

О полном базисе в пространстве вращательно-инвариантных операторов N квантовых спинов $1/2$

Филипп Усков

Сколковский Институт Науки и Технологий
Большой бульвар д.30, стр.1, Москва 121205

27 января 2021 г.

Аннотация

В физике большую роль играют системы квантовых спинов $1/2$ с изотропным гейзенберговским взаимодействием. При изучении таких систем может быть полезно иметь полный, но не переполненный базис операторов, каждый из которых имеет симметрию гамильтониана, то есть инвариантен относительно вращений (т.е. глобальных $SU(2)$ -преобразований матриц Паули). В настоящей статье сформулирован алгоритм построения такого базиса. Алгоритм реализован в программе Wolfram Mathematica[©].

1 Введение

В квантовой физике важную роль играют системы N спинов $1/2$ с изотропным гейзенберговским взаимодействием. Общий вид гамильтониана такой системы имеет вид

$$H = \sum_{i < j} J_{ij} (\vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j), \quad (1)$$

где $\vec{\sigma}_i = \{\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z\}$ - вектор матриц Паули, J_{ij} - константы связи, индексы $i, j = 1, 2, \dots, N$ нумеруют спины, а $(\vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j) \equiv \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha$ - скалярное произведение векторов сигма-матриц (здесь и далее предполагается суммирование по повторяющимся индексам).

Состояние квантовой системы описывается в общем случае матрицей плотности ρ . Зачастую, в силу симметрии гамильтониана относительно глобальных вращений, такой же симметрией должна обладать и матрица плотности. Это справедливо, например, когда необходимо решить стационарное уравнение Шредингера, записанное в виде $H\rho = E\rho$ [1], или при

поиске вариационных ограничений на энергию основного состояния [2] с использованием квадратичной параметризации матрицы плотности [3]. Также нередки случаи, когда необходимо записать вращательно-инвариантный оператор общего вида (не обязательно матрицу плотности) – например, для нахождения интегралов движения [4] или доказательства их отсутствия [5], а также для конструирования приближенных интегралов движения в неинтегрируемых системах [6].

Простой способ соблюсти условие вращательной инвариантности оператора – представить его в виде суммы слагаемых, каждое из которых является произведением скалярных и смешанных произведений матриц Паули (или единичным оператором). Например, для $N = 4$ спинов любой вращательно-инвариантный оператор можно разложить по следующему операторному базису:

$$\begin{aligned} &\{1, (\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2), (\vec{\sigma}_2\vec{\sigma}_3), (\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_3), \\ &(\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2)(\vec{\sigma}_3\vec{\sigma}_4), (\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_3)(\vec{\sigma}_2\vec{\sigma}_4), (\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_4)(\vec{\sigma}_2\vec{\sigma}_3), \\ &(\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2\vec{\sigma}_3), (\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2\vec{\sigma}_4), (\vec{\sigma}_2\vec{\sigma}_3\vec{\sigma}_4)\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $(\vec{\sigma}_i\vec{\sigma}_j\vec{\sigma}_k) \equiv \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\beta \sigma_k^\gamma$ обозначает смешанное произведение матриц Паули ($\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – антисимметричный тензор). При этом даже для большого числа спинов в каждом элементе базиса не должно быть больше одного смешанного произведения, т.к. произведение двух смешанных произведений раскладывается в полином из скалярных произведений благодаря тождеству

$$(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_3)(\vec{\sigma}_4, \vec{\sigma}_5, \vec{\sigma}_6) = \begin{vmatrix} (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_4) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_6) \\ (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_4) & (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_6) \\ (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_4) & (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_6) \end{vmatrix}. \quad (3)$$

Заметим еще, что если потребовать инвариантности оператора относительно обращения по времени (преобразование $\vec{\sigma}_i \rightarrow -\sigma_i$), то в базисе следует оставить только элементы без смешанного произведения.

Недостатком базиса типа (2) является его переполненность для $N \geq 5$ [2] (пример линейной зависимости см. в ур. (11)). В настоящей статье, опираясь на результаты работы [7], мы опишем алгоритм построения полного, но не переполненного операторного базиса, каждый элемент которого вращательно-инвариантен.

2 Построение непереполенного базиса

2.1 Таблички

Следуя [7], каждому элементу базиса поставим в соответствие *табличку*. Эти таблички заполняются номерами спинов.

Столбец высоты 3 мы интерпретируем как смешанное произведение.

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array} = (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_3) \quad (4)$$

Пару столбцов мы интерпретируем как определитель, составленный из скалярных произведений (или, что то же самое, обобщенный символ Кронекера[9], свёрнутый со всеми векторами сигма-матриц), например

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & 5 \\ \hline \end{array} = \sigma_1^{\alpha_1} \sigma_2^{\alpha_2} (\delta_{\alpha_1 \alpha_2}^{\alpha_4 \alpha_5}) \sigma_4^{\alpha_4} \sigma_5^{\alpha_5} = \begin{vmatrix} (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_4) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_5) \\ (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_4) & (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_5) \end{vmatrix}. \quad (5)$$

Пара столбцов высоты 1 – это просто скалярное произведение

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \end{array} = (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2). \quad (6)$$

Заметим, что по этому правилу пара столбцов высоты 3 равна произведению двух смешанных произведений (каждое соответствует своему столбцу), и мы воспроизводим ур. (3):



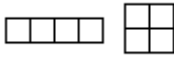

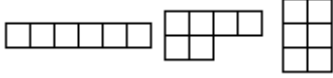
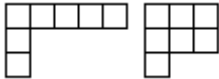
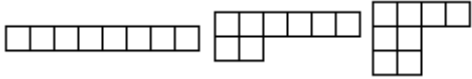
$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & 5 \\ \hline 3 & 6 \\ \hline \end{array} = \begin{vmatrix} (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_4) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_6) \\ (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_4) & (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_6) \\ (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_4) & (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_6) \end{vmatrix} = (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_3)(\vec{\sigma}_4, \vec{\sigma}_5, \vec{\sigma}_6). \quad (7)$$

2.2 Алгоритм построения базиса

Следуя [7], рассмотрим построение базиса для N спинов. Этот базис включает в себя единичный оператор, а также операторы с $n = 2, 3, \dots, N$ матрицами Паули. Для фиксированного n в базис войдут элементы, удовлетворяющие следующим критериям:

- полное число ячеек в табличке равно n
- каждая строка в табличке содержит число ячеек не больше, чем в предыдущей строке
- строк не больше 3
- Для четного числа спинов:
 - столбцы разбиваются на пары, высоты столбцов в каждой паре совпадают
- Для нечетного числа спинов:
 - в начале таблички добавляется столбец высоты 3
 - оставшиеся $n - 3$ ячейки строятся как для четного числа спинов

Для пояснения этих шагов, приведем примеры допустимых *форм* табличек:

n (число матриц Паули)	допустимые формы табличек
2	
3	
4	
5	
6	
7	
8	

- заполняем эти таблички различающимися номерами спинов так, чтобы каждая строка и каждый столбец был отсортирован по возрастанию номера спина (вообще говоря, правило сортировки может быть любым, но его нужно придерживаться для всех элементов базиса)

Примеры заполнения одной таблички:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline 5 & 6 \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 5 \\ \hline 4 & 6 \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline 5 & 6 \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 5 \\ \hline 4 & 6 \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & 5 \\ \hline 3 & 6 \\ \hline \end{array}
 \quad (8)$$

Например, для $n = 4$ матриц Паули мы получим три элемента

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} = (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)(\vec{\sigma}_3 \vec{\sigma}_4),$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} = \begin{vmatrix} (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_4) \\ (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_2) & (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_4) \end{vmatrix},$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} = \begin{vmatrix} (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_3) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_4) \\ (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_3) & (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_4) \end{vmatrix}, \quad (9)$$

ср. со второй строкой ур. (2).

Этот алгоритм реализован нами в программе Wolfram Mathematica[©], а именно написана функция [8], которая генерирует все возможные элементы базиса.

Число элементов базиса с n матрицами Паули дается формулой [7]

$$Q_n = \sum_{r=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{n!(3r - n + 1)}{(n - 2r)!r!(r + 1)!}. \quad (10)$$

Это совпадает с результатом работы функции [8].

2.3 Линейные зависимости и сравнение с переполненным базисом

Ранее нами было замечено [2], что оператор, соответствующий паре столбцов высоты 4, равен нулю, то есть имеет место линейная зависимость

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 5 \\ \hline 2 & 6 \\ \hline 3 & 7 \\ \hline 4 & 8 \\ \hline \end{array} = \begin{vmatrix} (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_6) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_7) & (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_8) \\ (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_6) & (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_7) & (\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_8) \\ (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_6) & (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_7) & (\vec{\sigma}_3, \vec{\sigma}_8) \\ (\vec{\sigma}_4, \vec{\sigma}_5) & (\vec{\sigma}_4, \vec{\sigma}_6) & (\vec{\sigma}_4, \vec{\sigma}_7) & (\vec{\sigma}_4, \vec{\sigma}_8) \end{vmatrix} = 0. \quad (11)$$

Была высказана гипотеза [2], что все линейные зависимости в базисе с четным числом спинов имеют аналогичную структуру.

Общее число элементов исходного переполненного базиса с заданным количеством матриц Паули, n , дается формулой

$$T_n = \begin{cases} \frac{n!}{2^{n/2}(n/2)!} & (n = 2k) \\ \frac{n!}{3 \times 2^{(n-1)/2}((n-3)/2)!} & (n = 2k + 1) \end{cases} \quad (12)$$

Было замечено, что если для четного числа спинов сгенерировать все возможные таблички с заданным количеством ячеек n , но без ограничения числа строк, то их общее число оказалось равно T_n . Это подкрепляет гипотезу, что все таблички, у которых число строк больше 4 (они соответствуют линейным комбинациям, равным нулю), дают все линейные зависимости в исходном базисе. Для нечетного количества спинов аналогичный факт нами не установлен.

Поучительно сравнить размеры переполненного и не переполненного базисов:

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20	30	40
T_n	1	1	3	10	15	105	105	1260	945	4.7E6	6.5E8	6.2E15	3.2E23
Q_n	1	1	3	6	15	36	91	232	603	83097	1.3E7	4.4E11	1.7E16

Из этого сравнения видно, что не переполненный базис значительно меньше.

3 Заключение

Мы сформулировали и реализовали алгоритм построения полного, но не переполненного базиса в пространстве операторов системы N спинов $1/2$, инвариантных относительно глобальных вращений системы координат. Число элементов этого базиса значительно меньше числа элементов наивного переполненного базиса, сконструированного из всевозможных мономов из скалярных и векторных произведений матриц Паули.

Полученный базис может быть использован для различных задач квантовой физики спиновых систем с изотропным гейзенберговским взаимодействием [1, 2, 3, 4]. Заметим, что для многих приложений желательно найти эффективный алгоритм умножения элементов базиса друг на друга. Этот вопрос является перспективным направлением дальнейших исследований.

Благодарности. Автор благодарен О.В. Лычковскому за постановку задачи и многочисленные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, грант № 18-32-20218.

Список литературы

- [1] E. Shpagina, F. Uskov, N. Il'in, O. Lychkovskiy. Merits of using density matrices instead of wave functions in the stationary Schrödinger equation for systems with symmetries // *J. Phys. A: Math. Theor.* **53**, 075301 (2020). <https://arxiv.org/abs/1812.03056>
- [2] F. Uskov, O. Lychkovskiy, A variational lower bound on the ground state of a many-body system and the squaring parametrization of density matrices // *J. Phys.: Conf. Ser.* **1163**, 012057 (2019). <https://arxiv.org/abs/1902.09246>
- [3] N. Il'in, E. Shpagina, F. Uskov, O. Lychkovskiy, Squaring parametrization of constrained and unconstrained sets of quantum states, *J. Phys. A: Math. Theor.* **51**, 085301 (2018) <https://arxiv.org/abs/1704.03861>
- [4] P. Grabowski and Pierre Mathieu, Quantum Integrals of Motion for the Heisenberg Spin Chain, *Modern Physics Letters A* **9.24 (1994): 2197-2206**. <https://arxiv.org/abs/hep-th/9403149>
- [5] Shiraishi, N., Proof of the absence of local conserved quantities in the XYZ chain with a magnetic field, *Europhysics Letters*, **128**, 17002 (2019).
- [6] Malakis, S., Kurlov, D. and Gritsev, V., Quasi-conserved quantities in the perturbed XXX spin chain, arXiv:2007.01715. arXiv 2007.01715.
- [7] D. L. Andrews and T. Thirunamachandran, On three-dimensional rotational averages, *J. Chem. Phys.*, **67** (1977), 5026-5033.
- [8] <https://github.com/FeelUsM/ScalarMixedSpins/blob/master/tables.nb>

[9] https://en.wikipedia.org/wiki/Kronecker_delta#Generalizations