推广的 Weyl-Stratonovich 映射与 Meyer-Miller 模型之联系

2021 年 8 月 26 日

1 高维自旋相干态

Todd Tilma & Kae Nometo在J. Phys. A: Math. Theor. 45 (2012) 015302当中给出了高维自旋空间当中的相干态，这样一个相干态可以用 $(2F-2)$ 个实角度参数 $\{\theta_1, \phi_1, \dots, \theta_{F-1}, \phi_{F-1}\}$ 描述。具体形式如下：

$$|\Omega\rangle = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1+\phi_2+\cdots+\phi_{F-1})}\cos(\theta_1)\cos(\theta_2)\cdots\cos(\theta_{F-2})\sin(\theta_{F-1}) \\ -\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-\phi_1+\phi_2+\cdots+\phi_{F-1})}\sin(\theta_1)\cos(\theta_2)\cdots\cos(\theta_{F-2})\sin(\theta_{F-1}) \\ -\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_3+\phi_4+\cdots+\phi_{F-1})}\sin(\theta_2)\cos(\theta_3)\cdots\cos(\theta_{F-2})\sin(\theta_{F-1}) \\ \vdots \\ -\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_{F-3}+\phi_{F-2}+\phi_{F-1})}\sin(\theta_{F-4})\cos(\theta_{F-3})\cos(\theta_{F-2})\sin(\theta_{F-1}) \\ -\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_{F-2}+\phi_{F-1})}\sin(\theta_{F-3})\cos(\theta_{F-2})\sin(\theta_{F-1}) \\ -\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_{F-1})}\sin(\theta_{F-2})\sin(\theta_{F-1}) \\ \cos(\theta_{F-1}) \end{pmatrix}$$

. 这样定义的自旋相干态满足如下的性质（其中 $\mathrm{d}\Omega$ 是角度参数的积分测度）：

1. $\langle\Omega|\Omega\rangle = 1$;
2. $\int \mathrm{d}\Omega\ |\Omega\rangle\langle\Omega| = \hat{1}$;
3. $\int \mathrm{d}\Omega = F$.

2 推广的 Weyl-Stratonovich 映射

引用这样定义的相干态，Richardson 等人在J. Chem. Phys. 152, 084110 (2020)当中定义了一个推广的 Weyl-Stratonotich 映射。对于这样的映射还有一些更早的工作(例如 C. Brif and A. Mann, Phys. Rev. A 59, 971 (1999).)。一般意义上的映射核可以表示为：

$$\hat{K}_W = \frac{1}{F} + 2(1+F)^{\alpha}\sum_{i=1}^{F^2-1}\langle\Omega|\hat{S}_i|\Omega\rangle\hat{S}_i$$

$$\hat{K}_W^{-1} = \frac{1}{F} + 2(1+F)^{1-\alpha}\sum_{i=1}^{F^2-1}\langle\Omega|\hat{S}_i|\Omega\rangle\hat{S}_i$$

其中 $\hat{S}_i$ 是 F 维空间上的所有无迹厄米矩阵，一共 F^2-1 个。当 $F=2$ 时，这些矩阵是 Pauli 矩阵的一半；当 $F=3$ 时，这些矩阵是 Gell-Mann 矩阵的一半。这些矩阵与单位矩阵 $\hat{1}$ 一起，构成了 F 维空间当中算符的完备集，即对于任意的算符 $\hat{A}$，存在形式

$$\hat{A} = A_0\hat{1} + \sum_{i=1}^{F^2-1}A_i\hat{S}_i.$$

这样的 $\hat{S}_i$ 满足性质

1. $\mathrm{Tr}\,\hat{S}_i = 0$;

2. $\mathrm{Tr}\,\hat{S}_i\hat{S}_j = \delta_{ij}/2$;

3. *Fierz* 完备性关系。

$$\sum_i \langle m|\,\hat{S}_i\,|n\rangle\,\langle r|\,\hat{S}_i\,|s\rangle = \frac{1}{2}\delta_{ms}\delta_{nr} - \frac{1}{2F}\delta_{mn}\delta_{rs};$$

证明：*(Cheng&Li，Gauge Theory of elementary particle physics书 (4.134) 式)*

$$\forall\,\hat{A},\ \hat{A} = A_0 + \sum_i A_i\hat{S}_i.$$

利用上面列出的两条性质，可知 $A_0 = \mathrm{Tr}\,\hat{A},\ A_i = 2\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{S}_i$. 因此，

$$\hat{A} = \frac{1}{F}\mathrm{Tr}\,\hat{A} + 2\sum_i \mathrm{Tr}\,[\hat{A}\hat{S}_i]\hat{S}_i.$$

取 $\hat{A} = |n\rangle\langle m|$, 上式化为

$$|n\rangle\langle m| = \frac{1}{F}\delta_{mn}\hat{1} + 2\sum_i \langle m|\,\hat{S}_i\,|n\rangle\,\hat{S}_i.$$

取表达式两边的分量，得到

$$\delta_{nr}\delta_{ms} = \frac{1}{F}\delta_{rs}\delta_{mn} + 2\sum_i \langle m|\,\hat{S}_i\,|n\rangle\ \langle r|\,\hat{S}_i\,|s\rangle\,,$$

整理后便得到 *Fierz* 完备性关系。

4. $\int \mathrm{d}\Omega\,\langle\Omega|\,\hat{S}_i\,|\Omega\rangle = 0$. 将单位算符 $\hat{1} = \int \mathrm{d}\Omega\,|\Omega\rangle\,\langle\Omega|$ 插入 $\mathrm{Tr}\,\hat{S}_i = 0$ 可证.

5. $\int \mathrm{d}\Omega\ \langle\Omega|\,\hat{S}_i\,|\Omega\rangle\,\langle\Omega|\,\hat{S}_j\,|\Omega\rangle = \delta_{ij}/2(F+1)$.
这个性质的完整证明需要用到一些李群上的分析知识，*Richardson* 等人的文章附录 *E* 当中的证明跳过了那一部分。李群上的分析我看不懂，而列出一个不完整的证明和直接接受结论没有本质差别，因此这里就不给出证明了。

可以证明这样定义的映射核满足：

1. 角度空间的归一化。

$$\int \mathrm{d}\Omega\hat{K}_W(\Omega) = \int \mathrm{d}\Omega\hat{K}_W^{-1}(\Omega) = \hat{1}$$

证明：考虑 $\hat{S}_i$ 都是无迹矩阵，因此求迹只有 $\mathrm{Tr}\,\hat{1} = F$，于是 $\mathrm{Tr}\,\hat{K}_W = \mathrm{Tr}\,\hat{K}_W^{-1} = (1/F)\mathrm{Tr}\,\hat{1} = 1$.

2. 算符空间的归一化。

$$\mathrm{Tr}\,\hat{K}_W(\Omega) = \mathrm{Tr}\,\hat{K}_W^{-1}(\Omega) = 1.$$

证明：利用 $\hat{S}_i$ 性质四，有

$$\int \mathrm{d}\Omega\hat{K}_W(\Omega) = \int \mathrm{d}\Omega\hat{K}_W^{-1}(\Omega) = \hat{1}/F\int \mathrm{d}\Omega = \hat{1}.$$

3. 求迹关系。

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B} = \int \mathrm{d}\Omega A_W\tilde{B}_W$$

其中 $A_W = \mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{K}_W$，$\tilde{B}_W = \mathrm{Tr}\,\hat{B}\hat{K}_W^{-1}$.

证明：考虑 $\hat{A} = A_0\hat{1} + \sum_{i=1}^{F^2-1} A_i\hat{S}_i$，因此

$$\begin{aligned}
A_W &= \mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{K}_W \\
&= \mathrm{Tr}\left(A_0\hat{1} + \sum_{i=1}^{F^2-1} A_i\hat{S}_i\right)\left(1/F + 2(1+F)^\alpha \sum_{i=1}^{F^2-1} \langle\Omega|\,\hat{S}_j\,|\Omega\rangle\,\hat{S}_j\right) \\
&= A_0\frac{1}{F}\mathrm{Tr}\,\hat{1} + 2(1+F)^\alpha \sum_i \langle\Omega|\,\hat{S}_i\,|\Omega\rangle\,A_i \times \frac{1}{2} \\
&= A_0 + (1+F)^\alpha \sum_i \langle\Omega|\,\hat{S}_i\,|\Omega\rangle\,A_i
\end{aligned}$$

其中第三步使用了 $\hat{S}_i$ 的性质 *1* 和 *2*. 类似地，因为逆映射核与正核只相差求和之前的系数，可以得到

$$\tilde{B}_W = B_0 + (1+F)^{1-\alpha} \sum_i \langle\Omega|\,\hat{S}_i\,|\Omega\rangle\,B_i.$$

因此

$$\begin{aligned}
\int \mathrm{d}\Omega\, A_W\tilde{B}_W &= A_0B_0\int\mathrm{d}\Omega + (1+F)\sum_{ij}A_iB_j\int\mathrm{d}\Omega\,\langle\Omega|\,\hat{S}_i\,|\Omega\rangle\langle\Omega|\,\hat{S}_j\,|\Omega\rangle \\
&= FA_0B_0 + \frac{1}{2}\sum_i A_iB_i = \mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B}.
\end{aligned}$$

其中的第二个和第三个等号都利用了性质 $\int\mathrm{d}\Omega\,\langle\Omega|\,\hat{S}_i\,|\Omega\rangle\langle\Omega|\,\hat{S}_j\,|\Omega\rangle = \delta_{ij}/2(F+1)$.

3 推广 WS 映射与 MM 映射的等价关系

原文中给出了映射后哈密顿量的变换关系。这里直接对于映射核重写这个过程：

考虑一个变量替换

$$|\Omega\rangle = \sum_{n=1}^{F} c_n\,|n\rangle\,; c_n \equiv \frac{x_n + \mathrm{i}p_n}{\sqrt{2}(1+F)^{\alpha/2}}.$$

将这样一个变量替换作用到 $\hat{K}_W$ 当中去：

$$\begin{aligned}
\hat{K}_W &= \frac{1}{F} + 2(1+F)^\alpha\sum_i\langle\Omega|\,\hat{S}_i\,|\Omega\rangle\,\hat{S}_i \\
&= \frac{1}{F} + 2(1+F)^\alpha\sum_i\sum_{m,n}\langle m|\,\hat{S}_i\,|n\rangle\,c_m^\star c_n\hat{S}_i \\
&= \frac{1}{F} + 2(1+F)^\alpha\sum_i\sum_{m,n}\langle m|\,\hat{S}_i\,|n\rangle\,\frac{(x_m - \mathrm{i}p_m)(x_n + \mathrm{i}p_n)}{2(1+F)^\alpha}\hat{S}_i \\
&= \frac{1}{F} + \sum_i\sum_{m,n}\sum_{r,s}\langle m|\,\hat{S}_i\,|n\rangle\langle r|\,\hat{S}_i\,|s\rangle\,(x_m - \mathrm{i}p_m)(x_n + \mathrm{i}p_n)\,|r\rangle\!\langle s|
\end{aligned}$$

i 标记无迹厄米矩阵的下标，m, n, r, s 标记量子态。将 Fierz 完备性关系代入对 i 的求和，可以得到

$$\begin{aligned}
\hat{K}_W &= \frac{1}{F} + \sum_{m,n}\sum_{r,s}\left(\frac{1}{2}\delta_{ms}\delta_{nr} - \frac{1}{2F}\delta_{mn}\delta_{rs}\right)(x_m - \mathrm{i}p_m)(x_n + \mathrm{i}p_n)\,|r\rangle\!\langle s| \\
&= \frac{1}{F} + \sum_{m,n}|n\rangle\!\langle m|\left[\frac{(x_m - \mathrm{i}p_m)(x_n + \mathrm{i}p_n)}{2} - \frac{\delta_{mn}}{2F}\sum_r(x_r^2 + p_r^2)\right]
\end{aligned}$$

注意到 $|\Omega\rangle$ 是归一化的，因此有

$$1=\sum|c_n|^2=\frac{1}{2(1+F)^\alpha}\sum_n(x_n^2+p_n^2),$$

从而

$$\begin{aligned}\hat{K}_W&=\sum_{m,n}|n\rangle\langle m|\left[\frac{(x_m-\mathrm{i}p_m)(x_n+\mathrm{i}p_n)}{2}-\delta_{mn}\left(\frac{(1+F)^\alpha}{F}-\frac{1}{F}\right)\right]\\&\equiv\sum_{m,n}|n\rangle\langle m|\left[\frac{(x_m-\mathrm{i}p_m)(x_n+\mathrm{i}p_n)}{2}-\gamma_\alpha\delta_{mn}\right]=\hat{K}_{MM}.\end{aligned}$$

其中

$$\gamma_\alpha\equiv\frac{(1+F)^\alpha-1}{F}\in(-\frac{1}{F},+\infty),\ \mathrm{when}\,\alpha\in\mathbb{R}.$$

如果将 γ_α 的定义带回，则可以得到 $\sum_n(x_n^2+p_n^2)=2(1+F\gamma)$.

按照相同的操作，可以得到

$$\begin{aligned}\hat{K}_W^{-1}&=\sum_{m,n}|n\rangle\langle m|\left[\frac{(x_m-\mathrm{i}p_m)(x_n+\mathrm{i}p_n)}{2}\frac{1+F}{(1+F)^{2\alpha}}-\delta_{mn}\left(\frac{1}{2F}\cdot2(1+F)^\alpha\frac{1+F}{(1+F)^{2\alpha}}-\frac{1}{F}\right)\right]\\&\equiv\sum_{m,n}|n\rangle\langle m|\left[\frac{1+F}{2(1+F\gamma_\alpha)^2}(x_m-\mathrm{i}p_m)(x_n+\mathrm{i}p_n)-\frac{1+F}{1+F\gamma_\alpha}\delta_{mn}\right]=\hat{K}_{MM}^{-1}.\end{aligned}$$

当 α 分别取 $0,1/2,1$ 时，分别对应了原文当中的 Q、Wigner、P 表示。这三种表示对应到 Mayer-Miller 模型里面，分别有 $\gamma_Q=0;\gamma_{\mathrm{Wigner}}=(\sqrt{1+F}-1)/F;\gamma_P=1$.

这里将角度变量的 $2F-2$ 个实变量变换到了 (x,p) 形式的 $2F$ 个变量，某种意义上可以看作是映射参数空间的广义球坐标和直角坐标之间的变换关系。变换当中多出的两个自由度，其中一个由 (x,p) 满足的球面约束除去，另一个对应自旋相干态用 $|n\rangle$ 表示时系数的一个整体任意相位，由于在 WS 形式中这样的系数总是成对的出现，因此这个相位被消掉了。在自旋相干态的原文献当中给出了这个任意相位。

4 讨论

这里给出的 Weyl-Stratonovich 映射只能给出 Meyer-Miller 模型的对角 γ 形式，并不能给出 Γ_{mn} 的形式，这一点有待后续的考虑。另一方面，考虑到 Weyl-Stratonovich 映射是球坐标的形式，看作分立的两态体系给出的映射如果存在，有可能会和 Meyer-Miller 模型的作用变量-角变量形式有一定关系。