$SU(N)$ 自旋波计算

Ryelin

2025 年 7 月 14 日

摘要

本文将回顾并归纳最近邻 Ising 耦合形式自旋系统的 $SU(N)$ 线性自旋波近似哈密顿量的一般形式，并给出铁磁、反铁磁自旋波的实例，以说明其和一般固体物理所述之自旋波的等价性。一言以蔽之，自旋波计算方案就是将自旋哈密顿量用适当表象下的 Schwinger Boson 算符表达以后，将基态所对应的 Boson 凝聚以后所进行的谐振子近似。本文的讨论范围仅限于具有格点直积态形式的基态模式，不考虑出现了格点间纠缠的各类基态 (例如 VBS)。

目录

1 简介

线性自旋波近似是一种描述具有磁有序的小量子涨落自旋系统的有效计算方案。其核心思想是假定系统处在某一已知的基态上，并出现微小的量子涨落。在玻色子的语言下，处在已知的基态上，代表此时描述基态的 Boson 出现凝聚，而微小的量子涨落则对应于其余量子态的产生与湮灭行为。从而利用二次量子化下的 Boson 准粒子行为，近似描述体系的低能性质。

本文我们将给出具有如下最近邻 Ising 耦合相互作用的自旋系统的自旋波一般描述

$$\hat{H}=\sum_m\sum_{\langle ij\rangle}J_m\hat{P}_i^m\hat{Q}_j^m \tag{1}$$

这里 $\hat{P}_i^m,\hat{Q}_j^m$ 是第 i 格点的若干局域算符。大量的模型可以用这一形式来描述。例如各向同性的 spin-1/2 Heisenberg 模型

$$\hat{H}=\sum_{\langle ij\rangle}J\Big(\hat{S}_i^x\hat{S}_j^x+\hat{S}_i^y\hat{S}_j^y+\hat{S}_i^z\hat{S}_j^z\Big) \tag{2}$$

此时 $\hat{S}_i^m$ 局域算符为自旋算符的三个分量。类似地，六角晶格上的 Kitaev 模型

$$\hat{H}=\sum_{\langle ij\rangle\gamma}J\hat{S}_i^\gamma\hat{S}_j^\gamma \tag{3}$$

及其更一般的非对角相互作用推广形式，也可以按此模型描述。除此以外，由其它高阶幺正群生成元所描述的高自旋系统也可以纳入这一框架，例如我们可以考虑令 $\hat{P}_i^m,\hat{Q}_i^m$ 为八个 Gell-mann 矩阵

$$\hat{H}=\sum_{m=1}^{8}\sum_{\langle ij\rangle}J_m\hat{\lambda}_i^m\lambda_j^m \tag{4}$$

本文的内容主要参考 Ref.[1]

2 单子格序情形

2.1 二次型玻色哈密顿量矩阵的书写

假设基态具有单子格磁序，即 $|GS\rangle=\prod\limits_i|\psi_i\rangle$。则每一格点上的自旋态，总可以对偶到一个玻色子的占据上，即

$$|\psi_i\rangle=\hat{b}_i^\dagger|vac\rangle \tag{5}$$

例如在 spin-1/2 体系的一个典型铁磁态，总是有 $|\uparrow\rangle=\hat{b}_\uparrow^\dagger|vac\rangle,|\downarrow\rangle=\hat{b}_\downarrow|vac\rangle$ 的 Schwinger boson 描述。选取一个表象，使得 $|\psi_i\rangle$ 是该格点 Hilbert 空间的第一基矢，它所对应的 Schwinger Boson 被记为 $\hat{b}_{i0}$。对于 $SU(N)$ 自旋波，每个格点的 Hilbert 空间为 N 维，于是在这一选定的表象下，局域算符 $\hat{S}_i^m$ 可以被写为 $N\times N$ 的表示矩阵。二次量子化的语言下，自旋系统的哈密顿量就被表达为

$$\hat{H}=\sum_m\sum_{\langle ij\rangle}J_mD_{\alpha\beta}(P^m)D_{\mu\nu}(Q^m)\hat{b}_{i\alpha}^\dagger\hat{b}_{i\beta}\hat{b}_{j\mu}^\dagger\hat{b}_{j\nu} \tag{6}$$

上式采用了不严格的求和约定，即对指标 α,β,μ,ν 从 0 到 $N-1$ 进行求和。

举例而言，自旋算符 $\hat{S}^{x,y,z}$ 对自旋 1/2 粒子的描述，具有 Pauli 矩阵的表示形式。如果系统所处处于 $|\uparrow\rangle$ 铁磁态，那么 $\hat{S}^z$ 的表示为 $D(S^z)=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1&\\&-1\end{pmatrix}$。而如果处于 $|\downarrow\rangle$ 的铁磁态，那么就将

$\hat{S}^x$ 表示为 $D^{(\downarrow)}(S^z) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$。如果处于更复杂的态 $|\psi\rangle$，那么就引入一个表象变换矩阵 R，使得 $R\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = D(|\psi\rangle)$，这里 $D(|\psi\rangle)$ 是在原始 $\hat{S}^z$ 表象下的矢量表示，亦即若 $|\psi\rangle = c_\uparrow |\uparrow\rangle + c_\downarrow |\downarrow\rangle$，则 $D(|\psi\rangle) = \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix}$，于是此时 $\hat{S}^z$ 的表示矩阵就应当为

$$D^{(gs)}\left(\hat{S}^z\right) = R^\dagger D\left(\hat{S}^z\right) R \tag{7}$$

对于 $SU(N)$ 的高自旋情形同理。从而可以利用 R 矩阵，将哈密顿量中的局域算符 $\hat{P}^m$,$\hat{Q}^m$ 在某一个以基态作为第一基矢的表象 (gs) 中表示

$$D^{(gs)}\left(\hat{P}^m\right) = R^\dagger D\left(\hat{P}^m\right) R \qquad D^{(gs)}\left(\hat{Q}^m\right) = R^\dagger D\left(\hat{Q}^m\right) R \tag{8}$$

我们不妨记 $R = \left(R_0, R_1, \cdots, R_{N-1}\right)$，由于我们期望 $R\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = D(|\psi\rangle)$，因此有列矢量 $R_0 = D(|\psi\rangle)$。由于 R 是幺正的，因此 $R_1, \cdots, R_{N-1}$ 都应当与 $R_0 = D(|\psi\rangle)$ 正交归一，亦即 $R_1, \cdots, R_{N-1}$ 自身归一的同时，满足

$$R_i^T D(|\psi\rangle) = 0 \qquad i = 1, 2, \cdots, N-1 \tag{9}$$

上式意味着 $R_1, \cdots, R_{N-1}$ 是 $D(|\psi\rangle)$ 的核空间 (Null space) 的正交归一基底。从 $Null[D(|\psi\rangle))]$ 中任取一组正交归一基底，就可以构造出一个对应的表象变换 R 矩阵。

由于我们认定基态是每个格点都处在 $\hat{b}_0^\dagger |vac\rangle$ 所对应的自旋态上，这意味着在 Boson 的语言下，Boson 在 $\hat{b}_0 |vac\rangle$ 所对应的态上发生凝聚。如果可以只考虑很小的量子涨落，那么根据 BEC 的基本精神，我们可以认为将每个格点上的 $\hat{b}_{i0}^\dagger, \hat{b}_{i0}$ 从算符降低为一个数。在实际计算中，对于 $\hat{b}_{i0}^\dagger$ 或者 $\hat{b}_{i0}$ 单独出现时，可以视为

$$\hat{b}_{i0}^\dagger \hat{b}_{i0} \approx \mathcal{N} \equiv b_0^2 \tag{10}$$

这里 $\mathcal{N}$ 是 Schwinger boson 的粒子数约束。对于最常见的 spin-S 系统的 $SU(2S+1)$ 自旋波理论中，总是有 $\mathcal{N} = 1$。而如果 $\hat{b}_{i0}$ 组成数算符时，则以如下替换

$$\hat{b}_{i0}^\dagger \hat{b}_{i0} = \mathcal{N} - \sum_{\alpha=1}^{N-1} \hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{i\alpha} \tag{11}$$

在不考虑强量子涨落时，自旋系统的 Schwinger Boson 哈密顿量(6)就可以以 b_0 为参考作谐振子近似，即只保留到有两个 Boson 算符的形式。为此，我们首先引入记号

$$L_{\alpha\beta;\mu\nu} = \sum_m J_m D_{\alpha\beta}\left(\hat{P}^m\right) D_{\mu\nu}\left(\hat{Q}^m\right) \tag{12}$$

在单子格情形下，如果哈密顿量是 Ising 的对角耦合形式，即 $\hat{P}^m = \hat{Q}^m$ 是同一个算符，那么显然有一个内禀的指标交换对称

$$L_{\alpha\beta;\mu\nu} = L_{\mu\nu;\alpha\beta} \tag{13}$$

同时，由于 $\hat{P}^m, \hat{Q}^m$ 是厄米的，因此其表示矩阵也是厄米的，这意味着

$$L^*_{\alpha\beta;\mu\nu} = L_{\beta\alpha;\nu\mu} \tag{14}$$

从而将 Schwinger Boson 哈密顿量(6)简记为

$$\hat{H} = L_{\alpha\beta;\mu\nu} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{b}^\dagger_{i\alpha} \hat{b}_{i\beta} \hat{b}^\dagger_{j\mu} \hat{b}_{j\nu} \tag{15}$$

只保留到两个 Boson 算符，也就意味着只有由以下几种 L 系数领头的项会被保留，包括

$$L_{00;00}, L_{00:0\alpha}, L_{00:\alpha 0}, L_{0\alpha;00}, L_{\alpha 0;00}, L_{\alpha\beta;00}, L_{00;\alpha\beta}, L_{\alpha 0;0\beta}, L_{0\alpha;\beta 0}, L_{\alpha 0;\beta 0}, L_{0\alpha;\beta 0} \tag{16}$$

接下来我们分别讨论之。

2.1.1 零阶项

我们有

$$L_{00;00} \sim L_{00;00} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{b}^\dagger_{i0} \hat{b}_{i0} \hat{b}^\dagger_{j0} \hat{b}_{j0} = L_{00;00} \sum_{\langle ij \rangle} \left(\mathcal{N} - \hat{b}^\dagger_{i\alpha} \hat{b}_{i\alpha} \right) \left(\mathcal{N} - \hat{b}^\dagger_{j\beta} \hat{b}_{j\beta} \right) \tag{17}$$

注意以后关于指标 α, β 的求和变为从 1 开始进行到 $N-1$。只保留到算符的二阶项，因而我们有

$$L_{00;00} \sim L_{00;00} \sum_{\langle ij \rangle} \left(\mathcal{N}^2 - \mathcal{N} \hat{b}^\dagger_{i\alpha} \hat{b}_{i\alpha} - \mathcal{N} \hat{b}^\dagger_{j\beta} \hat{b}_{j\beta} \right) \tag{18}$$

$$= L_{00;00} Z N_s \mathcal{N}^2 - L_{00;00} \mathcal{N} Z \sum_i \hat{b}^\dagger_{i\alpha} \hat{b}_{i\alpha} - L_{00;00} \mathcal{N} Z \sum_j \hat{b}^\dagger_{j\beta} \hat{b}_{j\beta} \tag{19}$$

$$= L_{00;00} Z N_s \mathcal{N}^2 - 2 L_{00;00} \mathcal{N} Z \sum_i \hat{b}^\dagger_{i\alpha} \hat{b}_{i\alpha} \tag{20}$$

这里 Z 是晶格的配位数，N_s 是系统的格点数，亦即每个特定的 $i(j)$ 格点最近邻的格点数。对于单子格情形而言，所有格点的配位数肯定一样。

2.1.2 一阶项

接下来我们考虑以 $L_{00:0\alpha}, L_{00:\alpha 0}, L_{0\alpha;00}, L_{\alpha 0;00}$ 系数领头的项

$$L_{\alpha 0;00} \sim L_{\alpha 0;00} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{b}^\dagger_{i\alpha} \hat{b}_{i0} \hat{b}^\dagger_{j0} \hat{b}_{j0} = L_{\alpha 0;00} \sum_{\langle ij \rangle} \mathcal{N}^{1/2} \hat{b}^\dagger_{i\alpha} \left(\mathcal{N} - \hat{b}^\dagger_{j\beta} \hat{b}_{j\beta} \right) \approx L_{\alpha 0;00} Z \mathcal{N}^{3/2} \sum_i \hat{b}^\dagger_{i\alpha} \tag{21}$$

我们记 $C_\alpha = L_{\alpha 0;00} = L^*_{0\alpha;00} = L_{00;\alpha 0} = L^*_{00;0\alpha}$，从而这四个一阶项被写为

$$\hat{H}_1 = 2 Z \mathcal{N}^{3/2} \sum_i \left(C_\alpha \hat{b}^\dagger_{i\alpha} + C^*_\alpha \hat{b}_{i\alpha} \right) \tag{22}$$

它没有给出更高阶的 Boson 算符组合形式。我们会在后面说明，所有的一阶项最后都只等价于能量零点的平移，不影响激发谱。

2.1.3 二阶项

下面我们考察剩余的六个二阶项。首先，可以注意到

$$L_{\alpha\beta;00} \sim L_{\alpha\beta;00}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{i\beta}\hat{b}_{j0}^{\dagger}\hat{b}_{j0} = L_{\alpha\beta;00}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{i\beta}\left(\mathcal{N}-\hat{b}_{j\mu}^{\dagger}\hat{b}_{j\mu}\right) \tag{23}$$

$$=L_{\alpha\beta;00}\mathcal{N}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{i\beta} = L_{\alpha\beta;00}\mathcal{N}Z\sum_{i}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{i\beta} \tag{24}$$

类似地，我们有

$$L_{00;\alpha\beta} \sim L_{00;\alpha\beta}\mathcal{N}Z\sum_{j}\hat{b}_{j\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{j\beta} \tag{25}$$

这两项都只涉及到同一个格点，从而构成**在位相互作用项**

$$H_V = (L_{\alpha\beta;00}+L_{00;\alpha\beta})\mathcal{N}Z\sum_{i}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{i\beta} \tag{26}$$

记 $V_{\alpha\beta}^{(l)\prime}=\mathcal{N}L_{\alpha\beta;00}, V_{\alpha\beta}^{(r)\prime}=\mathcal{N}L_{00;\alpha\beta}$，因此我们有

$$H_V = Z\left(V_{\alpha\beta}^{(l)\prime}+V_{\alpha\beta}^{(r)\prime}\right)\sum_{i}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{i\beta} \tag{27}$$

接下来，我们考察由 $L_{\alpha0;0\beta}$ 和 $L_{0\alpha;\beta0}$ 领头的两项。

$$L_{\alpha0;0\beta} \sim L_{\alpha0;0\beta}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{i0}\hat{b}_{j0}\hat{b}_{j\beta} \approx L_{\alpha0;0\beta}\mathcal{N}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{j\beta} \tag{28}$$

类似地

$$L_{0\alpha;\beta0} \sim L_{0\alpha;\beta0}\mathcal{N}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}\hat{b}_{j\beta}^{\dagger} = L_{0\alpha;\beta0}\mathcal{N}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{j\beta}^{\dagger}\hat{b}_{i\alpha} = L_{\alpha0;0\beta}^{*}\mathcal{N}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{j\beta}^{\dagger}\hat{b}_{i\alpha} \tag{29}$$

这互为复共轭的两项涉及到了不同的格点，但都是一个产生算符和一个湮灭算符的组合，保证粒子数的守恒，因而它们构成了**跃迁项**。我们记 $T_{\alpha\beta}=\mathcal{N}L_{\alpha0;0\beta}$，于是

$$\hat{H}_T = \sum_{\langle ij\rangle}\left(T_{\alpha\beta}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{j\beta}+T_{\beta\alpha}^{*}\hat{b}_{j\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{i\beta}\right) \tag{30}$$

对于单子格的 Ising 对角耦合相互作用形式，由于 $T_{\alpha\beta}=L_{\alpha0;0\beta}=L_{0\beta;\alpha0}=L_{\beta0;0\alpha}=T_{\beta\alpha}^{*}$，因此事实上 $T_{\alpha\beta}$ 构成 $N-1$ 维的厄米矩阵。

最后我们来考察 $L_{\alpha0;\beta0}$ 两项。

$$L_{\alpha0;\beta0} \sim L_{\alpha0;\beta0}\mathcal{N}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{j\beta}^{\dagger} \qquad L_{0\alpha;\beta0} \sim L_{0\alpha;\beta0}\mathcal{N}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}\hat{b}_{j\beta} \tag{31}$$

这两项是在 i,j 两个格点同时产生与同时消灭 Boson，从而构成了共轭的**配对项**，我们记 $\Delta_{\alpha\beta}=\mathcal{N}L_{\alpha0;\beta0}$，于是 $L_{0\alpha;0\beta}=L_{\alpha0;\beta0}^{*}=\Delta_{\alpha\beta}^{*}$，从而

$$\hat{H}_\Delta = \Delta_{\alpha\beta}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{j\beta}^{\dagger}+\Delta_{\alpha\beta}^{*}\sum_{\langle ij\rangle}\hat{b}_{i\alpha}\hat{b}_{j\beta} \tag{32}$$

2.1.4 动量空间哈密顿量矩阵

综合以上(20)(22)(26)(30)(32)，我们可以给出完整的二次型玻色哈密顿量

$$
\begin{aligned}
\hat{H} =& L_{00;00} Z N_s \mathcal{N}^2 - 2L_{00;00}\mathcal{N} Z \sum_i \hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{i\alpha} + 2ZN \sum_i \left(C_\alpha \hat{b}_{i\alpha}^\dagger + C_{i\alpha}\hat{b}_\alpha \right) \\
&+ Z\left(V_{\alpha\beta}^{(l)\prime} + V_{\alpha\beta}^{(r)\prime} \right) \sum_i \hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{i\beta} + \sum_{\langle ij\rangle} \left(T_{\alpha\beta}\hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{j\beta} + T_{\beta\alpha}^* \hat{b}_{j\alpha}^\dagger \hat{b}_{i\beta} \right) + \sum_{\langle ij\rangle} \left(\Delta_{\alpha\beta}\hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{j\beta}^\dagger + \Delta_\alpha \hat{b}_{i\alpha}\hat{b}_{j\beta} \right)
\end{aligned} \tag{33}
$$

由在四个 b_0 凝聚之上的量子涨落所给出的 $L_{00;00}$ 引导的在位项可以与 $V_{\alpha\beta}'$ 合并为

$$
V_{\alpha\beta}^{(l)} = V_{\alpha\beta}^{(l)\prime} - \mathcal{N} L_{00;00}\delta_{\alpha\beta} = \sum_m J_m \mathcal{N} \left[D_{\alpha\beta}\left(\hat{P}^m \right) - D_{00}\left(\hat{P}^m \right)\delta_{\alpha\beta} \right] D_{00}\left(\hat{Q}^m \right) \tag{34}
$$

$$
V_{\alpha\beta}^{(r)} = V_{\alpha\beta}^{(r)\prime} - \mathcal{N} L_{00;00}\delta_{\alpha\beta} = \sum_m J_m \mathcal{N} D_{00}\left(\hat{P}^m \right) \left[D_{\alpha\beta}\left(\hat{Q}^m \right) - D_{00}\left(\hat{Q}^m \right)\delta_{\alpha\beta} \right] \tag{35}
$$

从而哈密顿量为

$$
\begin{aligned}
\hat{H} =& E_0 + 2ZN \sum_i \left(C_{i\alpha}\hat{b}_{i\alpha}^\dagger + C_{i\alpha}^* \hat{b}_\alpha \right) + Z\left(V_{\alpha\beta}^{(l)} + V_{\alpha\beta}^{(r)} \right) \sum_i \hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{i\beta} \\
&+ \sum_{\langle ij\rangle} \left(T_{\alpha\beta}\hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{j\beta} + T_{\beta\alpha}^* \hat{b}_{j\alpha}^\dagger \hat{b}_{i\beta} \right) + \sum_{\langle ij\rangle} \left(\Delta_{\alpha\beta}\hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{j\beta}^\dagger + \Delta_{\alpha\beta} \hat{b}_{i\alpha}\hat{b}_{j\beta} \right)
\end{aligned} \tag{36}
$$

这里 $E_0 = L_{00;00} Z N_s \mathcal{N}$。

这是一个二次型玻色哈密顿量，其中对于一次项，我们总是可以进行如下的算符平移 $\tilde{b}_{i\alpha} = \hat{b}_{i\alpha} + \lambda_{i\alpha}, \tilde{b}_{i\alpha}^\dagger = \hat{b}_{i\alpha}^\dagger + \lambda_{i\alpha}^*$。通过仔细地调整 $\lambda_{i\alpha}$ 的数值，总是可以将原始的一次项系数 $2ZNC_\alpha, 2ZNC_\alpha^*$ 消去。而于此同时唯一的后果仅仅是平移了能量零点 E_0'，对于所有 Boson 算符二次形式的系数都没有做出调整。因此我们可以直接将这一项删去，使得最终的二次形式哈密顿量为

$$
\hat{H} = E_0' + Z\left(V_{\alpha\beta}^{(l)} + V_{\alpha\beta}^{(r)} \right) \sum_i \hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{i\beta} + \sum_{\langle ij\rangle} \left(T_{\alpha\beta}\hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{j\beta} + T_{\beta\alpha}^* \hat{b}_{j\alpha}^\dagger \hat{b}_{i\beta} \right) + \sum_{\langle ij\rangle} \left(\Delta_{\alpha\beta}\hat{b}_{i\alpha}^\dagger \hat{b}_{j\beta}^\dagger + \Delta_{\alpha\beta} \hat{b}_{i\alpha}\hat{b}_{j\beta} \right) \tag{37}
$$

下面利用平移对称性进行傅里叶变换。引入

$$
\hat{b}_{i\alpha} = \sqrt{\frac{1}{N_s}} \sum_{\boldsymbol{k}} \hat{b}_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} \tag{38}
$$

这里 $R_{\boldsymbol{i}}$ 是 i 格点的坐标。接下来，我们准备将上式代入到(37)中。对于单格点项，代入后 $\sum_i$ 的求和给出了同一格点两个 Boson 的动量相等的约束。对于跃迁项同理，由于 $\sum_{\langle ij\rangle} = \sum_{i,\boldsymbol{\delta}}$，因此 $\sum_i$ 的求和同样给出了两个 Boson 的等动量约束，带来了一个与 $\boldsymbol{k}$ 有关的相位因子 $\gamma_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{\delta}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}$，这里 $\boldsymbol{\delta}$ 是从一个格点到另外的某一个最近邻格点的位移矢量。对于配对项，$\sum_i$ 则带来两个格点总动量归零的约束，同时 $\gamma_{\boldsymbol{k}}$ 同样存在。我们有

$$
\hat{H} = E_0' + \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ \left[Z\left(V_{\alpha\beta}^{(l)} + V_{\alpha\beta}^{(r)} \right) + T_{\alpha\beta}\gamma_{\boldsymbol{k}} + T_{\beta\alpha}^*\gamma_{\boldsymbol{k}}^* \right] \hat{b}_{\boldsymbol{k}\alpha}^\dagger \hat{b}_{\boldsymbol{k}\beta} + \Delta_{\alpha\beta}\gamma_{\boldsymbol{k}} \hat{b}_{\boldsymbol{k}\alpha}^\dagger \hat{b}_{-\boldsymbol{k}\beta}^\dagger + \Delta_{\alpha\beta}^* \hat{b}_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}\beta} \right\} \tag{39}
$$

我们引入 $\Psi(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}}\right]\\ \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}}\right]^\dagger\end{pmatrix}$，其中 $\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}}\right]=\begin{pmatrix}\hat{b}_{\boldsymbol{k}1}\\ \vdots\\ \hat{b}_{\boldsymbol{k},N-1}\end{pmatrix}$，$\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}}\right]^\dagger=\begin{pmatrix}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k}1}\\ \vdots\\ \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k},N-1}\end{pmatrix}$，于是我们有 $\Psi(\boldsymbol{k})^\dagger=\begin{pmatrix}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}}\right]^\dagger & \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}}\right]\end{pmatrix}$。因而哈密顿量可以被表达为一个矩阵形式 $\mathcal{H}(\boldsymbol{k})$。为了完成这一过程，我们先对哈密顿量进行一些处理

$$\hat{H}=E_0'+\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\frac{1}{2}\left[Z\left(V^{(l)}_{\alpha\beta}+V^{(r)}_{\alpha\beta}\right)+T_{\alpha\beta}\gamma_{\boldsymbol{k}}+T^*_{\beta\alpha}\gamma^*_{\boldsymbol{k}}\right]\left(\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{b}_{\boldsymbol{k}\beta}+\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\alpha}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}\beta}\right)+\Delta_{\alpha\beta}\gamma_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\beta}+\Delta^*_{\alpha\beta}\hat{b}_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}\beta}\right\} \tag{40}$$

考虑到 Boson 算符的对易关系，我们有 $\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\alpha}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}\beta}=\hat{b}_{-\boldsymbol{k}\beta}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\alpha}-\delta_{\alpha\beta}$。在经过对 $\boldsymbol{k}$ 的求和后，因对易关系只会给出一个由 $\delta_{\alpha\beta}$ 引导常数移动，我们将其吸收到 E_0' 中，从而有

$$\hat{H}=E_0''+\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\frac{1}{2}\left(ZV^{(l)}_{\alpha\beta}+ZV^{(r)}_{\alpha\beta}+T_{\alpha\beta}\gamma_{\boldsymbol{k}}+T^*_{\beta\alpha}\gamma^*_{\boldsymbol{k}}\right)\left(\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{b}_{\boldsymbol{k}\beta}+\hat{b}_{-\boldsymbol{k}\beta}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\alpha}\right)+\Delta_{\alpha\beta}\gamma_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\beta}+\Delta^*_{\alpha\beta}\hat{b}_{\boldsymbol{k}\alpha}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}\beta}\right\} \tag{41}$$

$$=E_0''+\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{2}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}}\right]^\dagger\left[Z\boldsymbol{V}^{(l)}+Z\boldsymbol{V}^{(r)}+\gamma_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}+\gamma^*_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}^\dagger\right]\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}}\right] \tag{42}$$

$$+\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{2}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}}\right]\left[Z\left(\boldsymbol{V}^{(l)}\right)^T+Z\left(\boldsymbol{V}^{(r)}\right)^T+\gamma_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}^T+\gamma^*_{-\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}\right]\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}}\right]^\dagger \tag{43}$$

$$+\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}}\right]^\dagger\gamma_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\Delta}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}}\right]^\dagger+\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}}\right]\gamma^*_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\Delta}^\dagger\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}}\right]\right\} \tag{44}$$

$$=E_0''+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\begin{pmatrix}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}}\right]^\dagger & \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}}\right]\end{pmatrix}\mathcal{H}(\boldsymbol{k})\begin{pmatrix}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}}\right]\\ \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}}\right]^\dagger\end{pmatrix} \tag{45}$$

并且

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{k})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}Z\left(\boldsymbol{V}^{(l)}+\boldsymbol{V}^{(r)}\right)+\left(\gamma_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}+\gamma_{-\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}^\dagger\right) & 2\boldsymbol{\Delta}\\ 2\boldsymbol{\Delta}^\dagger & Z\left(\boldsymbol{V}^{(l)}+\boldsymbol{V}^{(r)}\right)^T+\gamma_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}^T+\gamma_{-\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}^*\end{pmatrix} \tag{46}$$

从而 $\mathcal{H}(\boldsymbol{k})$ 即为我们期望得到的哈密顿量矩阵，满足

$$\hat{H}=E_0''+\sum_{\boldsymbol{k}}\Psi(\boldsymbol{k})^\dagger\mathcal{H}(\boldsymbol{k})\Psi(\boldsymbol{k}) \tag{47}$$

这是一个 $2(N-1)\times 2(N-1)$ 的矩阵，因而有 $2(N-1)$ 条能谱，但由于我们的基底 $\Psi(\boldsymbol{k})$ 是讨论了配对项的，因此实际上只有 $N-1$ 个谱将是实际系统所对应的能谱 (物理谱)，而另外 $N-1$ 个谱将会是它关于零能的镜像 (镜像谱)。要得到实际系统的能谱，我们需要引入一个所谓的 $(N-1,N-1)$ 型 Para-unit 矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{2(N-1)}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_{N-1} & \\ & -\boldsymbol{I}_{N-1}\end{pmatrix}$，实际能谱将会是 $\boldsymbol{\Sigma}\mathcal{H}(\boldsymbol{k})$ 的所有本征值中，本征矢量 $\boldsymbol{v}_i$ 满足 $\boldsymbol{v}_i^\dagger\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_i=1$ 的正归一化的那一半。

到此，我们就得到了一个单子格序上自旋波激发的完整计算流程

1. 计算得到单子格基态形式 $|\psi_g\rangle$，得到其在 $\hat{S}^z$ 表象下的矢量形式 $D(|\psi\rangle)$。

2. 在 $D(|\psi\rangle)$ 的 Null space 中选取 $N-1$ 个正交归一基底 $\boldsymbol{R}_1, \cdots \boldsymbol{R}_{N-1}$，构造表象变换矩阵 $\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} D(|\psi\rangle) & \boldsymbol{R}_1 & \cdots \boldsymbol{R}_{N-1} \end{pmatrix}$

3. 将原始哈密顿量中的局域算符 $\hat{S}^m$ 在 $\hat{S}^z$ 表象下写出 $D\left(\hat{S}^m\right)$，用 $\boldsymbol{R}$ 表象变换以后的形式 $\boldsymbol{D}^{(gs)}\left(\hat{P}^m\right) = \boldsymbol{R}^\dagger D\left(\hat{P}^m\right)\boldsymbol{R}, \boldsymbol{D}^{(gs)}\left(\hat{Q}^m\right) = \boldsymbol{R}^\dagger D\left(\hat{Q}^m\right)\boldsymbol{R}$ 代替之。

4. 按以下表达式构造 $\boldsymbol{V}^{(l)}, \boldsymbol{V}^{(r)}, \boldsymbol{T}, \boldsymbol{\Delta}$

$$V^{(l)}_{\alpha\beta} = \sum_m J_m \mathcal{N}\left[D^{(gs)}_{\alpha\beta}\left(\hat{P}^m\right) - D^{(gs)}_{00}\left(\hat{P}^m\right)\delta_{\alpha\beta}\right] D^{(gs)}_{00}\left(\hat{Q}^m\right) \tag{48}$$

$$V^{(r)}_{\alpha\beta} = \sum_m J_m \mathcal{N} D^{(gs)}_{00}\left(\hat{P}^m\right)\left[D^{(gs)}_{\alpha\beta}\left(\hat{Q}^m\right) - D^{(gs)}_{00}\left(\hat{Q}^m\right)\delta_{\alpha\beta}\right] \tag{49}$$

$$T_{\alpha\beta} = \sum_m J_m \mathcal{N} D^{(gs)}_{\alpha 0}\left(\hat{P}^m\right) D^{(gs)}_{0\beta}\left(\hat{Q}^m\right) \tag{50}$$

$$\Delta_{\alpha\beta} = \sum_m J_m \mathcal{N} D^{(gs)}_{\alpha 0}\left(\hat{P}^m\right) D^{(gs)}_{\beta 0}\left(\hat{Q}^m\right) \tag{51}$$

5. 在每一个关注的动量点上，按照以下表达式构造 Hamiltonian 矩阵

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} Z\left(\boldsymbol{V}^{(l)} + \boldsymbol{V}^{(r)}\right) + \left(\gamma_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T} + \gamma_{-\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}^\dagger\right) & 2\boldsymbol{\Delta} \\ 2\boldsymbol{\Delta}^\dagger & Z\left(\boldsymbol{V}^{(l)} + \boldsymbol{V}^{(r)}\right)^T + \gamma_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}^T + \gamma_{-\boldsymbol{k}}\boldsymbol{T}^* \end{pmatrix} \tag{52}$$

6. 计算 $\Sigma\mathcal{H}(\boldsymbol{k})$ 的 $2(N-1)$ 个本征值 $E_1(\boldsymbol{k}), \cdots E_{2(N-1)}(\boldsymbol{k})$ 与对应的本征矢量 $\boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_{2(N-1)}$。挑选其中使得

$$\boldsymbol{v}_i^\dagger \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{v}_i = 1 \tag{53}$$

所对应的本征值 $E_i(\boldsymbol{k})$。完成计算。

上述计算结果在正常情况下应当保证每一个 $\boldsymbol{k}$ 点的全体能谱都是正能且非虚的。如果在某一参数选择下出现负能谱，往往意味着此时的参数并非使得参考态作为基态。往往调整参数会使得能谱出现上下的移动或者缩放变形，这可以作为自旋波计算参考态和其它量子态的转变的数值证据之一。但如果有非零测度的动量空间范围内的计算结果均出现了虚能谱，往往意味着参考态的选择是有问题的，可能此参数选择下并非是一个可用直积态表达的磁有序态，而是某种具有强量子涨落的量子无序态。

2.2 实例：一维铁磁 Heisenberg 自旋链的 $SU(2)$ 自旋波

我们来考察一个可以解析计算的具体例子

$$\hat{H} = -J\sum_{\langle ij\rangle}\left(\hat{S}^x_i\hat{S}^x_j + \hat{S}^y_i\hat{S}^y_j + \hat{S}^z_i\hat{S}^z_j\right) \tag{54}$$

此时格点的配位数 $Z = 2$。我们以 $\prod_i |\uparrow\rangle_i$ 作为参考态，此时不用进行表象变换 (可以直接选取 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{I}$)，而各个算符的矩阵表示为

$$D\left(\hat{S}^x\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix} \qquad D\left(\hat{S}^y\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & \end{pmatrix} \qquad D(S^z) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \tag{55}$$

在 Schwinger boson 表示下，如果以 $|\uparrow\rangle$ 作为参考态，则意味着 $\hat{b}_\uparrow$ 所对应的 Boson 出现凝聚。我们记 $\hat{b}=\hat{b}_\downarrow$，此时我们就有

$$\hat{S}^x = \frac{1}{2}\left(\hat{b}_\uparrow^\dagger \hat{b}_\downarrow + \hat{b}_\downarrow^\dagger \hat{b}_\uparrow\right) \approx \frac{\sqrt{2S}}{2}\left(\hat{b}^\dagger + \hat{b}\right) \tag{56}$$

$$\hat{S}^y = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(-\hat{b}_\uparrow^\dagger \hat{b}_\downarrow + \hat{b}_\downarrow^\dagger \hat{b}_\uparrow\right) \approx \frac{\mathrm{i}\sqrt{2S}}{2}\left(\hat{b}^\dagger - \hat{b}\right) \tag{57}$$

$$\hat{S}^z = \frac{1}{2}\left(\hat{b}_\uparrow^\dagger \hat{b}_\uparrow - \hat{b}_\downarrow^\dagger \hat{b}_\downarrow\right) = S - \hat{b}^\dagger \hat{b} \tag{58}$$

可以发现，这一变换本质上就是一般固体物理课程所讲述的 HP 玻色子变换。$\hat{S}^z$ 是在基态的凝聚基础上所减少的 HP 玻色子数目，而 $\hat{S}^x, \hat{S}^y$ 可以对偶到角动量升降算符

$$\hat{S}^+ = \hat{S}^x + \mathrm{i}\hat{S}^y = \sqrt{2S}\hat{b} \tag{59}$$

$$\hat{S}^- = \hat{S}^x - \mathrm{i}\hat{S}^y = \sqrt{2S}\hat{b}^\dagger \tag{60}$$

从而自旋角动量分量的升降，就恰好对应于以基态为参考的 HP 玻色子的湮灭与产生。

按照我们的流程，对于 $SU(2)$ 自旋波方法，$\boldsymbol{V}, \boldsymbol{T}, \boldsymbol{\Delta}$ 都退化为一个复数。注意到只有 σ_{00}^z 非零，因此

$$V = V^{(l)} + V^{(r)} = 2V^{(l)} = 2 \times (-J) \times \left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) \times \frac{1}{2} \times 2S = -2JS \tag{61}$$

另一方面，我们有 $D_{10}\left(\hat{S}^x\right) = \frac{1}{2}, D_{01}\left(\hat{S}^x\right) = \frac{1}{2}, D_{10}\left(\hat{S}^y\right) = -\frac{\mathrm{i}}{2}, D_{01}\left(\hat{S}^y\right) = \frac{\mathrm{i}}{2}$，因此我们有

$$T = -2JS\left(D_{10}\left(\hat{S}^x\right)D_{01}\left(\hat{S}^x\right) + D_{10}\left(\hat{S}^y\right)D_{01}\left(\hat{S}^y\right)\right) = -JS \tag{62}$$

$$\Delta = -2JS\left(D_{10}\left(\hat{S}^x\right)D_{10}\left(\hat{S}^x\right) + D_{10}\left(\hat{S}^y\right)D_{10}\left(\hat{S}^y\right)\right) = 0 \tag{63}$$

从而哈密顿量矩阵为

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -4JS - 2JS(\gamma_{\boldsymbol{k}} + \gamma_{-\boldsymbol{k}})/2 & \\ & -4JS + 2JS(\gamma_{\boldsymbol{k}} - J\gamma_{-\boldsymbol{k}})/2 \end{pmatrix} \tag{64}$$

因此立刻可以读出能谱为

$$E = -JS(4 - \gamma_{\boldsymbol{k}} - \gamma_{-\boldsymbol{k}})/2 \tag{65}$$

对于自旋链，我们有 $\gamma_{\boldsymbol{k}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}} + \mathrm{e}^{-\boldsymbol{k}} = 2\cos\boldsymbol{k}$，从而能谱为

$$E(\boldsymbol{k}) = -JS(4 - 4\cos\boldsymbol{k})/2 = -2JS(1 - \cos\boldsymbol{k}) \tag{66}$$

此即为一维铁磁自旋波的标准能谱。

3 多子格序情形

3.1 多子格二次型哈密顿量的书写

更丰富的磁有序总是表现为多子格序。一方面，我们考虑的晶格体系可能本身即为复格子，例如六角晶格是双子晶格体系，Kagome 晶格则是三子晶格体系。另一方面，大部分的磁序往往是多

子格的，例如 Neel 反铁磁序需要两个子格才能表达，120° 序则需要三个子格才能表达。因此，我们需要讨论在多子格序的情况下如何书写哈密顿量。大体思路是，引入的 Schwinger Boson 需要进一步依赖于子格指标。

假设系统有 M 个子格，分别标记为 $A, B, C, \cdots$。因此哈密顿量中对格点的最近邻求和，就可以拆解成不同子格对的最近邻求和

$$\sum_{\langle ij\rangle} = \sum_{\langle ij\rangle AB} + \sum_{\langle ij\rangle AC} + \cdots \tag{67}$$

例如，对于一维的反铁磁序，系统有 $M = 2$ 个子格，此时所有的最近邻求和都是 AB 子格间的求和。而对于二维三角格子上的三子格序，则最近邻求和包括 AB, BC, CA 之间的求和。

在基态上，每一个子格处在不同的格点量子态 $|\psi_{gs}\rangle_A, |\psi_{gs}\rangle_B, \cdots$ 上。此时，我们需要引入不同的表象变换矩阵 R，将哈密顿量中各个格点上的局域算符在各自格点的基态表象下写成表示矩阵的形式。从而原始哈密顿量此时应当被改写为

$$\hat{H} = \hat{H}_{AB} + \hat{H}_{BC} + \cdots \tag{68}$$

$$= \sum_m \sum_{\langle ij\rangle_{AB}} J_m D^{(A)}_{\alpha\beta}\left(\hat{P}^m\right) D^{(B)}_{\mu\nu}\left(\hat{Q}^m\right) \hat{b}^\dagger_{iA\alpha}\hat{b}_{iA\beta}\hat{b}^\dagger_{jB\mu}\hat{b}_{jB\nu} + \sum_m \sum_{\langle ij\rangle_{BC}} J_m D^{(B)}_{\alpha\beta}\left(\hat{P}^m\right) D^{(C)}_{\mu\nu}\left(\hat{Q}^m\right) \hat{b}^\dagger_{iB\alpha}\hat{b}_{iB\beta}\hat{b}^\dagger_{jC\mu}\hat{b}_{jC\nu} \tag{69}$$

$$+ \cdots$$

我们首先考察 $\hat{H}_{AB}$。我们引入记号

$$L^{AB}_{\alpha\beta;\mu\nu} = \sum_m J_m D^{(A)}_{\alpha\beta}\left(\hat{P}^m\right) D^{(B)}_{\mu\nu}\left(\hat{Q}^m\right) \tag{70}$$

从而 AB 键相互作用可以记为

$$\hat{H}_{AB} = L^{AB}_{\alpha\beta;\mu\nu} \sum_{\langle ij\rangle_{AB}} \hat{b}^\dagger_{iA\alpha}\hat{b}_{iA\beta}\hat{b}^\dagger_{jB\mu}\hat{b}_{jB\nu} \tag{71}$$

和单子格情形一致，当只保留到两个 Boson 算符时，会有以下几种 L 系数领头的项会被保留，包括

$$L^{AB}_{00;00}, L^{AB}_{\alpha\beta;00}, L^{AB}_{00;\alpha\beta}, L^{AB}_{\alpha0;0\beta}, L^{AB}_{0\alpha;\beta0}, L^{AB}_{\alpha0;\beta0}, L^{AB}_{0\alpha;0\beta} \tag{72}$$

这里我们不再考虑一阶项。和(19)类似，立刻可以得到

$$L^{AB}_{00;00} \sim L_{00;00} Z_{AB} N_{sA} \mathcal{N}^2 - L_{00;00}\mathcal{N} Z_{AB} \sum_{i\in A} \hat{b}^\dagger_{iA\alpha}\hat{b}_{iA\beta} - L_{00;00}\mathcal{N} Z_{AB} \sum_{i\in B} \hat{b}^\dagger_{iB\alpha}\hat{b}_{iB\alpha} \tag{73}$$

这里 N_{sA} 是属于子格 A 的格点数，Z_{AB} 是每个 A 子格的最近邻 B 格点数，显然 $Z_{AB} = Z_{BA}$，因此 Z 的下指标是顺序无关的。和(26)类似，立刻可以得到

$$L_{\alpha\beta;00} \sim L_{\alpha\beta;00}\mathcal{N} Z_{AB} \sum_{i\in A} \hat{b}^\dagger_{iA\alpha}\hat{b}_{iA\beta} \qquad L_{00;\alpha\beta} \sim L_{00;\alpha\beta}\mathcal{N} Z_{AB} \sum_{i\in B} \hat{b}^\dagger_{iB\alpha}\hat{b}_{iB\beta} \tag{74}$$

记

$$V_{\alpha\beta}^{AB}=\mathcal{N}L_{\alpha\beta;00}^{AB}-\mathcal{N}L_{00;00}^{AB}\delta_{\alpha\beta} \tag{75}$$
$$V_{\alpha\beta}^{BA}=\mathcal{N}L_{00;\alpha\beta}^{AB}-\mathcal{N}L_{00;00}^{BA}\delta_{\alpha\beta} \tag{76}$$

从而我们可以给出**在位项**

$$\hat{H}_V^{AB}=Z_{AB}V_{\alpha\beta}^{AB}\sum_{i\in A}\hat{b}_{iA\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{iA\beta}+Z_{AB}V_{\alpha\beta}^{BA}\sum_{i\in B}\hat{b}_{iB\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{iB\beta} \tag{77}$$

引入傅里叶变换

$$\hat{b}_{iA\alpha}=\sqrt{\frac{1}{N_{sA}}}\sum_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} \tag{78}$$

则有

$$\hat{H}_V^{AB}=Z_{AB}V_{\alpha\beta}^{A}B\sum_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{kA\beta}+Z_{AB}V_{\alpha\beta}^{BA}\sum_{\boldsymbol{k}}\hat{b}_{\boldsymbol{k}B\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{\boldsymbol{k}B\beta} \tag{79}$$

考虑到配对项将会出现正负动量的配对，我们将其写成

$$\hat{H}_V^{AB}=\frac{1}{2}Z_{AB}V_{\alpha\beta}^{AB}\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{\boldsymbol{k}A\beta}+\hat{b}_{-\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}A\beta}\right)+\frac{1}{2}Z_{AB}V_{\alpha\beta}^{BA}\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\hat{b}_{\boldsymbol{k}B\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{\boldsymbol{k}B\beta}+\hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\beta}\right) \tag{80}$$

引入矢量 $\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right]=\begin{pmatrix}\hat{b}_{\boldsymbol{k}A1}\\ \vdots\\ \hat{b}_{\boldsymbol{k}A,(N-1)}\end{pmatrix}$, $\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}A}\right]^{\dagger}=\begin{pmatrix}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}A1}^{\dagger}\\ \vdots\\ \hat{b}_{-\boldsymbol{k}A,(N-1)}^{\dagger}\end{pmatrix}$，$\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}B}\right]$ 和 $\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}B}\right]^{\dagger}$ 的定义同理，我们有

$$\hat{H}_V^{AB}=\frac{1}{2}Z_{AB}V_{\alpha\beta}^{AB}\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{\boldsymbol{k}A\beta}+\hat{b}_{-\boldsymbol{k}A\beta}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger}-\delta_{\alpha\beta}\right)+\frac{1}{2}Z_{AB}V_{\alpha\beta}^{BA}\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\hat{b}_{\boldsymbol{k}B\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{\boldsymbol{k}B\beta}+\hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\beta}\hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\alpha}^{\dagger}-\delta_{\alpha\beta}\right) \tag{81}$$

$$=C+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right]^{\dagger}Z_{AB}\boldsymbol{V}^{AB}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right]+\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}B}\right]^{\dagger}Z_{AB}\boldsymbol{V}^{BA}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}B}\right]\right\} \tag{82}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}A}\right]Z_{AB}\left(\boldsymbol{V}^{AB}\right)^{T}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}A}\right]^{\dagger}+\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}B}\right]Z_{AB}\left(\boldsymbol{V}^{BA}\right)^{T}\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}B}\right]^{\dagger}\right\} \tag{83}$$

这里 C 是由于 Boson 对易关系导致的能量零点移动，可以直接吸收到零阶项中，不对能谱造成影响。另外，和单子格情形不同，此时 $\sum_{\boldsymbol{k}}$ 所遍及的将是第一磁布里渊区，即以磁序原胞作为一个格点所给出的新的序晶格的第一布里渊区。

和(30)类似，记 $T_{\alpha\beta}^{AB}=\mathcal{N}L_{\alpha0;0\beta}^{AB}$，则由 $L_{\alpha0;0\beta}^{AB},L_{0\alpha;\beta0}^{AB}$ 可以给出**跃迁项**

$$\hat{H}_T^{AB}=\sum_{\langle ij\rangle}\left(T_{\alpha\beta}^{AB}\hat{b}_{iA\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{jB\beta}+\left(T_{\beta\alpha}^{AB}\right)^{*}\hat{b}_{jB\alpha}^{\dagger}\hat{b}_{iA\beta}\right) \tag{84}$$

傅里叶变换以后，则有

$$\hat{H}_T^{AB} = \sum_{\boldsymbol{k}} \left(T_{\alpha\beta}^{AB} \gamma_{AB}(\boldsymbol{k}) \hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{\boldsymbol{k}B\beta} + \left(T_{\beta\alpha}^{AB}\right)^* \gamma_{AB}^*(\boldsymbol{k}) \hat{b}_{\boldsymbol{k}B\beta}^{\dagger} \hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha} \right) \tag{85}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \left(T_{\alpha\beta}^{AB} \gamma_{AB}(\boldsymbol{k}) \hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{\boldsymbol{k}B\beta} + \left(T_{\beta\alpha}^{AB}\right)^* \gamma_{AB}^*(\boldsymbol{k}) \hat{b}_{\boldsymbol{k}B\beta}^{\dagger} \hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha} \right) \tag{86}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \left(T_{\alpha\beta}^{AB} \gamma_{AB}(-\boldsymbol{k}) \hat{b}_{-\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\beta} + \left(T_{\beta\alpha}^{AB}\right)^* \gamma_{AB}^*(-\boldsymbol{k}) \hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\beta}^{\dagger} \hat{b}_{-\boldsymbol{k}A\alpha} \right) \tag{87}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right]^{\dagger} \gamma_{AB}(\boldsymbol{k}) \boldsymbol{T}^{AB} \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}B}\right] + \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}B}\right]^{\dagger} \gamma_{AB}^*(\boldsymbol{k}) \left(\boldsymbol{T}^{AB}\right)^{\dagger} \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right] \right\} \tag{88}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}B}\right] \gamma_{AB}(-\boldsymbol{k}) \left(\boldsymbol{T}^{AB}\right)^{T} \left[-\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right]^{\dagger} + \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}A}\right] \gamma_{AB}^*(-\boldsymbol{k}) \left(\boldsymbol{T}^{AB}\right)^{*} \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}B}\right]^{\dagger} \right\} \tag{89}$$

这里 $\gamma_{AB}(\boldsymbol{k})$ 将被定义为

$$\gamma_{AB}(\boldsymbol{k}) = \sum_{\boldsymbol{\delta}_{AB}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_{AB}} \tag{90}$$

其中 $\boldsymbol{\delta}_{AB}$ 是从 A 子格的某一格点出发，向某一个最近邻 B 子格格点的位移矢量。

和(32)类似，我们记 $\mathcal{N}\Delta_{\alpha\beta}^{AB} = L_{\alpha0;\beta0}^{AB}$，从而 $L_{\alpha0;\beta0}^{AB}, L_{0\alpha;0\beta}^{AB}$ 两项将引导出**配对项**

$$\hat{H}_{\Delta}^{AB} = \sum_{\langle ij \rangle} \left(\Delta_{\alpha\beta}^{AB} \hat{b}_{iA\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{jB\beta}^{\dagger} + \Delta_{\alpha\beta}^{*} \hat{b}_{iA\alpha} \hat{b}_{iB\beta} \right) \tag{91}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k}} \left(\Delta_{\alpha\beta}^{AB} \gamma_{AB}(\boldsymbol{k}) \hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\beta}^{\dagger} + \Delta_{\alpha\beta}^{*} \gamma_{AB}^*(\boldsymbol{k}) \hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha} \hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\beta} \right) \tag{92}$$

由于这里涉及到两种 Boson 的配对，因此需要再做一步对称化（**Question** 为什么？如果不做对称化会有什么后果？）

$$\hat{H}_{\Delta}^{AB} = \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \left(\Delta_{\alpha\beta}^{AB} \gamma_{AB}(\boldsymbol{k}) \hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\beta}^{\dagger} + \Delta_{\alpha\beta}^{*} \gamma_{AB}^*(\boldsymbol{k}) \hat{b}_{\boldsymbol{k}A\alpha} \hat{b}_{-\boldsymbol{k}B\beta} \right) \tag{93}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \left(\Delta_{\alpha\beta}^{AB} \gamma_{AB}(-\boldsymbol{k}) \hat{b}_{-\boldsymbol{k}A\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{\boldsymbol{k}B\beta}^{\dagger} + \Delta_{\alpha\beta}^{*} \gamma_{AB}^*(-\boldsymbol{k}) \hat{b}_{-\boldsymbol{k}A\alpha} \hat{b}_{\boldsymbol{k}B\beta} \right) \tag{94}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right]^{\dagger} \gamma_{AB}(\boldsymbol{k}) \boldsymbol{\Delta}^{AB} \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}B}\right] + \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}B}\right] \gamma_{AB}^*(\boldsymbol{k}) \left(\boldsymbol{\Delta}^{AB}\right)^{\dagger} \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right] \right\} \tag{95}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}B}\right]^{\dagger} \gamma_{AB}(-\boldsymbol{k}) \left(\boldsymbol{\Delta}^{AB}\right)^{T} \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}A}\right] + \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}A}\right] \gamma_{AB}^*(-\boldsymbol{k}) \left(\boldsymbol{\Delta}^{AB}\right)^{*} \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}B}\right] \right\} \tag{96}$$

综合 $\hat{H}_V^{AB}, \hat{H}_T^{AB}, \hat{H}_{\Delta}^{AB}$ 的结果，我们可以引入

$$\Psi(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right] \\ \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}B}\right] \\ \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}A}\right]^{\dagger} \\ \left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}B}\right]^{\dagger} \end{pmatrix} \tag{97}$$

从而将完整的哈密顿量写为

$$\hat{H}_{AB} = E_0'' + \sum_{\boldsymbol{k}} \Psi^{\dagger}(\boldsymbol{k}) \mathcal{H}(\boldsymbol{k}) \Psi(\boldsymbol{k}) \tag{98}$$

其中代表激发部分的哈密顿量矩阵具有结构

$$
\mathcal{H}_{AB}(\boldsymbol{k})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}
Z_{AB}\boldsymbol{V}^{AB} & \gamma_{AB}(\boldsymbol{k})\boldsymbol{T}^{AB} & & \gamma_{AB}(\boldsymbol{k})\boldsymbol{\Delta}^{AB} \\
\gamma^*_{AB}(\boldsymbol{k})\left(\boldsymbol{T}^{AB}\right)^\dagger & Z_{AB}\boldsymbol{V}^{BA} & \gamma_{AB}(-\boldsymbol{k})\left(\boldsymbol{\Delta}^{AB}\right)^T & \\
 & \gamma^*_{AB}(\boldsymbol{k})(\boldsymbol{\Delta}_{AB})^* & Z_{AB}\left(\boldsymbol{V}^{AB}\right)^T & \gamma^*_{AB}(-\boldsymbol{k})\left(\boldsymbol{T}^{AB}\right)^* \\
\gamma^*_{AB}(\boldsymbol{k})(\Delta_{AB})^\dagger & & \gamma_{AB}(-\boldsymbol{k})\left(\boldsymbol{T}^{AB}\right)^T & Z_{AB}\left(\boldsymbol{V}^{BA}\right)^T
\end{pmatrix} \tag{99}
$$

显然，对于其它子格也有类似的结构，因而当我们选取矩阵基底为

$$
\Psi(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}
\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}A}\right] \\
\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{\boldsymbol{k}B}\right] \\
\vdots \\
\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}A}\right]^\dagger \\
\left[\hat{\boldsymbol{b}}_{-\boldsymbol{k}B}\right]^\dagger \\
\vdots
\end{pmatrix} \tag{100}
$$

哈密顿量矩阵具有如下结构

$$
\mathcal{H}(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}
\mathcal{E}(\boldsymbol{k}) & \mathcal{D}(\boldsymbol{k}) \\
\mathcal{D}^\dagger(\boldsymbol{k}) & \mathcal{E}^T(\boldsymbol{k})
\end{pmatrix} \tag{101}
$$

其中 $\mathcal{E}(\boldsymbol{k}),\mathcal{D}(\boldsymbol{k})$ 都将分成 $M\times M$ 块

$$
\mathcal{E}(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}
\mathcal{E}_{AA}(\boldsymbol{k}) & \mathcal{E}_{AB}(\boldsymbol{k}) & \cdots \\
\mathcal{E}_{BA}(\boldsymbol{k}) & \mathcal{E}_{BB}(\boldsymbol{k}) & \cdots \\
\vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix} \qquad
\mathcal{D}(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}
\mathcal{D}_{AA}(\boldsymbol{k}) & \mathcal{D}_{AB}(\boldsymbol{k}) & \cdots \\
\mathcal{D}_{BA}(\boldsymbol{k}) & \mathcal{D}_{BB}(\boldsymbol{k}) & \cdots \\
\vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix} \tag{102}
$$

每一块 $\mathcal{E}_{LR}(\boldsymbol{k})$ 都是 $(N-1)\times(N-1)$ 维矩阵，并且有

$$
\mathcal{E}_{LR}(\boldsymbol{k})=\begin{cases}
\sum\limits_{S\in nn-L} Z_{LS}\boldsymbol{V}^{LS} & L=R \\
\gamma_{LR}(\boldsymbol{k})\boldsymbol{T}^{LR} & R\in nn-L \\
0 & R\notin nn-L, R\neq L
\end{cases} \qquad
\mathcal{D}_{LR}(\boldsymbol{k})=\begin{cases}
\gamma_{LR}(\boldsymbol{k})\boldsymbol{\Delta}^{AB} & R\in nn-L \\
0 & R\notin nn-L
\end{cases} \tag{103}
$$

这里用 $nn-R$ 表示全体 R 子格的最近邻子格，例如三角格子上的三子格序上 $nn-A=\{B,C\}$。注意由于

$$
\gamma_{RL}(\boldsymbol{k})=\gamma_{LR}(-\boldsymbol{k}) \qquad \boldsymbol{T}^{RL}=\left(\boldsymbol{T}^{LR}\right)^\dagger \qquad \boldsymbol{\Delta}^{RL}=\left(\boldsymbol{\Delta}^{LR}\right)^T \tag{104}
$$

因此这一表达式和前面 $\mathcal{H}_{AB}$ 的示例结构是自洽的。这一完整的哈密顿量矩阵是 $2M(N-1)$ 维的，其物理谱的求解方式和单子格情形相同，此时将有 $M(N-1)$ 条物理谱。

到此，我们就得到了一个多子格序上自旋波激发的完整计算流程

1. 计算得到基态形式，标记各个子格为 $A,B,C,\cdots$，得到各个子格的基态形式 $|\psi_A\rangle,|\psi_B\rangle,|\psi_C\rangle$

2. 对每个子格 S，构造表象变换矩阵 $R^{(s)}$，得到原始哈密顿量出现的所有局域算符在各个子格基态表象下的表示矩阵 $D^{(S)}\left(\hat{P}^m\right), D^{(S)}\left(\hat{Q}^m\right)$

3. 按照以下表达式构造 $\boldsymbol{V}^{LR}, \boldsymbol{T}^{LR}, \boldsymbol{\Delta}^{LR}$，只构造 L 与 R 是最近邻子格的部分

$$V_{\alpha\beta}^{LR} = \sum_m J_m \mathcal{N}\left[D_{\alpha\beta}^{(L)}\left(\hat{P}^m\right) - D_{00}^{(L)}\left(\hat{P}^m\right)\delta_{\alpha\beta}\right] D_{00}^{(R)}\left(\hat{Q}^m\right) \tag{105}$$

$$T_{\alpha\beta}^{LR} = \sum_m J_m \mathcal{N} D_{\alpha 0}^{(L)}\left(\hat{P}^m\right) D_{0\beta}^{(R)}\left(\hat{Q}^m\right) \tag{106}$$

$$\Delta_{\alpha\beta}^{LR} = \sum_m J_m \mathcal{N} D_{\alpha 0}^{(L)}\left(\hat{P}^m\right) D_{\beta 0}^{(R)}\left(\hat{Q}^m\right) \tag{107}$$

$\boldsymbol{V}^{LR}$ 需要完整构造, $\boldsymbol{T}^{LR}, \boldsymbol{\Delta}^{LR}$ 可以只构造 $L<R$ 的一半, 另一半有 $\boldsymbol{T}^{RL} = \left(\boldsymbol{T}^{LR}\right)^\dagger, \boldsymbol{\Delta}^{RL} = \left(\boldsymbol{\Delta}_{LR}\right)^T$。

4. 在感兴趣的 $\boldsymbol{k}$ 空间点上，构造 $\mathcal{E}(\boldsymbol{k}), \mathcal{D}(\boldsymbol{k})$ 矩阵，其 (L,R) 分块为

$$\mathcal{E}_{LR}(\boldsymbol{k}) = \begin{cases} \sum_{S\in nn-L} Z_{LS}\boldsymbol{V}^{LS} & L=R \\ \gamma_{LR}(\boldsymbol{k})\boldsymbol{T}^{LR} & R\in nn-L \\ 0 & R\notin nn-L, R\neq L \end{cases} \qquad \mathcal{D}_{LR}(\boldsymbol{k}) = \begin{cases} \gamma_{LR}(\boldsymbol{k})\boldsymbol{\Delta}^{AB} & R\in nn-L \\ 0 & R\notin nn-L \end{cases} \tag{108}$$

5. 构造哈密顿量矩阵

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{E}(\boldsymbol{k}) & \mathcal{D}(\boldsymbol{k}) \\ \mathcal{D}^\dagger(\boldsymbol{k}) & \mathcal{E}^T(\boldsymbol{k}) \end{pmatrix} \tag{109}$$

6. 对角化 $\boldsymbol{\Sigma}\mathcal{H}(\boldsymbol{k})$ 矩阵，得到 $2M(N-1)$ 个本征值，挑选使得其本征矢量 $\boldsymbol{v}_i$ 能够正归一化 $\boldsymbol{v}_i^\dagger\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{v}_i$ 的 $M(N-1)$ 支，完成计算。

3.2 实例：一维反铁磁 Heisenberg 链的 $SU(2)$ 自旋波

同样是 Heisenberg 模型，但这一次我们取消(54)中耦合强度 J 前面的符号，此时近邻的两个格点在经典意义下倾向于最近邻排列，从而经典基态为所谓的 Neel 态，此时自旋链分为 A,B 两个子格，A 子格自旋态可以选为 $|\uparrow\rangle$，而 B 子格自旋态可以选为 $|\downarrow\rangle$。因而 A 子格上的自旋算符无需表象变换，B 子格上自旋算符则需用 $R=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$ 引导一个表象变换，使 $|\downarrow\rangle$ 基矢被提取到第一位置。这相当于对于 A 子格，我们令 $\hat{b}_\uparrow$ 凝聚，从而

$$\hat{S}_A^x \approx \frac{\sqrt{2S}}{2}\left(\hat{b}_A^\dagger + \hat{b}\right) \qquad S_A^y \approx \frac{\mathrm{i}\sqrt{2S}}{2}\left(\hat{b}_A^\dagger - \hat{b}_A\right) \qquad \hat{S}_A^z \approx S - \hat{b}_A^\dagger\hat{b}_A \tag{110}$$

而对于 B 子格，这一表象变换相当于将要令 $\hat{b}_\downarrow$ 凝聚，从而

$$S_B^x \approx \frac{\sqrt{2S}}{2}\left(\hat{b}_B + \hat{b}_B^\dagger\right) \qquad S_B^y \approx \frac{\mathrm{i}\sqrt{2S}}{2}\left(\hat{b}_B - \hat{b}_B^\dagger\right) \qquad \hat{S}_B^z \approx \hat{b}_B^\dagger\hat{b}_B - S \tag{111}$$

同样，这一变换和一般固体物理讨论的反铁磁 HP 玻色子表示一致。很容易给出其哈密顿量矩阵为

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{k})=\frac{JS}{2}\begin{pmatrix}2 & & & \gamma_{\boldsymbol{k}}\\ & 2 & \gamma_{\boldsymbol{k}} & \\ & \gamma_{\boldsymbol{k}} & 2 & \\ \gamma_{\boldsymbol{k}} & & & 2\end{pmatrix} \tag{112}$$

这里 $\gamma_{\boldsymbol{k}}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}}=2\cos\boldsymbol{k}$。因此 ΣH 具有分块的结构，利用 Laplace 定理有

$$\det\left(\Sigma\mathcal{H}(\boldsymbol{k})-E\boldsymbol{I}\right)=\det\begin{pmatrix}JS-E & JS\gamma_{\boldsymbol{k}}/2\\ -JS\gamma_{\boldsymbol{k}}/2 & -JS-E\end{pmatrix} \tag{113}$$

从而得到其能谱为 $E(\boldsymbol{k})=JS\sqrt{4-\gamma_{\boldsymbol{k}}^2}$，在零模附近，符合反铁磁自旋波的线性色散特征。

参考文献

[1] Rodrigo A. Muniz, Yasuyuki Kato, and Cristian D. Batista. Generalized spin-wave theory: Application to the bilinear–biquadratic model. Progress of Theoretical and Experimental Physics, 2014(8):083I01, 08 2014.