

# 自旋波: 动力学关联函数

任杰

我们详细讨论过线性自旋波理论的能谱计算。线性自旋波理论的基本逻辑是：

1. 找到自旋的经典基态；
2. 考虑经典基态的量子涨落，将自旋算符变换为 Holstein-Primakoff 波色子；
3. 得到最低阶的二次型波色哈密顿量，并用波色对角化技术求解能谱。

到目前为止，我们只考虑波色哈密顿量的能谱。但此哈密顿量本征值同样包含信息，其中非常重要的是关联函数。

## 动力学自旋关联函数

自旋关联函数定义为：

$$S^{\alpha\beta}(R_i - R_j, t_1 - t_2) = \langle S^\alpha(R_i, t_1) S^\beta(R_j, t_2) \rangle \quad (1)$$

对坐标空间做傅立叶变换，得到动量空间的关联函数：

$$\begin{aligned} S^{\alpha\beta}(q, t) &= \sum_d e^{iq \cdot d} S^{\alpha\beta}(d, t) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{i,j} \langle e^{iq \cdot R_i} S^\alpha(R_i) e^{-ik \cdot R_j} S^\beta(R_j, t) \rangle \\ &= \langle S^\alpha(-q) S^\beta(q, t) \rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

下面具体写出自旋算符的傅立叶分量。对于有子晶格的系统，格点坐标可以表达为：

$$R_{i,n} = r_i + t_n. \quad (3)$$

其中  $r_i$  是晶格坐标， $t_n$  是子晶格相对坐标。把子晶格混起来一起做傅立叶变换：

$$\begin{aligned} S^\alpha(q, t) &= \frac{1}{\sqrt{LN}} \sum_{i,n} e^{-iq \cdot R_{i,n}} S^\alpha(R_{i,n}, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{-iq \cdot t_n} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i e^{-iq \cdot r_i} S_{i,n}^\alpha(r_i, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{-iq \cdot t_n} S_n^\alpha(q, t). \end{aligned} \quad (4)$$

我们已经将自旋算符表达为波色算符形式。注意在线性理论中，横向和纵向的自旋波互相不耦合，在最低阶近似下，只有横向分量对动力学关联有贡献。为表达方便，我们只保留横向部分，将自旋算符写为：

$$S_n^\alpha(r_i, t) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} U_n^\alpha a_n(r_i, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} U_n^{\alpha*} a_n^\dagger(r_i, t). \quad (5)$$

其傅立叶变换表达式为：

$$S_n^\alpha(q, t) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} U_n^\alpha a_n(q, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} U_n^{\alpha*} a_n^\dagger(-q, t). \quad (6)$$

这样，我们可以将自旋关联表达成波色算符的关联函数：

$$\begin{aligned} S^{\alpha\beta}(q, t) &= \frac{1}{N} \sum_{n,m} e^{-iq \cdot (t_n - t_m)} \langle S_n^\alpha(q) S_m^\beta(-q, t) \rangle \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{n,m} e^{-iq \cdot (t_n - t_m)} \left\langle \left( a_n^\dagger(q), a_n(-q) \right) \begin{pmatrix} U_n^{\alpha*} U_m^\beta & U_n^{\alpha*} U_m^{\beta*} \\ U_n^\alpha U_m^\beta & U_n^\alpha U_m^{\beta*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_m(q, t) \\ a_m^\dagger(-q, t) \end{pmatrix} \right\rangle \end{aligned} \quad (7)$$

引入多分量场

$$\phi(q, t) = (a_1(q, t), \dots, a_N(q, t), a_1^\dagger(-q, t), \dots, a_N^\dagger(-q, t))^T. \quad (8)$$

关联函数可表达成紧凑的形式

$$S^{\alpha\beta}(q, t) = \frac{1}{2N} \left\langle \phi^\dagger(q) \begin{pmatrix} W_{11}^{\alpha\beta} & W_{12}^{\alpha\beta} \\ W_{21}^{\alpha\beta} & W_{22}^{\alpha\beta} \end{pmatrix} \phi(q, t) \right\rangle \quad (9)$$

其中我们可以显式写下  $W$  的矩阵元：

$$(W_{11}^{\alpha\beta})_{nm} = e^{-iq \cdot (t_n - t_m)} U_n^{\alpha*} U_m^\beta \quad (10)$$

$$(W_{12}^{\alpha\beta})_{nm} = e^{-iq \cdot (t_n - t_m)} U_n^{\alpha*} U_m^{\beta*} \quad (11)$$

$$(W_{21}^{\alpha\beta})_{nm} = e^{-iq \cdot (t_n - t_m)} U_n^\alpha U_m^\beta \quad (12)$$

$$(W_{22}^{\alpha\beta})_{nm} = e^{-iq \cdot (t_n - t_m)} U_n^\alpha U_m^{\beta*} \quad (13)$$

要继续化简上式，我们需要用一算符的正则变换使哈密顿量对角化：

$$\phi(q, t) = T_q \psi(q, t) \quad (14)$$

这样最终关联函数写为：

$$S^{\alpha\beta}(q, t) = \frac{1}{2N} \sum_n (T_q^\dagger W_q^{\alpha\beta} T_q)_{nn} \langle \psi_n^\dagger(q) \psi_n(q, t) \rangle \quad (15)$$

其频域空间的分量为：

$$\begin{aligned} S^{\alpha\beta}(q, \omega) &= \int \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} S^{\alpha\beta}(q, t) \\ &= \frac{i}{2N} \sum_n (T_q^\dagger W_q^{\alpha\beta} T_q)_{nn} G_n^R(q, -\omega) \end{aligned} \quad (16)$$

## 波色二次型标准本征态矩阵

上一节中我们给出了一般波色二次型能谱的一般解法。对于能谱问题，我们只需将哈密顿量稍加修改变为动力学矩阵，再将其对角化就可以得到能谱。然而对角化动力学矩阵得到的本征向量未必是满足要求的本征模式。我们在这里给出一个数值上稳定的对角化方法。

首先，对于哈密顿矩阵  $H$ ，我们对其进行 Cholesky 分解：

$$H = K^\dagger K \quad (17)$$

这实际上类似于矩阵“开平方”，对于一个正定的厄米矩阵，这样的分解总是存在的，一般的矩阵数值库中也有此分解方法。接着，利用分解后的矩阵  $K$ ，构造新的厄米矩阵  $K I_- K^\dagger$ ，并对角化之：

$$K I_- K^\dagger \rightarrow \tilde{D} = U^\dagger K I_- K^\dagger U \quad (18)$$

我们可以通过排列本征向量使  $\tilde{D}$  前  $N$  个本征值为正，后  $N$  个本征值为负，此哈密顿量的谱为：

$$D = I_- \tilde{D} \quad (19)$$

而我们要求的  $T$  矩阵为

$$T = K^{-1} U \sqrt{D} \quad (20)$$

注意这些操作我们都是对厄米矩阵做的，数值稳定性更高。我们下面证明这样得到的  $T$  矩阵的确满足要求，首先， $T$  需对角化矩阵  $H$ ：

$$T^\dagger H T = D \quad (21)$$

直接验证：

$$\begin{aligned} T^\dagger H T &= \sqrt{D} U^\dagger (K^\dagger)^{-1} H K^{-1} U \sqrt{D} \\ &= \sqrt{D} U^\dagger (K^\dagger)^{-1} K^\dagger K K^{-1} U \sqrt{D} \\ &= \sqrt{D} U^\dagger U \sqrt{D} \\ &= D \end{aligned} \quad (22)$$

即  $T$  的确对角化原来的矩阵  $H$ ，其次，波色对易关系要求：

$$T I_- T^\dagger = I_- \quad (23)$$

$$I_- = \begin{pmatrix} 1_{N \times N} & 0 \\ 0 & -1_{N \times N} \end{pmatrix}. \quad (24)$$

验证：

$$\begin{aligned} T I_- T^\dagger &= K^{-1} U \sqrt{D} I_- \sqrt{D} U^\dagger (K^\dagger)^{-1} \\ &= K^{-1} U I_- D U^\dagger (K^\dagger)^{-1} \\ &= K^{-1} U \tilde{D} U^\dagger (K^\dagger)^{-1} \\ &= K^{-1} U U^\dagger K I_- K^\dagger U U^\dagger (K^\dagger)^{-1} \\ &= I_- \end{aligned} \quad (25)$$

## 关联函数

剩下我们只需要考虑算符  $\psi(k, t)$  的关联函数，作为已对角化的无相互作用哈密顿量的场算符， $\psi(k, t)$  的关联函数是比较平庸的。我们这里只考虑零温推迟格林函数，有限温度情形是类似的。

$$\langle 0 | a_n(q, t) a_n^\dagger(a) | 0 \rangle = e^{-i\omega_n t} \quad (26)$$

对于场量  $\psi_n$ ，我们需要讨论下标  $n$ ，当  $n \leq N$  时：

$$\begin{aligned} iG_n^R(q, t) &= \theta(t) \langle 0 | [\psi_n^\dagger(q), \psi_n(q, t)] | 0 \rangle \\ &= -\theta(t) \langle 0 | a_n(q, t) a_n^\dagger(q) | 0 \rangle \\ &= -i \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} e^{-i\omega_{q,n} t} \\ &= -i \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \omega_{q,n} + i\eta}. \end{aligned} \quad (27)$$

当  $n > N$  时：

$$\begin{aligned} iG_n^R(q, t) &= \theta(t) \langle 0 | [\psi_n^\dagger(q), \psi_n(q, t)] | 0 \rangle \\ &= \theta(t) \langle 0 | a_n(-q) a_n^\dagger(-q, t) | 0 \rangle \\ &= i \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} e^{+i\omega_{q,n} t} \\ &= i \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega + \omega_{q,n} + i\eta}. \end{aligned} \quad (28)$$

因此：

$$iG_n^R(q, \omega) = \begin{cases} \frac{-i}{\omega - \omega_{q,n} + i\eta} & n \leq N \\ \frac{i}{\omega + \omega_{q,n} + i\eta} & n > N \end{cases} \quad (29)$$