\delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} + C^+_{-\vec{k}_3} C_{-\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} +$$

$$+ C^+_{-\vec{k}_3} C_{\vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_1}) \tag{3.39}$$

$$\text{e)}\; V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_3} V_{\vec{k}_4} (C^+_{-\vec{k}_1} C_{-\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_2} + \delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_3}\cdot\delta_{\vec{k}_2,-\vec{k}_1} + C^+_{-\vec{k}_1} C_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} +$$

$$+ \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_1}\cdot\delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_4} + C^+_{-\vec{k}_2} C_{-\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_1} + C^+_{-\vec{k}_2} C_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_1})$$

ovde nam je $\vec{k}_4 = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3$

Posle sređivanja i skidanja sume po jednom k dobijamo:

$$H_4^{(3)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \mathcal{L}\beta\, C^+_{\vec{k}_1} C_{\vec{k}_1}\Big[J(\vec{k}_1)\, U^2_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} + J(\vec{k}_1) U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2}^2 + J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_2}^2 U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} +$$

$$+ J(\vec{k}_2) U^2_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} + J(\vec{k}_1) V^2_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} + J(\vec{k}_1) V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_1} V^2_{\vec{k}_2} + J(\vec{k}_2) V^2_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_2} +$$

$$+ J(\vec{k}_2) V^2_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1} + J(\vec{k}_2) V^2_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} + J(\vec{k}_1) V^2_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_1} + J(\vec{k}_2) V^2_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_2} +$$

$$+ J(\vec{k}_2) U^2_{\vec{k}_2} V_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_1}\Big] + \frac{1}{N}\mathcal{L}\beta \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} J(\vec{k}_1)\Big[V^2_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_2} U_{\vec{k}_2} + 2\, U_{\vec{k}_1} U_{\vec{k}_2} V^2_{\vec{k}_2}\Big] \qquad (3.40)$$

Za $\vec{k}_1 = \vec{k}$ i $\vec{k}_2 = \vec{q}$ dobijamo sledeći hamiltonijan

$$H_4^{(3)} = \mathcal{L}\beta \sum_{\vec{k}} C^+_{\vec{k}} C_{\vec{k}}\Big[J(\vec{k}) U^2_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}} V_{\vec{q}} + 4 J(\vec{k}) U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V^2_{\vec{q}} +$$

$$+ 2 U^2_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q}) V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} + J(\vec{k}) V^2_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} + 2 V^2_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q}) V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} + \qquad (3.41)$$

$$+ 2 V_{\vec{k}} U_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q}) V^2_{\vec{q}}\Big] + \frac{1}{N}\mathcal{L}\beta \sum_{\vec{k},\vec{q}} J(\vec{k})\Big[V^2_{\vec{k}} V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} + 2 V_{\vec{k}} U_{\vec{k}} V^2_{\vec{q}}\Big]$$

Doprinos u kvadratni hamiltonijan, od operatora H_4 je (3.42)

$$H_4 = \sum_{\vec{k}} C^+_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \Big\{\mathcal{L}\beta\Big[2 J(\vec{k}) U^2_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} + 8 J(\vec{k}) V_{\vec{k}} U_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V^2_{\vec{q}} +$$

$$+ 4 U^2_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} J(\vec{q}) V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} + 2 J(\vec{k}) V^2_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} + 4 V^2_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} J(\vec{q}) V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} +$$

$$+ 4 V_{\vec{k}} U_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} J(\vec{q}) V^2_{\vec{q}}\Big] - \Big[4 U_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} U_{\vec{q}} \{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4 S\gamma J(0) + 2 J(\vec{q}-\vec{k}) +$$

$$+ J(\vec{k}-\vec{q}) + \mathcal{L}\beta J(\vec{k}) + \mathcal{L}\beta J(\vec{q})\} + U^2_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} V^2_{\vec{q}} \{4(g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4 S\gamma J(0)) + 4 J(0) + 2 J(\vec{k}-\vec{q}) +$$

$$+ 2 J(\vec{q}-\vec{k}) + 4\mathcal{L}\beta J(\vec{q}) + 4\mathcal{L}\beta J(\vec{k})\} + V^2_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} V^2_{\vec{q}} \{4(g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4 S\gamma J(0) +$$

$$+2J(\vec{k}-\vec{q}) + 2J(\vec{q}-\vec{k}) + 4\alpha\beta J(\vec{q}) + 4\alpha\beta J(\vec{k})]]\} + \frac{2}{N}\sum_{\vec{k}} \alpha\beta J(\vec{k})[v_{\vec{k}}^2 \sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} +$$

$$+2 v_{\vec{k}} u_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2] - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \{u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} u_{\vec{q}} [g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) +$$

$$+2J(\vec{k}-\vec{q}) + \alpha\beta J(\vec{q}) + \alpha\beta J(\vec{k})] + v_{\vec{k}}^2 \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 [2(g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0)) + \qquad (3.42)$$

$$+2J(\vec{k}-\vec{q}) + 2J(0) + \alpha\beta J(\vec{q}) + 3\alpha\beta J(\vec{k})]]\}$$

gde nam je $H_4 = H_4' + H_0^2$

$$H_4' = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}} \{2\alpha\beta(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) J(\vec{k}) \sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} + 8\alpha\beta J(\vec{k}) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 +$$

$$+4\alpha\beta(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) \sum_{\vec{q}} J(\vec{q}) v_{\vec{q}} u_{\vec{q}} + 4\alpha\beta u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 J(\vec{q}) - 4 u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} (g\mu_B \mathcal{H}\gamma + \qquad (3.43)$$

$$+4S\gamma J(0) + \alpha\beta J(\vec{k})) \sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} - 8 u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} J(\vec{q}-\vec{k}) - 8\alpha\beta u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} J_{\vec{q}}$$

$$-4(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2)(g\mu_B \mathcal{H}\gamma + S\gamma J(0) + J(0) + \alpha\beta J(\vec{k})) \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 - 4(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2)\alpha\beta \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 J(\vec{q}) -$$

$$-4(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 J(\vec{k}-\vec{q})\} = \sum_{\vec{k}} E'(\vec{k}) C_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}}$$

$$H_2^{(0)} = \frac{2}{N}\sum_{\vec{k}} \alpha\beta J(\vec{k})[v_{\vec{k}}^2 \sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} + 2 u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2] - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \{u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} u_{\vec{q}} \times$$

$$\times \{g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0) + 2J(\vec{k}-\vec{q}) + \alpha\beta J(\vec{q}) + \alpha\beta J(\vec{k})\} + v_{\vec{k}}^2 \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 \times \{2 \times$$

$$\times (g\mu_B \mathcal{H}\gamma + 4S\gamma J(0)) + 2J(\vec{k}-\vec{q}) + 2J(0) + \alpha\beta J(\vec{q}) + 3\alpha\beta J(\vec{k})\} \qquad (3.44)$$

$$\frac{E'(\vec{k})}{J(0)} = 2(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2)\gamma(\vec{k})\alpha\beta \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} + 8\alpha\beta\gamma(\vec{k}) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 +$$

$$+4(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2)\alpha\beta \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \gamma(\vec{q}) u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} + 4 u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \alpha\beta \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} \gamma(\vec{q}) v_{\vec{q}}^2 - 4 u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \times$$

$$\times \left(\frac{g\mu_B \mathcal{H}\gamma}{J(0)} + 4S\gamma + \alpha\beta\gamma(\vec{k})\right) \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} u_{\vec{q}} - 8 u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} J(\vec{q}-\vec{k}) -$$

$$-4\Delta\beta u_{\vec k} v_{\vec k}\frac{1}{N}\sum_{\vec q} u_{\vec q} v_{\vec q}\gamma(\vec q) - 4(u_{\vec k}^2+v_{\vec k}^2)\left(\frac{g\mu_B\mathcal{H}\Gamma}{J(0)}+4S\gamma+\Delta\beta\gamma(\vec k)\right)\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}^2 -$$

$$-4(u_{\vec k}^2+v_{\vec k}^2)\Delta\beta\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}\gamma(\vec q) - 4(u_{\vec k}^2+v_{\vec k}^2)\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}^2\gamma(\vec k-\vec q) \qquad (3.45)$$

gde nam je $\gamma(\vec k)=\frac{J(\vec k)}{J(0)}$.

Posmatramo slučaj bez polja $\mathcal{H}=0$.

$$\frac{E'(\vec k)}{J(0)} = 2(u_{\vec k}^2+v_{\vec k}^2)\gamma(\vec k)\Delta\beta\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}u_{\vec q} + 8\Delta\beta\gamma(\vec k)u_{\vec k}v_{\vec k}\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}^2 +$$

$$+4(u_{\vec k}^2+v_{\vec k}^2)\Delta\beta\sum_{\vec q} u_{\vec q}v_{\vec q}\gamma(\vec q) + 4u_{\vec k}v_{\vec k}\Delta\beta\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\gamma(\vec q)v_{\vec q}^2 - 4u_{\vec k}v_{\vec k}(4S\gamma+$$

$$+\Delta\beta\gamma(\vec k))\frac{1}{N}\sum_{\vec q} u_{\vec q}v_{\vec q} - 8u_{\vec k}v_{\vec k}\frac{1}{N}\sum_{\vec q} u_{\vec q}v_{\vec q}\gamma(\vec q-\vec k) - 4\Delta\beta u_{\vec k}v_{\vec k}\frac{1}{N}\times$$

$$\times\frac{1}{N}\sum_{\vec q} u_{\vec q}v_{\vec q}\gamma(\vec q) - 4(u_{\vec k}^2+v_{\vec k}^2)(S\gamma+1+\Delta\beta\gamma(\vec k))\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}^2 - \qquad (3.46)$$

$$-4(u_{\vec k}^2+v_{\vec k}^2)\Delta\beta\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}^2\gamma(\vec q) - 4(u_{\vec k}^2+v_{\vec k}^2)\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}^2\gamma(\vec k-\vec q)$$

Pre nego što pređemo na izračunavanje energije, definisali smo vrednosti određenih suma:

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}u_{\vec q} = -\frac{1}{4}I_2$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec q} u_{\vec q}v_{\vec q}\gamma(\vec q-\vec k) = -\frac{1}{4}\gamma(\vec k)\left(\frac{1}{d}I_{xx}+\frac{d-1}{d}I_{xy}\right)$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\gamma(\vec q-\vec k)v_{\vec q}^2 = \frac{1}{2}\gamma(\vec k)\left[I_2-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{d}I_{xx}-\frac{d-1}{d}I_{xy}\right)\right] \qquad (3.47)$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\gamma(\vec q)u_{\vec q}v_{\vec q} = -\frac{1}{4}\left(\frac{1}{d}I_{xx}+\frac{d-1}{d}I_{xy}\right)$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec q} v_{\vec q}^2 = \frac{1}{2}I_1-\frac{1}{4}I_2-\frac{1}{2}$$

$$\frac{1}{N}\sum_{q} u_{\vec q}^2 = 2I_1-I_2$$

$$I_1 = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\frac{dx}{\sqrt{1-\cos x}} \;;\quad I_2 = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\frac{\cos x\, dx}{\sqrt{1-\cos x}}$$

$$I_{xx} = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\frac{\cos^2 x\, dx}{\sqrt{1-\cos x}} \;;\quad I_{xy} = \frac{1}{\pi}\iint_0^{\pi}\frac{\cos x \cos y\, dx\, dy}{\sqrt{2-\frac{1}{2}(\cos x+\cos y)}} \tag{3.48}$$

Raznatramo za slučaj $S > \frac{1}{2}$, tada je $\alpha=\sqrt{2S}$, $\Gamma=0$ i energija (3.46) postaje

$$\begin{aligned}\frac{E'(\vec{k})}{J(0)} = {} & 2\sqrt{2S}\beta(u_{\vec{k}}^2+v_{\vec{k}}^2)\gamma(\vec{k})\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} + 8\gamma(\vec{k})u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}\sqrt{2S}\beta\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 + \\ & + 4\sqrt{2S}\beta(u_{\vec{k}}^2+v_{\vec{k}}^2)\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\gamma(\vec{q})u_{\vec{q}}v_{\vec{q}} + 4\sqrt{2S}\beta u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\gamma(\vec{q})v_{\vec{q}}^2 - \\ & - 8u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}}v_{\vec{q}}\gamma(\vec{k}-\vec{q}) - 4\sqrt{2S}\beta u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}}v_{\vec{q}}\gamma(\vec{q}) - \\ & - 4(u_{\vec{k}}^2+v_{\vec{k}}^2)(1-\sqrt{2S}\gamma(\vec{k})\beta)\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 - 4(u_{\vec{k}}^2-v_{\vec{k}}^2)\sqrt{2S}\beta\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2\gamma(\vec{q}) - \\ & - 4(u_{\vec{k}}^2+v_{\vec{k}}^2)\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2\gamma(\vec{k}-\vec{q})\end{aligned} \tag{3.49}$$

Za $S \gg 1$, Holštajn-Primakova i Agranovič-Tošićeva transformacija su iste, i ako uvrstimo (3.47) u (3.49) tada smo dobili energiju. β ima istu vrednost za obe transformacije i iznosi $\beta = -\frac{1}{\sqrt{2S}}\cdot\frac{1}{2}$.

$$\begin{aligned}\frac{E'(\vec{k})}{J(0)} = {} & \frac{\gamma^2(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}\Big[I_2 - \frac{7}{8}\Big(\frac{1}{d}I_{xx} - \frac{d-1}{d}I_{xy}\Big)\Big] + \frac{\gamma(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}\Big[\frac{13}{8}I_2 + \frac{3}{2}I_1 - \frac{1}{2} + \\ & + \frac{7}{8}\Big(\frac{1}{d}I_{xx} - \frac{d-1}{d}I_{xy}\Big)\Big] - \frac{1}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}\big(I_2 - I_1 + 1\big)\end{aligned} \tag{3.50}$$

Posmatrajmo okolinu $\vec{k}\to 0$. U tom slučaju vidimo da se sve veličine ponašaju na isti način:

$$\frac{\gamma^2(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}} \to \frac{1}{\gamma(\vec{k})} \;;\quad \frac{\gamma(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(k)}} \to \frac{1}{\gamma(\vec{k})} \;;\quad \frac{1}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}} \to \frac{1}{\gamma(\vec{k})} \tag{3.51}$$

Onda (3.50) dobija vrednost.

$$\frac{E'(\vec{k})}{J(0)} = \frac{1}{\gamma(\vec{k})}\left(\frac{13}{8}I_2 + \frac{5}{2}I_1 - \frac{5}{2}\right) \tag{3.52}$$

Za slučaj spina $S = \frac{1}{2}$, $\alpha = 1$, γ i β su različiti, a hamiltonijan (3.43) postaje (3.53)

$$\begin{aligned}\frac{E(\vec{k})}{J(0)} = {} & 2\beta(U_{\vec{k}}^2 + V_{\vec{k}}^2)\gamma(k)\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}}V_{\vec{q}} + 8\gamma(\vec{k})\beta U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} + \\ & + 4\beta(U_{\vec{k}}^2 + V_{\vec{k}}^2)\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}}V_{\vec{q}}\gamma(\vec{q}) + 4\beta U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\gamma(\vec{q})V_{\vec{q}}^2 - \\ & - 4U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}(2\gamma + \beta\gamma(\vec{k}))\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}}U_{\vec{q}} - 8U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}}V_{\vec{q}}\gamma(\vec{q}-\vec{k}) - \\ & - 4\beta U_{\vec{k}}V_{\vec{k}}\gamma(\vec{k})\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}}V_{\vec{q}}\gamma(\vec{q}) - 4(U_{\vec{k}}^2 + V_{\vec{k}}^2)(1 + 2\gamma + \beta\gamma(\vec{k}))\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} - \\ & - 4(U_{\vec{k}}^2 + V_{\vec{k}}^2)\beta\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}}^2\gamma(\vec{q}) - 4(U_{\vec{k}}^2 + V_{\vec{k}}^2)\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}}\gamma(\vec{k}-\vec{q})\end{aligned} \tag{3.53}$$

Uvrštavanjem vrednosti (3.22) i (3.47) u (3.53) dobijamo (3.54)

$$\begin{aligned}\frac{E'(\vec{k})}{J(0)} = {} & \frac{\gamma^2(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}\left[\beta\left(I_2 - 2I_1 + 2 - \frac{1}{d}I_{xx} - \frac{d-1}{d}I_{xy}\right) + I_2 - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{d}I_{xx} + \frac{d-1}{d}I_{xy}\right)\right] + \\ & + \frac{\gamma(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}\left[\beta\left(I_1 - \frac{5}{4}I_2 - 1 + \frac{1}{d}I_{xx} + \frac{d-1}{d}I_{xy}\right) + \gamma\left(2 - 2I_1 + \frac{1}{2}I_2\right) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{d}I_{xx} + \frac{d-1}{d}I_{xy}\right) - 2I_2\right] + \frac{1}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}\left[\beta(2I_1 - 2) + \gamma[4I_1 - 2I_2 - 4]\right]\end{aligned} \tag{3.54}$$

U Holštajn-Primakovoj transformaciji /5/ za $S = \frac{1}{2}$, $\beta_{HP} = -\frac{1}{2}$, $\gamma_{HP} = 0$, pa dobijamo (3.55)

$$\begin{aligned}\frac{E'(\vec{k})}{J(0)} = {} & \frac{\gamma^2(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}\left(\frac{1}{2}I_2 + I_1 - 1\right) + \frac{\gamma(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}\left(-\frac{1}{2}I_1 - \frac{3}{4}I_2 + \frac{1}{2}\right) + \\ & + \frac{1}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}}(1 - I_1)\end{aligned} \tag{3.55}$$

Ako uzmemo pretpostavku (3.51) dobijamo:

$$\frac{E'(\vec{k})}{J(0)} = \frac{1}{\gamma(\vec{k})}\left(-\frac{1}{4}I_2 - \frac{1}{2}I_1 + \frac{1}{2}\right) \qquad (3.56)$$

U Agranovič-Tošićevoj transformaciji /8/ za S = $\frac{1}{2}$, je $\gamma_{AT} = 1$ i $\beta_{AT} = -1$, uvrštavanjem ovih vrednosti u (3.54) dobijamo (3.57)

$$\frac{E'(\vec{k})}{J(0)} = \frac{\gamma^2(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma^2(\vec{k})}}\left(2I_1 - 2 + \frac{1}{2}\frac{1}{d}I_{xx} + \frac{d-1}{d}I_{xy}\right) + \frac{\gamma(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma^2(\vec{k})}}\left(-3I_1 + 3 - \frac{3}{4}I_2 - \frac{1}{2}\frac{1}{d}I_{xx} - \frac{d-1}{d}\frac{1}{2}I_{xy}\right) + \frac{1}{\sqrt{1-\gamma^2(\vec{k})}}\left(2I_1 - 2 - 2I_2\right) \qquad (3.57)$$

Ako uzmemo pretpostavku (3.51) tada energija (3.57) dobija oblik (3.58)

$$\frac{E'(\vec{k})}{J(0)} = \frac{1}{\gamma(\vec{k})}\left(I_1 - 1 - \frac{11}{4}I_2\right) \qquad (3.58)$$

Popravku na energiju osnovnog stanja (3.44) smo podjelili sa $J(0)$ pa dobijamo (3.59)

$$\sum_{\vec{k}}\frac{E_2^{(0)}(\vec{k})}{J(0)} = \frac{2}{N}\sum_{\vec{k}} \alpha\beta\gamma(\vec{k})\Big(v_{\vec{k}}^2\sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} + 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2\Big) - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} u_{\vec{q}}\Big[g\mu_B\mathcal{H}\gamma\frac{1}{J(0)} + 4S\gamma + 2\gamma(\vec{k}-\vec{q}) + \alpha\beta\gamma(\vec{q}) + \alpha\beta\gamma(\vec{k})\Big] - v_{\vec{k}}\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2\Big[2\Big(g\mu_B\mathcal{H}\frac{\gamma}{J(0)} + 4S\gamma\Big) + 2\gamma(\vec{k}-\vec{q}) + 2 + \alpha\beta\gamma(\vec{q}) + 3\alpha\beta\gamma(\vec{k})\Big] \qquad (3.59)$$

gde nam je $\frac{J(\vec{k})}{J(0)} = \gamma(\vec{k})$; $\frac{g\mu_B\mathcal{H}\gamma}{J(0)} = 0$.

Za $S > \frac{1}{2}$; $\alpha = \sqrt{2S}$ i $\gamma = 0$ pa dobijamo:

$$\sum_{\vec{k}}\frac{E_2^{(0)}(\vec{k})}{J(0)} = \frac{2}{N}\sum_{\vec{k}}\sqrt{2S}\beta\gamma(\vec{k})\Big[v_{\vec{k}}^2\sum_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} + 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}\sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 -$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} u_{\vec{q}} \left[2\gamma(\vec{k}-\vec{q}) + \sqrt{2S}\beta\gamma(\vec{q}) + \sqrt{2S}\beta\gamma(\vec{k})\right] -$$
$$-\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^2 \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}}^2 \left[2\gamma(\vec{k}-\vec{q}) + 2 + \sqrt{2S}\beta\gamma(\vec{q}) + 3\sqrt{3S}\beta\gamma(\vec{k})\right] \qquad (3.60)$$

Uvrštavanjem izraza (3.47) u (3.60) i pošto nam je isto za Holštajn-Primakovu i Agranovič-Tošićevu transformaciju dobili smo sledeći izraz za popravku energije osnovnog stanja.

$$\sum_{\vec{k}} \frac{E_2^{(0)}(\vec{k})}{J(0)} = \left(\frac{1}{d} I_{xx} + \frac{d-1}{d} I_{xy}\right)\left(\frac{5}{8} I_1 - \frac{1}{4} - \frac{45}{32} I_2\right) + I_2\left(\frac{1}{2} I_2 + \frac{1}{8} I_1 - \right.$$
$$\left. - \frac{1}{8}\right) + I_1\left(\frac{1}{2} I_1 - \frac{1}{2} - \frac{3}{8} I_2\right) \qquad (3.61)$$

Za $S = \frac{1}{2}$, uvrštavanjem izraza (3.22) i (3.47) i hamiltonijan (3.44) postaje:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{E_2^{(0)}(\vec{k})}{J(0)} = \sum_{\vec{k}} \frac{\gamma(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}} \left\{\alpha\beta\left[-\frac{1}{4} I_2 + \frac{3}{4} I_1 + \frac{3}{4} - \frac{3}{16}\left(\frac{1}{d} I_{xx} + \frac{d-1}{d} I_{xy}\right)\right] + \right.$$
$$\left. + \gamma\left(+\frac{1}{8} I_2 - \frac{3}{4} I_1 + \frac{3}{4}\right) - \frac{1}{4} I_1 + \frac{3}{4} I_2 + \frac{1}{4} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{d} I_{xx} + \frac{d-1}{d} I_{xy}\right)\right\} + \qquad (3.62)$$
$$+ \sum_{\vec{k}} \frac{\gamma^2(\vec{k})}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}} \alpha\beta\left(\frac{1}{2} I_2 - \frac{3}{2} I_1 + \frac{1}{2}\right) + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{1-\gamma(\vec{k})}} \alpha\beta\left(\frac{1}{4} I_2 + \frac{1}{4}\frac{1}{d} I_{xx} + \frac{d-1}{d} I_{xy}\right)$$

Za Holštajn-Primakovu transformaciju /5/ imamo da je $\alpha_{HP} = 1$, $\beta_{HP} = -\frac{1}{2}$, $\gamma_{HP} = 0$, pa dobijamo (3.63).

$$\sum_{\vec{k}} \frac{E_2^{(0)}(\vec{k})}{J(0)} = \left(\frac{1}{d} I_{xx} + \frac{d-1}{d} I_{xy}\right)\left(\frac{3}{32} I_2 + \frac{5}{8} I_1 - \frac{1}{4}\right) + I_2\left(\frac{7}{8} I_2 - \frac{5}{8} I_1 + \frac{5}{8}\right) +$$
$$+ I_1\left(\frac{1}{2} I_1 - \frac{3}{8} I_2 - \frac{1}{2}\right) \qquad (3.63)$$

A za Agranovič-Tošićevu transformaciju /8/ imamo da je $\alpha_{AT} = 1$,

$\beta_{AT}=-1, \gamma_{AT}=1$ i izraz (3.62) postaje (3.64).

$$\sum_{\vec{k}} \frac{E_{2(\vec{k})}^{(0)}}{J(0)} = \left(\frac{1}{d} I_{xx} + \frac{d-1}{d} I_{xy}\right)\left(\frac{3}{2} I_1 + \frac{3}{16} I_2 - \frac{1}{2}\right) + I_2\left(\frac{3}{2} I_2 - \frac{1}{4} I_1 + \frac{1}{4}\right) +$$
$$+ I_1\left(2 I_1 - 1 + \frac{3}{2} I_2\right) \tag{3.64}$$

Ukupna energija osnovnog stanja sa popravkom za S > 1 data je izrazom (3.65)

$$E = -2 J N_z S^2 - g\mu_B \mathcal{H} N S - J(0)\sum_{\vec{k}}\left(1 - \sqrt{1-\gamma(\vec{k})}\right) +$$
$$+ \left(\frac{1}{d} I_{xx} + \frac{d-1}{d} I_{xy}\right)\left(\frac{5}{2} I_1 - \frac{1}{4} - \frac{45}{32} I_2\right) + I_2\left(\frac{1}{2} I_2 + \frac{1}{8} I_1 - \frac{1}{8}\right) + \tag{3.65}$$
$$+ I_1\left(\frac{1}{2} I_1 - \frac{3}{8} I_2 - \frac{1}{2}\right)$$

Ukupna energija u Agranovič-Tošićevoj reprezentaciji za $S = \frac{1}{2}$ je dobijena.

$$E = -2 J N_z S^2 - g\mu_B \mathcal{H} N S - J(0)\sum_{\vec{k}}\left(1 - \sqrt{1-\gamma(\vec{k})}\right) + \left(\frac{1}{d} I_{xx} + \frac{d-1}{d} I_{xy}\right) \times$$
$$\times\left(\frac{3}{2} I_1 - \frac{3}{16} I_2 - \frac{1}{2}\right) + I_2\left(\frac{3}{2} I_2 - \frac{1}{4} I_1 + \frac{1}{4}\right) + I_1\left(2 I_1 - 1 + \frac{3}{2} I_2\right) \tag{3.66}$$

Ukupna energija osnovnog stanja za $S = \frac{1}{2}$ u Holštajn-Primakovoj reprezentaciji je data sa (3.67)

$$E = -2 J N_z S^2 - g\mu_B \mathcal{H} N S - J(0)\sum_{\vec{k}}\left(1 - \sqrt{1-\gamma(\vec{k})}\right) +$$
$$+ \left(\frac{1}{d} I_{xx} + \frac{d-1}{d} I_{xy}\right)\left(\frac{3}{32} I_2 + \frac{5}{8} I_1 - \frac{1}{4}\right) + I_2\left(\frac{7}{8} I_2 - \frac{5}{8} I_1 + \frac{5}{8}\right) + \tag{3.67}$$
$$+ I_1\left(\frac{1}{2} I_1 - \frac{3}{8} I_2 - \frac{1}{2}\right)$$

Zbog kvantnomehaničkog efekta tačnije zbog toga što operator čija srednja vrednost prestavlja parametar uređenosti ne komutira sa hamiltonijanom i na apsolutnoj nuli parametar uređenosti $\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\langle S^{y}_{\vec{k}}\rangle$ ne dostiže svoju maksimalnu vrednost N. Zbog toga je zanimljivo proučiti koliko je to ostupanje drugim rečima izračunati na T = OK.

Ostupanje dobijamo na sledeći način:

$$\Delta\langle S^{y}_{\vec{k}}\rangle_0 = S - \langle S^{y}_{\vec{k}}\rangle \tag{3.68}$$

$$\langle S^{y}_{\vec{k}}\rangle = S - \langle B^{+}_{\vec{k}}B_{\vec{k}}\rangle - \gamma\langle B^{+}_{\vec{k}}B^{+}_{\vec{k}}B_{\vec{k}}B_{\vec{k}}\rangle =$$

$$= S - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\langle B^{+}_{\vec{k}}B_{\vec{k}}\rangle + \frac{1}{N^3}\gamma\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4}\langle B^{+}_{\vec{k}_1}B^{+}_{\vec{k}_2}B_{\vec{k}_3}B_{\vec{k}_4}\rangle\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4} e^{i(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3-\vec{k}_4)n} =$$

$$= S - \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\langle B^{+}_{\vec{k}}B_{\vec{k}}\rangle + \frac{1}{N^2}\gamma\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3}\langle B^{+}_{\vec{k}_1}B^{+}_{\vec{k}_2}B_{\vec{k}_3}B_{\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3} \tag{3.69}$$

gde nam je $\vec{k}_4 = \vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3$

Posle uvrštavanja smene (3.16) dobijamo:

$$\langle B^{+}_{\vec{k}}B_{\vec{k}}\rangle = \langle (U_{\vec{k}}C^{+}_{\vec{k}} + V_{\vec{k}}C_{-\vec{k}})(U_{\vec{k}}C_{\vec{k}} + V_{\vec{k}}C^{+}_{-\vec{k}})\rangle \equiv V^{2}_{\vec{k}}\langle C_{-\vec{k}}C^{+}_{-\vec{k}}\rangle =$$

$$= V^{2}_{\vec{k}}\langle 1 + C^{+}_{\vec{k}}C_{-\vec{k}}\rangle = V^{2}_{\vec{k}} \tag{3.70}$$

$$\langle B^{+}_{\vec{k}_1}B^{+}_{\vec{k}_2}B_{\vec{k}_3}B_{\vec{k}_4}\rangle = \langle (U_{\vec{k}_1}C^{+}_{\vec{k}_1} + V_{\vec{k}_1}C_{-\vec{k}_1})(U_{\vec{k}_2}C^{+}_{\vec{k}_2} + V_{\vec{k}_2}C_{-\vec{k}_2})\times$$

$$\times(U_{\vec{k}_3}C_{\vec{k}_3} + V_{\vec{k}_3}C^{+}_{-\vec{k}_3})(U_{\vec{k}_4}C_{\vec{k}_4} + V_{\vec{k}_4}C^{+}_{-\vec{k}_4})\rangle \equiv \langle V_{\vec{k}_1}V_{\vec{k}_2}V_{\vec{k}_3}V_{\vec{k}_4}C_{-\vec{k}_1}C_{-\vec{k}_2}C^{+}_{-\vec{k}_3}C^{+}_{-\vec{k}_4}\rangle +$$

$$+ \langle U_{\vec{k}_1}V_{\vec{k}_2}U_{\vec{k}_3}V_{\vec{k}_4}C^{+}_{\vec{k}_1}C_{-\vec{k}_2}C_{\vec{k}_3}C^{+}_{-\vec{k}_4}\rangle \tag{3.71}$$

$$v_{\vec k_1} v_{\vec k_2} v_{\vec k_3} v_{\vec k_4} \langle c_{-\vec k_1}(\delta_{\vec k_2,\vec k_3} + c^+_{-\vec k_3} c_{-\vec k_2}) c^+_{-\vec k_4}\rangle + c_{-\vec k_1} c^+_{-\vec k_4}\delta_{\vec k_2,\vec k_4} +$$

$$+ c_{-\vec k_1} c^+_{-\vec k_3} c_{-\vec k_2} c^+_{-\vec k_4} \equiv \delta_{\vec k_1,\vec k_4}\cdot\delta_{\vec k_2,\vec k_3} + \langle c^+_{-\vec k_4} c_{-\vec k_1}\delta_{\vec k_2,\vec k_3}\rangle +$$

$$+(\delta_{\vec k_1,\vec k_3} + c^+_{-\vec k_3} c_{\vec k_1})(\delta_{\vec k_2,\vec k_4} + c^+_{-\vec k_3} c_{\vec k_4}) = \qquad (3.72)$$

$$\equiv v_{\vec k_1} v_{\vec k_2} v_{\vec k_3} v_{\vec k_4} (\delta_{\vec k_1,\vec k_4}\cdot\delta_{\vec k_2,\vec k_3} + \delta_{\vec k_1,\vec k_3}\cdot\delta_{\vec k_2,\vec k_4})$$

$$v_{\vec k_1} u_{\vec k_2} u_{\vec k_3} v_{\vec k_4} \langle c_{-\vec k_1} c^+_{\vec k_2} c_{\vec k_3} c^+_{-\vec k_4}\rangle = (\delta_{-\vec k_1,\vec k_2} + c^+_{\vec k_2} c_{-\vec k_1})(\delta_{\vec k_3,-\vec k_4} + c^+_{-\vec k_4} c_{\vec k_3}) \equiv$$

$$\equiv \delta_{-\vec k_1,\vec k_2}\cdot\delta_{\vec k_3,-\vec k_4}\cdot v_{\vec k_1} u_{\vec k_2} u_{\vec k_3} v_{\vec k_4} \qquad (3.73)$$

Za $\langle S^y_{\vec k}\rangle$ u osnovnom stanju dobijamo:

$$\langle S^y_{\vec k}\rangle = S - \frac{1}{N}\sum_{\vec k} v^2_{\vec k} + \gamma\frac{1}{N^2}\sum_{\vec k_1,\vec k_2,\vec k_3}\Big[v_{\vec k_1} v_{\vec k_2} v_{\vec k_3} v_{\vec k_4}(\delta_{\vec k_1,\vec k_4}\cdot\delta_{\vec k_2,\vec k_3} + \delta_{\vec k_1,\vec k_3}\cdot\delta_{\vec k_2,\vec k_4}) +$$

$$+ v_{\vec k_1} u_{\vec k_2} u_{\vec k_3} v_{\vec k_4}\delta_{-\vec k_1,\vec k_2}\cdot\delta_{\vec k_3,-\vec k_4}\Big] = \qquad (3.74)$$

$$= S - \frac{1}{N}\sum_{\vec k} v^2_{\vec k} + \frac{2}{N^2}\gamma\sum_{\vec k_1,\vec k_2} v^2_{\vec k_1} v^2_{\vec k_2} + \frac{1}{N^2}\gamma\sum_{\vec k_1,\vec k_2} u_{\vec k_1} v_{\vec k_1} u_{\vec k_2} v_{\vec k_2} =$$

$$= S - \frac{1}{N}\sum_{\vec k} v^2_{\vec k} + 2\gamma\Big(\frac{1}{N}\sum_{\vec k} v^2_{\vec k}\Big)^2 + \gamma\Big(\frac{1}{N}\sum_{k} u_{\vec k} v_{\vec k}\Big)^2 = \langle S^y_{\vec k}\rangle$$

Uvrštavanjem izraza (3.47) u (3.74) dobijamo za ostupanje:

$$\Delta\langle S^y_{\vec k}\rangle = S - \langle S^y_{\vec k}\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\vec k} v^2_{\vec k} - 2\gamma\Big(\frac{1}{N}\sum_{\vec k} v^2_{\vec k}\Big)^2 - \gamma\Big(\frac{1}{N}\sum_{\vec k} v_{\vec k} u_{\vec k}\Big)^2 \qquad (3.75)$$

Vidimo da dobijeni rezultat (3.75) reprodukuje rezultat iz /11/ stim što smo mi dobili popravku, koja potiče od članova četvrtog reda.

Z A K LJ U Č A K

Cilj ovog rada je bio da se prouče niskotemperaturske osobine XY-modela i to energija osnovnog stanja, energija elementarnih pobuđenja i devijacije magnetizacije u osnovnom stanju T = OK. Pokazano je da članovi četvrtog reda po Boze--operatorima koji su posledica kinematičke interakcije i imaju značajan doprinos, ali da oni u ovoj aproksimaciji divergiraju za male talasne vektore. To je osobina kanonske transformacije Bogoljubova. Stoga bi bilo poželjno da se ovi proračuni izvedu i nekom drugom metodom, npr. metodom Grinove funkcije.

P R I L O G

Svođenje operatora četvrtog reda na normalni proizvod

Opšti postupak: Svaki izraz ima 4 operatora. Doprinos mogu dati samo oni sa dva kreaciona i dva anhilaciona koji nisu u normalnom poretku jer dva kreiraju i daju kroneker, a druga dva daju C^+C. Ako sa + označimo kreacione, a sa − anhilacione operatore imamo 16 mogućnosti:

$+\,+\,+\,+$, $+\,+\,-\,+$, $+\,+\,-\,-$, $\boxed{+\,-\,-\,+}$, $\boxed{-\,+\,+\,-}$, $-\,+\,+\,+$,
$\boxed{-\,+\,-\,+}$, $-\,+\,-\,-$, $-\,-\,-\,+$, $+\,+\,+\,-$, $+\,-\,+\,+$, $\boxed{+\,-\,+\,-}$,
$+\,-\,-\,-$, $\boxed{-\,-\,+\,+}$, $-\,-\,+\,-$, $-\,-\,-\,-$;

Za nas su interesantni ovih pet uokvirenih koji imaju mogućnost da daju operatore C^+C ili konstantne popravke.

a) $C_a^+ C_b C_c^+ C_d = C_a^+ (\delta_{b,c} + C_c^+ C_b) C_d = \delta_{b,c} C_a^+ C_d$

b) $C_a^+ C_b C_c C_d^+ = C_a^+ C_b (\delta_{d,c} + C_d^+ C_c) = \delta_{d,c} C_a^+ C_b + C_a^+ C_b C_d^+ C_c = \delta_{d,c} C_a^+ C_b + C_a^+ C_c \delta_{b,d}$

c) $C_a C_b C_c^+ C_d^+ = C_a (C_c^+ C_b + \delta_{c,b}) C_d^+ = C_a C_c^+ C_d^+ + C_a C_d^+ \delta_{c,b} = (C_c^+ C_a + \delta_{a,c})(\delta_{b,d} +$

$+ C_d^+ C_b) + \delta_{c,b} (C_d^+ C_a + \delta_{a,d}) = \delta_{b,d} C_c^+ C_a + \delta_{a,c} \cdot \delta_{b,c} + C_c^+ C_a C_d^+ C_b + \delta_{a,c} C_d^+ C_b +$

$+ \delta_{c,b} C_d^+ C_a + \delta_{c,b} \cdot \delta_{a,d} \equiv \delta_{a,c} \cdot \delta_{b,d} + \delta_{a,d} \cdot \delta_{b,c} + \delta_{b,d} C_c^+ C_a + \delta_{a,c} C_d^+ C_b +$
$+ C_c^+ C_b \delta_{a,d} + \delta_{c,b} C_d^+ C_a$

d) $C_a C_b^+ C_c C_d^+ = (C_b^+ C_a + \delta_{a,b})(C_d^+ C_c + \delta_{c,d}) = C_b^+ C_a C_d^+ C_c + \delta_{c,d} C_b^+ C_a +$

$+ \delta_{a,b} C_d^+ C_c + \delta_{a,b} \cdot \delta_{c,d} = C_b^+ C_c \delta_{a,d} + \delta_{c,d} C_b^+ C_a + \delta_{a,b} C_d^+ C_c + \delta_{a,b} \delta_{c,d}$

e) $C_a C_b^+ C_c^+ C_d = (C_b^+ C_a + \delta_{a,b}) C_c^+ C_d = \delta_{a,b} C_c^+ C_d + C_b^+ C_a C_c^+ C_d =$

$\delta_{a,b} C_c^+ C_d + C_b^+ C_d \delta_{a,c}$

L I T E R A T U R A

/1/ G. Stenli: Fazovie perehodi i kritičeskie javljenija (prevod sa engleskog), Izdateljstvo "Mir", Moskva 1971.

/2/ Milan Dačić: Diplomski rad, PMF Novi Sad 1978.

/3/ Sava Milošević: Osnovi fenomenološke termodinamike, Univerzitet u Beogradu, Beograd 1979.

/4/ Dr Bratislav S. Tošić: Statistička fizika, Institut za fiziku, Novi Sad 1978.

/5/ T.Holstein, H.Primakoff: Phys.Rev.B 58, 1098 (1940)

/6/ F.Dyson: Phys.Rev. 102, 1217 (1956)

/7/ S.B.Maleev: ŽETF 33, 1010 (1953)

/8/ V.M.Agranovič,B.S.Tošić: ŽETF 53, 149(1967)

/9/ D.Kapor,A.Ivić: phys.stat.sol.(b) 90, K157 (1978)

/10/J.Katriel: phys.stat.sol.(b) 93, K177 (1979)

/11/T.Aoki,Sh.Homma and H.Nakano: Progress of Theoretical Physics 64, No 2; 448 (1980).