

О непереполненном базисе скалярных и смешанных произведений сигма-матриц

Олег Лычковский, Филипп Усков

21 сентября 2020 г.

Аннотация

Исследуется вопрос полном вращательно-инвариантном операторном базисе для спиновых систем. Вопрос важен для оценки энергии основного состояния в купратах.

1 Введение

Есть купраты (антиферромагнетики). У них гамильтониан вот такой:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j$$

где $\langle i,j \rangle$ означает соседние спины в решетке, как на рис. 1,2

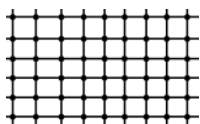


Рис. 1: 2d квадратная решетка.

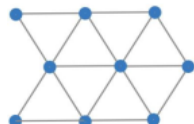


Рис. 2: 2d треугольная решетка.

И важно находить энергию основного состояния (на один спин). Оценить эту энергию сверху можно по формуле $E_{gs} \leq \langle \Psi | H | \Psi \rangle$. Оценить снизу можно разбивая кристалл на кластеры[3], а также вариационно [2]

$$E_{gs \text{ full}}/N = \frac{d}{m} E_{gs \text{ cl}}$$

где

- N - количество спинов в решетке
- M - количество кластеров
- d - количество связей на 1 спин
- m - количество связей в кластере

$$M = \frac{Nd}{m}$$

Энергию основного состояния кластера можно находить из уравнения Шредингера

$$H\rho = E\rho$$

На ρ как на матрицу плотности накладываются ограничения: самосопряженность, единичный след, неотрицательность.

$$\rho^+ = \rho; \quad \text{tr } \rho = 1; \quad \rho \geq 0$$

Этого можно добиться введя параметр τ :

$$\rho = \frac{\tau^2}{\text{tr } \tau^2}; \quad \tau^+ = \tau$$

где на τ накладывается только самосопряженность.

Далее мы вводим базис для τ , и раскладываем ее по нему.

$$\tau = b_i A_i$$

Поскольку система сферически симметрична, то в качестве базисных элементов можно выбрать всевозможные произведения скалярных и смешанных произведений сигма-матриц, а т.к. система еще симметрична по обращению времени, то можно оставить только скалярные произведения.

$$A_i = \{1, (\sigma_j \sigma_k), (\sigma_j \sigma_k)(\sigma_l \sigma_m), \dots\}$$

Этот базис не только не ортогонален, но и переполнен.

2 Цель и ход работы

Мы захотели получить этот базис в непереполенном виде, чтобы немного сократить объем вычислений.

Мы решили посчитать сколько же на самом деле линейнонезависимых векторов в нашем базисе для небольшого числа спинов, нашли эту последовательность на OEIS, и нашли статью, которая описывает, как строить непереполенный базис, и вот что там говорится:

3 Построение непереполенного базиса [1]

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

Столбец длины 3 мы интерпретируем как смешанное произведение.

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = (\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_3)$$

Пару столбцов мы интерпретируем как определитель скалярных произведений (или, что то же самое, обобщенный символ Кронекера).

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

в частности

пара столбцов длины 1 это просто скалярное произведение

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

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

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

В базис войдут элементы, удовлетворяющие следующим критериям:

- 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, длины столбцов в каждой паре совпадают
- Для нечетного числа спинов:
 - в начале таблички добавляется столбец длины 3
 - оставшиеся N-3 ячейки делаем как для четного числа
- после чего заполняем эти табличками различающимися номерами спинов так, чтобы каждая строка и каждый столбец был отсортирован

Была написана функция [4], которая генерирует все возможные элементы базиса, и их число совпало с формулой из статьи

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

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

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 5 \\ \hline 2 & 6 \\ \hline 3 & 7 \\ \hline 4 & 8 \\ \hline \end{array} = 0.$$

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

$$N_n = \begin{cases} \frac{n!}{2^{n/2}(n/2)!} & (n = 2k) \\ \frac{n!}{32^{(n-1)/2}((n-3)/2)!} & (n = 2k + 1) \end{cases}$$

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

4 Планы применения непереполненного базиса к уравнению Шредингера

Если вернуться к исходной задаче $H\rho = E\rho$, то нам требуется 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 [2]. Для нового непереполненного базиса это сделать пока не удалось (так чтобы не 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, 1977
- [2] Filipp Uskov, Oleg Lychkovskiy, A variational lower bound on the ground state of a many-body system and the squaring parametrization of density matrices, 2018
- [3] Anderson PW 1951 Limits on the energy of the antiferromagnetic Ground State *Phys. Rev.* **83(6)** 1260
- [4] <https://github.com/FeelUsM/ScalarMixedSpins/blob/master/tables.nb>
- [5] Filipp Uskov, Oleg Lychkovskiy, A variational lower bound on the ground state of a many-body system and the squaring parametrization of density matrices,
- [6] Anderson PW 1951 Limits on the energy of the antiferromagnetic Ground State *Phys. Rev.* **83(6)** 1260
- [7] P. Grabowski and Pierre Mathieu, Quantum Integrals of Motion for the Heisenberg Spin Chain, LAVAL-PHY-94-20