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

Филипп Усков, fe1992@mail.ru
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©.

Ключевые слова: матрицы Паули, изотропное гейзенберговское взаимодействие, системы квантовых спинов, операторный базис.

1 Введение

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

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

где $\vec{\sigma}_i = \{\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z\}$ - вектор матриц Паули, J_{ij} - константы связи, индексы $i, j = 1, 2, ..., N$ 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 систмемы описаывается в общем случае матрицей плотности ρ. Зачастую, в силу симметрии гамильтониана относительно

*Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, грант № 18-32-20218.

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:

$$\begin{aligned}&\{1,\ (\vec\sigma_1\vec\sigma_2),\ (\vec\sigma_2\vec\sigma_3),\ (\vec\sigma_3\vec\sigma_4),\ (\vec\sigma_1\vec\sigma_3),\ (\vec\sigma_2\vec\sigma_4),\ (\vec\sigma_1\vec\sigma_4),\\ &\ (\vec\sigma_1\vec\sigma_2)(\vec\sigma_3\vec\sigma_4),\ (\vec\sigma_1\vec\sigma_3)(\vec\sigma_2\vec\sigma_4),\ (\vec\sigma_1\vec\sigma_4)(\vec\sigma_2\vec\sigma_3),\\ &\ (\vec\sigma_1\vec\sigma_2\vec\sigma_3),\ (\vec\sigma_1\vec\sigma_2\vec\sigma_4),\ (\vec\sigma_2\vec\sigma_3\vec\sigma_4)\},\end{aligned} \tag{1}$$

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 поизведение матриц Паули ($\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – антисимметричный тензор). При этом даже для большего 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

$$(\vec\sigma_1,\vec\sigma_2,\vec\sigma_3)(\vec\sigma_4,\vec\sigma_5,\vec\sigma_6) = \begin{vmatrix}(\vec\sigma_1,\vec\sigma_4) & (\vec\sigma_1,\vec\sigma_5) & (\vec\sigma_1,\vec\sigma_6)\\ (\vec\sigma_2,\vec\sigma_4) & (\vec\sigma_2,\vec\sigma_5) & (\vec\sigma_2,\vec\sigma_6)\\ (\vec\sigma_3,\vec\sigma_4) & (\vec\sigma_3,\vec\sigma_5) & (\vec\sigma_3,\vec\sigma_6)\end{vmatrix}. \tag{2}$$

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

Недостатком базиса типа (1) является его переполненность для $N \geq 5$ [2](пример линейной зависимости см. в ур. (3)). 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 непереполненного 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.

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

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

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

Пара столбцов высоты 1 – это просто скалярное произведение

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

Заметим, что по этому правилу пара столбцов высоты 3 равна произведению двух смешанных произведений (каждое соответствует своему столбцу), и мы воспроизводим ур. (2):

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

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

Таблички из большего количества столбцов разбивается на пары столбцов с конца. При этом в начале может остаться 1 столбец. Например:

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline 1 & 4 & 6 & 8 & 9\\\hline 2 & 5 & 7 \\\cline{1-3} 3 \\\cline{1-1}\end{array} = \begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array} \cdot \begin{array}{|c|c|}\hline 4 & 6\\\hline 5 & 7\\\hline\end{array} \cdot \begin{array}{|c|c|}\hline 8 & 9\\\hline\end{array}$$

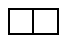
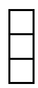
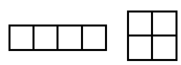
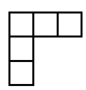
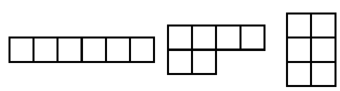
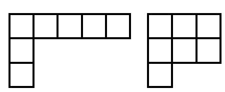
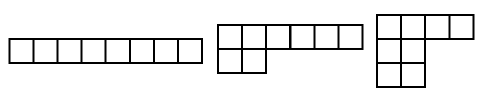
2.2 Алгоритм построения базиса

Следуя [7], рассмотрим построение базиса для N спинов. Этот базис включает в себя единичный оператор, а также операторы с $n = 2, 3, \ldots N$ 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:

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

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

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

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

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

ср. со второй строкой ур. (1).

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]

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

Это совпадает с результатом работы функции [8].

2.3 Линейные зависимости и сравнение с переполненным базисом

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

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

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 количектвом матриц Паули, n, дается формулой

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

Было замечено, что если для четного числа спинов сгененрировать 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 значтельно 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 (и разложения по этому базису). Этот вопрос является перспективным направлением дальнейших исследований.

Благодарности. Автор благодарен О.В. Лычковскому за постановку задачи и многочисленные обсуждения.

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] Malikis, 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. https://oeis.org/A005043/a005043_1.pdf

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

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