PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

NOVI SAD

D I P L O M S K I   R A D

T E M A: UTICAJ NELINEARNIH EFEKATA NA DAVIDOVSKO CEPANJE EKSITONSKIH ZONA

RADJEN IZ PREDMETA: KVANTNA MEHANIKA KOD PROFESORA

TOŠIĆ DR BRATISLAVA

NOVI SAD, 1 septembar 1972

STUDENT

K A P O R   D A R K O

Najlepše zahvaljujem predmetnom nastavniku dr BRATISLAVU TOŠIĆU koji mi je predložio ovu temu i rukovodio njenom izradom, na svestranoj podršci i brojnim korisnim savetima koji su omogućili da se ovaj rad realizuje, kao i dr SLOBODANU CARIĆU koji je ukazivanjem na dopunsku literaturu pomogao da ovaj rad dobije na širini.

S A D R Ž A J

U V O D

Pojava davidovskog cepanja eksitonskih zona uočena je dosta rano u istraživanju molekulskih kristala. J. I. Frenkelj (Я.И.Френкель) koji je sa Pajerlsom (Peierls R. E.) i Vanijeom (Wannier G. H.) utemeljitelj teorije eksitona, se u svojim radovima objavljenim 1931-1936 (Phys. Rev., Sow. Phys.) bavio kristalima sa jednim molekulom u elementarnoj ćeliji. A. S. Davidov (А.С. Давыдов) u svome delu "Теория поглощения света в молекулярных кристаллах" (1951) teoriski ispituje kristale sa više molekula u elementarnoj ćeliji i tako konstatuje cepanje eksitonskih zona koje po njemu dobija ime. U to vreme već postoje eksperimentalni podaci o ovoj pojavi. Nešto ranije (1949), N. N. Bogoljubov (Н.Н. Боголюбов) razvija teoriju približne druge kvantizacije koju je započeo Bloh (F. Bloch). Bogoljubov nju iznosi u delu "Лекции по квантовой статистике" . V. M. Agranovič (В.М.Агранович) koristeći se ovim metodom i poboljšanjima koja je dao S. V. Tjablikov (С.В.Тябликов), uspeva da dobije bolju kvantitativnu sliku o ovoj pojavi nego Davidov koji je koristio aproksimaciju Hajtler-Londona. Osnovu metoda približne druge kvantizacije čini aproksimativni prelaz sa Pauli-operatora na Boze-operatore. Javljaju se i drugi pokušaji aproksimativnih prelaza (Dajson, Holštajn-Primakov). Poslednjih godina V. M. Agranovič i B. S. Tošić razvijaju tačnu reprezentaciju Pauli-operatora preko Boze-operatora (Коллективные свойства френкелевсих экситонов ЖЕТФ 1964). Samim tim dobija se mogućnost tačnijeg teoriskog tretmana osobina eksitona dakle i davidovskog cepanja.

Ovaj rad sledi gore navedenu istorisku liniju razvoja teorije. Problem davidovskog cepanja eksitonskih zona kod kristala sa dva molekula u elementarnoj ćeliji biće obradjen u aproksimaciji Hajtler-Londona, a zatim metodom približne drugekvantizacije pri čemu će biti izveden jedan opšti rezultat koji može da posluži i kao osnova za dalje radove. Posle toga će biti izvršen niz aproksimacija u cilju matematičkog pojednostavljenja. Konačno će problem biti rešen primenom tačne reprezentacije Pauli-operatora preko Boze-operatora (u prvoj aproksimaciji), koja omogućava uračunavanje nelinearnih efekata. Cilj ovakvog postupka je da se omogući poredjenje rezultata dobijenih ovim novim metodom i dosad najčešće korišćenim metodima. Dobijeni rezultati su pokazali svrsishodnost ovakvog postupka.

I OSNOVNI POJMOVI TEORIJE EKSITONA

Kristal kao periodično uredjena sredina sa veoma velikim brojem čestica koje medjusobno interaguju, postavio je pred fizičare nove probleme. Pitanje kretanja odredjene čestice (elektrona) u kristalu rešeno je uz brojne aproksimacije, koje daju prilično grubu sliku. Još su teži problemi apsorpcije i emisije energije a pogotovu "prenošenja" energije kroz kristal, jer u ovim procesima osnovnu ulogu ne igra ponašanje pojedine čestice već njihovo kolektivno dejstvo, koje se uopšte ne može tretirati sa aspekta ponašanja "individue". Zbog toga su fizičari pribegli drugačijem tretmanu. Obično se smatra da energiju prenose odredjene kvazičestice čije se kretanje kroz kristal tretira metodama razradjenim za realne čestice. U fizici čvrstog stanja postoji čitav niz ovakvih kvazičestica i svaka se može smatrati kao kvant odredjenog oblika energije koji se može javiti kod kristala u pobudjenom stanju.

Jedna od ovakvih tvorevina je i eksiton. Njegov nastanak možemo objasniti na sledeći način: neka se elektron nalazi u valentnoj zoni. Ako dobije odredjenu količinu energije on prelazi u provodnu zonu i tada u kristalu imamo jedan elektron koji može slobodno da se kreće u provodnoj zoni i jednu isto tako slobodnu šupljinu u valentnoj zoni. Elektron može da napusti valentnu zonu i ako ne dobije dovoljno energije, ali tada nije potpuno slobodan već ostaje vezan kulonovskim silama za šupljinu koja je nastala njegovim odlaskom. Sada se ovaj par elektron - šupljina kreće kroz kristal. Ovakva veza elektrona i šupljine naziva se eksiton. Vidimo da on može kroz kristal da prenosi energiju ali ne i naelektrisanje, jer je električno neutralan. Postojanje eksitona se detektuje po njihovom uticaju na apsorpcione spektre kristala, čiji je mehanizam iz prethodnog jasan. Eksitoni iščezavaju rekombinacijom elektrona i šupljine i njihov srednji život iznosi $\sim 10^{-3}$ sec.. Ovaj proces se dešava kada energija koju poseduje eksiton predje u neki drugi vid energije. Važno je napomenuti da navedeni srednji život odgovara singletnim eksitonima dok je život tripletnih eksitona čija je rekombinacija "zabranjena" reda veličine 10^{-4} sec. Da ne bi bilo nesporazuma ubuduće ćemo uvek smatrati da ne dolazi do promene spina elektrona.

Postavlja se pitanje u kojoj meri su vezani elektron i šupljina u kristalu ? U teoriji se danas razmatraju dva granična slučaja, dok se u praksi najčešće registruju prelazni slučajevi izmedju ova dva. Jedan granični slučaj su slabo vezani eksitoni ili eksitoni Vanije-Mota (Wannier i Mott). U ovom slučaju veza je toliko slaba da iako se elektron i šupljina kreću zajedno, njihovo medjusobno rastojanje je mnogo veće od perioda same rešetke. Njihovo se ponašanje matematički tretira isto kao i vodonikov atom s obzirom da je sila koja deluje izmedju njih kulonovskog porekla. Sve specifične osobine kristala se uvode preko tenzora dielektrične propustljivosti.Drugi granični slučaj su eksitoni frenkelovskog tipa, ili jako vezani eksitoni. Kod njih je veza tako jaka da su elektron i šupljina uvek lokalizovani na jednom molekulu. To ne znači da se takva kombinacija ne kreće već da se kreće tako da su elektron i šupljina na istom molekulu.

Naročito je značajna pojava jako vezanih eksitona kod molekulskih kristala. To su kristali inertnih gasova, kao i svi oni kod kojih je energija veze atoma u molekulu mnogo veća nego energija kojom su molekuli vezani u kristalu. U takvom kristalu se pojedine osobine mogu pripisati odredjenom molekulu kao da je on izolovan od drugih. Ako se jedan molekul pobudi (ekscitira) onda ta ekscitacija biva lokalizovana na njemu. S obzirom da su molekuli vezani u kristal i da deluju medjusobnim silama, ova ekscitacija se može prenositi sa molekula na molekul. Ovo lako možemo povezati sa predstavom o eksitonima. Zato eksitone u molekulskim kristalima možemo shvatiti kao kvante pobudjivanja (ekscitacije) molekula. Odatle im je i potekao naziv.

Kretanje ovakvog eksitona kroz kristal možemo po principima talasne mehanike shvatiti kao prostiranje ravnog talasa modulisanog periodičnošću kristala. Tada ga možemo okarakterisati talasnim vektorom $\vec{k}$. Ukoliko nema procesa rasejanja ili drugih procesa pri kojima bi se $\vec{k}$ menjao, on je "dobar" kvantni broj. Ako je potencijal interakcije koji se javlja u hamiltonijanu analitička funkcija od $\vec{k}$, onda je talasni vektor dobar kvantni broj a eksitoni za koje to važi nazivaju se mehanički eksitoni.U suprotnom slučaju $\vec{k}$ nije dobar kvantni broj a takvi eksitoni se nazivaju kulonovski eksitoni.Prelaz sa kulonovskih na mehaničke eksitone se vrši tako da se u potencijalu interakcije odbaci deo koji nije analitička funkcija od $\vec{k}$ (v. ref. 1). Ako je $\vec{k}$ dobar kvantni broj njime se može okarakterisati energija eksitona tj. energija pobudjivanja molekula. S obzirom da $\vec{k}$ uzima niz vrednosti mi dobijamo energisku zonu koja se naziva eksitonska zona i podrazumeva interval vrednosti energija eksitona koje odgovaraju dozvoljenim vrednostima $\vec{k}$.

Ovakvu slikudao je još tvorac teorije čvrsto vezanih eksitona Frenkelj. On je pri tome razmatrao kristale sa jednim molekulom u elementarnoj ćeliji. U složenijim slučajevim dolazi do rascepljenja zone.Pri tome su moguća dva slučaja. Ako je nivo na koji se molekul pobudjuje g puta degenerisan, onda se umesto jedne, dobija g eksitonskih zona. Ovakvo cepanje nivoa naziva se Beteovo cepanje. (v. ref. 1). Drugi mogući slučaj je postojanje više molekula sa nedegenerisanim nivoima u elementarnoj ćeliji. A. S. Davidov je pokazao (op. cit.) da ako u elementarnoj ćeliji ima σ molekula, svaka zona se cepa na σ zona.To je davidovsko cepanje.Ovaj rezultat je dobijen u aproksimaciji Hajtler-Londona, ali je on opšti. U praksi se jasno javljaju kombinacije ove dve vrste cepanja, što veoma komplikuje ispitivanje eksitonskih zona kod ~~xxx~~ realnih kristala. Vredi napomenuti da ove pojave nisu čisto kvantne prirode jer se analogijom sa oscilatorima dobijaju slični efekti.

U ovom radu biće obradjeno davidovsko cepanje eksitonskih zona kod kristala koji u elementarnoj ćeliji imaju dva molekula sa nedegenerisanim nivoima. Razmatraće se samo jako vezani- frenkelovski eksitoni.

II DAVIDOVSKO CEPANJE EKSITONSKIH ZONA U APROKSIMACIJI HAJTLER - LONDONA

U ovoj glavi ćemo koristiti dobro poznate metode teorije perturbacija. Suštinska aproksimacija se čini pri izboru talasne funkcije kristala. U aproksimaciji Hajtler-Londona smatramo da je u kristalu samo jedan molekul pobudjen. Od interakcije medju molekulima posmatramo samo deo koji utiče na prenos pobudjenja sa jednog molekula na drugi.

Uvešćemo pretpostavku da svi molekuli miruju u svojim čvorovima.(Time smo fonone "isključili" iz računa.) Tada se jedan čvor u potpunosti karakteriše vektorom $\vec{n}=n_1\vec{a}_1+n_2\vec{a}_2+n_3\vec{a}_3$ gde su n_1, n_2 i n_3 celi brojevi, a $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ i $\vec{a}_3$ ortovi osa kristala.Ukoliko ima više molekula u elementarnoj ćeliji, svaki molekul se karakteriše vektorom $\vec{n}+\vec{\varrho}_\alpha$ pri čemu je $\vec{\varrho}_\alpha$ vektor položaja molekula α u odnosu na čvor $\vec{n}$ .Simbolički se tada molekul obeležava sa $\vec{n}\alpha$.

Hamiltonijan kristala u ovim oznakama je

$$\hat{H}=\sum_{\vec{n}\alpha}\hat{H}_{\vec{n}\alpha}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\alpha\,\vec{m}\beta}{}'\hat{V}_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}$$

Prvi član $\hat{H}_{\vec{n}\alpha}$ opisuje energiju izolovanog molekula $\vec{n}\alpha$. Drugi član opisuje interakciju dva molekula.(Ograničili smo se na dvočestične interakcije.) Crtica pri vrhu sume označava da ne postoji član sa $\vec{n}\alpha=\vec{m}\beta$. S obzirom da su molekuli neutralni, ovaj operator je u prvoj aproksimaciji predstavljen dipol-dipolnom interakcijom:

$$\hat{V}_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}=\frac{(\hat{\vec{P}}_{\vec{n}\alpha}\hat{\vec{P}}_{\vec{m}\beta})|\vec{r}_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}|^2-3(\hat{\vec{P}}_{\vec{n}\alpha}\vec{r}_{\vec{m}\beta})(\hat{\vec{P}}_{\vec{m}\beta}\vec{r}_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta})}{|\vec{r}_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}|^5}$$

gde je $\vec{r}_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}$ vektor koji povezuje molekule $\vec{n}\alpha$ i $\vec{m}\beta$, a $\hat{\vec{P}}_{\vec{n}\alpha}$ operator dipolnog momenta molekula $\vec{n}\alpha$ .Ceo ovaj operator je po svojoj strukturi multiplikativan i stoga je $V_{\vec{n}\alpha}=V_{\vec{m}\beta}$ .Zato se ispred drugog člana nalazi $1/2$. Ovaj hamiltonijan nije karakterističan samo za aproksimaciju Hajtler-Londona, već je on opštiji i uzima se kao polazna tačka većeg broja razmatranja u fizici čvrstog stanja. Napomenimo samo, da je ovde uzeta samo trenutna interakcija medju dipolima dok postoji tačnija teorija sa retardovanim potencijalima. Isto tako može se razviti teorija sa interakcijom multipola višeg reda. Mi ćemo se zadržati na datoj aproksimaciji.

Saglasno teoriji perturbacija pretpostavljamo da smo u stanju da rešimo svojstveni problem hamiltonijana izolovanog molekula kako u osnovnom tako i u pobudjenom stanju: $\hat{H}_{n\alpha}\varphi_{n\alpha}^{\ell} = \varepsilon^{\ell}\varphi_{n\alpha}^{\ell}$ *. Ovde ℓ obeležava nivo ekscitacije. Očigledno, osnovnom stanju molekula odgovaraju talasna funkcija $\varphi_{n\alpha}^{0}$ i energija ε^{0}. (Energija nema oznaku čvora jer su svi molekuli isti.) Dalje pretpostavljamo da su ove talasne funkcije ortonormirane. Isto tako smatramo da se u osnovnom i nižim pobudjenim stanjima efekti izmene mogu zanemariti.

Posle svih ovih pretpostavki vidimo da se talasna funkcija kristala u osnovnom stanju može napisati kao $\Psi_0 = \prod_{n\alpha}\varphi_{n\alpha}^{0}$. Energija osnovnog stanja kristala je $E^0 = (\Psi_0, \hat{H}\Psi_0) = N\sigma\varepsilon^0 + \frac{1}{2}\sum_{n\alpha m\beta}' V_{n\alpha m\beta}(0000)$. $N\sigma$ je ukupan broj molekula u kristalu (N je broj elementarnih ćelija, a σ broj molekula po elementarnoj ćeliji). U drugom članu koristimo oznaku $V_{n\alpha m\beta}(\ell_1,\ell_2,\ell_1',\ell_2') = \int \varphi_{n\alpha}^{\ell_1 *}\varphi_{m\beta}^{\ell_2 *}\hat{V}_{n\alpha m\beta}\varphi_{m\beta}^{\ell_2'}\varphi_{n\alpha}^{\ell_1'}d\tau$ pri čemu se integracija vrši po unutrašnjim promenljivim molekula. Vidimo da je to ustvari matrični elemenat interakcije u bazisu koji čine talasne funkcije izolovanih molekula.

Ako se zanemari prekrivanje talasnih funkcija molekula, onda se talasna funkcija kristala sa jednim pobudjenim molekulom na mestu $n\alpha$ može napisati kao $\chi_{n\alpha}^{\ell} = \varphi_{n\alpha}^{\ell}\prod_{m\beta\neq n\alpha}\varphi_{m\beta}^{0}$. Ovo stanje je $N\sigma$ puta degenerisano jer energija sistema ne zavisi od toga koji će molekul biti pobudjen. Energija koja odgovara toj funkciji je $(N\sigma-1)\varepsilon^0+\varepsilon^{\ell}$. Dalji postupak je ustvari primena teorije perturbacija degenerisanog nivoa. Može se dati i sledeće fizičko tumačenje: pobudjenje je u kristalu raspodeljeno po svim molekulima i stoga se talasna funkcija mora tražiti kao linearna kombinacija svih talasnih funkcija a koeficienti se biraju tako da poseduju translacionu simetriju:

$$\Psi(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n\alpha} u_{\alpha}^{\ell} e^{i\vec{k}\vec{r}_{n\alpha}}\chi_{n\alpha}^{\ell}$$

Ovde je $\vec{k}$ talasni vektor. Pretpostavićemo da talasna funkcija zadovoljava tzv. ciklične uslove tako da za talasni vektor važi :

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^{3}\frac{2\pi}{N_i}\nu_i\vec{b}_i \qquad -\frac{N}{2}+1 \leq \nu_i \leq \frac{N}{2} \qquad i=1,2,3$$

a $\vec{b}_i$ su ortovi recipročne rešetke.

Potražimo uslov normiranja $\int \Psi_k^* \Psi_k d\tau = 1$

pri čemu se integracija vrši po unutrašnjim promenljivim molekula.

---

* Ovde i nadalje pretpostavljamo da nivoi nisu degenerisani.

$$\int \Psi_k^* \Psi_k \, d\tau = \int \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}'\alpha'} u_{\alpha'}^{f'*} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}'\alpha'}} \chi_{\vec{n}'\alpha'}^{f'*} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}\alpha} u_\alpha^f e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}} \chi_{\vec{n}\alpha}^f = \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}'\alpha'\vec{n}\alpha} u_{\alpha'}^{f'*} u_\alpha^f e^{i\vec{k}(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{n}'\alpha'})} \int \chi_{\vec{n}'\alpha'}^{*f'} \chi_{\vec{n}\alpha} \, d\tau =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}'\alpha'\vec{n}\alpha} u_{\alpha'}^{f'*} u_\alpha^f e^{i\vec{k}(\vec{r}_{\vec{n}\alpha}-\vec{r}_{\vec{n}'\alpha'})} \delta_{\vec{n},\vec{n}'} \delta_{\alpha,\alpha'} \delta_{f,f'} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}\alpha} u_\alpha^{*f} u_\alpha^f = \frac{1}{N} N \sum_\alpha |u_\alpha^f|^2 \qquad \boxed{\sum_\alpha |u_\alpha|^2 = 1}$$

Sada rešavamo svojstveni problem $\Delta\hat{H}\Psi = E\Psi$ $\quad \Delta\hat{H} = \hat{H} - E^0$

Celu jednačinu $\Delta\hat{H} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta^f e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \chi_{\vec{m}\beta}^f = E \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta^f e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \chi_{\vec{m}\beta}^f$

množimo sa $\chi_{\vec{n}\alpha}^{f*}$ i integralimo po unutrašnjim promenljivim molekula.

$$E\Psi = E \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \chi_{\vec{m}\beta}^f \Big/ \int \chi_{\vec{n}\alpha}^{f*} \Rightarrow E \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \underbrace{\int \chi_{\vec{m}\beta}^f \chi_{\vec{n}\alpha}^{f*} d\tau}_{\delta_{\vec{n}\vec{m}} \delta_{\alpha\beta}} = E \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}}$$

Sada posmatramo delovanje operatora $\sum_{\vec{n}\alpha} \hat{H}_{\vec{n}\alpha}$:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \sum_{\vec{n}'\alpha'} \hat{H}_{\vec{n}'\alpha'} \chi_{\vec{m}\beta}^f \Big/ \int \chi_{\vec{n}\alpha}^{*f} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \int \varphi_{\vec{n}\alpha}^{*f} \varphi_{11}^{*0} \varphi_{12}^{*0} \ldots (\hat{H}_{11} + \hat{H}_{12} + \ldots + \hat{H}_{\vec{n}\alpha} + \ldots) \varphi_{\vec{m}\beta}^f \varphi_{11}^0 \varphi_{12}^0 \ldots d\tau$$

Vodeći računa da je $\varphi_{\vec{n}\alpha}^f$ potpuno određena vrednost, dobijamo:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \delta_{\vec{m},\vec{n}} \delta_{\alpha,\beta} \int \varphi_{\vec{n}\alpha}^{*f} \varphi_{11}^{*0} \ldots\ldots (\hat{H}_{11} + \hat{H}_{12} + \ldots \hat{H}_{\vec{n}\alpha} + \ldots) \varphi_{\vec{n}\alpha}^f \varphi_{11}^0 \varphi_{12}^0 \ldots d\tau = \frac{1}{\sqrt{N}} u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}} [\varepsilon^f + (N\sigma - 1)\varepsilon^0]$$

Dejstvo $E^{0'} = N\sigma\varepsilon^0$ $\quad \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} N\sigma\varepsilon_0 \int \chi_{\vec{m}\beta}^f \chi_{\vec{n}\alpha}^{*f} d\tau = \frac{1}{\sqrt{N}} u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}} N\sigma\varepsilon_0$

Znači $(\hat{H}' - E^{0'})\Psi \big/ \chi_{\vec{n}\alpha}^{*} = \frac{1}{\sqrt{N}} u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}} [\varepsilon^f + (N\sigma - 1)\varepsilon^0 - N\sigma\varepsilon^0] = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}} u_\alpha (\varepsilon^f - \varepsilon^0)$

Ispitajmo dejstvo operatora interakcije:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}''\alpha''\vec{m}''\beta''} \hat{V}_{\vec{n}''\alpha''\vec{m}''\beta''} \varphi_{\vec{m}\beta}^f \varphi_{11}^0 \varphi_{12}^0 \ldots \Big/ \cdot \int \chi_{\vec{n}\alpha}^{*f} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \frac{1}{2} \int \varphi_{\vec{n}\alpha}^{*f} \varphi_{11}^{*0} \ldots \sum_{\vec{n}''\alpha''\vec{m}''\beta''} V_{\vec{n}''\alpha''\vec{m}''\beta''} \varphi_{\vec{m}\beta}^f \varphi_{11}^0 \ldots d\tau$$

$\chi_{\vec{n}\alpha}^f$ tj. $\varphi_{\vec{n}\alpha}^f$ je fiksirana funkcija, stoga dolazi u obzir samo $\vec{n}''\alpha'' = \vec{n}\alpha$. Tako smo „skinuli" jednu sumu. Sada dolaze u obzir 2 slučaja. Možemo smatrati da je i $\varphi_{\vec{m}\beta}^f$ fiksirana funkcija (različita od $\varphi_{\vec{n}\alpha}^f$), tada otpada i suma po $\vec{m}''\beta''$, a funkcije osnovnog stanja dobijaju odgovarajuće indekse. Kao rezultat imamo:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{2} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \int \varphi_{\vec{n}\alpha}^{*f} \varphi_{\vec{m}\beta}^{*0} \hat{V}_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta} \varphi_{\vec{m}\beta}^f \varphi_{\vec{n}\alpha}^0 d\tau = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{2} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f00f)$$

Isti ovakav matrični elemenat daće i $\hat{V}_{\vec{m}\beta\vec{n}\alpha}$, tako da gubimo i faktor $1/2$.

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f00f)$$

Drugi mogući slučaj je ako $\vec{m}\beta$ uzme baš vrednost $\vec{n}\alpha$. To pišemo na sledeći način:

$$\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}}\delta_{\alpha,\beta}\delta_{\vec{m},\vec{n}}\sum_{\vec{m}''\beta''}\int \overset{*}{\varphi}{}^{f}_{\vec{n}\alpha}\overset{*}{\varphi}{}^{0}_{\vec{m}}\ldots V_{\vec{n}\alpha\vec{m}''\beta''}\varphi^{f}_{\vec{n}\alpha}\varphi^{0}_{\vec{m}}\ldots d\tau = \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{N}}u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}}\sum_{\vec{m}''\beta''}\int \overset{*}{\varphi}{}^{f}_{\vec{n}\alpha}\overset{*}{\varphi}{}^{0}_{\vec{m}} V_{\vec{n}\alpha\vec{m}''\beta''}\varphi^{f}_{\vec{n}\alpha}\varphi^{0}_{\vec{m}''\beta''}d\tau$$

Menjamo oznaku $\vec{m}''\beta'' \to \vec{m}\beta$. Faktor $1/2$ se krati kao u prethodnom slučaju i konačno dobijamo:

$\frac{1}{\sqrt{N}}u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}}\sum_{\vec{m}\beta} V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f0f0)$ Na kraju treba oduzeti član koji se dobije množenjem sa

$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta} V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(0000)$ koji pišemo kao $-\frac{1}{2}\sum_{\vec{m}\beta\vec{m}'\beta'} V_{\vec{m}\beta\vec{m}'\beta'}(0000) \Rightarrow -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}} \chi^{f}_{\vec{m}\beta}\,\frac{1}{2}\sum'_{\vec{m}\beta\vec{m}'\beta'} V_{\vec{m}\beta\vec{m}'\beta'}(0000)$

Koristimo zajedničku sumu po $\vec{m}\beta$, i faktor $1/2$ nam više nije potreban.

$$-\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}}\chi^{f}_{\vec{m}\beta}\sum_{\vec{m}'\beta'} V_{\vec{m}\beta\vec{m}'\beta'}(0000)\Big/\int \overset{*}{\chi}{}^{f}_{\vec{n}\alpha} \Rightarrow -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{m}\beta} u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}}\cdot\sum_{\vec{m}'\beta'} V_{\vec{m}\beta\vec{m}'\beta'}(0000)\underbrace{\int \chi^{f}_{\vec{m}\beta}\overset{*}{\chi}{}^{f}_{\vec{n}\alpha}\,d\tau}_{\delta_{\vec{m},\vec{n}}\delta_{\alpha,\beta}} =$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{N}}u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}}\sum_{\vec{m}\beta} V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(0000)$$

Konačan rezultat je jednačina:

$$\frac{1}{\sqrt{N}}u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}}(\mathcal{E}^{f}-\mathcal{E}_0)+\frac{1}{\sqrt{N}}u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}}\sum_{\vec{m}\beta}\left[V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f0f0)-V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(0000)\right]+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{m}\beta}u_\beta e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{m}\beta}}V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f00f)=\frac{1}{\sqrt{N}}E u_\alpha e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}} \Big/ : \frac{1}{\sqrt{N}}e^{i\vec{k}\vec{r}_{\vec{n}\alpha}}$$

$$u_\alpha\cdot\left\{\mathcal{E}^{f}-\mathcal{E}_0+\sum_{\vec{m}\beta}\left[V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f0f0)-V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(0000)\right]\right\}+\sum_{\vec{m}\beta}u_\beta e^{i\vec{k}(\vec{r}_{\vec{m}\beta}-\vec{r}_{\vec{n}\alpha})}V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f00f)=E u_\alpha$$

Veličina $\mathcal{D}^{f}_{\alpha}=\sum_{\vec{m}\beta}\left[V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f0f0)-V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(0000)\right]$ pokazuje kolika je razlika u interakciji molekula kada su oba u osnovnom stanju i kada je jedan od njih pobuđen.

Matrični elemenat $V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f00f)$ odgovara prenosu pobuđenja sa molekula $\vec{n}\alpha$ na molekul $\vec{m}\beta$. Njegov Furije-transform obeležimo sa: $L_{\alpha\beta}(\vec{k})=\sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}\alpha\vec{m}\beta}(f00f)e^{i\vec{k}(\vec{r}_{\vec{m}\beta}-\vec{r}_{\vec{n}\alpha})}$.

Jednačinu pišemo kompaktnije $\sum_{\beta=1}^{\sigma}u_\beta\left[L_{\alpha\beta}(\vec{k})+\delta_{\alpha\beta}(\mathcal{D}^{f}_{\alpha}+\mathcal{E}^{f}-\mathcal{E}_0)\right]=E u_\alpha$

Ovo je ustvari sistem od σ homogenih linearnih jednačina po nepoznatim u_α. Da bi on imao netrivijalna rešenja, mora njegova determinanta biti jednaka nuli. Kako je odgovarajuća matrica ermitska, dobićemo σ realnih rešenja za energiju (7). Ovime smo strogo dokazali davidovsko cepanje.

Mi razmatramo slučaj 2 molekula u elementarnoj ćeliji $\sigma=2$.

$$u_1\left[L_{11}(\vec{k})+\mathcal{D}^{f}_{1}+\mathcal{E}^{f}-\mathcal{E}^{0}\right]+u_2L_{12}(\vec{k})-Eu_1=0 \qquad \mathcal{E}^{f}-\mathcal{E}^{0}+\mathcal{D}^{f}_{\alpha}=\Delta_\alpha$$

$$u_1L_{21}(\vec{k})+u_2\left[L_{22}(\vec{k})+\mathcal{D}^{f}_{2}+\mathcal{E}^{f}-\mathcal{E}^{0}\right]-Eu_2=0$$

$$\begin{vmatrix} L_{11}(\vec{k})+\Delta_1-E & L_{12}(\vec{k}) \\ L_{21}(\vec{k}) & L_{22}(\vec{k})+\Delta_2-E \end{vmatrix}=0$$

Zbog prisustva $\varepsilon^{f}-\varepsilon^{o}$, $\Delta >> L$, što će kasnije biti veoma značajno.

$$(L_{11}+\Delta_1-E)(L_{22}+\Delta_2-E)-L_{12}L_{21}=0 \qquad E^2-E(L_{11}+L_{22}+\Delta_1+\Delta_2)+(L_{11}+\Delta_1)(L_{22}+\Delta_2)-L_{12}L_{21}=0$$

$$E_{1,2}=\frac{L_{11}+L_{22}+\Delta_1+\Delta_2}{2}\pm\sqrt{\left(\frac{L_{11}+\Delta_1+L_{22}+\Delta_2}{2}\right)^2-\frac{4(L_{11}+\Delta_1)(L_{22}+\Delta_2)+4L_{12}L_{21}}{4}}$$

$$E_{1,2}=\frac{L_{11}+L_{22}+\Delta_1+\Delta_2}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{[(L_{11}+\Delta_1)^2-(L_{22}+\Delta_2)]^2+4L_{12}L_{21}}$$

Prema tome veličina davidovskog cepanja je $\sqrt{[(L_{11}+\Delta_1)^2-(L_{22}+\Delta_2)]^2+4L_{12}L_{21}}$

Uvodimo aproksimaciju koja ovde nije neophodna ali će u kasnijim računima morati da se uvede pa je uvodimo i ovde zbog poređenja. Tako pretpostavljamo da je $\Delta_1=\Delta_2$, $L_{12}(\vec{k})=L_{21}(\vec{k})=B(\vec{k})$ i $L_{11}(\vec{k})=L_{22}(\vec{k})=A(\vec{k})$. Tada dobijamo

$$E_{1,2\atop x_A}=\frac{2A(\vec{k})+2\Delta}{2}\pm\sqrt{[(A+\Delta)-(A+\Delta)]^2+B^2}=\Delta+A(\vec{k})\pm B(\vec{k})$$

III PRIMENA METODA PRIBLIŽNE DRUGE KVANTIZACIJE NA DAVIDOVSKO CEPANJE EKSITONSKIH ZONA

IIIA. Prelazak na reprezentaciju druge kvantizacije

Metod približne druge kvantizacije će nam omogućiti potpuniji tretman eksitonskih zona. Tako ćemo sada moći da posmatramo slučaj više istovremeno pobudjenih molekula što nismo mogli u aproksimaciji Hajtler-Londona. Biće uzeti u obzir i drugi oblici interakcije medju molekulima (novi matrični elementi interakcije). U ovom metodu je u potpunosti iskorišćen formalizam statističkih operatora. Uvode se kreacioni i anihilacioni operatori koji stvaraju (kreiraju) i uništavaju (anihiliraju) odredjenu česticu ili kvazičesticu u odredjenom stanju i na odredjenom čvoru rešetke. Ovi operatori deluju na funkcije okupacionog broja, koji pokazuje koliko se čestica nalazi u odredjenom stanju (tačnije, na odredjenom energetskom nivou). Moguće je ove operatore izabrati na različite načine, ali se oni obično uvode tako da operator broja čestica u odredjenom stanju bude dijagonalan, tj. da talasne funkcije u reprezentaciji druge kvantizacije budu njegove svojstvene funkcije. (v. ref. 5). Koji će operatori biti primenjeni zavisi od prirode problema. Mi ćemo poći od Fermi operatora koji se karakterišu sledećim komutacionim (tačnije antikomutacionim) relacijama :

$$\{a_s, a_l^+\} = \delta_{s,l} \qquad \{a_s, a_l\} = \{a_s^+, a_l^+\} = 0 \qquad \{\ \} \text{ : antikomutator}$$

Posmatramo ponovo hamiltonijan sistema sa dvočestičnim interakcijama koji se odnosi na molekulski kristal $\hat{H} = \sum_{n\alpha} \hat{H}_{n\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{n\alpha m\beta} V_{n\alpha m\beta}$ i posmatramo potpun skup sopsvenih funkcija $\varphi_n^l(\xi)$ koje odgovaraju hamiltonijanu slobodnih molekula. Pravimo razvoj analogan razvoju funkcije po ovom skupu, ali za koeficiente uzimamo Fermi-operatore i tako dobijamo operatorske funkcije

$$\hat{\Psi}(\ldots \xi_n \ldots) = \sum_{nl} a_n^l \varphi_n^l \qquad \hat{\Psi}^+(\ldots \xi_n \ldots) = \sum_{nl} a_n^{l+} \varphi_n^l$$

Sada pomoću ovih "funkcija" koje su ustvari operatori, vršimo formalan prelaz na veličine u reprezentaciji druge kvantizacije, tako što svaku veličinu množimo sleva sa Ψ^+ zdesna sa Ψ i potom integralimo po unutrašnjim promenljivim molekula. Nadjimo prvo operator broja čestica. $\hat{N} = \int \Psi^+(\ldots \xi_n \ldots) \Psi(\ldots \xi_n \ldots) d\xi = \sum_{nl} a_n^{l+} a_n^l \qquad N_n^l = a_n^{l+} a_n^l$

$$\sum_{\vec n} \hat H_{\vec n} \longrightarrow \hat H_0 = \int \hat\Psi^+(\ldots \xi_n \ldots) \sum_{\vec n} H_{\vec n}(\xi_n) \hat\Psi(\ldots \xi_n \ldots) d\xi$$ $d\xi$ = skup unutrašnjih promenljivih

$$\hat H_0 = \sum_{\ell} \int (a_1^{\ell +} \overset{*}{\varphi}{}_1^{\ell} + a_2^{\ell +} \overset{*}{\varphi}{}_2^{\ell} + \ldots a_n^{\ell +} \overset{*}{\varphi}{}_n^{\ell} + \ldots)[\hat H_1(\xi_1) + \hat H_2(\xi_2) + \ldots \hat H_n(\xi_n) + \ldots](a_1^{\ell}\varphi_1^{\ell} + a_2^{\ell}\varphi_2^{\ell} + \ldots + a_n^{\ell}\varphi_n^{\ell} + \ldots) d\xi$$

$$\hat H_0 = \sum_{\vec n \ell} a_{\vec n}^{\ell +} a_{\vec n}^{\ell} E_{\ell}$$

Bilo koji operator predstavljen sumom operatora koji deluje na unutrašnje promenljive samo jednog molekula izražava se kao:

$$\sum_{\vec n} \hat V_{\vec n}(\xi_n) \to \hat V = \int \hat\Psi^+(\ldots \xi_n \ldots) \sum_{\vec n} \hat V_{\vec n}(\xi_n) \hat\Psi(\ldots \xi_n \ldots) d\xi = \sum_{\vec n \ell g} a_{\vec n}^{g +} a_{\vec n}^{\ell} V(g,\ell) \qquad V(g,\ell) = \int \overset{*}{\varphi}{}_n^{g} \hat V_n(\xi_n) \varphi_n^{\ell} d\xi_n$$

Nas više zanima operator $\underbrace{\text{koji}}_{\text{je suma operatora koji}}$ deluje na unutrašnje promenljive 2 molekula:

$$\sum_{\vec n \vec m}{}' \hat V_{\vec n \vec m} \to \hat V_{\vec n \vec m} = \int \hat\Psi^+(\ldots \xi \ldots) \hat\Psi^+(\ldots \xi' \ldots) \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n \vec m} \hat\Psi(\ldots \xi' \ldots) \hat\Psi(\ldots \xi \ldots) d\xi' d\xi$$

$$\hat V_{\vec n \vec m} = \int \sum_{\vec n' \ell'} a_{\vec n'}^{\ell' +} \overset{*}{\varphi}{}_{\vec n'}^{\ell'}(\xi_{n'}) \sum_{\vec m' g'} a_{\vec m'}^{g' +} \overset{*}{\varphi}{}_{\vec m'}^{g'}(\xi'_{m'}) \sum_{\vec n \vec m}{}' \hat V_{\vec n \vec m} \sum_{\vec m'' g} a_{\vec m''}^{g} \varphi_{\vec m''}^{g}(\xi'_{m''}) \sum_{\vec n'' \ell} a_{\vec n''}^{\ell} \varphi_{\vec n''}^{\ell}(\xi_{n''}) d\xi \, d\xi' =$$

$$= \sum_{\substack{\vec n' \vec n'' \vec n \\ \vec m' \vec m'' \vec m \\ \ell' g' \ell g}}{}' a_{\vec n'}^{\ell' +} a_{\vec m'}^{g' +} a_{\vec m''}^{g} a_{\vec n''}^{\ell} \int \overset{*}{\varphi}{}_{\vec n'}^{\ell'}(\xi_{n'}) \overset{*}{\varphi}{}_{\vec m'}^{g'}(\xi'_{m'}) V_{\vec n \vec m} \varphi_{\vec m''}^{g}(\xi'_{m''}) \varphi_{\vec n''}^{\ell}(\xi_{n''}) d\xi d\xi' =$$

$$= \sum_{\vec n \vec m \ell' g' \ell g}{}' a_{\vec n}^{\ell' +} a_{\vec m}^{g' +} a_{\vec m}^{g} a_{\vec n}^{\ell} V_{\vec n \vec m}(\ell' g' \ell g)$$

$$V_{\vec n \vec m}(\ell' g' \ell g) = \int \overset{*}{\varphi}{}_{\vec n}^{\ell'}(\xi_n) \overset{*}{\varphi}{}_{\vec m}^{g'}(\xi_{\vec m}) \hat V_{\vec n \vec m} \varphi_{\vec m}^{g}(\xi_{\vec m}) \varphi_{\vec n}^{\ell}(\xi_{\vec n}) d\xi_{\vec n} d\xi_{\vec m}$$

(Treba strogo voditi računa o poretku operatora jer se radi o Fermi-operatorima.)

Znači u reprezentaciji druge kvantizacije hamiltonijan izgleda:

$$\hat H = \sum_{\ell \vec n \alpha} E_{\alpha}^{\ell} a_{\vec n \alpha}^{\ell +} a_{\vec n \alpha}^{\ell} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec n \alpha, \vec m \beta \\ \ell' g' \ell g}}{}' a_{\vec n \alpha}^{\ell' +} a_{\vec m \beta}^{g' +} a_{\vec m \beta}^{g} a_{\vec n \alpha}^{\ell} V_{\vec n \alpha \vec m \beta}(\ell' g' \ell g)$$

Sada prelazimo na konkretan slučaj kada kristal u elementarnoj ćeliji ima 2 molekula kod kojih su aktuelni samo 2 energijska nivoa: osnovni i jedan viši. Ovaj viši nivo neka je različit za ta dva molekula. Znači: $\alpha, \beta = 1, 2$ a ℓ', g', ℓ i g mogu biti 0, ili $f_1 (f_2)$ zavisno uz koji indeks stoje.

$$\hat H = \hat H_1 + \frac{1}{2} \hat H_2 \qquad \hat H_1 = \sum_{\vec n \alpha \ell} E_{\alpha}^{\ell} a_{\vec n \alpha}^{\ell +} a_{\vec n \alpha}^{\ell}$$

$\vec n, \vec m$ - vektori čvorova rešetke

$\vec r_\alpha, \vec r_\beta$ - vektori molekula u elementarnoj ćeliji

$$\hat H_2 = \sum_{\substack{\vec n \alpha \vec m \beta \\ s \ell p k}}{}' V_{\vec n \alpha \vec m \beta}(s \ell p k) a_{\vec n \alpha}^{s +} a_{\vec m \beta}^{\ell +} a_{\vec m \beta}^{k} a_{\vec n \alpha}^{p} \qquad \alpha, \beta = 1, 2 \qquad s, \ell, p, k = \begin{cases} 0, f_1 & \text{uz } \alpha, \beta = 1 \\ 0, f_2 & \text{uz } \alpha, \beta = 2 \end{cases}$$

$$\hat H_1 = \sum_{\vec n \ell} \sum_{\alpha = 1}^{2} E_{\alpha}^{\ell} a_{\vec n \alpha}^{\ell +} a_{\vec n \alpha}^{\ell} = \sum_{\vec n \ell} [E_1^{\ell} a_{\vec n 1}^{\ell +} a_{\vec n 1}^{\ell} + E_2^{\ell} a_{\vec n 2}^{\ell +} a_{\vec n 2}^{\ell}] = \qquad \ell = \begin{cases} 0, f_1 & \text{uz } \alpha = 1 \\ 0, f_2 & \text{uz } \alpha = 2 \end{cases}$$

$$= \sum_{\vec n} [E_1^{0} a_{\vec n 1}^{0 +} a_{\vec n 1}^{0} + E_2^{0} a_{\vec n 2}^{0 +} a_{\vec n 2}^{0} + E_1^{f_1} a_{\vec n 1}^{f_1 +} a_{\vec n 1}^{f_1} + E_2^{f_2} a_{\vec n 2}^{f_2 +} a_{\vec n 2}^{f_2}] \qquad \vec n 1 \equiv \vec n' \quad \vec n 2 \equiv \vec n''$$

$$\hat{H}_1 = \varepsilon_1^{0} \sum_{\vec n} a^{0+}_{\vec n'} a^{0}_{\vec n'} + \varepsilon_2^{0} \sum_{\vec n} a^{0+}_{\vec n''} a^{0}_{\vec n''} + \varepsilon_1^{f_1} \sum_{\vec n} a^{f_1+}_{\vec n'} a^{f_1}_{\vec n'} + \varepsilon_2^{f_2} \sum_{\vec n} a^{f_2+}_{\vec n''} a^{f_2}_{\vec n''}$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{\substack{\vec n \vec m \\ s,l,p,k}} \sum_{\alpha,\beta=1}^{2}{}' V_{\vec n \alpha \vec m \beta}(slpk)\, a^{s+}_{\vec n \alpha} a^{l+}_{\vec m \beta} a^{k}_{\vec m \beta} a^{p}_{\vec n \alpha} = \sum_{\substack{\vec n \vec m \\ s,l,p,k}}{}' \Big[V_{\vec n 1 \vec m 1}(slpk)\, a^{s+}_{\vec n 1} a^{l+}_{\vec m 1} a^{k}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(slpk)\, a^{s+}_{\vec n 1} a^{l+}_{\vec m 2} a^{k}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 1}(slpk)\, a^{s+}_{\vec n 2} a^{l+}_{\vec m 1} a^{k}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 2 \vec m 2}(slpk)\, a^{s+}_{\vec n 2} a^{l+}_{\vec m 2} a^{k}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} \Big]$$

Sumiramo po $s = 0, f_1 (f_2)$

$$H_2 = \sum_{\substack{\vec n \vec m \\ l,p,k}}{}' \Big[V_{\vec n 1 \vec m 1}(0lpk)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{l+}_{\vec m 1} a^{k}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(0lpk)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{l+}_{\vec m 2} a^{k}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(0lpk)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{l+}_{\vec m 1} a^{k}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 2}(0lpk)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{l+}_{\vec m 2} a^{k}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 lpk)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{l+}_{\vec m 1} a^{k}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 lpk)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{l+}_{\vec m 2} a^{k}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 lpk)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{l+}_{\vec m 1} a^{k}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 2 \vec m 2}(f_2 lpk)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{l+}_{\vec m 2} a^{k}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} \Big]$$

Na isti **način** sumiramo i po l k i dobijamo:

$$H_2 = \sum_{\vec n \vec m p}{}' \Big[V_{\vec n 1 \vec m 1}(00p0)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 1} a^{0}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(00p0)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(00p0)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{0+}_{\vec m 1} a^{0}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 2}(00p0)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{0+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 0p0)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 1} a^{0}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 0p0)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 0p0)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{0+}_{\vec m 1} a^{0}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 2}(f_2 0p0)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{0+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 1 \vec m 1}(0 f_1 p0)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{f_1+}_{\vec m 1} a^{0}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(0 f_2 p0)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(0 f_1 p0)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{f_1+}_{\vec m 1} a^{0}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 2}(0 f_2 p0)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 f_1 p0)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_1+}_{\vec m 1} a^{0}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 f_2 p0)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 f_1 p0)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{f_1+}_{\vec m 1} a^{0}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 2}(f_2 f_2 p0)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 1 \vec m 1}(00pf_1)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 1} a^{f_1}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(00pf_2)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(00pf_1)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{0+}_{\vec m 1} a^{f_1}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2}$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 2}(00pf_2)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{0+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 0 p f_1)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 1} a^{f_1}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 0 p f_2)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 0 p f_1)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{0+}_{\vec m 1} a^{f_1}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 2}(f_2 0 p f_2)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{0+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 1 \vec m 1}(0 f_1 p f_1)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{f_1+}_{\vec m 1} a^{f_1}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(0 f_2 p f_2)\, a^{0+}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(0 f_1 p f_1)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{f_1+}_{\vec m 1} a^{f_1}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 2}(0 f_2 p f_2)\, a^{0+}_{\vec n 2} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} + V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 f_1 p f_1)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_1+}_{\vec m 1} a^{f_1}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 f_2 p f_2)\, a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 1} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 f_1 p f_1)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{f_1+}_{\vec m 1} a^{f_1}_{\vec m 1} a^{p}_{\vec n 2} +$$
$$+ V_{\vec n 2 \vec m 2}(f_2 f_2 p f_2)\, a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{p}_{\vec n 2} \Big]$$

Pre konačnog sumiranja razmotrimo sledeći korak. Preći ćemo na Pauli-operatore po obrascu $P^{l}_{\vec n} = a^{0+}_{\vec n} a$ Može se videti da će izrazi koji imaju neparan broj nula u indeksima davati članove prvog i trećeg reda po Pauli-operatorima. U daljem računu ćemo Pauli operatore zameniti Boze-operatorima. U prvoj aprosimaciji koja razmatra članove kvadratne po Boze-operatorima, ovi članovi neće dati nikakav doprinos. Pitanje je šta se dešava u višim aproksimacijama sa ovim članovima? Bogoljubov je pokazao (2) da se članovi prvog reda mogu eliminisati unitarnom transformacijom uz uslov da ovaj hamiltonijan daje minimalnu vrednost energije. Što se tiče članova trećeg reda u teoriji magnetizma je pokazano da su analogni članovi 2-3 reda veličine manji od ostalih, i to bi mogao biti razlog da ih zanemarimo. Ako pak posmatramo kristal sa centrom inverzije koji se poklapa sa centrom inverzije elementarne ćelije, ovi članovi automatski postaju nula. Mi ćemo koristiti ovu pretpostavku (1). Stoga možemo već sada u sumiranju odbaciti izraze koji imaju neparan broj nula u indeksima.

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_2 = \sum_{\bar n \bar m} \Big[& V_{\bar n_1 \bar m_1}(0000) a^{0+}_{\bar n_1} a^{0+}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar n_1} + V_{\bar n_1 \bar m_2}(0000) a^{0+}_{\bar n_1} a^{0+}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar n_1} + V_{\bar n_2 \bar m_1}(0000) a^{0+}_{\bar n_2} a^{0+}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar n_2} + V_{\bar n_2 \bar m_2}(0000) a^{0+}_{\bar n_2} a^{0+}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar n_2} + \\
& + V_{\bar n_1 \bar m_1}(f_1 f_1 00) a^{f_1+}_{\bar n_1} a^{f_1+}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar n_1} + V_{\bar n_1 \bar m_2}(f_1 f_2 00) a^{f_1+}_{\bar n_1} a^{f_2+}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar n_1} + V_{\bar n_2 \bar m_1}(f_2 f_1 00) a^{f_2+}_{\bar n_2} a^{f_1+}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar n_2} + V_{\bar n_2 \bar m_2}(f_2 f_2 00) a^{f_2+}_{\bar n_2} a^{f_2+}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar n_2} + \\
& + V_{\bar n_1 \bar m_1}(0 f_1 0 f_1) a^{0+}_{\bar n_1} a^{f_1+}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar n_1} + V_{\bar n_1 \bar m_2}(0 f_2 0 f_2) a^{0+}_{\bar n_1} a^{f_2+}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar n_1} + V_{\bar n_2 \bar m_1}(0 f_1 0 f_1) a^{0+}_{\bar n_2} a^{f_1+}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar n_2} + V_{\bar n_2 \bar m_2}(0 f_2 0 f_2) a^{0+}_{\bar n_2} a^{f_2+}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar n_2} + \\
& + V_{\bar n_1 \bar m_1}(f_1 0 0 f_1) a^{f_1+}_{\bar n_1} a^{0+}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar n_1} + V_{\bar n_1 \bar m_2}(f_1 0 0 f_2) a^{f_1+}_{\bar n_1} a^{0+}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar n_1} + V_{\bar n_2 \bar m_1}(f_2 0 0 f_1) a^{f_2+}_{\bar n_2} a^{0+}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar n_2} + V_{\bar n_2 \bar m_2}(f_2 0 0 f_2) a^{f_2+}_{\bar n_2} a^{0+}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar n_2} + \\
& + V_{\bar n_1 \bar m_1}(f_1 0 f_1 0) a^{f_1+}_{\bar n_1} a^{0+}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar n_1} + V_{\bar n_1 \bar m_2}(f_1 0 f_1 0) a^{f_1+}_{\bar n_1} a^{0+}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar m_2} a^{f_1}_{\bar n_1} + V_{\bar n_2 \bar m_1}(f_2 0 f_2 0) a^{f_2+}_{\bar n_2} a^{0+}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar m_1} a^{f_2}_{\bar n_2} + V_{\bar n_2 \bar m_2}(f_2 0 f_2 0) a^{f_2+}_{\bar n_2} a^{0+}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar n_2} + \\
& + V_{\bar n_1 \bar m_1}(0 f_1 f_1 0) a^{0+}_{\bar n_1} a^{f_1+}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar n_1} + V_{\bar n_1 \bar m_2}(0 f_2 f_1 0) a^{0+}_{\bar n_1} a^{f_2+}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar m_2} a^{f_1}_{\bar n_1} + V_{\bar n_2 \bar m_1}(0 f_1 f_2 0) a^{0+}_{\bar n_2} a^{f_1+}_{\bar m_1} a^{0}_{\bar m_1} a^{f_2}_{\bar n_2} + V_{\bar n_2 \bar m_2}(0 f_2 f_2 0) a^{0+}_{\bar n_2} a^{f_2+}_{\bar m_2} a^{0}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar n_2} + \\
& + V_{\bar n_1 \bar m_1}(0 0 f_1 f_1) a^{0+}_{\bar n_1} a^{0+}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar n_1} + V_{\bar n_1 \bar m_2}(0 0 f_1 f_2) a^{0+}_{\bar n_1} a^{0+}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar m_2} a^{f_1}_{\bar n_1} + V_{\bar n_2 \bar m_1}(0 0 f_2 f_1) a^{0+}_{\bar n_2} a^{0+}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar m_1} a^{f_2}_{\bar n_2} + V_{\bar n_2 \bar m_2}(0 0 f_2 f_2) a^{0+}_{\bar n_2} a^{0+}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar n_2} + \\
& + V_{\bar n_1 \bar m_1}(f_1 f_1 f_1 f_1) a^{f_1+}_{\bar n_1} a^{f_1+}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar n_1} + V_{\bar n_1 \bar m_2}(f_1 f_2 f_2 f_1) a^{f_1+}_{\bar n_1} a^{f_2+}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar m_2} a^{f_1}_{\bar n_1} + V_{\bar n_2 \bar m_1}(f_2 f_1 f_1 f_2) a^{f_2+}_{\bar n_2} a^{f_1+}_{\bar m_1} a^{f_1}_{\bar m_1} a^{f_2}_{\bar n_2} + V_{\bar n_2 \bar m_2}(f_2 f_2 f_2 f_2) a^{f_2+}_{\bar n_2} a^{f_2+}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar m_2} a^{f_2}_{\bar n_2} \Big]
\end{aligned}
$$

Ovako uveden hamiltonijan ima loše definisanu energiju osnovnog stanja, jer u nju ulaze samo energije iz hamiltonijana $\hat{H}_1$. Dobra strana ovog hamiltonijana je u tome što je izražen preko Fermi-operatora koji imaju dobro definisane komutacione relacije i statistiku. Ovi operatori direktno kreiraju i anihiliraju čestice (elektrone) u datom stanju. Nama je najvažnije da tačno odredimo energiju. Zbog toga prelazimo na nove operatore definisane preko dva Fermi-operatora: $P^{f}_{\bar n} = a^{0+}_{\bar n} a^{f}_{\bar n}$ $P^{f+}_{\bar n} = a^{f+}_{\bar n} a^{0}_{\bar n}$

Vidimo da ovi operatori samo prebacuju pobudjeni molekul u osnovno stanje i obrnuto, tj. oni ne kreiraju i anihiliraju elektrone u datom stanju, već kreiraju i anihiliraju ekscitaciju tipa f na molekulu $\bar n \alpha$. U opštem slučaju za ove operatore postoje veoma komplikovane komutacione relacije, za koje se može reći da su na neki način "prelazne" relacije izmedju Boze- i Fermi- komutacionih relacija (v. ref. 4). Ovi operatori su dobili naziv kvazi-Pauli operatori. U našem slučaju postojanje samo jednog pobudjenog nivoa umnogome pojednostavljuje postupak. Statistika za ove operatore nije razvijena. Kakvu nam onda korist donosi prelazak na nove operatore? Osnovna prednost je uključenje što većeg broja formi četvrtog reda po starim operatorima u forme drugog reda po novim. Ako se zadržimo samo na ovim formama drugog reda mi smo sistem interagujućih čestica zamenili sistemom neinteragujućih kvazičestica. Forme četvrtog reda koje vode poreklo iz hamiltonijana po Fermi-operatorima nazivaju se dinamički članovi, a kao posledica novih komutacionih relacija javiće se novi članovi četvrtog reda koji se nazivaju kinematički članovi.

Pre nego što pređemo na komutacione relacije ovih operatora, utvrdimo $N^l_n + N^0_n = 1$, jer smo se ograničili na jedan pobuđen nivo. Ispitajmo izraz $\hat{N}^l_n \hat{N}^0_n = a^{l+}_n a^l_n a^{0+}_n a^0_n$

$$a^{l+}_n a^l_n a^{0+}_n a^0_n = -a^{l+}_n a^{0+}_n a^l_n a^0_n = a^{l+}_n a^{0+}_n a^0_n a^l_n$$

On može da deluje na sledeća stanja:

$$a^{l+}_n a^{0+}_n a^0_n a^l_n |0^0_n\, 0^l_n\rangle = 0$$

$$a^{l+}_n a^{0+}_n a^0_n a^l_n |0^0_n\, 1^l_n\rangle = a^{l+}_n a^{0+}_n a^0_n |0^0\, 0^l\rangle = 0$$

$$a^{l+}_n a^{0+}_n a^0_n a^l_n |1^0_n\, 0^l_n\rangle = 0$$

Znači $\hat{N}^l_n \hat{N}^0_n$ je nulti operator $\hat{N}^l_n \hat{N}^0_n = 0$ a isto važi i za $\hat{N}^0_n \hat{N}^l_n = 0$

Tražimo $P^{l+}_n P^l_n = a^{l+}_n a^0_n a^{0+}_n a^l_n = -a^{l+}_n a^0_n a^l_n a^{0+}_n = a^{l+}_n a^l_n a^0_n a^{0+}_n = a^{l+}_n a^l_n (1 - a^{0+}_n a^0_n) = \hat{N}^l_n (1 - \hat{N}^0_n)$

$$P^{l+}_n P^l_n = \hat{N}^l_n - \hat{N}^l_n \hat{N}^0_n = \hat{N}^l_n$$

$$P^l_n P^{l+}_n = a^{0+}_n a^l_n a^{l+}_n a^0_n = a^{0+}_n a^0_n (1 - a^{l+}_n a^l_n) = \hat{N}^0_n (1 - N^l_n) = \hat{N}^0_n - \hat{N}^0_n \hat{N}^l_n = \hat{N}^0_n = 1 - \hat{N}^l_n$$

Dakle: $P^l_n P^{l+}_n + P^{l+}_n P^l_n = 1$ ili $P^l_n P^{l+}_n - P^{l+}_n P^l_n = 1 - 2\hat{N}^l_n$

Potrebne su komutacione relacije za različite čvorove:

$$P^{l+}_n P^l_m - P^l_m P^{l+}_n = a^{l+}_n a^0_n a^{0+}_m a^l_m - a^{0+}_m a^l_m a^{l+}_n a^0_n$$

Razvijamo prvi član: $a^{l+}_n a^0_n a^{0+}_m a^l_m = -a^{l+}_n a^{0+}_m a^0_n a^l_m = a^{0+}_m a^{l+}_n a^0_n a^l_m = -a^{0+}_m a^{l+}_n a^l_m a^0_n = +a^{0+}_m a^l_m a^{l+}_n a^0_n$

$$P^{l+}_n P^l_m - P^l_m P^{l+}_n = a^{0+}_m a^l_m a^{l+}_n a^0_n - a^{0+}_m a^l_m a^{l+}_n a^0_n = 0$$

Takođe se može pokazati $P^l_n P^l_n = P^{l+}_n P^{l+}_n = 0$ i $[P^l_n, P^l_m] = [P^{l+}_n, P^{l+}_m] = 0$

Operatori P^+ i P na istom čvoru zadovoljavaju zadovoljavaju Fermi-komutacione relacije, a na različitim čvorovima Boze-komutacione relacije. Ovakve komutacione relacije karakterišu Pauli-operatore.

III B. Prelazak na Pauli-operatore

Sada ćemo u kompletnom hamiltonijanu izvršiti prelaz na nove Pauli-operatore. Pri tome ćemo praviti razliku između operatora P^{f_1} koji deluje na molekule tipa 1, i operatora Q^{f_2} koji deluje na molekule tipa 2.

$$\hat H = \hat H_1 + \frac{1}{2}\hat H_2 \qquad \hat H_1 = \varepsilon_1^0 \sum_{\vec n} a^{0+}_{\vec n 1} a^{0}_{\vec n 1} + \varepsilon_2^0 \sum_{\vec n} a^{0+}_{\vec n 2} a^{0}_{\vec n 2} + \varepsilon_1^{f_1} \sum_{\vec n} a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_1}_{\vec n 1} + \varepsilon_2^{f_2} \sum_{\vec n} a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{f_2}_{\vec n 2}$$

$$a^{0+}_{\vec n 1} a^{0}_{\vec n 1} = \hat N^0_{\vec n 1} = 1 - \hat N^{f_1}_{\vec n 1} = 1 - P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} \qquad \text{analogno} \qquad a^{0+}_{\vec n 2} a^{0}_{\vec n 2} = 1 - Q^{f_2+}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec n}$$

$$a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_1}_{\vec n 1} = \hat N^{f_1}_{\vec n 1} = P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} \qquad a^{f_2+}_{\vec n 2} a^{f_2}_{\vec n 2} = Q^{f_2+}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec n}$$

$$\hat H_1 = \varepsilon_1^0 \sum_{\vec n} (1 - P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n}) + \varepsilon_2^0 \sum_{\vec n} (1 - Q^{f_2+}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec n}) + \varepsilon_1^{f_1} \sum_{\vec n} P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} + \varepsilon_2^{f_2} \sum_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec n} =$$

$$= \sum_{\vec n} (\varepsilon_1^0 + \varepsilon_2^0) + \sum_{\vec n} (\varepsilon_1^{f_1} - \varepsilon_1^0) P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} + \sum_{\vec n} (\varepsilon_2^{f_2} - \varepsilon_2^0) Q^{f_2+}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec n}$$

U izrazu za $\hat H_2$ operatori se javljaju u grupama od po četiri izraza koji imaju istu strukturu. Mi ćemo računati po jedan izraz iz svake takve grupe.

1) $a^{0+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec n 1} = - a^{0+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec n 1} a^{0}_{\vec m 2} = a^{0+}_{\vec n 1} a^{0}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} = \hat N^0_{\vec n 1} \hat N^0_{\vec m 2} = (1 - P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n})(1 - Q^{f_2+}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec m}) =$
$= 1 - P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} - Q^{f_2+}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec m} + P^{f_1+}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m} P^{f_1}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec m}$ (odmah ga pišemo u normalnom poretku)

2) $a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec n 1} \xlongequal{2\times\text{ antikom.}} a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{0}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} = P^{f_1+}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m}$

3) $a^{0+}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec n 1} = a^{0+}_{\vec n 1} a^{0}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} = \hat N^0_{\vec n 1} \hat N^{f_2}_{\vec m 2} = (1 - P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n}) Q^{f_2+}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec m} = Q^{f_2+}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec m} - P^{f_1+}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m} P^{f_1}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec m}$

4) $a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec n 1} = a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{0}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} = P^{f_1+}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec m}$

5) $a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{f_1}_{\vec n 1} = a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_1}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} = \hat N^{f_1}_{\vec n 1} \hat N^0_{\vec m 2} = P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} (1 - Q^{f_2+}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec m}) = P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} - P^{f_1+}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m} P^{f_1}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec m}$

6) $a^{0+}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} a^{f_1}_{\vec n 1} = a^{0+}_{\vec n 1} a^{f_1}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{0}_{\vec m 2} = P^{f_1}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m}$

7) $a^{0+}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{f_1}_{\vec n 1} = a^{0+}_{\vec n 1} a^{f_1}_{\vec n 1} a^{0+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} = P^{f_1}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec m}$

8) $a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} a^{f_1}_{\vec n 1} = a^{f_1+}_{\vec n 1} a^{f_1}_{\vec n 1} a^{f_2+}_{\vec m 2} a^{f_2}_{\vec m 2} = \hat N^{f_1}_{\vec n 1} \hat N^{f_2}_{\vec m 2} = P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec m} = P^{f_1+}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m} P^{f_1}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec m}$

$$\hat H_2 = \sum_{\vec n \vec m}{}' \Big[V_{\vec n 1 \vec m 1}(0000)(1 - P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} - P^{f_1+}_{\vec m} P^{f_1}_{\vec m} + P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1+}_{\vec m} P^{f_1}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec m}) + V_{\vec n 1 \vec m 2}(0000)(1 - P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec n} - Q^{f_2+}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec m} + P^{f_1+}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m} P^{f_1}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec m}) +$$

$$+ V_{\vec n 2 \vec m 1}(0000)(1 - P^{f_1+}_{\vec m} P^{f_1}_{\vec m} - Q^{f_2+}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec n} + P^{f_1+}_{\vec m} Q^{f_2+}_{\vec n} P^{f_1}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec n}) + V_{\vec n 2 \vec m 2}(0000)(1 - Q^{f_2+}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec n} - Q^{f_2+}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec m} + Q^{f_2+}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m} Q^{f_2}_{\vec n} Q^{f_2}_{\vec m}) +$$

$$+ V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 f_1 00) P^{f_1+}_{\vec n} P^{f_1+}_{\vec m} + V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 f_2 00) P^{f_1+}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m} + V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 f_1 00) Q^{f_2+}_{\vec n} P^{f_1+}_{\vec m} + V_{\vec n 2 \vec m 2}(f_2 f_2 00) Q^{f_2+}_{\vec n} Q^{f_2+}_{\vec m} +$$

$$+V_{\vec n1\vec m1}(0f_10f_1)(P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1}-P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}+P_{\vec n}^{f_1}P_{\vec m}^{f_1})+V_{\vec n1\vec m2}(0f_20f_2)(Q_{\vec m}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2}-P_{\vec n}^{f_1+}Q_{\vec m}^{f_2+}P_{\vec n}^{f_1}Q_{\vec m}^{f_2})+V_{\vec n2\vec m1}(0f_10f_1)(P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1}-Q_{\vec n}^{f_2+}P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1}Q_{\vec n}^{f_2})+$$

$$+V_{\vec n2\vec m2}(0f_20f_2)(Q_{\vec m}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2}-Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2+}Q_{\vec n}^{f_2}Q_{\vec m}^{f_2})+V_{\vec n1\vec m1}(f_100f_1)P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1}+V_{\vec n1\vec m2}(f_100f_2)P_{\vec n}^{f_1+}Q_{\vec m}^{f_2}+V_{\vec n2\vec m1}(f_200f_1)Q_{\vec n}^{f_2+}P_{\vec m}^{f_1}+$$

$$+V_{\vec n2\vec m2}(f_200f_2)Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2}+V_{\vec n1\vec m1}(f_10f_10)(P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}-P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}P_{\vec m}^{f_1})+V_{\vec n1\vec m2}(f_10f_10)(P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}-P_{\vec n}^{f_1+}Q_{\vec m}^{f_2+}P_{\vec n}^{f_1}Q_{\vec m}^{f_2})+$$

$$+V_{\vec n2\vec m1}(f_20f_20)(Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec n}^{f_2}-P_{\vec m}^{f_1+}Q_{\vec n}^{f_2+}P_{\vec m}^{f_1}Q_{\vec n}^{f_2})+V_{\vec n2\vec m2}(f_20f_20)(Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec n}^{f_2}-Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2+}Q_{\vec n}^{f_2}Q_{\vec m}^{f_2})+V_{\vec n1\vec m1}(0f_1f_10)P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}+$$

$$+V_{\vec n1\vec m2}(0f_2f_10)Q_{\vec m}^{f_2+}P_{\vec n}^{f_1}+V_{\vec n2\vec m1}(0f_1f_20)P_{\vec m}^{f_1+}Q_{\vec n}^{f_2}+V_{\vec n2\vec m2}(0f_2f_20)Q_{\vec m}^{f_2+}Q_{\vec n}^{f_2}+V_{\vec n1\vec m1}(00f_1f_1)P_{\vec n}^{f_1}P_{\vec m}^{f_1}+V_{\vec n1\vec m2}(00f_1f_2)P_{\vec n}^{f_1}Q_{\vec m}^{f_2}+$$

$$+V_{\vec n2\vec m1}(00f_2f_1)Q_{\vec n}^{f_2}P_{\vec m}^{f_1}+V_{\vec n2\vec m2}(00f_2f_2)Q_{\vec n}^{f_2}Q_{\vec m}^{f_2}+V_{\vec n1\vec m1}(f_1f_1f_1f_1)P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}P_{\vec m}^{f_1}+V_{\vec n1\vec m2}(f_1f_2f_1f_2)P_{\vec n}^{f_1+}Q_{\vec m}^{f_2+}P_{\vec n}^{f_1}Q_{\vec m}^{f_2}+$$

$$+V_{\vec n2\vec m1}(f_2f_1f_2f_1)Q_{\vec n}^{f_2+}P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1}Q_{\vec n}^{f_2}+V_{\vec n2\vec m2}(f_2f_2f_2f_2)Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2}Q_{\vec n}^{f_2}\Big]$$

Sada grupišemo članove i ~~grup~~ zapisujemo kompaktnije:

$$\hat H=\hat H_1+\frac12\hat H_2=\sum_{\vec n}\sum_{\sigma=1}^{2}\varepsilon_\sigma^0+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'\sum_{\alpha,\beta=1}^{2}V_{\vec n\alpha\vec m\beta}(0000)+\sum_{\vec n}(\varepsilon_1^{f_1}-\varepsilon_1^0)P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}+\sum_{\vec n}(\varepsilon_2^{f_2}-\varepsilon_2^0)Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec n}^{f_2}+$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'\sum_{\beta=1}^{2}\{V_{\vec n1\vec m\beta}(f_10f_10)-V_{\vec n1\vec m\beta}(0000)\}P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'\sum_{\alpha=1}^{2}\{V_{\vec n\alpha\vec m1}(0f_10f_1)-V_{\vec n\alpha\vec m1}(0000)\}P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1}+$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'\sum_{\beta=1}^{2}\{V_{\vec n2\vec m\beta}(f_20f_20)-V_{\vec n2\vec m\beta}(0000)\}Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec n}^{f_2}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'\sum_{\alpha=1}^{2}\{V_{\vec n\alpha\vec m2}(0f_20f_2)-V_{\vec n\alpha\vec m2}(0000)\}Q_{\vec m}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2}+$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n1\vec m1}(f_100f_1)P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n1\vec m1}(0f_1f_10)P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n2\vec m2}(f_200f_2)Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n2\vec m2}(0f_2f_20)Q_{\vec m}^{f_2+}Q_{\vec n}^{f_2}+$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n1\vec m2}(f_100f_2)P_{\vec n}^{f_1+}Q_{\vec m}^{f_2}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n2\vec m1}(f_200f_1)Q_{\vec n}^{f_2+}P_{\vec m}^{f_1}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n1\vec m2}(0f_2f_10)Q_{\vec m}^{f_2+}P_{\vec n}^{f_1}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n2\vec m1}(0f_1f_20)P_{\vec m}^{f_1+}Q_{\vec n}^{f_2}+$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n1\vec m1}(00f_1f_1)P_{\vec n}^{f_1}P_{\vec m}^{f_1}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n1\vec m2}(00f_1f_2)P_{\vec n}^{f_1}Q_{\vec m}^{f_2}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n2\vec m1}(00f_2f_1)Q_{\vec n}^{f_2}P_{\vec m}^{f_1}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n2\vec m2}(00f_2f_2)Q_{\vec n}^{f_2}Q_{\vec m}^{f_2}+$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n1\vec m1}(f_1f_100)P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1+}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n1\vec m2}(f_1f_200)P_{\vec n}^{f_1+}Q_{\vec m}^{f_2+}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n2\vec m1}(f_2f_100)Q_{\vec n}^{f_2+}P_{\vec m}^{f_1+}+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'V_{\vec n2\vec m2}(f_2f_200)Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2+}$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'\{V_{\vec n1\vec m1}(0000)+V_{\vec n1\vec m1}(f_1f_1f_1f_1)-V_{\vec n1\vec m1}(f_10f_10)-V_{\vec n1\vec m1}(0f_10f_1)\}P_{\vec n}^{f_1+}P_{\vec m}^{f_1+}P_{\vec n}^{f_1}P_{\vec m}^{f_1}+$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'\{V_{\vec n1\vec m2}(0000)+V_{\vec n1\vec m2}(f_1f_2f_1f_2)-V_{\vec n1\vec m2}(f_10f_10)-V_{\vec n1\vec m2}(0f_20f_2)\}P_{\vec n}^{f_1+}Q_{\vec m}^{f_2+}P_{\vec n}^{f_1}Q_{\vec m}^{f_2}+$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'\{V_{\vec n2\vec m1}(0000)+V_{\vec n2\vec m1}(f_2f_1f_2f_1)-V_{\vec n2\vec m1}(f_20f_20)-V_{\vec n1\vec m2}(0f_10f_1)\}Q_{\vec n}^{f_2+}P_{\vec m}^{f_1+}Q_{\vec n}^{f_2}P_{\vec m}^{f_1}+$$

$$+\frac12\sum_{\vec n\vec m}{}'\{V_{\vec n2\vec m2}(0000)+V_{\vec n2\vec m2}(f_2f_2f_2f_2)-V_{\vec n2\vec m2}(f_20f_20)-V_{\vec n2\vec m2}(0f_20f_2)\}Q_{\vec n}^{f_2+}Q_{\vec m}^{f_2+}Q_{\vec n}^{f_2}Q_{\vec m}^{f_2}$$

Uvodimo oznaku $H_0=N\sum_{\alpha=1}^{2}\varepsilon_\alpha^0+\frac12\sum_{\vec n\alpha\vec m\beta}V_{\vec n\alpha\vec m\beta}(0000)$

Koristimo sledeće osobine matričnih elemenata interakcije: $V_{ss'}(f00f)=V_{ss'}(0ff0)$ $V_{ss'}(ff00)=V_{ss'}(00ff)$ $V_{ss'}(f0f0)=V_{ss'}(0f0f)$ Ako se zanemare efekti izmene važi i $V_{ss'}(f00f)=V_{ss'}(ff00)$ a znamo da je uvek $V_{ss'}=V_{s's}$.

$$\frac{1}{2}\sum_{\vec n \vec m}{}' \left\{ V_{\vec n 1 \vec m 1}(0f_1 0f_1) - V_{\vec n 1 \vec m 1}(0000) + V_{\vec n 2 \vec m 1}(0f_1 0f_1) - V_{\vec n 2 \vec m 1}(0000) \right\} P_{\vec m}^{f_1 +} P_{\vec m}^{f_1} = \qquad \vec n \rightleftarrows \vec m$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\vec n \vec m}{}' \left\{ V_{\vec m 1 \vec n 1}(0f_1 0f_1) - V_{\vec m 1 \vec n 1}(0000) + V_{\vec m 2 \vec n 1}(0f_1 0f_1) - V_{\vec m 2 \vec n 1}(0000) \right\} P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec n}^{f_1} =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\vec n \vec m}{}' \left\{ V_{\vec n 1 \vec m 1}(0f_1 0f_1) - V_{\vec n 1 \vec m 1}(0000) + V_{\vec n 1 \vec m 2}(0f_1 0f_1) - V_{\vec n 1 \vec m 2}(0000) \right\} P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec n}^{f_1} =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\vec n \vec m}{}' \left\{ V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 0 f_1 0) - V_{\vec n 1 \vec m 1}(0000) + V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 0 f_1 0) - V_{\vec n 1 \vec m 2}(0000) \right\} P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec n}^{f_1}$$

Ovaj član ima sada jedan isti takav u hamiltonijanu i sabraće se sa njime. Isti je postupak i sa izrazima po $Q_{\vec n}^{f_2 +} Q_{\vec n}^{f_2}$. Dalje je:

$$\sum_{\vec m} \sum_{\beta=1}^{2} \left\{ V_{\vec n 1 \vec m \beta}(f_1 0 f_1 0) - V_{\vec n 1 \vec m \beta}(0000) \right\} = D^{f_1} \qquad \sum_{\vec m} \sum_{\beta=1}^{2} \left\{ V_{\vec n 2 \vec m \beta}(f_2 0 f_2 0) - V_{\vec n 2 \vec m \beta}(0000) \right\} = D^{f_2}$$

Uvodimo oznaku $\Delta_1 = \mathcal{E}_1^{f_1} - \mathcal{E}_1^{0} + D^{f_1}$ $\quad \Delta_2 = \mathcal{E}_2^{f_2} - \mathcal{E}_2^{0} + D^{f_2}$

$$\sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 1 \vec m 1}(0 f_1 f_1 0) P_{\vec m}^{f_1 +} P_{\vec n}^{f_1} \quad \vec m \rightleftarrows \vec n \; = \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec m 1 \vec n 1}(0 f_1 f_1 0) P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec m}^{f_1} = \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 1 \vec m 1}(0 f_1 f_1 0) P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec m}^{f_1} = \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 0 0 f_1) P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec m}^{f_1}$$

$$\sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 2 \vec m 1}(0 f_1 f_2 0) P_{\vec m}^{f_1 +} Q_{\vec n}^{f_2} \quad \vec n \rightleftarrows \vec m \; = \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec m 2 \vec n 1}(0 f_1 f_2 0) P_{\vec n}^{f_1 +} Q_{\vec m}^{f_2} = \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 1 \vec m 2}(0 f_1 f_2 0) P_{\vec n}^{f_1 +} Q_{\vec m}^{f_2} = \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 0 0 f_2) P_{\vec n}^{f_1} Q_{\vec m}^{f_2}$$

U celom ovom računu, menjamo mesta indeksima, što možemo bez posebnih komplikacija jer su gornje granice suma praktično beskonačne.

$$\hat H = H_0 + \sum_{\vec n} \Delta_1 P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec n}^{f_1} + \sum_{\vec n} \Delta_2 Q_{\vec n}^{f_2 +} Q_{\vec n}^{f_2} + \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 0 0 f_1) P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec m}^{f_1} + \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 2 \vec m 2}(f_2 0 0 f_2) Q_{\vec n}^{f_2 +} Q_{\vec m}^{f_2} +$$

$$+ \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 0 0 f_2) P_{\vec n}^{f_1 +} Q_{\vec m}^{f_2} + \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 0 0 f_1) Q_{\vec n}^{f_2 +} P_{\vec m}^{f_1} + \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 1 \vec m 1}(0 0 f_1 f_1) \left(P_{\vec n}^{f_1} P_{\vec m}^{f_1} + P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec m}^{f_1 +} \right) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 0 0 f_2) \left(P_{\vec n}^{f_1} Q_{\vec m}^{f_2} + P_{\vec n}^{f_1 +} Q_{\vec m}^{f_2 +} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 0 0 f_1) \left(Q_{\vec n}^{f_2} P_{\vec m}^{f_1} + Q_{\vec n}^{f_2 +} P_{\vec m}^{f_1 +} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m}{}' V_{\vec n 2 \vec m 2}(0 0 f_2 f_2) \left(Q_{\vec n}^{f_2} Q_{\vec m}^{f_2} + Q_{\vec n}^{f_2 +} Q_{\vec m}^{f_2 +} \right) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m}{}' \left\{ V_{\vec n 1 \vec m 1}(0000) + V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 f_1 f_1 f_1) - V_{\vec n 1 \vec m 1}(f_1 0 f_1 0) - V_{\vec n 1 \vec m 1}(0 f_1 0 f_1) \right\} P_{\vec n}^{f_1 +} P_{\vec m}^{f_1 +} P_{\vec n}^{f_1} P_{\vec m}^{f_1} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m}{}' \left\{ V_{\vec n 1 \vec m 2}(0000) + V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 f_2 f_1 f_2) - V_{\vec n 1 \vec m 2}(f_1 0 f_1 0) - V_{\vec n 1 \vec m 2}(0 f_2 0 f_2) \right\} P_{\vec n}^{f_1 +} Q_{\vec m}^{f_2 +} P_{\vec n}^{f_1} Q_{\vec m}^{f_2} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m}{}' \left\{ V_{\vec n 2 \vec m 1}(0000) + V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 f_1 f_2 f_1) - V_{\vec n 2 \vec m 1}(f_2 0 f_2 0) - V_{\vec n 2 \vec m 1}(0 f_1 0 f_1) \right\} Q_{\vec n}^{f_2 +} P_{\vec m}^{f_1 +} Q_{\vec n}^{f_2} P_{\vec m}^{f_1} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m}{}' \left\{ V_{\vec n 2 \vec m 2}(0000) + V_{\vec n 2 \vec m 2}(f_2 f_2 f_2 f_2) - V_{\vec n 2 \vec m 2}(f_2 0 f_2 0) - V_{\vec n 2 \vec m 2}(0 f_2 0 f_2) \right\} Q_{\vec n}^{f_2 +} Q_{\vec m}^{f_2 +} Q_{\vec n}^{f_2} Q_{\vec m}^{f_2}$$

Ovo je najopštiji izraz za hamiltonijan dat preko Pauli-operatora. Iz njega se mogu dobiti različiti aproksimativni hamiltonijani, zavisno od toga na koji ćemo način „predstaviti" Pauli operatore. Dosada se najboljim pokazala reprezentacija operatora - Pauli preko Boze-operatora, što se opet može izvesti na više načina. Pored toga iskrsavaju i teškoće čisto tehničke prirode - račun se veoma komplikuje. Zato ovde uvodimo pretpostavku koja pojednostavljuje račun. Pretpostavljamo da su oba molekula u elementarnoj deliji jednaka i da se pobudjuju na isti nivo $f_1=f_2=f$, a tada je i $\Delta_1=\Delta_2=\Delta$

Više ne pravimo razliku izmedju operatora P^{f_1} i Q^{f_2}. Već ih razlikujemo samo po tipu molekula na koji dejstvuju P_1^f i P_2^f. Tada hamiltonijan postaje:

$$
\begin{aligned}
\hat{H} = H_0 &+ \Delta\sum_{\vec n} P_{\vec n 1}^{f+}P_{\vec n 1}^{f} + \Delta\sum_{\vec n} P_{\vec n 2}^{f+}P_{\vec n 2}^{f} + \sum_{\vec n\vec m}{}' V_{\vec n 1\vec m 1}(f00f)P_{\vec n 1}^{f+}P_{\vec m 1}^{f} + \sum_{\vec n\vec m}{}' V_{\vec n 2\vec m 2}(f00f)P_{\vec n 2}^{f+}P_{\vec m 2}^{f} + \sum_{\vec n\vec m}{}' V_{\vec n 1\vec m 2}(f00f)P_{\vec n 1}^{f+}P_{\vec m 2}^{f} +\\
&+ \sum_{\vec n\vec m} V_{\vec n 2\vec m 1}(f00f)P_{\vec n 2}^{f+}P_{\vec m 1}^{f} + \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m}{}' V_{\vec n 1\vec m 1}(f00f)\left(P_{\vec n 1}^{f}P_{\vec m 1}^{f} + P_{\vec n 1}^{f+}P_{\vec m 1}^{f+}\right) + \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m} V_{\vec n 1\vec m 2}(f00f)\left(P_{\vec n 1}^{f}P_{\vec m 2}^{f} + P_{\vec n 1}^{f+}P_{\vec m 2}^{f+}\right) +\\
&+ \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m} V_{\vec n 2\vec m 1}(f00f)\left(P_{\vec n 1}^{f}P_{\vec m 2}^{f} + P_{\vec n 1}^{f+}P_{\vec m 2}^{f+}\right) + \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m}{}' V_{\vec n 2\vec m 2}(f00f)\left(P_{\vec n 2}^{f+}P_{\vec m 2}^{f+} + P_{\vec n 2}^{f}P_{\vec m 2}^{f}\right) +\\
&+ \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m}{}' \left\{V_{\vec n 1\vec m 1}(0000) + V_{\vec n 1\vec m 1}(ffff) - 2V_{\vec n 1\vec m 1}(f0f0)\right\}P_{\vec n 1}^{f+}P_{\vec m 1}^{f+}P_{\vec n 1}^{f}P_{\vec m 1}^{f} +\\
&+ \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m}{}' \left\{V_{\vec n 1\vec m 2}(0000) + V_{\vec n 1\vec m 2}(ffff) - 2V_{\vec n 1\vec m 2}(f0f0)\right\}P_{\vec n 1}^{f+}P_{\vec m 2}^{f+}P_{\vec n 1}^{f}P_{\vec m 2}^{f} +\\
&+ \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m}{}' \left\{V_{\vec n 2\vec m 1}(0000) + V_{\vec n 2\vec m 1}(ffff) - 2V_{\vec n 2\vec m 1}(f0f0)\right\}P_{\vec n 2}^{f+}P_{\vec m 1}^{f+}P_{\vec n 2}^{f}P_{\vec m 1}^{f} +\\
&+ \frac{1}{2}\sum_{\vec n\vec m}{}' \left\{V_{\vec n 2\vec m 2}(0000) + V_{\vec n 2\vec m 2}(ffff) - 2V_{\vec n 2\vec m 2}(f0f0)\right\}P_{\vec n 2}^{f+}P_{\vec m 2}^{f+}P_{\vec n 2}^{f}P_{\vec m 2}^{f}
\end{aligned}
$$

Indeks f ćemo nadalje izostavljati.

Želeo bih da na ovom mestu dam jednu napomenu u vezi sa izborom aproksimacije uvedene u ovoj glavi. U prvobitnoj verziji ovog rada posmatrao sam dva molekula koji se pobudjuju na različite energetske nivoe. Proces dijagonalizacije hamiltonijana se time bitno ne menja, ali se zato sistem jednačina za energiju veoma komplikuje, i javilo bi se više malih parametara tipa $\mathcal{E}$. Na drugoj strani pokušao sam i sa aproksimacijom u kojoj su s v i matrični elementi interakcije medjusobno jednaki $A=B$, i tada je $\varepsilon_1=0, \varepsilon_{12}=0$. Ova aproksimacija se pokazala kao veoma gruba. Stoga sam se odlučio za slučaj dva jednaka molekula i $A\neq B$ kao aproksimaciju koja nije isuviše gruba, a matematička strana nije preterano komplikovana.

III C. METOD PRIBLIŽNE DRUGE KVANTIZACIJE

Izražavanje hamiltonijana preko Pauli-operatora omogućilo nam je da sa interagujućih čestica predjemo na neinteragujuće kvazičestice. Kao lošu posledicu imamo pojavu Pauli-operatora za koje Furije-transformacija nije kanonična, što znači da ne možemo preći u recipročnu rešetku. Isto tako, za ove operatore ne postoji razradjena statistika. Znači moramo pokušati da Pauli-operatore izrazimo preko nekih operatora za koje postoji razradjena statistika. Povratak na Fermi-operatore ne bi doneo ništa novo, pa se moramo opredeliti za Boze-operatore.

U metodu približne druge kvantizacije se prelaz vrši na sledeći način. Posmatrajmo izraz $P^{\ell}_{n}P^{\ell +}_{n} - P^{\ell +}_{n}P^{\ell}_{n} = 1 - 2\hat{N}^{\ell}_{n}$. Ako je broj pobudjenih molekula mali, $\hat{N}^{\ell}_{n}$ se može zanemariti i tada je $[P^{\ell}_{n}, P^{\ell +}_{n}] = 1$ a to je komutaciona ralacija za Boze-operatore. Kako Pauli-operatori na različitim čvorovima već zadovoljavaju komutacione relacije Boze-operatora, možemo prelaz izvršiti tako da jednostavno Pauli-operatore zamenimo Boze-operatorima $P^{\ell}_{n} = B^{\ell}_{n}$ $P^{\ell +}_{n} = B^{\ell +}_{n}$ Jasno je da je ovaj prelaz aproksimativan jer broj pauliona može biti 0 ili 1, a broj bozona se kreće od 0 do ∞. Druga aproksimacija se sastoji u tome da se u hamiltonijanu zadrže samo članovi kvadratni po Boze-operatorima. Time smo sistem sveli na "gas kvazičestica" jer smo odbacili nelinearne efekte. Ako u hamiltonijanu zadržimo samo članove tipa $B^{+}B$ to odgovara postojanju samo jednog pobudjenog molekula, dakle aproksimacija Hajtler-Londona. Mogućnost postojanja više pobudjenih molekula u kristalu izražava se članovima tipa $B^{+}B^{+}$ i BB.

Izvršimo zamenu u hamiltonijanu:

$$\hat{H}_{pok} = H_0 + \Delta \sum_{\vec{n}} B^{+}_{\vec{n}1} B_{\vec{n}1} + \Delta \sum_{\vec{n}} B^{+}_{\vec{n}2} B_{\vec{n}2} + \sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' V_{\vec{n}1\vec{m}1}(\ell 00 \ell) B^{+}_{\vec{n}1} B_{\vec{m}1} + \sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' V_{\vec{n}2\vec{m}2}(\ell 00 \ell) B^{+}_{\vec{n}2} B^{+}_{\vec{m}2} +$$

$$+ \sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' V_{\vec{n}1\vec{m}2}(\ell 00 \ell) B^{+}_{\vec{n}1} B_{\vec{m}2} + \sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' V_{\vec{n}2\vec{m}1}(\ell 00 \ell) B^{+}_{\vec{n}2} B_{\vec{m}1} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' V_{\vec{n}1\vec{m}1}(\ell 00 \ell) (B_{\vec{n}1} B_{\vec{m}1} + B^{+}_{\vec{n}1} B^{+}_{\vec{m}1}) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' V_{\vec{n}1\vec{m}2}(\ell 00 \ell) (B_{\vec{n}1} B_{\vec{m}2} + B^{+}_{\vec{n}1} B^{+}_{\vec{m}2}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}}{}' V_{\vec{n}2\vec{m}1}(\ell 00 \ell) (B_{\vec{n}2} B_{\vec{m}1} + B^{+}_{\vec{n}2} B^{+}_{\vec{m}1}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} V_{\vec{n}2\vec{m}2}(\ell 00 \ell) (B_{\vec{n}2} B_{\vec{m}2} + B^{+}_{\vec{n}2} B^{+}_{\vec{m}2})$$

(Pošto je nivo samo jedan ne pišemo oznaku nivoa uz operator.)

Sada vršimo Furije transformaciju ovog hamiltonijana.

$$B^+_{\vec n 1}=\frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec k}B_1^+(\vec k)e^{-i\vec k(\vec n+\vec r_1)}\qquad B_{\vec m 2}=\frac{1}{\sqrt N}\sum_{\vec k}B_2(\vec k)e^{i\vec k(\vec m+\vec r_2)}$$

$$\Delta\sum_{\vec n}B^+_{\vec n f}B_{\vec n f}=\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec k_1,\vec k_2}B_f^+(\vec k_1)B_f(\vec k_2)e^{-i\vec k_1\vec r_f+i\vec k_2\vec r_f}\sum_{\vec n}e^{-i\vec k_1\vec n+i\vec k_2\vec n}=\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_f^+(\vec k_1)B_f(\vec k_2)e^{i\vec r_f(\vec k_2-\vec k_1)}N\delta_{\vec k_1,\vec k_2}=$$
$$=\Delta\sum_{\vec k}B_f^+(\vec k)B_f(\vec k)$$

$$\sum_{\vec n\vec m}V_{\vec n1\vec m1}B^+_{\vec n1}B_{\vec m1}=\frac1N\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_1^+(\vec k_1)B_1(\vec k_2)e^{-i\vec k_1\vec r_1+i\vec k_2\vec r_1}\sum_{\vec n\vec m}V_{\vec n1\vec m1}e^{-i\vec k_1\vec n+i\vec k_2\vec m},\qquad \vec n-\vec m=\vec s,\quad \vec n=\vec s+\vec m,\qquad V_{\vec n1\vec m1}=V_{(\vec n-\vec m)}$$

$$=\frac1N\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_1^+(\vec k_1)B_1(\vec k_2)e^{-i\vec k_1\vec r_1+i\vec k_2\vec r_1}\sum_{\vec s}V_{\vec s}e^{-i\vec k_1\vec s}\sum_{\vec m}e^{-i\vec k_1\vec m+i\vec k_2\vec m}=\frac1N\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_1^+(\vec k_1)B_1(\vec k_2)e^{i(-\vec k_1+\vec k_2)\vec r_1}\sum_{\vec s}V_{\vec s}e^{-i\vec k_1\vec s}N\delta_{\vec k_1,\vec k_2}=$$

$$=\sum_{\vec k}B_1^+(\vec k)B_1(\vec k)\sum_{\vec m}V_{\vec n-\vec m}e^{-i\vec k(\vec n-\vec m)}\qquad \sum_{\vec m}V_{\vec n-\vec m}e^{-i\vec k(\vec n-\vec m)}=A(\vec k)$$

Furije-transform matričnog elementa interakcije koji odgovara jednakim molekulima (molekulima istog tipa).

$$\sum_{\vec n\vec m}V_{\vec n1\vec m2}B^+_{\vec n1}B_{\vec m2}=\frac1N\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_1^+(\vec k_1)B_2(\vec k_2)e^{-i\vec k_1\vec r_1+i\vec k_2\vec r_2}\sum_{\vec n\vec m}V_{\vec n1\vec m2}e^{-i\vec k_1\vec n+i\vec k_2\vec m}\qquad \vec n-\vec m=\vec s,\quad \vec n=\vec s+\vec m$$

$$=\frac1N\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_1^+(\vec k_1)B_2(\vec k_2)e^{-i\vec k_1\vec r_1+i\vec k_2\vec r_2}\sum_{\vec s}V_{\vec s12}e^{-i\vec k_1\vec s}\sum_{\vec m}e^{-i\vec k_1\vec m+i\vec k_2\vec m}=\sum_{\vec k}B_1^+(\vec k)B_2(\vec k)e^{-i\vec k(\vec r_1-\vec r_2)}\sum_{\vec m}V_{\vec n-\vec m+\vec r_1-\vec r_2}e^{-i\vec k(\vec n-\vec m)}$$

$$B_{12}(\vec k)=\sum_{\vec m}V_{\vec n+\vec r_1-\vec m-\vec r_2}e^{-i\vec k(\vec n+\vec r_1-\vec m-\vec r_2)}\qquad B_{21}=\sum_{\vec m}V_{\vec n+\vec r_2-\vec m-\vec r_1}e^{-i\vec k(\vec n+\vec r_2-\vec m-\vec r_1)}$$

Ovo su Furije - transformi matričnih elemenata interakcije između molekula različitog tipa.

$$\sum_{\vec n\vec m}V_{\vec n1\vec m1}B^+_{\vec n1}B^+_{\vec m1}=\frac1N\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_1^+(\vec k_1)B_1^+(\vec k_2)e^{-i\vec k_1\vec r_1-i\vec k_2\vec r_1}\sum_{\vec n\vec m}V_{\vec n-\vec m}e^{-i\vec k_1\vec n-i\vec k_2\vec m}=\frac1N\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_1^+(\vec k_1)B_1^+(\vec k_2)e^{-i(\vec k_1+\vec k_2)\vec r_1}\sum_{\vec s}V_{\vec s}e^{-i\vec k_1\vec s}\times$$
$$\times\sum_{\vec m}e^{-i(\vec k_1+\vec k_2)\vec m}=\sum_{\vec k}B_1^+(\vec k)B_1^+(-\vec k)\sum_{\vec m}V_{\vec n-\vec m}e^{-i\vec k(\vec n-\vec m)}$$

$$\sum_{\vec n\vec m}V_{\vec n1\vec m1}B_{\vec n1}B_{\vec m1}=\frac1N\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_1(\vec k_1)B_1(\vec k_2)e^{i\vec k_1\vec r_1+i\vec k_2\vec r_1}\sum_{\vec n\vec m}V_{\vec n\vec m}e^{i\vec k_1\vec n+i\vec k_2\vec m}=\frac1N\sum_{\vec k_1\vec k_2}B_1(\vec k_1)B_1(\vec k_2)e^{i\vec k_1\vec r_1+i\vec k_2\vec r_1}\sum_{\vec s}V_{\vec s}e^{i\vec k_1\vec s}N\delta_{-\vec k_1,\vec k_2}=$$
$$=\sum_{\vec k}B_1(-\vec k)B_1(\vec k)\sum_{\vec s}V_{\vec s}e^{-i\vec k\vec s}$$

Pri ovome koristimo osobinu da matrični elementi zavise samo od rastojanja. Pošto su sume praktično beskonačne promena indeksa sumiranja ne utiče. Važno je ovo da pri prelazu sa $\vec s$ na $\vec m$, nova suma ne zavisi od $\vec n$, jer možemo staviti da je $\vec n=0$, znači taj molekul uzeti za početni i od njega meriti rastojanja.

Hamiltonijan možemo napisati u sledećoj formi:

$$\hat{H} = H_0 + \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{rl} \mathcal{B}_{rl}(\vec{k}) B_r^+(\vec{k}) B_l^+(-\vec{k}) + \sum_{rl} A_{rl}(\vec{k}) B_r^+(\vec{k}) B_l(\vec{k}) + \frac{1}{2} \sum_{rl} \mathcal{B}_{rl}(\vec{k}) B_r(-\vec{k}) B_l(\vec{k}) \right\}$$

Pri ovome je $A_{11} = \Delta + A(\vec{k})$ $\quad A_{22} = \Delta + A(\vec{k})$ $\quad A_{12} = B_{12}(\vec{k})$ $\quad A_{21}(\vec{k}) = B_{21}(\vec{k})$

$\mathcal{B}_{11} = \mathcal{B}_{22} = A(\vec{k}) \qquad \mathcal{B}_{12} = B_{12} \qquad \mathcal{B}_{21} = B_{21}$

S obzirom da kristal ima centar inverzije $A(\vec{k}) = A(-\vec{k})$.

$$\overset{*}{B}_{12}(\vec{k}) = B_{12}(-\vec{k}) = e^{-i(-\vec{k})(\vec{r}_1-\vec{r}_2)} \sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}+\vec{r}_1-\vec{m}-\vec{r}_2}\, e^{-i(-\vec{k})(\vec{n}-\vec{m})} = e^{-i\vec{k}(\vec{r}_2-\vec{r}_1)} \sum_{\vec{m}} V_{\vec{n}+\vec{r}_1-\vec{m}-\vec{r}_2}\, e^{-i\vec{k}(\vec{m}-\vec{n})} \qquad \vec{m} \rightleftarrows \vec{n}$$

$$= e^{-i\vec{k}(\vec{r}_2-\vec{r}_1)} \sum_{\vec{n}} V_{\vec{m}+\vec{r}_1-\vec{n}-\vec{r}_2}\, e^{-i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} = e^{-i\vec{k}(\vec{r}_2-\vec{r}_1)} \sum_{\vec{n}} V_{\vec{n}+\vec{r}_2-\vec{m}-\vec{r}_1}\, e^{-i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} = B_{21}(\vec{k})$$

Ako u ovom hamiltonijanu ostavimo samo srednji **član** $\sum_{\vec{k}} \sum_{rl} A_{rl}(\vec{k}) B_r^+(\vec{k}) B_l(\vec{k})$ i izvršimo dijagonalizaciju unitarnom transformacijom dobićemo isti rezultat za energiju kao i kod Hajtler-Londonove aproksimacije, što je jasno jer taj član upravo i odgovara ovoj aproksimaciji.

Dijagonalizaciju celokupnog hamiltonijana vršimo metodom koju je dao S. V. Tjablikov (ref. 3). Obeležimo sa $\hat{H}' = \hat{H} - H_0$. Prvo tražimo Hajzenbergove relacije kretanja za date operatore pri čemu zbog matematičkog komoditeta radimo u sistemu $\hbar = 1$.

$$i\frac{dB_s(\vec{q})}{dt} = [B_s(\vec{q}), \hat{H}'] = \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{rl} \mathcal{B}_{rl}(\vec{k}) [B_s(\vec{q}), B_r^+(\vec{k}) B_l^+(-\vec{k})] + \sum_{rl} A_{rl}(\vec{k}) [B_s(\vec{q}), B_r^+(\vec{k}) B_l(\vec{k})] + \frac{1}{2} \sum_{rl} \mathcal{B}_{rl}(\vec{k}) \cancel{[B_s(\vec{q}), B_r(-\vec{k}) B_l(\vec{k})]}^{\,0} \right\}$$

a) $B_s(\vec{q}) B_r^+(\vec{k}) B_l^+(-\vec{k}) = B_l^+(-\vec{k})\, \delta_{\vec{q},\vec{k}}\, \delta_{s,r} + B_r^+(\vec{k})\, \delta_{\vec{q},-\vec{k}}\, \delta_{s,l} + B_r^+(\vec{k}) B_l^+(-\vec{k}) B_s(\vec{q})$

b) $B_s(\vec{q}) B_r^+(\vec{k}) B_l(\vec{k}) = B_l(\vec{k})\, \delta_{s,r}\, \delta_{\vec{k},\vec{q}} + B_r^+(\vec{k}) B_l(\vec{k}) B_s(\vec{q})$

$$i\frac{dB_s(\vec{q})}{dt} = \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{rl} \mathcal{B}_{rl}(\vec{k}) B_l^+(-\vec{k})\, \delta_{\vec{q},\vec{k}}\, \delta_{s,r} + \frac{1}{2} \sum_{rl} \mathcal{B}_{rl}(\vec{k}) B_r^+(\vec{k})\, \delta_{\vec{q},-\vec{k}}\, \delta_{s,l} + \sum_{rl} A_{rl}(\vec{k}) B_l(\vec{k})\, \delta_{s,r}\, \delta_{\vec{k},\vec{q}} \right\} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_l \mathcal{B}_{sl}(\vec{q}) B_l^+(-\vec{q}) + \sum_l A_{sl}(\vec{q}) B_l(\vec{q}) + \frac{1}{2} \sum_r \mathcal{B}_{rs}(-\vec{q}) B_r^+(-\vec{q})$$

Posmatramo poslednji član $\frac{1}{2} \sum_r \mathcal{B}_{rs}(-\vec{q}) B_r^+(-\vec{q}) \overset{r \rightleftarrows l}{=} \frac{1}{2} \sum_l \mathcal{B}_{ls}(-\vec{q}) B_l^+(-\vec{q})$ $\quad \mathcal{B}_{ls}(-\vec{q}) = \overset{*}{\mathcal{B}}_{ls}(\vec{q}) = \mathcal{B}_{sl}(\vec{q})$

$$i\frac{dB_s(\vec{q})}{dt} = \sum_l A_{sl}(\vec{q}) B_l(\vec{q}) + \sum_l \mathcal{B}_{sl}(\vec{q}) B_l^+(-\vec{q})$$

Na isti način je $-i\frac{dB_s^+(\vec{q})}{dt} = \sum_l \overset{*}{A}_{sl}(\vec{q}) B_l^+(\vec{q}) + \sum_l \overset{*}{\mathcal{B}}_{sl}(\vec{q}) B_l(-\vec{q})$

Sada uvodimo smenu Tjablikova: $B_r(\vec{k}) = \sum_{g=1}^{2} \left[b_g(\vec{k}) u_{rg}(\vec{k}) + b_g^+(-\vec{k}) \overset{*}{v}_{rg}(-\vec{k}) \right]$

Kako je hamiltonijan stacionaran, biće:

$$B_r(\vec{k}, t) = \sum_{g=1}^{2} \left[b_g(\vec{k})\, e^{-iE_g(\vec{k})t}\, u_{rg}(\vec{k}) + b_g^+(-\vec{k})\, e^{iE_g(-\vec{k})t}\, \overset{*}{v}_{rg}(-\vec{k}) \right]$$

$$i\frac{dB_r(\vec k,t)}{dt} = \sum_{\rho=1}^{3}\left[b_\rho(\vec k)E_\rho(\vec k)e^{-iE_\rho(\vec k)t}u_{r\rho}(\vec k) - b_\rho^+(-\vec k)E_\rho(-\vec k)e^{iE_\rho(-\vec k)t}v_{r\rho}^*(-\vec k)\right] = \left[B_r(\vec k,t),\hat H'\right] =$$

$$= \sum_l A_{rl}(\vec k)\sum_\rho\left[b_\rho(\vec k)e^{-iE_\rho(\vec k)t}u_{l\rho}(\vec k) + b_\rho^+(-\vec k)e^{iE_\rho(-\vec k)t}v_{l\rho}^*(-\vec k)\right] + \sum_l B_{rl}(\vec k)\sum_\rho\left[b_\rho^+(-\vec k)e^{iE_\rho(-\vec k)t}u_{l\rho}^*(-\vec k) + b_\rho(\vec k)e^{-iE_\rho(\vec k)t}v_{l\rho}(\vec k)\right] =$$

$$= \sum_\rho b_\rho(\vec k)e^{-iE_\rho(\vec k)t}\sum_l\left[A_{rl}(\vec k)u_{l\rho}(\vec k)+B_{rl}(\vec k)v_{l\rho}(\vec k)\right] + \sum_\rho b_\rho^+(-\vec k)e^{iE_\rho(-\vec k)t}\sum_l\left[A_{rl}(\vec k)v_{l\rho}^*(-\vec k) + B_{rl}(\vec k)u_{l\rho}^*(-\vec k)\right]$$

Odavde slede 2 relacije: $E_\rho(\vec k)u_{r\rho}(\vec k) = \sum_l\left[A_{rl}(\vec k)u_{l\rho}(\vec k) + B_{rl}(\vec k)v_{l\rho}(\vec k)\right]$

$$-E_\rho(-\vec k)v_{r\rho}^*(-\vec k) = \sum_l\left[A_{rl}(\vec k)v_{l\rho}^*(-\vec k) + B_{rl}(\vec k)u_{l\rho}^*(-\vec k)\right]$$

Iz relacije za $B_r^+(\vec k,t)$ dobijamo $E_\rho(\vec k)u_{r\rho}^*(\vec k) = \sum_l\left[A_{rl}^*(\vec k)u_{l\rho}^*(\vec k) + B_{rl}^*(\vec k)v_{l\rho}^*(\vec k)\right]$

$$-E_\rho(-\vec k)v_{r\rho}(-\vec k) = \sum_l\left[A_{rl}^*(\vec k)v_{l\rho}(-\vec k) + B_{rl}^*(\vec k)u_{l\rho}(-\vec k)\right]$$

Vidimo da se ove relacije mogu dobiti iz gornjih konjugovanjem, iz čega odmah sledi da su energije realne.

Sada sa smenom ulazimo u hamiltonijan:

$$\hat H' = \sum_{\vec k}\Big\{\frac12\sum_{rl}B_{rl}(\vec k)\sum_{\rho_1}\left[b_{\rho_1}^+(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k) + b_{\rho_1}(-\vec k)v_{r\rho_1}(-\vec k)\right]\sum_{\rho_2}\left[b_{\rho_2}^+(-\vec k)u_{l\rho_2}^*(-\vec k) + b_{\rho_2}(\vec k)v_{l\rho_2}(\vec k)\right] +$$

$$+ \sum_{rl}A_{rl}(\vec k)\sum_{\rho_1}\left[b_{\rho_1}^+(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k) + b_{\rho_1}(-\vec k)v_{r\rho_1}(-\vec k)\right]\sum_{\rho_2}\left[b_{\rho_2}(\vec k)u_{l\rho_2}(\vec k) + b_{\rho_2}^+(-\vec k)v_{l\rho_2}^*(-\vec k)\right] +$$

$$+\frac12\sum_{rl}B_{rl}(\vec k)\sum_{\rho_1}\left[b_{\rho_1}(-\vec k)u_{r\rho_1}(-\vec k) + b_{\rho_1}^+(\vec k)v_{r\rho_1}^*(\vec k)\right]\sum_{\rho_2}\left[b_{\rho_2}(\vec k)u_{l\rho_2}(\vec k) + b_{\rho_2}^+(-\vec k)v_{l\rho_2}^*(-\vec k)\right]\Big\} =$$

$$= \sum_{\vec k}\Big\{\sum_{\rho_1\rho_2}b_{\rho_1}^+(\vec k)b_{\rho_2}^+(-\vec k)\sum_{rl}\left[\frac12 B_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k)u_{l\rho_2}^*(-\vec k) + A_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k)v_{l\rho_2}^*(-\vec k) + \frac12 B_{rl}(\vec k)v_{r\rho_1}^*(\vec k)v_{l\rho_2}^*(-\vec k)\right] +$$

$$+ \sum_{\rho_1\rho_2}b_{\rho_1}^+(\vec k)b_{\rho_2}(\vec k)\sum_{rl}\left[\frac12 B_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k)\cancel{v_{l\rho_2}(\vec k)} + A_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k)u_{l\rho_2}(\vec k) + \frac12 B_{rl}(\vec k)v_{r\rho_1}^*(\vec k)u_{l\rho_2}(\vec k)\right] +$$

$$+ \sum_{\rho_1\rho_2}b_{\rho_1}(-\vec k)b_{\rho_2}^+(-\vec k)\sum_{rl}\left[\frac12 B_{rl}(\vec k)v_{r\rho_1}(-\vec k)u_{l\rho_2}^*(-\vec k) + A_{rl}(\vec k)v_{r\rho_1}(-\vec k)v_{l\rho_2}^*(-\vec k) + \frac12 B_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}(-\vec k)v_{l\rho_2}^*(-\vec k)\right] +$$

$$+ \sum_{\rho_1\rho_2}b_{\rho_1}(-\vec k)b_{\rho_2}(\vec k)\sum_{rl}\left[\frac12 B_{rl}(\vec k)v_{r\rho_1}(-\vec k)v_{l\rho_2}(\vec k) + A_{rl}(\vec k)v_{r\rho_1}(-\vec k)u_{l\rho_2}(\vec k) + \frac12 B_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}(-\vec k)u_{l\rho_2}(\vec k)\right]\Big\}$$

Izračunajmo prva dva člana.

srednji član rastavljamo

$$a)\ \sum_{rl}\left[\frac12 B_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k)u_{l\rho_2}^*(-\vec k) + A_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k)v_{l\rho_2}^*(-\vec k) + \frac12 B_{rl}(\vec k)v_{r\rho_1}^*(\vec k)v_{l\rho_2}^*(-\vec k)\right] =$$

$$= \frac12\sum_r u_{r\rho_1}^*(\vec k)\sum_l\left[B_{rl}(\vec k)u_{l\rho_2}^*(-\vec k) + A_{rl}(\vec k)v_{l\rho_2}^*(-\vec k)\right] + \frac12\sum_l v_{l\rho_2}^*(-\vec k)\sum_r\left[B_{rl}(\vec k)v_{r\rho_1}^*(\vec k) + A_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k)\right]$$

$\downarrow$

Prvi član je $-E_{\rho_2}(-\vec k)v_{r\rho_2}^*(-\vec k)$ a u drugom članu vršimo smenu $r \rightleftharpoons l$

$$\frac12\sum_r v_{r\rho_2}^*(-\vec k)\sum_l\left[B_{lr}(\vec k)v_{l\rho_1}^*(\vec k) + A_{lr}(\vec k)u_{l\rho_1}^*(\vec k)\right] = \frac12\sum_r v_{r\rho_2}^*(-\vec k)\sum_l\left[B_{rl}^*(\vec k)v_{l\rho_1}^*(\vec k) + A_{rl}^*(\vec k)u_{l\rho_1}^*(\vec k)\right] =$$

$$= \frac12\sum_r v_{r\rho_2}^*(-\vec k)E_{\rho_1}(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k)$$

$$\sum_{rl} = \frac12\left[E_{\rho_1}(\vec k) - E_{\rho_2}(-\vec k)\right]\sum_r u_{r\rho_1}^*(\vec k)v_{r\rho_2}^*(-\vec k)$$

$$b)\ \sum_{rl} = \frac12\sum_r u_{r\rho_1}^*(\vec k)\sum_l\left[B_{rl}(\vec k)v_{l\rho_2}(\vec k) + A_{rl}(\vec k)u_{l\rho_2}(\vec k)\right] + \frac12\sum_l u_{l\rho_2}(\vec k)\sum_r\left[B_{rl}(\vec k)v_{r\rho_1}^*(\vec k) + A_{rl}(\vec k)u_{r\rho_1}^*(\vec k)\right] =$$

$r \rightleftharpoons l$

$$= \frac12 E_{\rho_2}(\vec k)\sum_r u_{r\rho_1}^*(\vec k)u_{r\rho_2}(\vec k) + \frac12\sum_r u_{r\rho_2}(\vec k)\sum_l\left[B_{lr}(\vec k)v_{l\rho_1}^*(\vec k) + A_{lr}(\vec k)u_{l\rho_1}^*(\vec k)\right] = \frac12\left[E_{\rho_1}(\vec k) + E_{\rho_2}(\vec k)\right]\sum_r u_{r\rho_1}^+(\vec k)u_{r\rho_2}(\vec k)$$

Istim postupkom dobijamo i druga dva člana

$$\sum_{rl}\left[\tfrac{1}{2}B_{rl}(\vec{k})v_{r\rho_1}(-\vec{k})u_{l\rho_2}^{*}(-\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})v_{r\rho_1}(-\vec{k})v_{l\rho_2}^{*}(-\vec{k})+\tfrac{1}{2}B_{rl}(\vec{k})u_{r\rho_1}(-\vec{k})v_{l\rho_2}^{*}(-\vec{k})\right]=-\tfrac{1}{2}\left[E_{\rho_1}(-\vec{k})+E_{\rho_2}(-\vec{k})\right]\sum_r v_{r\rho_1}(-\vec{k})v_{r\rho_2}^{*}(-\vec{k})$$

$$\sum_{rl}\left[\tfrac{1}{2}B_{rl}(\vec{k})v_{r\rho_1}(-\vec{k})u_{l\rho_2}(\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})v_{r\rho_1}(-\vec{k})u_{l\rho_2}(\vec{k})+\tfrac{1}{2}B_{rl}(\vec{k})u_{r\rho_1}(-\vec{k})u_{l\rho_2}(\vec{k})\right]=\tfrac{1}{2}\left[E_{\rho_2}(\vec{k})-E_{\rho_1}(-\vec{k})\right]\sum_r v_{r\rho_1}(-\vec{k})u_{r\rho_2}(\vec{k})$$

$$\hat{H}'=\sum_{\vec{k}}\Big\{\tfrac{1}{2}\sum_{\rho_1\rho_2}\left[E_{\rho_1}(\vec{k})-E_{\rho_2}(-\vec{k})\right]b_{\rho_1}^{+}(\vec{k})b_{\rho_2}^{+}(-\vec{k})\sum_r u_{r\rho_1}^{*}(\vec{k})v_{r\rho_2}^{*}(-\vec{k})+\tfrac{1}{2}\sum_{\rho_1\rho_2}\left[E_{\rho_1}(\vec{k})+E_{\rho_2}(\vec{k})\right]b_{\rho_1}^{+}(\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})\sum_r u_{r\rho_1}^{*}(\vec{k})u_{r\rho_2}(\vec{k})+$$

$$+\tfrac{1}{2}\sum_{\rho_1\rho_2}\left[-E_{\rho_1}(-\vec{k})-E_{\rho_2}(-\vec{k})\right]b_{\rho_1}(-\vec{k})b_{\rho_2}^{+}(-\vec{k})\sum_r v_{r\rho_1}(-\vec{k})v_{r\rho_2}^{*}(-\vec{k})+\tfrac{1}{2}\sum_{\rho_1\rho_2}\left[E_{\rho_2}(\vec{k})-E_{\rho_1}(-\vec{k})\right]b_{\rho_1}(-\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})\sum_r v_{r\rho_1}(-\vec{k})u_{r\rho_2}(\vec{k})\Big\}$$

Potrebne su nam relacije između transformacionih funkcija. Počnimo od sledećih relacija $E_\rho(\vec{k})u_{r\rho}(\vec{k})=\sum_{l=1}^{3}\left[B_{rl}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})\right]$ i $-E_\rho(-\vec{k})v_{r\rho}(-\vec{k})=\sum_l\left[B_{rl}^{*}(\vec{k})u_{l\rho}(-\vec{k})+A_{rl}^{*}(\vec{k})v_{l\rho}(-\vec{k})\right]$. U drugoj relaciji pređimo sa $\vec{k}$ na $-\vec{k}$. $B_{rl}^{*}(-\vec{k})\equiv B_{rl}$.

$$E_\rho(\vec{k})u_{r\rho}(\vec{k})=\sum_l\left[B_{rl}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})\right]\Big/u_{r\rho'}^{*}(\vec{k})$$

i sumiramo po r

$$-E_\rho(\vec{k})v_{r\rho}(\vec{k})=\sum_l\left[B_{rl}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})\right]\Big/v_{r\rho'}^{*}(\vec{k})$$

$$E_\rho(\vec{k})\sum_r\left[u_{r\rho}(\vec{k})u_{r\rho'}^{*}(\vec{k})-v_{r\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}^{*}(\vec{k})\right]=\sum_{rl}\Big[B_{rl}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})u_{r\rho'}^{*}(\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})u_{r\rho'}^{*}(\vec{k})+B_{rl}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}^{*}(\vec{k})+$$
$$+A_{rl}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}^{*}(\vec{k})\Big]$$

Sada u ovoj relaciji izvršimo prelaz $\rho\rightleftarrows\rho'$, zatim konjugujemo i potom izmenimo mesta indeksima r i l sa desne strane. Konačno dobijamo:

$$E_{\rho'}(\vec{k})\sum_r\left[u_{r\rho'}^{*}(\vec{k})u_{r\rho}(\vec{k})-v_{r\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}^{*}(\vec{k})\right]=\sum_{rl}\left[B_{rl}(\vec{k})v_{r\rho'}^{*}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})u_{r\rho'}^{*}u_{l\rho}+A_{rl}(\vec{k})v_{r\rho'}^{*}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})+B_{rl}(\vec{k})u_{r\rho'}^{*}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})\right]$$

Ako ove dve relacije oduzmemo, sledi: $\left[E_\rho(\vec{k})-E_{\rho'}(\vec{k})\right]\sum_r\left[u_{r\rho}(\vec{k})u_{r\rho'}^{*}(\vec{k})-v_{r\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}^{*}(\vec{k})\right]=0$

Pretpostavimo da su transformacione funkcije normirane i tada imamo:

$$\sum_r\left[u_{r\rho}(\vec{k})u_{r\rho'}^{*}(\vec{k})-v_{r\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}^{*}(\vec{k})\right]=\delta_{\rho\rho'}$$

Potrebna nam je još jedna veza:

$$E_\rho(\vec{k})u_{r\rho}(\vec{k})=\sum_l\left[B_{rl}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})\right]\Big/v_{r\rho'}(-\vec{k})$$

i sumiramo po r

$$-E_\rho(\vec{k})v_{r\rho}(\vec{k})=\sum_l\left[B_{rl}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})\right]\Big/u_{r\rho'}(-\vec{k})$$

$$E_\rho(\vec{k})\sum_r\left[u_{r\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}(-\vec{k})-v_{r\rho}(\vec{k})u_{r\rho'}(-\vec{k})\right]=\sum_{rl}\Big[B_{rl}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}(-\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}(-\vec{k})+B_{rl}(\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})u_{r\rho'}(-\vec{k})+$$
$$+A_{rl}(\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})u_{r\rho'}(-\vec{k})\Big]$$

Prvo pređimo sa ρ na ρ' i obratno, zatim sa $\vec{k}$ na $-\vec{k}$ i potom izmenimo $r\rightleftarrows l$.

$$-E_{\rho'}(-\vec{k})\sum_r\left[u_{r\rho}(\vec{k})v_{r\rho'}(-\vec{k})-u_{r\rho'}(-\vec{k})v_{r\rho}(\vec{k})\right]=\sum_{rl}\Big[A_{rl}(\vec{k})u_{r\rho'}(-\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})+B_{rl}(\vec{k})v_{r\rho'}(-\vec{k})v_{l\rho}(\vec{k})+A_{rl}(\vec{k})v_{r\rho'}(-\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})+$$
$$+B_{rl}(\vec{k})u_{r\rho'}(-\vec{k})u_{l\rho}(\vec{k})\Big]$$

Oduzmimo ove 2 relacije.

$$[E_\rho(\vec k)+E_{\rho'}(-\vec k)]\sum_r\left[u_{r\rho}(\vec k)v_{r\rho'}(-\vec k)-v_{r\rho}(\vec k)u_{r\rho'}(-\vec k)\right]=0 \Rightarrow \sum_r\left[u_{r\rho}(\vec k)v_{r\rho'}(-\vec k)-v_{r\rho}(\vec k)u_{r\rho'}(-\vec k)\right]=0$$

Prvi član hamiltonijana $\hat H'$ možemo napisati kao $\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} Q_{\rho_1\rho_2}(\vec k)\, b^+_{\rho_1}(\vec k)\, b^+_{\rho_2}(-\vec k)$ pri čemu je

$$Q_{\rho_1\rho_2}(\vec k)=[E_{\rho_1}(\vec k)-E_{\rho_2}(-\vec k)]\sum_r u^*_{r\rho_1}(\vec k)\,v^*_{r\rho_2}(-\vec k)$$

koeficient

Posmatramo član $Q_{\rho_2\rho_1}(-\vec k)=[E_{\rho_2}(-\vec k)-E_{\rho_1}(\vec k)]\sum_r u^*_{r\rho_2}(-\vec k)\,v^*_{r\rho_1}(\vec k)=-[E_{\rho_1}(\vec k)-E_{\rho_2}(-\vec k)]\sum_r u^*_{r\rho_1}(\vec k)\,v^*_{r\rho_2}(-\vec k)=-Q_{\rho_1\rho_2}(\vec k)$

Ovaj član se javlja uz $b^+_{\rho_2}(-\vec k)\,b^+_{\rho_1}(\vec k)$, pa pošto se sve sumira i po $\vec k$ i po ρ_1 i ρ_2, zbog antisimetričnosti koeficienata celokupna suma je 0. $\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} Q_{\rho_1\rho_2}(\vec k)\, b^+_{\rho_1}(\vec k)\, b^+_{\rho_2}(-\vec k)=0$

Isto tako poslednji član $\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} P_{\rho_1\rho_2}(\vec k)\, b_{\rho_1}(-\vec k)\, b_{\rho_2}(\vec k)$ $\quad P_{\rho_1\rho_2}(\vec k)=[E_{\rho_2}(\vec k)-E_{\rho_1}(-\vec k)]\sum_r v_{r\rho_1}(-\vec k)\,u_{r\rho_2}(\vec k)$

$$P_{\rho_2\rho_1}(-\vec k)=[E_{\rho_1}(-\vec k)-E_{\rho_2}(\vec k)]\sum_r v_{r\rho_2}(\vec k)\,u_{r\rho_1}(-\vec k)=-[E_{\rho_2}(+\vec k)-E_{\rho_1}(-\vec k)]\sum_r u_{r\rho_2}(\vec k)\,v_{r\rho_1}(-\vec k)=-P_{\rho_1\rho_2}(\vec k)$$

$$P_{\rho_2\rho_1}(-\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k)\,b_{\rho_1}(-\vec k)=-P_{\rho_1\rho_2}(\vec k)\,b_{\rho_1}(-\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k) \Rightarrow \sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} P_{\rho_1\rho_2}(\vec k)\,b_{\rho_1}(-\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k)=0$$

$$\hat H'=\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k)[E_{\rho_1}(\vec k)+E_{\rho_2}(\vec k)]\sum_r u^*_{r\rho_1}(\vec k)\,u_{r\rho_2}(\vec k)+\frac12\underbrace{\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} b_{\rho_1}(-\vec k)\,b^+_{\rho_2}(-\vec k)[-E_{\rho_1}(-\vec k)-E_{\rho_2}(-\vec k)]\sum_r v_{r\rho_1}(-\vec k)\,v^*_{r\rho_2}(-\vec k)}_{\vec k\to-\vec k}=$$

$$=\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k)[E_{\rho_1}(\vec k)+E_{\rho_2}(\vec k)]\sum_r u^*_{r\rho_1}(\vec k)\,u_{r\rho_2}(\vec k)+\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} b_{\rho_1}(\vec k)\,b^+_{\rho_2}(\vec k)[-E_{\rho_1}(\vec k)-E_{\rho_2}(\vec k)]\sum_r v_{r\rho_1}(\vec k)\,v^*_{r\rho_2}(\vec k)= \quad \rho_1\rightleftarrows\rho_2$$

$$=\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k)[E_{\rho_1}(\vec k)+E_{\rho_2}(\vec k)]\sum_r u^*_{r\rho_1}(\vec k)\,u_{r\rho_2}(\vec k)-\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} b_{\rho_2}(\vec k)\,b^+_{\rho_1}(\vec k)[E_{\rho_2}(\vec k)+E_{\rho_1}(\vec k)]\sum_r v^*_{r\rho_1}(\vec k)\,v_{r\rho_2}(\vec k)=$$

$$=\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k)[E_{\rho_1}(\vec k)+E_{\rho_2}(\vec k)]\sum_r u^*_{r\rho_1}(\vec k)\,u_{r\rho_2}(\vec k)-\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2}[\delta_{\rho_1\rho_2}+b^+_{\rho_1}(\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k)][E_{\rho_1}(\vec k)+E_{\rho_2}(\vec k)]\sum_r v^*_{r\rho_1}(\vec k)\,v_{r\rho_2}(\vec k)=$$

$$=\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2}[E_{\rho_1}(\vec k)+E_{\rho_2}(\vec k)]\,b^+_{\rho_1}(\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k)\sum_r\left[u^*_{r\rho_1}(\vec k)\,u_{r\rho_2}(\vec k)-v^*_{r\rho_1}(\vec k)\,v_{r\rho_2}(\vec k)\right]-\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2}[E_{\rho_1}(\vec k)+E_{\rho_2}(\vec k)]\,\delta_{\rho_1\rho_2}\sum_r v^*_{r\rho_1}(\vec k)\,v_{r\rho_2}(\vec k)=$$

$$=\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho_1\rho_2}[E_{\rho_1}(\vec k)+E_{\rho_2}(\vec k)]\,b^+_{\rho_1}(\vec k)\,b_{\rho_2}(\vec k)\,\delta_{\rho_1\rho_2}-\frac12\sum_{\vec k}\sum_{\rho}2E_\rho(\vec k)\sum_r|v_{r\rho}(\vec k)|^2=\sum_{\vec k,\rho}E_\rho(\vec k)\,b^+_\rho(\vec k)\,b_\rho(\vec k)-\sum_{\vec k,\rho,r}E_\rho(\vec k)\,|v_{r\rho}(\vec k)|^2$$

$$\hat H=H_0-\sum_{\vec k,\rho,r}E_\rho(\vec k)\,|v_{r\rho}(\vec k)|^2+\sum_{\vec k,\rho}E_\rho(\vec k)\,b^+_\rho(\vec k)\,b_\rho(\vec k) \qquad \rho=1,2$$

Ovakvom smenom mi smo dijagonalizovali hamiltonijan a i energija osnovnog stanja dobila je popravku.

III D. Odredjivanje energija i transformacionih funkcija

Za odredjivanje energija koristimo već navedeni sistem jednačina:

$$E_\rho(\vec{k})\,u_{r\rho}(\vec{k}) = \sum_{l=1}^{2} B_{rl}(\vec{k})\,v_{l\rho}(\vec{k}) + A_{rl}(\vec{k})\,u_{l\rho}(\vec{k})$$

$$-E_\rho(\vec{k})\,v_{r\rho}(\vec{k}) = \sum_{l=1}^{2} B_{rl}(\vec{k})\,u_{l\rho}(\vec{k}) + A_{rl}(\vec{k})\,v_{l\rho}(\vec{k})$$

Indeks ρ pokazuje o kojem rešenju za energiju je reč i njega za sada ispuštamo. Takodje nećemo pisati ni zavisnost od $\vec{k}$.

$$E u_1 = B_{11} v_1 + A_{11} u_1 + B_{12} v_2 + A_{12} u_2 \qquad (A_{11}-E)u_1 + B_{11} v_1 + A_{12} u_2 + B_{12} v_2 = 0$$

$$E u_2 = B_{21} v_1 + A_{21} u_1 + B_{22} v_2 + A_{22} u_2 \qquad B_{11} u_1 + (A_{11}+E) v_1 + B_{12} u_2 + A_{12} v_2 = 0$$

$$-E v_1 = B_{11} u_1 + A_{11} v_1 + B_{12} u_2 + A_{12} v_2 \qquad A_{21} u_1 + B_{21} v_1 + (A_{22}-E) u_2 + B_{22} v_2 = 0$$

$$-E v_2 = B_{21} u_1 + A_{21} v_1 + B_{22} u_2 + A_{22} v_2 \qquad B_{21} u_1 + A_{21} v_1 + B_{22} u_2 + (A_{22}+E) v_2 = 0$$

Sistem smo napisali tako da su nam nepoznate energije na dijagonali.

Sada činimo važnu pretpostavku, koja je u teoriji dosta česta, a to je da su Furije-transformi matričnih elemenata realni. Znamo da je $A(\vec{k}) = A(-\vec{k}) = A^*(\vec{k})$ a sada pretpostavljamo da je i $B_{12}(\vec{k}) = B_{12}^*(\vec{k})$ a kao posledicu imamo $B_{12}^*(\vec{k}) = B_{21}(\vec{k})$, znači $B_{12}(\vec{k}) = B_{21}(\vec{k}) = B(\vec{k})$. Dakle smatramo da postoje samo 2 matrična elementa interakcije: $A(\vec{k})$ koji odgovara interakciji molekula istog tipa i $B(\vec{k})$ koji odgovara interakciji molekula različitog tipa. U aproksimaciji najbližih suseda se zadržava samo $B(\vec{k})$.

Ovaj sistem je sistem homogenih linearnih jednačina po nepoznatim u i v. Da bi on imao netrivijalna rešenja, mora njegova determinanta biti jednaka nuli.

$$\begin{vmatrix} \Delta+A-E & A & B & B \\ A & \Delta+A+E & B & B \\ B & B & \Delta+A-E & A \\ B & B & A & \Delta+A+E \end{vmatrix} = 0$$

Ovo je jednačina IV stepena po E.

Oduzmimo II vrstu od I, i IV od III. Time smo pojednostavili determinantu.

$$\begin{vmatrix} \Delta - E & A-\Delta-E & 0 & 0 \\ A & \Delta+A+E & B & B \\ 0 & 0 & \Delta-E & A-\Delta-E \\ B & B & A & A+\Delta+E \end{vmatrix} = 0$$

Kada se determinanta razvije, dobijamo sledeću jednačinu:

$$E^4 - 2\Delta^2E^2 - 4\Delta A E^2 + 4\Delta^3 A + 4A^2\Delta^2 - 4B^2\Delta^2 = (E^2-\Delta^2)^2 - 4\Delta A(E^2-\Delta^2) + 4\Delta^2(A^2-B^2) = 0$$

$$E^2 - \Delta^2 = 2\Delta A \pm \sqrt{4A^2\Delta^2 - 4\Delta^2(A^2-B^2)} = 2A\Delta \pm 2B\Delta \qquad E^2-\Delta^2 = 2\Delta(A\pm B)$$

$$E^2 = \Delta^2 + 2\Delta(A\pm B) \qquad E_{1,2} = \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta(A\pm B)} \qquad E_{1,2} = \Delta\sqrt{1+\frac{2(A\pm B)}{\Delta}}$$

Pošto su ove energije, energije pobuđenja molekula, negativna rešenja ne uzimamo u obzir. Približno rešenje tražimo tako da razvijemo koren $\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \frac{1}{16}x^3 + \dots$ za $x \ll 1$.

U našem slučaju ovo je moguće jer je $\frac{A\pm B}{\Delta} \ll 1$. Nas će zanimati popravka na energiju u prvoj aproksimaciji ali zbog određivanja transformacionih funkcija idemo do $\underbrace{\text{}}_{}$malih veličina drugog reda.

$$E_1 \simeq \Delta\left[1 + \frac{A+B}{\Delta} - \frac{1}{2}\frac{(A+B)^2}{\Delta^2} + \frac{1}{2}\frac{(A+B)^3}{\Delta^3}\right] \qquad E_2 \simeq \Delta\left[1 + \frac{A-B}{\Delta} - \frac{1}{2}\frac{(A-B)^2}{\Delta^2} + \frac{1}{2}\frac{(A-B)^3}{\Delta^3}\right]$$

$$E_1 \simeq \Delta + A + B - \frac{(A+B)^2}{2\Delta} + \frac{(A+B)^3}{2\Delta^2} \qquad E_2 \simeq \Delta + A - B - \frac{(A-B)^2}{2\Delta} + \frac{(A-B)^3}{2\Delta^2}$$

Uvodimo 2 male veličine prvog reda $\varepsilon_1 = \frac{A+B}{2\Delta}$ i $\varepsilon_2 = \frac{A-B}{2\Delta}$. (Mi ustvari ne možemo tačno da ocenimo red veličine ε_2, jer ne znamo odnos veličina $A : B$, pa ćemo je smatrati veličinom prvog reda)

$$E_1 \simeq \Delta + A + B - (A+B)\varepsilon_1 + 2(A+B)\varepsilon_1^2 = \Delta + (A+B)(1-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2) = E_{HL_1} + (A+B)(-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2)$$

$$E_2 \simeq \Delta + A - B - (A-B)\varepsilon_2 + 2(A-B)\varepsilon_2^2 = \Delta + (A-B)(1-\varepsilon_2+2\varepsilon_2^2) = E_{HL_2} + (A-B)(-\varepsilon_2+2\varepsilon_2^2)$$

Vidimo da ovaj metod daje u energiju u Hajtler-Londonovoj aproksimaciji popravku reda veličine ε.

Za određivanje transformacionih funkcija koristimo već dati sistem, ali nam on nije dovoljan pa moramo koristiti i uslov normiranja: $\sum_{\vec q} |U_{\vec q}|^2 - |V_{\vec q}|^2 = 1$. Kako smo pretpostavili da su Furije-transformi realni, a transformacione funkcije moraju biti izražene preko njih i energija, mi ćemo tražiti realne transformacione funkcije. Dakle $\sum_{\vec q}(U_{\vec q}^2 - V_{\vec q}^2) = 1$. Standardni postupak bi bio rešavanjem ovog sistema jednačina preko determinanti, ali je ovaj postupak veoma dug.

Mi ćemo pokušati da to izbegnemo. Podelimo ceo sistem sa u_1 $(u_1 \neq 0)$ i uvedimo oznake:
$\alpha = \frac{v_1}{u_1}$ $\beta = \frac{u_2}{u_1}$ $\gamma = \frac{v_2}{u_1}$. Tada imamo:

$$\mathrm{I} \quad A + \Delta - E + A\alpha + B\beta + B\gamma = 0 \qquad u_1^2(1 - \alpha^2 + \beta^2 - \gamma^2) = 1$$

$$\mathrm{II} \quad A + (A+\Delta+E)\alpha + B\beta + B\gamma = 0$$

$$\mathrm{III} \quad B + B\alpha + (A+\Delta-E)\beta + A\gamma = 0 \qquad u_1^2 = \frac{1}{1+\beta^2-\alpha^2-\gamma^2}$$

$$\mathrm{IV} \quad B + B\alpha + A\beta + (A+\Delta+E)\gamma = 0$$

Iz I i II sledi $A + \Delta - E + A\alpha = A + (A+\Delta+E)\alpha \qquad \Delta - E = (\Delta+E)\alpha \qquad \alpha = \frac{\Delta-E}{\Delta+E}$

Iz III i IV sledi $(A+\Delta-E)\beta + A\gamma = A\beta + (A+\Delta+E)\gamma \qquad (\Delta-E)\beta = (\Delta+E)\gamma \qquad \gamma = \frac{\Delta-E}{\Delta+E}\beta \qquad \gamma = \alpha\beta$

Sada u IV izrazimo sve preko β, i eliminišemo α:

$$B\left(1 + \frac{\Delta-E}{\Delta+E}\right) + A\beta + (A+\Delta+E)\frac{(\Delta-E)}{\Delta+E}\beta = 0 \qquad B(\Delta+\cancel{E}+\Delta-\cancel{E}) + \beta\left[A(\Delta+E)+(A+\Delta+E)(\Delta-E)\right] = 0$$

$$2\Delta B + \beta(A\Delta + \cancel{AE} + A\Delta - \cancel{AE} + \Delta^2 - \cancel{\Delta E} + \cancel{E\Delta} - E^2) = 0 \qquad 2\Delta B + \beta(2A\Delta + \Delta^2 - E^2) = 0$$

$$\beta = \frac{2\Delta B}{E^2 - \Delta^2 - 2A\Delta}$$

Sada indeksima 1 i 2 označavamo veličine koje odgovaraju energijama E_1 i E_2.

$$\beta_1 = \frac{2\Delta B}{E_1^2 - \Delta^2 - 2A\Delta} = \frac{2\Delta B}{\cancel{2\Delta A} + 2\Delta B - \cancel{2\Delta A}} = 1 \qquad \beta_2 = \frac{2\Delta B}{\cancel{2\Delta A} - 2\Delta B - \cancel{2\Delta A}} = -1$$

$$\gamma_1 = \alpha_1\beta_1 = \alpha_1 \qquad \gamma_2 = \alpha_2\beta_2 = -\alpha_2 \Rightarrow v_{11} = v_{21} \quad v_{22} = -v_{12} \quad u_{11} = u_{21} \quad u_{22} = -u_{12}$$

$$\alpha_1 = \frac{\Delta - E_1}{\Delta + E_1} = \frac{\Delta - \left[\Delta + A + B - (A+B)\varepsilon_1 + 2(A+B)\varepsilon_1^2\right]}{\Delta + \Delta + A + B - (A+B)\varepsilon_1 + 2(A+B)\varepsilon_1^2} = -\frac{(A+B)(1-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2)}{2\Delta + (A+B)(1-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2)} = -\frac{A+B}{2\Delta}\,\frac{1-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2}{1+\varepsilon_1(1-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2)} =$$

$$= -\varepsilon_1\frac{1-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2}{1+(\varepsilon_1-\varepsilon_1^2)}$$

Ovaj izraz razvijamo kao $\frac{1}{1+x} \simeq 1 - x + x^2$. Transformacione funkcije razvijamo do veličina reda ε^2, jer u daljem računu veličina $\Delta \cdot \varepsilon^2$ daje popravku reda ε u energiju

$$\alpha_1 = (-\varepsilon_1 + \varepsilon_1^2)(1 - \varepsilon_1 + \varepsilon_1^2 + \varepsilon_1^2) = (-\varepsilon_1 + \varepsilon_1^2 + \varepsilon_1^2) = -\varepsilon_1 + 2\varepsilon_1^2 \qquad \alpha_1 = -\varepsilon_1 + 2\varepsilon_1^2$$

Pri određivanju α_2, postupak je isti samo treba zameniti $A+B$ za $A-B$ i ε_1 sa ε_2

$$\alpha_2 = -\varepsilon_2 + 2\varepsilon_2^2 \qquad \gamma_1 = \alpha_1\beta_1 = \alpha_1 = -\varepsilon_1 + 2\varepsilon_1^2 \qquad \gamma_2 = -\alpha_2 \qquad \gamma_2 = \varepsilon_2 - 2\varepsilon_2^2$$

$$u_{11}^2 = \frac{1}{1+\beta_1^2-\alpha_1^2-\gamma_1^2} = \frac{1}{1+1-\varepsilon_1^2-\varepsilon_1^2} = \frac{1}{2}\,\frac{1}{1-\varepsilon_1^2} = \frac{1}{2}(1+\varepsilon_1^2) \qquad u_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1+\varepsilon_1^2} \qquad u_{11} \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{1}{2}\varepsilon_1^2\right)$$

$$v_{11} = \alpha_1 u_{11} = (-\varepsilon_1 + 2\varepsilon_1^2)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{1}{2}\varepsilon_1^2\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\varepsilon_1 + 2\varepsilon_1^2) \qquad u_{21} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{1}{2}\varepsilon_1^2\right) \qquad v_{21} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\varepsilon_1 + 2\varepsilon_1^2)$$

$$u_{12}^2 = \frac{1}{1+\beta_2^2-\alpha_2^2-\gamma_2^2} = \frac{1}{1+1-\varepsilon_2^2-\varepsilon_2^2} = \frac{1}{2}\,\frac{1}{1-\varepsilon_2^2} = \frac{1}{2}(1+\varepsilon_2^2) \qquad u_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + \frac{1}{2}\varepsilon_2^2\right)$$

$$v_{12} = \alpha_2 u_{12} = (-\varepsilon_2 + 2\varepsilon_2^2)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{1}{2}\varepsilon_2^2\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\varepsilon_2 + 2\varepsilon_2^2) \qquad u_{22} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{1}{2}\varepsilon_2^2\right) \qquad v_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varepsilon_2 - 2\varepsilon_2^2)$$

Kada smo odredili transformacione funkcije možemo naći i popravku na energiju osnovnog stanja.

$$\sum_{\vec{k},S.}\sum_{r=1}^{2} E_p(\vec{k})\, v_{rp}^2(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}}\sum_{p=1}^{2} E_p(\vec{k})\left[v_{1p}^2(\vec{k}) + v_{2p}^2(\vec{k})\right] = \sum_{\vec{k}}\left\{E_1(\vec{k})\left[v_{11}^2(\vec{k}) + v_{21}^2(\vec{k})\right] + E_2(\vec{k})\left[v_{12}^2(\vec{k}) + v_{22}^2(\vec{k})\right]\right\} =$$

$$= \sum_{\vec{k}}\left\{\left[\Delta + (A+B)(1-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2)\right]\left[\tfrac{1}{2}\varepsilon_1^2 + \tfrac{1}{2}\varepsilon_1^2\right] + \left[\Delta + (A-B)(1-\varepsilon_2+2\varepsilon_2^2)\right]\left[\tfrac{1}{2}\varepsilon_2^2 + \tfrac{1}{2}\varepsilon_2^2\right]\right\} =$$

$$= \sum_{\vec{k}}\left[\Delta\varepsilon_1^2 + (A+B)\varepsilon_1^2 + \Delta\varepsilon_2^2 + (A-B)\varepsilon_1^2\right]$$ (zanima nas samo popravka linearna po ε)

Ako poredimo sa A ili B, ε_1 i ε_2 su male veličine prvog reda, a Δ je velika veličina prvog reda, što znači da važe sledeći odnosi: $\Delta\cdot\Delta \sim \Delta$ $\quad \Delta\cdot\varepsilon \sim A$ $\quad \Delta\varepsilon^2 \sim \varepsilon$ $\quad A\varepsilon \sim \varepsilon$

Stoga ovde zanemarujemo i $A\varepsilon^2 \sim \varepsilon^2$. Tada je ukupna popravka

$$H_0' = \Delta\sum_{\vec{k}} \varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 = \Delta\sum_{\vec{k}}\frac{(A+B)^2 + (A-B)^2}{4\Delta^2} = \sum_{\vec{k}}\frac{A^2 + \cancel{2AB} + B^2 + A^2 - \cancel{2AB} + B^2}{4\Delta} = \sum_{\vec{k}}\frac{A^2+B^2}{2\Delta}$$

Rezimirajmo dosadašnje rezultate:

$$\hat{H} = H_0 + \sum_{\vec{k}}\frac{A^2(\vec{k}) + B^2(\vec{k})}{2\Delta} + \sum_{\vec{k}}\sum_{p=1}^{2} E_p(\vec{k})\, b_p^+(\vec{k})\, b_p(\vec{k})$$

$$E_1 = \Delta + (A+B)(1-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2) \qquad \varepsilon_1 = \frac{A+B}{2\Delta}$$

$$E_2 = \Delta + (A-B)(1-\varepsilon_2+2\varepsilon_2^2) \qquad \varepsilon_2 = \frac{A-B}{2\Delta}$$

$$u_{11} = u_{21} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\tfrac{1}{2}\varepsilon_1^2\right) \quad v_{11} = v_{21} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\varepsilon_1 + 2\varepsilon_1^2\right) \quad u_{12} = -u_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\tfrac{1}{2}\varepsilon_2^2\right) \quad v_{12} = -v_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\varepsilon_2 + 2\varepsilon_2^2\right)$$

IV URAČUNAVANJE DOPRINOSA NELINEARNIH EFEKATA POMOĆU TAČNE REPREZENTACIJE PAULI-OPERATORA PREKO BOZE-OPERATORA

IV A. Tačna reprezentacija Pauli-operatora preko Boze-operatora i njena prva aproksimacija

Pokušajmo da Pauli-operatore izrazimo preko Boze-operatora u vidu jednog posebnog operatora: $P_s = \sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu}}\, B_s$ $\quad P_s^+ = B_s^+ \sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu}}$ pri čemu su a_ν realni koeficienti. Mi zahtevamo da važi $P_s P_s^+ + P_s^+ P_s = 1$, ako važi $B_s B_s^+ - B_s^+ B_s = 1$.

Ispitajmo operator $B_s^{+\nu} B_s^{\nu}$ i njegovo dejstvo na talasnu funkciju $|N_s\rangle$, gde je N_s okupacioni broj, koji pokazuje koliko se bozona tipa s nalazi u odredjenom stanju.

$$B_s^{+\nu} B_s^{\nu} |N_s\rangle = B_s^{+\nu} B_s^{\nu-1} \sqrt{N_s}\, |N_s-1\rangle = B_s^{+\nu} B_s^{\nu-2} \sqrt{N_s(N_s-1)}\, |N_s-2\rangle = \ldots = B_s^{+\nu} \sqrt{N_s(N_s-1)\ldots(N_s-\nu+1)}\, |N_s-\nu\rangle =$$

$$= \sqrt{N_s(N_s-1)\ldots(N_s-\nu+1)}\, B_s^{+\nu} |N_s-\nu\rangle = \sqrt{N_s(N_s-1)\ldots(N_s-\nu+1)} \cdot \sqrt{N_s-\nu+1}\, B_s^{+\nu-1} |N_s-\nu+1\rangle = \ldots =$$

$$= N_s(N_s-1)\ldots\ldots(N_s-\nu+1)|N_s\rangle \Rightarrow B_s^{+\nu} B_s^{\nu} = \hat{N}_s(\hat{N}_s-1)\ldots\ldots(\hat{N}_s-\nu+1)$$

Odatle je $B_s^{+\nu+1} B_s^{\nu+1} |N_s\rangle = N_s(N_s-1)\ldots\ldots(N_s-\nu+1)(N_s-\nu)|N_s\rangle = N_s N_s \ldots\ldots (N_s-\nu+1)|N_s\rangle - \nu N_s \ldots (N_s-\nu+1)|N_s\rangle$

$$= (N_s-\nu) B_s^{+\nu} B_s^{\nu} |N_s\rangle = (\hat{N}_s-\nu) B_s^{+\nu} B_s^{\nu} |N_s\rangle$$

$$P_s P_s^+ = \sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu} B_s B_s^+}\sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu}} = \sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu} (1 + B_s^+ B_s)}\sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu}} \qquad B_s^+ B_s = \hat{N}_s$$

Ovde pri množenju nismo pisali različite indekse, jer ako red konvergira, onda se množenjem 2 korena dobija samo jedan red. Primetimo da operator pod sumom ima jednu osobinu koja je iz gornjeg izraza očigledna, a to je da je on nula za svako $N_s < \nu$. Ovo je bitno, jer znači svaki sledeći član reda je ravan nuli na sve širem podprostoru bozonskih stanja, pa je „ostatak" bozonskog prostora mali parametar po kojem možemo koren razviti. Kako je $B_s^{+\nu} B_s^{\nu}$ analitička funkcija samo od $\hat{N}_s$, možemo $1+\hat{N}_s$ „provući" kroz prvi koren, jer operator komutira sa svakim svojim stepenom. Znači:

$$P_s P_s^+ = \sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu} (1+\hat{N}_s)}\sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu}} = (1+\hat{N}_s)\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu (1+\hat{N}_s) B_s^{+\nu} B_s^{\nu}$$

$$P_s^+ P_s = B_s^+ \sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu}}\sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu}}\, B_s = B_s^+ \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu} B_s = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu B_s^{+\nu+1} B_s^{\nu+1}$$

$$1 = P_s P_s^+ + P_s^+ P_s = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \left[B_s^{+\nu} B_s^{\nu} + \hat{N}_s B_s^{+\nu} B_s^{\nu} + B_s^{+\nu+1} B_s^{\nu+1} + \nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu} - \nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu} \right]$$

(Dodali smo i oduzeli $\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu}$.)

$$1 = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \left[B_s^{+\nu+1} B_s^{\nu+1} + (\hat{N}_s - \nu) B_s^{+\nu} B_s^{\nu} + (\nu+1) B_s^{+\nu} B_s^{\nu} \right] = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \left[B_s^{+\nu+1} B_s^{\nu+1} + B_s^{+\nu+1} B_s^{\nu+1} + (\nu+1) B_s^{+\nu} B_s^{\nu} \right] =$$

$$= 2 \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \underset{\nu+1=\nu'}{B_s^{+\nu+1} B_s^{\nu+1}} + \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu (\nu+1) B_s^{+\nu} B_s^{\nu} = 2 \sum_{\nu=1}^{\infty} a_{\nu-1} B_s^{+\nu} B_s^{\nu} + \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu (\nu+1) B_s^{+\nu} B_s^{\nu} = a_0 + \sum_{\nu=1}^{\infty} \left[2a_{\nu-1} + a_\nu (\nu+1) \right] B_s^{+\nu} B_s^{\nu}$$

$a_0 = 1 \qquad 2a_{\nu-1} + a_\nu(\nu+1) = 0 \qquad a_\nu = -\frac{2}{\nu+1} a_{\nu-1} \qquad a_1 = -\frac{2}{1+1} a_0 = -\frac{2}{2} \qquad a_2 = -\frac{2}{3} a_1 = \frac{2 \cdot 2}{3 \cdot 2} \qquad a_3 = \frac{2}{4} a_2 = -\frac{2^3}{4 \cdot 3 \cdot 2}$

$$a_\nu = \frac{(-2)^\nu}{(\nu+1)!} \qquad P_s = \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(\nu+1)!} B_s^{+\nu} B_s^{\nu} \right]^{1/2} B_s \qquad P_s^+ = B_s^+ \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(\nu+1)!} B_s^{+\nu} B_s^{\nu} \right]^{1/2}$$

Može se pokazati * da u ovoj reprezentaciji operator $\hat{L}_s = P_s^+ P_s$ uzima samo vrednosti 0 ili 1, dakle nema „nefizičkih" stanja.

Pokušajmo još ovaj razvoj da predstavimo preko reda.

$$\sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(\nu+1)!} B_s^{+\nu} B_s^{\nu}} = \sqrt{1 - B_s^+ B_s + \frac{2}{3} B_s^{+2} B_s^{2} + \dots} = \sqrt{1 - \hat{N}_s + \frac{2}{3} \hat{N}_s (\hat{N}_s - 1) + \dots} = \sum_{\nu=0}^{\infty} b_\nu B_s^{+\nu} B_s^{\nu} = b_0 + b_1 \hat{N}_s + b_2 \hat{N}_s (\hat{N}_s - 1) + \dots$$

Neka je $N_s = 0$. Tada je $b_0 = 1$. Za $N_s = 1$ $\quad 0 = 1 + b_1 \quad b_1 = -1$

za $N_s = 2$ $\quad \sqrt{1 - 2 + \frac{2}{3} \cdot 2} = 1 - 1 \cdot 2 + 2a_2 \qquad \frac{1}{\sqrt{3}} = -1 + 2a_2 \qquad a_2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$

U prvoj aproksimaciji $\sqrt{\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^\nu}{(\nu+1)!} B_s^{+\nu} B_s^{\nu}} = 1 - B_s^+ B_s$

$P_s = B_s - B_s^+ B_s B_s \qquad P_s^+ = B_s^+ - B_s^+ B_s^+ B_s$

* Ovo izvodjenje se u potpunosti oslanja na citirani rad Agranoviča i Tošića objavljen u ŽETF, dok su rigorozni matematički dokazi dati u članku B. S. Tošića i J. B. Vujaklije " Proof of Hermiticity of the Pauli Hamiltonian in Exact Bose Representation" objavljenom u "Phys. Stat. Sol." (b) 45 (1971)

IV B. Hamiltonijan u tačnoj reprezentaciji Pauli-operatora preko Boze-operatora

U svim prethodnim aproksimacijama mi smo nelinearne članove odbacivali. Sada ćemo iskoristiti tačnu reprezentaciju Pauli-operatora preko Boze-operatora, da utvrdimo koliki doprinos energiji u prvoj aproksimaciji daju nelinearni članovi. Polazimo od hamiltonijana koji je dat na kraju II glave. Mi smo kasnije uveli pretpostavku da su matrični elementi interakcije koji odgovaraju jednakim rastojanjima, jednaki. Obeležimo ih sa $A_{\vec n 1 \vec m 1}$ i $B_{\vec n 1 \vec m 2}$. Svuda gde imamo operatore poredjane tako da prvo stoji operator sa indeksom $\vec n 2$ pa iza njega sa $\vec m 1$, vršimo prelaz sa $\vec n$ na $\vec m$ i obratno. Na kraju uvedimo sledeće oznake:

$$V_{\vec n 1 \vec m 1}(0000)+V_{\vec n 1 \vec m 1}(\ell\ell\ell\ell)-2V_{\vec n 1 \vec m 1}(\ell 0 0 \ell)=V_{\vec n 2 \vec m 2}(0000)+V_{\vec n 2 \vec m 2}(\ell\ell\ell\ell)-2V_{\vec n 2 \vec m 2}(\ell 0 0 \ell)=C_{\vec n 1 \vec m 1}$$

$$V_{\vec n 1 \vec m 2}(0000)+V_{\vec n 1 \vec m 2}(\ell\ell\ell\ell)-2V_{\vec n 1 \vec m 2}(\ell 0 0 \ell)=V_{\vec n 2 \vec m 1}(0000)+V_{\vec n 2 \vec m 1}(\ell\ell\ell\ell)-2V_{\vec n 2 \vec m 1}(\ell 0 0 \ell)=D_{\vec n 1 \vec m 2}$$

Tada hamiltonijan postaje:

$$\begin{aligned}\hat H = {} & H_0+\Delta\sum_{\vec n}P^+_{\vec n 1}P_{\vec n 1}+\Delta\sum_{\vec n}P^+_{\vec n 2}P_{\vec n 2}+\sum_{\vec n \vec m}{}' A_{\vec n 1 \vec m 1}\left(P^+_{\vec n 1}P_{\vec m 1}+P^+_{\vec n 2}P_{\vec m 2}\right)+\sum_{\vec n \vec m}{}' B_{\vec n 1 \vec m 2}\left(P^+_{\vec n 1}P_{\vec m 2}+P^+_{\vec m 2}P_{\vec n 1}\right)+\\ & +\frac{1}{2}\sum_{\vec n \vec m}{}' A_{\vec n 1 \vec m 1}\left(P_{\vec n 1}P_{\vec m 1}+P^+_{\vec n 1}P^+_{\vec m 1}+P_{\vec n 2}P_{\vec m 2}+P^+_{\vec n 2}P^+_{\vec m 2}\right)+\sum_{\vec n \vec m}{}' B_{\vec n 1 \vec m 2}\left(P^+_{\vec n 1}P^+_{\vec m 2}+P_{\vec n 1}P_{\vec m 2}\right)+\sum_{\vec n \vec m} D_{\vec n 1 \vec m 2}P^+_{\vec n 1}P^+_{\vec m 2}P_{\vec m 2}P_{\vec n 1}+\\ & +\frac{1}{2}\sum_{\vec n \vec m}{}' C_{\vec n 1 \vec m 1}\left(P^+_{\vec n 1}P^+_{\vec m 1}P_{\vec m 1}P_{\vec n 1}+P^+_{\vec n 2}P^+_{\vec m 2}P_{\vec m 2}P_{\vec n 2}\right)\end{aligned}$$

Sada u ovaj hamiltonijan ulazimo sa aproksimativnim izrazom za Pauli-operatore. Članovi koji su linearni po Boze-operatorima daće iz kvadratnog dela hamiltonijan približne druge kvantizacije, a iz nelinearnog dela dinamičke članove IV reda. Pored toga pojaviće se i kinematički članovi IV reda. Naročitu pažnju treba obratiti na članove sa istim indeksima jer kod njih moramo uzeti u obzir i normalizaciju člana VI reda.

$$\begin{aligned}\sum_{\vec n}P^+_{\vec n 1}P_{\vec n 1} & =\sum_{\vec n}\left(B^+_{\vec n 1}-B^+_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}\right)\left(B_{\vec n 1}-B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}B_{\vec n 1}\right)=\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}-\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}B_{\vec n 1}-\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}B_{\vec n 1}+\\ & +\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}B_{\vec n 1}=\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}-2\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}B_{\vec n 1}+\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}\left(1+B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}\right)B_{\vec n 1}B_{\vec n 1}=\\ & =\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}-\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}B_{\vec n 1}+\sum_{\vec n}B^+_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}B^+_{\vec n 1}B_{\vec n 1}B_{\vec n 1}B_{\vec n 1}\rightarrow\end{aligned}$$

ovaj član u ovoj aproksimaciji zanemarujemo

$$P^+_{\vec n} P_{\vec m} = (B^+_{\vec n} - B^+_{\vec n} B^+_{\vec n} B_{\vec n})(B_{\vec m} - B^+_{\vec m} B_{\vec m} B_{\vec m}) = B^+_{\vec n} B_{\vec m} - B^+_{\vec n} B^+_{\vec m} B_{\vec m} B_{\vec m} - B^+_{\vec n} B^+_{\vec n} B_{\vec n} B_{\vec m} + \ldots$$

Ovde normalizacija člana VI reda ne daje novi član IV reda zbog $\vec m \neq \vec n$

$$P_{\vec n} P_{\vec m} = (B_{\vec n} - B^+_{\vec n} B_{\vec n} B_{\vec n})(B_{\vec m} - B^+_{\vec m} B_{\vec m} B_{\vec m}) = B_{\vec n} B_{\vec m} - B^+_{\vec n} B_{\vec n} B_{\vec n} B_{\vec m} - B^+_{\vec m} B_{\vec n} B_{\vec m} B_{\vec m}$$

$$P^+_{\vec n} P^+_{\vec m} = (B^+_{\vec n} - B^+_{\vec n} B^+_{\vec n} B_{\vec n})(B^+_{\vec m} - B^+_{\vec m} B^+_{\vec m} B_{\vec m}) = B^+_{\vec n} B^+_{\vec m} - B^+_{\vec n} B^+_{\vec m} B^+_{\vec m} B_{\vec m} - B^+_{\vec n} B^+_{\vec n} B^+_{\vec m} B_{\vec n}$$

Konačno dobijamo hamiltonijan:

$$\hat H = \hat H_{POK} - \Delta \sum_{\vec n} B^+_{\vec n 1} B^+_{\vec n 1} B_{\vec n 1} B_{\vec n 1} - \Delta \sum_{\vec n} B^+_{\vec n 2} B^+_{\vec n 2} B_{\vec n 2} B_{\vec n 2} - \sum_{\vec n \vec m l}{}' A_{\vec n 1 \vec m 1} (B^+_{\vec n l} B^+_{\vec n l} B_{\vec m l} B_{\vec m l} + B^+_{\vec m l} B^+_{\vec m l} B_{\vec n l} B_{\vec n l}) -$$

$$- \sum_{\vec n \vec m}{}' B_{\vec n 1 \vec m 2} (B^+_{\vec n 1} B^+_{\vec m 2} B_{\vec m 2} B_{\vec m 2} + B^+_{\vec n 1} B^+_{\vec n 1} B_{\vec n 1} B_{\vec m 2} + B^+_{\vec m 2} B^+_{\vec n 1} B_{\vec n 1} B_{\vec n 1} + B^+_{\vec m 2} B^+_{\vec m 2} B_{\vec m 2} B_{\vec n 1}) -$$

$$- \sum_{\vec n \vec m l}{}' A_{\vec n 1 \vec m 1} (B^+_{\vec n l} B_{\vec n l} B_{\vec n l} B_{\vec m l} + B^+_{\vec n l} B^+_{\vec m l} B^+_{\vec m l} B_{\vec m l}) + \frac{1}{2} \sum_{\vec n \vec m l}{}' C_{\vec n 1 \vec m 1} B^+_{\vec n l} B^+_{\vec m l} B_{\vec m l} B_{\vec n l} + \sum_{\vec n \vec m} D_{\vec n 1 \vec m 2} B^+_{\vec n 1} B^+_{\vec m 2} B_{\vec m 2} B_{\vec n 1} -$$

$$- \sum_{\vec n \vec m} B_{\vec n 1 \vec m 2} (B^+_{\vec m 2} B_{\vec m 2} B_{\vec m 2} B_{\vec n 1} + B^+_{\vec n 1} B_{\vec n 1} B_{\vec n 1} B_{\vec m 2} + B^+_{\vec n 1} B^+_{\vec m 2} B^+_{\vec m 2} B_{\vec m 2} + B^+_{\vec n 1} B^+_{\vec n 1} B^+_{\vec m 2} B_{\vec n 1})$$

Sada vršimo Furije-transformaciju uz važenje cikličkih uslova:

$$B^+_{\vec n 1} = \frac{1}{\sqrt N} \sum_{\vec k} B^+_1(\vec k) e^{-i\vec k(\vec n + \vec r_1)} \qquad B_{\vec m 2} = \frac{1}{\sqrt N} \sum_{\vec k} B_2(\vec k) e^{i\vec k(\vec m + \vec r_2)}$$

$$\Delta \sum_{\vec n l} B^+_{\vec n l} B^+_{\vec n l} B_{\vec n l} B_{\vec n l} = \frac{\Delta}{N^2} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \vec k_4 l} B^+_l(\vec k_1) B^+_l(\vec k_2) B_l(\vec k_3) B_l(\vec k_4) \sum_{\vec n} e^{-i\vec k_1(\vec n + \vec r_l)} e^{-i\vec k_2(\vec n + \vec r_l)} e^{i\vec k_3(\vec n + \vec r_l)} e^{i\vec k_4(\vec n + \vec r_l)} =$$

$$= \frac{\Delta}{N^2} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \vec k_4 l} B^+_l(\vec k_1) B^+_l(\vec k_2) B_l(\vec k_3) B_l(\vec k_4) e^{i(-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4)\vec r_l} \sum_{\vec n} e^{i(-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4)\vec n} = \frac{\Delta}{N^2} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \vec k_4 l} B^+_l(\vec k_1) B^+_l(\vec k_2) B_l(\vec k_3) B_l(\vec k_4) e^{i(-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4)\vec r_l} \times$$

$$\times N \delta_{-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4, 0}$$

$$(\delta_{-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4, 0} = \delta_{\vec k_1 + \vec k_2 - \vec k_3, \vec k_4}) = \frac{\Delta}{N} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 l} B^+_l(\vec k_1) B^+_l(\vec k_2) B_l(\vec k_3) B_l(\vec k_1 + \vec k_2 - \vec k_3)$$

$$\sum_{\vec n \vec m} A_{\vec n 1 \vec m 1} B^+_{\vec n 1} B^+_{\vec n 1} B_{\vec m 1} B_{\vec m 1} = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \vec k_4} B^+_1(\vec k_1) B^+_1(\vec k_2) B_1(\vec k_3) B_1(\vec k_4) e^{-i(\vec k_1 + \vec k_2 - \vec k_3 - \vec k_4)} \sum_{\vec n \vec m} A_{\vec n 1 \vec m 1} e^{-i\vec k_1 \vec n - i\vec k_2 \vec m + i\vec k_3 \vec m + i\vec k_4 \vec m} =$$

$$\vec n - \vec m = \vec s$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \vec k_4} B^+_1(\vec k_1) B^+_1(\vec k_2) B_1(\vec k_3) B_1(\vec k_4) e^{i(-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4)} \sum_{\vec s} A_{\vec s} e^{-i\vec k \vec s} \sum_{\vec m} e^{i(-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4)\vec m} \leftarrow N \delta_{\vec k_4, \vec k_1 + \vec k_2 - \vec k_3} =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3} A(\vec k_1) B^+_1(\vec k_1) B^+_1(\vec k_2) B_1(\vec k_3) B_1(\vec k_1 + \vec k_2 - \vec k_3) \qquad A(\vec k) = \sum_{\vec s} A_{\vec s} e^{-i\vec k \vec s} = \sum_{\vec m} A_{\vec n - \vec m} e^{-i\vec k \vec m}$$

$$\sum_{\vec n \vec m} C_{\vec n 1 \vec m 1} B^+_{\vec n 1} B^+_{\vec m 1} B_{\vec m 1} B_{\vec n 1} = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \vec k_4} B^+_1(\vec k_1) B^+_1(\vec k_2) B_1(\vec k_3) B_1(\vec k_4) e^{i(-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4)\vec r_1} \sum_{\vec n \vec m} C_{\vec n 1 \vec m 1} e^{-i\vec k_1 \vec n - i\vec k_2 \vec m + i\vec k_3 \vec n + i\vec k_4 \vec m} =$$

$$\vec n - \vec m = \vec s$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \vec k_4} B^+_1(\vec k_1) B^+_1(\vec k_2) B_1(\vec k_3) B_1(\vec k_4) e^{i(-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4)\vec r_1} \sum_{\vec s} C_{\vec s} e^{i(-\vec k_1 + \vec k_3)\vec s} \sum_{\vec m} e^{i(-\vec k_1 - \vec k_2 + \vec k_3 + \vec k_4)\vec m} = \frac{1}{N} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3} B^+_1(\vec k_1) B^+_1(\vec k_2) B_1(\vec k_3) B_1(\vec k_1 + \vec k_2 - \vec k_3) C(\vec k_1 - \vec k_3)$$

$$\sum_{\vec n \vec m} A_{\vec n 1 \vec m 1} B^+_{\vec m 1} B^+_{\vec m 1} B_{\vec n 1} B_{\vec n 1} = \frac{1}{N} \sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3} A(\vec k_3) B^+_1(\vec k_1) B^+_1(\vec k_2) B_1(\vec k_3) B_1(\vec k_1 + \vec k_2 - \vec k_3)$$

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}\sum_{\ell=1}^{2}\left[-\Delta - A(\vec{k}_1) - A(\vec{k}_2) + \frac{1}{2}C(\vec{k}_1-\vec{k}_3)\right]B_\ell^+(\vec{k}_1)B_\ell^+(\vec{k}_2)B_\ell(\vec{k}_3)B_\ell(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} A_{\vec{n}\vec{m}1} B^+_{\vec{n}1} B^+_{\vec{m}1} B^+_{\vec{m}1} B_{\vec{m}1} = \frac{1}{N^2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4} B_1^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1^+(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_4)e^{-i(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3-\vec{k}_4)\vec{r}_1}\sum_{\vec{n}\vec{m}} A_{\vec{n}\vec{m}1} e^{-i\vec{k}_1\vec{n}-i\vec{k}_2\vec{m}-i\vec{k}_3\vec{m}+i\vec{k}_4\vec{m}} \quad ; \quad \vec{n}-\vec{m}=\vec{s}$$

$$= \frac{1}{N^2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4} B_1^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1^+(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_4)\,e^{-i(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3-\vec{k}_4)\vec{r}_1}\sum_{\vec{s}} A_{\vec{s}}e^{-i\vec{k}_1\vec{s}}\sum_{\vec{m}} e^{-i(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3-\vec{k}_4)\vec{m}} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} A(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1^+(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} A_{\vec{n}\vec{m}1} B^+_{\vec{n}1} B_{\vec{m}1} B_{\vec{m}1} B_{\vec{m}1} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} A(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_1)$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}\sum_{\ell=1}^{2} A(\vec{k}_1)\left[B_\ell^+(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)B_\ell(\vec{k}_3)B_\ell(\vec{k}_2)B_\ell(\vec{k}_1) + B_\ell^+(\vec{k}_1)B_\ell^+(\vec{k}_2)B_\ell^+(\vec{k}_3)B_\ell(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)\right]$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} D_{\vec{n}\vec{m}2} B^+_{\vec{n}1} B^+_{\vec{m}2} B_{\vec{n}1} B_{\vec{m}2} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} D(\vec{k}_1-\vec{k}_3)B_1^+(\vec{k}_1)B_2^+(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3) \qquad D(\vec{k}_1-\vec{k}_3) = \sum_{\vec{s}} D_{\vec{s}+\vec{r}_1-\vec{r}_2}e^{i(\vec{k}_1-\vec{k}_3)(\vec{s}+\vec{r}_1-\vec{r}_2)}$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}\vec{m}2} B^+_{\vec{n}1} B^+_{\vec{n}1} B_{\vec{n}1} B_{\vec{m}2} = \frac{1}{N^2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4} B_1^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_4)e^{-i(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)\vec{r}_1+i\vec{k}_4\vec{r}_2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}\vec{m}2}e^{-i(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)\vec{n}+i\vec{k}_4\vec{m}} \quad ; \quad \vec{n}-\vec{m}=\vec{s}$$

$$= \frac{1}{N^2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4} B_1^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_4)e^{-i(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)\vec{r}_1+i\vec{k}_4\vec{r}_2}\sum_{\vec{s}} B_{\vec{s}+\vec{r}_1-\vec{r}_2}e^{-i\vec{k}_1\vec{s}-i\vec{k}_2\vec{s}+i\vec{k}_3\vec{s}}\sum_{\vec{m}} e^{i(-\vec{k}_1-\vec{k}_2+\vec{k}_3+\vec{k}_4)\vec{m}} =$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} B_1^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)\sum_{\vec{s}} B_{\vec{s}+\vec{r}_1-\vec{r}_2}e^{-i(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)(\vec{s}+\vec{r}_1-\vec{r}_2)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} B(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)B_1^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}\vec{m}2} B^+_{\vec{n}1} B^+_{\vec{m}2} B_{\vec{m}2} B_{\vec{m}2} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} B(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_1)B_2^+(\vec{k}_2)B_2(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)$$

$$\hat{H}_3 = -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}\Big\{B(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)\left[B_1^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3) + B_2^+(\vec{k}_1)B_2^+(\vec{k}_2)B_2(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)\right] +$$

$$+ B(\vec{k}_1)\left[B_1^+(\vec{k}_1)B_2^+(\vec{k}_2)B_2(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3) + B_2^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)\right] - D(\vec{k}_1-\vec{k}_3)B_1^+(\vec{k}_1)B_2^+(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3)\Big\}$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}\vec{m}2} B^+_{\vec{n}1} B_{\vec{n}1} B_{\vec{n}1} B_{\vec{m}2} = \frac{1}{N^2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4} B_1^+(\vec{k}_1)B_1(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_4)\,e^{i(-\vec{k}_1+\vec{k}_3+\vec{k}_2)\vec{r}_1+i\vec{k}_4\vec{r}_2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}-\vec{m}+\vec{r}_1-\vec{r}_2}e^{i(-\vec{k}_1+\vec{k}_3+\vec{k}_2)\vec{n}+i\vec{k}_4\vec{m}} \quad ; \quad \vec{n}-\vec{m}=\vec{s}$$

$$= \frac{1}{N^2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4} B_1^+(\vec{k}_1)B_1(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_2)B_2(\vec{k}_4)e^{i(-\vec{k}_1+\vec{k}_3+\vec{k}_2)\vec{r}_1+i\vec{k}_4\vec{r}_2}\sum_{\vec{s}} B_{\vec{s}+\vec{r}_1-\vec{r}_2}e^{-i\vec{k}_4\vec{s}}\sum_{\vec{n}} e^{i(-\vec{k}_1+\vec{k}_3+\vec{k}_2+\vec{k}_4)\vec{n}} =$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} B_1^+(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_2)B_2(\vec{k}_1)\sum_{\vec{s}} B_{\vec{s}+\vec{r}_1-\vec{r}_2}e^{-i\vec{k}_1(\vec{s}+\vec{r}_1-\vec{r}_2)} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} B(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_2)B_2(\vec{k}_1)$$

$$\sum_{\vec{n}\vec{m}} B_{\vec{n}\vec{m}2} B^+_{\vec{n}1} B^+_{\vec{m}2} B^+_{\vec{m}2} B_{\vec{m}2} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} B(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_1)B_2^+(\vec{k}_2)B_2^+(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)$$

$$\hat{H}_4 = -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3} B(\vec{k}_1)\Big[B_1^+(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_2)B_2(\vec{k}_1) + B_2^+(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_2)B_1(\vec{k}_1) + B_1^+(\vec{k}_1)B_2^+(\vec{k}_2)B_2^+(\vec{k}_3)B_2(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3) +$$

$$+ B_2^+(\vec{k}_1)B_1^+(\vec{k}_2)B_1^+(\vec{k}_3)B_1(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)\Big]$$

$$\hat{H}_4 = -\frac{1}{N}\sum_{k_1k_2k_3}\sum_{\alpha,\beta=1}^{2}{}' B(\vec{k}_1)\left[B_\alpha^+(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)B_\alpha(\vec{k}_3)B_\alpha(\vec{k}_2)B_\beta(\vec{k}_1) + B_\alpha^+(\vec{k}_1)B_\beta^+(\vec{k}_2)B_\beta^+(\vec{k}_3)B_\beta(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)\right]$$

IV C. Doprinos članova IV reda kvadratnom hamiltonijanu

Pristupamo najvažnijem koraku. U hamiltonijan IV reda (po Boze-operatorima) uvodimo smenu koja je dijagonalizovala H_{kv}. Usled ovoga pojaviće se članovi IV reda koji ne stoje u normalnom poretku i posle uredjivanja oni daju nove članove u kvadratni deo hamiltonijana. Nas zanima koliku popravku prvog reda po ε_1 i ε_2 ovi članovi unose u energiju. Znamo da važi $\varepsilon \ll A \ll \Delta$. Stoga pri množenju zadržavamo produkte tipa $\Delta A \sim \Delta$, $\Delta\varepsilon \sim A$, $\Delta\varepsilon^2 \sim \varepsilon$ i $A\varepsilon \sim \varepsilon$ a zanemarujemo sve produkte reda veličine ε^2 kao napr. $A\varepsilon^2$. Kako je u prvoj aproksimaciji $v \sim \varepsilon$ produkt Av^2 je mala veličina drugog reda i nju ne uzimamo u račun.

U radu B. S. Tošića (ref. 6) je pokazano da produkti bb i b^+b^+ unose popravku reda veličine ε^2, zato će nas oni zanimati jedino ako su množeni sa Δ. Isto važi i za produkte b^+b^+bb, $b^+b^+b^+b^+$ i $bbbb$. Njih iz istog razloga odmah zanemarujemo. Zadržavamo samo produkte koji stoje u normalnom pretku $b^+b^+b^+b$ i b^+bbb ako je koeficienat ispred njih reda veličine A . Isto tako zadržavamo sve produkte koji ne stoje u normalnom poretku, jer oni pri normalizovanju daju doprinos u kvadratni deo hamiltonijana.

Procenimo izraz $B^+B^+BB = [ub^+ + vb][ub^+ + vb][ub + vb^+][ub + vb^+] =$

$= [u^2b^+b^+ + uvb^+b + uvbb^+ + v^2bb][u^2bb + uvbb^+ + uvb^+b + v^2b^+b^+] = u^4b^+b^+bb + u^3vb^+b^+bb^+ +$

$+ u^3vb^+b^+b^+b + u^2v^2b^+b^+b^+b^+ + u^3vb^+bbb + u^2v^2b^+bbb^+ + u^2v^2b^+bb^+b + uv^3b^+bb^+b^+ + u^3vbb^+bb +$

$+ u^2v^2bb^+bb^+ + u^2v^2bb^+b^+b + uv^3bb^+b^+b^+ + u^2v^2bbbb + uv^3bbbb^+ + uv^3bbb^+b + v^4bbb^+b^+$.

Normalizovani produkti b^+b^+bb, $bbbb$ i $b^+b^+b^+b^+$ nas ne zanimaju. Produkti b^+bbb i $b^+b^+b^+b$ se množe koeficientom $v^2 \cong \varepsilon^2$. Što se nenormalizovanih produkata tiče, oni posle komutiranja daju $v^2b^+b^+$ i v^2bb, i stoga nas ovaj izraz zanima samo ako se množi sa Δ. Stoga možemo u konačnom računu potpuno zanemariti $\hat{H}_3$ jer u datoj aproksimaciji ne daje doprinos energiji, a u $\hat{H}_1$ iz istih razloga zadržavamo od svih koeficienata samo Δ.

Primetimo da smo zanemarivanjem $\hat{H}_3$ i $\hat{H}_4$ zanemarili celokupan dinamički član IV reda.

$$\hat H_{eff} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2\vec k_3}\sum_{\ell=1}^{2} B_\ell^+(\vec k_1)B_\ell^+(\vec k_2)B_\ell(\vec k_3)B_\ell(\vec k_1+\vec k_2-\vec k_3) - \frac{1}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2\vec k_3}\sum_{\ell=1}^{2} A(\vec k_1)\Big\{B_\ell^+(\vec k_1)B_\ell^+(\vec k_2)B_\ell^+(\vec k_3)B_\ell(\vec k_1+\vec k_2+\vec k_3) +$$

$$+ B_\ell^+(\vec k_1+\vec k_2+\vec k_3)B_\ell(\vec k_3)B_\ell(\vec k_2)B_\ell(\vec k_1)\Big\} - \frac{1}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2\vec k_3}\sum_{\alpha,\beta=1}^{2}{}' B(\vec k_1)\Big\{B_\alpha^+(\vec k_1)B_\beta^+(\vec k_2)B_\beta^+(\vec k_3)B_\beta(\vec k_1+\vec k_2+\vec k_3) +$$

$$+ B_\alpha^+(\vec k_1+\vec k_2+\vec k_3)B_\alpha(\vec k_3)B_\alpha(\vec k_2)B_\beta(\vec k_1)\Big\}$$

Uvodimo veličinu $f^{\alpha\beta}(\vec k) = \begin{cases} A(\vec k) & \text{za } \alpha=\beta \\ B(\vec k) & \text{za } \alpha\neq\beta \end{cases}$

$$\hat H_{eff} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2\vec k_3}\sum_{\ell=1}^{2} B_\ell^+(\vec k_1)B_\ell^+(\vec k_2)B_\ell(\vec k_3)B_\ell(\vec k_1+\vec k_2-\vec k_3) - \frac{1}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2\vec k_3}\sum_{\alpha,\beta=1}^{2} f^{\alpha\beta}(\vec k_1) B_\alpha^+(\vec k_1+\vec k_2+\vec k_3)B_\alpha(\vec k_3)B_\alpha(\vec k_2)B_\beta(\vec k_1) -$$

$$-\frac{1}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2\vec k_3}\sum_{\alpha,\beta=1}^{2} f^{\alpha\beta}(\vec k_1) B_\alpha^+(\vec k_1)B_\beta^+(\vec k_2)B_\beta^+(\vec k_3)B_\beta(\vec k_1+\vec k_2+\vec k_3)$$

$$\hat H_{eff} = \hat H_{eff}^{(1)} + \hat H_{eff}^{(2)} + \hat H_{eff}^{(3)}$$

$$\hat H_{eff}^{(3)} = -\frac{1}{N}\sum_{\vec k_1\vec k_2\vec k_3}\sum_{\alpha,\beta}\sum_{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4=1}^{2} f^{\alpha\beta}(\vec k_1)\left[b_{\rho_1}^+(\vec k_1)u^*_{\alpha\rho_1}(\vec k_1)+b_{\rho_1}(-\vec k_1)v_{\alpha\rho_1}(-\vec k_1)\right]\left[b^+_{\rho_2}(\vec k_2)u^*_{\beta\rho_2}(\vec k_2)+b_{\rho_2}(-\vec k_2)v_{\beta\rho_2}(-\vec k_2)\right]\times$$

$$\times\left[b^+_{\rho_3}(\vec k_3)u^*_{\beta\rho_3}(\vec k_3)+b_{\rho_3}(-\vec k_3)v_{\beta\rho_3}(-\vec k_3)\right]\left[b_{\rho_4}(\vec k_4)u_{\beta\rho_4}(\vec k_4)+b^+_{\rho_4}(-\vec k_4)v^*_{\beta\rho_4}(-\vec k_4)\right]$$

$\vec k_4 = \vec k_1+\vec k_2+\vec k_3$

$$\hat H_{eff}^{(3)} = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec k_1\vec k_2\vec k_3\alpha\beta\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} f^{\alpha\beta}(\vec k_1)\Big[b^+_{\rho_1}(\vec k_1)b^+_{\rho_2}(\vec k_2)u^*_{\alpha\rho_1}(\vec k_1)u^*_{\beta\rho_2}(\vec k_2) + b^+_{\rho_1}(\vec k_1)b_{\rho_2}(-\vec k_2)u^*_{\alpha\rho_1}(\vec k_1)v_{\beta\rho_2}(-\vec k_2) + b_{\rho_1}(-\vec k_1)b^+_{\rho_2}(\vec k_2)v_{\alpha\rho_1}(-\vec k_1)u^*_{\beta\rho_2}(\vec k_2) +$$

$$+ b_{\rho_1}(-\vec k_1)b_{\rho_2}(-\vec k_2)v_{\alpha\rho_1}(-\vec k_1)v_{\beta\rho_2}(-\vec k_2)\Big]\times\Big[b^+_{\rho_3}(\vec k_3)b_{\rho_4}(\vec k_4)u^*_{\beta\rho_3}(\vec k_3)u_{\beta\rho_4}(\vec k_4) + b^+_{\rho_3}(\vec k_3)b^+_{\rho_4}(-\vec k_4)u^*_{\beta\rho_3}(\vec k_3)v^*_{\beta\rho_4}(-\vec k_4) +$$

$$+ b_{\rho_3}(-\vec k_3)b_{\rho_4}(\vec k_4)v_{\beta\rho_3}(-\vec k_3)u_{\beta\rho_4}(\vec k_4) + b_{\rho_3}(-\vec k_3)b^+_{\rho_4}(-\vec k_4)v_{\beta\rho_3}(-\vec k_3)v^*_{\beta\rho_4}(-\vec k_4)\Big]$$

Ispred izraza stoji $f^{\alpha\beta}(\vec k)$ znači odbacujemo sve što je $\simeq v^2$ ili manje od toga.

U daljem pisanju koristimo $u(-\vec k)=u(\vec k)$ i $v(-\vec k)=v(\vec k)$, i svuda pišemo $+\vec k$.

$$\hat H_{eff}^{(3)} = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec k_1\vec k_2\vec k_3\alpha\beta\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} f^{\alpha\beta}(\vec k_1)\Big[b^+_{\rho_1}(\vec k_1)b^+_{\rho_2}(\vec k_2)b^+_{\rho_3}(\vec k_3)b_{\rho_4}(\vec k_4)u^*_{\alpha\rho_1}(\vec k_1)u^*_{\beta\rho_2}(\vec k_2)u^*_{\beta\rho_3}(\vec k_3)u_{\beta\rho_4}(\vec k_4) +$$

$$+ b^+_{\rho_1}(\vec k_1)b_{\rho_2}(-\vec k_2)b^+_{\rho_3}(\vec k_3)b_{\rho_4}(\vec k_4)u^*_{\alpha\rho_1}(\vec k_1)v_{\beta\rho_2}(+\vec k_2)u_{\beta\rho_3}(\vec k_3)u_{\beta\rho_4}(\vec k_4) +$$

$$+ b_{\rho_1}(-\vec k_1)b^+_{\rho_2}(\vec k_2)b^+_{\rho_3}(\vec k_3)b_{\rho_4}(\vec k_4)v_{\alpha\rho_1}(\vec k_1)u_{\beta\rho_2}(\vec k_2)u^*_{\beta\rho_3}(\vec k_3)u_{\beta\rho_4}(\vec k_4)\Big]$$

Funkcije $u(\vec k)$ i $v(\vec k)$ su realne. $u^*=u$, $v^*=v$.

Prvi član $\hat H_{eff}^{(3)}$ je već napisan kao normalni produkt, zato posmatramo II i III član.

$$\hat{H}^{(3)}_{eff}(\mathrm{II}) \to b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)b^+_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4) = b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_2,\rho_3}\delta_{-\vec{k}_2,\vec{k}_3} +$$ član IV reda koji ne daje doprinos u prvoj aproksimaciji

$$\hat{H}^{(3)}_{eff}(\mathrm{II}) = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\alpha\beta\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)u_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_1)v_{\beta\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\beta\rho_3}(\vec{k}_3)u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_2,\rho_3}\delta_{-\vec{k}_2,\vec{k}_3} =$$ za $\vec{k}_2=-\vec{k}_3$ $\vec{k}_4=\vec{k}_1$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\alpha\beta\\ \rho_1\rho_2\rho_4}} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_4}(\vec{k}_1)u_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_1)v_{\beta\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\beta\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_1) =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\rho_1,\rho_4} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_4}(\vec{k}_1)\sum_{\alpha\beta} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)}u_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_1)\sum_{\vec{k}_2,\rho_2} v_{\beta\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\beta\rho_2}(\vec{k}_2)$$ $\rho_4 \to \rho_2'$ $\rho_2 \to \rho_3'$ $\vec{k}_1 \to \vec{q}$ $\vec{k}_2 \to \vec{q}\,'$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec{q}\rho_1'\rho_2'} b^+_{\rho_1'}(\vec{q})b_{\rho_2'}(\vec{q})\sum_{\alpha\beta} f^{\alpha\beta}_{(\vec{q})}u_{\alpha\rho_1'}(\vec{q})u_{\beta\rho_2'}(\vec{q})\sum_{\vec{q}\,'\rho_3'} v_{\beta\rho_3'}(\vec{q}\,')u_{\beta\rho_3'}(\vec{q}\,') =$$ Sada se vraćamo na $\vec{k}$ i ρ.

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})\sum_{\alpha\beta} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k})}u_{\alpha\rho_1}(\vec{k})u_{\beta\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}'}\left[v_{\beta 1}(\vec{k}')u_{\beta 1}(\vec{k}') + v_{\beta 2}(\vec{k}')u_{\beta 2}(\vec{k}')\right] =$$ Ova druga suma zavisi samo od β

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})\Big\{\left[A(\vec{k})u_{1\rho_1}(\vec{k})u_{1\rho_2}(\vec{k}) + B(\vec{k})u_{2\rho_1}(\vec{k})u_{1\rho_2}(\vec{k})\right]\sum_{\vec{k}'}\left(v_{11}(\vec{k}')u_{11}(\vec{k}') + v_{12}(\vec{k}')u_{12}(\vec{k}')\right) +$$

$$+\left[B(\vec{k})u_{1\rho_1}(\vec{k})u_{2\rho_2}(\vec{k}) + A(\vec{k})u_{2\rho_1}(\vec{k})u_{2\rho_2}(\vec{k})\right]\sum_{\vec{k}'}\left(v_{21}(\vec{k}')u_{21}(\vec{k}') + v_{22}(\vec{k}')u_{22}(\vec{k}')\right)\Big\}$$

U ovoj aproksimaciji su $u_{11}=u_{12}=u_{21}=\frac{1}{\sqrt{2}}$ $u_{22}=-\frac{1}{\sqrt{2}}$ $v_{11}=v_{21}=-\frac{1}{\sqrt{2}}\varepsilon_1$ $v_{12}=-\frac{1}{\sqrt{2}}\varepsilon_2$ $v_{22}=\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$v_{11}u_{11}+v_{12}u_{12} = -\frac{1}{2}\varepsilon_1 - \frac{1}{2}\varepsilon_2 = -\frac{1}{2}(\varepsilon_1+\varepsilon_2) = -\frac{1}{2}\left(\frac{A+B}{2\Delta}+\frac{A-B}{2\Delta}\right) = -\frac{1}{2}\,\frac{A+\cancel{B}+A-\cancel{B}}{2\Delta} = -\frac{A(\vec{k})}{2\Delta}$$

$$v_{21}u_{21}+v_{22}u_{22} = -\frac{1}{2}\varepsilon_1 - \frac{1}{2}\varepsilon_2 = -\frac{1}{2}(\varepsilon_1+\varepsilon_2) = -\frac{A(\vec{k})}{2\Delta}$$

Kod nas se javlja $\sum_{\vec{k}} A(\vec{k})$ $\sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}}\sum_{\vec{\xi}} V_{\vec{\xi}}e^{i\vec{k}\vec{\xi}} = \sum_{\vec{\xi}} V_{\vec{\xi}}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{\xi}} = \sum_{\vec{\xi}} V_{\vec{\xi}} N\delta_{\vec{\xi},0}$

$\sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) = N\cdot V_0$. Znamo $V_{\vec{\xi}} = V_{\vec{n}-\vec{m}}$. $V_0 = V_{\vec{n}-\vec{n}}$ - to je „interakcija sa samim sobom". $V_0 = 0$ $\sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) = 0$.

$$\hat{H}^{(3)}_{eff}(\mathrm{I}) = 0$$

$$\hat{H}^{(3)}_{eff}(\mathrm{III}) \to b_{\rho_1}(-\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4) = b^+_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_2}\delta_{-\vec{k}_1,\vec{k}_2} + b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_3}\delta_{\rho_2,\rho_4} + \ldots$$

$$\hat{H}^{(3)}_{eff}(\mathrm{III}^a) = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\alpha\beta\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} b^+_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)v_{\alpha\rho_1}(-\vec{k}_1)u_{\beta\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\beta\rho_3}(\vec{k}_3)u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_2}\delta_{-\vec{k}_1,\vec{k}_2}$$ za $\vec{k}_1=-\vec{k}_2$ $\vec{k}_4=\vec{k}_3$

$$\dot{H}^{(3)}_{eff}(\mathrm{III}a) = -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_3}\sum_{\alpha,\beta}\sum_{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)}\, b^+_{\rho_3}(\vec{k}_3) b_{\rho_4}(\vec{k}_3) v_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_1) u_{\beta\rho_2}(\vec{k}_1) u_{\beta\rho_3}(\vec{k}_3) u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_3) =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_3,\rho_3\rho_4} b^+_{\rho_3}(\vec{k}_3) b_{\rho_4}(\vec{k}_3) \sum_{\alpha,\beta} u_{\beta\rho_3}(\vec{k}_3) u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_3) \sum_{\rho_1,\vec{k}_1} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} v_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_1) u_{\beta\rho_1}(\vec{k}_1) =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k},\rho_1,\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k}) b_{\rho_2}(\vec{k}) \sum_{\alpha,\beta} u_{\beta\rho_1}(\vec{k}) u_{\beta\rho_2}(\vec{k}) \sum_{\vec{k}_1} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} \left[v_{\alpha1}(\vec{k}_1) u_{\beta1}(\vec{k}_1) + v_{\alpha2}(\vec{k}_1) u_{\beta2}(\vec{k}_1) \right] =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k},\rho_1,\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k}) b_{\rho_2}(\vec{k}) \Big\{ u_{1\rho_1}(\vec{k}) u_{1\rho_2}(\vec{k}) \sum_{\vec{k}_1} \Big[A(\vec{k}_1)\big(v_{11}(\vec{k}_1)u_{11}(\vec{k}_1) + v_{12}(\vec{k}_1)u_{12}(\vec{k}_1)\big) + B(\vec{k}_1)\big(v_{21}(\vec{k}_1)u_{11}(\vec{k}_1) + v_{22}(\vec{k}_1)u_{12}(\vec{k}_1)\big)\Big] +$$

$$+ u_{2\rho_1}(\vec{k}) u_{2\rho_2}(\vec{k}) \sum_{\vec{k}_1} \Big[B(\vec{k}_1)\big(v_{11}(\vec{k}_1)u_{21}(\vec{k}_1) + v_{12}(\vec{k}_1)u_{22}(\vec{k}_1)\big) + A(\vec{k}_1)\big(v_{21}(\vec{k}_1)u_{21}(\vec{k}_1) + v_{22}(\vec{k}_1)u_{22}(\vec{k}_1)\big)\Big]\Big\} =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k},\rho_1,\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k}) b_{\rho_2}(\vec{k}) \Big\{ u_{1\rho_1}(\vec{k}) u_{1\rho_2}(\vec{k}) \sum_{\vec{k}_1} \Big[A(\vec{k}_1)\big(-\tfrac{1}{2}\varepsilon_1(\vec{k}_1) - \tfrac{1}{2}\varepsilon_2(\vec{k}_1)\big) + B(\vec{k}_1)\big(-\tfrac{1}{2}\varepsilon_1(\vec{k}_1) + \tfrac{1}{2}\varepsilon_2(\vec{k}_1)\big)\Big] +$$

$$+ u_{2\rho_1}(\vec{k}) u_{2\rho_2}(\vec{k}) \sum_{\vec{k}_1} \Big[B(\vec{k}_1)\big(-\tfrac{1}{2}\varepsilon_1(\vec{k}_1) + \tfrac{1}{2}\varepsilon_2(\vec{k}_1)\big) + A(\vec{k}_1)\big(-\tfrac{1}{2}\varepsilon_1(\vec{k}_1) - \tfrac{1}{2}\varepsilon_2(\vec{k}_1)\big)\Big]\Big\} =$$

$$= \frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}_1}\left[A(\vec{k}_1)\varepsilon_1(\vec{k}_1) + A(\vec{k}_1)\varepsilon_2(\vec{k}_1) + B(\vec{k}_1)\varepsilon_1(\vec{k}_1) - B(\vec{k}_1)\varepsilon_2(\vec{k}_1)\right] \sum_{\vec{k},\rho_1,\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k}) b_{\rho_2}(\vec{k}) \left[u_{1\rho_1}(\vec{k})u_{1\rho_2}(\vec{k}) + u_{2\rho_1}(\vec{k})u_{2\rho_2}(\vec{k})\right] =$$

$$= \frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}_1}\left\{\varepsilon_1(\vec{k}_1)\left[A(\vec{k}_1)+B(\vec{k}_1)\right] + \varepsilon_2(\vec{k}_1)\left[A(\vec{k}_1)-B(\vec{k}_1)\right]\right\} \times \sum_{\vec{k}}\Big[b^+_1(\vec{k})b_1(\vec{k})\left(u_{11}u_{11} + u_{21}u_{21}\right) + b^+_1(\vec{k})b_2(\vec{k})\left(u_{11}u_{12} + u_{21}u_{22}\right) +$$

$$+ b^+_2(\vec{k})b_1(\vec{k})\left(u_{12}u_{11} + u_{22}u_{21}\right) + b^+_2(\vec{k})b_2(\vec{k})\left(u_{12}u_{12} + u_{22}u_{22}\right)\Big] = \frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}_1}\left\{\frac{[A(\vec{k}_1)+B(\vec{k}_1)]^2}{2\Delta} + \frac{[A(\vec{k}_1)-B(\vec{k}_1)]^2}{2\Delta}\right\} \times$$

$$\times \sum_{\vec{k}}\left[b^+_1(\vec{k})b_1(\vec{k})\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}\right) + b^+_1(\vec{k})b_2(\vec{k})\left(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right) + b^+_2(\vec{k})b_1(\vec{k})\left(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}\right) + b^+_2(\vec{k})b_2(\vec{k})\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}\right)\right] =$$

$$= \sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1) + \cancel{2A(\vec{k}_1)B(\vec{k}_1)} + B^2(\vec{k}_1) + A^2(\vec{k}_1) - \cancel{2A(\vec{k}_1)B(\vec{k}_1)} + B^2(\vec{k}_1)}{2\Delta}\sum_{\vec{k}\rho} b^+_\rho(\vec{k})b_\rho(\vec{k}) \cdot \frac{1}{2N} =$$

$$= \frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\sum_{\vec{k}}\sum_{\rho=1}^{2} b^+_\rho(\vec{k})b_\rho(\vec{k})$$

$$\dot{H}^{(3)}_{eff}(\mathrm{III}b) = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\alpha\beta\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)}\, b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2) b_{\rho_4}(\vec{k}_2) v_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_1) u_{\beta\rho_2}(\vec{k}_2) u_{\beta\rho_3}(\vec{k}_3) u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_2)\, \delta_{\rho_1\rho_3}\delta_{-\vec{k}_1,\vec{k}_3} =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\rho_2,\rho_4,\vec{k}_2} b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2) b_{\rho_4}(\vec{k}_2) \sum_{\alpha,\beta} u_{\beta\rho_2}(\vec{k}_2) u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_2) \sum_{\rho_1,\vec{k}_1} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} v_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_1) u_{\beta\rho_1}(\vec{k}_1) =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec{k},\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k}) b_{\rho_2}(\vec{k}) \sum_{\alpha,\beta} u_{\beta\rho_1}(\vec{k}) u_{\beta\rho_2}(\vec{k}) \sum_{\rho_3,\vec{k}_1} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} v_{\alpha\rho_3}(\vec{k}_1) u_{\beta\rho_3}(\vec{k}_1)$$

Izraz je identičan sa $\dot{H}^{(3)}_{eff}(\mathrm{III}a)$. $\dot{H}^{(3)}_{eff}(\mathrm{III}b) = \frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\sum_{\vec{k}}\sum_{\rho=1}^{2} b^+_\rho(\vec{k})b_\rho(\vec{k})$

$$H^{(3)}_{eff}(\mathrm{III}) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\sum_{\vec{k}}\sum_{\rho=1}^{2} b^+_\rho(\vec{k})b_\rho(\vec{k})$$

$$\hat{H}^{(3)}_{eff}(I) = -\frac{1}{N}\sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \alpha\beta}\ \sum_{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4} f^{\alpha\beta}(\vec k_1)\, b^+_{\rho_1}(\vec k_1) b^+_{\rho_2}(\vec k_2) b^+_{\rho_3}(\vec k_3) b_{\rho_4}(\vec k_4)\, u_{\alpha\rho_1}(\vec k_1) u_{\beta\rho_2}(\vec k_2) u_{\beta\rho_3}(\vec k_3) u_{\beta\rho_4}(\vec k_4) = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \alpha \\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec k_1) b^+_{\rho_2}(\vec k_2) b^+_{\rho_3}(\vec k_3) b_{\rho_4}(\vec k_4)\, \times$$

$$\times \left[A(\vec k_1) u_{1\rho_1}(\vec k_1) u_{1\rho_2}(\vec k_2) u_{1\rho_3}(\vec k_3) u_{1\rho_4}(\vec k_4) + B(\vec k_1) u_{1\rho_1}(\vec k_1) u_{2\rho_2}(\vec k_2) u_{2\rho_3}(\vec k_3) u_{2\rho_4}(\vec k_4) + B(\vec k_1) u_{2\rho_1}(\vec k_1) u_{1\rho_2}(\vec k_2) u_{1\rho_3}(\vec k_3) u_{1\rho_4}(\vec k_4) + A(\vec k_1) u_{2\rho_1}(\vec k_1) u_{2\rho_2}(\vec k_2) u_{2\rho_3}(\vec k_3) u_{2\rho_4}(\vec k_4)\right]$$

S obzirom da je $u \approx \frac{1}{\sqrt{2}}$, nadalje izostavljamo oznaku $\vec k$.

$$\hat{H}^{(3)}_{eff}(I) = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \\ \rho_2\rho_3\rho_4}} \Big\{ b^+_1(\vec k_1) b^+_{\rho_2}(\vec k_2) b^+_{\rho_3}(\vec k_3) b_{\rho_4}(\vec k_4) \left[A(\vec k_1) u_{11} u_{1\rho_2} u_{1\rho_3} u_{1\rho_4} + B(\vec k_1) u_{11} u_{2\rho_2} u_{2\rho_3} u_{2\rho_4} + B(\vec k_1) u_{21} u_{1\rho_2} u_{1\rho_3} u_{1\rho_4} + A(\vec k_1) u_{21} u_{2\rho_2} u_{2\rho_3} u_{2\rho_4}\right] +$$

$$+ b^+_2(\vec k_1) b^+_{\rho_2}(\vec k_2) b^+_{\rho_3}(\vec k_3) b_{\rho_4}(\vec k_4) \left[A(\vec k_1) u_{12} u_{1\rho_2} u_{1\rho_3} u_{1\rho_4} + B(\vec k_1) u_{12} u_{2\rho_2} u_{2\rho_3} u_{2\rho_4} + B(\vec k_1) u_{22} u_{1\rho_2} u_{1\rho_3} u_{1\rho_4} + A(\vec k_1) u_{22} u_{2\rho_2} u_{2\rho_3} u_{2\rho_4}\right]\Big\} =$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2}N}\sum_{\substack{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \\ \rho_2\rho_3\rho_4}} \Big\{ b^+_1(\vec k_1) b^+_{\rho_2}(\vec k_2) b^+_{\rho_3}(\vec k_3) b_{\rho_4}(\vec k_4) \left[A(\vec k_1) u_{1\rho_2} u_{1\rho_3} u_{1\rho_4} + B(\vec k_1) u_{2\rho_2} u_{2\rho_3} u_{2\rho_4} + B(\vec k_1) u_{1\rho_2} u_{1\rho_3} u_{1\rho_4} + A(\vec k_1) u_{2\rho_2} u_{2\rho_3} u_{2\rho_4}\right] +$$

$$+ b^+_2(\vec k_1) b^+_{\rho_2}(\vec k_2) b^+_{\rho_3}(\vec k_3) b_{\rho_4}(\vec k_4) \left[A(\vec k_1) u_{1\rho_2} u_{1\rho_3} u_{1\rho_4} + B(\vec k_1) u_{2\rho_2} u_{2\rho_3} u_{2\rho_4} - B(\vec k_1) u_{1\rho_2} u_{1\rho_3} u_{1\rho_4} - A(\vec k_1) u_{2\rho_2} u_{2\rho_3} u_{2\rho_4}\right]\Big\}$$

Na isti način sumiramo i po ρ_2, ρ_3 i ρ_4, ali zbog $u_{22} = -u_{12}$ određeni koeficienti će se skratiti i u konačnom izrazu imamo samo 8 članova.

$$\hat{H}^{(3)}_{eff}(I) = -\frac{1}{2N}\sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3} [A(\vec k_1)+B(\vec k_1)]\left[b^+_1(\vec k_1) b^+_1(\vec k_2) b^+_1(\vec k_3) b_1(\vec k_4) + b^+_1(\vec k_1) b^+_2(\vec k_2) b^+_2(\vec k_3) b_1(\vec k_4) + b^+_1(\vec k_1) b^+_2(\vec k_2) b^+_1(\vec k_3) b_2(\vec k_4) + b^+_1(\vec k_1) b^+_1(\vec k_2) b^+_2(\vec k_3) b_2(\vec k_4)\right] +$$

$$+ [A(\vec k_1)-B(\vec k_1)]\left[b^+_2(\vec k_1) b^+_2(\vec k_2) b^+_1(\vec k_3) b_1(\vec k_4) + b^+_2(\vec k_1) b^+_1(\vec k_2) b^+_2(\vec k_3) b_1(\vec k_4) + b^+_2(\vec k_1) b^+_1(\vec k_2) b^+_1(\vec k_3) b_2(\vec k_4) + b^+_2(\vec k_1) b^+_2(\vec k_2) b^+_2(\vec k_3) b_2(\vec k_4)\right]$$

Istim ovakvim postupkom izračunavamo i $\hat{H}^{(2)}_{eff}$.

$$\hat{H}^{(2)}_{eff} = -\frac{1}{N}\sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3}\sum_{\alpha\beta} f^{\alpha\beta}(\vec k_1) B^+_\alpha(\vec k_1+\vec k_2+\vec k_3) B_\alpha(\vec k_3) B_\alpha(\vec k_2) B_\beta(\vec k_1) = -\frac{1}{N}\sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \alpha\beta} f^{\alpha\beta}(\vec k_1)\sum_{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}\left[b^+_{\rho_1}(\vec k_4) u_{\alpha\rho_1}(\vec k_4) + b_{\rho_1}(-\vec k_4) v_{\alpha\rho_1}(\vec k_4)\right]\times$$

$$\times\left[b_{\rho_2}(\vec k_3) u_{\alpha\rho_2}(\vec k_3) + b^+_{\rho_2}(-\vec k_3) v_{\alpha\rho_2}(\vec k_3)\right]\left[b_{\rho_3}(\vec k_2) u_{\alpha\rho_3}(\vec k_2) + b^+_{\rho_3}(-\vec k_2) v_{\alpha\rho_3}(\vec k_2)\right]\left[b_{\rho_4}(\vec k_1) u_{\beta\rho_4}(\vec k_1) + b^+_{\rho_4}(-\vec k_1) v_{\beta\rho_4}(\vec k_1)\right] =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \alpha\beta} f^{\alpha\beta}(\vec k_1)\sum_{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}\left[b^+_{\rho_1}(\vec k_4) b_{\rho_2}(\vec k_3) b_{\rho_3}(\vec k_2) b_{\rho_4}(\vec k_1) u_{\alpha\rho_1}(\vec k_4) u_{\alpha\rho_2}(\vec k_3) u_{\alpha\rho_3}(\vec k_2) u_{\beta\rho_4}(\vec k_1) + b^+_{\rho_1}(\vec k_4) b_{\rho_2}(\vec k_3) b_{\rho_3}(\vec k_2) b^+_{\rho_4}(-\vec k_1)\,\times\right.$$

$$\left.\times\, u_{\alpha\rho_1}(\vec k_4) u_{\alpha\rho_2}(\vec k_3) u_{\alpha\rho_3}(\vec k_2) v_{\beta\rho_4}(\vec k_1) + b^+_{\rho_1}(\vec k_4) b_{\rho_2}(\vec k_3) b^+_{\rho_3}(-\vec k_2) b_{\rho_4}(\vec k_1) u_{\alpha\rho_1}(\vec k_4) u_{\alpha\rho_2}(\vec k_3) v_{\alpha\rho_3}(\vec k_2) u_{\beta\rho_4}(\vec k_1)\right]$$

Zadržali smo samo članove koji odgovaraju prvoj aproksimaciji.

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(II) \to b^+_{\rho_1}(\vec k_4) b_{\rho_2}(\vec k_3) b_{\rho_3}(\vec k_2) b^+_{\rho_4}(-\vec k_1) = b^+_{\rho_1}(\vec k_4) b_{\rho_2}(\vec k_3)\,\delta_{\rho_3,\rho_4}\,\delta_{\vec k_2,-\vec k_1} + b^+_{\rho_1}(\vec k_4) b_{\rho_3}(\vec k_2)\,\delta_{\rho_2,\rho_4}\,\delta_{\vec k_3,-\vec k_1}$$

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(II^a) = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec k_1 \vec k_2 \vec k_3 \alpha\beta \\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} f^{\alpha\beta}(\vec k_1)\, b^+_{\rho_1}(\vec k_4) b_{\rho_2}(\vec k_3) u_{\alpha\rho_1}(\vec k_4) u_{\alpha\rho_2}(\vec k_3) u_{\alpha\rho_3}(\vec k_2) v_{\beta\rho_4}(\vec k_1)\,\delta_{\rho_3,\rho_4}\,\delta_{\vec k_2,-\vec k_1} =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\vec k_3,\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec k_3) b_{\rho_2}(\vec k_3)\sum_{\alpha,\beta} u_{\alpha\rho_1}(\vec k_3) u_{\alpha\rho_2}(\vec k_3)\sum_{\rho_3 \vec k_1} u_{\alpha\rho_3}(\vec k_1) v_{\beta\rho_3}(\vec k_1)$$

Ovo je slučaj isti kao $\hat{H}^{(1)}_{eff}(III^a)$ samo uz $\alpha \rightleftharpoons \beta$, što nema značaja.

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(II^a) = \frac{1}{2N}\sum_{\vec k_1}\frac{A^2(\vec k_1)+B^2(\vec k_1)}{\Delta}\sum_{\rho \vec k} b^+_\rho(\vec k) b_\rho(\vec k)$$

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(II^{\alpha}) = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\alpha\beta\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)}\, b^+_{\rho_1}(\vec{k}_4) b_{\rho_3}(\vec{k}_2) u_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_4) u_{\alpha\rho_2}(\vec{k}_3) u_{\alpha\rho_3}(\vec{k}_2) v_{\beta\rho_4}(\vec{k}_1)\delta_{\rho_2,\rho_4}\,\delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_1} =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\rho_1\rho_3\vec{k}_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_2) b_{\rho_3}(\vec{k}_2)\sum_{\alpha,\beta} u_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_2) u_{\alpha\rho_3}(\vec{k}_2)\sum_{\rho_2\vec{k}_1} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} u_{\alpha\rho_2}(\vec{k}_1) v_{\beta\rho_2}(\vec{k}_1)$$

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(II^{\beta}) = -\frac{1}{N}\sum_{\rho_1\rho_2\vec{k}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}) b_{\rho_2}(\vec{k})\sum_{\alpha,\beta} u_{\alpha\rho_1}(\vec{k}) u_{\alpha\rho_2}(\vec{k})\sum_{\rho_3\vec{k}_1} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} u_{\alpha\rho_3}(\vec{k}_1) v_{\beta\rho_3}(\vec{k}_1) = \hat{H}^{(2)}_{eff}(II^{\alpha}) = \frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\sum_{\rho,\vec{k}} b^+_{\rho}(\vec{k}) b_{\rho}(\vec{k})$$

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(II) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\sum_{\vec{k},\rho} b^+_{\rho}(\vec{k}) b_{\rho}(\vec{k})$$

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(III) \to b^+_{\rho_1}(\vec{k}_4) b_{\rho_2}(\vec{k}_3) b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_2) b_{\rho_4}(\vec{k}_1) = b^+_{\rho_1}(\vec{k}_4) b_{\rho_4}(\vec{k}_1)\delta_{\rho_2,\rho_3}\,\delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_2}$$

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(III) = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\alpha\beta\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_4) b_{\rho_4}(\vec{k}_1) u_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_4) u_{\alpha\rho_2}(\vec{k}_3) v_{\alpha\rho_3}(\vec{k}_2) u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_1)\delta_{\rho_2,\rho_3}\delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_2} =$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{\rho_1,\rho_4,\vec{k}_1} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1) b_{\rho_4}(\vec{k}_1)\sum_{\alpha,\beta} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} u_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_1) u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_1)\sum_{\rho_2,\vec{k}_2} u_{\alpha\rho_2}(\vec{k}_2) v_{\alpha\rho_2}(\vec{k}_2) \equiv 0$$

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(I) = -\frac{1}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\alpha\beta\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} f^{\alpha\beta}_{(\vec{k}_1)} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_4) b_{\rho_2}(\vec{k}_3) b_{\rho_3}(\vec{k}_2) b_{\rho_4}(\vec{k}_1) u_{\alpha\rho_1}(\vec{k}_4) u_{\alpha\rho_2}(\vec{k}_3) u_{\alpha\rho_3}(\vec{k}_2) u_{\beta\rho_4}(\vec{k}_1)$$

Postupak je isti kao kod $\hat{H}^{(3)}_{eff}(I)$.

$$\hat{H}^{(2)}_{eff}(I) = -\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}[A(\vec{k}_1)+B(\vec{k}_1)][b^+_1(\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_1) + b^+_2(\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_1) + b^+_2(\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_1) + b^+_1(\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_1)] +$$

$$+ [A(\vec{k}_1)-B(\vec{k}_1)][b^+_2(\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_1) + b^+_1(\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_1) + b^+_1(\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_1) + b^+_2(\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_1)]$$

Preostao je još član $\hat{H}^{(1)}_{eff}$ koji u sebi sadrži kao množitelj Δ, stoga se u zameni transformacionih funkcija ići do veličina reda ε^2.

$$\hat{H}^{(1)}_{eff} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3 f\\ \vec{k}_4=\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3}} B^+_f(\vec{k}_1) B^+_f(\vec{k}_2) B_f(\vec{k}_3) B_f(\vec{k}_4) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3 f}\sum_{\rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}[b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1) + b_{\rho_1}(-\vec{k}_1)v_{f\rho_1}(\vec{k}_1)][b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_2}(\vec{k}_2) + b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)v_{f\rho_2}(\vec{k}_2)]\times$$

$$\times[b_{\rho_3}(\vec{k}_3)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3) + b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)v_{f\rho_3}(\vec{k}_3)][b_{\rho_4}(\vec{k}_4)u_{f\rho_4}(\vec{k}_4) + b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)v_{f\rho_4}(\vec{k}_4)]$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3 f\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}}[b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)v_{f\rho_4}(\vec{k}_4) + b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_2)v_{f\rho_3}(\vec{k}_3)u_{f\rho_4}(\vec{k}_4) +$$

$$+ b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)v_{f\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)u_{f\rho_4}(\vec{k}_4) + b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)v_{f\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)v_{f\rho_4}(\vec{k}_4) +$$

$$+ b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)v_{f\rho_2}(\vec{k}_2)v_{f\rho_3}(\vec{k}_3)u_{f\rho_4}(\vec{k}_4) + b_{\rho_1}(-\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)v_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)u_{f\rho_4}(\vec{k}_4) +$$

$$+ b_{\rho_1}(-\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)v_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)v_{f\rho_4}(\vec{k}_4) + b_{\rho_1}(-\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)v_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_2)v_{f\rho_3}(\vec{k}_3)u_{f\rho_4}(\vec{k}_4)]$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(I) \rightarrow b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4) = b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)\delta_{\rho_3,\rho_4}\delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_4} + b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^a) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3 f\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)v_{f\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_3\rho_4}\delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_4} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_3 f\\ \rho_1\rho_2\rho_3}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(-\vec{k}_1)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_1)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)v_{f\rho_3}(\vec{k}_3) =$$

$$= -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec{k}_1,\rho_1,\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(-\vec{k}_1)\sum_{f} u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_1)\sum_{\rho_3\vec{k}_3} u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)v_{f\rho_3}(\vec{k}_3) =$$

$$= -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec{k},\rho_1,\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b^+_{\rho_2}(-\vec{k})\sum_{f} u_{f\rho_1}(\vec{k})u_{f\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}\left[u_{f1}(\vec{k}_1)v_{f1}(\vec{k}_1) + u_{f2}(\vec{k}_1)v_{f2}(\vec{k}_1)\right] = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec{k}\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b^+_{\rho_2}(-\vec{k})\Big\{u_{1\rho_1}(\vec{k})u_{1\rho_2}(\vec{k}) \times$$

$$\times\sum_{\vec{k}_1}\left[u_{11}(\vec{k}_1)v_{11}(\vec{k}_1) + u_{12}(\vec{k}_1)v_{12}(\vec{k}_1)\right] + u_{2\rho_1}(\vec{k})u_{2\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}\left[u_{21}(\vec{k}_1)v_{21}(\vec{k}_1) + u_{22}(\vec{k}_1)v_{22}(\vec{k}_1)\right]\Big\}$$

$$\sum_{\vec{k}_1}(u_{11}v_{11} + u_{12}v_{12}) = \sum_{\vec{k}_1}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{1}{2}\varepsilon_1^2\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{1}{2}\varepsilon_2^2\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\varepsilon_2+2\varepsilon_2^2\right)\right] = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}_1}\left(-\varepsilon_1+2\varepsilon_1^2-\varepsilon_2+2\varepsilon_2^2\right)$$

S obzirom da je $\Delta\varepsilon^2 \sim \varepsilon$, a stoji ispred b^+b^+, članove ε^2 odbacujemo pa ostaje $\sum_{\vec{k}_1}\varepsilon_1(\vec{k}_1)+\varepsilon_2(\vec{k}_1) = 0$ (kao što smo već pokazali). Isto važi i za $\sum_{\vec{k}_1}(u_{21}v_{21}+u_{22}v_{22}) = 0$

znači $\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^a) = 0$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^b) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3 f\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)v_{f\rho_4}(\vec{k}_4) \qquad v \sim \frac{1}{\sqrt{2}}\varepsilon(\vec{k}) \quad u \sim \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^b) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)\left[u_{1\rho_1}u_{1\rho_2}u_{1\rho_3}v_{1\rho_4}(\vec{k}_4) + u_{2\rho_1}u_{2\rho_2}u_{2\rho_3}v_{2\rho_4}(\vec{k}_4)\right] =$$

Sumiramo po ρ_1 i odmah zamenjujmo vrednost za u.

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^b) = -\frac{\Delta}{N}\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\\ \rho_2\rho_3\rho_4}}\Big\{b^+_1(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)\left[u_{1\rho_2}u_{1\rho_3}v_{1\rho_4}(\vec{k}_4) + u_{2\rho_2}u_{2\rho_3}v_{2\rho_4}(\vec{k}_4)\right] + b^+_2(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)b_{\rho_3}(\vec{k}_3) \times$$
$$\times\left[u_{1\rho_2}u_{1\rho_3}v_{1\rho_4}(\vec{k}_4) - u_{2\rho_2}u_{2\rho_3}v_{2\rho_4}(\vec{k}_4)\right]\Big\}$$

Sumiramo po ρ_2, ρ_3 i ρ_4 i na kraju stavljamo $\varepsilon_1 = \frac{A+B}{2\Delta}$ i $\varepsilon_2 = \frac{A-B}{2\Delta}$.

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^b) = \frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}\left[A(\vec{k}_4)+B(\vec{k}_4)\right]\left[b^+_1(\vec{k}_1)b^+_1(\vec{k}_2)b^+_1(-\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3) + b^+_2(\vec{k}_1)b^+_2(\vec{k}_2)b^+_1(-\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3) + b^+_2(\vec{k}_1)b^+_1(\vec{k}_2)b^+_1(-\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3) + b^+_1(\vec{k}_1)b^+_2(\vec{k}_2)b^+_1(-\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3)\right.$$
$$\left. + \left[A(\vec{k}_4)-B(\vec{k}_4)\right]\left[b^+_2(\vec{k}_1)b^+_1(\vec{k}_2)b^+_2(-\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3) + b^+_1(\vec{k}_1)b^+_2(\vec{k}_2)b^+_2(-\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3) + b^+_1(\vec{k}_1)b^+_1(\vec{k}_2)b^+_2(-\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3) + b^+_2(\vec{k}_1)b^+_2(\vec{k}_2)b^+_2(-\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3)\right]\right.$$

Ovaj član uporedujemo sa $\hat{H}^{(3)}_{eff}(I)$. Stoga vršimo smenu: $-\vec{k}_1-\vec{k}_2+\vec{k}_3 = \vec{q}_1$ $\vec{k}_2 = \vec{q}_2$ $\vec{k}_1 = \vec{q}_3$ $\vec{q}_4 = \vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3 = \vec{k}_3$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^b) = \frac{1}{4N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2\vec{q}_3}\left[A(\vec{q}_1)+B(\vec{q}_1)\right]\left[b^+_1(\vec{q}_3)b^+_1(\vec{q}_2)b^+_1(\vec{q}_1)b_1(\vec{q}_4) + b^+_2(\vec{q}_3)b^+_2(\vec{q}_2)b^+_1(\vec{q}_1)b_1(\vec{q}_4) + b^+_2(\vec{q}_3)b^+_1(\vec{q}_2)b^+_1(\vec{q}_1)b_2(\vec{q}_4) + b^+_1(\vec{q}_3)b^+_2(\vec{q}_2)b^+_1(\vec{q}_1)b_2(\vec{q}_4)\right] +$$
$$+\left[A(\vec{q}_1)-B(\vec{q}_1)\right]\left[b^+_2(\vec{q}_3)b^+_1(\vec{q}_2)b^+_2(\vec{q}_1)b_1(\vec{q}_4) + b^+_1(\vec{q}_3)b^+_2(\vec{q}_2)b^+_2(\vec{q}_1)b_1(\vec{q}_4) + b^+_1(\vec{q}_3)b^+_1(\vec{q}_2)b^+_2(\vec{q}_1)b_2(\vec{q}_4) + b^+_2(\vec{q}_3)b^+_2(\vec{q}_2)b^+_2(\vec{q}_1)b_2(\vec{q}_4)\right]$$

Pošto kreacioni operatori medusobno komutiraju, menjamo im poredak.

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^B) = \frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}\left[A(\vec{k}_1)+B(\vec{k}_1)\right]\left[b_1^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_1^+(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_2^+(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_2^+(\vec{k}_3)b_2^+(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_1^+(\vec{k}_3)b_2^+(\vec{k}_4)\right]+$$
$$+\left[A(\vec{k}_1)-B(\vec{k}_1)\right]\left[b_2^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_2^+(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_1^+(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_1^+(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_2^+(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)\right] = -\frac{1}{2}\hat{H}^{(3)}_{eff}(I)$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(II) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3 f\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)u_{f\rho_2}(\vec{k}_2)v_{f\rho_3}(\vec{k}_3)u_{f\rho_4}(\vec{k}_4) = \qquad \vec{k}_4=\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3$$
$$= -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)\left[u_{1\rho_1}u_{1\rho_2}v_{1\rho_3}(\vec{k}_3)u_{1\rho_4}+u_{2\rho_1}u_{2\rho_2}v_{2\rho_3}(\vec{k}_3)u_{2\rho_4}\right]$$

Sumiranje se vrši isto kao kod $\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^B)$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(II) = \frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}\left[A(\vec{k}_3)+B(\vec{k}_3)\right]\left[b_1^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_1^+(-\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_1^+(-\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_1^+(-\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_1^+(-\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)\right]+$$
$$+\left[A(\vec{k}_3)-B(\vec{k}_3)\right]\left[b_2^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_2^+(-\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_2^+(-\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_2^+(-\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_2^+(-\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)\right]$$

$$\vec{k}_1=\vec{q}_3 \qquad \vec{k}_2=\vec{q}_2 \qquad -\vec{k}_3=\vec{q}_1 \qquad \vec{k}_4=\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3=\vec{q}_4=\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(II) = \frac{1}{4N}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2\vec{q}_3}\left[A(\vec{q}_1)+B(\vec{q}_1)\right]\left[b_1^+(\vec{q}_3)b_1^+(\vec{q}_2)b_1^+(\vec{q}_1)b_1(\vec{q}_4)+b_2^+(\vec{q}_3)b_2^+(\vec{q}_2)b_1^+(\vec{q}_1)b_1(\vec{q}_4)+b_2^+(\vec{q}_3)b_1^+(\vec{q}_2)b_1^+(\vec{q}_1)b_2(\vec{q}_4)+b_1^+(\vec{q}_3)b_2^+(\vec{q}_2)b_1^+(\vec{q}_1)b_2(\vec{q}_4)\right]+$$
$$+\left[A(\vec{q}_1)-B(\vec{q}_1)\right]\left[b_2^+(\vec{q}_3)b_1^+(\vec{q}_2)b_2^+(\vec{q}_1)b_1(\vec{q}_4)+b_1^+(\vec{q}_3)b_2^+(\vec{q}_2)b_2^+(\vec{q}_1)b_1(\vec{q}_4)+b_1^+(\vec{q}_3)b_1^+(\vec{q}_2)b_2^+(\vec{q}_1)b_2(\vec{q}_4)+b_2^+(\vec{q}_3)b_2^+(\vec{q}_2)b_2^+(\vec{q}_1)b_2(\vec{q}_4)\right] = \qquad \vec{q}\to\vec{k}$$

$$= \frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}\left[A(\vec{k}_1)+B(\vec{k}_1)\right]\left[b_1^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_1^+(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_2^+(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_2^+(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_1^+(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)\right]+$$
$$+\left[A(\vec{k}_1)-B(\vec{k}_1)\right]\left[b_2^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_2^+(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_1^+(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_1^+(\vec{k}_2)b_1^+(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_2^+(\vec{k}_2)b_2^+(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)\right] = -\frac{1}{2}\hat{H}^{(3)}_{eff}(I)$$

$$\hat{H}^{(3)}_{eff}(I)+\hat{H}^{(1)}_{eff}(I^B)+H^{(1)}_{eff}(II)=0$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(III) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3 f\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)u_{f\rho_1}(\vec{k}_1)v_{f\rho_2}(\vec{k}_2)u_{f\rho_3}(\vec{k}_3)u_{f\rho_4}(\vec{k}_4) = \qquad \vec{k}_4=\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3$$
$$= -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)\left[u_{1\rho_1}v_{1\rho_2}(\vec{k}_2)u_{1\rho_3}u_{1\rho_4}+u_{2\rho_1}v_{2\rho_2}(\vec{k}_2)u_{2\rho_3}u_{2\rho_4}\right] =$$
$$= -\frac{\Delta}{\sqrt{2}N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\\ \rho_2\rho_3\rho_4}}\left\{b_1^+(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)\left[v_{1\rho_2}(\vec{k}_2)u_{1\rho_3}u_{1\rho_4}+v_{2\rho_2}(\vec{k}_2)u_{2\rho_3}u_{2\rho_4}\right]+b_2^+(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)\left[v_{1\rho_2}(\vec{k}_2)u_{1\rho_3}u_{1\rho_4}-v_{2\rho_2}(\vec{k}_2)u_{2\rho_3}u_{2\rho_4}\right]\right\}$$

Prosumiramo po ρ_2, ρ_3 i ρ_4 i smenimo ε_1 i ε_2.

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(III) = -\frac{\Delta}{4N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}\left[A(\vec{k}_2)+B(\vec{k}_2)\right]\left[b_1^+(\vec{k}_1)b_1(-\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_1(-\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_1(-\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_1(-\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)\right]+$$
$$+\left[A(\vec{k}_2)-B(\vec{k}_2)\right]\left[b_2^+(\vec{k}_1)b_2(-\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_2(-\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_4)+b_1^+(\vec{k}_1)b_2(-\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)+b_2^+(\vec{k}_1)b_2(-\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_4)\right]$$

Vršimo smenu $\vec{k}_1=\vec{q}_4=\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3$ $\;-\vec{k}_2=\vec{q}_1$ $\;\vec{k}_3=\vec{q}_2$. $\vec{k}_4=\vec{q}_3$, potom se vraćamo na $\vec{k}$ i uredjujemo operatore po opadajućim indeksima uz $\vec{k}$, što možemo jer anihilacioni operatori komutiraju.

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{III}) = -\frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}[A(\vec{k}_1)+B(\vec{k}_1)][b_1^+(\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_1)+b_2^+(\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_1)+b_2^+(\vec{k}_4)b_2^+(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_1)+b_1^+(\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_2)b_1(\vec{k}_1)]+$$
$$+[A(\vec{k}_1)-B(\vec{k}_1)][b_2^+(\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_1)+b_1^+(\vec{k}_4)b_1(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_1)+b_1^+(\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3)b_1(\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_1)+b_2^+(\vec{k}_4)b_2(\vec{k}_3)b_2(\vec{k}_2)b_2(\vec{k}_1)] = -\frac{1}{2}\hat{H}^{(2)}_{eff}(\underline{I})$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{IV}) \longrightarrow b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4) = b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)\delta_{\rho_3\rho_4}\delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_4} + b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)\delta_{\rho_2\rho_4}\delta_{\vec{k}_2\vec{k}_4}$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{IV}a) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\ell\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(-\vec{k}_2)u_{\ell\rho_1}(\vec{k}_1)v_{\ell\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\ell\rho_3}(\vec{k}_3)v_{\ell\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_3\rho_4}\delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_4} =$$
$$= -\frac{\Delta}{N}\sum_{\rho_1\rho_2\vec{k}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_2}(\vec{k}_1)\sum_{\ell}u_{\ell\rho_1}(\vec{k}_1)v_{\ell\rho_2}(\vec{k}_1)\sum_{\rho_3\vec{k}_3}u_{\ell\rho_3}(\vec{k}_3)v_{\ell\rho_3}(\vec{k}_3) =$$

$$= -\frac{\Delta}{N}\sum_{\rho_1\rho_2\vec{k}} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})\Big\{u_{1\rho_1}(\vec{k})v_{1\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}[u_{11}(\vec{k}_1)v_{11}(\vec{k}_1)+u_{12}(\vec{k}_1)v_{12}(\vec{k}_1)] + u_{2\rho_1}(\vec{k})v_{2\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}[u_{21}(\vec{k}_1)v_{21}(\vec{k}_1)+u_{22}(\vec{k}_1)v_{22}(\vec{k}_1)]\Big\} =$$

$$= -\frac{\Delta}{N}\frac{1}{2}\sum_{\rho_1\rho_2\vec{k}} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})\Big\{u_{1\rho_1}(\vec{k})v_{1\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}[-\varepsilon_1(\vec{k}_1)+2\varepsilon_1^2(\vec{k}_1)-\varepsilon_2(\vec{k}_1)+2\varepsilon_2^2(\vec{k}_1)] + u_{2\rho_1}(\vec{k})v_{2\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}[-\varepsilon_1(\vec{k}_1)+2\varepsilon_1^2(\vec{k}_1)-\varepsilon_2(\vec{k}_1)+2\varepsilon_2^2(\vec{k}_1)]\Big\}$$

Sumu po $\vec{k}_1$ izvlačimo kao zajednički množitelj i koristimo $\sum_{\vec{k}}[\varepsilon_1(\vec{k})+\varepsilon_2(\vec{k})]=0$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{IV}a) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec{k}_1}[\varepsilon_1^2(\vec{k}_1)+\varepsilon_2^2(\vec{k}_1)]\sum_{\rho_1\rho_2\vec{k}} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})[u_{1\rho_1}(\vec{k})v_{1\rho_2}(\vec{k})+u_{2\rho_1}(\vec{k})v_{2\rho_2}(\vec{k})]$$

$\Delta\varepsilon^2 \sim A\varepsilon \sim \varepsilon$ a $v \sim \varepsilon$ pa je $\Delta\varepsilon^2 . u . v \sim \varepsilon^2$ i stoga ovaj član u ovoj aproksimaciji ne daje doprinos. $\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{IV}a) = 0$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{IV}b) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\ell\\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)u_{\ell\rho_1}(\vec{k}_1)v_{\ell\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\ell\rho_3}(\vec{k}_3)v_{\ell\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\vec{k}_2\vec{k}_4}\delta_{\rho_2\rho_4} = \qquad \delta_{\vec{k}_1\vec{k}_4} = \delta_{\vec{k}_1\vec{k}_3}$$
$$= -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec{k}_1\rho_1\rho_3} b^+_{\rho_1}(\vec{k}_1)b_{\rho_3}(\vec{k}_1)\sum_{\ell}u_{\ell\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\ell\rho_3}(\vec{k}_1)\sum_{\rho_2\vec{k}_2}|v_{\ell\rho_2}(\vec{k}_2)|^2 =$$

$$= -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec{k}\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})\Big\{u_{1\rho_1}(\vec{k})u_{1\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}[v_{11}^2(\vec{k}_1)+v_{12}^2(\vec{k}_1)] + u_{2\rho_1}(\vec{k})u_{2\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}[v_{21}^2(\vec{k}_1)+v_{22}^2(\vec{k}_1)]\Big\} = \qquad v^2 \sim \frac{1}{2}\varepsilon^2$$

$$= -\frac{\Delta}{2N}\sum_{\vec{k}\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})\Big\{u_{1\rho_1}(\vec{k})u_{1\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}[\varepsilon_1^2(\vec{k}_1)+\varepsilon_2^2(\vec{k}_1)] + u_{2\rho_1}(\vec{k})u_{2\rho_2}(\vec{k})\sum_{\vec{k}_1}[\varepsilon_1^2(\vec{k}_1)+\varepsilon_2^2(\vec{k}_1)]\Big\} =$$

$$= -\frac{\Delta}{2N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{[A(\vec{k}_1)+B(\vec{k}_1)]^2+[A(\vec{k}_1)-B(\vec{k}_1)]^2}{4\Delta^2}\sum_{\vec{k}\rho_1\rho_2} b^+_{\rho_1}(\vec{k})b_{\rho_2}(\vec{k})[u_{1\rho_1}(\vec{k})u_{1\rho_2}(\vec{k})+u_{2\rho_1}(\vec{k})u_{2\rho_2}(\vec{k})]$$

Za $\sum_{\ell\rho_1\rho_2}$ smo već pokazali da je dijagonalna

$$= -\frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2+2A\cancel{B}+B^2+A^2-2A\cancel{B}+B^2}{4\Delta}\sum_{\vec{k}\rho} b^+_{\rho}(\vec{k})b_{\rho}(\vec{k}) = -\frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\sum_{\vec{k}\rho} b^+_{\rho}(\vec{k})b_{\rho}(\vec{k})$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{VII}a) = \hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{IV}a) = 0$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{VII}b) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\rho \\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\rho\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\rho\rho_3}(\vec{k}_3)v_{\rho\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_4}\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_4} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\vec{k}_2\rho_2\rho_3} b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_3}(\vec{k}_2)\sum_{\rho} u_{\rho\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\rho\rho_3}(\vec{k}_2)\sum_{\rho_1\vec{k}_1}|v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)|^2 =$$

$$= -\frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\sum_{\vec{k},\rho} b^+_{\rho}(\vec{k})b_{\rho}(\vec{k})$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{VII}c) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\rho \\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_4}(-\vec{k}_4)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\rho\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\rho\rho_3}(\vec{k}_3)v_{\rho\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_2}\delta_{-\vec{k}_1,\vec{k}_2} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\rho_4\rho_3\vec{k}_3} b^+_{\rho_4}(\vec{k}_3)b_{\rho_3}(\vec{k}_3)\sum_{\rho} u_{\rho\rho_3}(\vec{k}_3)v_{\rho\rho_4}(\vec{k}_3)\sum_{\rho_1\vec{k}_1} v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1) = 0$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{VII}d) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\rho \\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\rho\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\rho\rho_3}(\vec{k}_3)v_{\rho\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_2}\delta_{-\vec{k}_1,\vec{k}_2}\delta_{\rho_3,\rho_4}\delta_{\vec{k}_3,-\vec{k}_4} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\rho_1\vec{k}_1} v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\rho\rho_2}(\vec{k}_1)\sum_{\rho_3\vec{k}_3} v_{\rho\rho_3}(\vec{k}_3)u_{\rho\rho_3}(\vec{k}_3) \sim \varepsilon^4\Delta = 0$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{VIII}) \longrightarrow b_{\rho_1}(-\vec{k}_1)b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4) = b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_2}\delta_{-\vec{k}_1,\vec{k}_2} + b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_3}\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_3}$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{VIII}a) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\rho \\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\rho\rho_2}(\vec{k}_2)v_{\rho\rho_3}(\vec{k}_3)u_{\rho\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_2}\delta_{-\vec{k}_1,\vec{k}_2} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\rho_3\rho_4\vec{k}_3} b^+_{\rho_3}(-\vec{k}_3)b_{\rho_4}(-\vec{k}_3)\sum_{\rho} v_{\rho\rho_3}(\vec{k}_3)u_{\rho\rho_4}(\vec{k}_3)\sum_{\rho_1\vec{k}_1} v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1) = 0$$

$$\hat{H}^{(1)}_{eff}(\underline{VIII}b) = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\rho \\ \rho_1\rho_2\rho_3\rho_4}} b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_4}(\vec{k}_4)v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)u_{\rho\rho_2}(\vec{k}_2)v_{\rho\rho_3}(\vec{k}_3)u_{\rho\rho_4}(\vec{k}_4)\delta_{\rho_1,\rho_3}\delta_{\vec{k}_1,\vec{k}_3} = -\frac{\Delta}{N}\sum_{\rho_2\rho_4\vec{k}_2} b^+_{\rho_2}(\vec{k}_2)b_{\rho_4}(\vec{k}_2)\sum_{\rho} u_{\rho\rho_2}(\vec{k}_2)u_{\rho\rho_4}(\vec{k}_2)\sum_{\rho_1\vec{k}_1}|v_{\rho\rho_1}(\vec{k}_1)|^2 =$$

$$= -\frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\sum_{\vec{k},\rho} b^+_{\rho}(\vec{k})b_{\rho}(\vec{k})$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0' + \hat{H}_{pok} + \hat{H}_{eff} = H_0' + \sum_{\rho,\vec{k}} b^+_{\rho}(\vec{k})b_{\rho}(\vec{k})\Big[E_{\rho_{pok}} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta} - \frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta} -$$

$$- \frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta} - \frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta} - \frac{1}{4N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\Big] = H_0' + \sum_{\rho,\vec{k}}\Big[E_{\rho_{pok}} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}\Big]b^+_{\rho}(\vec{k})b_{\rho}(\vec{k})$$

$$E_{\rho}(\vec{k}) = E_{\rho_{pok}}(\vec{k}) + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta}$$

$$\boxed{E_{12}(\vec{k}) = \Delta + A(\vec{k}) + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}_1}\frac{A^2(\vec{k}_1)+B^2(\vec{k}_1)}{\Delta} \pm B(\vec{k}) - \frac{(A\pm B)^2}{2\Delta} + H_0'}$$

R E Z I M E

Ovaj rad je obradjivao pojavu cepanja eksitonskih zona kod kristala sa dva molekula po elementarnoj ćeliji. Prvo je u aproksimaciji Hajtler-Londona dobijen rezultat Davidova, tj. pokazano postojanje dve eksitonske zone sa energijama $E_{k_1,k_2} = \Delta + A \pm B$. Znači, nadjena je širina procepa $2B$. Zatim sam postavio opšti hamiltonijan kristala (po Bogoljubovu) izražen preko Fermi-operatora, koji je sadržao forme II i IV reda po operatorima. Da bi se što veći broj formi četvrtog reda uključio u forme drugog reda, prelazim na Pauli-operatore koji su dati kao $P_n^f = a_n^{0+} a_n^f$. Pojava Pauli- a ne kvazipauli operatora je posledica pretpostavke o samo jednom energetskom nivou pobudjenja. Novodobijeni hamiltonijan sam prvo iskoristio tokom računanja sa metodom približne druge kvantizacije. U ovom metodu se Pauli-operatori direktno zamenjuju sa Boze-operatorima ($P_n^f = B_n^f$), a nelinearni članovi se ne uzimaju u obzir. Time je sistem u potpunosti sveden na "gas" neinteragujućih kvazičestica. Ovaj hamiltonijan je dijagonalizovan smenom Tjablikova $B_f(\vec{k}) = \sum_{\rho=1}^{2} [b_\rho(\vec{k}) u_{f\rho}(\vec{k}) + b_\rho^+(-\vec{k}) v_{f\rho}^*(-\vec{k})]$, u kojoj su b_ρ i b_ρ^+ novi Boze-operatori, a u i v ortonormirane funkcije. Kao rezultat dijagonalizacije pojavljuju se nova rešenja za energiju koja su manja od E_{kl} a popravka je prvog reda veličine po malim veličinama $\varepsilon_1 = \frac{A+B}{\Delta}$ i $\varepsilon_2 = \frac{A-B}{\Delta}$

$$E_1 = \Delta + (A+B)(1-\varepsilon_1) \qquad E_2 = \Delta + (A-B)(1-\varepsilon_2)$$

Širina procepa je sada $2B - \frac{4AB}{\Delta}$.

Konačno sam iskoristio tačnu reprezentaciju Pauli-operatora preko Boze-operatora u prvoj aproksimaciji $P = B - B^+BB$. Time nastaje mogućnost da se izračuna i doprinos nelinearnih članova. U hamiltonijanu postoje forme četvrtog reda koje potiču iz početnog hamiltonijana i ti članovi se nazivaju dinamički članovi, a sada se pojavljuju novi kao posledica novih komutacionih relacija i oni se nazivaju kinematički članovi. Sada se u ovaj hamiltonijan uvodi smena koja je dijagonalizovala H_{pok}. Dobijaju se članovi koji nemaju operatore uredjene u normalnom poretku, i pri njihovom normalizovanju nastaju novi članovi kvadratni po Boze-operatorima. Znači da članovi IV reda mogu da daju doprinos energiji, a njihov uticaj je upravo ono što nas zanima.

Rezultati se mogu formulisati na sledeći način. Nelinearni članovi u prvoj aproksimaciji daju doprinos energiji. Značajno je primetiti da u ovoj aproksimaciji postoji samo doprinos kinematičkih članova, dok dinamički članovi ne igraju nikakvu ulogu. Energije ovako dobijene su veće od E_{POK}

$$E_{\varrho} = H_0' + E_{\varrho POK} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \frac{A^2(\vec{k}) + B^2(\vec{k})}{\Delta}$$

Posebno treba naglasiti da je doprinos ovih članova jednoznačan, što znači da oni ne utiču na širinu procepa, i ovo je verovatno najznačajniji zaključak ovog rada.

Reference

1) В.М. Агранович: Теория экситонов - Москва 1968

2) Н.Н. Боголюбов: Избранные труды - том II (Лекции по квантовой статистике) Киев 1970

3) С.В. Тябликов: Математические методы в квантовой теории феро-магнетизма - Москва 1965

4) D.I. Lalović, B.S. Tošić, R.B. Žakula: Theory of Nonlinear Effects in Crystals in the Second Quantisation Representation - Phys. Rev. 178 (1478) - 1969

5) А.С. Давыдов: Квантовая механика

6) Б.С. Тошич: О влиянии кинематического и динамического взаимодействий на экситонный спектр нулевого приближения Дубна 1971

7) В.И. Смирнов: Курс высшей математики - том III, часть 1 - Москва 1958

8) Ch. Kittel: Uvod u fiziku čvrstog stanja - Beograd 1970

9) Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц: Квантовая механика - нерелятивская теория Москва 1963

10) M. Born: Atomic Physics London 1969