无磁场

$$\widetilde{H}=-\mathrm{i}\sum_{\langle j,k\rangle}K_{\alpha_{jk}}u_{jk}c_jc_k, \tag{1}$$

其中 u_{jk} 是 $\hat{u}_{jk}$ 的本征值。

首先 c_j 是 j 格点的 Majorana-c 算符。若区分 A,B 子格，用 $c_{\boldsymbol{r},\alpha}$ 表示 $\boldsymbol{r}$ unit cell 内 β 子格格点上的 Majorana-c 算符，则哈密顿量可改写为：

$$\begin{aligned}\widetilde{H}&=-\mathrm{i}\sum_{\langle j,k\rangle}K_{\alpha_{jk}}u_{jk}c_jc_k\\&=-\mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{r}\in\mathrm{UC}}\left(K_xu_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r},B}c_{\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r},B}+K_yu_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1,B}c_{\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1,B}+K_zu_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2,B}c_{\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2,B}\right)\\&=-\mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{r}\in\mathrm{UC}}\sum_{\boldsymbol{\delta}\in\{\boldsymbol{0},\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2\}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},B}c_{\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},B}.\end{aligned} \tag{2}$$

其中

$$\mathrm{UC}\equiv\{\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N\}, \tag{3}$$

$N=N_1N_2$ 为总 unit cell 数，$\boldsymbol{r}_i$ 为第 i 个元胞的位置矢量，

$$K_{\boldsymbol{\delta}}\equiv\begin{cases}K_x, & \boldsymbol{\delta}=\boldsymbol{0},\\K_y, & \boldsymbol{\delta}=\boldsymbol{a}_1,\\K_z, & \boldsymbol{\delta}=\boldsymbol{a}_2.\end{cases} \tag{4}$$

把 $\boldsymbol{r}$ unit cell 内的两个 Majorana-c 算符组合成复费米子算符：

$$a_{\boldsymbol{r}}\equiv\frac{1}{2}\left(c_{\boldsymbol{r},A}+\mathrm{i}c_{\boldsymbol{r},B}\right),\quad a_{\boldsymbol{r}}^{\dagger}\equiv\frac{1}{2}\left(c_{\boldsymbol{r},A}-\mathrm{i}c_{\boldsymbol{r},B}\right),\quad \boldsymbol{r}\in\mathrm{UC}, \tag{5}$$

可以反解出

$$c_{\boldsymbol{r},A}=a_{\boldsymbol{r}}+a_{\boldsymbol{r}}^{\dagger},\quad c_{\boldsymbol{r},B}=\frac{1}{\mathrm{i}}\left(a_{\boldsymbol{r}}-a_{\boldsymbol{r}}^{\dagger}\right), \tag{6}$$

则哈密顿量可表达为

$$\begin{aligned}\widetilde{H}&=-\mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{r}\in\mathrm{UC}}\sum_{\boldsymbol{\delta}\in\{\boldsymbol{0},\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2\}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},B}c_{\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},B}\\&=-\mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{r}}\sum_{\boldsymbol{\delta}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},B}\left(a_{\boldsymbol{r}}+a_{\boldsymbol{r}}^{\dagger}\right)\cdot\frac{1}{\mathrm{i}}\left(a_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}}-a_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}}^{\dagger}\right)\\&=\sum_{\boldsymbol{r}}\sum_{\boldsymbol{\delta}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},B}\left(a_{\boldsymbol{r}}+a_{\boldsymbol{r}}^{\dagger}\right)\left(-a_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}}+a_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}}^{\dagger}\right)\\&=\sum_{\boldsymbol{\delta}}\sum_{\boldsymbol{r}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},B}\left(a_{\boldsymbol{r}}+a_{\boldsymbol{r}}^{\dagger}\right)\left(-a_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}}+a_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}}^{\dagger}\right)\\&=\sum_{\boldsymbol{\delta}}\sum_{\boldsymbol{r}}\sum_{\boldsymbol{r}'\in\mathrm{UC}}\sum_{\boldsymbol{r}''\in\mathrm{UC}}\delta_{\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}}\delta_{\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},B}\left(a_{\boldsymbol{r}'}+a_{\boldsymbol{r}'}^{\dagger}\right)\left(-a_{\boldsymbol{r}''}+a_{\boldsymbol{r}''}^{\dagger}\right)\\&=\sum_{\boldsymbol{\delta}}\sum_{\boldsymbol{r}'}\sum_{\boldsymbol{r}''}\sum_{\boldsymbol{r}}\delta_{\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}}\delta_{\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r},A;\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta},B}\left(a_{\boldsymbol{r}'}+a_{\boldsymbol{r}'}^{\dagger}\right)\left(-a_{\boldsymbol{r}''}+a_{\boldsymbol{r}''}^{\dagger}\right)\\&=\sum_{\boldsymbol{\delta}}\sum_{\boldsymbol{r}'}\sum_{\boldsymbol{r}''}\delta_{\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{\delta}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r}',A;\boldsymbol{r}'',B}\left(a_{\boldsymbol{r}'}+a_{\boldsymbol{r}'}^{\dagger}\right)\left(-a_{\boldsymbol{r}''}+a_{\boldsymbol{r}''}^{\dagger}\right)\\&=\sum_{\boldsymbol{r}'}\sum_{\boldsymbol{r}''}\left(\sum_{\boldsymbol{\delta}}\delta_{\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{\delta}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r}',A;\boldsymbol{r}'',B}\right)\left(a_{\boldsymbol{r}'}+a_{\boldsymbol{r}'}^{\dagger}\right)\left(-a_{\boldsymbol{r}''}+a_{\boldsymbol{r}''}^{\dagger}\right)\\&=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{\boldsymbol{\delta}}\delta_{\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r}_i,A;\boldsymbol{r}_j,B}\right)\left(a_i+a_i^{\dagger}\right)\left(-a_j+a_j^{\dagger}\right)\end{aligned} \tag{7}$$

令

$$
t_{ij}=\sum_{\boldsymbol{\delta}\in\{\mathbf{0},\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2\}}\delta_{\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r}_i,A;\boldsymbol{r}_j,B}, \tag{8}
$$

则

$$
\begin{aligned}
\widetilde{H}&=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{\boldsymbol{\delta}}\delta_{\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}}K_{\boldsymbol{\delta}}u_{\boldsymbol{r}_i,A;\boldsymbol{r}_j,B}\right)\left(a_i+a_i^{\dagger}\right)\left(-a_j+a_j^{\dagger}\right)\\
&=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}\left(a_i+a_i^{\dagger}\right)\left(-a_j+a_j^{\dagger}\right)\\
&=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-t_{ij}a_ia_j+t_{ij}a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}+t_{ij}a_ia_j^{\dagger}-t_{ij}a_i^{\dagger}a_j\right)
\end{aligned} \tag{9}
$$

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(-t_{ij})a_ia_j&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(-t_{ij})a_ia_j+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(-t_{ij})a_ia_j\\
&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}a_ja_i+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(-t_{ij})a_ia_j\\
&=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}t_{ji}a_ia_j+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(-t_{ij})a_ia_j\\
&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(t_{ji}-t_{ij}\right)a_ia_j
\end{aligned} \tag{10}
$$

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}\\
&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}-t_{ij}a_j^{\dagger}a_i^{\dagger}+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}\\
&=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}-t_{ji}a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}\\
&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(t_{ij}-t_{ji}\right)a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}
\end{aligned} \tag{11}
$$

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(t_{ij}a_ia_j^{\dagger}-t_{ij}a_i^{\dagger}a_j\right)&=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left[t_{ij}\left(\delta_{ij}-a_j^{\dagger}a_i\right)-t_{ij}a_i^{\dagger}a_j\right]\\
&=\sum_{i=1}^{N}t_{ii}+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-t_{ij}\right)a_j^{\dagger}a_i+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-t_{ij}\right)a_i^{\dagger}a_j\\
&=\sum_{i=1}^{N}t_{ii}+\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}\left(-t_{ji}\right)a_i^{\dagger}a_j+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-t_{ij}\right)a_i^{\dagger}a_j\\
&=\sum_{i=1}^{N}t_{ii}+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}-(t_{ij}+t_{ji})a_i^{\dagger}a_j
\end{aligned} \tag{12}
$$

于是

$$
\begin{aligned}
&\widetilde{H}=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-t_{ij}a_ia_j+t_{ij}a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}+t_{ij}a_ia_j^{\dagger}-t_{ij}a_i^{\dagger}a_j\right)\\
&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(t_{ji}-t_{ij}\right)a_ia_j+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(t_{ij}-t_{ji}\right)a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}-(t_{ij}+t_{ji})a_i^{\dagger}a_j+\sum_{i=1}^{N}t_{ii}
\end{aligned} \tag{13}
$$

设

$$
\begin{aligned}
\widetilde{H} &= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} a_1^\dagger & \cdots & a_N^\dagger & a_1 & \cdots & a_N \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \Xi & \Delta \\ \Delta^\dagger & -\Xi^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \\ a_1^\dagger \\ \vdots \\ a_N^\dagger \end{bmatrix} + C \\
&= C + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Xi_{ij}a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-\Xi^{\mathrm{T}}\right)_{ij}a_i a_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Delta_{ij}a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\Delta^\dagger\right)_{ij}a_i a_j \\
&= C + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Xi_{ij}a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-\Xi_{ji}\right)\left(\delta_{ij} - a_j^\dagger a_i\right) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Delta_{ij}a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-\Delta_{ij}^*\right)a_i a_j \\
&= C - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\Xi_{ii} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Xi_{ij}a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Xi_{ji}a_j^\dagger a_i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Delta_{ij}a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-\Delta_{ij}^*\right)a_i a_j \\
&= C - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\Xi_{ii} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Xi_{ij}a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}\Xi_{ij}a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Delta_{ij}a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-\Delta_{ij}^*\right)a_i a_j \\
&= C - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\Xi_{ii} + \sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}\Xi_{ij}a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\Delta_{ij}a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-\Delta_{ij}^*\right)a_i a_j
\end{aligned} \tag{14}
$$

其中

$$
\Delta^{\mathrm{T}} = -\Delta, \quad \Xi^\dagger = \Xi. \tag{15}
$$

对比可得

$$
\Xi_{ij} = -\left(t_{ij} + t_{ji}\right), \quad \Delta_{ij} = t_{ij} - t_{ji}, \quad C = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\Xi_{ii} + \sum_{i=1}^{N}t_{ii} = 0. \tag{16}
$$

磁场微扰

如果考虑

$$
H_{\mathrm{eff}}^{(3)} = -\kappa\sum_{\langle j,k,l\rangle}\sigma_j^x\sigma_k^y\sigma_l^z = -\kappa\sum_{\boldsymbol{r}\in\mathrm{UC}}\left(\mathrm{around}A + \mathrm{around}B\right), \tag{17}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{around}A &= \sigma_{\boldsymbol{r},A}^x\sigma_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1,B}^y\sigma_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2,B}^z + \sigma_{\boldsymbol{r},B}^x\sigma_{\boldsymbol{r},A}^y\sigma_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2,B}^z + \sigma_{\boldsymbol{r},B}^x\sigma_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1,B}^y\sigma_{\boldsymbol{r},A}^z \\
&= \mathrm{i}u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1,B;\boldsymbol{r},A}u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2,B;\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1,B}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2,B} \\
&\quad + \mathrm{i}u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2,B;\boldsymbol{r},A}u_{\boldsymbol{r},B;\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_2,B}c_{\boldsymbol{r},B} \\
&\quad + \mathrm{i}u_{\boldsymbol{r},B;\boldsymbol{r},A}u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1,B;\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r},B}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1,B} \\
&= \mathrm{i}\sum_{\substack{(\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{\delta}_2)\in \\ \{(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2),(\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{0}),(\boldsymbol{0},\boldsymbol{a}_1)\}}} u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_1,B;\boldsymbol{r},A}u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_2,B;\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_1,B}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_2,B}
\end{aligned} \tag{18}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{around}B &= \sigma_{\boldsymbol{r},B}^x\sigma_{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}_1,A}^y\sigma_{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}_2,A}^z + \sigma_{\boldsymbol{r},A}^x\sigma_{\boldsymbol{r},B}^y\sigma_{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}_2,A}^z + \sigma_{\boldsymbol{r},A}^x\sigma_{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}_1,A}^y\sigma_{\boldsymbol{r},B}^z \\
&= \mathrm{around}A\left(\boldsymbol{a}_1 \leftrightarrow -\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2 \leftrightarrow -\boldsymbol{a}_2, A \leftrightarrow B\right) \\
&= \mathrm{i}\sum_{\substack{\left(\boldsymbol{\delta}_1',\boldsymbol{\delta}_2'\right)\in \\ \{(-\boldsymbol{a}_1,-\boldsymbol{a}_2),(-\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{0}),(\boldsymbol{0},-\boldsymbol{a}_1)\}}} u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_1',A;\boldsymbol{r},B}u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_2',A;\boldsymbol{r},B}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_1',A}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_2',A}
\end{aligned} \tag{19}
$$

$$
\begin{aligned}
-\kappa\sum_{\boldsymbol{r}}\mathrm{around}A &= -\mathrm{i}\kappa\sum_{\boldsymbol{r}}\sum_{(\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{\delta}_2)} u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_1,B;\boldsymbol{r},A}u_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_2,B;\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_1,B}c_{\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_2,B}\\
&= -\mathrm{i}\kappa\sum_{(\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{\delta}_2)}\sum_{\boldsymbol{r}'}\sum_{\boldsymbol{r}''}\sum_{\boldsymbol{r}}\delta_{\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_1}\delta_{\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\delta}_2}u_{\boldsymbol{r}',B;\boldsymbol{r},A}u_{\boldsymbol{r}'',B;\boldsymbol{r},A}c_{\boldsymbol{r}',B}c_{\boldsymbol{r}'',B}\\
&= -\mathrm{i}\kappa\sum_{(\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{\delta}_2)}\sum_{\boldsymbol{r}'}\sum_{\boldsymbol{r}''}\delta_{\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{\delta}_2}u_{\boldsymbol{r}',B;\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{\delta}_1,A}u_{\boldsymbol{r}'',B;\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{\delta}_2,A}c_{\boldsymbol{r}',B}c_{\boldsymbol{r}'',B}\\
&= -\mathrm{i}\kappa\sum_{\boldsymbol{r}'}\sum_{\boldsymbol{r}''}\left(\sum_{(\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{\delta}_2)}\delta_{\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{\delta}_2}u_{\boldsymbol{r}',B;\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{\delta}_1,A}u_{\boldsymbol{r}'',B;\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{\delta}_2,A}\right)c_{\boldsymbol{r}',B}c_{\boldsymbol{r}'',B}\\
&= -\mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{(\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{\delta}_2)}\delta_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}_2}u_{\boldsymbol{r}_i,B;\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{\delta}_1,A}u_{\boldsymbol{r}_j,B;\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}_2,A}\right)c_{i,B}c_{j,B}
\end{aligned}
\tag{20}
$$

令

$$
t_{ij}^{(+)} = \sum_{(\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{\delta}_2)}\delta_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}_2}u_{\boldsymbol{r}_i,B;\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{\delta}_1,A}u_{\boldsymbol{r}_j,B;\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}_2,A}
\tag{21}
$$

$$
c_{\boldsymbol{r},A} = a_{\boldsymbol{r}} + a_{\boldsymbol{r}}^{\dagger},\quad c_{\boldsymbol{r},B} = \frac{1}{\mathrm{i}}\left(a_{\boldsymbol{r}} - a_{\boldsymbol{r}}^{\dagger}\right),
\tag{22}
$$

则

$$
\begin{aligned}
-\kappa\sum_{\boldsymbol{r}}\mathrm{around}A &= -\mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{(\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{\delta}_2)}\delta_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{\delta}_1,\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}_2}u_{\boldsymbol{r}_i,B;\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{\delta}_1,A}u_{\boldsymbol{r}_j,B;\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}_2,A}\right)c_{i,B}c_{j,B}\\
&= -\mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}^{(+)}c_{i,B}c_{j,B}\\
&= \mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}^{(+)}\left(a_i - a_i^{\dagger}\right)\left(a_j - a_j^{\dagger}\right)\\
&= \mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}^{(+)}\left(a_ia_j + a_i^{\dagger}a_j^{\dagger} - a_ia_j^{\dagger} - a_i^{\dagger}a_j\right)\\
&= \mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{\left(t_{ij}^{(+)} - t_{ji}^{(+)}\right)}{2}\left(a_ia_j + a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}\right) + \mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(t_{ji}^{(+)} - t_{ij}^{(+)}\right)a_i^{\dagger}a_j - \mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}t_{ii}^{(+)}
\end{aligned}
\tag{23}
$$

令

$$
t_{ij}^{(-)} = \sum_{(\boldsymbol{\delta}_1',\boldsymbol{\delta}_2')}\delta_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{\delta}_1',\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}_2'}u_{\boldsymbol{r}_i,A;\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{\delta}_1',B}u_{\boldsymbol{r}_j,A;\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{\delta}_2',B}
\tag{24}
$$

则

$$
\begin{aligned}
-\kappa\sum_{\boldsymbol{r}}\mathrm{around}B &= -\mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}^{(-)}c_{i,A}c_{j,A}\\
&= -\mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}^{(-)}\left(a_i + a_i^{\dagger}\right)\left(a_j + a_j^{\dagger}\right)\\
&= -\mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}t_{ij}^{(-)}\left(a_ia_j + a_i^{\dagger}a_j^{\dagger} + a_ia_j^{\dagger} + a_i^{\dagger}a_j\right)\\
&= -\mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{\left(t_{ij}^{(-)} - t_{ji}^{(-)}\right)}{2}\left(a_ia_j + a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}\right) + \mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(t_{ji}^{(-)} - t_{ij}^{(-)}\right)a_i^{\dagger}a_j - \mathrm{i}\kappa\sum_{i=1}^{N}t_{ii}^{(-)}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

于是微扰哈密顿量为

$$
\begin{aligned}
\widetilde{H}_{\mathrm{eff}}^{(3)} &= -\kappa \sum_{\boldsymbol{r}\in\mathrm{UC}} (\mathrm{around} A + \mathrm{around} B) \\
&= \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \frac{\mathrm{i}\kappa}{2}\left[\left(t_{ij}^{(+)} - t_{ji}^{(+)}\right) - \left(t_{ij}^{(-)} - t_{ji}^{(-)}\right)\right]\left(a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger\right) + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \mathrm{i}\kappa \left[\left(t_{ji}^{(+)} - t_{ij}^{(+)}\right) + \left(t_{ji}^{(-)} - t_{ij}^{(-)}\right)\right] a_i^\dagger a_j - \mathrm{i}\kappa \sum_{i=1}^{N}\left(t_{ii}^{(+)} + t_{ii}^{(-)}\right)
\end{aligned} \tag{26}
$$

设

$$
\begin{aligned}
\widetilde{H}_{\mathrm{eff}}^{(3)} &= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} a_1^\dagger & \cdots & a_N^\dagger & a_1 & \cdots & a_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Xi' & \Delta' \\ \Delta'^\dagger & -\Xi'^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \\ a_1^\dagger \\ \vdots \\ a_N^\dagger \end{bmatrix} + C' \\
&= C' - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \Xi'_{ii} + \sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} \Xi'_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \Delta'_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(-(\Delta'_{ij})^*\right) a_i a_j
\end{aligned} \tag{27}
$$

对比可得

$$
\Xi'_{ij} = \mathrm{i}\kappa\left[\left(t_{ji}^{(+)} - t_{ij}^{(+)}\right) + \left(t_{ji}^{(-)} - t_{ij}^{(-)}\right)\right], \quad \Delta'_{ij} = \frac{\mathrm{i}\kappa}{2}\left[\left(t_{ij}^{(+)} - t_{ji}^{(+)}\right) - \left(t_{ij}^{(-)} - t_{ji}^{(-)}\right)\right] \tag{28}
$$