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。

1 动力学自旋关联函数

自旋关联函数定义为:

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

对坐标空间做傅立叶变换，得到动量空间的关联函数:

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

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:

$$R_{i,n}=r_i+t_n. \tag{3}$$

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:

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

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:

$$
S^{\alpha}_{n}(r_i,t) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} U^{\alpha}_{n} a_n(r_i,t) + \frac{1}{\sqrt{2}} U^{\alpha *}_{n} a^{\dagger}_{n}(r_i,t). \qquad (5)
$$

其傅立叶变换表达式为:

$$
S^{\alpha}_{n}(q,t) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} U^{\alpha}_{n} a_n(q,t) + \frac{1}{\sqrt{2}} U^{\alpha *}_{n} a^{\dagger}_{n}(-q,t). \qquad (6)
$$

这样，我们可以将自旋关联表达成求波色算符的关联函数:

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

引入多分量场

$$
\phi(q,t) = \left(a_1(q,t), \cdots, a_N(q,t), a^{\dagger}_{1}(-q,t), \cdots, a^{\dagger}_{N}(-q,t)\right)^{T}. \qquad (8)
$$

关联函数可表达成紧凑的形式

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

其中我们可以显式写下 W 的矩阵元:

$$
\begin{aligned}
\left(W^{\alpha\beta}_{11}\right)_{nm} &= e^{-iq\cdot(t_n-t_m)} U^{\alpha *}_{n} U^{\beta}_{m} \qquad (10) \\
\left(W^{\alpha\beta}_{12}\right)_{nm} &= e^{-iq\cdot(t_n-t_m)} U^{\alpha *}_{n} U^{\beta *}_{m} \qquad (11) \\
\left(W^{\alpha\beta}_{21}\right)_{nm} &= e^{-iq\cdot(t_n-t_m)} U^{\alpha}_{n} U^{\beta}_{m} \qquad (12) \\
\left(W^{\alpha\beta}_{22}\right)_{nm} &= e^{-iq\cdot(t_n-t_m)} U^{\alpha}_{n} U^{\beta *}_{m} \qquad (13)
\end{aligned}
$$

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:

$$\phi(q,t) = T_q \psi(q,t) \tag{14}$$

这样最终关联函数写为:

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

其频域空间的分量为:

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

2 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:

$$H = K^\dagger K \tag{17}$$

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都有此分解方法。接着，利用分解后的矩阵 K，构造新的厄米矩阵 $KI_-K^\dagger$，并对角化之:

$$KI_-K^\dagger \to \tilde{D} = U^\dagger KI_-K^\dagger U \tag{18}$$

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:

$$D = I_-\tilde{D} \tag{19}$$

而我们要求的 T 矩阵为

$$T = K^{-1} U \sqrt{D} \tag{20}$$

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:

$$T^\dagger H T = D \tag{21}$$

直接验证:

$$
\begin{aligned}
T^{\dagger}HT &= \sqrt{D}U^{\dagger}\left(K^{\dagger}\right)^{-1}HK^{-1}U\sqrt{D} \\
&= \sqrt{D}U^{\dagger}\left(K^{\dagger}\right)^{-1}K^{\dagger}KK^{-1}U\sqrt{D} \\
&= \sqrt{D}U^{\dagger}U\sqrt{D} \\
&= D
\end{aligned} \tag{22}
$$

即 T 的确对角化原来的矩阵 H，其次，波色对易关系要求：

$$
TI_{-}T^{\dagger} = I_{-}. \tag{23}
$$

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

验证：

$$
\begin{aligned}
TI_{-}T^{\dagger} &= K^{-1}U\sqrt{D}I_{-}\sqrt{D}U^{\dagger}\left(K^{\dagger}\right)^{-1} \\
&= K^{-1}UI_{-}DU^{\dagger}\left(K^{\dagger}\right)^{-1} \\
&= K^{-1}U\tilde{D}U^{\dagger}\left(K^{\dagger}\right)^{-1} \\
&= K^{-1}UU^{\dagger}KI_{-}K^{\dagger}UU^{\dagger}\left(K^{\dagger}\right)^{-1} \\
&= I_{-}
\end{aligned} \tag{25}
$$

3 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。

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

对于场量 ψ_n，我们需要讨论下标 n，当 $n \le N$ 时：

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

当 $n > N$ 时：

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

因此:

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