О непереполненном базисе скалярных и смешанных произведений сигма-матриц

Олег Лычковский, Филипп Усков

14 октября 2020 г.

Аннотация

Исследуется вопрос о полном вращательно-инвариантном операторном базисе для спиновых систем. Получен полный непереполненный базис, и исследованы его простейшие свойства.

1 Введение

В физике важную роль играют системы спинов $1/2$ с изотропным Гейзенберговским взаимодействием. Общий вид гамильтониана имеет вид:

$$H = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j \tag{1}$$

где $\vec{\sigma}_i = \{\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z\}$ - вектор матриц Паули, J_{ij} - константы связи, i, j - нумеруют спины.

Состояние такой систмемы описаывается матрицей плотности ρ. Поскольку гамильотониан изотропен, то матрица плотности тоже изотропна, и может быть разложена в базис:

$$A_i = \{1, \;\; (\vec{\sigma}_j \vec{\sigma}_k), \;\; (\vec{\sigma}_j \vec{\sigma}_k)(\vec{\sigma}_l \vec{\sigma}_m) \;\;, \;\; ...\} \tag{2}$$

Он конструируется из единичной матрицы и всевозможных скалярных и смешанных произведений сигма-матриц. Если мы требуем инвариантности матрицы плотности относительно обращений по времени, то в этом базисе будут только скалярные произведения (и единица), а если не требуем, то благодаря тождеству

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

в каждом слагаемом ожно оставить не более одного смешанного произведения.

Матрица плотности, разложенная по такому базису, используется в частности при квадратичной параметризации [2], для нахождения вариационного ограничения снизу энергии основного состояния [4], а также для решения уравнения шредингера в виде $H\rho = E\rho$ [3]. Также такой базис используется для нахождения интегралов движения гейзенберговской спиновой цепочки [6].

Недостатком такого базиса является его переполненность. В настоящей статье опираясь на результаты работы [1] мы построим полный но непереполненный базис изотропной системы.

2 Построение непереполненного базиса [1]

Элементы базиса будем называть табличками. Эти таблички заполняются номерами спинов.

Столбец высоты 3 мы интерпретируем как смешанное произведение.

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

Пару столбцов мы интерпретируем как определитель скалярных произведений (или, что то же самое, обобщенный символ Кронекера[7], свёрнутый со всеми векторами сигма-матриц).

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

например

пара столбцов длины 1 это просто скалярное произведение

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

пара столбцов длины 3 равна произведению двух смешанных произведений (каждое соответствует своему столбцу)

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

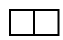
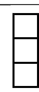
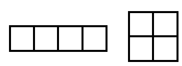
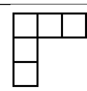
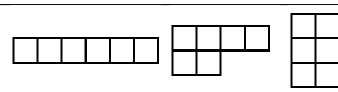
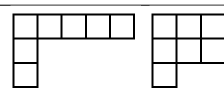
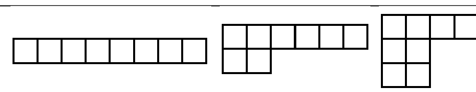
В базис войдут элементы, удовлетворяющие следующим критериям:

- кажда 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 делаем как для четного числа

Примеры форм табличек:

количество спинов	Примеры форм табличек
2	
3	
4	
5	
6	
7	
8	

- после чего заполняем эти таблички различающимися номерами спинов так, чтобы каждая строка и каждый столбец был отсортирован по возрастанию номера спина (при необходимости спины можно перенумеровать в любой последовательности)

Примеры заполнения одной таблички:

1	2
3	4
5	6

1	2
3	5
4	6

1	3
2	4
5	6

1	3
2	5
4	6

1	4
2	5
3	6

(8)

Пример всего базиса для 4 спинов:

1	2	3	4

1	2
3	4

1	3
2	4

(9)

Была написана функция [5], которая генерирует все возможные элементы базиса, и их число совпало с формулой из статьи[1]

$$Q_n = \sum_{r=0}^{[n/2]} \frac{n!(3r-n+1)}{(n-2r)!r!(r+1)!}. \tag{10}$$

Ранее нами была обнаружена гипотеза, что пара столбцов длины 4 равна 0, и что этим объясняются все линейные зависимости в базисе с четным числом спинов.

$$\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 5 \\ \hline 2 & 6 \\ \hline 3 & 7 \\ \hline 4 & 8 \\ \hline \end{array} = \begin{vmatrix} (\vec\sigma_1,\vec\sigma_5) & (\vec\sigma_1,\vec\sigma_6) & (\vec\sigma_1,\vec\sigma_7) & (\vec\sigma_1,\vec\sigma_8) \\ (\vec\sigma_2,\vec\sigma_5) & (\vec\sigma_2,\vec\sigma_6) & (\vec\sigma_2,\vec\sigma_7) & (\vec\sigma_2,\vec\sigma_8) \\ (\vec\sigma_3,\vec\sigma_5) & (\vec\sigma_3,\vec\sigma_6) & (\vec\sigma_3,\vec\sigma_7) & (\vec\sigma_3,\vec\sigma_8) \\ (\vec\sigma_4,\vec\sigma_5) & (\vec\sigma_4,\vec\sigma_6) & (\vec\sigma_4,\vec\sigma_7) & (\vec\sigma_4,\vec\sigma_8) \end{vmatrix} = 0. \tag{11}$$

Был замечен факт, что если для четного числа спинов сгененрировать все возможные таблички без ограничения числа строк, то их общее число оказалось равно количеству элементов нашего исходного переполненного базиса

$$N_n = \begin{cases} \frac{n!}{2^{n/2}(n/2)!} & (n = 2k) \\ \frac{n!}{3\dot{2}^{(n-1)/2}((n-3)/2)!} & (n = 2k+1) \end{cases} \tag{12}$$

откуда можно сформулировать гипотезу, что скорее всего все таблички, у которых число строк больше 4 (они =0), дают все линейные зависимости в исходном базисе. Для нечетного количества спинов аналогичный факт нами пока не придуман.

Можно сравнить размеры базисов переполненного и непереполненного:

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20
N_n	1	1	3	10	15	105	105	1260	945	4.7E6	6.5E8
Q_n	1	1	3	6	15	36	91	232	603	83097	1.3E7

n	10	20	30	40	50	60	70	80
N_n	945	6.5E8	6.2E15	3.2E23	5.8E31	2.9E40	3.4E49	8.0E58
Q_n	603	1.3E7	4.4E11	1.7E16	7.2E20	3.3E25	1.5E30	7.4E34

3 Заключительное замечание

Количество элементов в полученном базисе меньше, однако чтобы использовать в уравнении Шрёдингера $H\rho = E\rho$, нужно еще научиться умножать элементы нашего базиса (из ρ) на скалярные произведения (из H), и полученный результат вновь раскладывать по базису. Для переполненного базиса это было реализовано ранее (и описано в предыдущих статьях [4]. Для нового непереполненного базиса это сделать пока не удалось (так чтобы при этом не переходить к старому переполненному базису, что сводит на нет преимущества нового непереполненного базиса).

Список литературы

[1] D. L. Andrews and T. Thirunamachandran, On three-dimensional rotational averages, *J. Chem. Phys.,* **67 (1977),** 5026-5033. https://oeis.org/A005043/a005043_1.pdf

[2] 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

[3] 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

[4] 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

[5] https://github.com/FeelUsM/ScalarMixedSpins/blob/master/tables.nb

[6] 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

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