О непереполненном базисе скалярных и смешанных произведений сигма-матриц

Олег Лычковский, Филипп Усков

14 сентября 2020 г.

Аннотация

Исследуется вопрос полном вращательно-инвариантном операторном базисе для спиновых систем. Вопрос важен для того-то и сего-то.

1 Введение

как мы писали в наших предыдущих статьях

H rho = E rho

квадратичная параметризация

базис

он переполнен

(кстати я в предыдущей статье неправильно посчитал количество элементов этого базиса)

2 Цель

Мы захотели получить этот базис в непереполненном виде, чтобы немного сократить объем вычилений.

Мы нашли статью (***) про "базис f но через год, когда мы ее всё-таки прочитали, оказалось что это вообще не имеет ни какого отношения к нашему базису.

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(***)

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).

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

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:

- каждa 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 (***), 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 сгененрировать все возможные таблички без ограничения числа строк, то их общее число оказалось равно количеству элементов нашего исходного переполненного базиса

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

откуда можно сделать вывод, что скорее всего все таблички, у которых число строк больше 4 (они =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 (***). 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)