满足置换对称性的多体哈密顿量的 $\mathfrak{su}(n)$ 约化

squid

2022 年 12 月 27 日

目录

1 引言

量子力学中经常会遇到求能量本征值、本征态的问题，而有时要处理的系统粒子数 N 较大，总的态矢空间维数很大，生成矩阵元以及求解会比较难。如果哈密顿量具有某种对称性，适当选取基矢量将态矢空间分解为若干个不变子空间的直和，哈密顿量在这组基下将是块对角的，于是生成大矩阵并求解的问题被转化为生成一个个小矩阵再求解的问题，计算速度得到提升。此外，问题有时候只与在具有某种特定对称性质的态矢有关，此时在特定的不变子空间中生成求解小矩阵即可。

本文讨论考虑总粒子数为 N、单粒子态矢空间 $\mathcal{V}$ 维数为 $\dim\mathcal{V} = n$ 的体系，多体态矢空间为

$$\mathcal{H} = \mathcal{V}^{\otimes N}. \tag{1}$$

假设哈密顿量具有置换对称性，考虑其约化问题。这样的哈密顿量有时会出现在采用平均场近似的格点模型中。哈密顿量与任意置换操作对易意味着可以找到一组基使得在这组基下置换群（代数）的表示是其不可约表示 (用杨图 $[\lambda]$ 标记) 的直和，其中不可约表示的重数一般不为 1。假设适当选取基矢量使得同种不可约表示的位置是沿着对角线相邻的，那么在这组基下，哈密顿量是块对角的。哈密顿量矩阵中的每一块所在的位置刚好覆盖了所有同一种不可约表示的位置，

$$H = \bigoplus_{[\lambda]} H^{[\lambda]}, \tag{2}$$

$$D(R) = \bigoplus_{[\lambda]} I_{m_{[\lambda]}} \otimes D^{[\lambda]}(R), \quad R \in \mathbb{C}\mathfrak{S}_N, \tag{3}$$

其中 $m_{[\lambda]}$ 是相应不可约表示的重数，$\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 是 N 粒子置换群代数。换句话说，满足置换对称性的多体哈密顿量 H 可以找到一组基按照 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 不可约表示进行约化，某一分块 $H^{[\lambda]}$ 对应子空间就是在置换操作下按照不可约表示 $[\lambda]$ 进行变换的所有不变子空间的直和。

下文将要说明的是，满足置换对称性的多体哈密顿量按照 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 不可约表示进行分块的结果与按照 $\mathfrak{su}(n)$ 不可约表示进行分块的结果相同。这可以从 $\mathfrak{SU}(n)$ 群直乘表示的性质来理解，不过这里尝试采用不同的方法来证明。$\mathfrak{SU}(n)$ 群在态矢空间上的作用是 n 个自身表示的直乘，生成元定义为，

$$M^{(p)} = \sum_{j=1}^{N} \sigma_j^{(p)}, \quad p = 1, 2, \cdots, n^2 - 1, \tag{4}$$

$\sigma_j^{(p)}$ 为单粒子生成元，$\mathfrak{su}(n)$ 是 $M^{(p)}$ 生成的实李代数。

本文的组织如下：第 2 节介绍用杨算符投影将态矢空间按 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 不可约表示约化的方法，第 3 节以两粒子和三粒子自旋 1/2 角动量耦合为例比较按照 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 不可约表示约化和按照 $\mathfrak{su}(n=2)$ 不可约表示约化的结果，第 4 节针对 N 粒子自旋体系采用一种特殊的方法来证明两种方式的约化结果相同，第 5 节尝试对 $\dim \mathcal{V} = n$ 的情况用比较一般的方法来证明这一结论。

2 多体态矢空间按置换性质直和分解

置换群代数 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 的单位元可以分解维正交化杨算符的和 [1]，

$$E = \frac{1}{N!} \sum_{[\lambda]} d_{[\lambda]} \sum_{\mu=1}^{[\lambda]} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]}, \tag{5}$$

μ 是同一杨图不同杨表的指标。将单位元展开式作用到态矢空间 $\mathcal{H}$ 上就得到态矢空间的一种直和分解，满足置换对称的哈密顿量也可以相应做一分解，

$$\mathcal{H} = E\mathcal{H} = \frac{1}{N!} \bigoplus_{[\lambda]} d_{[\lambda]} \bigoplus_{\mu} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H} = \bigoplus_{[\lambda]} \bigoplus_{\mu} \mathcal{H}_\mu^{[\lambda]} = \bigoplus_{[\lambda]} \mathcal{H}^{[\lambda]}, \tag{6}$$

$$H = \bigoplus_{[\lambda]} H^{[\lambda]}, \tag{7}$$

其中

$$\mathcal{H}_\mu^{[\lambda]} = \frac{d_{[\lambda]}}{n!} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H}, \quad \mathcal{H}^{[\lambda]} = \bigoplus_{\mu} \mathcal{H}_\mu^{[\lambda]}. \tag{8}$$

$\mathcal{H}^{[\lambda]}$ 就是 $[\lambda]$ 不可约表示对应的不变子空间。不同的 $[\lambda]$ 对应的子空间中的态矢相互正交。

用杨算符投影得到 $\mathcal{H}_\mu^{[\lambda]}$ 后再对不同杨表的结果做直和便得到 $\mathcal{H}^{[\lambda]}$。不过作为线性空间，$\mathcal{H}_\mu^{[\lambda]}$ 的计算过程可以简化，比如系数 $d_{[}\lambda]/n!$ 可以吸收到 $\mathcal{H}$ 中。更进一步，事实上 $y_\mu^{[\lambda]}$ 也可略去 [1]。因为 $y_\mu^{[\lambda]}\mathcal{H} \subset \mathcal{H}$, 于是

$$\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H} = \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} \left\{ y_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H} \right\} \subset \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H}. \tag{9}$$

又由于

$$\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} = \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} = \frac{N!}{d_{[\lambda]}} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}, \tag{10}$$

利用 $\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]}\mathcal{H} \subset \mathcal{H}$，便有

$$\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H} = \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]} \left\{ \frac{d_{[\lambda]}}{N!} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H} \right\} \subset \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H}. \tag{11}$$

于是

$$\mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H} = \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H}, \tag{12}$$

$$\mathcal{H}_\mu^{[\lambda]} = \frac{d_{[\lambda]}}{n!} \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H} = \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} y_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H} = \mathcal{Y}_\mu^{[\lambda]} \mathcal{H}. \tag{13}$$

这说明要得到不同不可约表示对应的不变子空间，直接使用未正交化的杨算符投影再将不同杨表的结果直和即可，

$$\mathcal{H}^{[\lambda]} = \bigoplus_{\mu} \mathcal{Y}_{\mu}^{[\lambda]} \mathcal{H}. \tag{14}$$

不过要注意的是，尽管不同杨图对应的不变子空间 $\mathcal{H}^{[\lambda]}$ 之间是正交的（因为是不同不可约表示），同一杨图不同杨表的投影结果 $\mathcal{H}_{\mu}^{[\lambda]}$ 却不一定是正交的。在下一小节角动量耦合的例子中会看到这一点。

3 在自旋 1/2 角动量耦合中的例子

现在以两粒子、三粒子自旋 1/2 角动量耦合为例，即 $\dim\mathcal{V} = 2, N = 2, 3$ 的情形，来对比按照 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 不可约表示分块和按照 $\mathfrak{su}(2)$ 不可约表示约化的结果。

首先，两个自旋 1/2 角动量耦合的结果是熟知的自旋三重态和自旋单态。自旋三重态是

$$\begin{aligned} |j = 1; m = +1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle, \\ |j = 1; m = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right), \\ |j = 1; m = -1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{15}$$

而自旋单态是

$$|j = 0; m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right). \tag{16}$$

容易发现三重态中两个自旋对称，而单态中两个自旋反对称，故态矢空间 $\mathrm{span}\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ 按照总角动量约化的结果与按照对称还是反对称约化的结果是一样的。对于 $\mathfrak{su}(2)$ 而言，一种总角动量取值对应一种不可约表示。而 $N = 2$ 时，杨算符为

$$\mathcal{Y}^{[2]} = E + (1\ 2), \quad \mathcal{Y}^{[1,1]} = E - (1\ 2), \tag{17}$$

分别对应全对称态和全反对称态，因为

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\mathcal{Y}^{[2]}|j = 1; m = +1\rangle = |j = 1; m = +1\rangle, \quad \frac{1}{2}\mathcal{Y}^{[1,1]}|j = 1; m = +1\rangle = 0, \\ &\frac{1}{2}\mathcal{Y}^{[2]}|j = 1; m = 0\rangle = |j = 1; m = 0\rangle, \quad \frac{1}{2}\mathcal{Y}^{[1,1]}|j = 1; m = 0\rangle = 0, \\ &\frac{1}{2}\mathcal{Y}^{[2]}|j = 1; m = -1\rangle = |j = 1; m = +1\rangle, \quad \frac{1}{2}\mathcal{Y}^{[1,1]}|j = 1; m = -1\rangle = 0, \end{aligned} \tag{18}$$

以及

$$\frac{1}{2}\mathcal{Y}^{[2]}|j = 0; m = 0\rangle = 0, \quad \frac{1}{2}\mathcal{Y}^{[1,1]}|j = 0; m = 0\rangle = |j = 0; m = 0\rangle. \tag{19}$$

于是可以看到，$n = 2, N = 2$ 的情况下，按照 $\mathfrak{su}(2)$ 不同不可约表示（总角动量 $j = 1, 0$）约化的结果与按照 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_2$ 不同不可约表示（杨图 $[\lambda] = [2], [1, 1]$）约化的结果是一样的。

下面考虑三粒子自旋 1/2 角动量耦合的问题。此时杨算符为

$$\mathcal{Y}^{[3]} = E + (1\ 2) + (1\ 3) + (2\ 3) + (1\ 2\ 3) + (1\ 3\ 2), \tag{20}$$

$$\mathcal{Y}_1^{[2,1]} = E + (1\ 2) - (1\ 3) - (1\ 2)(1\ 3), \tag{21}$$

$$\mathcal{Y}_2^{[2,1]} = E + (1\ 3) - (1\ 2) - (1\ 3)(1\ 2). \tag{22}$$

注意，由于杨算符 $\mathcal{Y}^{[1,1,1]}$ 包含三个元素的反对称置换，而三个自旋 1/2 的粒子至少有两个自旋朝向是相同的，故用 $\mathcal{Y}^{[1,1,1]}$ 投影结果总是 0，下面计算中可以忽略这个杨算符。

将基矢量用杨算符 $\mathcal{Y}^{[3]}$ 投影可以得到子空间 $\mathcal{H}^{[3]}$，

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}^{[3]}\left|\uparrow\uparrow\uparrow\right\rangle = \left|\uparrow\uparrow\uparrow\right\rangle, \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}^{[3]}\left|\downarrow\downarrow\downarrow\right\rangle = \left|\downarrow\downarrow\downarrow\right\rangle, \tag{23}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}^{[3]}\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle = \frac{1}{3}\left(\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle\right), \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}^{[3]}\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle = \frac{1}{3}\left(\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle\right), \tag{24}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}^{[3]}\left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle = \frac{1}{3}\left(\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle\right), \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}^{[3]}\left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle = \frac{1}{3}\left(\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle\right), \tag{25}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}^{[3]}\left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle = \frac{1}{3}\left(\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle\right), \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}^{[3]}\left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle = \frac{1}{3}\left(\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle\right). \tag{26}$$

于是

$$\mathcal{H}^{[3]} = \mathrm{span}\{\left|\uparrow\uparrow\uparrow\right\rangle, \left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle, \left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle, \left|\downarrow\downarrow\downarrow\right\rangle\}. \tag{27}$$

$\mathcal{H}_1^{[2,1]}$ 和 $\mathcal{H}_2^{[2,1]}$ 子空间类似，

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\left|\uparrow\uparrow\uparrow\right\rangle = 0, \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\left|\downarrow\downarrow\downarrow\right\rangle = 0, \tag{28}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle = \frac{1}{6}\left(2\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle - \left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle\right), \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle = \frac{1}{6}\left(2\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle - \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle\right), \tag{29}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle = 0, \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle = 0, \tag{30}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle = \frac{1}{6}\left(\left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle - 2\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle\right), \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}_1^{[2,1]}\left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle = \frac{1}{6}\left(\left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle - 2\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle\right). \tag{31}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\left|\uparrow\uparrow\uparrow\right\rangle = 0, \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\left|\downarrow\downarrow\downarrow\right\rangle = 0, \tag{32}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle = 0, \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle = 0, \tag{33}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle = \frac{1}{6}\left(2\left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle - \left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle\right), \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle = \frac{1}{6}\left(2\left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle - \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle\right), \tag{34}$$

$$\frac{1}{3!}\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle = \frac{1}{6}\left(\left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle + \left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle - 2\left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle\right), \quad \frac{1}{3!}\mathcal{Y}_2^{[2,1]}\left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle = \frac{1}{6}\left(\left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle - 2\left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle\right). \tag{35}$$

从而

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_1^{[2,1]} &= \mathrm{span}\{2\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle - \left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle, \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle - 2\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle\},\\ \mathcal{H}_2^{[2,1]} &= \mathrm{span}\{2\left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle - \left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle, \left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle + \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle - 2\left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle\}.\end{aligned} \tag{36}$$

可以看到，$\mathcal{H}^{[3]}$ 子空间就是总角动量 $j = 3/2$ 对应的子空间，而 $\mathcal{H}_1^{[2,1]}$ 和 $\mathcal{H}_2^{[2,1]}$ 子空间均为总角动量 $j = 1/2$ 对应的子空间。$\mathcal{H}_1^{[2,1]}$ 和 $\mathcal{H}_2^{[2,1]}$ 这两个子空间并不正交，但它们直和后可以重新选取一组正交基，比如

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{[2,1]} &= \mathcal{H}_1^{[2,1]} \oplus \mathcal{H}_2^{[2,1]}\\ &= \mathrm{span}\{2\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle - \left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle, \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle - 2\left|\downarrow\downarrow\uparrow\right\rangle, \left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle - \left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle, \left|\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\uparrow\downarrow\downarrow\right\rangle\}.\end{aligned} \tag{37}$$

显然这四个正交基中的前两个和后两个依然分别构成 $\mathfrak{su}(2)$ 的 $j = 1/2$ 的表示空间。综上，对于三粒子的情况，态矢空间按照杨图 $[\lambda] = [3], [2,1]$ 约化与按照总角动量 $j = 3/2.1/2$ 约化结果相同，

$$\mathcal{H}^{[3]} = \mathcal{H}^{j=3/2}, \quad \mathcal{H}^{[2,1]} = \mathcal{H}^{j=1/2}. \tag{38}$$

相应的，哈密顿量的分块结果也相同。

4 dim $\mathcal{V}=2$ 情况的证明

上一小节中展示了自旋 1/2、粒子数 $N=2,3$ 时态矢的约化，结果表明按照 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 约化与按照 $\mathfrak{su}(2)$ 约化所得相同。本节对自旋 1/2、任意粒子数 N 的情况来证明这一点。

首先，和上一小节相同，注意到自旋 1/2 意味着三个粒子中至少两个粒子自旋朝向是相同的，故对于有三行及以上行数的杨图对应的杨算符, 态矢空间在其上的投影为 0，在下文中不考虑。从而要考虑的杨算符为

$$\mathcal{Y}^{[\lambda]}=\mathcal{Y}^{[N]},\mathcal{Y}_{\mu}^{[N-1,1]},\cdots,\mathcal{Y}_{\mu}^{[N-[N/2]+1,[N/2]-1]},\mathcal{Y}_{\mu}^{[N-[N/2],[N/2]]},\tag{39}$$

其中 $[N/2]$ 表示对 $N/2$ 向下取整。杨图 $[N-K,K]$ 对应的正则杨表的个数可以由钩形数规则方便地计算出来，

$$\begin{aligned}d_{[\lambda]}&=\frac{N!}{1\times2\times\cdots\times(N-2K)\times(N-2K+2)\times\cdots\times(N-K)\times(N-K+1)\times K!}\\&=\frac{N!}{1\times2\times\cdots\times(N-K)\times K!}\frac{N-2K+1}{N-K+1}\\&=\frac{N!}{(N-K)!K!}\frac{N-2K+1}{N-K+1}\\&=C_N^K\frac{N-2K+1}{N-K+1}\\&=C_N^K-C_N^{K-1}.\end{aligned}\tag{40}$$

不同同一杨图不同杨表对应的杨算符的投影之间线性无关（虽然并不正交），并且可以由置换联系起来，故存在维数关系

$$\begin{aligned}\dim\mathcal{H}^{[N-K,K]}&=\dim\bigoplus_{\mu}\mathcal{Y}_{\mu}^{[N-K,K]}\mathcal{H}\\&=(C_N^K-C_N^{K-1})\dim\mathcal{Y}_1^{[N-K,K]}\mathcal{H}.\end{aligned}\tag{41}$$

定义 $\mathcal{U}^q$ 为所有总角动量 z 分量为 q 的基矢的集合，每个基矢具有 $N/2+q$ 个向上自旋、$N/2-q$ 个向下自旋。下面要证明可以找到态矢 $|\psi\rangle\in\operatorname{span}\{\mathcal{U}^{N/2-1}\}$ 满足 $\mathcal{Y}_1^{[N-1,1]}|\psi\rangle\neq0$。考虑如下态矢，

$$|\psi\rangle=|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle_{\text{else}}\otimes(|\uparrow\downarrow\rangle_{1,N}-|\downarrow\uparrow\rangle_{1,N}),\tag{42}$$

其中态矢的下标表示粒子编号。由于 $\mathcal{Y}_1^{[N-1,1]}$ 的列置换为 $(E-(1\ N))$，故列置换作用到 $|\psi\rangle$ 上正比于 $|\psi\rangle$，非零。而剩下的行置换均为正号，并且不会改变第 N 个粒子的自旋指向，故含 $|\uparrow\rangle_N$ 的分量与含 $|\downarrow\rangle_N$ 的分量无法消去，最终结果非零。类似的方法可以证明存在态矢 $|\psi\rangle\in\operatorname{span}\{\mathcal{U}^{N/2-2}\}$ 满足 $\mathcal{Y}_1^{[N-2,2]}|\psi\rangle\neq0$。考虑态矢

$$|\psi\rangle=|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle_{\text{else}}\otimes(|\uparrow\downarrow\rangle_{1,N-1}-|\downarrow\uparrow\rangle_{1,N-1})\otimes(|\uparrow\downarrow\rangle_{2,N}-|\downarrow\uparrow\rangle_{2,N}),\tag{43}$$

$\mathcal{Y}_1^{[N-2,2]}$ 列置换的结果正比于 $|\psi\rangle$，而行置换均为正号，无法消去含 $|\uparrow\uparrow\rangle_{N-1,N}$ 的分量与含 $|\downarrow\downarrow\rangle_{N-1,N}$ 的分量，从而最终结果非零。按同样的方式一直构造下去，可以发现总是存在 $|\psi\rangle\in\operatorname{span}\{\mathcal{U}^{N/2-K}\}$ 满足 $\mathcal{Y}_1^{[N-K,K]}|\psi\rangle\neq0$，

$$|\psi\rangle=|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle_{\text{else}}\otimes(|\uparrow\downarrow\rangle_{1,N-K+1}-|\downarrow\uparrow\rangle_{1,N-K+1})\otimes\cdots\otimes(|\uparrow\downarrow\rangle_{K,N}-|\downarrow\uparrow\rangle_{K,N}).\tag{44}$$

注意到上述构造的 $|\psi\rangle$ 中，除去反对称部分之外，是自旋向上的全对称部分。现在考虑总角动量 z 分量下降算符 M^- 作用到 $|\psi\rangle$ 上得到的态矢 $|\phi\rangle$，容易发现，此时它的反对称部分不变，全对称部分总角动量 z 分量减少 1，但仍是全对称的。按照与上文完全一致的推理，不难证明 $\mathcal{Y}_1^{[N-K,K]}|\phi\rangle\neq0$。继续用

M^- 作用，由于 $|\psi\rangle$ 是总角动量为 $(N/2-K)$ 的态矢，于是在 $\mathcal{Y}_1^{[N-K,K]}\mathcal{H}$ 子空间中至少包含了 $|\psi\rangle$ 以及剩余用 M^- 任意次作用后得到的共 $(N-2K+1)$ 个正交的态矢，从而

$$\dim \mathcal{Y}_1^{[N-K,K]}\mathcal{H} \geq N-2K+1, \tag{45}$$

于是有维数关系

$$\dim \mathcal{H}^{[N-K,K]} \geq (C_N^K - C_N^{K-1})(N-2K+1). \tag{46}$$

这意味着

$$2^N = \dim \mathcal{H} \geq \sum_{K=0}^{[N/2]} (C_N^K - C_N^{K-1})(N-2K+1). \tag{47}$$

接下来将利用一个组合数关系 [2] 证明等号刚好取到。由于

$$\begin{aligned}\sum_{K=0}^{[N/2]} \left(C_N^K - C_N^{K-1}\right)(N+1-2K) &= \sum_{K=0}^{[N/2]} C_N^K (N+1-2K) - \sum_{K=0}^{[N/2]} C_N^{K-1}(N+1-2K) \\ &= \sum_{K=0}^{[N/2]} C_N^K (N+1-2K) - \sum_{K=0}^{[N/2]-1} C_N^K (N-1-2K) \\ &= C_N^{[N/2]}(N+1-2[N/2]) + 2\sum_{K=0}^{[N/2]-1} C_N^K,\end{aligned} \tag{48}$$

注意到组合数恒等式

$$\sum_{K=0}^{N} C_N^K = 2^N, \tag{49}$$

由于 $C_N^K = C_N^{N-K}$，故容易得到，N 为奇数或偶数时，

$$\sum_{K=0}^{[N/2]} C_N^K = \begin{cases} 2^{N-1}, & N \bmod 2 = 1 \\ 2^{N-1} + \frac{1}{2}C_N^{[N/2]}, & N \bmod 2 = 0 \end{cases}. \tag{50}$$

于是 (48) 式可以化简，

$$\begin{aligned}\sum_{K=0}^{[N/2]} \left(C_N^K - C_N^{K-1}\right)(N+1-2K) &= C_N^{[N/2]}(N+1-2[N/2]) + 2\sum_{K=0}^{[N/2]-1} C_N^K \\ &= \begin{cases} 2C_N^{[N/2]} + 2\sum_{K=0}^{[N/2]-1} C_N^K, & N \bmod 2 = 1 \\ C_N^{[N/2]} + 2\sum_{K=0}^{[N/2]-1} C_N^K, & N \bmod 2 = 0 \end{cases} \\ &= \begin{cases} 2\sum_{K=0}^{[N/2]} C_N^K, & N \bmod 2 = 1 \\ -C_N^{[N/2]} + 2\sum_{K=0}^{[N/2]} C_N^K, & N \bmod 2 = 0 \end{cases} \\ &= \begin{cases} 2\times 2^{N-1}, & N \bmod 2 = 1 \\ 2\times 2^{N-1}, & N \bmod 2 = 0 \end{cases} \\ &= 2^N.\end{aligned} \tag{51}$$

故对任意 K，(45) 式等号都能取到，$\mathcal{H}^{[N-K,K]}$ 中仅包含总角动量为 $(N/2-K)$ 的态矢。态矢空间按照 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 不可约表示约化与按照 $\mathfrak{su}(2)$ 不可约表示约化的结果相同。满足置换对称性的哈密顿量也是如此。

5 dim $\mathcal{V}=n$ 情况的证明

上一小节 dim $\mathcal{V}=2$ 的证明依赖于特殊的构造，以及 $\mathfrak{su}(2)$ 中不同的不可约表示对应不同的总角动量这一知识。下面用不同的方法对 dim $\mathcal{V}=n$ 的情况进行证明。

首先多体态矢空间用置换群约化之后，置换群代数 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 在这组基上的表示可以写为

$$\mathbb{C}\mathfrak{S}_N=\bigoplus_{[\lambda]} I_{m_{[\lambda]}}\otimes\mathcal{L}(\mathcal{H}_1^{[\lambda]}),\tag{52}$$

其中 $m_{[\lambda]}$ 是 $[\lambda]$ 不可约表示的重数，$\mathcal{L}(\mathcal{H}_1^{[\lambda]})$ 是作用在不变子空间 $\mathcal{H}_1^{[\lambda]}$ 上的任意线性算符（由各种置换算符的 $d_{[\lambda]}$ 不可约表示线性组合得到）。定义与置换群代数 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 中任何的算符对易的，作用在 $\mathcal{V}^{\otimes N}$ 的算符构成的代数 $\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$,

$$\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)=\left\{A\in\mathcal{L}(\mathcal{V}^{\otimes N})|\forall\tau\in\mathbb{C}\mathfrak{S}_N,[A,\tau]=0\right\}.\tag{53}$$

下面计算 $\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$ 在这组基下的表示。由于与 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 对易，故和哈密顿量一样，$\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$ 可以写成按 $[\lambda]$ 分块对角的形式，

$$\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)=\bigoplus_{[\lambda]}\mathcal{L}'(\mathcal{H}^{[\lambda]}).\tag{54}$$

于是 $\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$ 中任意算符与 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 中任何算符的对易可以放到各个 $[\lambda]$ 块中考虑, 即

$$[A,A']=0,\quad\forall A\in I_{m_{[\lambda]}}\otimes\mathcal{L}(\mathcal{H}_1^{[\lambda]}),A'\in\mathcal{L}'(\mathcal{H}^{[\lambda]}).\tag{55}$$

由于 $A\in I_{m_{[\lambda]}}\otimes\mathcal{L}(\mathcal{H}_1^{[\lambda]})$，选取 $\mathcal{H}^{[\lambda]}$ 的基矢为直积的形式 $|e_i\rangle|g_j\rangle$，使得 A 在这组基下可以写为

$$A=\sum_i|e_i\rangle\langle e_i|\otimes\sum_{lm}A_{lm}|g_l\rangle\langle g_m|.\tag{56}$$

A' 算符相应写为

$$A'=\sum_{ijlm}A'_{ij,lm}|e_i\rangle\langle e_j|\otimes|g_l\rangle\langle g_m|.\tag{57}$$

A_{lm} 的任意性允许我们取 $A_{lm}=\delta_{l1}\delta_{m1}$，则对易子可以写为

$$[A,A']=\sum_{ijlm}A'_{ij,lm}|e_i\rangle\langle e_j|\otimes(|g_1\rangle\langle g_m|-|g_j\rangle\langle g_1|)=0\tag{58}$$

这说明 $m\neq1$ 或 $l\neq1$ 时，$A'_{ij,1m}=A'_{ij,l1}=0$。继续取 $A_{lm}=\delta_{l2}\delta_{m2},\delta_{l3}\delta_{m3},\cdots$ 同样的推理最终可以得到 $A'_{ij,lm}|_{l\neq m}=0$，故 A' 算符可以写为

$$A'=\sum_{ijm}A'_{ijm}|e_i\rangle\langle e_j|\otimes|g_m\rangle\langle g_m|.\tag{59}$$

现在取 $A_{lm}=\delta_{l1}\delta_{m1}+\delta_{l2}\delta_{m1}+\delta_{l1}\delta_{m2}+\delta_{l2}\delta_{m2}$，代入对易子中得到

$$[A,A']=\sum_{ij}|e_i\rangle\langle e_j|\otimes\left[(A'_{ij1}-A'_{ij2})|g_1\rangle\langle g_2|-(A'_{ij1}-A'_{ij2})|g_2\rangle\langle g_1|\right]=0,\tag{60}$$

于是有 $A'_{ij1}=A'_{ij2}$。继续取 $A_{lm}=\delta_{l1}\delta_{m1}+\delta_{l3}\delta_{m1}+\delta_{l1}\delta_{m3}+\delta_{l3}\delta_{m3},\delta_{l1}\delta_{m1}+\delta_{l4}\delta_{m1}+\delta_{l1}\delta_{m4}+\delta_{l4}\delta_{m4},\cdots$ 相同的分析最终可以得到 $A'_{ij1}=A'_{ij2}=\cdots=A'_{ij}$，$A'$ 算符可以写为

$$A'=\sum_{ij}A'_{ij}|e_i\rangle\langle e_j|\otimes\sum_m|g_m\rangle\langle g_m|.\tag{61}$$

从而

$$\mathcal{L}'(\mathcal{H}^{[\lambda]})=\mathcal{L}'(\mathcal{H}_{m_{[\lambda]}})\otimes I_{d_{[\lambda]}},\tag{62}$$

$$\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)=\bigoplus_{[\lambda]}\mathcal{L}'(\mathcal{H}_{m_{[\lambda]}})\otimes I_{d_{[\lambda]}}.\tag{63}$$

其中 $\mathcal{L}'(\mathcal{H}_{m_{[\lambda]}})$ 指的是 $m_{[\lambda]}$ 维的态矢空间。由 $\mathcal{L}'(\mathcal{H}_{m_{[\lambda]}})$ 的任意性，$\mathcal{L}'(\mathcal{H}_{m_{[\lambda]}})$ 是 $\mathcal{H}_{m_{[\lambda]}}$ 上的不可约表示，$\mathcal{L}'(\mathcal{H}^{[\lambda]})$ 是 $\mathcal{H}^{[\lambda]}$ 上重数为 $d_{[\lambda]}$ 的表示。(63) 式中 $\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$ 的每个 $[\lambda]$ 分块中只包含一种不可约表示，将按照 $[\lambda]$ 分块的总块数记为 B，按照 $\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$ 的不可约表示分块的总块数记为 B_c，由于不同的 $[\lambda]$ 块中可能是同种不可约表示，故 $B\geq B_c$。

注意 (63) 式与 (52) 式有类似的结构，事实上与前文类似的过程可以证明

$$\mathrm{comm}(\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N))=\mathbb{C}\mathfrak{S}_N.\tag{64}$$

于是可以有 $B\leq B_c$，进而有 $B=B_c$。也就是说不同的 $[\lambda]$ 分块中包含着 $\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$ 的不同的不可约表示，按照 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 的不可约表示约化的结果与按照 $\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$ 的不可约表示约化的结果相同。

$\mathfrak{su}(n)$ 由 (4) 式所示生成元 $M^{(p)}$ 生成。现在定义另一个算符的线性空间 $\mathfrak{su}'(n)$，$\mathfrak{su}'(n)$ 为单位阵以及生成元 $M^{(p)}$ 的任意乘积项张成的线性空间（由于在态矢空间的表示矩阵的矩阵元个数 $N^n\times N^n$ 为是有限值，故这是有限维线性空间）。容易看出作为线性空间 $\mathfrak{su}(n)\subset\mathfrak{su}'(n)$，经 $\mathfrak{su}(n)$ 约化后的不同不可约表示的不变子空间在 $\mathfrak{su}'(n)$ 变换下（包含更多变换元素）可能会联系起来。不过因为 $\mathfrak{su}(n)$ 不可约表示由生成元的不可约表示决定的，假设用于约化的相似变换矩阵为 X，$X^{-1}M^{(p)}X$ 是约化后分块的矩阵，注意到相似变换矩阵 X 在生成元乘积项上的作用为 $X^{-1}M^{(p_1)}M^{(p_2)}\cdots M^{(p_n)}X=X^{-1}M^{(p_1)}XX^{-1}M^{(p_2)}X\cdots X^{-1}M^{(p_n)}X$，从而在同样的相似变换下，不同不可约表示的不变子空间并不会联系起来。同时又由于单位阵的存在并不会影响约化过程，故按照 $\mathfrak{su}'(n)$ 与 $\mathfrak{su}(n)$ 的约化结果相同。

最后我们用归纳法 [3] 证明 $\mathfrak{su}'(n)=\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$，从而证明 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 与 $\mathfrak{su}'(n)$ 的约化结果相同。首先由生成元 $M^{(p)}$ 的定义 (4) 式可知，$M^{(p)}$ 及其任意乘积与任意置换对易，单位阵也与任意置换对易，故 $\mathfrak{su}'(n)\subset\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$。

现在证明 $\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)\subset\mathfrak{su}'(n)$。$\forall A\in\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$，注意到 $\mathcal{V}^{\otimes N}$ 上的算符 A 可以用单位阵与单粒子生成元展开（$\mathcal{V}$ 上的单位阵与单粒子生成元构成矩阵完备基），而单位阵属于 $\mathfrak{su}'(n)$，故证 $A\in\mathfrak{su}'(n)$ 等价于证 $(A-\mathrm{Tr}A)\in\mathfrak{su}'(n)$，下面只需考虑 A 为迹零矩阵的情形。写出 A 的展开式，

$$A=\sum_{n=1}^{N}\sum_{p_1\ldots p_n}\sum_{j_1<j_2<\cdots<j_n}c^{(n)}_{\vec{j},\vec{p}}\sigma^{(p_1)}_{j_1}\cdots\sigma^{(p_n)}_{j_n},\tag{65}$$

其中 $c^{(n)}_{\vec{j},\vec{p}}$ 为系数。由于对易关系 $[A,\tau]=0,\forall\hat{\tau}\in\mathfrak{S}_N$，我们可以得到 $\tau^{-1}A\tau=0$，

$$\begin{aligned}A&=\frac{1}{N!}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\tau^{-1}A\tau\\&=\sum_{n=1}^{N}\sum_{p_1\ldots p_n}\sum_{j_1<j_2<\cdots<j_n}c^{(n)}_{\vec{j},\vec{p}}\left(\frac{1}{N!}\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\sigma^{(p_1)}_{\tau(j_1)}\cdots\sigma^{(p_n)}_{\tau(j_n)}\right)\\&=\sum_{n=1}^{N}\sum_{p_1\ldots p_n}\left(\sum_{j_1<j_2<\cdots<j_n}c^{(n)}_{\vec{j},\vec{p}}\right)\frac{1}{N!}\left(\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\sigma^{(p_1)}_{\tau(1)}\cdots\sigma^{(p_n)}_{\tau(n)}\right).\end{aligned}\tag{66}$$

若上式第二个括号中的求和项是 $\mathfrak{su}'(n)$ 中的元素，那么 A 是 $\mathfrak{su}'(n)$ 中的元素。现在就用归纳法来证明

$$\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N}\sigma^{(p_1)}_{\tau(1)}\cdots\sigma^{(p_n)}_{\tau(n)}\in\mathfrak{su}\,(n)\,.\tag{67}$$

单粒子生成元乘积项长度 $m = 1$ 时，显然有

$$\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N} \hat{\sigma}_{\tau(1)}^{(p_1)} = (N-1)!\hat{M}^{(p_1)} \in \mathfrak{su}'(n)\,. \tag{68}$$

假设对于 $m < m_0$ 时下式均成立，

$$\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N} \sigma_{\tau(1)}^{(p_1)} \cdots \sigma_{\tau(m)}^{(p_m)} \in \mathfrak{su}'(n)\,, \tag{69}$$

则当 $m = m_0$ 时，由关系

$$\begin{aligned} M^{(p_1)} \cdots M^{(p_{m_0})} &= \sum_{j_1\cdots j_{m_0}} \sigma_{j_1}^{(p_1)} \cdots \sigma_{j_{m_0}}^{(p_{m_0})} \\ &= \sum_{\substack{j_1\cdots j_{m_0}\\ \forall\alpha\neq\beta, j_\alpha\neq j_\beta}} \sigma_{j_1}^{(p_1)} \cdots \sigma_{j_{m_0}}^{(p_{n_0})} + Lm_0 \\ &= \sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N} \sigma_{\tau(1)}^{(p_1)} \cdots \sigma_{\tau(m_0)}^{(p_{m_0})} + Lm_0, \end{aligned} \tag{70}$$

其中 Lm_0 来自于 $j_\alpha = j_\beta$ 的情形。由于等号左边与等号右边第一项置换对称，类似于 (66) 式的推导，可以发现 Lm_0 是单粒子生成元乘积项长度小于 m_0 的项，由归纳假设，$Lm_0 \in \mathfrak{su}'(n)$，故

$$\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N} \sigma_{\tau(1)}^{(p_1)} \cdots \sigma_{\tau(n_0)}^{(p_{m_0})} = M^{(p_1)} M^{(p_2)} \cdots M^{(p_{m_0})} - Lm_0 \in \mathfrak{su}'(n)\,. \tag{71}$$

于是 $\forall m$，$\sum_{\tau\in\mathfrak{S}_N} \sigma_{\tau(1)}^{(p_1)} \cdots \sigma_{\tau(m)}^{(p_m)} \in \mathfrak{su}'(n)$，从而 $\forall A \in \mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$，$A \in \mathfrak{su}'(n)$。故 $\mathfrak{su}'(n) = \mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$。

最终我们得出结论，多体态矢空间按 $\mathrm{comm}(\mathbb{C}\mathfrak{S}_N)$ 不可约表示约化的结果与按 $\mathfrak{su}'(n)$ 不可约表示约化的结果，也即按 $\mathbb{C}\mathfrak{S}_N$ 不可约表示约化的结果与按 $\mathfrak{su}(n)$ 不可约表示约化的结果，是相同的。满足置换对称性的哈密顿量在两种方式下的约化结果相应也一致。

参考文献

[1] 马中骐. *物理学中的群论 (第二版)*. 科学出版社, 2006.

[2] Victor Bapst and Guilhem Semerjian. On quantum mean-field models and their quantum annealing. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2012(06):P06007, Jun 2012.

[3] Shoki Sugimoto, Ryusuke Hamazaki, and Masahito Ueda. Eigenstate thermalization in long-range interacting systems. *Phys. Rev. Lett.*, 129:030602, Jul 2022.