长程有序作用的量子海森堡铁磁链的自旋波理论计算研究

张修志　陈　渊

（广州大学物理与电子工程学院　广东广州　526200）

【摘　要】利用自旋波理论计算一维带有长程有序作用的海森堡铁磁模型的自旋波量子（磁振子），以方便研究者在找到磁振子的基础上，根据热力学公式探究模型的热力学性质。

【关键词】长程有序；铁磁模型；自旋波理论；自旋波量子（磁振子）

DOI: 10.18686/jyfzyj.v2i7.28052

当下科学技术日新月异，各种物理研究方法层出不穷，极大地推动了理论物理学的发展，带动了人们对固体磁性的研究，同时也加深了人们对理论物理学的研究兴趣。低维度磁性系统的研究是理论物理学的一个重要的研究方向，而对于接触这类知识学者来说，最开始总是围绕着自旋波理论、格林函数方法、蒙特卡罗模拟、重整化群等主要方法进行学习的。在本文中，我们主要介绍一种利用自旋波理论找到海森堡模型的自旋波量子（磁振子）的方法，从而为利用自旋波量子（磁振子）研究海森堡模型的热力学性质提供帮助。

1 模型的建立及简化

引入一维量子海森堡铁磁系统哈密顿量：

$$H = J\sum_{\langle i\,j\rangle}\hat{S}_i\cdot\hat{S}_j - J_d\sum_{i\,j}\frac{\hat{S}_i\cdot\hat{S}_j}{{r_{i\,j}}^p}$$

通常情况下我们会将系统的海森堡哈密顿量用上升和下降算符 S^+S^- 改写为 H_1 和 H_2 两个部分，分别进行简化计算，得到计算结果后再进行合并，得到自旋波量子（磁振子），在本文的模型中我们把哈密顿量拆分成 H_1 和 H_2 两个部分进行计算，得到结果后再进行合并。

令 $H_1 = J\sum_{\langle i\,j\rangle}\hat{S}_i\cdot\hat{S}_j$；$H_2 = J_d\sum_{i\,j}\frac{\hat{S}_i\cdot\hat{S}_j}{{r_{i\,j}}^p}$，$\langle i,j\rangle$表示最近邻，则：

$$H_1 = J\sum_{\langle i\,j\rangle}\hat{S}_i\cdot\hat{S}_j = J\sum_{\langle i\,j\rangle}\left(\hat{S}_i^x\hat{S}_j^x+\hat{S}_i^y\hat{S}_j^y+\hat{S}_i^z\hat{S}_j^z\right) \Rightarrow H_1 = J\sum_{\langle i\,j\rangle}\left[\hat{S}_i^z\hat{S}_j^z+\frac{1}{2}\left(\hat{S}_i^+\hat{S}_j^-+\hat{S}_i^-\hat{S}_j^+\right)\right]$$

而 $H_2 = J_d\sum_{i\,j}\frac{\hat{S}_i\cdot\hat{S}_j}{{r_{i\,j}}^p}$，令 $\frac{J_d}{{r_{i\,j}}^p} = J_{i\,j}$ 有：

$$H_2 = \sum_{i\,j}J_{i\,j}\,\hat{S}_i\cdot\hat{S}_j = \sum_{i\,j}J_{i\,j}\left(\hat{S}_i^x\hat{S}_j^x+\hat{S}_i^y\hat{S}_j^y+\hat{S}_i^z\hat{S}_j^z\right);\quad H_2 = \sum_{i\,j}J_{i\,j}\left[\hat{S}_i^z\hat{S}_j^z+\frac{1}{2}\left(\hat{S}_i^+\hat{S}_j^-+\hat{S}_i^-\hat{S}_j^+\right)\right]$$

2 变换和近似计算

在这个部分中，我们要分别对拆分后的 H_1 和 H_2 引入霍斯坦因・普里马科夫变换（以下简称 H-P 变换），将自旋上升和下降算符转化为量子数的产生和湮灭算符 a^+a，略去其中的四次方项，然后用 $\sqrt{2S}$ 近似代替 $\sqrt{2S-a^+a}$ 并引入傅里叶变换，将量子数的产生和湮灭算符转化为自旋波量子的产生和湮灭算符 $b_k^+b_k$，然后将 H_1 和 H_2 合并得到自旋波量子（磁振子）。

对 H_1 引入 H-P 变换 $\left(\hat{S}^+=\left(\sqrt{2S-a^+a}\right)a;\hat{S}^-=a^+\left(\sqrt{2S-a^+a}\right);\hat{S}^z=S-a^+a\right)$ 有：

$$H_1 = J\sum_{\langle i\,j\rangle}\left[\left(S-a_i^+a_i\right)\left(S-a_j^+a_j\right)+\frac{1}{2}\left(\sqrt{2S-a_i^+a_i}\right)a_ia_j^+\left(\sqrt{2S-a_j^+a_j}\right)+\frac{1}{2}a_i^+\left(\sqrt{2S-a_i^+a_i}\right)\left(\sqrt{2S-a_j^+a_j}\right)a_j\right]$$

将 $\sqrt{2S-a^{+}a}$ 用 $\sqrt{2S}$ 近似代替有：

$$H_1 = J\sum_{\langle ij\rangle}\left[S^2 - S\left(a_i^{+}a_i + a_j^{+}a_j\right) + a_i^{+}a_i a_j^{+}a_j + S\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right)\right]$$

略去四次方项有：

$$H_1 = J\sum_{\langle ij\rangle}\left[S^2 - S\left(a_i^{+}a_i + a_j^{+}a_j\right) + S\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right)\right]$$

$$H_1 = \underbrace{J\sum_{\langle ij\rangle}S^2}_{(1)} - \underbrace{J\sum_{\langle ij\rangle}S\,a_i^{+}a_i}_{(2)} - \underbrace{J\sum_{\langle ij\rangle}S\,a_j^{+}a_j}_{(3)} + \underbrace{J\sum_{\langle ij\rangle}S\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right)}_{(4)}$$

$$(1)\ J\sum_{\langle ij\rangle}S^2 = J\sum_i\sum_r S^2 = J\,S^2NZ,\quad \boxed{\sum_r = \sum_z = Z\left(\text{即配位数}\right)}$$

(2) $J\sum_{\langle ij\rangle}S\,a_i^{+}a_i$，引入傅里叶变换$\left(a = N^{-\frac{1}{2}}\sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}b_k;\ a^{+} = N^{-\frac{1}{2}}\sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}b_k^{+}\right)$有：

$$J\sum_{\langle ij\rangle}S\,a_i^{+}a_i = J\,S\sum_i\sum_r N^{-1}\sum_k\sum_{k'}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}\,e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_i}\,b_k^{+}b_{k'}$$

$$J\sum_{\langle ij\rangle}S\,a_i^{+}a_i = J\,S\sum_r\sum_k\sum_{k'}N^{-1}\sum_i e^{-i\left(\vec{k}-\vec{k}'\right)\cdot\vec{r}_i}\,b_k^{+}b_{k'};\quad J\sum_{\langle ij\rangle}S\,a_i^{+}a_i = J\,S\sum_r\sum_k\sum_{k'}\delta_{kk'}b_k^{+}b_{k'}$$

$$J\sum_{\langle ij\rangle}S\,a_i^{+}a_i = J\,S\sum_r\sum_k b_k^{+}b_k;\quad J\sum_{\langle ij\rangle}S\,a_i^{+}a_i = J\,S\,Z\sum_k b_k^{+}b_k$$

同理：$(3)\ J\sum_{\langle ij\rangle}S\,a_j^{+}a_j = JSZ\sum_k b_k^{+}b_k$；$(4)\ H_1 = J\sum_{\langle ij\rangle}S\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right)$

$$\boxed{\text{因指标 } i, j \text{ 是任意的，故可以按需交换位置}}$$

$J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right) = J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_j^{+}a_i + a_i^{+}a_j\right)$，引入傅里叶变换有：

$$J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right) = J\,S\sum_i\sum_r N^{-1}\left(\sum_k\sum_{k'}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j}\,e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_i}\,b_k^{+}b_{k'} + \sum_k\sum_{k'}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}\,e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j}\,b_k^{+}b_{k'}\right)$$

$$J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right) = J\,S\sum_i\sum_r N^{-1}\sum_k\sum_{k'}\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,e^{i\left(\vec{k}'-\vec{k}\right)\cdot\vec{r}_i}\,b_k^{+}b_{k'} + e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\,e^{i\left(\vec{k}'-\vec{k}\right)\cdot\vec{r}_i}\,b_k^{+}b_{k'}\right)$$

$$J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right) = J\,S\sum_r\sum_k\sum_{k'}\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,N^{-1}\sum_i e^{i\left(\vec{k}'-\vec{k}\right)\cdot\vec{r}_i}\,b_k^{+}b_{k'} + e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\,N^{-1}\sum_i e^{i\left(\vec{k}'-\vec{k}\right)\cdot\vec{r}_i}\,b_k^{+}b_{k'}\right)$$

$$J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right) = J\,S\sum_r\sum_k\sum_{k'}b_k^{+}b_{k'}\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,\delta_{kk'} + e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\,\delta_{kk'}\right)$$

$$J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right) = 2J\,S\sum_r\sum_k b_k^{+}b_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}};\quad J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right) = 2J\,S\sum_k b_k^{+}b_k\sum_r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right) = 2J\,S\,Z\sum_k b_k^{+}b_k\frac{1}{Z}\sum_r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

定义自旋结构因子 $\frac{1}{Z}\sum_r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \gamma_k$ 有：

$$J\,S\sum_{\langle ij\rangle}\left(a_i a_j^{+} + a_i^{+}a_j\right) = 2JSZ\sum_k\gamma_k b_k^{+}b_k$$

$$H_1 = JNZS^2 - 2JZS\sum_k b_k^{+}b_k + 2JZS\sum_k\gamma_k b_k^{+}b_k;\quad H_1 = JNZS^2 - 2JZS\sum_k\left(1-\gamma_k\right)b_k^{+}b_k$$

Educational Development Research, 教育发展研究 (2) 2020, 7
ISSN: 2661-3573 (Print); 2661-3581 (Online)

对 H_2 引入 H-P 变换有：

$$H_2=\sum_{ij}J_{ij}\left[\left(S-a_i^+a_i\right)\left(S-a_j^+a_j\right)+\frac{1}{2}\left(\sqrt{2S-a_i^+a_i}\right)a_ia_j^+\left(\sqrt{2S-a_j^+a_j}\right)+\frac{1}{2}a_i^+\left(\sqrt{2S-a_i^+a_i}\right)\left(\sqrt{2S-a_j^+a_j}\right)a_j\right]$$

将 $\sqrt{2S-a^+a}$ 用 $\sqrt{2S}$ 近似代替有：

$$H_2=\sum_{ij}J_{ij}\left[S^2-S\left(a_i^+a_i+a_j^+a_j\right)+a_i^+a_ia_j^+a_j+S\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)\right]$$

略去四次方项有：

$$H_2=\sum_{ij}J_{ij}\left[S^2-S\left(a_i^+a_i+a_j^+a_j\right)+S\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)\right]$$

$$H_2=\underbrace{\sum_{ij}J_{ij}S^2}_{(1)}-\underbrace{\sum_{ij}J_{ij}S\,a_i^+a_i}_{(2)}-\underbrace{\sum_{ij}J_{ij}S\,a_j^+a_j}_{(3)}+\underbrace{\sum_{ij}J_{ij}S\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)}_{(4)}$$

(1) $\sum_{ij}J_{ij}S^2=S^2\sum_i\sum_r J_{ij}$，

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{其中 } r=\left|\vec r_i-\vec r_j\right|,J_{ij}=J\left(\left|\vec r_i-\vec r_j\right|\right)=J(r)\\ \text{令 } J(k)=\sum_r J(r)e^{i\vec k\cdot\vec r},\text{则 } J(0)=\sum_r J(r)\end{array}}$$

$$\sum_{ij}J_{ij}S^2=S^2\sum_i\sum_r J(r)=N\,S^2J(0)$$

(2) $\sum_{ij}J_{ij}S\,a_i^+a_i$，引入傅里叶变换有：

$$\sum_{ij}J_{ij}S\,a_i^+a_i=S\sum_i\sum_r J(r)N^{-1}\sum_k\sum_{k'}e^{-i\vec k\cdot\vec r_i}\,e^{i\vec k'\cdot\vec r_i}\,b_k^+b_{k'}$$

$$\sum_{ij}J_{ij}S\,a_i^+a_i=S\sum_r J(r)\sum_k\sum_{k'}N^{-1}\sum_i e^{-i\left(\vec k-\vec k'\right)\cdot\vec r_i}\,b_k^+b_{k'}\;;\quad \sum_{ij}J_{ij}S\,a_i^+a_i=S\sum_r J(r)\sum_k\sum_{k'}\delta_{kk'}b_k^+b_{k'}$$

$$\sum_{ij}J_{ij}S\,a_i^+a_i=S\sum_r J(r)\sum_k b_k^+b_k\;;\quad \sum_{ij}J_{ij}S\,a_i^+a_i=S\,J(0)\sum_k b_k^+b_k$$

同理：

$$(3)\ \sum_{ij}J_{ij}S\,a_j^+a_j=S\,J(0)\sum_k b_k^+b_k\;;\quad (4)\ H_2=\sum_{ij}J_{ij}S\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)$$

$$S\sum_{ij}J_{ij}\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)=S\sum_{ij}J_{ij}\left(a_j^+a_i+a_i^+a_j\right),$$

引入傅里叶变换有：

$$S\sum_{ij}J_{ij}\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)=S\sum_i\sum_r J(r)N^{-1}\left(\sum_k\sum_{k'}e^{-i\vec k\cdot\vec r_j}\,e^{i\vec k'\cdot\vec r_i}\,b_k^+b_{k'}+\sum_k\sum_{k'}e^{-i\vec k\cdot\vec r_i}\,e^{i\vec k'\cdot\vec r_j}\,b_k^+b_{k'}\right)$$

$$S\sum_{ij}J_{ij}\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)=S\sum_i\sum_r J(r)N^{-1}\sum_k\sum_{k'}\left(e^{i\vec k\cdot\vec r}\,e^{i\left(\vec k'-\vec k\right)\vec r_i}\,b_k^+b_{k'}+e^{i\vec k'\cdot\vec r}\,e^{i\left(\vec k'-\vec k\right)\vec r_i}\,b_k^+b_{k'}\right)$$

$$S\sum_{ij}J_{ij}\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)=S\sum_r J(r)\sum_k\sum_{k'}\left(e^{i\vec k\cdot\vec r}\,N^{-1}\sum_i e^{i\left(\vec k'-\vec k\right)\vec r_i}\,b_k^+b_{k'}+e^{i\vec k'\cdot\vec r}\,N^{-1}\sum_i e^{i\left(\vec k'-\vec k\right)\vec r_i}\,b_k^+b_{k'}\right)$$

$$S\sum_{ij}J_{ij}\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)=S\sum_r J(r)\sum_k\sum_{k'}b_k^+b_{k'}\left(e^{i\vec k\cdot\vec r}\,\delta_{kk'}+e^{i\vec k'\cdot\vec r}\,\delta_{kk'}\right)$$

$$S\sum_{ij}J_{ij}\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)=2S\sum_k\underbrace{\sum_r J(R)e^{i\vec k\cdot\vec r}}_{J(k)}\,b_k^+b_k$$

$$S\sum_{ij}J_{ij}\left(a_ia_j^++a_i^+a_j\right)=2S\sum_k J(k)b_k^+b_k$$

$$H_2 = N\,S^2 J(0) - 2S\,J(0)\sum_k b_k^+ b_k + 2S\sum_k J(k) b_k^+ b_k$$

$$H_2 = N\,S^2 J(0) - 2S\sum_k [J(0) - J(k)] b_k^+ b_k \text{ ，}$$

而根据 $H = H_1 - H_2$ 有：

$$H = JNZS^2 - 2JZS\sum_k (1-\gamma_k) b_k^+ b_k - \left\{ N\,S^2 J(0) - 2S\,J(0)\sum_k b_k^+ b_k + 2S\sum_k J(k) b_k^+ b_k \right\}$$

$$H = N\,S^2 [J\,Z - J(0)] + 2S\sum_k \left\{ [J(0) - J(k)] - J\,Z(1-\gamma_k) \right\} b_k^+ b_k$$

设约束项为：

$$\lambda\sum_i S_i^z \text{ 有：} \lambda\sum_i S_i^z = \lambda\sum_i \left(S - a_i^+ a_i\right) \Rightarrow \lambda\sum_i S_i^z = \lambda\sum_i S - \lambda\sum_i a_i^+ a_i$$

引入傅立叶变换有：

$$\lambda\sum_i S_i^z = \lambda N\,S - \lambda\sum_i N^{-1}\sum_k\sum_{k'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}\, e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_i}\, b_k^+ b_{k'}$$

$$\lambda\sum_i S_i^z = \lambda N\,S - \lambda\sum_k\sum_{k'} N^{-1}\sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}\, e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_i}\, b_k^+ b_{k'}$$

$$\lambda\sum_i S_i^z = \lambda N\,S - \lambda\sum_k\sum_{k'} \delta_{kk'} b_k^+ b_{k'} = \lambda N\,S - \lambda\sum_k b_k^+ b_k$$

考虑约束项后的哈密顿为：

$$H = N\,S^2 [J\,Z - J(0)] + 2S\sum_k \left\{ [J(0) - J(k)] - J\,Z(1-\gamma_k) \right\} b_k^+ b_k - \left(\lambda N\,S - \lambda\sum_k b_k^+ b_k\right)$$

$$H = NS\left[JZS - SJ(0) - \lambda\right] + \sum_k \left\{ 2S\left[J(0) - J(k)\right] - 2JZS(1-\gamma_k) + \lambda \right\} b_k^+ b_k$$

基态能量为：

$$E_0 = N\,S[JZS - S\,J(0) - \lambda]$$

自旋波量子（磁振子）为：

$$\hbar\omega_k = 2S\left[J(0) - J(k)\right] - 2JZS(1-\gamma_k) + \lambda$$

3 结语

自此，我们利用自旋波理论的方法对一维量子海森堡铁磁系统哈密顿量进行了引入霍斯坦因·普里马科夫变换和傅立叶变换并略去四次方项和用 $\sqrt{2S}$ 近似代替 $\sqrt{2S - a^+ a}$ 的两种近似计算，得到了它的自旋波量子（磁振子）。有了自旋波量子（磁振子），接下来就可以建立约束项平均值的等式、再令约束项的平均值为零，建立关于格点总自旋 S 的等式。然后就可以根据热力学公式探究模型的热力学性质了。

作者简介：张修志（1982.3—），男，黑龙江鸡东人，讲师，研究方向：受限小量子系统。

【参考文献】

[1] J.Ricardo de Sousa and N. S. Branco, Phys. Rev. B.72, 134421 (2005).
[2] H. Nakano and M. takashi, Phys. Rev. B.50, 14 (1994).
[3] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. lett. 60, 635 (1988).
[4] B. S. Shastry, Phys. Rev. lett. 60, 639 (1988).
[5] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. lett. 66, 1529 (1991).
[6] F. J. Dyson, Commun. Math. Phys. 12, 91 (1969); 12, 212 (1969); 21, 269 (1971).