

$$- \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'n} \left[(c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow} - c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}) \left(\frac{1}{2} c_{n\uparrow}^{\dagger} c_{n\downarrow} - \frac{1}{2} c_{n\downarrow}^{\dagger} c_{n\uparrow} \right) + \right. \\ \left. + c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{n\uparrow}^{\dagger} c_{n\downarrow} + c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow} c_{n\downarrow}^{\dagger} c_{n\uparrow} \right] \langle \mathbf{k}'n | V | n\mathbf{k} \rangle. \quad (2.112)$$

Согласно (ч. I.38.5), (ч. I.38.6), комбинации операторов c_n — в точности операторы спина S_z , S_+ и S_- . Следовательно, для второго (обменного) члена в (2.112) можно записать

$$H'_{ex} = - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'n} \langle \mathbf{k}'n | V | n\mathbf{k} \rangle \left[(c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow} - c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}) S_{nz} + \right. \\ \left. + c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} S_{n+} + c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow} S_{n-} \right]. \quad (2.113)$$

Этот оператор описывает четыре процесса, посредством которых электрон может перейти из состояния $\mathbf{k}$ в состояние $\mathbf{k}'$. В исходном состоянии электрон имеет одно из двух возможных направлений спина, а в конечном — либо то же самое, либо противоположное направление спина. В первом порядке расчета по теории возмущений эти процессы дают лишь не зависящие от температуры вклады. Важнее процессы второго порядка, которые идут через промежуточное состояние. Рассмотрим, в частности, процессы перехода из состояния $\mathbf{k}\uparrow$ в $\mathbf{k}'\uparrow$. Имеем тогда четыре возможности.

а) Электрон переходит в незаполненное состояние $\mathbf{k}''$, а оттуда переходит в $\mathbf{k}'$. При этом в $\mathbf{k}''$ электрон сохраняет направление спина или оно может быть изменено на противоположное.

б) Электрон переходит сначала из заполненного состояния $\mathbf{k}''$ в состояние $\mathbf{k}'$, а затем электрон $\mathbf{k}$ перескакивает в дырку $\mathbf{k}''$. Здесь также возможны два направления спина в $\mathbf{k}''$.

Для дальнейших вычислений упрощаем (2.113), полагая обменный матричный элемент (2.111) постоянным и отрицательным. Обозначим его через $-J$. В качестве вклада второго порядка в гамильтониан для процесса $\mathbf{k}\uparrow$ в $\mathbf{k}'\uparrow$ при фиксированном n , который следует тогда из возможности а) (переворот спина в промежуточном состоянии), имеем

$$H'_{ex,a}^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}''} J^2 \frac{c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''\downarrow} c_{\mathbf{k}''\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow} S_{n-} S_{n+}}{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}')}, \quad (2.114a)$$

а из возможности б) (также с переворотом спина)

$$H'_{ex,b}^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}''} J^2 \frac{c_{\mathbf{k}''\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''\uparrow} S_{n+} S_{n-}}{E(\mathbf{k}) - [E(\mathbf{k}) + E(\mathbf{k}') - E(\mathbf{k}'')]} \quad (2.114б)$$

Соответствующие выражения без переворота спина можно получить, перевернув обозначающие направление спина стрелки в $c_{\mathbf{k}}^{(\pm)}$ и заменив S_- и S_+ на S_z . Прежде чем прибавить эти вклады, заметим, что, с точностью до знака, знаменатель в (2.114б) вследствие $E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}')$ равен знаменателю в (2.114а). Далее, перегруппиро-