To będzie taki szkic, nie: „rozwiązanie przeze mnie pożądane”, bo nie ma części obliczeń, za to jeżeli ktoś zechce porównać swoje wnioski z moimi, to oto i one!

Transformacja Bogoliubowa

Wybierzmy transformację kwazicząstkową postaci $\gamma_+ = uc_+ + vc_-^\dagger$ oraz $\gamma_- = u'c_- + v'c_+^\dagger$. Fermionowe są operatory c_σ, a co do γ_σ, to *żądamy* tego, żeby:

$$\{c_\sigma, c_{\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma,\sigma'} = \{\gamma_\sigma, \gamma_{\sigma'}^\dagger\}, \qquad \{c_\sigma, c_{\sigma'}\} = 0 = \{\gamma_\sigma, \gamma_{\sigma'}\}.$$

To prowadzi do wniosku, że jedną z najprostszych parametryzacji będzie $u = u' = \cos\alpha$, $v = -v' = \sin\alpha$.

Zapytajmy: czemu akurat taka transformacja? Sprawdzamy, że operator rzutu spinu na oś kwantyzacji $S^z = (\hbar/2)(c_+^\dagger c_+ - c_-^\dagger c_-)$ komutuje z hamiltonianem. Jak z tego skorzystać? „Za czasów pierwszej kwantyzacji” wybieraliśmy funkcje własne hamiltonianu spośród funkcji własnych operatora, który z nim komutował, a „drugokwantyzacyjny” operator kreacji kwazicząstki realizuje „własność” tak:

$$[S^z, \gamma_\sigma^\dagger] = a_\sigma \gamma_\sigma^\dagger, \qquad a_\sigma \in \mathbb{R},$$

i już widać: skoro $[S^z, c_+^\dagger] = (\hbar/2)c_+^\dagger$ oraz $[S^z, c_-] = (\hbar/2)c_-$, to ich kombinacja liniowa też. Dlatego z postaci transformacji wprost wynika, że (tak jak chcemy) γ_σ są operatorami własnymi dla S^z. Po dobraniu α będą własne i dla $\mathcal{H}$.

Zamiast tej długiej dyskusji można mówić: szukamy przekształcenia, które wykurzy rzeczy typu c_+c_- nie tworząc $\gamma_+\gamma_-$, a do tego $\gamma_{\text{złe}} = yc_+ + zc_+^\dagger$ nie wystarczy.

Powinniśmy dostać

$$\mathcal{H} = E_+\gamma_+^\dagger\gamma_+ + E_-\gamma_-^\dagger\gamma_- + C, \qquad E_+, E_-, C \in \mathbb{R}.$$

To prowadzi, jak porównamy skutek podstawienia operatorów kwazicząstkowych do hamiltonianu z postacią oczekiwaną, do układu równań

$$\begin{aligned}
E_+ &= \epsilon_+\cos^2\alpha - \epsilon_-\sin^2\alpha + 2\lambda\sin\alpha\cos\alpha,\\
E_- &= \epsilon_-\cos^2\alpha - \epsilon_+\sin^2\alpha + 2\lambda\sin\alpha\cos\alpha,\\
C &= (\epsilon_+ + \epsilon_-)\sin^2\alpha - 2\lambda\sin\alpha\cos\alpha,\\
0 &= (\epsilon_+ + \epsilon_-)\sin\alpha\cos\alpha - \lambda(\cos^2\alpha - \sin^2\alpha).
\end{aligned}$$

I istotnie, jest to możliwe dla $\operatorname{tg}(2\alpha) = \lambda/\epsilon$. Dla porządku ustalmy znak $\cos(2\alpha)$, niech będzie dodatni. Wtedy dla $|h| < \sqrt{\epsilon^2 + \lambda^2}$ energie kwazicząstek będą dodatnie. Zatem przekształcając funkcje trygonometryczne

$$\begin{aligned}
E_+ &= h + \sqrt{\epsilon^2 + \lambda^2},\\
E_- &= -h + \sqrt{\epsilon^2 + \lambda^2},\\
C &= \epsilon - \sqrt{\epsilon^2 + \lambda^2}.
\end{aligned}$$

Nowy stan próżni $|0\rangle'$ bedzię spełniał $\gamma_\sigma|0\rangle' = 0$. Dla $|h| < \sqrt{\epsilon^2 + \lambda^2}$ energie kwazicząstek są dodatnie i C jest energią stanu podstawowego $|P\rangle$ równego $|0\rangle'$. Dla wiekszych $|h|$ niższą energię (a mianowicie $-|h| + \epsilon$) ma stan z jedną kwazicząstką. Jeżeli np. $h < -\sqrt{\epsilon^2 + \lambda^2}$ to $E_+ < 0$ i stanem podstawowym jest $|P\rangle = \gamma_+^\dagger|0\rangle'$ o energii $h + \epsilon$.

Jak widać energia stanu podstawowego zależy od wartości zewnętrznego pola magnetycznego, jeśli jest ono dostatecznie silne. Wtedy stan podstawowy jest magnetyczny o wartości rzutu spinu na kierunek pola $\hbar/2$. Poza tym operatory kreujące wzbudzenia w magnetycznym stanie podstawowym (znów zobaczmy dla dla $h < -\sqrt{\epsilon^2 + \lambda^2}$) to $\gamma_-^\dagger$ i (to nie literówka!) γ_+. Cóż…jeśli układ <u>wzbudzony</u> ma mieć <u>wyższą</u> energię, to tak musi być.

Więcej dyskusji! W słabych polach magnetycznych stan podstawowy to kombinacja liniowa $|0\rangle$ oraz $c_+^\dagger c_-^\dagger|0\rangle$. Ale stan podstawowy o niezerowym spinie (silniejsze pola) to musi być (zależnie od zwrotu pola) $c_+^\dagger|0\rangle$ bądź $c_-^\dagger|0\rangle$. Niczego innego nie ma „na stole”. Sprawdzamy i istotnie $\mathcal{H}c_\pm^\dagger|0\rangle = (\epsilon \pm h)c_\pm^\dagger|0\rangle$.

Elementy macierzowe hamiltonianu Heisenberga

Hamiltonian Heisenberga $\mathcal{H} = J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ winniśmy przepisać za pomocą operatorów kreacji i anihilacji. Z uwagi na to, że pracujemy w bazie stanów własnych operatorów $\{S_i^z\}$ wygodniej nie stosować operatorów S_i^x, S_i^y, tylko ich kombinacje $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$, które przekształcają jedne stany własne operatorów $\{S_i^z\}$ w drugie. Dodatkowo $[S_i^+, S_j^-] = 2\delta_{i,j}S_i^z$. Podstawiwszy mamy:

$$\mathcal{H} = J\left[S_1^zS_2^z + \frac{1}{2}\left(S_1^+S_2^- + S_2^+S_1^-\right)\right], \qquad S_i^- = \hbar c_{i\downarrow}^\dagger c_{i,\uparrow},\ S_i^+ = \left(S_i^-\right)^\dagger,\ S_i^z = \frac{\hbar}{2}\left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}\right).$$

A teraz napiszmy jak działają poszczególne składniki

$$S_1^z S_2^z c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma'}^\dagger |0\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\sigma\sigma' c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma'}^\dagger |0\rangle\,, \qquad S_1^+ S_2^- c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma'}^\dagger |0\rangle = \hbar^2 \delta_{\sigma,\downarrow}\delta_{\sigma',\uparrow} c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle\,.$$

Musicie mi wybaczyć, że chcę mnożyć strzałki w pierwszym wyrażeniu— zwyczajnie $\sigma\sigma'$ jest jedynką dla równoległych spinów cząstek i minus jedynką dla przeciwnych.

To uruchamiamy hamitonian na danych stanach...

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}|1\rangle &= J\frac{\hbar^2}{4}|1\rangle\,,\\
\mathcal{H}|2\rangle &= J\frac{\hbar^2}{4}|2\rangle\,,\\
\mathcal{H}|3\rangle &= J\frac{\hbar^2}{4}|3\rangle\,,\\
\mathcal{H}|4\rangle &= -3J\frac{\hbar^2}{4}|4\rangle\,,
\end{aligned}$$

i okazują się one być jego stanami własnymi. Są to trzy tryplety (o wartości spinu $1\hbar$) i jeden singlet (stan $|4\rangle$).

Zaburzenie w postaci zewnętrznego pola magnetycznego powinno rozszczepić poziom trypletowy ($S = 1$) na trzy podpoziomy o rzutach spinu $-1, 0, 1$ na kierunek pola. Singlet i tryplet o zerowym rzucie spinu (stan $|3\rangle$) mają pozostać nietknięte. Sprawdzamy... i istotnie!

Stany $|1\rangle$, $|2\rangle$ nie są stanami własnymi zaburzonego hamiltonianu w przeciwieństwie do $|\uparrow\uparrow\rangle = 2^{-1/2}(|1\rangle + |2\rangle)$ o energii $J\hbar^2/4 + h\hbar$ oraz $|\downarrow\downarrow\rangle = 2^{-1/2}(|1\rangle - |2\rangle)$ o energii $J\hbar^2/4 - h\hbar$. Jak widać dla $J < 0$ stan podstawowy ma całkowity spin 1 nawet w zerowym polu, a dla $J > 0$ przejście do stanu z niezerową magnetyzacją następuje dopiero wtedy gdy $|h| > J\hbar$.