О непереполненном базисе скалярных и смешанных произведений сигма-матриц

Олег Лычковский, Филипп Усков

21 сентября 2020 г.

Аннотация

Исследуется вопрос о полном вращательно-инвариантном операторном базисе для спиновых систем.

1 Введение

Есть антиферромагнетики. У них гамильтониан вот такой:

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

где $< i, j >$ означает соседние спины в решетке, как на рис. 1,2

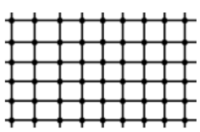

Рис. 1: 2d квадратная решетка.

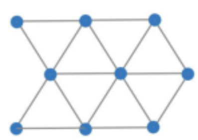

Рис. 2: 2d треугольная решетка.

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

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

где

- N - количество спинов в решетке
- M - количество кластров
- 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.

$$\rho^+ = \rho; \qquad \operatorname{tr}\rho = 1; \qquad \rho \geqslant 0$$

Этого можно добиться введя параметр тау:

$$\rho = \frac{\tau^2}{\operatorname{tr}\tau^2}; \qquad \tau^+ = \tau$$

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.

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

Этот базис не только не ортогонален, но и переполнен.

2 Цель и ход работы

Мы захотели получить этот базис в непереполненном 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 непереполненный базис, и вот что там говориться:

3 Построение непереполненного базиса [1]

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

Столбец длины 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 скалярных произведений (или, что то же самое, обобщенный символ Кронекера, свёрнутый со всеми векторами сигма-матриц).

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

например

пара столбцов длины 1 это просто скалярное произведение

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

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:

- 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, 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 (например по возрастанию номера спина)

Была написана функция [4], которая генерирует все возможные элементы базиса, и их число совпало с формулой из статьи[1]

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

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

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

Был замечен факт, что если для четного числа спинов сгенерировать все возможные таблички без ограничения числа строк в 3 строки, то их общее число оказалось равно количеству элементов нашего исходного переполненного базиса

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

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.

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