

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

26.04.2018

Научные руководители:

Гердт Владимир Петрович (ЛИТ ОИЯИ)

Лычковский Олег Валентинович

(Сколтех, РКЦ, МИАН им. Стеклова)

Skoltech

Skolkovo Institute of Science and Technology

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):

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} (\sigma_i \sigma_j)$$

$\langle i, j \rangle$ – соседние частицы

Скалярное произведение:

$$(\sigma_1 \sigma_3) = \delta^{\alpha\beta} \cdot \sigma_1^\alpha \otimes 1_2 \otimes \sigma_3^\beta \otimes 1_4 \otimes 1_5$$

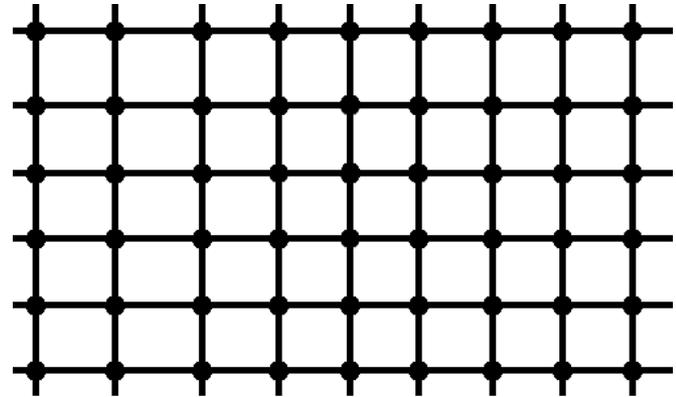
Смешанное произведение:

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

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

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

Задача: $E_{gs} \geq ?$



Антиферромагнетики:

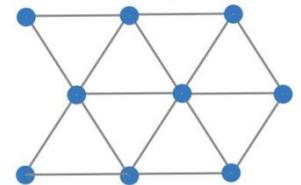
Пример 1d: $\text{Sr}_2\text{Cu}(\text{PO}_4)_2$

Примеры 2d: La_2CuO_4

YBa_2CuO_6

Спиновые жидкости:

Herbertsmithite $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$

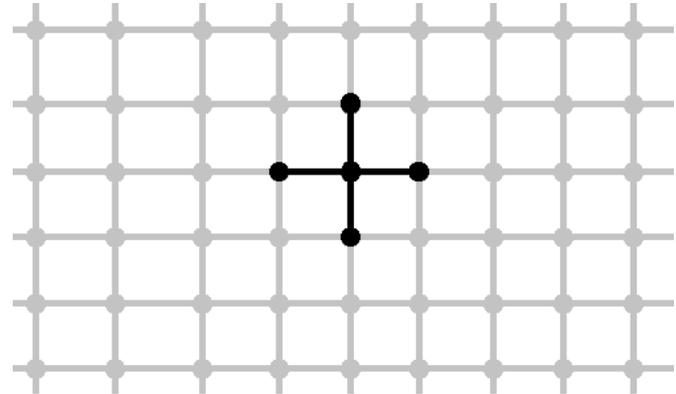


Методы решения

Через основную энергию подсистем

$$H_{full} = \sum_{i=1}^M H_{cl_i} \Rightarrow E_{gs full} \geq \sum_{i=1}^M E_{i gs cl}$$

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



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

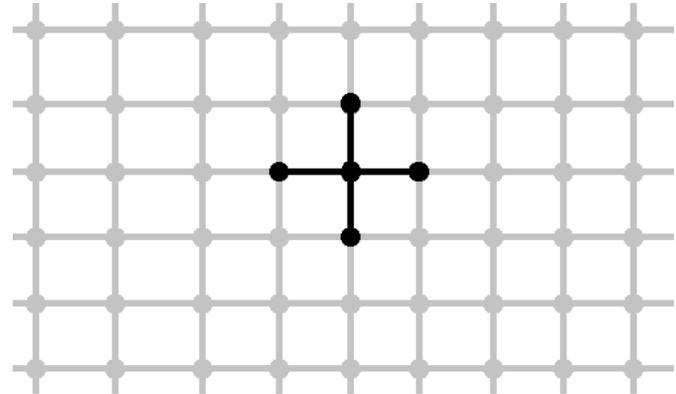
d – размерность кристалла

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, 062511

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

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

$$= M \min_{\rho_{cl} \in M_{cl}^{trS}} \text{tr}_{cl} H_{cl} \rho_{cl} \geq M \min_{\rho_{cl} \in M_{cl}'} \text{tr}_{cl} H_{cl} \rho_{cl}$$

$$E_{gs\ full} / N \geq \frac{d}{m} \min_{\rho_{cl} \in M_{cl}'} \text{tr}_{cl} H_{cl} \rho_{cl};$$

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

N – кол-во спинов в кристалле

M – кол-во кластеров

d – размерность кристалла

m – кол-во связей в кластере

Параметризация матрицы плотности

$$\rho^+ = \rho; \quad \text{tr}\rho = 1; \quad \langle \rho \rangle \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{\tau^2}{\text{tr}\tau^2}; \quad \tau^+ = \tau$$

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

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

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

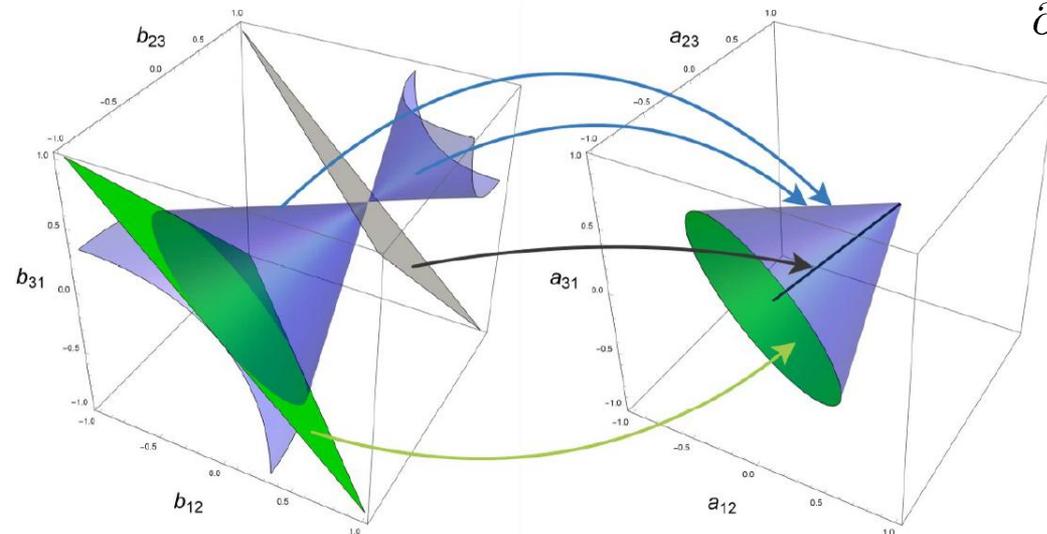
$$b_i \in \mathbb{R}^n; \quad f_i(\{b_i\}) = a_i \in \mathbf{V} \subset \mathbb{R}^n$$

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

$$\rho = \frac{1}{8} (1 + a_{12}(\sigma_1 \sigma_2) + a_{23}(\sigma_2 \sigma_3) + a_{31}(\sigma_3 \sigma_1))$$

$$\tau = 1 + b_{12}(\sigma_1 \sigma_2) + b_{23}(\sigma_2 \sigma_3) + b_{31}(\sigma_3 \sigma_1)$$

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



Символьное умножение матриц

Алгоритм реализован на [wolfram mathematica](#)

Входные и выходные данные задаются в виде:

$$(\sigma_i \sigma_j) = d(i, j) \quad (\sigma_i \sigma_j \sigma_k) = t(i, j, k)$$

Подразумевается спиновые индексы не равны

$$1) \quad d(i, j) \rightarrow \sigma(i, \alpha)\sigma(j, \alpha)$$

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

2) σ -матрицы с разными индексами коммутируют,

так что мы можем их стабильно отсортировать:

например

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

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

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

3) Теперь можно применить тождество Паули:

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

$$\rightarrow \delta(\alpha, \beta)\sigma(i, \gamma, \dots) + i\varepsilon(\alpha, \beta, \mu)\sigma(i, \mu, \gamma, \dots)$$

4) Теперь все σ -матрицы коммутируют,

можно упростить δ и ε символы

и выделить $d(i, j)$ и $t(i, j, k)$

$$(\sigma_1 \sigma_2)^2 = 3 - 2(\sigma_1 \sigma_2)$$

$$(\sigma_1 \sigma_2)(\sigma_2 \sigma_3) = (\sigma_1 \sigma_3) - i(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3)$$

$$(\sigma_1 \sigma_2)(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3) = -(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3) - 2i(\sigma_1 \sigma_3) + 2i(\sigma_2 \sigma_3)$$

$$(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3)(\sigma_1 \sigma_2) = -(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3) + 2i(\sigma_1 \sigma_3) - 2i(\sigma_2 \sigma_3)$$

$$(\sigma_1 \sigma_2)(\sigma_2 \sigma_3 \sigma_4) =$$

$$(\sigma_1 \sigma_3 \sigma_4) - i(\sigma_1 \sigma_3)(\sigma_2 \sigma_4) + i(\sigma_1 \sigma_4)(\sigma_2 \sigma_3)$$

$$(\sigma_2 \sigma_3 \sigma_4)(\sigma_1 \sigma_2) =$$

$$(\sigma_1 \sigma_3 \sigma_4) + i(\sigma_1 \sigma_3)(\sigma_2 \sigma_4) - i(\sigma_1 \sigma_4)(\sigma_2 \sigma_3)$$

$$(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3)^2 =$$

$$6 - 2(\sigma_1 \sigma_2) - 2(\sigma_1 \sigma_3) - 2(\sigma_2 \sigma_3)$$

$$(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3)(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_4) =$$

$$-(\sigma_1 \sigma_3)(\sigma_2 \sigma_4) - (\sigma_1 \sigma_4)(\sigma_2 \sigma_3)$$

$$+ 2(\sigma_3 \sigma_4) + i(\sigma_1 \sigma_3 \sigma_4) + i(\sigma_2 \sigma_3 \sigma_4)$$

$$(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3)(\sigma_1 \sigma_4 \sigma_5) =$$

$$+(\sigma_2 \sigma_4)(\sigma_3 \sigma_5) - (\sigma_2 \sigma_5)(\sigma_3 \sigma_4)$$

$$-i(\sigma_1 \sigma_2)(\sigma_3 \sigma_4 \sigma_5) + i(\sigma_1 \sigma_3)(\sigma_2 \sigma_4 \sigma_5)$$

Скалярное произведение матриц

Алгоритм реализован на [wolfram mathematica](#)

$$(A, B) = \text{tr}(A^+ B); \quad A^+ = A$$

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

$$\text{tr}((\sigma_i \sigma_j)(\sigma_j \sigma_k) \dots (\sigma_l \sigma_m)(\sigma_m \sigma_i)) = 3 \cdot 2^n$$

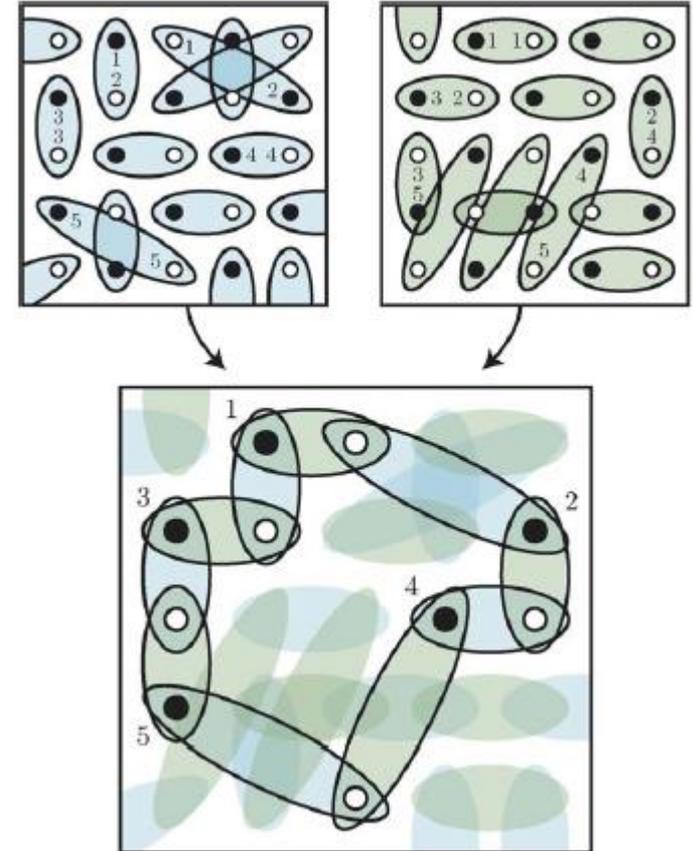
$$\begin{aligned} \text{tr}((\sigma_i \sigma_j \sigma_k)(\sigma_i \sigma_j \sigma_n)(\sigma_k \sigma_l) \dots (\sigma_m \sigma_n)) &= \\ &= \text{tr}((\sigma_i \sigma_j \sigma_k)(\sigma_i \sigma_j \sigma_k)) = 6 \cdot 2^n \end{aligned}$$

$(A, B) = 3^C \cdot 2^n$, 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

$$\begin{aligned}
 A &= (\sigma_1 \sigma_2)(\sigma_3 \sigma_4) \\
 B &= (\sigma_1 \sigma_3)(\sigma_2 \sigma_4) \\
 C &= (\sigma_1 \sigma_4)(\sigma_2 \sigma_3)
 \end{aligned}
 \quad
 g = \begin{pmatrix} (AA) & (AB) & (AC) \\ (BA) & (BB) & (BC) \\ (CA) & (CB) & (CC) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & 3 & 3 \\ 3 & 9 & 3 \\ 3 & 3 & 9 \end{pmatrix} > 0$$

$$+(\sigma_1 \sigma_2)(\sigma_3 \sigma_4 \sigma_5) - (\sigma_1 \sigma_3)(\sigma_2 \sigma_4 \sigma_5) + (\sigma_1 \sigma_4)(\sigma_2 \sigma_3 \sigma_5) - (\sigma_1 \sigma_5)(\sigma_2 \sigma_3 \sigma_4) = 0 \quad (1)$$

$$(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3)(\sigma_4 \sigma_5 \sigma_6) = \det \begin{pmatrix} (\sigma_1 \sigma_4) & (\sigma_2 \sigma_4) & (\sigma_3 \sigma_4) \\ (\sigma_1 \sigma_5) & (\sigma_2 \sigma_5) & (\sigma_3 \sigma_5) \\ (\sigma_1 \sigma_6) & (\sigma_2 \sigma_6) & (\sigma_3 \sigma_6) \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$(1, 2) \Rightarrow \det \begin{pmatrix} (\sigma_1 \sigma_5) & (\sigma_2 \sigma_5) & (\sigma_3 \sigma_5) & (\sigma_4 \sigma_5) \\ (\sigma_1 \sigma_6) & (\sigma_2 \sigma_6) & (\sigma_3 \sigma_6) & (\sigma_4 \sigma_6) \\ (\sigma_1 \sigma_7) & (\sigma_2 \sigma_7) & (\sigma_3 \sigma_7) & (\sigma_4 \sigma_7) \\ (\sigma_1 \sigma_8) & (\sigma_2 \sigma_8) & (\sigma_3 \sigma_8) & (\sigma_4 \sigma_8) \end{pmatrix} = 0$$

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

Уравнение Шредингера

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

A_j - только скалярные произведения

B_j - каждое слагаемое содержит 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

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

A_i группируются на основе перестановочных симметрий H
 например если $H = (\sigma_1 \sigma_2) + (\sigma_2 \sigma_3)$, то
 $A_0 = 1$; $A_1 = ((\sigma_1 \sigma_2) + (\sigma_2 \sigma_3))$; $A_2 = (\sigma_1 \sigma_3)$

Если

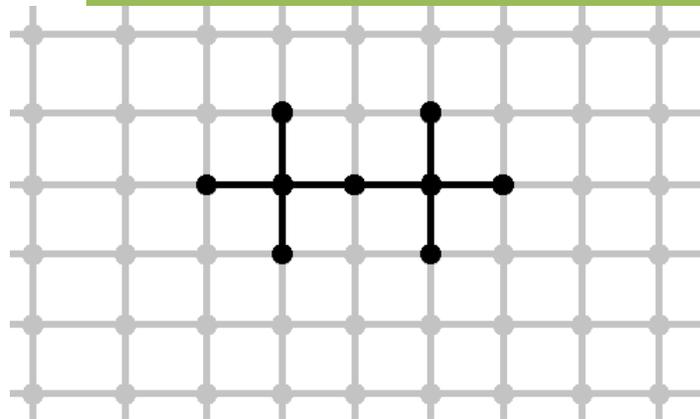
$$(A_i, A_j) = g_{ij}$$

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

то

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

Сравни с вар. методом



Пример:

H – матрица 512x512

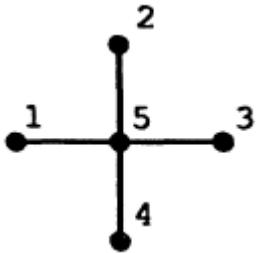
113 векторов A

62 уравнения от B

Итого ищем $C3$

у матрицы 51x51

УШ: генерация ρ



Реализован алгоритм 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

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

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

$$\rho = \frac{\tau^2}{\operatorname{tr} \tau^2}; \quad \tau = b_i A_i$$

A_i группируются на основе перестановочных симметрий H всего кристалла: трансляционная, поворот на 90° , отражение

Метод 1:

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

где

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

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

Метод 2:

$$\min \operatorname{tr} H \rho = \min_{\{b_i\}} b_i b_j \eta_{ij}$$

при условии $b_l b_m g_{lm} = 1$

Метод Лагранжа:

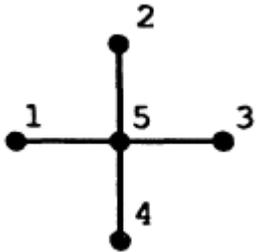
$$\Rightarrow L(\{b_k\}, \lambda) = b_i b_j (\eta_{ij} - \lambda g_{ij}) + \lambda$$

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

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

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

Вар. метод: генерация ρ



Реализован алгоритм генерации базиса A_i
на [Wolfram Mathematica](#)

A_i подчиняются симметриям всей сетки кристалла

```
In[186]:= cluster51 =  $\begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 \\ 2 & 5 & 4 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ 
```

```
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
```

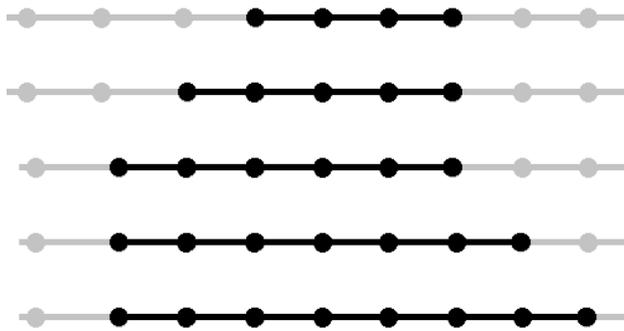
```
In[204]:= basis51var
```

```
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]}
```

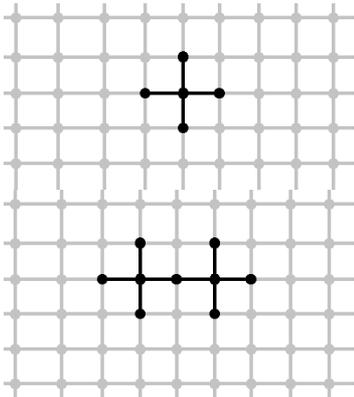
Сравнение результатов

$$E_{gs \text{ full}} / N \geq$$

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

- 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 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
- *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, 062511*
- *K.S.D. Beach, A.W. Sandvik* Some formal results for the valence bond basis *Nuclear
Physics B* 750 [FS] (2006) 142–178