Алгебраические преобразования произведений скалярных и смешанных произведений матриц Паули

Филипп Усков

Елена Шпагина, Олег Лычковский, Николай Ильин

Сколтех; МГУ им. Ломоносова

fel1992@mail.ru

2 декабря 2017 г.

Содержание

1. Оценка энергии основного состояния снизу
   - через энергию основного состояния подсистем
   - через вариационный метод
2. базис матриц плотности
   - Учет симметрий и создание базиса
   - Умножение элементов базиса
3. Уравнение Шредингера в виде $H\rho = E\rho$
4. квадратичная параметризация и поиск минимума

Системы с гайзенберговским взаимодействием

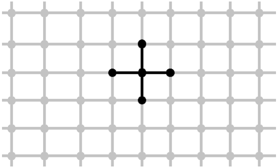
Типичный Гамильтониан:

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

$< i, j >$ - соседние чатицы в решётке

Скалярное произведение:
$(\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_3) = (\boldsymbol{\sigma}_3 \boldsymbol{\sigma}_1) = \sigma_1^\alpha \otimes 1_2 \otimes \sigma_3^\alpha \otimes 1_4 \otimes 1_5$
Смешанное произведение
$(\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_3 \boldsymbol{\sigma}_4) = \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \times \sigma_1^\alpha \otimes 1_2 \otimes \sigma_3^\beta \otimes \sigma_4^\gamma \otimes 1_5$
$\alpha, \beta, \gamma \in \{x, y, z\}$

Оценка через энергию основного состояния подсистем



$$H = \sum_i H_i \quad \Rightarrow \quad E_{gs} \geqslant \sum_i E_{gs_i}$$

Для квадратной решетки, которую можем замостить одинаковыми кластерами:

$$E_{gs}/N \geqslant \frac{2}{M} E_{gs_C}$$

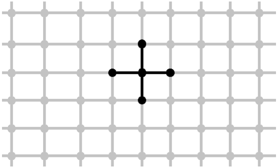
где E_{gs}/N - энергия основного состояния решетки, приходящаяся на 1 спин

M - число связей в кластере

E_{gs_C} - энергия основного состояния клатера

R. Tarrah, R. Valenti (1990)
Exact lover bounds to the ground state of spin systems: The two-dimensional $S = \frac{1}{2}$ antiferromagnetic Geisenberg model
Physical rewiew B , 1990.

Оценка через вариационный метод



Для квадратной решетки, которую можем замостить одинаковыми кластерами:

$$E_{gs}/N \geqslant \frac{2}{M} \min_{\rho_c} \operatorname{tr} H_c \rho_c$$

где E_{gs}/N - энергия основного состояния системы, приходящаяся на 1 спин

M - число связей в кластере

H_c, ρ_c - гамильтониан и матрица плотности клатера

David A. Mazziotti
Advances in Chemical Physics, Reduced-Density-Matrix Mechanics: With Application to Many-Electron Atoms and Molecules
Volume 134. Wiley-Interscience, 1 edition., 2007.

Учет симметрий и создание базиса

т.к. гамильтониан обладает **вращательной симметрией**, то матрица плотности тоже должна быть вращательно инвариантна
а значит должна состоять из **скалярных и смешанных произведений** σ-матриц
т.к. гамильтониан обладает **симметрией обращения по времени** $T[H] = H$, и $T[\boldsymbol{\sigma}] = -\boldsymbol{\sigma}$
то матрица плотности должна состоять **только из скалярных произведений** σ-матриц

$$\rho = \frac{1}{2^N}\left(1 + a_{i,j}(\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j) + b_{i,j,k,l}(\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j)(\boldsymbol{\sigma}_k\boldsymbol{\sigma}_l) + \ldots\right)$$

Также можно ввести скалярное произведение на этом базисе:
$(A, B) = \mathrm{tr} AB, \qquad A^+ = A, \qquad \mathrm{tr}(a \otimes b \otimes c) = (\mathrm{tr} a)(\mathrm{tr} b)(\mathrm{tr} c)$
тогда базис можно назвать ортогональным (почти)

Линейная независимость элементов базиса

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4)\ (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4) = 3 - 2(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2) - 2(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3) + 2(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_4) + 2(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3) - $$
$$-2(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4) + (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3)(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4) - 2(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4) + (\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4) +$$
$$+i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3) - i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_4) + i(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4) - i(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_4)$$

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

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

Линейная независимость элементов базиса

$(\sigma_1\sigma_4)(\sigma_2\sigma_5)(\sigma_3\sigma_6)$
$(\sigma_1\sigma_4)(\sigma_2\sigma_6)(\sigma_3\sigma_5)$
$(\sigma_1\sigma_5)(\sigma_2\sigma_4)(\sigma_3\sigma_6)$
$(\sigma_1\sigma_5)(\sigma_2\sigma_6)(\sigma_3\sigma_4)$
$(\sigma_1\sigma_6)(\sigma_2\sigma_4)(\sigma_3\sigma_5)$
$(\sigma_1\sigma_6)(\sigma_2\sigma_5)(\sigma_3\sigma_4)$
$(\sigma_1\sigma_3)(\sigma_2\sigma_5)(\sigma_4\sigma_6)$
$(\sigma_1\sigma_3)(\sigma_2\sigma_6)(\sigma_4\sigma_5)$
$(\sigma_1\sigma_5)(\sigma_2\sigma_3)(\sigma_4\sigma_6)$
$(\sigma_1\sigma_6)(\sigma_2\sigma_3)(\sigma_4\sigma_5)$
$(\sigma_1\sigma_3)(\sigma_2\sigma_4)(\sigma_5\sigma_6)$
$(\sigma_1\sigma_4)(\sigma_2\sigma_3)(\sigma_5\sigma_6)$
$(\sigma_1\sigma_2)(\sigma_3\sigma_5)(\sigma_4\sigma_6)$
$(\sigma_1\sigma_2)(\sigma_3\sigma_6)(\sigma_4\sigma_5)$
$(\sigma_1\sigma_2)(\sigma_3\sigma_4)(\sigma_5\sigma_6)$

$$\begin{bmatrix}
27 & 9 & 9 & 3 & 3 & 9 & 9 & 3 & 3 & 3 \\
9 & 27 & 3 & 9 & 9 & 3 & 3 & 9 & 3 & 3 \\
9 & 3 & 27 & 9 & 9 & 3 & 3 & 3 & 9 & 3 \\
3 & 9 & 9 & 27 & 3 & 9 & 3 & 9 & 9 & 3 \\
3 & 9 & 9 & 3 & 27 & 9 & 3 & 3 & 3 & 9 \\
9 & 3 & 3 & 9 & 9 & 27 & 9 & 3 & 3 & 9 \\
9 & 3 & 3 & 3 & 3 & 9 & 27 & 9 & 9 & 3 \\
3 & 9 & 3 & 9 & 3 & 3 & 9 & 27 & 3 & 9 \\
3 & 3 & 9 & 9 & 3 & 3 & 9 & 3 & 27 & 9 \\
3 & 3 & 3 & 3 & 9 & 9 & 3 & 9 & 9 & 27 \\
3 & 3 & 9 & 3 & 9 & 3 & 9 & 9 & 3 & 3 \\
9 & 9 & 3 & 3 & 3 & 3 & 3 & 3 & 9 & 9 \\
3 & 9 & 3 & 3 & 9 & 3 & 9 & 3 & 9 & 3 \\
9 & 3 & 9 & 3 & 3 & 3 & 3 & 9 & 3 & 9 \\
3 & 3 & 3 & 9 & 3 & 9 & 3 & 3 & 3 & 3
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
3 & 9 & 3 & 9 & 3 \\
3 & 9 & 9 & 3 & 3 \\
9 & 3 & 3 & 9 & 3 \\
3 & 3 & 3 & 3 & 9 \\
9 & 3 & 9 & 3 & 3 \\
3 & 3 & 3 & 3 & 9 \\
9 & 3 & 9 & 3 & 3 \\
9 & 3 & 3 & 9 & 3 \\
3 & 9 & 9 & 3 & 3 \\
3 & 9 & 3 & 9 & 3 \\
27 & 9 & 3 & 3 & 9 \\
9 & 27 & 3 & 3 & 9 \\
3 & 3 & 27 & 9 & 9 \\
3 & 3 & 9 & 27 & 9 \\
9 & 9 & 9 & 9 & 27
\end{bmatrix} > 0$$

Линейная зависимость элементов базиса

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

$$\begin{pmatrix} 18 & 6 & -6 & 6 & 6 & -6 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 18 & 6 & -6 & 6 & 0 & 0 & -6 & 6 & 0 \\ -6 & 6 & 18 & 6 & 0 & 6 & 0 & -6 & 0 & 6 \\ 6 & -6 & 6 & 18 & 0 & 0 & 6 & 0 & -6 & 6 \\ 6 & 6 & 0 & 0 & 18 & 6 & -6 & 6 & -6 & 0 \\ -6 & 0 & 6 & 0 & 6 & 18 & 6 & 6 & 0 & -6 \\ 6 & 0 & 0 & 6 & -6 & 6 & 18 & 0 & 6 & -6 \\ 0 & -6 & -6 & 0 & 6 & 6 & 0 & 18 & 6 & 6 \\ 0 & 6 & 0 & -6 & -6 & 0 & 6 & 6 & 18 & 6 \\ 0 & 0 & 6 & 6 & 0 & -6 & -6 & 6 & 6 & 18 \end{pmatrix} \geqslant 0$$

алгоритм симв. умножения через тождество Паули

реализован на wolfram mathematica и nikhef form

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, что разные спиновые индексы не могут быть равны)

1. $d(i,j) \to \sigma(i,\alpha)\sigma(j,\alpha) \qquad t(i,j,k) \to \varepsilon(\alpha,\beta,\gamma)\sigma(i,\alpha)\sigma(j,\beta)\sigma(k,\gamma)$
2. σ-матрицы с разными спиновыми индексами коммутируют, так что мы можем их стабильно отсортировать: например
$$(\sigma(1,\mu)\sigma(3,\mu))(\sigma(1,\alpha)\sigma(3,\beta)\sigma(6,\gamma)\varepsilon(\alpha,\beta,\gamma) = \\ = \sigma(1,\mu,\alpha)\sigma(3,\mu,\beta)\sigma(6,\gamma)\varepsilon(\alpha,\beta,\gamma)$$
3. $\sigma(i,\alpha,\beta,\gamma) = \sigma_i^\alpha\sigma_i^\beta\sigma_i^\gamma$. 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 $t(i,j,k)$

альтернативные базовые соотношения

которые можно применыть рекурсивно:

$$
\begin{aligned}
(\sigma_1\sigma_2)^2 &= 3 \; - 2(\sigma_1\sigma_2) && (1)\\
(\sigma_1\sigma_2)(\sigma_2\sigma_3) &= -i(\sigma_1\sigma_2\sigma_3) \; + (\sigma_1\sigma_3) && (2)\\
(\sigma_1\sigma_2)(\sigma_1\sigma_2\sigma_3) &= -(\sigma_1\sigma_2\sigma_3) \; - 2i(\sigma_1\sigma_3) \; + 2i(\sigma_2\sigma_3) && (3)\\
(\sigma_1\sigma_2\sigma_3)(\sigma_1\sigma_2) &= -(\sigma_1\sigma_2\sigma_3) \; + 2i(\sigma_1\sigma_3) \; - 2i(\sigma_2\sigma_3) && (4)\\
(\sigma_1\sigma_2)(\sigma_2\sigma_3\sigma_4) &= (\sigma_1\sigma_3\sigma_4) \; - i(\sigma_1\sigma_3)(\sigma_2\sigma_4) \; + i(\sigma_1\sigma_4)(\sigma_2\sigma_3) && (5)\\
(\sigma_2\sigma_3\sigma_4)(\sigma_1\sigma_2) &= (\sigma_1\sigma_3\sigma_4) \; + i(\sigma_1\sigma_3)(\sigma_2\sigma_4) \; - i(\sigma_1\sigma_4)(\sigma_2\sigma_3) && (6)\\
(\sigma_1\sigma_2\sigma_3)^2 &= 6 \; - 2(\sigma_1\sigma_2) \; - 2(\sigma_1\sigma_3) \; - 2(\sigma_2\sigma_3) && (7)\\
(\sigma_1\sigma_2\sigma_3)(\sigma_1\sigma_2\sigma_4) &= +i(\sigma_1\sigma_3\sigma_4) \; + i(\sigma_2\sigma_3\sigma_4) \\
&\quad -(\sigma_1\sigma_3)(\sigma_2\sigma_4) \; - (\sigma_1\sigma_4)(\sigma_2\sigma_3) + 2(\sigma_3\sigma_4) && (8)\\
(\sigma_1\sigma_2\sigma_3)(\sigma_1\sigma_4\sigma_5) &= -i(\sigma_1\sigma_2)(\sigma_3\sigma_4\sigma_5) \; + i(\sigma_1\sigma_3)(\sigma_2\sigma_4\sigma_5) \\
&\quad +(\sigma_2\sigma_4)(\sigma_3\sigma_5) \; - (\sigma_2\sigma_5)(\sigma_3\sigma_4) && (9)
\end{aligned}
$$

Уравнение Шредингера в виде $H\rho = E\rho$ [2]

Рассмотрим пример из 3 частиц

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

Гамильтониан обладает дополнительной симметрией: $1 \leftrightarrow 3$

$$\rho = \frac{1}{8}\big(1 + a\big((\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2) + (\boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3)\big) + b(\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_3)\big)$$

Lychkovskiy, Oleg and Gamayun, Oleksandr and Cheianov, Vadim (2017)
Time Scale for Adiabaticity Breakdown in Driven Many-Body Systems and Orthogonality Catastrophe
Phys. Rev. Lett. 119, 200401 (2017).

пример с тремя частицами

$$H\rho = \frac{1}{8}((\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2)+(\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_3))(1+a((\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2)+(\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_3))+b(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_3)) =$$
$$= \frac{1}{8}(6a+(1+b-2a)(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2)+2a(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_3)+(1+b-2a)(\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_3)) =$$
$$= \frac{1}{8}(E+Ea(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2)+Ea(\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_3)+Eb(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_3)) = E\rho$$

получается система из трех квадратных уравнений

$$\begin{cases} 6a - E = 0 \\ 1 - 2a + b - aE = 0 \\ 2a - bE = 0 \end{cases}$$

Решение:

$$\begin{cases} a = -\frac{1}{2} \\ b = \frac{1}{3} \\ E = -4 \end{cases} \qquad \begin{cases} a = 0 \\ b = -1 \\ E = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} a = \frac{1}{3} \\ b = \frac{1}{3} \\ E = 2 \end{cases}$$

Применяем для кластера

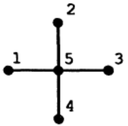
```
solveShredinger[d[1, 5] + d[2, 5] + d[3, 5] + d[4, 5],
  (1 + a1 * (d[1, 5] + d[2, 5] + d[3, 5] + d[4, 5]) + a2 * (d[1, 3] + d[2, 4]) + a2 * (d[1, 2] + d[2, 3] + d[3, 4] + d[4, 1]) +
    b1 * (d[1, 3] * d[2, 4]) + b1 * (d[1, 2] * d[3, 4] + d[2, 3] * d[1, 4]) +
    b3 * (d[1, 5] * d[2, 4] + d[2, 5] * d[1, 3] + d[3, 5] * d[2, 4] + d[4, 5] * d[1, 3]) +
    b3 * (d[1, 5] * d[3, 4] + d[2, 5] * d[4, 1] + d[3, 5] * d[1, 2] + d[4, 5] * d[3, 2]) +
    b3 * (d[1, 5] * d[2, 3] + d[2, 5] * d[3, 4] + d[3, 5] * d[4, 1] + d[4, 5] * d[1, 2]))

  , {a1, a2, b1, b3}] // TableForm
```

5 уравнений

12 a1 - energ == 0
1 - 2 a1 + 3 a2 - a1 energ == 0
2 a1 + 10 b3 - a2 energ == 0
4 b3 - b1 energ == 0
a2 + b1 - 2 b3 - b3 energ == 0

Out[315]//TableForm=

$a1 \to -\frac{1}{2}$	$a2 \to \frac{1}{3}$	$b1 \to \frac{1}{15}$	$b3 \to -\frac{1}{10}$	$energ \to -6$
$a1 \to -\frac{1}{3}$	$a2 \to -\frac{1}{9}$	$b1 \to -\frac{1}{9}$	$b3 \to \frac{1}{9}$	$energ \to -4$
$a1 \to 0$	$a2 \to -\frac{1}{3}$	$b1 \to \frac{1}{3}$	$b3 \to 0$	$energ \to 0$
$a1 \to \frac{1}{6}$	$a2 \to -\frac{1}{9}$	$b1 \to -\frac{1}{9}$	$b3 \to -\frac{1}{18}$	$energ \to 2$
$a1 \to \frac{1}{3}$	$a2 \to \frac{1}{3}$	$b1 \to \frac{1}{15}$	$b3 \to \frac{1}{15}$	$energ \to 4$



$$E_{gs}/N \geqslant -3$$

Алгоритм генерации ρ

... с учетом симметрий гамильтониана - был реализован на wolfram mathematica

```
rho8 = rhoGen[8, {swapToPerm[{1→2}, 8], swapToPerm[{2→3}, 8], swapToPerm[{1→6, 2→7, 3→8, 4→5}, 8]}]
```

```
{(d[1, 2] + d[1, 3] + d[2, 3] + d[6, 7] + d[6, 8] + d[7, 8]) a1 + (d[1, 4] + d[2, 4] + d[3, 4] + d[5, 6] + d[5, 7] + d[5, 8]) a2 + ··· 40 ··· +
  (d[1, 4] d[2, 3] d[5, 8] d[6, 7] + d[1, 3] d[2, 4] d[5, 8] d[6, 7] + d[1, 2] d[3, 4] d[5, 8] d[6, 7] + d[1, 4] d[2, 3] d[5, 7] d[6, 8] + d[1, 3] d[2, 4] d[5, 7] d[6, 8] +
    d[1, 2] d[3, 4] d[5, 7] d[6, 8] + d[1, 4] d[2, 3] d[5, 6] d[7, 8] + d[1, 3] d[2, 4] d[5, 6] d[7, 8] + d[1, 2] d[3, 4] d[5, 6] d[7, 8]) d7,
 {a1, a2, a3, a4, a5, b1, b2, b3, b4, b5, b6, b7, b8, b9, b10, b11, b12, b13, b14, c1, c2, c3, c4, c5, c6, c7, c8, c9, c10, c11,
  c12, c13, c14, c15, c16, c17, d1, d2, d3, d4, d5, d6, d7}}
```

large output | show less | show more | show all | set size limit...

```
solveShredinger[d[1, 4] + d[2, 4] + d[3, 4] + d[4, 5] + d[5, 6] + d[5, 7] + d[5, 8]
  , 1 + rho8[[1]], rho8[[2]]] // TableForm
```

Solve::svars : Equations may not give solutions for all "solve" variables. »

5)	$d_2 \to \frac{1}{20}(1+27c_6)$	$d_3 \to \frac{1}{60}(-1-27c_6)$	$d_4 \to \frac{1}{180}(1+27c_6)$	$d_5 \to \frac{1}{45}(-1+18c_6)$	$d_6 \to \frac{1}{90}(1-63c_6)$	$d_7 \to \frac{1}{45}(-1+18c_6)$	$energ \to -1$	
	$d_1 \to 0$	$d_2 \to 0$	$d_3 \to 0$	$d_4 \to \frac{1}{18}$	$d_5 \to -\frac{1}{27}$	$d_6 \to -\frac{1}{27}$	$d_7 \to -\frac{1}{27}$	$energ \to -3$
	$d_1 \to 0$	$d_2 \to 0$	$d_3 \to 0$	$d_4 \to 0$	$d_5 \to \frac{1}{135}$	$d_6 \to \frac{1}{135}$	$d_7 \to \frac{1}{135}$	$energ \to 3$
	$d_1 \to 0$	$d_2 \to 0$	$d_3 \to 0$	$d_4 \to -\frac{1}{630}$	$d_5 \to -\frac{1}{315}$	$d_6 \to -\frac{1}{315}$	$d_7 \to -\frac{1}{315}$	$energ \to 5$
	$d_1 \to \frac{1}{945}$	$d_2 \to \frac{1}{945}$	$d_3 \to \frac{1}{945}$	$d_4 \to \frac{1}{945}$	$d_5 \to \frac{1}{945}$	$d_6 \to \frac{1}{945}$	$d_7 \to \frac{1}{945}$	$energ \to 7$
)	$d_1 \to 0$	$d_2 \to 0$	$d_3 \to 0$	$d_4 \to 0$	$d_5 \to \frac{1}{27\sqrt{2}}$	$d_6 \to -\frac{1}{27}$	$d_7 \to -\frac{1}{27\sqrt{2}}$	$energ \to -1-2\sqrt{2}$
)	$d_1 \to 0$	$d_2 \to 0$	$d_3 \to 0$	$d_4 \to 0$	$d_5 \to -\frac{1}{27\sqrt{2}}$	$d_6 \to -\frac{1}{27}$	$d_7 \to \frac{1}{27\sqrt{2}}$	$energ \to -1+2\sqrt{2}$
	$d_1 \to 0$	$d_2 \to 0$	$d_3 \to 0$	$d_4 \to 0$	$d_5 \to \frac{1}{27}(1-\sqrt{3})$	$d_6 \to \frac{1}{27}$	$d_7 \to \frac{1}{27}(1+\sqrt{3})$	$energ \to -3-2\sqrt{3}$
	$d_1 \to 0$	$d_2 \to 0$	$d_3 \to 0$	$d_4 \to 0$	$d_5 \to \frac{1}{27}(1+\sqrt{3})$	$d_6 \to \frac{1}{27}$	$d_7 \to \frac{1}{27}(1-\sqrt{3})$	$energ \to -3+2\sqrt{3}$
	$d_1 \to \frac{1}{45}(3-\sqrt{15})$	$d_2 \to \frac{1}{15}$	$d_3 \to \frac{1}{45}(3+\sqrt{15})$	$d_4 \to -\frac{2}{45}$	$d_5 \to \frac{1}{135}(-1+\sqrt{15})$	$d_6 \to -\frac{1}{135}$	$d_7 \to \frac{1}{135}(-1-\sqrt{15})$	$energ \to -3-2\sqrt{15}$
	$d_1 \to \frac{1}{45}(3+\sqrt{15})$	$d_2 \to \frac{1}{15}$	$d_3 \to \frac{1}{45}(3-\sqrt{15})$	$d_4 \to -\frac{2}{45}$	$d_5 \to \frac{1}{135}(-1-\sqrt{15})$	$d_6 \to -\frac{1}{135}$	$d_7 \to \frac{1}{135}(-1+\sqrt{15})$	$energ \to -3+2\sqrt{15}$

Квадратичная параметризация

Для поиска $\min_\rho \mathrm{tr} H_c \rho_c$ чтобы удовлетворить требованиям

$$\rho_c \geq 0, \quad \mathrm{tr}\rho_c = 1, \quad \rho_c^\dagger = \rho_c$$

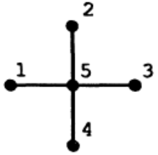
используется квадратичная параметризация

$$\rho_c = \frac{\tau^2}{\mathrm{tr}\tau^2}$$

N. Il'in, E. Shpagina, F. Uskov, O. Lychkovskiy
Squaring parametrization of constrained and unconstrained sets of quantum states.
arXiv:1704.03861.

пример вар. принципа и кв. параметризации

с учетом симметрий решетки



$$\begin{gathered}\tau = 1+\\ a_1((\sigma_1,\sigma_5)+(\sigma_2,\sigma_5)+(\sigma_3,\sigma_5)+(\sigma_4,\sigma_5))+\\ a_2((\sigma_1,\sigma_3)+(\sigma_2,\sigma_4))+\\ a_3((\sigma_1,\sigma_2)+(\sigma_2,\sigma_3)+(\sigma_3,\sigma_4)+(\sigma_4,\sigma_1))+\\ b_1((\sigma_1,\sigma_5)(\sigma_2,\sigma_3)+(\sigma_1,\sigma_5)(\sigma_4,\sigma_3)+(\sigma_2,\sigma_5)(\sigma_3,\sigma_4)+(\sigma_2,\sigma_5)(\sigma_1,\sigma_4)+\\ +(\sigma_3,\sigma_5)(\sigma_4,\sigma_1)+(\sigma_3,\sigma_5)(\sigma_2,\sigma_1)+(\sigma_4,\sigma_5)(\sigma_1,\sigma_2)+(\sigma_4,\sigma_5)(\sigma_3,\sigma_2))+\\ b_2((\sigma_1,\sigma_2)(\sigma_3,\sigma_4)+(\sigma_2,\sigma_3)(\sigma_4,\sigma_1))+\\ b_3(\sigma_1,\sigma_3)(\sigma_2,\sigma_4)+\\ b_4((\sigma_1,\sigma_5)(\sigma_2,\sigma_4)+(\sigma_2,\sigma_5)(\sigma_1,\sigma_3)+(\sigma_3,\sigma_5)(\sigma_2,\sigma_4)+(\sigma_4,\sigma_5)(\sigma_1,\sigma_3))\end{gathered}$$

пример вар. принципа и кв. параметризации

$$\mathrm{tr} H_c \rho_c = \frac{(24a_1 - 24a_1^2 + 24a_1a_2 + 48a_1a_3 + 48a_2b_1 + 192a_3b_1 - 192b_1^2 + 192b_1b_2 + 48b_1b_3 + 72a_2b_4 + 48a_3b_4 - 96b_1b_4 + 48b_2b_4 + 72b_3b_4 - 72b_4^2)}{1 + 12a_1^2 + 6a_2^2 + 12a_3^2 + 96b_1^2 + 24b_2^2 + 12b_2b_3 + 9b_3^2 + 48b_1b_4 + 36b_4^2}$$

$$NMinimize \to \left\{ -6., \begin{cases} a_1 \to -0.5, & a_2 \to 0.333333, \\ a_3 \to 0.333333, & \\ b_1 \to -0.1, & b_2 \to 0.0666667, \\ b_3 \to 0.0666667, & b_4 \to -0.1 \end{cases} \right\} \quad \Rightarrow \quad E_{gs}/N \geqslant -3$$

Те же результаты были получены через уравнение Шредингера.
Мы ожидаем, что этот метод превзойдет метод через УШ.

Литература

N. Il'in, E. Shpagina, F. Uskov, O. Lychkovskiy
Squaring parametrization of constrained and unconstrained sets of quantum states.
arXiv:1704.03861.

Lychkovskiy, Oleg and Gamayun, Oleksandr and Cheianov, Vadim
Time Scale for Adiabaticity Breakdown in Driven Many-Body Systems and Orthogonality Catastrophe
Phys. Rev. Lett. 119,200401 (2017).

David A. Mazziotti
Advances in Chemical Physics, Reduced-Density-Matrix Mechanics: With Application to Many-Electron Atoms and Molecules
Volume 134. Wiley-Interscience, 1 edition., 2007.

R. Tarrah and R. Valenti
Exact lower bounds to the ground-state energy of spin systems: The two-dimensional $S = \frac{1}{2}$ antiferromagnetic Heisenberg model
Physical review B, 1990.

Спасибо за внимание