arXiv:2303.00380v2 [cond-mat.str-el] 3 Mar 2023

具有 U(1) 对称性的量子自旋模型的转子/自旋波理论

Tommaso Roscilde、Tommaso Comparin 和 Fabio Mezzacapo*Univ Lyon*、
Ens de Lyon、 *CNRS*、 *Laboratoire de Physique*、 *F-69342 Lyon*、 *France*

在热力学极限下自发破缺连续 $U(1)$ 对称性的有限尺寸晶格量子自旋模型，其静态和动力学性质对于从凝聚态物理到量子模拟的诸多物理系统都至关重要。这类系统以戈德斯通激发分支为特征，该分支终止于一个零模；在线性化方法中对零模进行理论处理会导致有限尺寸系统上的发散，从而表明，脱离热力学极限后，对称性破缺这一假设并没有明确的定义。在本工作中，我们证明，一旦将零模的所有非线性纳入考量，零模便与一个 U(1) 量子转子完全对应，并且与预期存在于表现出热力学极限下对称性破缺的系统中的安德森态塔相关。有限动量模在占据数较低时则可以安全地线性化（即在自旋波理论框架内处理），并有效地与零模解耦。这一图景使得可以近似地将转子变量与自旋波变量分离，从而正确描述基态和低能物理。更重要的是，它为有限尺寸非平衡动力学提供了一种定量处理方法——在量子淬火之后，这种动力学由零模主导，而线性化方法在短时间后便会失效。我们聚焦于具有幂律衰减相互作用的 $2d$ XX模型，将平衡态预测与无偏的量子蒙特卡罗结果和精确对角化结果进行比较，并将非平衡结果与含时变分蒙特卡罗结果进行比较。对于所有相互作用范围，结果都具有显著的一致性，而且相互作用范围越长，一致性越好。我们的转子/自旋波理论为将自旋波理论及其扩展应用于处于平衡态或偏离平衡态的有限尺寸系统，确立了一种行之有效的策略。

I. 引言

晶格量子自旋模型 [1, 2] 在多体量子物理领域占据核心地位，为绝缘材料中的磁性提供了定量描述，同时也是量子统计力学的一组典型模型。近年来，随着此类模型能够在由相互作用的量子比特（$S = 1/2$自旋）或量子多能级系统（$S > 1/2$自旋）构成的体系中实现，量子自旋模型的研究在量子模拟 [3], 领域进入了一个新阶段；相关平台包括光学晶格中的超冷原子 [4–8], 囚禁离子 [9], 里德堡原子阵列 [10], 或超导电路 [11], ，仅举数例。

量子模拟为量子磁性的研究带来了两个新的基本层面：1）量子模拟器可实现介观自旋系综（粒子数为 N 至 ~ 10，具体范围取决于平台），其有限尺寸特性是一个基本特征，而不一定是一种局限；2）量子模拟器可自然实现量子自旋模型的幺正非平衡动力学，且演化时间足够长，使系统尺寸有限这一事实能够对动力学产生影响。要忠实地研究非平衡量子动力学，就必须能够描述关联和纠缠的演化；尤其是必须在描述中考虑非线性，因为非线性对于有限尺寸系统的动力学至关重要——下文将进一步阐述这一点。在量子自旋模型的背景下，处理超越平均场层次的量子关联和纠缠，最简单的方法是线性自旋波（LSW）理论 [1, 12], ，它将量子自旋问题近似映射为一个二次玻色哈密顿量，用以描述经典有序态附近的线性化量子涨落。该理论基于自发对称性破缺（SSB）这一假设，即认为物理系统的动力学始终局限于经典有序构型附近，并在有序态周围产生微弱振荡。这一图像使动力学线性化成为可能；在自发对称性破缺得以恰当实现的热力学极限下，它完全成立。另一方面，在有限尺寸系统中，有序态附近的线性涨落图像可能会严重失效，导致经典有序遭到破坏，并出现完全非线性的量子效应；这类效应通常会产生比线性量子涨落所能描述的形式更为丰富的纠缠。

有限尺寸系统中长程有序的动力学扰乱，在连续对称性的情形下尤为严重——本文将聚焦于具有 U(1) 对称性的平移不变系统，即均匀平面磁体。在这类系统中，两个自旋分量的耦合强度相同，且这种耦合主导系统的低能能量学。破缺 U(1) 对称性的系统具有无能隙的戈德斯通激发支（线性自旋波理论对此已有正确描述），该支终止于一个零模 ——即零波矢处与 U(1) 对称性动力学恢复相关的零频模。然而，传统线性自旋波理论在有限尺寸系统中的失效，体现在处理这一零模时遇到的显著困难。首先，在不存在偶然简并的情况下，有限尺寸系统不允许存在完全无能隙的谱。事实上

众所周知，破缺连续对称性的系统，其低能谱呈现的并非如此，而是安德森态塔（ToS），即类似量子转子 [13–15] 的离散非线性激发谱。忽略这一点并将无能隙零模不加分析地纳入系统，会导致动量空间求和发散，而这些求和决定了线性自旋波理论最基本的一些预测，首当其冲的是序参量的大小。

面对这一问题，为了构建有限尺寸系统的 LSW 理论，可以考虑三种策略：1）零模移除：可以直接在处理中去除零模，因为在热力学极限下，它对动量空间积分的贡献会消失。这种方法适用于用有限尺寸系统模拟热力学极限，但无法捕捉有限尺寸带来的特有影响；2）零模开隙：仍可将零模纳入 LSW 描述，但通过施加一个与序参量耦合的场来消除其病态特性，从而使该模获得能隙 [16–18]。这种方法也是 LSW 理论非线性推广（即所谓的修正自旋波理论 [19]）的基础；3）对零模进行单独处理：在平移不变系统中，可以在自旋波理论中将零模与其余模式形式上分离，因为零模源于产生和湮灭零动量玻色子的玻色算符；由于动量守恒，在二次阶近似下，这些算符与有限动量算符彼此解耦。零动量玻色子可以区别于有限动量玻色子进行处理，并可用玻色正交分量表示，而非通过 Bogolyubov 对角化；这一方法最早见于文献 [20–22], , 并已成功应用于具有 SU(2) 对称性的海森堡反铁磁体。

在本工作中，我们采用第三种策略，单独处理零模，即零动量算符；并将这一方法远远拓展到二次玻色子哈密顿量的图景之外，从而考虑有限尺寸系统中经典有序被破坏所伴随的量子非线性效应。以下总结我们的主要结果：

- 我们表明，玻色子哈密顿量中所有仅涉及零动量玻色子的项（包括线性项和非线性项）共同构成了 *U(1)* 量子转子变量的哈密顿量，即一个长度为 NS、转动惯量为 $\sim N$ 的巨自旋。量子转子哈密顿量呈现出有限尺寸系统中预期的 Anderson 塔态谱。有限尺寸系统的平衡低能构型，以及淬火动力学过程中形成的非平衡构型，都会导致转子去极化，对应于零动量玻色子 [50], 的宏观布居，因此处理其非线性至关重要。
- 另一方面，可以认为有限动量玻色模的布居始终很低（$\mathcal{O}(1)$ 布居）；因此，哈密顿量以及所有感兴趣的可观测量，都可以有意义地按有限动量玻色子展开。有限动量模最低阶的非平凡贡献对应于 LSW 理论，其中有限动量模与零动量模彼此解耦。因此，仅保留这一贡献，就得到非线性量子转子变量（零动量玻色子）与有限动量自旋波之间近似变量分离的图像。

下文中，我们将这种方法称为转子/自旋波（RSW）理论。我们将理论应用于具有幂律衰减相互作用的XXZ模型。以量子蒙特卡罗结果为基准，我们表明，RSW理论能够定量描述这些模型的基态物理，其表现与采用有能隙的零模的LSW理论相近（在某些方面甚至更优）。但我们最重要的结果是对激发谱和非平衡动力学的描述。通过将结果与精确对角化进行比较，我们表明，RSW是唯一能够正确描述有限尺寸系统低能激发谱的自旋波方法，可同时描述Anderson 塔态谱和自旋波激发。正确描述低能激发谱，确保了该方法能够描述从完全极化自旋态出发的低能淬火动力学。通过将结果与基于对积波函数的含时变分蒙特卡罗进行比较，我们表明，RSW理论是唯一能够定量描述动力学的自旋波方法，这是因为它正确处理了零动量玻色子的所有非线性效应。我们的姊妹论文Ref. [23]对RSW方法在描述淬火动力学方面的成功作了补充性的大篇幅讨论。我们的谱和动力学性质结果在定量上的准确性，从根本上表明，将零动量转子变量与有限动量自旋波变量近似分离的图景，为理解有限尺寸量子磁体的行为提供了极富成效的研究途径。

本文结构如下。第II节介绍自旋-玻色子映射以及有限尺寸自旋波理论的传统方法；第三节讨论近似的转子/自旋波分离和RSW 理论；第IV节比较传统自旋波理论、RSW 理论和量子蒙特卡罗对二维长程XXZ模型基态的预测；第V节讨论低能谱；第VI节阐述传统自旋波理论在描述非平衡动力学时存在的问题，以及RSW 理论的成功之处。结论见

第七节。

II. XXZ模型的自旋-玻色子映射与自旋波理论

A. 自旋哈密顿量

在本工作中，我们将重点放在相互作用随距离按幂律衰减的XXZ模型上（以下简称为 α-XXZ模型），

$$\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}} = -\sum_{i<j} J_{ij}\left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z\right) \quad (1)$$

这里， $S_i^\mu(\mu = x, y, z)$是任意自旋长度的量子自旋算符，$\boldsymbol{S}_i^2 = S(S+1)$； i 和 j 指标遍历周期性布拉菲晶格的格点（坐标为 $\boldsymbol{r}_i$ 和 $\boldsymbol{r}_j$），该晶格除此之外没有其他限制。布拉菲晶格这一假设并非必要，只是为了简化问题：我们的方法可以很容易地推广到非布拉菲晶格。耦合 J_{ij} 随格点间距呈幂律衰减结构

$$J_{ij} = \frac{J}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|^\alpha} \quad (2)$$

指数为 $\alpha \geq 0$； $J > 0$是 x 和 y 自旋分量之间的铁磁耦合； Δ是耦合各向异性。

在本文余下部分，我们将讨论这样一类系统：其基态在 xy 平面内形成长程铁磁有序。这对晶格维数以及 Δ的取值施加了根本性限制。易平面各向异性，即 $|\Delta| < 1$，确保 xy 平面中的自旋-自旋关联最强；而关联函数

$$C_{ij}^{(\mu\mu)} = \langle S_i^\mu S_j^\mu \rangle \quad (3)$$

在满足 $\alpha < 2d$ in $d = 1,2$ 的条件下，对于 $\mu = x$ or y，其基态具有长程有序，且可持续至有限的临界温度，从而保证违反默明-瓦格纳定理 [24]；当 $d = 3$ 时，对任意 α 也成立。对于任意 α，当 $d \geq 2$ 时，量子易平面铁磁体的基态也具有长程有序。对于 $\Delta < -1$， x and y 自旋分量也可能呈现长程有序，即当 z 自旋分量的反铁磁相互作用占主导时，只要晶格几何和/或相互作用的长程特性对这一相互作用造成足够强的受挫即可——例如，参见文献 [18]，其中给出了正方晶格上 α-XXZ模型的平均场相图。

α-XXZ模型不仅与固态磁性的描述密切相关（尤其是在短程相互作用的极限下），而且也已在许多量子模拟平台上实现（包括其长程版本），从囚禁离子 [9]到光镊阵列中的里德堡原子 [10, 25]，，再到超冷分子 [8]以及深光学晶格中的磁性原子 [5, 7]。

B. 自旋-玻色子变换与自旋波理论

我们方法的关键步骤是利用著名的 Holstein-Primakoff（HP）变换 [26]，将自旋模型映射为玻色模型，并将量子化轴选在沿着 x 轴的方向（即位于长程有序出现的 xy 平面内）：

$$\begin{aligned} S_i^x &= S - n_i \\ S_i^y &= \frac{1}{2}\left(S_i^+ + S_i^-\right) = \frac{1}{2}\left(\sqrt{2S - n_i}\, b_i + b_i^\dagger \sqrt{2S - n_i}\right) \\ S_i^z &= \frac{1}{2i}\left(S_i^+ - S_i^-\right) = \frac{1}{2i}\left(\sqrt{2S - n_i}\, b_i - b_i^\dagger \sqrt{2S - n_i}\right) . \end{aligned} \quad (4)$$

此处，升算符和降算符 S_i^+ and S_i^- 分别相对于 x 轴定义；而 $b_i, b_i^\dagger$ 是玻色算符，其中 $n_i = b_i^\dagger b_i$。

如果式（1）的哈密顿量在 xy 平面内具有铁磁长程有序，则该基态的平均场近似为相干自旋态（CSS），所有自旋均沿 例如 x 轴排列，$|\mathrm{CSS}_x\rangle = |\rightarrow_x\rangle^{\otimes N}$ 对应于 HP 玻色子的真空态。

在 HP 变换下， α-XXZ 哈密顿量呈现为

$$\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}} = -\sum_{i<j} J_{ij}\left(\mathcal{H}_{ij}^{(xx)} + \mathcal{H}_{ij}^{(++)} + \mathcal{H}_{ij}^{(+-)}\right) \quad (5)$$

其中

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ij}^{(xx)} &= (S - n_i)(S - n_j) \\ \mathcal{H}_{ij}^{(++)} &= \frac{1-\Delta}{4}\left(\sqrt{2S - n_i}\, b_i \sqrt{2S - n_j}\, b_j + \mathrm{h.c.}\right) \\ \mathcal{H}_{ij}^{(+-)} &= \frac{1+\Delta}{4}\left(\sqrt{2S - n_i}\, b_i b_j^\dagger \sqrt{2S - n_j} + \mathrm{h.c.}\right) \end{aligned} \quad (6)$$

由于 HP 变换中存在平方根，上述哈密顿量具有高度非线性的形式。然而，将平方根展开后不难看出，其中只包含玻色算符的偶数阶项，即

$$\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}} = E_{\mathrm{CSS}} + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_4 + ... \quad (7)$$

其中

$$E_{\mathrm{CSS}} = -\sum_{i<j} J_{ij} S^2 \quad (8)$$

是 CSS 的能量（或平均场能量），而

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 = -\sum_{i<j} J_{ij} S \Big[&- (n_i + n_j) \\ &+ \frac{1-\Delta}{2}\left(b_i b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger\right) + \frac{1+\Delta}{2}\left(b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i\right) \Big] \end{aligned} \quad (9)$$

是描述平均场附近二次涨落的哈密顿量，它构成了自旋波近似的基础。

在动量空间中引入 HP 玻色子

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{q}} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i} b_{\boldsymbol{q}} \tag{10}$$

其中，$\boldsymbol{q}$ 波矢遍历周期晶格的布里渊区，可得二次哈密顿量的如下形式

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}} \begin{pmatrix} b_{\boldsymbol{q}}^\dagger \\ b_{-\boldsymbol{q}} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} A_{\boldsymbol{q}} & B_{\boldsymbol{q}} \\ B_{\boldsymbol{q}} & A_{\boldsymbol{q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\boldsymbol{q}} \\ b_{-\boldsymbol{q}}^\dagger \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}} A_{\boldsymbol{q}} \tag{11}$$

其中

$$\begin{aligned} A_{\boldsymbol{q}} &= S\left[J_0 - J_{\boldsymbol{q}}(1+\Delta)/2\right] \\ B_{\boldsymbol{q}} &= -J_{\boldsymbol{q}} S(1-\Delta)/2 \end{aligned} \tag{12}$$

并且，我们引入自旋-自旋耦合的傅里叶变换

$$J_{\boldsymbol{q}} = \frac{1}{N}\sum_{ij} e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)}\ J_{ij}\ . \tag{13}$$

通过引入算符 $a_{\boldsymbol{q}}$ 和 $a_{\boldsymbol{q}}^\dagger$，可以对二次哈密顿量进行 Bogolyubov 对角化，使得 $b_{\boldsymbol{q}} = u_{\boldsymbol{q}} a_{\boldsymbol{q}} - v_{\boldsymbol{q}} a_{-\boldsymbol{q}}^\dagger$，其中

$$u_{\boldsymbol{q}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{A_{\boldsymbol{q}}}{\epsilon_{\boldsymbol{q}}} + 1\right)} \quad v_{\boldsymbol{q}} = \mathrm{sign}(B_{\boldsymbol{q}})\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{A_{\boldsymbol{q}}}{\epsilon_{\boldsymbol{q}}} - 1\right)} \tag{14}$$

从而得到如下形式

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{\boldsymbol{q}} \epsilon_{\boldsymbol{q}} a_{\boldsymbol{q}}^\dagger a_{\boldsymbol{q}} + \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}} (\epsilon_{\boldsymbol{q}} - A_{\boldsymbol{q}}) \tag{15}$$

其中

$$\epsilon_{\boldsymbol{q}} = \sqrt{A_{\boldsymbol{q}}^2 - B_{\boldsymbol{q}}^2} = S\sqrt{(J_0 - J_{\boldsymbol{q}})(J_0 - \Delta J_{\boldsymbol{q}})}\ . \tag{16}$$

这些结果构成了标准线性自旋波理论的基础。特别是，该理论中的基态能量为

$$E_0 = E_{\mathrm{CSS}} + \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}} (\epsilon_{\boldsymbol{q}} - A_{\boldsymbol{q}})\ . \tag{17}$$

C. 通过施加场对线性自旋波理论进行正则化（LSW+h 方法）

当 $\boldsymbol{q}$ =0 时，自旋波色散关系 $\epsilon_{\boldsymbol{q}}$ 趋于零：这一零模的存在导致式（14）中的 Bogolyubov 变换出现奇异性，因此需要对 b_0,$b_0^\dagger$ 算符作单独处理。

解决零模 Bogolyubov 变换奇异性的一种可能策略——例如文献 [16–18]中所采用的方法——是通过施加与序参量耦合的均匀磁场使其产生能隙。这意味着在哈密顿量中添加一项 $\mathcal{H}_h = -h\sum_i S_i^x = -hSN + h\sum_i n_i$，从而使平均场能量中出现额外项 $-hSN$；同时，二次哈密顿量中也会出现额外项，相当于将 $A_{\boldsymbol{q}}$ 系数的值平移：

$$A_{\boldsymbol{q}} = S\left[J_0 - J_{\boldsymbol{q}}(1+\Delta)/2\right] + h\ . \tag{18}$$

因此，在 $\boldsymbol{q} = 0$处会出现能隙 $\epsilon_{\boldsymbol{q}=0} = \sqrt{2A_0 h + h^2}$。所添加场的大小原则上可以任意选择：不过，一个合理的标准是选择 h，使系统基态（或更一般地说，平衡态）中的平均序参量为零。用 $\langle ...\rangle_h$ 表示施加场存在时的平衡平均值，则要求 $\langle S_i^x\rangle_h = 0$。鉴于 $\langle S_i^x\rangle_h = S - N^{-1}\sum_{\boldsymbol{q}}\left[(u_{\boldsymbol{K}}^2 + v_{\boldsymbol{K}}^2)n_{\boldsymbol{q}} + v_{\boldsymbol{q}}^2\right]$，其中 $n_{\boldsymbol{q}} = (e^{\beta\epsilon_{\boldsymbol{q}}} - 1)^{-1}$ 是逆温度为 $\beta = (k_B T)^{-1}$时的玻色分布，关于 h 的条件可写为

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}} \frac{(2n_{\boldsymbol{q}} + 1)A_{\boldsymbol{q}}}{2\epsilon_{\boldsymbol{q}}} = S + \frac{1}{2}\ . \tag{19}$$

这意味着，$\boldsymbol{q} = 0$ 处对总和的贡献不会发散，而至多产生一个为 $\mathcal{O}(1)$ 的项，即 $(2n_0 + 1)A_0/\epsilon_0 \sim \mathcal{O}(N)$。在满足$\beta\epsilon_0 \ll 1$的弱场下，有 $n_0 \approx k_B T/\sqrt{2A_0 h}$。因此，上述条件可写为

$$\frac{\frac{2k_B T}{\sqrt{2A_0 h}} + 1}{\sqrt{h}} \sim N\ , \tag{20}$$

这意味着，在 $T = 0$处，$h \sim \mathcal{O}(N^{-2})$，而对于 $T > 0$（以及 $T > \mathcal{O}(N^{-1})$），则有 $h \sim \mathcal{O}(N^{-1})$。有趣的是，$T = 0$ 处能隙按 $\sqrt{h} \sim O(N^{-1})$ 标度，这恰好反映了在热力学极限下自发破缺连续对称性的系统中最低能量激发的有限尺寸标度 [17],，也就是我们将在下文讨论的安德森塔态激发的标度。下文将把这种对线性自旋波理论进行正则化的策略称为“LSW+h”。

III. 零模作为量子转子，以及转子/自旋波分离

我们解决线性自旋波理论中零模问题的策略，是按照文献 [20] 的思路，将玻色子 $b_0, b_0^\dagger$ 与有限动量玻色子分开处理。正如前文所述，从技术层面来看，这是由 Bogolyubov 变换（式 (14)）在 $\boldsymbol{q} = 0$ 处的奇异性所要求的。然而，这种奇异性揭示了线性自旋波理论在存在无能隙模式时应用于有限尺寸系统所存在的深层缺陷。HP 变换（式 (5)）的线性化导出了二次哈密顿量 $\mathcal{H}_2$，而这只有在假设 HP 玻色子气体稀薄时才成立，

也就是说，在平移不变系统中 $\langle n_i\rangle = N^{-1}\sum_{\boldsymbol{q}}\langle b^\dagger_{\boldsymbol{q}} b_{\boldsymbol{q}}\rangle \ll 2S$。这通常意味着所有 $\boldsymbol{q}$ 都有 $\langle b^\dagger_{\boldsymbol{q}} b_{\boldsymbol{q}}\rangle \ll 2NS$ ——事实上，对于大多数模式，$\langle b^\dagger_{\boldsymbol{q}} b_{\boldsymbol{q}}\rangle \ll 2S$。显然，对于 $\boldsymbol{q}=0$，这一假设并不成立，因为 $\langle b^\dagger_0 b_0\rangle \sim 1/\epsilon_0 \to \infty$，尤其是在 $\boldsymbol{q}=0$ 模式无能隙的情况下。这一缺陷揭示了一个根本事实：在有限尺寸系统中，自发对称性破缺的假设，以及经典有序态附近量子涨落很小的假设，都是站不住脚的。

$\boldsymbol{q}=0$玻色子 $\langle b^\dagger_0 b_0\rangle$的数目不能被视为很小，这反过来要求处理玻色子哈密顿量（式（5））中涉及 b_0、$b^\dagger_0$ 玻色子的非线性项。我们的策略是仅对零动量玻色子所涉及的非线性项进行全阶重求和，从而充分考虑它们的非线性。通过这种方式，我们重构了有限尺寸系统中零动量激发的真实本质：它们不是线性玻色准粒子，而是宏观量子转子的非线性激发，正如我们将在下文说明的那样。

A. 量子转子变量的重构

我们方法的核心洞见在于：对于所有相关态，b_0、$b^\dagger_0$ 算符对玻色子哈密顿量的贡献在参数上大于 $b_{\boldsymbol{q}\neq 0}$、$b^\dagger_{\boldsymbol{q}\neq 0}$算符，因为 $\langle b^\dagger_0 b_0\rangle \gg \langle b^\dagger_{\boldsymbol{q}\neq 0} b_{\boldsymbol{q}\neq 0}\rangle$。这一点在精神上类似于玻色-爱因斯坦凝聚假设，而该假设正是稀薄玻色气体的Bogolyubov理论的基础 [27]。然而，与该理论不同，我们不会通过经典场近似处理 $\boldsymbol{q}=0$ 玻色子，因为这会使我们回到自发对称性破缺的假设。相反，我们将完整保留 $\boldsymbol{q}=0$ 玻色模的量子本质。

鉴于可能存在宏观数量的 $\boldsymbol{q}=0$ 玻色子，我们将在哈密顿量中分离出仅包含 b_0，$b^\dagger_0$ 算符的部分。这相当于将完整的玻色子哈密顿量（式 (5)）写到动量空间中，并舍弃所有包含某些 $b_{\boldsymbol{q}\neq 0}$，$b^\dagger_{\boldsymbol{q}\neq 0}$ 算符的项。由于哈密顿量具有非线性，这看起来或许是一项相当艰巨的任务；然而恰恰相反，这项任务相当简单。

1. *Zero-momentum/finite-momentum decomposition of operators*

首先，我们将算符 $O = O(\{b_i, b^\dagger_i\})$ 分解为零动量部分和有限动量部分：

$$O = [O]_{\rm ZM}(b_0, b^\dagger_0) + [O]_{\rm FM} \tag{21}$$

其中，第一项（零动量项）仅包含唯一的b_0，$b^\dagger_0$ 算符；第二项（有限动量项，FM）则是由玻色算符乘积构成的总和，其中至少包含一个具有有限动量的玻色算符。例如，实空间中的玻色算符可分解为 $b_i = [b_i]_{\rm ZM} + [b_i]_{\rm FM}$，其中定义非常简单：

$$[b_i]_{\rm ZM} = \frac{b_0}{\sqrt{N}} \tag{22}$$

and

$$[b_i]_{\rm FM} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i} b_{\boldsymbol{q}}\ . \tag{23}$$

现在来看长度为 S的自旋算符，其 $\mu(=x,\ y,\ z)$ 分量可通过玻色子算符表示为 $S^\mu_i = f^\mu_S(b_i,\ b^\dagger_i)$，其中函数 f^μ_S 由式 (5) 中的 HP 变换给出。对于这些算符，可以直接验证以下性质：

$$[S^\mu_i]_{\rm ZM} = f^\mu_S\left(\frac{b_0}{\sqrt{N}}, \frac{b^\dagger_0}{\sqrt{N}}\right) = \frac{f^\mu_{NS}(b_0, b^\dagger_0)}{N} = \frac{K^\mu}{N} \tag{24}$$

也就是说，自旋-S S^μ 算符的零动量分量等价于（相差一个缩放因子 N^{-1}）另一个自旋算符 K^μ，其宏观长度为 NS，并通过 HP 变换与 b_0，$b^\dagger_0$ 算符相关，即

$$\begin{aligned} K^x &= NS - b^\dagger_0 b_0 \\ K^y &= \frac{1}{2}\left(\sqrt{2NS - b^\dagger_0 b_0}\ b_0 + \text{h.c.}\right) \\ K^y &= \frac{1}{2i}\left(\sqrt{2NS - b^\dagger_0 b_0}\ b_0 - \text{h.c.}\right)\ . \end{aligned} \tag{25}$$

2. *Zero-momentum Hamiltonian as a planar-rotor Hamiltonian*

将所有算符分解为零动量部分和有限动量部分的方法，可以直接应用于 α-XXZ 哈密顿量，以重构其零动量分量

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{\alpha-\rm XXZ}]_{\rm ZM} =& -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\Big([S^x_i]_{\rm ZM}[S^x_j]_{\rm ZM} + [S^y_i]_{\rm ZM}[S^y_j]_{\rm ZM} \\ &\qquad + \Delta[S^z_i]_{\rm ZM}[S^z_j]_{\rm ZM}\Big) \\ =& -\frac{J_{\boldsymbol{q}=0}}{2N}\left[(K^x)^2 + (K^y)^2 + \Delta(K^z)^2\right] \end{aligned} \tag{26}$$

就宏观自旋而言，$\boldsymbol{K}=(K^x,\ K^y,\ K^z)$ 具有量子转子哈密顿量的形式。利用 $(K^x)^2+(K^y)^2 = \boldsymbol{K}^2 - (K^z)^2$ 这一事实，可以将其更明确地写成这种形式，其中

$\boldsymbol{K}^2 = NS(NS+1)$，因此哈密顿量呈单轴扭转（OAT）[28] 形式

$$[\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}]_{\mathrm{ZM}} = \mathcal{H}_{\mathrm{R}} = E_{0,\mathrm{R}} + \frac{(K^z)^2}{2\tilde{I}} \tag{27}$$

其中

$$E_{0,\mathrm{R}} = -\frac{S\left(S+\frac{1}{N}\right)}{2}\sum_{ij} J_{ij} \tag{28}$$

是转子的基态能量；平面转子的广延转动惯量 I 为

$$\frac{1}{2\tilde{I}} = \frac{J_{\boldsymbol{q}=0}\,(1-\Delta)}{2N}\ . \tag{29}$$

当 $\Delta > 1$时，转动惯量变为负值。这表明，基于以 x 为量子化轴的 HP 变换构造玻色子哈密顿量的方法失效了。考虑到当 $\Delta > 1$ 时，哈密顿量的精确基态实际上是沿着 z 轴排列的相干自旋态，这一点显而易见。

我们先指出，转子哈密顿量的定义将在第III节 D中进一步修正（至 $\mathcal{O}(1/N)$ 阶）。还需强调，$\boldsymbol{K}$ 量子自旋是一个不同于集体自旋 $\boldsymbol{J} = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{S}_i$ 的变量；集体自旋的长度 $\boldsymbol{J}^2$ 并不固定，因为集体自旋也包含有限动量玻色子的贡献。不过，正如我们将在第三节 F中看到的那样，两者的行为密切相关。

B. 有限动量玻色子：自旋波哈密顿量及与转子的耦合

如上一节所见，α-XXZ 哈密顿量的零动量/有限动量分解，$\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}} = [\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}]_{\mathrm{ZM}} + [\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}]_{\mathrm{FM}}$ 将零动量部分确定为宏观自旋 $\boldsymbol{K}$的量子转子哈密顿量。有限动量部分$[\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}]_{\mathrm{FM}}$ 是所有至少包含一个有限动量玻色算符的项之和 $b_{\boldsymbol{q}\neq 0}$，$b^\dagger_{\boldsymbol{q}\neq 0}$，描述有限动量激发的能量学，以及它们与零动量模（即量子转子）的耦合。
$[\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}]_{\mathrm{FM}}$ 的一般形式为

$$[\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}]_{\mathrm{FM}} = [\mathcal{H}_2]_{\mathrm{FM}} + [\mathcal{H}_4]_{\mathrm{FM}} + ... \tag{30}$$

有限动量二次哈密顿量对应于不含零模的自旋波哈密顿量，即 $[\mathcal{H}_2]_{\mathrm{FM}} = \mathcal{H}_{\mathrm{SW}}$ with

$$\mathcal{H}_{\mathrm{SW}} = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\begin{pmatrix} b^\dagger_{\boldsymbol{q}} \\ b_{-\boldsymbol{q}}\end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} A_{\boldsymbol{q}} & B_{\boldsymbol{q}} \\ B_{\boldsymbol{q}} & A_{\boldsymbol{q}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_{\boldsymbol{q}} \\ b^\dagger_{-\boldsymbol{q}}\end{pmatrix} - \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0} A_{\boldsymbol{q}}\ , \tag{31}$$

其区别在于缺少 $\boldsymbol{q}=0$ 项。因此，该哈密顿量可以通过 Bogolyubov 变换对角化，而不会出现任何异常。

下一阶项包含有限动量玻色子的最低阶非线性，以及它们与零动量模的耦合，由四次哈密顿量的有限动量部分 $[\mathcal{H}_4]_{\mathrm{FM}}$ 表示：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_4 = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\Big[& b^\dagger_i b^\dagger_j b_i b_j \\ & -\frac{1-\Delta}{8}\left(b^\dagger_i b_i b_i b_j + b^\dagger_j b_j b_j b_i + \mathrm{h.c.}\right) \\ & -\frac{1+\Delta}{8}\left(b^\dagger_i b_i b_i b^\dagger_j + b^\dagger_j b^\dagger_j b_j b_i + \mathrm{h.c.}\right)\Big]\ .\end{aligned} \tag{32}$$

原则上，$[\mathcal{H}_4]_{\mathrm{FM}}$ 包含关于零动量玻色算符 b_0，$b_0^\dagger$ 的三次、二次、一次项以及零次项。尽管如此，在平移不变晶格中，只允许动量守恒的项：$[\mathcal{H}_4]_{\mathrm{FM}}$ 中的三次项涉及 b_0，$b_0^\dagger$，显然不满足动量守恒，因为有限动量处玻色子的产生/湮灭无法由零动量模的产生/湮灭来匹配。因此，$[\mathcal{H}_4]_{\mathrm{FM}}$中含有最多 b_0，$b_0^\dagger$ 的项对于后者这些算符而言是二次的。

C. 近似转子/自旋波分离

总之，总哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}} = \mathcal{H}_{\mathrm{R}} + \mathcal{H}_{\mathrm{sw}} + [\mathcal{H}_4]_{\mathrm{FM}} + ... \tag{33}$$

因此，比较上述哈密顿量中出现的各项的数量级是很有意义的。我们的处理基于以下假设：对于所关注的低能态，或在非平衡时间演化过程中，有限动量玻色子构成稀薄气体，即 $\langle b^\dagger_{\boldsymbol{q}\neq 0} b_{\boldsymbol{q}\neq 0}\rangle \ll 2S$，因此算符 $b^{(\dagger)}_{\boldsymbol{q}}/\sqrt{2S}$ 可以被视为参数上较小。另一方面，我们预计，当沿量子化（x）轴的反演对称性部分或完全恢复时，零动量玻色子的占据数 $\langle b_0^\dagger b_0\rangle$ 可以增大到 $\mathcal{O}(NS)$。因此，算符 $b_0^{(\dagger)}/\sqrt{2NS}$ 可以被视为大于 $b^{(\dagger)}_{\boldsymbol{q}\neq 0}/\sqrt{2S}$ ——其含义是，对于我们所关注的大多数态，$\sqrt{\langle b^\dagger_{\boldsymbol{q}} b_{\boldsymbol{q}}\rangle}/(2S) \lesssim \sqrt{\langle b_0^\dagger b_0\rangle}/(2NS) \leq 1$。事实上，由于 b_0，$b_0^\dagger$ 玻色子的希尔伯特空间约束，最后一个不等式始终成立。

我们注意到

$$\mathcal{H}_{\mathrm{R}} = (2S)^2 N \left[\mathcal{O}(1) + \mathcal{O}\left(\frac{b_0^2}{2NS}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{b_0^4}{(2NS)^2}\right) + ...\right]$$

$$\mathcal{H}_{\mathrm{SW}} = (2S)^2 N\ \mathcal{O}\left(\frac{b_{\boldsymbol{q}\neq 0}^2}{2S}\right)$$

$$[\mathcal{H}_4]_{\mathrm{FM}} = (2S)^2 N \left[\mathcal{O}\left(\frac{b_{\boldsymbol{q}\neq 0}^2}{2S}\ \frac{b_0^2}{2NS}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{b_{\boldsymbol{q}\neq 0}^4}{(2S)^2}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{b_{\boldsymbol{q}\neq 0}^3}{(2S)^{3/2}}\frac{b_0}{\sqrt{2NS}}\right)\right]. \tag{34}$$

这意味着，忽略自旋波与转子之间的耦合项，即忽略项$[\mathcal{H}_4]_{\mathrm{FM}}$及更高阶项，本质上等同于忽略相对于$\mathcal{O}\left(\begin{smallmatrix} b_{\boldsymbol{q}\neq 0}^2 \\ 2S \end{smallmatrix}\right)$阶项（包含在自旋波哈密顿量中）而言的$\mathcal{O}\left(\begin{smallmatrix} b_{\boldsymbol{q}\neq 0}^2 & b_0^2 \\ 2S & 2NS \end{smallmatrix}\right)$阶项（$[\mathcal{H}_4]_{\mathrm{FM}}$中的最低阶项——参见上一节的讨论）。

这一近似使转子变量与有限动量的线性自旋波实现了变量分离。其合理性既有物理依据，源于上述考量；也有技术层面的依据，因为它带来了一套可行的理论，用于描述与量子转子变量共存的谐变量。这些变量都可以精确求解，计算成本随 N呈多项式增长。

D. 改进推导
零动量/有限动量算符分解：投影到Dicke态扇区

上述将哈密顿量分解为零动量和有限动量分量的方法在数学上非常直观，但有一个明显缺点：它不能 正确再现真空期望值，即完整哈密顿量在沿x，$\langle \mathrm{CSS}_x|\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}|\mathrm{CSS}_x\rangle = E_{\mathrm{CSS}}$取向的相干自旋态上的期望值，其中 E_{CSS} 由式 (8) 给出。事实上，由于玻色子的 $|\mathrm{CSS}_{\mathrm{x}}\rangle = |0\rangle$，根据式 (27) 中零动量哈密顿量的定义，立即可得：

$$\langle \mathrm{CSS}_x|[\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}]_{\mathrm{ZM}}|\mathrm{CSS}_x\rangle = E_{\mathrm{CSS}} - \frac{S}{4N}\sum_{ij} J_{ij}(1+2\Delta) \tag{35}$$

而 $\langle \mathrm{CSS}_x|\mathcal{H}_2|\mathrm{CSS}_x\rangle = 0$，这是因为式 (9) 的二次哈密顿量是正规序的。因此，所得期望值与正确项相比，存在$\mathcal{O}(1/N)$量级的误差。

这个问题的根源相当明确：如果将哈密顿量的整个有限动量分量（式 (30)）正规序化，就会产生一些项（相对阶为 $\mathcal{O}(1/N)$），并将其加到零动量哈密顿量中。这一点在式 (32) 给出的四次哈密顿量中已经显而易见：它显然不是正规序的，而且经过正规序处理和傅里叶变换后，会包含仅涉及 b_0, $b_0^\dagger$ 算符的项。因此，对哈密顿量进行零动量/有限动量分解的正确方法是

$$[\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}]_{\mathrm{ZM}} = \mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}} - :[\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}]_{\mathrm{FM}}: \tag{36}$$

其中：(...)：表示对玻色算符进行正规序。这可能意味着，为了正确重构零动量哈密顿量，应当考察（并进行正规序处理）有限动量哈密顿量定义中被忽略的全部项，即式（30）中的一整系列项——这是一项相当艰巨的任务。

不过，幸运的是，我们可以绕过这一困难，并通过认识到零动量哈密顿量的一个基本性质来完全消除 $\mathcal{O}(1/N)$ 阶的所有问题：由于 b_0, $b_0^\dagger$ 算符的构造本身具有格点置换对称性，零动量哈密顿量也完全对称 于格点置换。此外，b_0, $b_0^\dagger$ 算符作用于维数为 $2NS+1$ 的希尔伯特空间中（这是由于自旋的物理性质所导致的玻色占据数约束）。因此，零动量哈密顿量的正确确定应为：将 $\mathcal{H}_{\alpha-\mathrm{XXZ}}$ 投影到希尔伯特空间中由对称迪克态张成的 $(2NS+1)$ 维子空间$|J_{\mathrm{tot}} = NS,\ M\rangle$。引入总自旋

$$\boldsymbol{J} = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{S}_i\ , \tag{37}$$

Dicke 态是 $\boldsymbol{J}^2$ 和 J^z 的本征态，对应的本征值分别为 $J_{\mathrm{tot}}(J_{\mathrm{tot}}+1)$ 和 M；其中 J_{tot} 取其最大值 $J_{\mathrm{tot}} = NS$；且 $M = -J_{\mathrm{tot}}$, ..., J_{tot}。

因此，我们将一般算符 O 的零动量分量重新定义为

$$[O]_{\mathrm{ZM}} = \sum_{M,M'} \langle J_{\mathrm{tot}}, M|O|J_{\mathrm{tot}}, M'\rangle\ |J_{\mathrm{tot}}, M\rangle\langle J_{\mathrm{tot}}, M'|\ . \tag{38}$$

此定义以及将有限动量分量定义为正规序形式的做法，得出一般分解

$$O = [O]_{\mathrm{ZM}} + :[O]_{\mathrm{FM}}: \tag{39}$$

这保证了相干自旋态上的期望值正确，因为：1）相干自旋态属于 Dicke 子空间；2）有限动量分量的正规序确保了该分量对相干自旋态上期望值的贡献为零。

因此，式 (38) 的零动量算符可表示为自旋长度为 NS 的分量 K^μ 的函数。可以简单地将这些分量视为表示所有作用于 Dicke 子空间上的算符的工具，即

$$K^\mu = [J^\mu]_{\mathrm{ZM}} = \sum_{M,M'} \langle J_{\mathrm{tot}}, M|\sum_i S_i^\mu|J_{\mathrm{tot}}, M'\rangle\ |J_{\mathrm{tot}}, M\rangle\langle J_{\mathrm{tot}}, M'|\ . \tag{40}$$

因此，我们可以写成

$$[S_i^\mu]_{\rm ZM} = \frac{K^\mu}{N} \tag{41}$$

并且，对于 $i \neq j$

$$[S_i^\mu S_j^\nu]_{\rm ZM} = \frac{1}{N(N-1)} \left(K^\mu K^\nu - \sum_l [S_l^\mu S_l^\nu]_{\rm ZM} \right) \tag{42}$$

其中， $[S_l^\mu S_l^\nu]_{\rm ZM}$ 的定义与公式(38)中相同。

哈密顿量的 U(1) 对称性使其在 Dicke 子空间上为对角形式，因此

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{\alpha-\rm XXZ}]_{\rm ZM} &= \sum_M \langle J,M|\mathcal{H}_{\alpha-\rm XXZ}|J,M\rangle \ |J,M\rangle\langle J,M| \\
&= \frac{J_0}{2(N-1)} \big[-N(N-1)S^2 + (1-\Delta)(K^z)^2 \\
&\qquad - (1-\Delta)[(S_i^z)^2]_{\rm ZM} \big] \\
&= E_{\rm CSS} - \frac{(1-\Delta)}{N-1} \ [(S_i^z)^2]_{\rm ZM} + \frac{(K^z)^2}{2I} = \mathcal{H}_{\rm R}
\end{aligned} \tag{43}$$

这里我们引入了精细化的转动惯量定义

$$\frac{1}{2I} = \frac{J_0(1-\Delta)}{2(N-1)} \tag{44}$$

它与先前的定义公式(29)不同，差异在于阶数为 $\mathcal{O}(1/N)$ 的修正。公式(43)最后一行定义了转子哈密顿量 $\mathcal{H}_{\rm R}$，并取代了公式(26)中的先前定义。特别是，由于⟨相干自旋态$_x$|$[(S_i^z)^2]_{\rm ZM}$|相干自旋态$_x$⟩ = ⟨相干自旋态$_x$|$(K^z)^2$|相干自旋态$_x$⟩$/N$ =$S/2$, 我们得到 ⟨相干自旋态$_x$|$[\mathcal{H}_{\alpha-\rm XXZ}]_{\rm ZM}$|相干自旋态$_x$⟩ $= E_{\rm CSS}$, 这与上文所述一致。

对于 $S = 1/2$，计算 $[(S_i^z)^2]_{\rm ZM}$ 很简单，因为在这种情况下显然有 $[(S_i^z)^2]_{\rm ZM} = 1/4$。另一方面，对于 $S > 1/2$ 自旋，这一点一点也不简单。由于本文的结果（见第 IV 节和第 VI 节）侧重于 $S = 1/2$ 自旋，我们将把这个问题留待未来研究。

E. RSW 分离与希尔伯特空间扩展

在上一小节中，我们描述了如何通过将哈密顿量以及任何其他算符投影到具有最大集体自旋长度的态所构成的 Dicke 子空间，来识别由此产生的零动量自由度。RSW 理论的核心是转子/自旋波分离，它近似地将一个位于 Dicke 子空间中的转子变量，与自旋波自由度分离开来；后者则描述系统态在与 Dicke 子空间正交的各个扇区上的投影。这种构造显然扩展了多体自旋系统的希尔伯特空间 H。确实， H 是由具有不同集体自旋长度的正交子空间构成的直和 $J_{\rm tot}$, $H_{J_{\rm tot}}$

$$H = \oplus_{J_{\rm tot}} H_{J_{\rm tot}} \ . \tag{45}$$

另一方面，假设 H_{NS} 中的变量与正交子空间中的变量彼此分离，实际上就等于默认将希尔伯特空间扩展为一种张量积结构:

$$H \to H_{NS} \otimes \left(\oplus_{J_{\rm tot} < NS} H_{J_{\rm tot}} \right) \ . \tag{46}$$

此外，将有限动量玻色子的哈密顿量线性化后，正交子空间便被近似为（无限维）玻色子子空间，从而进一步扩展了空间——这无论如何也是大多数玻色化方法的核心。将特定问题嵌入更大的空间，是引入近似时相当常见的步骤——例如传统自旋波理论、从属玻色子方法 [29], Schwinger 玻色子方法 [1], 等。在 RSW 理论中，这对计算标准观测量的影响较小，因为正如我们将看到的，忽略与哈密顿量中被忽略项同类的项后，这些观测量确实可以用转子/自旋波变量表示为可加结构。然而，计算纠缠熵时，后果则稍为严重。正如我们将在第 IV D 节看到的，由于希尔伯特空间维数增大，某些情况下纠缠熵会被高估。我们将在后文进一步讨论这一点。

F. 转子/自旋波分离下的可观测量 离

第三节 D 中式（39）定义的零动量/有限动量分解，可以系统地应用于所有关注的可观测量。在 RSW 理论框架内，通过仅保留有限动量玻色子的二次项并忽略与零动量模的所有耦合，以近似方式处理有限动量部分。

1. *Hamiltonian and its spectrum*

零动量模（转子）与有限动量模（自旋波）之间的近似变量分离，定义了哈密顿量的可加结构

$$\mathcal{H}_{\alpha-\rm XXZ} \approx \mathcal{H}_{\rm R} + \mathcal{H}_{\rm SW} \ , \tag{47}$$

其中，转子哈密顿量的定义见公式(43)。对于有限动量玻色子，自旋波哈密顿量经过 Bogolyubov 对角化后具有以下形式

$$\mathcal{H}_{\rm SW} = \sum_{\boldsymbol{q}\neq 0} \epsilon_{\boldsymbol{q}} a_{\boldsymbol{q}}^\dagger a_{\boldsymbol{q}} + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{q}\neq 0} (\epsilon_{\boldsymbol{q}} - A_{\boldsymbol{q}}) \tag{48}$$

其本征矢量 $|\{n_{\boldsymbol{q}}^{(a)}\}\rangle$ 对应于 Bogolyubov (a)准粒子的福克态。

因此，RSW 理论下哈密顿量的谱为

$$E_{\mathrm{RSW}}(M_K,\{n_{\boldsymbol{q}}^{(a)}\}) = E_{\mathrm{gs}} + \frac{M_K^2}{2I} + \sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\epsilon_{\boldsymbol{q}} n_{\boldsymbol{q}}^{(a)} \tag{49}$$

其中 $M_K = -NS, ..., NS$。相应的近似本征态具有因子化的转子／自旋波形式$|K = NS, M_K\rangle \otimes |\{n_{\boldsymbol{q}}^{(a)}\}\rangle$——见第 III E 节。 E_{gs}是 RSW 基态能量，其表达式为

$$E_{\mathrm{gs}} = E_{\mathrm{CSS}} - \frac{J_0(1-\Delta)}{2(N-1)}\,[(S_i^z)^2]_{\mathrm{ZM}} + \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}(\epsilon_{\boldsymbol{q}} - A_{\boldsymbol{q}})\ . \tag{50}$$

其中包含转子的零点能（在 N 较大时对应于平均场能量），以及有限动量模的零点能。该表达式与 LSW+h 的式（17）几乎一致；右侧第二项起到 $(\epsilon_0 - A_0)/2$ 项的作用，该项在 RSW 中已从最后一个求和项中移除。请注意，由于对转子哈密顿量作了变形，以使基态中的平均磁化强度为零，第 V 节中计算得到的实际谱与此处所述的谱略有不同，详情见第 IVA 节。

此处及下文中，我们用 $\langle ...\rangle_{\mathrm{R}}$ 表示转子处于（平衡或非平衡）态时的平均值，用 $\langle ...\rangle_{\mathrm{SW}}$ 表示自旋波态的平均值。因此，相应的平均能量形式为 $\langle\mathcal{H}\rangle = \langle\mathcal{H}_{\mathrm{R}}\rangle_{\mathrm{R}} + \langle\mathcal{H}_{\mathrm{SW}}\rangle_{\mathrm{SW}}$。

2. *Average total spin*

总自旋 $\boldsymbol{J}$ 的平均 x 分量为

$$\langle J^x\rangle = NS - \sum_{\boldsymbol{q}}\langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{\boldsymbol{q}}\rangle \tag{51}$$

而在下文将讨论的所有情形中，另外两个分量均恒为零。在 RSW 理论中，上述平均值可写成加和形式

$$\langle J^x\rangle = \langle K^x\rangle_{\mathrm{R}} - \sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{\boldsymbol{q}}\rangle_{\mathrm{SW}}\ . \tag{52}$$

3. *Correlation functions and total-spin covariance matrix*

我们考虑一般的自旋-自旋关联函数

$$\begin{aligned} C_{ij}^{\mu\nu} &= \frac{1}{2}\langle\{S_i^\mu, S_j^\nu\}\rangle \\ &= \frac{1}{2N}\sum_{\boldsymbol{q}} e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}\langle\{S_{\boldsymbol{q}}^\mu, S_{-\boldsymbol{q}}^\nu\}\rangle \end{aligned} \tag{53}$$

其中我们引入了自旋算符的傅里叶分解

$$S_i^\mu = N^{-1/2}\sum_{\boldsymbol{q}} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i} S_{\boldsymbol{q}}^\mu\ . \tag{54}$$

按照方程 (39) 和 (42) 的处理方法，关联函数可分解为

$$\begin{aligned} C_{ij}^{\mu\nu} \approx{}& \frac{1}{2}\langle[\{S_i^\mu, S_i^\nu\}]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}\ \delta_{ij} \\ &+ \frac{\langle\{K^\mu, K^\nu\}\rangle_{\mathrm{R}} - \sum_l\langle[\{S_l^\mu, S_l^\nu\}]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}}{2N(N-1)}(1-\delta_{ij}) \\ &+ \frac{1}{2N}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0} e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}\langle:\{S_{\boldsymbol{q}}^\mu, S_{-\boldsymbol{q}}^\nu\}:\rangle_{\mathrm{SW}} \end{aligned} \tag{55}$$

其中，项 $\langle:\{S_{\boldsymbol{q}}^\mu, S_{-\boldsymbol{q}}^\nu\}:\rangle_{\mathrm{SW}}$ 应理解为：将 $\{S_{\boldsymbol{q}}^\mu, S_{-\boldsymbol{q}}^\nu\}$ 算符用 HP 玻色子表示后，对其（正序排列的）谐波近似在自旋波态上的期望值。 $\mu,\ \nu = x,\ y,\ z$的关联函数详细表达式见附录 A。

对集体自旋的协方差矩阵元素在空间上对附录 A 中的表达式进行积分后，可写成如下形式

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}(J^x) &\approx \mathrm{Var}(K^x)_{\mathrm{R}} - 2(NS - \langle K^x\rangle_{\mathrm{R}})N_{\mathrm{FM}} - N_{\mathrm{FM}}^2 \\ \mathrm{Var}(J^y) &\approx \mathrm{Var}(K^y)_{\mathrm{R}} \\ \mathrm{Var}(J^z) &\approx \mathrm{Var}(K^z)_{\mathrm{R}} \\ \mathrm{Cov}(J^x, J^y) &\approx \frac{1}{2}\langle\{K^x, K^y\}\rangle_{\mathrm{R}} \\ \mathrm{Cov}(J^x, J^z) &\approx \frac{1}{2}\langle\{K^x, K^z\}\rangle_{\mathrm{R}} \\ \mathrm{Cov}(J^y, J^z) &\approx \frac{1}{2}\langle\{K^y, K^z\}\rangle_{\mathrm{R}} \end{aligned} \tag{56}$$

其中，$\mathrm{Var}(J^\alpha) = \langle(J^\alpha)^2\rangle - \langle J^\alpha\rangle^2$ 表示方差，$\mathrm{Cov}(J^\alpha, J^\beta) = \frac{1}{2}\langle\{J^\alpha, J^\beta\}\rangle - \langle J^\alpha\rangle\langle J^\beta\rangle$表示协方差，而 $N_{\mathrm{FM}} = \sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{\boldsymbol{q}}\rangle_{\mathrm{SW}}$ 表示有限动量玻色子的数量。

由上述表达式可见，在具有平均自旋 $\langle\boldsymbol{J}\rangle = (\langle J^x\rangle, 0, 0)$ 的平移不变系统的 RSW 理论中，集体自旋的协方差矩阵与转子的协方差矩阵一致——除了 $\mathrm{Var}(J^x)$ 这一项，该项还会受到自旋波的贡献。

4. *Entanglement entropy*

如上所述，RSW 理论中的物理态可分解为转子部分和自旋波部分：$|\psi\rangle = |\psi_{\mathrm{R}}\rangle \otimes |\psi_{\mathrm{SW}}\rangle$。因此，子系统的纠缠熵具有可加结构，其中一部分来自转子变量，另一部分来自有限动量自旋波。

自旋波的贡献可以通过有限动量

玻色子的协方差矩阵知识计算得出，即通过矩阵 $G_{ij} = \langle \tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_j \rangle$ 和 $F_{ij} = \langle \tilde{b}_i \tilde{b}_j \rangle$计算，其中 $\tilde{b}_i, \tilde{b}_i^\dagger$ 算符˜仅包含式（23）中定义的有限动量分量 $b_i = [b_i]_{\mathrm{FM}}$。因此

$$\begin{aligned} G_{ij} =& \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{q} \neq 0} e^{-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)} \langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{\boldsymbol{q}} \rangle \\ F_{ij} =& \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{q} \neq 0} e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)} \langle b_{\boldsymbol{q}} b_{-\boldsymbol{q}} \rangle \ . \end{aligned}$$

严格来说， $\tilde{b}_i, \tilde{b}_i^\dagger$ 算符满足略有修改的玻色对易关系

$$[\tilde{b}_i, \tilde{b}_j^\dagger] = \delta_{ij} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \tag{57}$$

其中， $-1/N$ 修正源于缺少 $\boldsymbol{q} = 0$ 分量。不过，对于 $N \gg 1$ 我们可以放心地忽略这一点，并将 $\tilde{b}, \tilde{b}^\dagger$ 算符视为常规玻色子算符。

由于有限动量玻色子的物理态是高斯态，任意子系统 A （包含 N_A 个格点）的约化密度矩阵也同样是高斯态，即 $\tilde{b}_i, \tilde{b}_i^\dagger$ 算符的二次型指数；它可以完全根据 G_A 和 F_A 矩阵的知识重构，这两个矩阵分别是 G 和F 矩阵，其指标限制在 $i, j \in A$。定义该子系统约化态的二次型的单体本征频率，可通过对 $2N_A \times 2N_A$ 矩阵 [17]进行对角化得到

$$\begin{pmatrix} -\mathbb{1}_A - G_A^* & F_A \\ F_A^* & G_A \end{pmatrix} \tag{58}$$

其对角形式写作 diag($\{-1-n_\alpha\}$, $\{n_\alpha\}$)，其中$\alpha = 1$, ……， N_A 且 $n_\alpha \geq 0$。随后可得到纠缠熵（分别为冯·诺伊曼熵和第二 Rényi 熵）

$$\begin{aligned} S_{A,\mathrm{SW}}^{(\mathrm{vN})} &= -\sum_\alpha \left[n_\alpha \log(n_\alpha) - (1+n_\alpha) \log(1+n_\alpha) \right] \\ S_{A,\mathrm{SW}}^{(2)} &= \sum_\alpha \log(1+2n_\alpha) \ . \end{aligned} \tag{59}$$

根据第III节 D 的构造，来自转子自由度的纠缠贡献，是长度为 S、由 N 个自旋构成的集体对称自旋态中所涉及的 A 个 N_A 自旋子系统的熵；或者等价地说，是一个由 $2NS$ 个自旋组成、处于具有相同总自旋长度的对称自旋态的系统中，长度为 $S = 1/2$ 的 $2SN_A$ 个自旋子系统的熵。此类系统的一般状态是 Dicke 态的叠加 $|J,\ M\rangle$

$$|\psi_{\mathrm{R}}\rangle = \sum_{M=-J_{\mathrm{tot}}}^{J_{\mathrm{tot}}} c_{J_{\mathrm{tot}},M} |J, M\rangle \tag{60}$$

而这些态又可以施密特分解为子系统Dicke态 [30]

$$|J_{\mathrm{tot}}, M\rangle = \sum_{n_A=0}^{2J_A} \sqrt{p_{n_A}} \ |J_A, n_A - J_A\rangle |J_B, M - n_A - J_A\rangle \tag{61}$$

where $J_A = N_A S$, $J_B = (N - N_A)S$,

$$p_{n_A} = \binom{2J_A}{n_A} \binom{2J_B}{n - n_A} \Big/ \binom{2J_{\mathrm{tot}}}{n} \tag{62}$$

以及 $n = M + J_{\mathrm{tot}}$。

通过对由方程（60）和（61）组合得到的状态 $|\psi_{\mathrm{R}}\rangle$进行施密特分解，可以直接构造子系统 A 的约化密度矩阵，将其表示为一个（$2J_A+1$）×（$2J_A+1$）矩阵。随后对其进行对角化即可得到纠缠熵。

随后，在 RSW 理论框架内估算 A 子系统得到的纠缠熵为

$$S_A \approx S_{A,\mathrm{R}} + S_{A,\mathrm{SW}} \ . \tag{63}$$

由于 RSW 理论中隐含了希尔伯特空间的扩展（见第 IIIE 节），我们通常预计，该熵会高估所关注状态的实际纠缠熵。

IV. 基态性质

本节讨论RSW理论对U(1)对称系统基态性质的预测。在本文余下部分，我们将重点研究长程XX模型（以下简称 α-XX模型），即取$\Delta = 0$ 且指数 α 可变的式（1）。特别地，我们将重点关注具有$N = L \times L$ 自旋的正方晶格几何，此时无论 α取何值，系统基态均呈现长程有序。

在热力学极限下，传统线性自旋波理论同样适用于该模型的平衡态物理；其正则化版本（LSW+h）则可用于处理有限尺寸效应。接下来，我们将系统地比较RSW理论与LSW+h理论，并与通过随机级数展开方法获得的量子蒙特卡罗（QMC）结果进行比较 [31]。

A. 将序参量设为零的哈密顿量修正

有限尺寸系统的精确平衡态不表现出自发对称性破缺，即序参量 $m = \langle J^x \rangle / N$ 在任意温度下都严格为零。在序参量的 RSW 表达式（式（52））中，对于具有 U(1) 对称性的转子哈密顿量（式（27）），在热平衡下有 $m = m_{\mathrm{R}} + \delta m_{\mathrm{SW}}$，其中 $m_{\mathrm{R}} = \langle K^x \rangle_{\mathrm{R}} = 0$

另一方面，由于系统的任意平衡态（包括基态）中都存在有限数量的铁磁玻色子，一般有 $\delta m_{\rm SW} = -N^{-1}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\langle b_{\boldsymbol{q}}^{\dagger}b_{\boldsymbol{q}}\rangle_{\rm SW} < 0$。这意味着，RSW 理论会直观地预测 $m < 0$，这是不符合物理的。这一结果揭示了这样一个事实：不可能围绕一个在 U(1) 旋转下完全对称的基态，构建元激发的二次理论。

RSW 理论中的这一表面问题，可以通过对转子哈密顿量稍作修改轻松解决

$$\mathcal{H}_{\rm R} \to \mathcal{H}_{\rm R} - hK^{x} \tag{64}$$

加入有限场 h，使序参量中的转子贡献 $m_{\rm R}$ 变为有限，并抵消自旋波的贡献，从而得到 $m = 0$。鉴于转子谱由一系列态构成，它们之间的能量间隔为 $\mathcal{O}(1/N)$，因此，按$h \approx h_0/N$ 缩放的场原则上足以通过混合低能哈密顿量本征态，在其中诱发宏观磁化强度。实际上，对于本文研究的模型，我们观察到 $h_0 \lesssim 10^{-3}J$ 。

我们仅在平衡态计算中使用这一对转子哈密顿量的微小修正。在非平衡情形下，则使用原本具有 U(1) 对称性的哈密顿量。

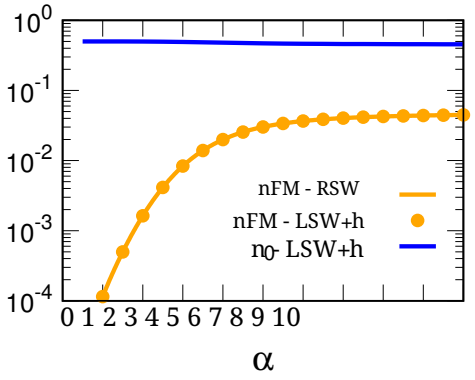

图 1：模型基态中有限动量玻色子（$n_{\rm FM}$）和零动量玻色子（n_0）的密度随可变参数的变化。此处展示了 RSW 和 LSW+h 理论的预测结果。计算针对一个具有 $L = 20$ 的 $L \times L$ 晶格进行。

B. α →0 时 RSW 理论的精确性

一个基本的说明涉及小 α 极限。在该极限下，如图 1 所示，在 RSW 框架内，所有量中的自旋波贡献均消失。我们在那里绘制了有限动量玻色子的密度

$$n_{\rm FM} = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\langle b_{\boldsymbol{q}}^{\dagger}b_{\boldsymbol{q}}\rangle \tag{65}$$

可以看出，该量在 $\alpha \to 0$ 时趋于零。这意味着在此极限下，对任意系统尺寸，RSW 理论都能再现平面转子的物理性质，也就是对 $\alpha = 0$ 极限的精确描述。这一性质在有限尺寸形式的自旋波理论，即 LSW+h 中并不具备。随着 α 减小，有限动量玻色子会消失（其数值与 RSW 理论的结果几乎相同，如图 1 所示）；此时仅有 $\boldsymbol{q} = 0$ 模仍保持活跃，其占据数必须单独满足序参量为零的条件 $\langle b_0^{\dagger}b_0\rangle \to NS$。这意味着在极限 $\alpha \to 0$ 下，转子哈密顿量（$\alpha = 0$）的基态——它恰好是一个 Dicke 态 $|J,\ M\rangle = |NS,\ 0\rangle$——在 LSW+h 理论中由一个具有宏观占据数的单玻色模态近似，其密度为 $n_0 = \langle b_0^{\dagger}b_0\rangle/N \to S$ ——见图 1。令人颇感意外的是，对这种模态进行线性化（这是 LSW+h 理论的基础）竟能在任意 α 值下给出定量预测。此外，LSW+h 的基态会显式破缺绕 z 轴旋转的 U(1) 对称性；而在 $\alpha \to 0$ 时，RSW 理论按构造精确恢复了这一对称性；在较小的 α 下，该对称性也近似得到保持（除去上一节讨论的微弱对称性破缺场 h ）。

C. 二维α-XX模型的基态能量与关联

图 2 展示了 RSW 理论对 α-XX模型基态性质的预测，这些预测随 α 以及具有周期性边界条件的晶格尺寸 $N = L \times L$ 变化。我们特别关注每自旋基态能量 $e_{\rm GS} = \langle H\rangle/(NJ)$，以及最大距离处的关联函数

$$C_{L/2} = \frac{1}{2}\langle S_i^x S_{i+L/2}^x + S_i^y S_{i+L/2}^y\rangle \tag{66}$$

其中，$i + L/2$ 表示相对于任意参考格点 i 沿晶格两个坐标轴之一平移距离 $L/2$ 后的格点。有限尺寸系统在平衡态下的净磁化强度为零——这是一个精确结果，在 RSW 理论和 LSW+h 理论中均由构造保证。因此，在没有净磁化强度的情况下，$C_{L/2}$ 起到平方序参量的作用。我们将 RSW 理论的结果与 LSW+h 理论以及提供数值精确参考的量子蒙特卡罗（QMC）结果进行比较。特别是，量子蒙特卡罗模拟在温度 $T \sim \mathcal{O}(1/L)$下进行，以确保有限尺寸结果不受热效应影响。

图 2(a-b) 显示，在足够大的晶格上，RSW 理论和 LSW+h 理论给出的结果几乎相同，

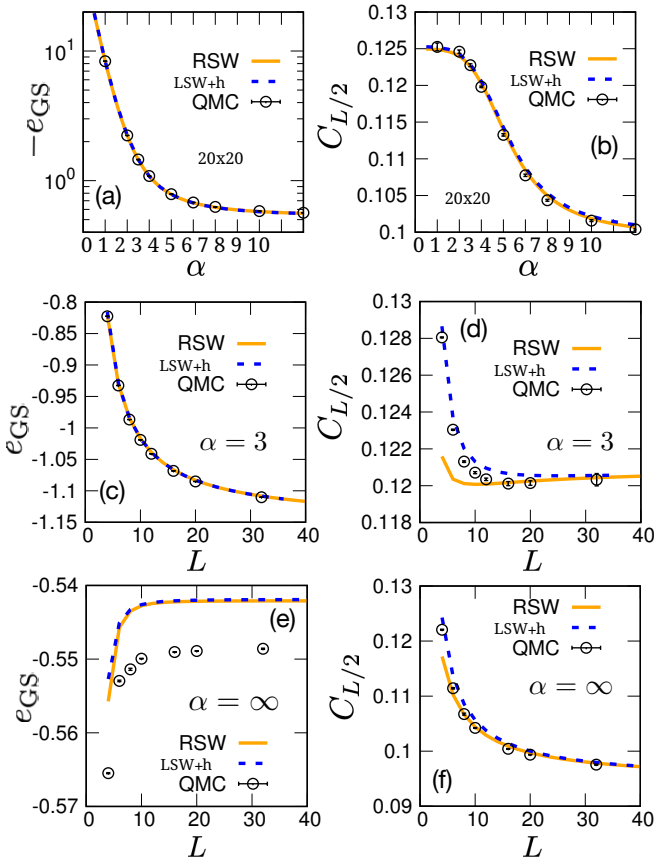

图 2： *Ground-state properties of the 2d $\alpha - XX$ model.* (a-b) 20×20 晶格中每自旋基态能量 e_{gs} (a) 和关联 $C_{L/2}$ (b) 随 α 的变化。此处以及其他所有面板中，我们将 RSW 和 LSW+h 理论的预测与量子蒙特卡罗（QMC）得到的数值精确结果进行比较——特别是对于 LSW+h 理论 $e_{gs} = E_0/N$；(c-d) 偶极 $\alpha - XX$ 模型（$\alpha = 3$）中 e_{gs} 和 $C_{L/2}$ 的尺寸依赖性；(e-f) 与 (c-d) 相同，但针对最近邻相互作用模型（$\alpha = \infty$）。

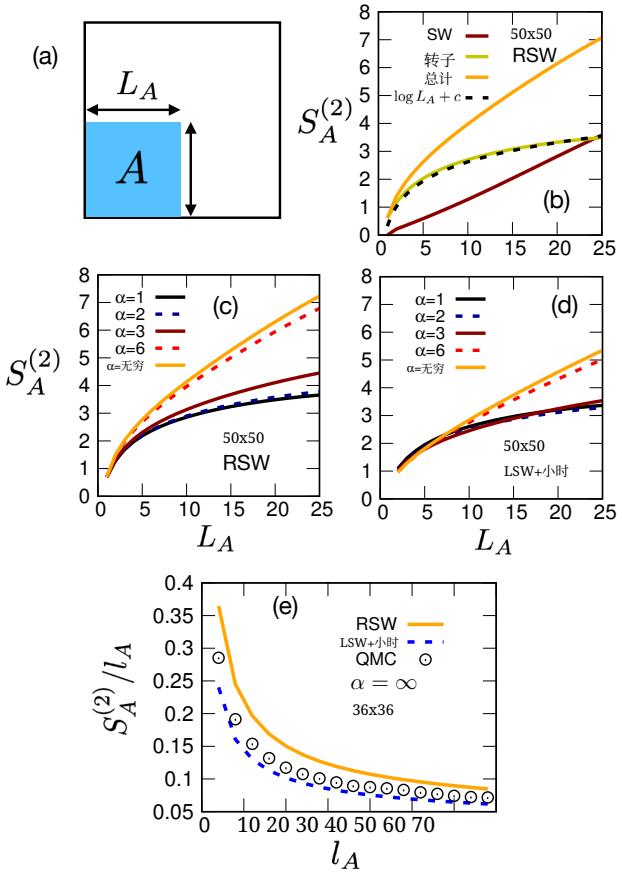

图 3 *Ground-state entanglement entropy of the 2d $\alpha - XX$ model.* （a）后续各面板中展示其熵的子系统几何结构；（b）RSW 理论预测的纠缠 Rényi 熵随子系统线性尺寸 L_A 的标度关系。计算针对具有最近邻相互作用 ($\alpha = \infty$)、线性尺寸为 $L = 50$ 的系统进行。图中展示了自旋波贡献、转子贡献及二者之和（即总熵）。虚线为对数拟合；（c-d）RSW 理论（c）和 LSW+h 理论（d）预测的纠缠 Rényi 熵在不同 α 值下的标度关系；其他参数与面板（b）相同；（e）对于具有 $L = 36$ 的晶格，纠缠 Rényi 熵随子系统周长 l_A 变化的标度关系。将 RSW 和 LSW+h 理论的预测与文献 [32] 中的量子蒙特卡罗结果进行比较。

（图中所示的晶格为 $L = 20$ ），且在很宽的 α 值范围内，从严格定义的长程区间（$\alpha < d = 2$）到短程区间（$\alpha \gg d$），两种理论的结果也与量子蒙特卡罗结果非常吻合。 [51]

在图 2(c-f) 中，我们展示了上述量在两个具有物理意义的 α 值下的有限尺寸标度： $\alpha = 3$ 对应于偶极相互作用；$\alpha = \infty$ 对应于最近邻相互作用。在这两种情况下，我们观察到，两种理论预测的基态能量几乎相同。特别值得指出的是，对于 $\alpha = 3$，两种理论都能很好地再现基态能量；但对于 $\alpha = \infty$，效果则不那么理想。值得注意的是，两种理论都正确捕捉到了能量标度的变化：由于相互作用的性质从幂律衰减变为短程相互作用，能量随系统尺寸的变化也从减小（对于 $\alpha = 3$）变为增大（对于 $\alpha = \infty$）。另一方面，关联

RSW 理论和 LSW+h 理论的预测在小系统尺寸下彼此不同，只有在系统尺寸较大时才会收敛到相同的数值。哪种理论对 QMC 结果的复现效果最佳，似乎取决于尺寸范围，但可以公允地说，RSW 结果整体上更接近数值精确结果。特别是，RSW 理论捕捉到了 $\alpha = 3$ 长距离关联随尺寸变化的非单调性。

D. 纠缠熵

现在，我们进一步深入审视 RSW 理论对基态性质的预测，并聚焦于二分划分下的基态纠缠熵。具体而言，我们考虑一个子系统 A，它是系统$L \times L$ 内部的一个 $L_A \times L_A$ 正方形，如图 3(a) 所示。对于在热力学极限下破坏连续对称性的哈密顿量，其基态的纠缠熵预期按如下形式标度：

$$S_A^{(2)} = aL_A + b\log L_A + ... \tag{67}$$

其中，a是主导面积律项的系数，而 b 是次主导对数项的系数，该项可归因于 N_G无能隙 Goldstone 模的存在。对于具有 Goldstone 模的 d维系统，若其频率与波矢之间呈线性色散关系 $\omega \sim k$，则有 $b = N_G(d-1)/2$ [33]。反之，若 Goldstone 模呈现非线性色散关系 $\omega \sim k^z$，则 b 系数会修正为 $b = N_G(d-z)/2$ [18]。在 α-XX模型中，$\alpha < d+2$时便会出现这种情况：事实上，$d < \alpha < d+2$时有$z = (\alpha - d)/2$，而 $\alpha \leq d$[34]时则有 $z = 0$。

RSW 理论的纠缠熵的 RSW 表达式（式 (63)）自然分解为两个具有不同标度的项：如图 3(b)所示，自旋波项呈现面积律标度，而转子项呈现对数标度。遗憾的是，对数标度项的前因子与 Dicke 态的子系统纠缠熵十分接近$|J_{\rm tot} = NS,\ M = 0\rangle$——即使对转子基态施加场使其发生形变（如式 (64) 所示），以获得净磁化强度为零的状态，也依然如此。这种熵是

$$S_{A,\mathrm{R}}^{(2)} \approx \frac{1}{2}\log N_A = \frac{d}{2}\log L_A \tag{68}$$

其中 $N_A = L_A^d$ 是 A 子系统的体积。这意味着，对于满足 $N_G = 1$ 的 α-XX模型，对数项的前因子是预期用于 $\alpha > d$ 的前因子乘以 $d/(d-z)$，而它仅在 $\alpha \leq d$（即 $z = d$ 时）才与预期的前因子一致，再次表明 RSW 理论的预测在小 α 极限下变得精确。

鉴于第III E节的讨论，RSW 理论对$d > \alpha$ 的纠缠熵系统性地高估对数项，这并不令人意外。这是相对于原自旋模型扩展希尔伯特空间所产生的相当自然的结果。正如文献 [33], 中已经讨论的，我们的结果源于转子变量与自旋波变量之间的严格解耦；RSW 理论假定二者对纠缠熵分别作出可加贡献。文献 [33] 中对数项前因子的结果 $b = N_G\ (d-1)\ /2$ 则源于考虑子系统的转子（或 ToS）谱与将子系统和其补集耦合起来的最低能自旋波之间的相互作用。另一方面，正如近期多项研究 [16, 18]所示，LSW+h 理论能够得到正确的对数项前因子。尽管 LSW+h 理论无法正确重现 ToS 谱——正如我们将在文献 V 中进一步展示的那样——但它的优点在于以耦合的方式处理零模和有限波矢模对纠缠熵的贡献。这似乎足以正确揭示导致普适对数贡献出现的机制。

图 3(c-d) 展示了对于不同的 α，二维 α-XX模型中第二 Rényi 熵随子系统尺寸的标度关系，并将 RSW 预测（图 3(b)）与 LSW+h 理论的预测（图 3(c)）进行了比较。两种理论都预测，随着 α 增大，面积律项会增加；但在 LSW+h 理论中，对数项的前因子会随 α 减小，从而导致在子系统尺寸足够小时，子系统熵对 α 的依赖呈现非单调性。两种理论预测之间的差异，再一次主要归因于对数项。图 3(e) 尤其清楚地展示了这一点：该图给出了在具有最近邻相互作用的 XX模型（$\alpha = \infty$）情况下，子系统纠缠 Rényi 熵随周长 $l_A = 4(L_A - 1)$ 的变化关系。与文献 [32], 中的量子蒙特卡罗数据相比，可以看到 RSW 理论高估了数值精确结果，而 LSW+h 理论则低估了这些结果。然而，两种理论的单位周长熵 S_A/l_A 似乎都会渐近地收敛到精确结果，这表明它们都能够再现正确的主导面积律标度项。

V. 激发谱

接下来，我们分析具有偶极相互作用的二维 α-XX模型 α =3 的低能谱，并将小型 ($L = 4$) 系统的精确结果与 RSW 和 LSW+h 理论的预测进行比较。图 4(a) 展示了精确谱的能级随 $(J^z)^2$, 的变化；鉴于该问题具有 U(1) 对称性，这是一个良好的量子数。按 $(J^z)^2$ 量子数分类的谱清楚地显示，存在一支能量随 $(J^z)^2$ 线性变化的低能激发——即第一节中已提及的 Anderson的ToS，由哈密顿量在每个 J^z 扇区中的基态组成。ToS 的能谱在很好的近似下可表示为

$$E_{\mathrm{ToS}}(J^z) \approx E_{\mathrm{gs,ex}} + \frac{(J^z)^2}{2I_{\mathrm{ToS}}} \tag{69}$$

其中 $E_{\mathrm{gs,\ ex}}$ 是精确基态能量，而 I_{ToS}应被视为.....的有效转动惯量

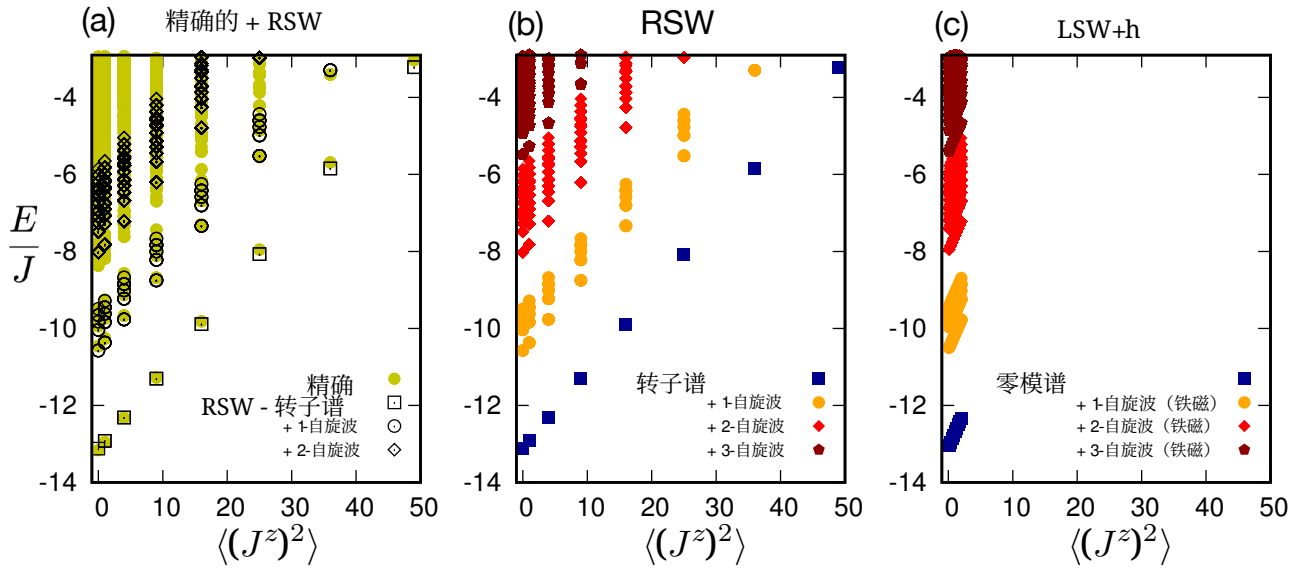

图 4： *Low-lying energy spectrum of the 2d XX model with dipolar interactions.* （a）具有$L = 4$的 $L \times L$ 晶格的精确谱，绘制为（J^z）^{2} 量子数的函数。为便于比较，还给出了面板（b）的 RSW 数据（转子谱，以及加入一个自旋波和双自旋波激发）；（b）RSW 对谱的预测，绘制为 ⟨（J^z）^{2}⟩的函数。不同符号突出显示低能转子谱，以及加入单自旋波能量、双自旋波能量和三自旋波能量后的相同谱。（c）LSW+h 对谱的预测。符号的含义与（b）相同，不同之处在于转子谱被谐零模谱所取代。

一个平面转子变量，其谱与 ToS 的谱相同。该谱的另一个显著特征是，对于其他几组高能态，也能发现其对 $(J^z)^2$呈现相同的近线性依赖关系，从而形成近似塔；这些近似塔相较于低能 ToS 仅有一个常数位移。

这一图像显然与 RSW 理论（式（49））所给出的图像相符；在该理论中，相邻态塔之间的能量位移由自旋波频率之和给出。因此，这强烈表明谱具有一种（近似的）可加结构，该结构由转子贡献和一个自旋波贡献之和产生。图 4（b）确实展示了 RSW 谱低能部分与精确谱之间的定量对应关系；为清晰起见，同一个 RSW 谱也在图 4（b）中重复给出。RSW 能量绘制为 ⟨（J^z）^{2}⟩ ≈ ⟨（K^z）^{2}⟩的函数，其中 ⟨...⟩ 是激发态上的平均值。由于我们施加了一个横向场项来补偿基态中的自旋波磁化强度，从而略微破坏了转子哈密顿量的 U(1) 对称性，正如第四节 A 中所讨论的，该平均值取代了（J^z）^{2} 量子数。正如图中所示，⟨（J^z）^{2}⟩的值始终非常接近整数[52]的平方。按照转子贡献的预期，能级线性依赖于 ⟨（J^z）^{2}⟩，其斜率由1/（2I）给出。

如图 4(a) 所示，RSW 理论根据式 (29) 预测的转子“裸”转动惯量 I，与精确谱的 ToS $I_{\rm ToS}$ 中得到的转动惯量并不完全一致。事实上，我们通常观察到 $I > I_{\rm ToS}$。对于图 4 中的 $N = 16$ 数据，$I = 2.47J^{-1}$ 和 $I_{\rm ToS} = 2.42J^{-1}$，因此在这种情况下差异相当小。但是，正如我们在参考文献 [35]，中所展示的，两个转动惯量之间的差异会随着 α 增大；例如 </style，对于 $\alpha = \infty$， $I = 3.75J^{-1}$，而$I_{\rm ToS} = 3.45J^{-1}$。这可以直接解释为一种重整化效应，它源于转子与有限动量自旋波之间的残余相互作用，而这些相互作用在 RSW 理论中被忽略。正如我们在参考文献 [23] 中进一步讨论的那样，以可扩展的方式将这种重整化纳入考量确实是可行的。

在图 4(b) 中，我们将激发态归为若干“塔”状能带，分别表示由一次、两次、三次等自旋波激发移位后的低能（或严格定义的）ToS。与图 4(a) 对比可见，在精确谱中可以清楚地辨认出单自旋波激发分支，它与包含更多次自旋波激发的分支之间存在能隙（至少在 $(J^z)^2$ 足够小时如此）。然而，在精确谱中，含有两次以上自旋波激发的分支之间的区别则消失了。

最后，图4(c)展示了 LSW+h 理论对谱的预测。在该理论中，最低能量的激发通过占据能量为 $\epsilon_{\boldsymbol{q}=0} \sim N^{-1}$ 的零模获得——见第 II C 节——其能量为 $E_0 + n\epsilon_{\boldsymbol{q}=0}$，其中 $n = 1, 2, ...$， E_0 是由式 (17) 给出的 LSW+h 基态能量。高能态则通过向每个含有 n 个零模

激发的扇区中添加有限动量自旋波而获得，从而形成含有一个自旋波、两个自旋波等的一组态——如图4(c) [53]所示。显然，从图中可以看出，自旋波“能带”得到了正确复现——这是意料之中的，因为有限动量处的自旋波谱与 RSW 理论中的基本相同。但总自旋结构完全不正确，因为在 LSW+h 理论中，零模被表示为一个（线性）谐振子，因此，除了第一个激发之外，它无法准确近似实际低能总自旋态的（非线性）转子谱。具体而言，激发态的$\langle (J^z)^2 \rangle$ 数值完全错误，这是因为对基态描述之外的零模处理不正确。

RSW 理论能够正确重现低能激发谱，这正是它成功再现以相干自旋态为初态的低能非平衡动力学的关键所在，下一节将对此进行讨论。

VI. 淬火动力学

本节将针对非平衡动力学，检验支撑 RSW 理论的物理图像——即非线性零模自由度与线性化有限动量自旋波之间的近似分离。鉴于 RSW 理论描述的是系统的低能性质，我们选择考察一个极具代表性的低能淬火动力学实例，即以相干自旋态（CSS）为初态的偶极XX模型（$\alpha = 3$）的动力学；该初态代表Holstein-Primakoff玻色子的真空（第II节）。我们已在配套论文 Ref. [23] 中详细研究了这一动力学。本节旨在将 RSW预测与含时变分蒙特卡罗（tVMC）的结果进行比较；正如我们在 Ref. [36] 中所示，tVMC 能够非常准确地求解系统的动力学。此外，我们还将这些结果与标准线性自旋波理论的预测进行对比；后者相当于对零模进行线性化。

A. 非平衡 RSW 理论与 OAT动力学

在 RSW 理论中，XXZ模型的动力学可简单表示为转子的独立非线性动力学（由单轴扭转哈密顿量 [28]公式(43)描述），以及有限动量下线性自旋波的动力学。这两种动力学都可以高效地计算：转子变量存在于一个（$2NS+1$）维希尔伯特空间中；而研究线性自旋波的动力学，则相当于求解 $\mathcal{O}(N/2)$ 对耦合微分方程，这些方程分别描述与两个具有相反动量 $\boldsymbol{q}$ 和$-\boldsymbol{q}$的 Holstein-Primakoff玻色子模相关的常规关联子 $G_{\boldsymbol{q}} = \langle b^\dagger_{\boldsymbol{q}} b_{\boldsymbol{q}} \rangle$ 和反常关联子 $F_{\boldsymbol{q}} = \langle b_{\boldsymbol{q}} b_{-\boldsymbol{q}} \rangle$。相关方程见附录B，其中还给出了它们的通过在有限动量 [34]下进行 Bogolyubov对角化得到的解析解。

要使 RSW 理论成立，有限动量玻色子的密度 N_{FM}/N 必须在整个动力学过程中保持极低，从而保证自旋波与转子之间解耦这一假设成立。另一方面，转子动力学完全不受限制，因为其非线性已得到充分考虑。如果如第III节 F所定义的所有可观测量的转子/自旋波分解都由转子贡献主导，那么整个系统的动力学就类似于单轴扭转模型 [28], ；该模型的一个典型特征是在短时间内出现可扩展的自旋压缩，这可由自旋压缩参数 [37]表征

$$\xi_R^2 = \frac{N \min_\theta \mathrm{Var}(J^\theta)}{\langle J^x \rangle^2} \tag{70}$$

其中 $J^\theta = \cos\theta J^y + \sin\theta J^z$，因此

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(J^\theta) = &\cos^2\theta\ \mathrm{Var}(J^y) + \sin^2\theta\ \mathrm{Var}(J^z) \\ &+ 2\sin\theta\cos\theta\ \mathrm{Cov}(J^y, J^z)\ .\end{aligned} \tag{71}$$

自旋压缩对应于条件 $\xi_R^2 < 1$，这表明存在纠缠 [38]; 具体而言，OAT动力学的最小压缩参数在时刻 $t_{\mathrm{sq}} \sim N^{1/3}$达到，其标度为 $(\xi_R^2)_{\min} \sim N^{-2/3}$ （当 N 非常大时） [28]。

根据第IIIF节的讨论，在 RSW 理论中，自旋压缩参数可简单表示为

$$\xi_R^2 \approx \frac{N \min_\theta \mathrm{Var}(K^\theta)_{\mathrm{R}}}{(\langle K^x \rangle_{\mathrm{R}} - N_{\mathrm{FM}})^2} \tag{72}$$

也就是说，它与单轴扭曲模型的自旋压缩参数的区别在于，平均自旋受到自旋波贡献的重整化。

B. 非平衡 LSW 理论与压缩动力学

非平衡LSW理论本质上是将线性化零动量HP玻色子中的转子变量，与有限动量HP玻色子置于同等地位处理。研究（短时间）非平衡动力学时，可以忽略零动量玻色子Bogolyubov对角化所带来的复杂性（见第II C节），直接将HP玻色子的线性化运动方程（附录B）推广到 $\boldsymbol{q} = 0$ 该变量。近期许多研究都采用了类似方法，而且对于不存在源自U(1) 对称性的零模病态的系统，该方法是有效的 [39–43]。对于具有U(1) 对称性的系统，非平衡时无法像在线性自旋波理论中那样通过使零模开隙来处理，因为只有在要求集体自旋的平均值为零时，施加场才有依据。然而，在我们考虑的特定淬火方案中，该平均值反而达到最大 $t = 0$

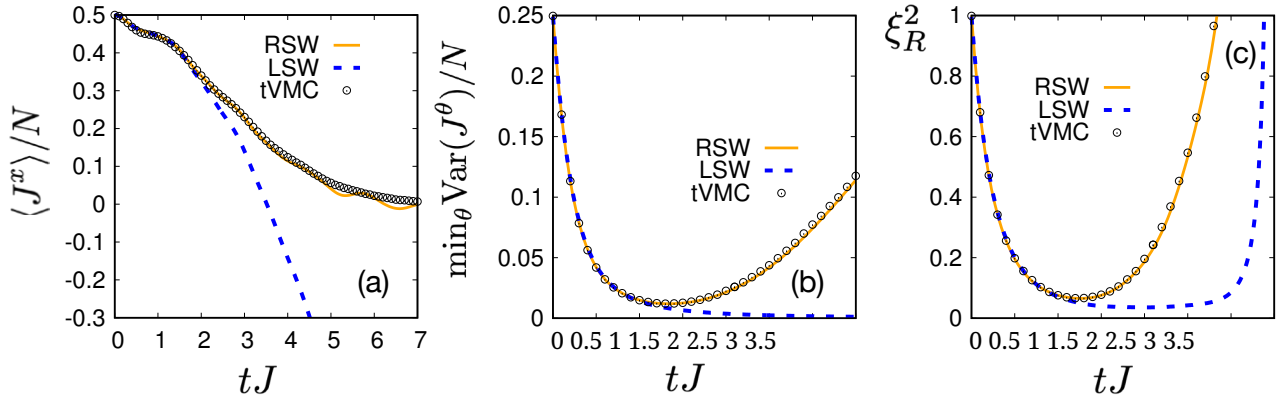

图 5： *Collective-spin dynamics after a quench in the 2d dipolar XX model.* (a) $L = 10$时正方晶格上平均集体自旋的弛豫。该图比较了 RSW 和线性自旋波理论的预测与 tVMC 的结果；(b) 平均取向的横向集体自旋分量的最小方差；(c) 自旋压缩参数。对于 (b-c) 两个子图，晶格几何与符号含义均与 (a) 相同。

。因此，对于有限尺寸系统，零模病态必然会将线性自旋波理论的有效性限制在短时间内。

如式 (11) 所示，控制 $\boldsymbol{q} = 0$ 玻色子线性化动力学的哈密顿量形式为

$$\mathcal{H}_0 = A_0 b_0^\dagger b_0 + \frac{B_0}{2}\left[(b_0^\dagger)^2 + (b_0)^2\right] . \qquad (73)$$

这是一种在量子光学中已知的压缩哈密顿量 [44]。事实上，从第II节 B 中给出的表达式可以验证，

$$A_0 = -B_0 = SJ_0(1-\Delta)/2 = NS/2I;$$

因此，引入玻色场的（无量纲） P 正交分量， $P = (b_0 - b_0^\dagger)/(i\sqrt{2})$，可得 $\mathcal{H}_0 = NS/(2\tilde{I})\ P^2 + \text{const.} \approx (J^z)^2/2\tilde{I} + \text{const.}$，其中我们使用了线性化 HP 变换 $J^z \approx \sqrt{2SN}(b_0 - b_0^\dagger)/(2i) = \sqrt{NS}P$。$\mathcal{H}_0 \sim P^2$ 哈密顿量通过无限制的自由扩展演化初始真空态——在位置本征基中，它是一个对应于谐振子基态的高斯波包。由此，场的一个正交分量受到压缩，该分量 [45], 介于 P 与 $X = (b_0 + b_0^\dagger)/\sqrt{2} \approx J^y/\sqrt{NS}$之间，对应于 yz 平面内某个集体自旋分量的压缩。这是意料之中的，因为 $\mathcal{H}_0$ 是单轴扭曲哈密顿量的二次近似。尽管如此，在自由演化过程中，X 的涨落也会无界增长，这意味着零动量玻色子的数目 $N_0 = \langle b_0^\dagger b_0\rangle = \langle X^2\rangle + \langle P^2\rangle - 1/2$ 同样会无限增长，导致平均自旋 $\langle J^x\rangle = NS - N_0 - N_{\mathrm{FM}}$不断衰减。此处，$N_{\mathrm{FM}}$ 是有限动量玻色子的数目，定义见第三节 F。零动量处 HP 玻色子的这种增殖再次揭示了 LSW 在动力学中的零模病态。

C. 结果

图5比较了 RSW 理论、线性自旋波理论以及基于对积波函数 [35, 36, 46] 的 tVMC 对初态为相干自旋态的 $S = 1/2$ 2维偶极XX模型淬火动力学的计算结果。我们尤其关注由$N = 100$ 个格点组成的正方晶格。具体而言，图5(a)展示了平均集体自旋的去极化动力学；RSW 理论对其复现得非常好，因为转子贡献遵循单轴扭曲哈密顿量的非线性动力学。另一方面，在 LSW 理论中，零动量玻色子的动力学由式(73)的线性哈密顿量支配，这会导致这类玻色子无界增殖，进而使集体自旋去极化得过快。

与此同时，集体自旋的一个横向分量会发展出低于初态散粒噪声极限 $\mathrm{Var}(J^\theta)/N = S/2 = 1/4$ 的压缩不确定度。如图 5(b) 所示，在短时间内，RSW 和线性自旋波理论都能很好地再现这一行为。但在较长时间下，两种理论的预测开始出现差异。RSW 理论预测，$\min_\theta \mathrm{Var}(J^\theta)$遵循与单轴扭曲模型中压缩自旋分量相同的动力学，而 tVMC 证实了这一预测。另一方面，线性自旋波理论中的最小方差会持续无限下降，因为这里的压缩发生在无限的正交分量平面上；而自旋压缩则发生在有限的布洛赫球面上。

式（70）中的压缩参数 ξ_R^2 由迄今讨论的两个量之比构成。虽然 RSW 结果与 tVMC 非常吻合，但我们看到，LSW 结果仅在演化初期、直到 ξ_R^2 参数达到最小值时，才能重现压缩效应。此后，LSW 对 ξ_R^2 的预测继续下降，低于

实际最小值；这是由最小方差无界下降所导致的，直至平均自旋趋于零，使 ξ_R^2急剧且无界地增大。

这些结果表明，LSW动力学在很短时间后便不再具有定量准确性。另一方面，正如我们配套论文Ref. [23]中详细讨论的那样，RSW动力学在宏观时间内仍保持定量准确性 $\sim \mathcal{O}(N)$。

VII. 结论

在本文中，我们提出了一种新的方法——转子/自旋波（RSW）理论——用于处理具有 U(1) 对称性的量子自旋系统的有限尺寸平衡和非平衡行为。与传统自旋波理论类似，我们的方法将相对于经典参考态的自旋偏差映射为玻色准粒子气体。然而，不同于自旋波理论，我们仅假设该气体在有限动量处是稀薄的。相反，在 RSW 理论中，零动量玻色子以其全部非线性特征进行处理；我们证明，它们能够重构出一个量子转子自由度，而该自由度原则上可以处于任意非经典状态。量子转子的谱重构了激发的安德森态塔，这是在热力学极限下自发破缺 U(1) 对称性的有限尺寸系统所具有的特征。因此，我们的理论能够同时描述有限动量处的线性自旋波激发以及非线性的 ToS 激发，从而完整地重构低能谱。

对于呈现长程有序的 U(1) 对称系统，RSW 理论能够很好地再现其基态性质，其表现与针对有限尺寸系统修正后的传统自旋波理论相近（在某些方面甚至更胜一筹）。然而，在描述低能谱和非平衡动力学方面，它远胜于自旋波理论。尤其是，它能够正确描述高度非线性的量子动力学过程：有限尺寸系统通过弛豫到未极化（即非经典）态，有效恢复初态中被破缺的 U(1) 对称性。在本研究中，我们将 RSW 理论应用于 U(1) 对称的 $S = 1/2$ 自旋系统。不过，该理论很容易推广到任意自旋长度，也可以扩展至更高的对称性（例如 SU(2)），我们将在未来的工作中讨论这一点。

RSW 理论呈现出的物理图像是：零动量自由度（代表量子转子变量）与有限动量自由度（对应线性自旋波）之间近似实现了变量分离。当有限动量自旋波构成非常稀薄的气体时，这一图像似乎成立；但随着这类自旋波的密度升高，它预计会变得越来越不准确，因为这对应着有限动量自旋的涨落（经典或量子）越来越强。若仅考虑纯态，这些有限动量（量子）涨落的强度可由晶格的连通性控制，即由相互作用的范围和／或晶格的维数控制。在无限程相互作用／无限维数的极限下，RSW 理论渐近地变得精确；而对于短程相互作用，其准确性则较低。通过明确考虑转子变量与有限动量自旋波之间的耦合，可以系统地改进 RSW 理论。要彻底推进这一方案，难度不亚于对系统进行精确对角化；但可以设想，只考虑转子与有限动量模式的一个子集之间的耦合，从而逐步提高该方法的计算复杂度。

我们的方法面临的另一项挑战，是将其推广到本文讨论的平移不变系统之外。平移不变性的破缺会在玻色算符的二次阶引入转子与有限动量自旋波之间的耦合；除非该耦合在大系统中属于边界项，否则很难合理地将其忽略。因此，若要将理论推广至例如无序系统，就必须明确考虑转子与自旋波（或其中一部分）之间的耦合。

RSW 理论（及其未来可能的扩展）能够以极少的计算资源处理自旋系统中高度非经典的状态，可为晶格量子自旋系统动力学的实验量子模拟提供极具价值的指导——例如基于里德堡原子阵列、囚禁离子阵列、光学晶格中的中性原子或超导量子比特的实验。该理论的物理内涵十分直观，并能在极短的计算时间内处理规模极大的系统，涉及多达数千个自旋。因此，对于量子模拟器的平衡态与非平衡态性质研究，它为半经典方法 [47] 或变分方法[35, 48, 49]等更复杂、计算开销更大的方法提供了一种颇具价值的替代方案。

致谢

谨此感谢 Y. Trifa 和 J. Br´ehier 就相关课题开展的有益讨论与合作。本项目由 ANR（EELS 项目）、QuantERA（MAQS 项目）和 PEPR-Q（QubitAF 项目）资助。所有数值计算均在里昂高等师范学院的 PSMN 集群上完成。

附录 A：RSW 理论中的关联函数

在 RSW 理论中，按照式（55）对关联函数作此规定，可得以下公式

$$C_{ij}^{xx} \approx \langle[(S_i^x)^2]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}\ \delta_{ij} + \frac{\langle(K^x)^2\rangle_{\mathrm{R}} - \sum_l \langle[(S_l^x)^2]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}}{N(N-1)}\ (1-\delta_{ij}) - \frac{2S}{N}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{\boldsymbol{q}}\rangle_{\mathrm{SW}} \tag{A1}$$

$$C_{ij}^{yy} \approx \langle[(S_i^y)^2]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}\ \delta_{ij} + \frac{\langle(K^y)^2\rangle_{\mathrm{R}} - \sum_l \langle[(S_l^y)^2]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}}{N(N-1)}\ (1-\delta_{ij}) + \frac{S}{2N}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0} e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}\Big(\langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{\boldsymbol{q}}\rangle_{\mathrm{SW}} + \langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{-\boldsymbol{q}}^\dagger\rangle_{\mathrm{SW}} + \mathrm{c.c.}\Big) \tag{A2}$$

$$C_{ij}^{zz} \approx \langle[(S_i^y)^2]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}\ \delta_{ij} + \frac{\langle(K^z)^2\rangle_{\mathrm{R}} - \sum_l \langle[(S_l^z)^2]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}}{N(N-1)}\ (1-\delta_{ij}) + \frac{S}{2N}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0} e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}\Big(\langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{\boldsymbol{q}}\rangle_{\mathrm{SW}} - \langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{-\boldsymbol{q}}^\dagger\rangle_{\mathrm{SW}} + \mathrm{c.c.}\Big) \tag{A3}$$

$$C_{ij}^{xy} \approx \frac{1}{2}\langle[\{S_i^x, S_i^y\}]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}\ \delta_{ij} + \frac{\langle\{K^x, K^y\}\rangle_{\mathrm{R}} - \sum_i \langle[\{S_i^x, S_i^y\}]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}}{2N(N-1)}\ (1-\delta_{ij}) \tag{A4}$$

$$C_{ij}^{xz} \approx \frac{1}{2}\langle[\{S_i^x, S_i^z\}]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}\ \delta_{ij} + \frac{\langle\{K^x, K^z\}\rangle_{\mathrm{R}} - \sum_i \langle[\{S_i^x, S_i^z\}]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}}{2N(N-1)}\ (1-\delta_{ij}) \tag{A5}$$

$$C_{ij}^{yz} \approx \frac{1}{2}\langle[\{S_i^y, S_i^z\}]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}\ \delta_{ij} + \frac{\langle\{K^y, K^z\}\rangle_{\mathrm{R}} - \sum_i \langle[\{S_i^y, S_i^z\}]_{\mathrm{ZM}}\rangle_{\mathrm{R}}}{2N(N-1)}\ (1-\delta_{ij}) + \frac{S}{2iN}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0} e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}\Big(\langle b_{\boldsymbol{q}} b_{-\boldsymbol{q}}\rangle_{\mathrm{SW}} - \langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{-\boldsymbol{q}}^\dagger\rangle_{\mathrm{SW}}\Big)\ . \tag{A6}$$

不难验证，上述表达式准确地再现了相干自旋态的期望值，即 $C_{ij}^{xx} = S^2, C_{ij}^{yy} = C_{ij}^{zz} = (S/2)\delta_{ij}$ 和 $C_{ij}^{xy} = C_{ij}^{xz} = C_{ij}^{yz} = 0$。

附录 B：LSW 中 Holstein-Primakoff玻色子的运动方程

这里给出由线性哈密顿量方程（31）所支配的动力学下，关联子 $G_{\boldsymbol{q}} = \langle b_{\boldsymbol{q}}^\dagger b_{\boldsymbol{q}}\rangle$ 和 $F_{\boldsymbol{q}} = \langle b_{\boldsymbol{q}} b_{-\boldsymbol{q}}\rangle$ 的运动方程。这些关联子完全描述了线性化 HP 玻色子的高斯态。方程如下：

$$\begin{aligned}\frac{dG_{\boldsymbol{q}}}{dt} &= -2\ B_{\boldsymbol{q}}\ \mathrm{Im}(F_{\boldsymbol{q}}) \\ \frac{dF_{\boldsymbol{q}}}{dt} &= -i\left[2A_{\boldsymbol{q}}F_{\boldsymbol{q}} + B_{\boldsymbol{q}}(1 + G_{\boldsymbol{q}} + G_{-\boldsymbol{q}})\right]\ .\end{aligned} \tag{B1}$$

对于有限动量，可以通过第 IIB 节中的 Bogolyubov 变换求解这些方程，得到

$$\begin{aligned}G_{\boldsymbol{q}}(t) &= 2u_{\boldsymbol{q}}^2 v_{\boldsymbol{q}}^2[1-\cos(2\epsilon_{\boldsymbol{q}}t)] \\ F_{\boldsymbol{q}}(t) &= u_{\boldsymbol{q}}v_{\boldsymbol{q}}\left(u_{\boldsymbol{q}}^2 e^{-2i\epsilon_{\boldsymbol{q}}t} + v_{\boldsymbol{q}}^2 e^{2i\epsilon_{\boldsymbol{q}}t} - 2v_{\boldsymbol{q}}^2 - 1\right)\ .\end{aligned} \tag{B2}$$

对于零动量，Bogolyubov 变换变得奇异；然而，F_0 和 B_0 的方程简化为单玻色模受方程（73）中的挤压哈密顿量支配时的方程。正如正文中所述，其动力学解与最小不确定度高斯波包自由扩展的解相同；该波包用位置算符 $X = (b_0 + b_0^\dagger)/\sqrt{2}$ 的基表示时即为真空态。

–

[1] A. Auerbach，《*Interacting Electrons and Quantum Magnetism* 2006》（Springer，）。

[2] S. Blundell，《*Magnetism in Condensed Matter*》（OUP Oxford, 2001）。[3] I. M. Georgescu、S. Ashhab 和 F. Nori，《现代物理评论》**86**，153（2014），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.86.153。[4] A. Mazurenko、C. S. Chiu、G. Ji、M. F. Parsons、M. Kan´asz-Nagy、R. Schmidt、F. Grusdt、E. Demler、D. Greif 和 M. Greiner，《自然》**545**，462（2017），统一资源定位符 https://doi.org/10.1038/nature22362。[5] S. Lepoutre、J. Schachenmayer、L. Gabardos、B. Zhu、B. Naylor、E. Mar´echal、O. Gorceix、A. M. Rey、L. Vernac 和 B. Laburthe-Tolra，《自然通讯》**10**，1714（2019），国际标准连续出版物号 2041-1723，统一资源定位符 https://doi.org/10.1038/s41467-019-09699-5. [6] P. N. Jepsen, J. Amato-Grill, I. Dimitrova, W. W. Ho, E. Demler, and W. Ketterle,《自然》**588**, 403 (2020), 统一资源定位符 https://doi.org/10.1038/s41586-020-3033-y. [7] L. Chomaz, I. Ferrier-Barbut, F. Ferlaino, B. Laburthe- Tolra, B. L. Lev, and T. Pfau, *Dipolar physics: A review of experiments with magnetic quantum gases* (2022), 统一资源定位符 https://arxiv.org/abs/2201.02672. [8] L. Christakis, J. S. Rosenberg, R. Raj, S. Chi, A. Morn- ingstar, D. A. Huse, Z. Z. Yan, and W. S. Bakr,《自然》**614**, 64 (2023), 国际标准连续出版物号 1476-4687, 统一资源定位符 https://doi.org/10.1038/s41586-022-05558-4.[9] C. Monroe, W. C. Campbell, L.-M. Duan, Z.-X. Gong, A. V. Gorshkov, P. W. Hess, R. Islam, K. Kim, N. M. Linke, G. Pagano, 等,《现代物理评论》

93, 025001 (2021), 统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.93.025001. [10] A. Browaeys and T. Lahaye, 《自然·物理》16, 132 (2020), 统一资源定位符 https://doi.org/10.1038/s41567-019-0733-z. [11] J. Garc´ıa-Ripoll, *Quantum Information and Quantum Optics with Superconducting Circuits* (剑桥大学出版社, 2022). [12] L. P. Levy, *Magnetism and Superconductivity* (Springer, 1997). [13] P. W. Anderson, *Basic Notions of Condensed Matter Physics* 1997 (Taylor & Francis, Boca Raton (FL),). [14] A. M. La¨uchli, M. Schuler, and A. Wietek, 载于 *Quantum Materials: Experiments and Theory - Modeling and Simulation vol. 6* , , 编者为 E. Pavarini, E. Koch, J. van den Brink, and G. Sawatzky (Schriften des Forschungszen- trums J¨ulich, J¨ulich, 2016), 统一资源定位符 http://handle. net/2128/12467.[15] H. Tasaki, J. Stat. Phys. 174, 735 (2018), 统一资源定位符 https: //doi.org/10.1007/s10955-018-2193-8. [16] H. F. Song, N. Laflorencie, S. Rachel, and K. Le Hur, Phys. Rev. B 83, 224410 (2011), 统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.224410. [17] I. Fr´erot and T. Roscilde, Phys. Rev. B 92, 115129 (2015), 统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.92.115129. [18]I. Fr´erot, P. Naldesi, and T. Roscilde, Phys. Rev. B 95, 245111 (2017), 统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.245111. [19]M. Takahashi, Phys. Rev. B 40, 2494 (1989), 统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB. 40.2494.[20]Q. F. Zhong and S. Sorella, Europhysics Letters (EPL) 21, 629 (1993), 统一资源定位符 https://doi.org/10.1209/ 0295-5075/21/5/021.[21] A. E. Trumper, L. Capriotti, and S. Sorella, Phys. Rev. B 61, 11529 (2000), 统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.11529. [22] L. Capriotti, International Journal of Modern Physics B 17, 4819 (2003), https://doi.org/10.1142/S0217979203023148, 统一资源定位符 https://doi.org/10.1142/S0217979203023148. [23]T. Roscilde, T. Comparin, and F. Mezzacapo, *Entangling dynamics from effective rotor/spin-wave separation in u(1)-symmetric quantum spin models* (2023), 统一资源定位符 https://arxiv.org/abs/2302.09271. [24]P. Bruno, Phys. Rev. Lett. 87, 137203 (2001), 统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87. 137203.[25] C. Chen, G. Bornet, M. Bintz, G. Emperauger, L. Leclerc, V. S. Liu, P. Scholl, D. Barredo, J. Hauschild, S. Chatterjee, 等, *Continuous symmetry breaking in a two-dimensional rydberg array* (2022), 统一资源定位符 https: //arxiv.org/abs/2207.12930. [26]T. Holstein and H. Primakoff, Phys. Rev. 58, 1098 (1940), 统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRev.58.1098. [27] L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation* 2016 (牛津,). [28] M. Kitagawa and M. Ueda, Phys. Rev. A 47, 5138 (1993), 统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevA.47.5138. [29]R. Fr´esard, 载于 *Many-Body Physics: From Kondo to Hubbard - Modeling and Simulation vol. 6* , , 编者为 E. Pavarini, E. Koch, 以及 P. Coleman（Schriften des Forschungszentrums J¨ulich, J¨ulich, 2015），统一资源定位符 https://juser.fz-juelich.de/record/205123/files/correl15.pdf。[30] J. I. Latorre、R. Or´us、E. Rico 和 J. Vidal, 《物理评论 A》71，064101（2005），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/ 10.1103/PhysRevA.71.064101。[31] O. F. Syljua˚sen 和 A. W. Sandvik, 《物理评论 E》66，046701（2002），统一资源定位符 http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.66.046701。[32] S. Humeniuk 和 T. Roscilde, 《物理评论 B》86，235116（2012），统一资源定位符 http://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.86.235116。[33] M. A. Metlitski 和 T. Grover, *Entanglement entropy of systems with spontaneously broken continuous symmetry* （2011），统一资源定位符 https://arxiv.org/abs/1112.5166。[34] I. Fr´erot、P. Naldesi 和 T. Roscilde, 《物理评论快报》120，050401（2018），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.050401。[35] T. Comparin、F. Mezzacapo 和 T. Roscilde, 《物理评论 A》105，022625（2022），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.105.022625。[36] T. Comparin、F. Mezzacapo 和 T. Roscilde, 《物理评论快报》129，150503（2022），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.129.150503。[37] D. J. Wineland、J. J. Bollinger、W. M. Itano 和 D. J. Heinzen, 《物理评论 A》50，67（1994），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.50.67。[38] A. Sørensen、L.-M. Duan、J. I. Cirac 和 P. Zoller, 《自然》409，63（2001），统一资源定位符 https://doi.org/10.1038/ 35051038。[39]R. Menu 和 T. Roscilde, 《物理评论 B》98，205145（2018），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.98.205145。[40]R. Menu 和 T. Roscilde, 《物理评论快报》124，130604（2020），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.124.130604。[41]L. Cevolani、J. Despres、G. Carleo、L. Taglia-cozzo 和 L. Sanchez-Palencia, 《物理评论 B》98，024302（2018），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.024302。[42] A. Lerose、B. ˇZunkovi˘c、J. Marino、A. Gambassi 和 A. Silva, 《物理评论 B》99，045128（2019），统一资源定位符 https: //link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.045128。[43] A. Lerose 和 S. Pappalardi, 《物理评论研究》2，012041（2020），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevResearch.2.012041。[44] D. F. Walls 和 G. J. Milburn, *Quantum Optics*（Springer, 2008）。[45] L. Garbe、O. Abah、S. Felicetti 和 R. Puebla, 《量子科学与技术》7，035010（2022），统一资源定位符 https: //dx.doi.org/10.1088/2058-9565/ac6ca5。[46] J. Thibaut、T. Roscilde 和 F. Mezzacapo, 《物理评论 B》100，155148（2019），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/ 10.1103/PhysRevB.100.155148。[47] J. Schachenmayer、A. Pikovski 和 A. M. Rey, 《物理评论 X》5，011022（2015），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.5.011022。[48] G. Carleo、F. Becca、L. Sanchez-Palencia、S. Sorella 和 M. Fabrizio, 《物理评论 A》89，031602（2014），统一资源定位符 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA. 89.031602。[49]S. Paeckel、T. K¨ohler、A. Swoboda、S. R. Man-mana、U. Schollw¨ock 和 C. Hubig, 《物理学年鉴》411，167998（2019），ISSN 0003-4916，URL

https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491619302532.

[50]我们不会将这一现象称为零动量玻色子的 $condensation$ ，因为这里所说的玻色子是准粒子，其数目并不守恒，并且可以动态地从零变为宏观数值。在后一种情况下，系统中的长程有序会受到破坏；因此，凝聚态这一概念可能会造成混淆，因为它反而与长程相位相干性相关。

[51] 顺便指出，在 LSW+h 理论中，构成式（66）中 $C_{L/2}$ 表达式的两个关联函数 $\langle S_i^x S_{i+L/2}^x \rangle$ 和 $\langle S_i^y S_{i+L/2}^y \rangle$差异很大，甚至可能取非物理值；只有它们的平均值才会以某种神奇的方式正确再现 QMC 关联函数。另一方面，在 RSW 理论中，这两个关联函数始终取物理值；当 $\alpha \to 0$时，它们变得相同，而且 α 越小，二者就越接近。

[52] 原则上，应针对每个激发态构造使总磁化强度为零的横向场，这会得到依赖于能量的横向场——不过，为了简便起见，我们绘制的是使用一种仅使基态中的 $\langle J^x \rangle$ 磁化强度抵消的场所得的谱，这意味着激发态实际上具有净磁化强度。这一选择与研究动力学时不施加任何场的做法相一致，因此图 4 所示的激发谱，本质上就是可观测量在时间演化中将呈现的谱。

[53]与对 RSW 谱的处理类似，我们选择一个使磁化强度为零的场 h ，但这只针对基态（见第 IIC 节）；其余谱则显示为在同一固定场下计算的结果。原则上，对于每个能级，都应找到一个使磁化强度为零的场 h ，但为简便起见，我们没有进行这项计算。与上文关于 RSW 理论的评论同理，实际上，不加任何 h 场时的谱才与动力学相关。