Системы спинов 1/2 с изотропным Гайзенберговским взаимодействием: параметризация матрицы плотности, вариационный метод, точная диагонализация

Faculty of Physics of MSU

Филипп Усков (fel1992@mail.ru)
МГУ им. Ломоносова, Сколтех

Skoltech
Skolkovo Institute of Science and Technology

26.04.2018

Научные руководители:
Лычковский Олег Валентинович (Сколтех, РКЦ, МИАН)

Содержание

- Описание модели, задача
- Методы решения
- Параметризация матрицы плотности
  - Символьное умножение матриц
  - Скалярное произведение матриц
  - Переполненность базиса
- Уравнение Шредингера
  - УШ: генерация ρ
- Вариационный метод
  - Вар. метод: генерация ρ
- Сравнение результатов
- Выводы

Описание модели, задача

Системы с Гайзенберговским взаимодействием (модель Изинга):

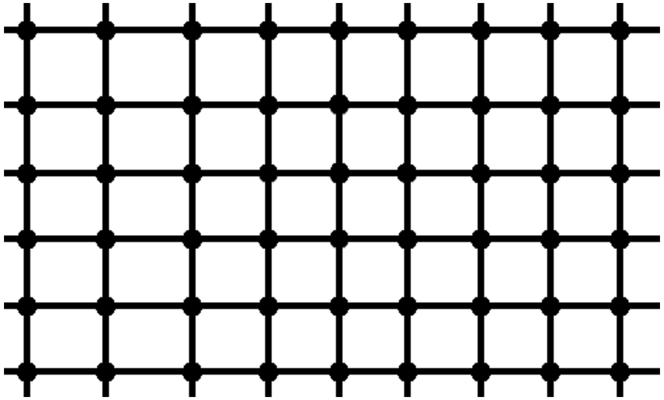
$$H = J \sum_{<i,j>} (\boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_j)$$

$< i, j >$ – соседние частицы

$$(\boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_j) \quad = \delta^{\alpha\beta} \cdot \sigma_i^\alpha \sigma_j^\beta$$

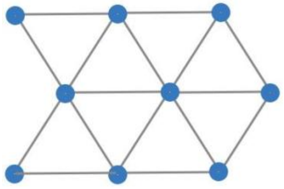
$$(\boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_j \boldsymbol{\sigma}_k) = \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \cdot \sigma_i^\alpha \sigma_j^\beta \sigma_k^\gamma$$

$$\alpha, \beta, \gamma \in \{x, y, z\}$$



Антиферромагнетики:
Пример 1d: $Sr_2Cu(PO_4)_2$
Примеры 2d: La_2CuO_4
YBa_2CuO_6

Спиновые жидкости:
Herbertsmithite $ZnCu_3(OH)_6Cl_2$



$$? \leqslant E_{gs} \leqslant \langle \psi | H | \psi \rangle$$

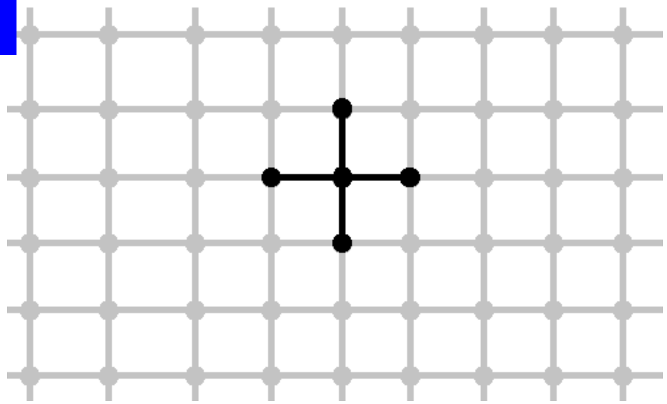
наша задача   известный

вариационный метод

Методы решения

Через энергию основного состояния подсистем

$$H_{full} = \sum_{i=1}^{M} H_{i\,cl} \quad \Rightarrow \quad E_{gs\ full} \geqslant \sum_{i=1}^{M} E_{i\ gs\ cl}$$



$$\boxed{E_{gs\ full} / N \geqslant \frac{d}{m} E_{gs\ cl}; \qquad H_{cl}\rho_{cl} = E_{cl}\rho_{cl}}$$

R. Tarrah, R. Valenti
Exact lower bounds to the ground state of spin systems: The two-dimensional
S = 1/2 antiferromagnetic Geisenberg model *Physical review B , 1990.*

P. W. Anderson
Limits on the Energy of the Antiferromagnetic Ground State
Letters to the editor 1951

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

N – кол-во спинов в кристалле

M – кол-во кластеров

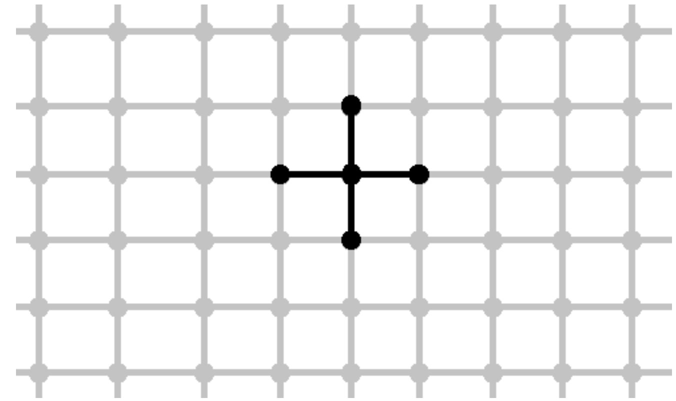
d – размерность кристалла

m – кол-во связей в кластере

Методы решения

Вариационный метод

Tillmann Baumgratz1 and Martin B Plenio
Lower bounds for ground states of condensed matter systems
New Journal of Physics 14 (2012) 023027 (21pp)



David A. Mazziotti
Variational minimization of atomic and molecular ground-state energies via the two-particle reduced density matrix
PHYSICAL REVIEW A, VOLUME 65, (2002) 062511

$$E_{gs\ full} = \min_{\psi}\langle\psi|H|\psi\rangle = \min_{\rho_{full}\in M_{full}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{full}} H_{full}\rho_{full} = \min_{\rho_{full}\in M^S_{full}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{full}} H_{full}\rho_{full} =$$

$$= M \min_{\rho_{full}\in M^S_{full}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{full}} H_{cl}\rho_{full} = M \min_{\rho_{full}\in M^S_{full}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{cl}}(H_{cl}\mathrm{Tr}_{\mathrm{full\text{-}cl}}\rho_{full}) =$$

$$= M \min_{\rho_{cl}\in M^{trS}_{cl}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{cl}} H_{cl}\rho_{cl} \geqslant M \min_{\rho_{cl}\in M'_{cl}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{cl}} H_{cl}\rho_{cl}$$

$$\boxed{E_{gs\ full} / N \geqslant \frac{d}{m} \min_{\rho_{cl}\in M'_{cl}} \mathrm{Tr}_{\mathrm{cl}} H_{cl}\rho_{cl};}$$

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

N – кол-во спинов в кристалле
M – кол-во кластеров
d – размерность кристалла
m – кол-во связей в кластере

Параметризация матрицы плотности

$$\rho^+ = \rho; \qquad \mathrm{Tr}\rho = 1; \qquad \langle\rho\rangle \geqslant 0 \qquad \Leftarrow \qquad \boxed{\rho = \frac{\tau^2}{\mathrm{Tr}\tau^2};} \qquad \tau^+ = \tau$$

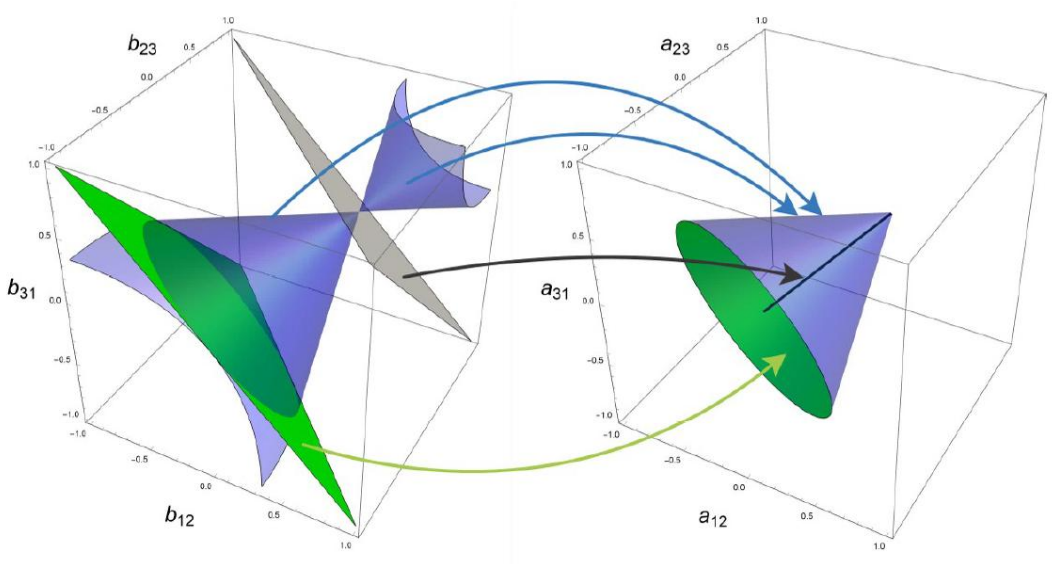
N. Il'in, E. Shpagina, F. Uskov, O. Lychkovskiy
Squaring parametrization of constrained and unconstrained sets of quantum states.
J. Phys. A: Math. Theor. 51 (2018) 085301

$$\boxed{\rho = \frac{1}{2^n} a_i A_i; \qquad \tau = b_i A_i}$$

$$\{A_i\} = \{1,\ (\boldsymbol{\sigma}_j \boldsymbol{\sigma}_k),\ (\boldsymbol{\sigma}_j \boldsymbol{\sigma}_k)(\boldsymbol{\sigma}_l \boldsymbol{\sigma}_m),\ \dots\}$$

$$b_i \in \mathbb{R}^n; \qquad \boxed{a_i = f_i(\{b\})} \in \mathbf{V} \subset \mathbb{R}^n$$

$$\partial\mathbf{V} : \det \left\| \frac{\partial a_i}{\partial b_j} \right\| = 0; \qquad \mathbf{V} - \text{выпукло.}$$



$\leftarrow$ Пример для 3 спинов $\downarrow$:

$$\rho = \frac{1}{8}(1 + a_{12}(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) + a_{23}(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3) + a_{31}(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_1))$$

$$\tau = 1 + b_{12}(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) + b_{23}(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3) + b_{31}(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_1)$$

$$a_{12} = 2\frac{b_{12} - b_{12}^2 + b_{23}b_{31}}{1 + 3(b_{12}^2 + b_{23}^2 + b_{31}^2)} \qquad (1 \to 2 \to 3 \to 1)$$

Символьное умножение матриц

Алгоритм реализован на wolfram mathematica

Входные и выходные данные задаются в виде:

$(\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j) = d(i,j) \qquad (\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_k) = t(i,j,k)$

Подразумевается спиновые индексы не равны

1) $d(i,j) \to \sigma(i;\alpha)\sigma(j;\alpha)$

$t(i,j,k) \to \varepsilon(\alpha,\beta,\gamma)\sigma(i;\alpha)\sigma(j;\beta)\sigma(k;\gamma)$

2) σ-матрицы с разными спиновыми индексами коммутирут, так что мы можем их стабильно отсортировать: например

$(\sigma(1;\mu)\sigma(3;\mu))(\sigma(1;\alpha)\sigma(3;\beta)\sigma(6;\gamma)\varepsilon(\alpha,\beta,\gamma)) =$

$= \sigma(1;\mu,\alpha)\sigma(3;\mu,\beta)\sigma(6;\gamma)\varepsilon(\alpha,\beta,\gamma)$

$\sigma(i;\alpha,\beta,\gamma\ldots) = \sigma_i^\alpha\sigma_i^\beta\sigma_i^\gamma\ldots$

3) Теперь можно применить тождество Паули:

$$\boxed{\begin{aligned}&\sigma(i;\alpha,\beta,\gamma,\ldots)\\ &\quad\to \delta(\alpha,\beta)\sigma(i;\gamma,\ldots) + i\varepsilon(\alpha,\beta,\mu)\sigma(i;\mu,\gamma,\ldots)\end{aligned}}$$

4) Теперь все σ-матрицы коммутируют, можно упростить δ и ε символы и выделить $d(i,j)$ и $t(i,j,k)$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)^2 = 3 - 2(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3) = (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3) - i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3) = -(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3) - 2i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3) + 2i(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) = -(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3) + 2i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3) - 2i(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4) = (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4) - i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4) + i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_4)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4)(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) = (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4) + i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4) - i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_4)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)^2 = 6 - 2(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) - 2(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3) - 2(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4) = &- (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4) - (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_4)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)\\ &+ 2(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4) + i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4) + i(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_5) = &+ (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4)(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_5) - (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_5)(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4)\\ &- i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_5) + i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_5)\end{aligned}$$

Скалярное произведение матриц

Алгоритм реализован на wolfram mathematica

$$(A,B) = \mathrm{Tr}(A^{+}B) = \mathrm{Tr}(AB); \qquad A^{+} = A$$

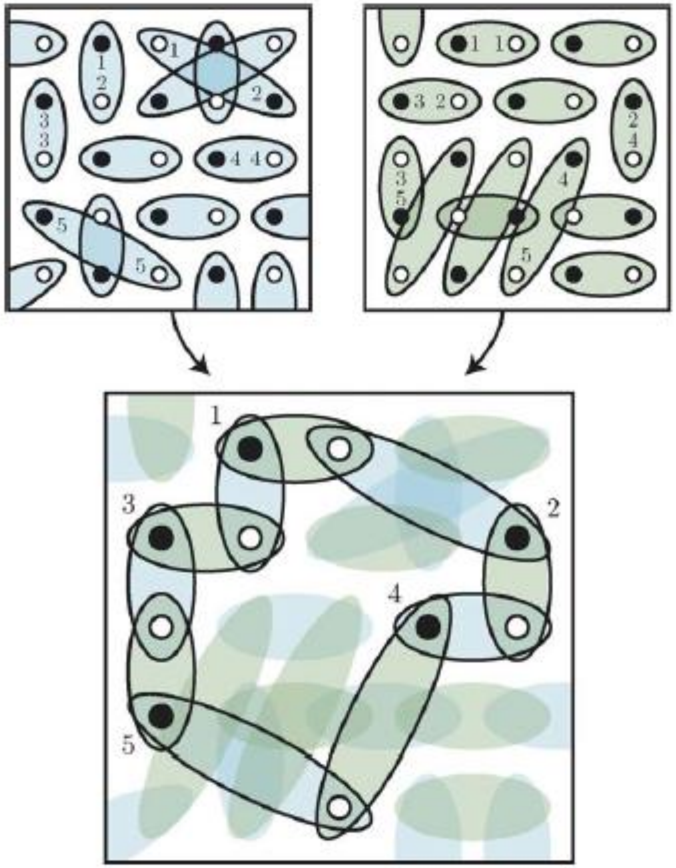
$(A,B) = 0$, если A и B содержат разные спины

$$\mathrm{Tr}(\,(\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j)(\boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_k)\ldots(\boldsymbol{\sigma}_l\boldsymbol{\sigma}_m)(\boldsymbol{\sigma}_m\boldsymbol{\sigma}_i)\,) = 3\cdot 2^n$$

$$\mathrm{Tr}(\,(\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_k)(\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_n)\,(\boldsymbol{\sigma}_k\boldsymbol{\sigma}_l)\ldots(\boldsymbol{\sigma}_m\boldsymbol{\sigma}_n)\,) =$$

$$= \mathrm{Tr}(\,(\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_k)(\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_k)\,) = 6\cdot 2^n$$

$(A,B) = 3^C\cdot 2^n$, где C - количество циклов



K.S.D. Beach, A.W. Sandvik
Some formal results for the valence bond basis
Nuclear Physics B 750 [FS] (2006) 142–178

Переполненность базиса

$A=(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4)$

$B=(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4)$

$C=(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_4)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)$

$$g=\begin{vmatrix}(AA) & (AB) & (AC)\\ (BA) & (BB) & (BC)\\ (CA) & (CB) & (CC)\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}9 & 3 & 3\\ 3 & 9 & 3\\ 3 & 3 & 9\end{vmatrix}>0$$

$$+(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_5)-(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_5)+(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_4)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_5)-(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_5)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4)=0 \qquad (1)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_5\boldsymbol{\sigma}_6)=\det\begin{vmatrix}(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_4) & (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4) & (\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4)\\ (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_5) & (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_5) & (\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_5)\\ (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_6) & (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_6) & (\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_6)\end{vmatrix} \qquad (2)$$

$$(1,2)\Rightarrow \quad \det\begin{vmatrix}(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_5) & (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_5) & (\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_5) & (\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_5)\\ (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_6) & (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_6) & (\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_6) & (\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_6)\\ (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_7) & (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_7) & (\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_7) & (\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_7)\\ (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_8) & (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_8) & (\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_8) & (\boldsymbol{\sigma}_4\boldsymbol{\sigma}_8)\end{vmatrix}=0$$

из уравнений (1 и 2) следуют все линейные зависимости в базисе

это было проверено вплоть до 10 спинов

Уравнение Шредингера

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{H\rho = E\rho} \quad \Leftrightarrow \quad H\frac{\tau^2}{\mathrm{Tr}\tau^2} = E\frac{\tau^2}{\mathrm{Tr}\tau^2} \quad \Leftarrow \quad H\tau = E\tau$$

$\{A_j\}$ - только скалярные произведения, $\rho = A_i a_i$

$\{B_j\}$ - каждое слагаемое содерждит смешанное произведение

$$H\rho = HA_j a_j = A_i h_{ij} a_j + B_i b_{ij} a_j = EA_j a_j$$

Алгоритм раскладывания векторов по базису реализован в Wolfram Mathematica

Если A_j, B_j - линейнонезависимы, то

$$\begin{cases} h_{ij} a_j = E a_i \\ b_{ij} a_j = 0 \end{cases}$$

A_i группируются на основе перестановочных симметрий H

например если $H = (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) + (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)$, то

$A_0 = 1;\qquad A_1 = ((\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) + (\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3));\qquad A_2 = (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3)$

Если

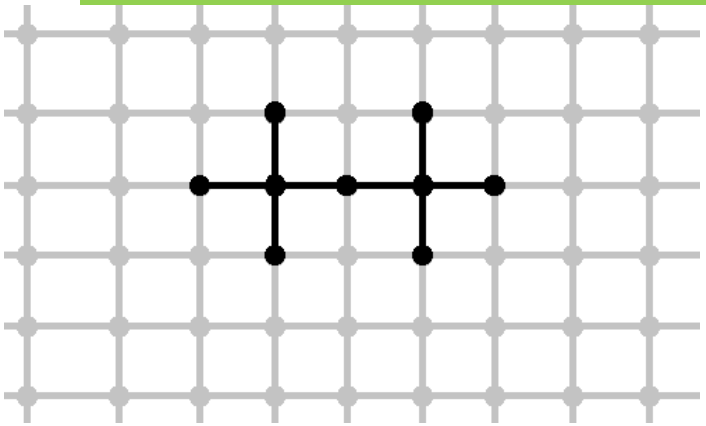
$(A_i, A_j) = g_{ij}$

$\mathrm{Tr}(A_i H A_j) = \eta_{ij}$

то

$h_{ij} = g_{ik}^{-1}\eta_{kj}$

Сравни с вар. методом



Пример:

H – матрица 512x512

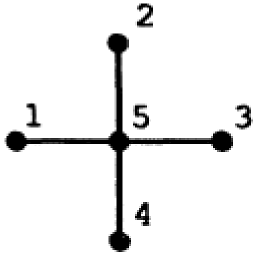
113 векторов А

62 уравнения от В

Итого ищем СЗ

у матрицы 51x51

УШ: генерация ρ



Реализован алгоритм генерации базиса A_i
на Wolfram Mathematica

A_i подчиняются симметриям кластера

```
In[161]:= doubleKrestGens5 = {swapToPerm[{4 → 5}, 5], swapToPerm[{2 → 3}, 5], swapToPerm[{3 → 4}, 5]}

Out[161]= {{1 → 1, 2 → 2, 3 → 3, 4 → 5, 5 → 4}, {1 → 1, 2 → 3, 3 → 2, 4 → 4, 5 → 5}, {1 → 1, 2 → 2, 3 → 4, 4 → 3, 5 → 5}}

In[162]:= doubleKrestGroup5 = generateGroup[doubleKrestGens5] // Keys;

In[163]:= basis51 = {1};
          AppendTo[basis51, (Plus @@ # &) /@ (KPToExpr /@ # &) /@ invariantKPsets[1, 5, doubleKrestGroup5]];
          AppendTo[basis51, (Plus @@ # &) /@ (KPToExpr /@ # &) /@ invariantKPsets[2, 5, doubleKrestGroup5]];
          basis51 = basis51 // Flatten;
          basis51 // Length

Out[167]= 5

In[168]:= basis51

          {1,
           d[1, 2] + d[1, 3] + d[1, 4] + d[1, 5],
           d[2, 3] + d[2, 4] + d[2, 5] + d[3, 4] + d[3, 5] + d[4, 5],
           d[1, 4] d[2, 3] + d[1, 5] d[2, 3] + d[1, 3] d[2, 4] + d[1, 5] d[2, 4] + d[1, 3] d[2, 5] + d[1, 4] d[2, 5] +
            d[1, 2] d[3, 4] + d[1, 5] d[3, 4] + d[1, 2] d[3, 5] + d[1, 4] d[3, 5] + d[1, 2] d[4, 5] + d[1, 3] d[4, 5],
           d[2, 5] d[3, 4] + d[2, 4] d[3, 5] + d[2, 3] d[4, 5]
          }
```

Вариационный метод

$\rho = a_i A_i, \quad a_i \in \mathbf{V}, \quad \mathbf{V}$ - выпукло, $\quad \Rightarrow \quad \exists!^{(*)} \boxed{\min \mathrm{Tr} H\rho} = \min a_i (\mathrm{Tr} H A_i)$

(*) - если не единственен, то облать минимума односвязна

$$\rho = \frac{\tau^2}{\mathrm{Tr}\tau^2}; \qquad \tau = b_i A_i$$

Метод 1:

$$\min \mathrm{Tr} H\rho = \boxed{\min_{\{b_i\}} \frac{b_i b_j}{b_l b_m} \frac{\eta_{ij}}{g_{lm}}}$$

где

$$\eta_{ij} = \mathrm{Tr}(A_i H A_j)$$

$$g_{ij} = (A_i, A_j)$$

Метод 2:

$$\min \mathrm{Tr} H\rho = \min_{\{b_i\}} b_i b_j \eta_{ij}$$

при условии $b_l b_m g_{lm} = 1$

Метод Лагранжа:

$$\Rightarrow L(\{b_k\}, \lambda) = b_i b_j (\eta_{ij} - \lambda g_{ij}) + \lambda$$

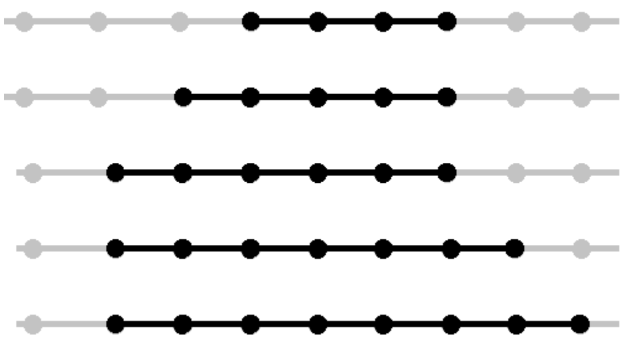
$$\Rightarrow b_i (\eta_{ik} - \lambda g_{ik}) = 0$$

$$\Leftrightarrow \; b_i (g_{ij}^{-1} \eta_{jk}) = \boxed{b_i h_{ik} = \lambda b_k}$$

$$\min_{\{b_i\}} b_i b_j \eta_{ij} = \min \lambda$$

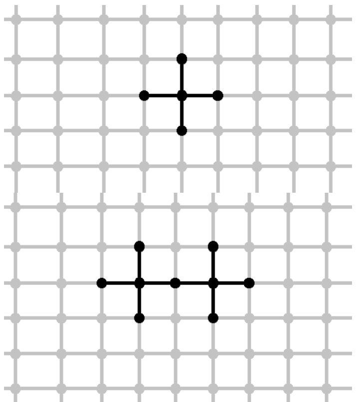
Сравнение результатов

$$E_{gs\ full} / N \geqslant$$



Одномерный случай:

Уравнение Шредингера
-2.1547
-1.92789
-1.99486
-1.89083
-1.92853



Двумерный случай:

Уравнение Шредингера
-3
-2,9685

Выводы

- Получены строгие нижние ограничения на энергию основного состояния (в расчете на один спин) в трансляционно-инвариантных спиновых системах в термодинамическом пределе.

- Рассмотренные методы позволяют одновременно учитывать все симметрии системы, в том числе не коммутирующие, в том числе в случае спонтанного нарушения симметрии в чистых квантовых состояниях

- Код доступен по адресу https://github.com/FeelUsM/ScalarMixedSpins

Спасибо за внимание

Литература:

- *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 (2018) 085301
- *R. Tarrah, R. Valenti (1990)* Exact lover bounds to the ground state of spin systems: The two-dimensional S = 1/2 antiferromagnetic Geisenberg model
  Physical review B , 1990.
- *P. W. Anderson*, Limits on the Energy of the Antiferromagnetic Ground State,
  Letters to the editor 1951
- *Tillmann Baumgratz1 and Martin B Plenio*
  Lower bounds for ground states of condensed matter systems
  New Journal of Physics 14 (2012) 023027 (21pp)
- *David A. Mazziotti*, Variational minimization of atomic and molecular ground-state energies via the two-particle reduced density matrix, *PHYSICAL REVIEW A, VOLUME 65, (2002) 062511*
- *K.S.D. Beach, A.W. Sandvik* Some formal results for the valence bond basis *Nuclear Physics B 750 [FS] (2006) 142–178*