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

Филипп Усков (fel1992@mail.ru)
МГУ им. Ломоносова, Сколтех
23.04.2018
Научные руководители:
Гердт Владимир Петрович
Лычковский Олег Валентинович

Содержание

Мотивация

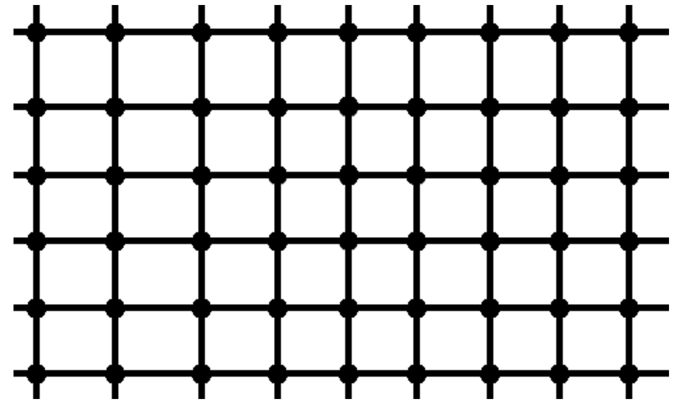
- Квантовый компьютер
- Кубиты
- Джозефсоновские контакты
- Высокотемпературные сверхпроводники

Описание модели, задача

Системы с Гайзенберговским взаимодействием (модель Изинга):

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

$< i, j >$ – соседние частицы



Скалярное произведение:

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3) \quad = \; \delta^{\alpha\beta}\cdot\sigma_1^{\alpha}\otimes 1_2\otimes\sigma_3^{\beta}\otimes 1_4\otimes 1_5$$

Смешанное произведение:

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4) = \varepsilon^{\alpha\beta\gamma}\cdot\sigma_1^{\alpha}\otimes 1_2\otimes\sigma_3^{\beta}\otimes\sigma_4^{\gamma}\otimes 1_5$$

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

Антиферромагнетики: J > 0

Пример 1d: ????

Пример 2d: “Гербертсмитит”

La_2CuO

Пример 3d: ????

Ферромагнетики: J < 0

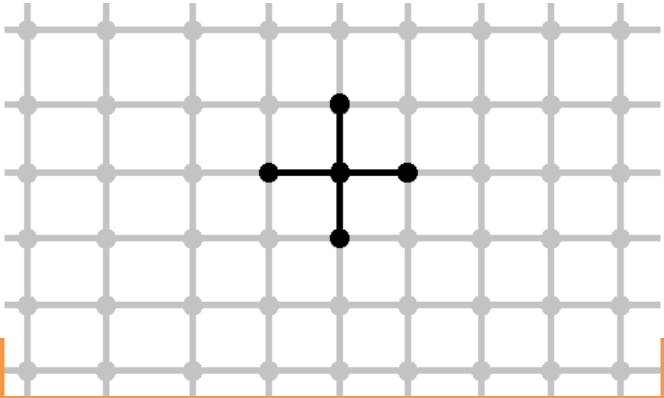
Пример: ????

$$\langle\psi|H|\psi\rangle\geqslant E_{gs}$$

Задача: $E_{gs}\geqslant ?$

Методы решения

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



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

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.

*) $$E_{gs\ full} = \min_{\psi}\langle\psi | H | \psi\rangle = \min_{\rho_{full}\in M_{full}} \mathrm{tr}_{\mathrm{full}} H_{full}\rho_{full} = \min_{\rho_{full}\in M_{full}^{S}} \mathrm{tr}_{\mathrm{full}} H_{full}\rho_{full} =$$

$$= M \min_{\rho_{full}\in M_{full}^{S}} \mathrm{tr}_{\mathrm{full}} H_{cl}\rho_{full} = M \min_{\rho_{full}\in M_{full}^{S}} \mathrm{tr}_{\mathrm{cl}} (H_{cl}\mathrm{tr}_{\mathrm{full\text{-}cl}}\rho_{full}) =$$

$$= M \min_{\rho_{cl}\in M_{cl}^{trS}} \mathrm{tr}_{\mathrm{cl}} H_{cl}\rho_{cl} \geqslant M \min_{\rho_{cl}\in M_{cl}'} \mathrm{tr}_{\mathrm{cl}} H_{cl}\rho_{cl}; \qquad M = \frac{Nd}{m}$$

N — кол-во спинов в кристалле

M — кол-во кластеров

d — размерность кристалла

m — кол-во связей в кластере

??? Ссылка на вариационный метод

Параметризация матрицы плотности

$$\rho^+ = \rho; \qquad \mathrm{tr}\rho = 1; \qquad \langle\rho\rangle \geqslant 0 \qquad \Rightarrow \quad \rho = \frac{\tau^2}{\mathrm{tr}\tau^2}; \qquad \tau^+ = \tau$$

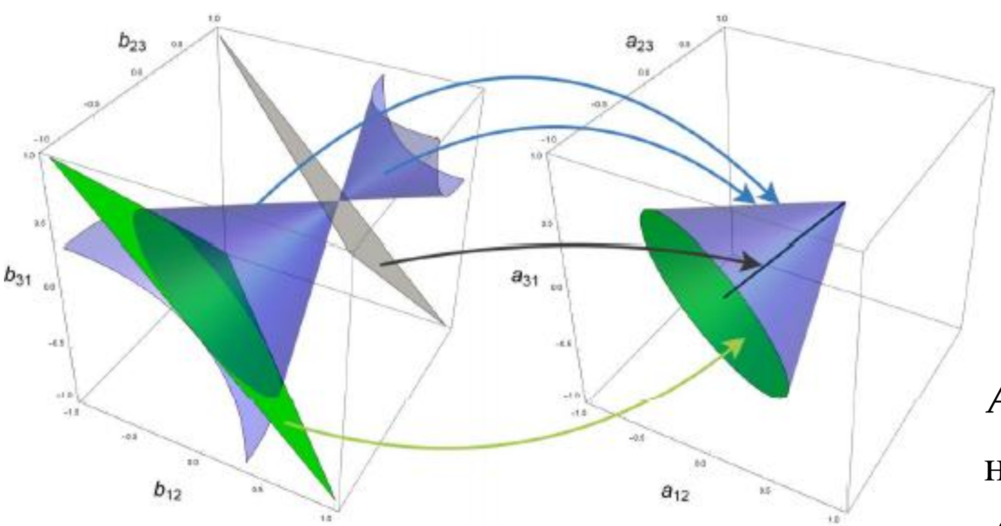
N. Il'in, E. Shpagina, F. Uskov, O. Lychkovskiy
Squaring parametrization of constrained and unconstrained sets of quantum states.
J. Phys. A:Math. Theor. 51 (2018) 085301

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

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

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

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



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

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

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

A_i подчиняются тем же симметриям, что и H

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

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

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 индексами коммутирут, так что мы можем их стабильно отсортировать: например

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

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

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

3) Теперь можно применить тождество Паули:

$\sigma(i,\alpha,\beta,\gamma,...)$

$\to\delta(\alpha,\beta)\sigma(i,\gamma,...)+i\varepsilon(\alpha,\beta,\mu)\sigma(i,\mu,\gamma,...)$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Скалярное произведение матриц

Алгоритм реализован на wolfram mathematica

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

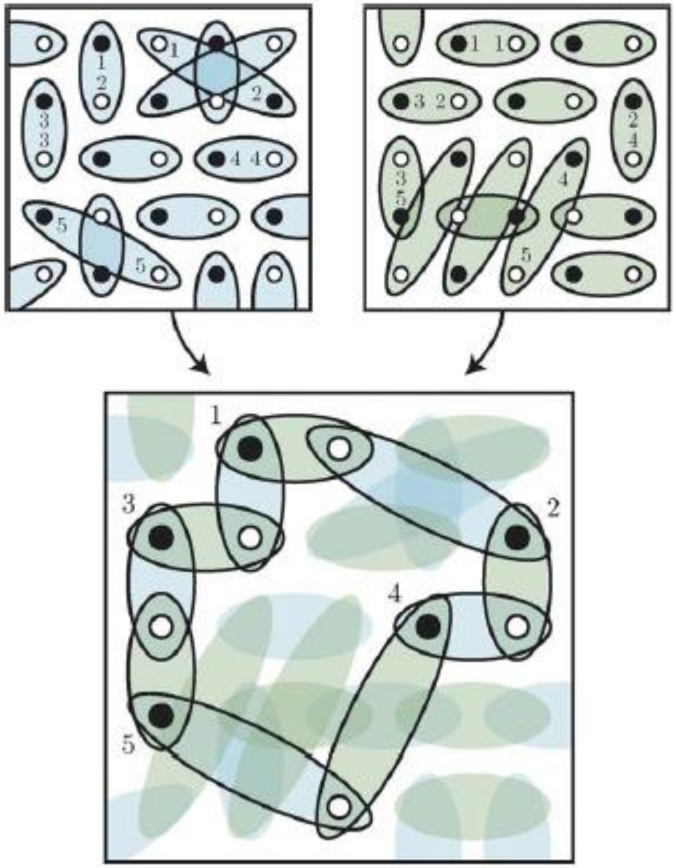
$(A,B)\neq 0,$ если A и B содержат одни и те же спины

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

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

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

$(A,B)=3^C\cdot 2^n,$ 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=$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_4)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3)$

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

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

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

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

Было проверено в плоть до 10 спинов,
что из уравнений (1 и 2) следуют все линейные зависимости

Уравнение Шредингера

$$H\tau = E\tau \quad \Rightarrow \quad H\frac{\tau^2}{\mathrm{tr}\tau^2} = E\frac{\tau^2}{\mathrm{tr}\tau^2} \quad \Leftrightarrow \quad H\rho = E\rho$$

A_j - только скалярные произведения

B_j - каждое слагаемое содерждит смешанное произведения

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

Алгоритм раскладывания векторов по базису реализован в Wolfram Mathematica

Если A_j, B_j - линейнонезависимы, то

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

Если

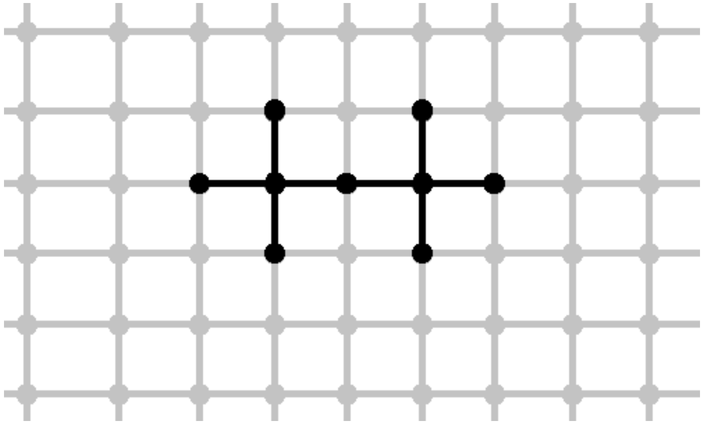
$(A_i, A_j) = g_{ij}$

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

то

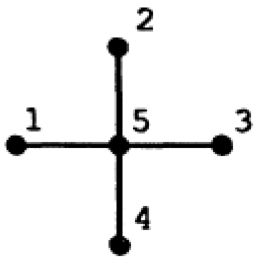
$h_{ij} = g_{ik}^{-1} \eta_{kj}$

Сравни с вар. методом



Пример:
H – матрица 512x512
113 векторов A
62 уравнения от B
Итого ищем СЗ
у матрицы 51x51

УШ: генерация Ро



Реализован лгоритм генерации базиса A_i
на Wolfram Mathematica

A_i подчиняются симметриям кластера

```
In[161]:= doubleKrestGens5 = {swapToPerm[{1 → 2}, 5], swapToPerm[{2 → 3}, 5], swapToPerm[{3 → 4}, 5]}

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

In[178]:= basis51 = {1};
          AppendTo[basis51, (Plus @@ # &) /@ (KPToExpr /@ # &) /@ invariantKPsets[1, 5, doubleKrestGroup5]];
          AppendTo[basis51, (Plus @@ # &) /@ (KPToExpr /@ # &) /@ invariantKPsets[2, 5, doubleKrestGroup5]];
          basis51 = basis51 // Flatten;
          basis51 // Length

Out[182]= 5

In[202]:= basis51

Out[202]= {1, d[1, 2] + d[1, 3] + d[1, 4] + d[2, 3] + d[2, 4] + d[3, 4],
           d[1, 5] + d[2, 5] + d[3, 5] + d[4, 5], d[1, 4] d[2, 3] + d[1, 3] d[2, 4] + d[1, 2] d[3, 4],
           d[1, 5] d[2, 3] + d[1, 5] d[2, 4] + d[1, 3] d[2, 5] + d[1, 4] d[2, 5] + d[1, 5] d[3, 4] + d[2, 5] d[3, 4] +
            d[1, 2] d[3, 5] + d[1, 4] d[3, 5] + d[2, 4] d[3, 5] + d[1, 2] d[4, 5] + d[1, 3] d[4, 5] + d[2, 3] d[4, 5]}
```

Вариационный метод

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

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

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

Метод 1:

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

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 $b_l b_m g_{lm} = 1$

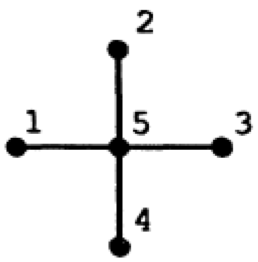
Метод Лагранжа:

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

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

$$\Leftrightarrow \ (\eta_{kj} g_{ji}^{-1}) b_i = h_{ki} b_i = \lambda b_k$$

Вар. метод: генерация Ро



Реализован лгоритм генерации базиса A_i
на Wolfram Mathematica

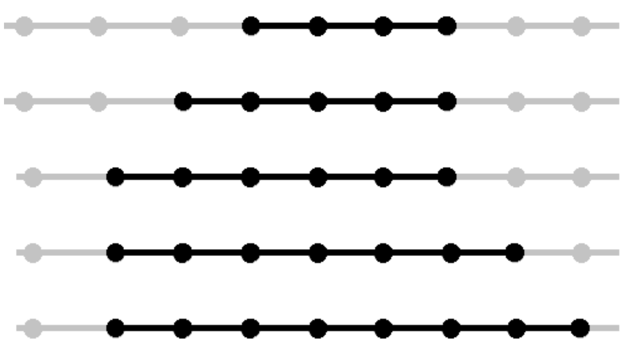
A_i подчиняются симметриям всей сетки кристалла

```
                          0 3 0
In[186]:= cluster51 =     2 5 4
                          0 1 0

Out[186]= {{0, 3, 0}, {2, 5, 4}, {0, 1, 0}}

In[197]:= basis51var = {1};
          AppendTo[basis51var, (Plus @@ # &) /@ (KPToExpr /@ # &) /@ squareInvariantKPsets[1, cluster51]];
          AppendTo[basis51var, (Plus @@ # &) /@ (KPToExpr /@ # &) /@ squareInvariantKPsets[2, cluster51]];
          basis51var = basis51var // Flatten;
          basis51var // Length

Out[201]= 8

In[204]:= basis51var

Out[204]= {1, d[1, 2] + d[1, 4] + d[2, 3] + d[3, 4], d[1, 3] + d[2, 4], d[1, 5] + d[2, 5] + d[3, 5] + d[4, 5],
           d[1, 3] d[2, 4], d[1, 5] d[2, 4] + d[1, 3] d[2, 5] + d[2, 4] d[3, 5] + d[1, 3] d[4, 5],
           d[1, 4] d[2, 3] + d[1, 2] d[3, 4], d[1, 5] d[2, 3] + d[1, 4] d[2, 5] + d[1, 5] d[3, 4] +
            d[2, 5] d[3, 4] + d[1, 2] d[3, 5] + d[1, 4] d[3, 5] + d[1, 2] d[4, 5] + d[2, 3] d[4, 5]}
```

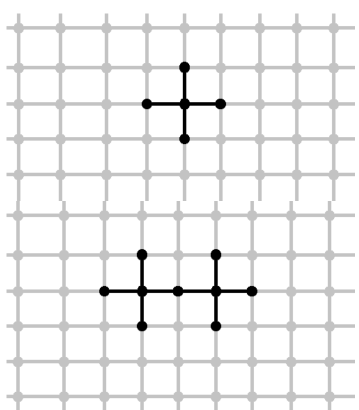
Сравнение результатов

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

Одномерный случай:



Уравнение Шредингера	Вариационный метод
-2.1547	-2.09548
-1.92789	-1.91063
-1.99486	-1.94983
-1.89083	-1.87265
-1.92853	-1.8388



Двумерный случай:

Уравнение Шредингера	Вариационный метод
-3	-3
-2,9685	-2.9657

Выводы

- В работе исследованы спиновые системы с явным учетом пространственных симметрий и инвариантности относительно обращения времени.
- Рассчитаны точные спектры энергий для кластеров из небольшого числа частиц.
- Проведена оценка энергии основного состояния системы большого числа спинов методом ее разбиения на кластеры, спектры которых возможно эффективно рассчитать.

Исследуемый метод не предполагает конкуренции с наиболее эффективными алгоритмами, вместо этого он описывает систему с точки зрения симметрий, которые могут не коммутировать друг с другом, что исключает возможные появления спонтанного нарушения симметрии.

Спасибо за внимание

Литература:

- 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.
- ??? Ссылка на вариационный метод
- N. Il'in, E. Shpagina, F. Uskov, O. Lychkovskiy, Squaring parametrization of constrained and unconstrained sets of quantum states. Ссылка на ??? J Phys A
- *K.S.D. Beach, A.W. Sandvik* Some formal results for the valence bond basis *Nuclear Physics B 750 [FS] (2006) 142–178*