Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

И. Г. Бострем, А. С. Овчинников, В. Е. Сеницын, Метод точной диагонализации с сохранением полного спина и учетом точечной симметрии для двумерного изотропного гейзенберговского магнетика, *ТМФ*, 2006, том 149, номер 2, 262–280

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf4233>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.207.199.55

26 апреля 2023 г., 14:17:45

© 2006 г. И. Г. Бострем*, А. С. Овчинников*, В. Е. Синицын*

МЕТОД ТОЧНОЙ ДИАГОНАЛИЗАЦИИ С СОХРАНЕНИЕМ ПОЛНОГО СПИНА И УЧЕТОМ ТОЧЕЧНОЙ СИММЕТРИИ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО ИЗОТРОПНОГО ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО МАГНЕТИКА

Предложен двухпроходный метод точной диагонализации конечного кластера на базисе функций, обладающих определенным полным спином и преобразующихся по определенному неприводимому представлению точечной группы симметрии решетки. Также предложен метод аппроксимации энергетического спектра в термодинамическом пределе с использованием спектра состояний окружения, позволяющий повысить точность вычислений при неизменных размерах кластера. Детали алгоритма подробно иллюстрируются на примере кластеров спина $1/2$ на простой квадратной решетке.

Ключевые слова: модель Гейзенберга, точная диагонализация, кластерные расчеты, теория групп, теория углового момента, двумерный антиферромагнетик.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время магнитные низкоразмерные соединения являются предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований. Многие наблюдаемые в них необычные физические свойства связаны с короткомасштабными спиновыми корреляциями, которые должны быть аккуратно учтены в реалистичных моделях этих систем. Кластерные методы, аппроксимирующие физику бесконечной системы путем решения проблемы для конечного кластера, хорошо подходят для этой цели, поскольку учитывают такие корреляции в пределах кластера.

Широко используемые стандартные численные методы, такие как квантовый метод Монте-Карло (QMC), методы точной диагонализации (ED) [1] и ренормгруппы матрицы плотности (DMRG) [2], [3], хорошо воспроизводят результаты термодинамического предела на кластерном уровне, позволяя получать достаточно точные результаты на системах малого размера для одномерных и двумерных систем. Известными недостатками перечисленных методов являются экспоненциальный рост вычислений при увеличении размеров системы (ED), “проблема знака” для низких

*Уральский государственный университет, Екатеринбург, Россия.
E-mail: Irene.Bostrem@usu.ru, Alexander.Ovchinnikov@usu.ru, Valentine.SinitSyn@usu.ru

температур (QMC), отсутствие общепринятого алгоритма для случая двумерных систем (DMRG) [4].

Кроме того, все перечисленные выше методы обладают одним общим недостатком: они не используют полную симметрию задачи и, следовательно, не сохраняют квантовые числа (полный спин и индекс неприводимого представления точечной группы), которые, в свою очередь, могут быть использованы для классификации состояний и сокращения вычислительной сложности задачи.

Гамильтониан системы часто обладает определенными симметриями, а следовательно, сохраняющимися величинами. Перечислим симметрии, встречающиеся при рассмотрении спиновых систем: 1) изинговская, или XY -симметрия (сохранение намагниченности): $S_{\text{tot}}^z = \text{const}$; 2) симметрия точечной группы (сохранение четности, углового момента); 3) полная $SU(2)$ -симметрия (сохранение S_{tot}^2). Среди этих симметрий обычно только первая широко используется в методах ED и DMRG, и это оказывается весьма эффективным способом сокращения вычислительных затрат. Традиционно считается, что учет полной $SU(2)$ -симметрии и симметрии точечной группы крайне труден в реализации и что для построения собственных состояний S_{tot}^2 , преобразующихся по неприводимым представлениям точечной группы симметрии кластера, требуются затраты, сравнимые с диагонализацией исходного гамильтониана.

С другой стороны, учет спиновой $SU(2)$ -симметрии и точечной симметрии решетки не только приведет к дополнительному сокращению вычислительных усилий, но и позволит классифицировать состояния спиновой системы квантовыми числами полного спина и неприводимого представления точечной группы. И если при современном уровне развития вычислительной техники дополнительное сокращение объема расчетов является недостаточным стимулом к проведению такой трудоемкой работы, то возможность получения качественно новой информации о системе – правил отбора, зависимости наблюдаемых, например энергии, от полного спина – оправдывает усилия по полному учету симметрии.

Отметим, что варианты использования неабелевой спиновой $SU(2)$ -симметрии в рамках метода DMRG предлагались для одномерных IRF (interaction round a face) моделей Сьеррой и Нишино [5]. Такой метод IRF-DMRG с успехом был применен ими к гейзенберговской спиновой цепочке спина $1/2$ и, несколько позже, к гейзенберговским цепочкам спина 1 и 2 [6]. Численный вариант метода DMRG, сохраняющего полный спин, предлагался также в работах Мак-Калаха и Гулачи [7], [8]. Наконец, отметим использование $SU(2)$ -симметрии в методе матричных произведений, являющемся вариационной формулировкой метода DMRG [9], [10], в применении к спиновым цепочкам и лестницам [10], [11].

В данной статье мы развиваем двухпроходный алгоритм точной диагонализации, основанный на использовании непрерывной неабелевой спиновой $SU(2)$ -симметрии и дискретной симметрии точечной группы решетки для двумерной изотропной гейзенберговской спиновой системы. В традиционном методе ED бесконечная решетка моделируется кластером конечных размеров, а энергия связи – энергией кластера, деленной на число связей. В предлагаемом нами методе в кластере выделяются центральный спин и его окружение, которое и служит моделью бесконечной решетки. При первом проходе алгоритма с помощью метода ED решается задача об

определении спектра и собственных функций окружения, а на втором этапе – полного кластера. Спектр системы в термодинамическом пределе аппроксимируется набором энергий взаимодействия центрального спина с окружением.

Все расчеты проводятся на базисе функций определенного полного спина, преобразующихся по конкретному неприводимому представлению точечной группы симметрии кластера. Алгоритм построения такого базиса, основанный на методе проекционного оператора, детально разбирается на примере хорошо изученной системы – гейзенберговского антиферромагнетика спина $1/2$ на квадратной решетке. Так как цель настоящей работы – подробно описать алгоритм, мы сознательно ограничиваемся рассмотрением кластеров небольших размеров 3×3 и $\sqrt{13} \times \sqrt{13}$. Проблема расширения кластера до размеров, имеющих реальный интерес, представляет собой самостоятельную задачу, исследование которой будет представлено нами отдельно.

Статья организована следующим образом: общий формализм для двумерной изотропной гейзенберговской системы спина s вводится в разделе 2. В разделе 3 иллюстрируется применение алгоритма на примере двумерного гейзенберговского антиферромагнетика спина $1/2$. Выводы представлены в разделе 4.

2. ДВУМЕРНАЯ ИЗОТРОПНАЯ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКАЯ СИСТЕМА СПИНА s

На первом шаге алгоритма необходимо выбрать кластер. Основное внимание при выборе кластера должно быть уделено сохранению точечной симметрии решетки. При исследовании антиферромагнетиков необходимо также следить за тем, чтобы окружение центрального узла содержало равное число узлов из каждой подрешетки [12]. Однако проблема выбора оптимального размера и формы кластера, как мы увидим ниже, не так проста.

Разделим гамильтониан кластера на две составляющие:

$$\hat{H} = J \sum_{n, \vec{\delta}} \vec{S}_n \vec{S}_{n+\vec{\delta}} = \hat{H}_u + \hat{V}. \quad (1)$$

Слагаемое $\hat{V} = J \vec{S}_0 \sum_{\vec{\delta}} \vec{S}_{0+\vec{\delta}}$ описывает взаимодействие центрального спина $\vec{S}_0$ с ближайшими соседями на расстояниях $\vec{\delta}$, а оставшиеся слагаемые обозначены как гамильтониан окружения $\hat{H}_u$.

Поскольку по построению кластер сохраняет точечную симметрию решетки, его состояния $|iSM\Gamma\mu\rangle$ с энергиями $E_{iS\Gamma}$ характеризуются значениями полного спина кластера S , его проекцией M и неприводимыми представлениями точечной группы кластера Γ , μ . Различные состояния с одинаковыми величинами S , M и Γ , μ различаются индексом i .

Предположим, что первый проход выполнен, и нам известны собственные значения $E_{i_u S_u \Gamma_u}$ и собственные функции гамильтониана окружения $\hat{H}_u$ в виде $|i_u S_u M_u \Gamma_u \mu_u\rangle$. Тогда базисные функции полного кластера можно построить по обычному правилу сложения моментов:

$$|i_u S_u \Gamma_u; s; SM\Gamma_u \mu_u\rangle = \sum_{\mu_u, \sigma} \begin{bmatrix} S_u & s & S \\ M_u & \sigma & M \end{bmatrix} |i_u S_u M_u \Gamma_u \mu_u\rangle |s\sigma\rangle, \quad (2)$$

где $\begin{bmatrix} S_u & s & S \\ M_u & \sigma & M \end{bmatrix}$ – коэффициент Клебша–Гордана и $|s\sigma\rangle$ – волновая функция центрального спина. Поскольку состояние $|s\sigma\rangle$ остается инвариантным при всех преобразованиях точечной группы симметрии, базисные функции кластера преобразуются так же, как и состояния окружения, т.е. наследуют индексы неприводимых представлений окружения.

Для работы в базисе (2) необходимо преобразовать оператор $\hat{V}$. Перейдем от спиновых операторов $\vec{S}_n$ к их линейным комбинациям, преобразующимся по неприводимым представлениям точечной группы симметрии кластера, т.е. к двойным неприводимым тензорным операторам $\widehat{W}_{q1}^{1A_1} = (1/\sqrt{2}) \sum_{\bar{\delta}} (S_{0+\bar{\delta}})_{q1}^{1A_1}$ и $(S_0)_q^1 \equiv (S_0)_{q1}^{1A_1}$. Оператор $\hat{V}$ теперь может быть представлен в виде тензорного произведения

$$\hat{V} = \sqrt{2} J \sum_q (-1)^q \begin{bmatrix} A_1 & A_1 & A_1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} (S_0)_{q1}^{1A_1} \widehat{W}_{-q1}^{1A_1},$$

где $\begin{bmatrix} A_1 & A_1 & A_1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = 1$ – коэффициент Клебша–Гордана точечной группы кластера [13].

Для расчета матричных элементов гамильтониана (1) используем теорему Вигнера–Эккарта:

$$\langle iSm\Gamma\mu | W_{q\nu}^{1\gamma} | i'S'm'\Gamma'\mu' \rangle = (-1)^{S-m} \begin{pmatrix} S & 1 & S' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \gamma & \Gamma' & \Gamma \\ \nu & \mu' & \mu \end{bmatrix}^* \langle iS\Gamma || W^{1\gamma} || i'S'\Gamma' \rangle. \quad (3)$$

В результате получаем матрицу

$$\begin{aligned} \langle i_u S_u \Gamma_u; s; SM \Gamma_u \mu_u | \hat{H} | i'_u S'_u \Gamma'_u; s; S' M' \Gamma'_u \mu'_u \rangle = \\ = E_{i_u S_u \Gamma_u} \delta_{i_u, i'_u} \delta_{S_u, S'_u} \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u} \delta_{S, S'} \delta_{M, M'} + \\ + \sqrt{2} J (-1)^{S'_u + S + 1/2} \left\{ \begin{matrix} S_u & s & S \\ s & S'_u & 1 \end{matrix} \right\} \delta_{S, S'} \delta_{M, M'} \times \\ \times \langle s || s || s \rangle \langle i_u S_u \Gamma_u || W^{1A_1} || i'_u S'_u \Gamma'_u \rangle \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\left\{ \begin{matrix} S_u & s & S \\ s & S'_u & 1 \end{matrix} \right\}$ обозначает $6j$ -символ [14]. Первый приведенный матричный элемент равен $\langle s || s || s \rangle = \sqrt{s(s+1)(2s+1)}$, а второй может быть вычислен, если известны собственные функции окружения (см. раздел 3). Собственные функции

$$|iSM\Gamma\mu\rangle = \sum_{i_u, S_u} \beta_{i_u S_u \Gamma_u}^{iS\Gamma} |i_u S_u \Gamma_u; s; SM\Gamma\mu\rangle, \quad \Gamma\mu = \Gamma_u \mu_u, \quad (5)$$

и энергетические уровни $E_{iS\Gamma_u}$ определяются прямой диагонализацией кластерного гамильтониана H (4). Зная весовые коэффициенты волновых функций окружения $|\beta_{i_u S_u \Gamma_u}^{iS\Gamma}|^2$, можно рассчитать различные величины, характеризующие спиновую систему на решетке.

Прежде всего можно вычислить энергию связи, определяемую соотношением

$$\varepsilon_{iS\Gamma_u} = \frac{1}{z} \left(E_{iS\Gamma_u} - \sum_{i_u, S_u} E_{i_u S_u \Gamma_u} |\beta_{i_u S_u \Gamma_u}^{iS\Gamma_u}|^2 \right) = \frac{1}{z} (E_{iS\Gamma_u} - \langle E_{iS\Gamma_u}^{\text{env}} \rangle), \quad (6)$$

где z – число ближайших соседей центрального спина, а второе слагаемое в правой части – средняя энергия окружения центрального спина. Значения $\varepsilon_{iS\Gamma_u}$ лучше

аппроксимируют энергетический спектр системы по сравнению с энергией $E_{iS\Gamma_u}$, деленной на число связей (при условии надлежащего выбора кластера).

Другой важной величиной является среднее значение проекции спина $\hat{S}_z$. Естественно, что наилучшим приближением к результату для бесконечной решетки является среднее, рассчитанное для центрального спина:

$$\begin{aligned} \langle iS\Gamma\mu|(S_0)_q|iS\Gamma\mu\rangle &= (-1)^{S-M} \begin{pmatrix} S & 1 & S \\ -M & q & M \end{pmatrix} \langle s||S||s\rangle \times \\ &\times \sum_{i_u, S_u} |\beta_{i_u S_u \Gamma}^{iS\Gamma}|^2 (-1)^{1+S_u+s+S} (2S+1) \begin{Bmatrix} S & 1 & S \\ s & S_u & s \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (7)$$

Аналогично могут быть рассчитаны и различные корреляционные функции.

Вернемся к первому этапу алгоритма – задаче об определении спектра и собственных функций окружения. Оптимальный алгоритм определяется симметрией кластера, поэтому соответствующие расчеты подробно разобраны на конкретном примере (см. раздел 3). Важно отметить, что, как следует из соотношения (4), для построения состояния кластера $|iS\Gamma\mu\rangle$ необходимы только состояния окружения $|i_u S_u M_u \Gamma_u \mu_u\rangle$ с квантовыми числами $|S-s| \leq S_u \leq S+s$ и $\Gamma_u \mu_u = \Gamma \mu$.

3. АНТИФЕРРОМАГНЕТИК СПИНА 1/2 НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

В соответствии с предписаниями раздела 2 выберем кластер в виде ромба, как показано на рисунке, и разделим окружение центрального спина на две части. Первая часть содержит четыре несвязанных подкластера α , β , γ и δ , а вторая часть состоит из четырех линий a , b , c и d , сходящихся к центральному узлу. Очевидно, что подкластеры взаимодействуют со спинами, принадлежащими линиям. Такие спины для краткости будем называть далее *коннекторами*.

По построению гамильтониан окружения имеет вид

$$H_u = J \sum_{n, \delta} \vec{S}_n \vec{S}_{n+\delta} + J \sum_{j, \langle t, \tau \rangle} \vec{S}_{jt} \vec{S}_{j\tau}, \quad (8)$$

где первое слагаемое описывает взаимодействия внутри подкластеров α , β , γ и δ , а второе слагаемое суммирует все спаривания между спинами подкластеров $\vec{S}_{jt}$ и коннекторов $\vec{S}_{j\tau}$ из j -й конфигурационной сферы. Естественно, предварительно необходимо определить собственные функции и энергетический спектр подкластеров, т.е. диагонализировать первое слагаемое в (8).

Для расчета матрицы H_u образуем базис

$$\begin{aligned} |i_I S_I \Gamma_I i_{II} S_{II} \Gamma_{II}; S_u M_u \Gamma_u \mu_u\rangle &= \\ &= \sum_{m_I, m_{II}} \sum_{\mu_I, \mu_{II}} \begin{bmatrix} S_I & S_{II} & S_u \\ m_I & m_{II} & M_u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_I & \Gamma_{II} & \Gamma_u \\ \mu_I & \mu_{II} & \mu_u \end{bmatrix} |i_I S_I m_I \Gamma_I \mu_I\rangle |i_{II} S_{II} m_{II} \Gamma_{II} \mu_{II}\rangle \end{aligned} \quad (9)$$

из собственных функций коннекторов $|i_I S_I m_I \Gamma_I \mu_I\rangle$ и подкластеров $|i_{II} S_{II} m_{II} \Gamma_{II} \mu_{II}\rangle$. Алгоритм их построения будет детально описан ниже.

Пример кластера $\sqrt{13} \times \sqrt{13}$, используемого в расчетах. Координационные сферы обозначены жирными штриховыми линиями. Подкластеры отмечены овалами и обозначены греческими буквами, спины коннекторов – латинскими.

Второе слагаемое в (8) необходимо переписать через двойные неприводимые тензорные операторы $W_{q\nu}^{1\gamma}$ и $U_{q\nu}^{1\gamma}$, построенные из спиновых операторов подкластеров и коннекторов, соответственно:

$$H_u = J \sum_{n, \vec{\delta}} \vec{S}_n \vec{S}_{n+\vec{\delta}} + J \sum_{\gamma, \nu} \sum_q (-1)^q \begin{bmatrix} \gamma & \gamma & A_1 \\ \nu & \nu & 1 \end{bmatrix} W_{q\nu}^{1\gamma} U_{-q\nu}^{1\gamma}, \quad (10)$$

где γ, ν – неприводимое представление точечной группы D_4 .

С помощью теоремы Вигнера–Экарта получаем (см. приложение А)

$$\begin{aligned} & \langle i_I S_I \Gamma_I i_{II} S_{II} \Gamma_{II}; S_u M_u \Gamma_u \mu_u | \hat{H}_u | i'_I S'_I \Gamma'_I i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II}; S'_u M'_u \Gamma'_u \mu'_u \rangle = \\ & = (E_{i_I S_I \Gamma_I} + E_{i_{II} S_{II} \Gamma_{II}}) \times \\ & \times \delta_{i_I, i'_I} \delta_{i_{II}, i'_{II}} \delta_{S_I, S'_I} \delta_{S_{II}, S'_{II}} \delta_{\Gamma_I, \Gamma'_I} \delta_{\Gamma_{II}, \Gamma'_{II}} \delta_{S_u, S'_u} \delta_{M_u, M'_u} \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u} + \\ & + (-1)^{S'_I + S_{II} + S_u} \left\{ \begin{matrix} S_I & S_{II} & S_u \\ S'_{II} & S'_I & 1 \end{matrix} \right\} \sum_{\gamma} F(\Gamma_I \Gamma_{II} \Gamma_u; \Gamma'_I \Gamma'_{II} \gamma) \times \\ & \times \langle i_I S_I \Gamma_I \| U^{1\gamma} \| i'_I S'_I \Gamma'_I \rangle \langle i_{II} S_{II} \Gamma_{II} \| W^{1\gamma} \| i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II} \rangle \delta_{S_u, S'_u} \delta_{M_u, M'_u} \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u}. \quad (11) \end{aligned}$$

После диагонализации H_u получаем собственные функции

$$|i_u S_u \Gamma_u \mu_u\rangle = \sum_{i_I, S_I, \Gamma_I} \sum_{i_{II}, S_{II}, \Gamma_{II}} \alpha_{i_I S_I \Gamma_I; i_{II} S_{II} \Gamma_{II}}^{i_u S_u \Gamma_u} |i_I S_I \Gamma_I i_{II} S_{II} \Gamma_{II}; S_u M_u \Gamma_u \mu_u\rangle$$

и спектр окружения $E_{i_u S_u \Gamma_u}$.

Теперь мы можем рассчитать приведенный матричный элемент, который входит в матрицу полного кластера (4) (см. приложение Б):

$$\langle i_u S_u \Gamma_u \| W^{1A_1} \| i'_u S'_u \Gamma'_u \rangle = \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \sum_{i_I, S_I, \Gamma_I} \sum_{i'_{II}, S'_{II}, \Gamma'_{II}} \sum_{i_{II}, S_{II}, \Gamma_{II}} \alpha_{i_I S_I \Gamma_I; i_{II} S_{II} \Gamma_{II}}^{i_u S_u \Gamma_u} \alpha_{i_I S_I \Gamma_I; i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II}}^{i'_u S'_u \Gamma'_u} \times$$

$$\times (-1)^{1+S_I+S'_I+S_u}[S_u, S'_u]^{1/2} \begin{Bmatrix} S_u & 1 & S'_u \\ S'_I & S_I & S_{II} \end{Bmatrix} \langle i_{II} S_{II} \Gamma_{II} \| W^{1A_1} \| i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II} \rangle. \quad (12)$$

Матрица из редуцированных матричных элементов (12) имеет размер 54×54 . Для изложения деталей алгоритма удобно временно перейти к рассмотрению меньшего кластера в форме квадрата 3×3 . Данный кластер содержит все необходимые компоненты: центральный узел и окружение, состоящее из одиночных спинов S_α , S_β , S_γ , S_η (подкластеры) и коннекторов S_a , S_b , S_c , S_d . В этом случае матрицы будут иметь существенно меньший размер, что позволит привести выражения для них в тексте статьи.

Спиновые волновые функции коннекторов (подкластеров) с полным спином S_I (S_{II}) и проекцией M_I (M_{II}) имеют вид

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} (S_{ab}) \frac{1}{2} \frac{1}{2} (S_{cd}) S_I M_I \right\rangle &= \sum_{m_a, m_b, m_c, m_d} \sum_{m_{ab}, m_{cd}} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & S_{ab} \\ m_a & m_b & m_{ab} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & S_{cd} \\ m_c & m_d & m_{cd} \end{bmatrix} \times \\ &\times \begin{bmatrix} S_{ab} & S_{cd} & S_I \\ m_{ab} & m_{cd} & M_I \end{bmatrix} \left| \frac{1}{2} m_a \right\rangle \left| \frac{1}{2} m_b \right\rangle \left| \frac{1}{2} m_c \right\rangle \left| \frac{1}{2} m_d \right\rangle, \\ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} (S_{\alpha\beta}) \frac{1}{2} \frac{1}{2} (S_{\gamma\eta}) S_{II} M_{II} \right\rangle &= \sum_{m_\alpha, m_\beta, m_\gamma, m_\eta} \sum_{m_{\alpha\beta}, m_{\gamma\eta}} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & S_{\alpha\beta} \\ m_\alpha & m_\beta & m_{\alpha\beta} \end{bmatrix} \times \\ &\times \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & S_{\gamma\eta} \\ m_\gamma & m_\eta & m_{\gamma\eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{\alpha\beta} & S_{\gamma\eta} & S_{II} \\ m_{\alpha\beta} & m_{\gamma\eta} & M_{II} \end{bmatrix} \left| \frac{1}{2} m_\alpha \right\rangle \left| \frac{1}{2} m_\beta \right\rangle \left| \frac{1}{2} m_\gamma \right\rangle \left| \frac{1}{2} m_\eta \right\rangle. \end{aligned}$$

При таком описании допустимыми состояниями четверок подкластеров или коннекторов являются $|00; 00\rangle$, $|11; 00\rangle$, $|01; 1M\rangle$, $|10; 1M\rangle$, $|11; 1M\rangle$, $|11; 2M\rangle$ (здесь и далее для краткости мы опускаем обозначение одиночного спина $1/2$).

Рассмотрим четыре коннектора. Легко заметить, что функции $|S_{ab}S_{cd}; SM\rangle$ образуют базис представления (в общем случае приводимого) группы D_4 :

$$\hat{g}|S_{ab}S_{cd}; SM\rangle = D_{S'_{ab}S'_{cd}, S_{ab}S_{cd}}^{(S)}(\hat{g})|S'_{ab}S'_{cd}; SM\rangle.$$

Будем пользоваться введенными в приложении В мультииндексами для обозначения векторов базиса $\kappa = \{S_{ab}S_{cd}\}$. Верхний индекс матрицы обозначает спин S . Матрицы $D_{\kappa, \kappa'}^{(0)}(\hat{g})$ имеют следующий явный вид (подробности см. в приложении В):

$$\begin{aligned} D_{\kappa, \kappa'}^{(0)}(E) &= D_{\kappa, \kappa'}^{(0)}(C_4^2) = D_{\kappa, \kappa'}^{(0)}(C_2^x) = D_{\kappa, \kappa'}^{(0)}(C_2^y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ D_{\kappa, \kappa'}^{(0)}(C_4) &= D_{\kappa, \kappa'}^{(0)}(C_4^3) = D_{\kappa, \kappa'}^{(0)}(\sigma'_v) = D_{\kappa, \kappa'}^{(0)}(\sigma''_v) = \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Функции $|00; 00\rangle$, $|11; 00\rangle$ образуют базис этого двумерного представления. Еще одно представление D_4 получается с помощью функций $|01; 1M\rangle$, $|10; 1M\rangle$ и $|11; 1M\rangle$

$$\begin{aligned}
 D_{\kappa, \kappa'}^{(1)}(E) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D_{\kappa, \kappa'}^{(1)}(C_4) &= \begin{pmatrix} -1/2 & -1/2 & 1/\sqrt{2} \\ -1/2 & -1/2 & -1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \\
 D_{\kappa, \kappa'}^{(1)}(C_4^2) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & D_{\kappa, \kappa'}^{(1)}(C_4^3) &= \begin{pmatrix} -1/2 & -1/2 & -1/\sqrt{2} \\ -1/2 & -1/2 & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \\
 D_{\kappa, \kappa'}^{(1)}(C_2^x) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D_{\kappa, \kappa'}^{(1)}(C_2^y) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\
 D_{\kappa, \kappa'}^{(1)}(\sigma'_v) &= \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 1/\sqrt{2} \\ 1/2 & 1/2 & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \\
 D_{\kappa, \kappa'}^{(1)}(\sigma''_v) &= \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & -1/\sqrt{2} \\ 1/2 & 1/2 & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Схожим образом находим матрицы $D_{\kappa, \kappa'}^{(2)}(\hat{g})$ в базисе $|11; 2M\rangle$:

$$D_{\kappa, \kappa'}^{(2)}(\hat{g}) = \delta_{\kappa, \kappa'} \quad \forall \hat{g} \in D_4.$$

Представления $D^{(S)}$ разлагаются в прямые суммы неприводимых представлений $D^{(0)} = D^{(0A_1)} \oplus D^{(0B_1)}$, $D^{(1)} = D^{(1B_2)} \oplus D^{(1E)}$, $D^{(2)} = D^{(2A_1)}$. Базисные функции этих неприводимых представлений можно записать с помощью преобразования подобия:

$$|SM; \Gamma\mu\rangle = \sum_{S_{12}, S_{34}} \hat{T}_{S_{12}S_{34}; \Gamma\mu}^{(S)} |S_{12}S_{34}; SM\rangle, \quad (13)$$

где матрицы $\hat{T}_{S_{12}S_{34}; \Gamma\mu}^{(S)}$ строятся с помощью техники проекционного оператора по матрицам представления. Удобно объединить их в общую матрицу $\hat{T}_{S_{12}S_{34}S'; \Gamma\mu} = \hat{T}_{S_{12}S_{34}; \Gamma\mu}^{(S)} \delta_{S, S'}$:

	$ 00; A_1 1\rangle$	$ 00; B_1 1\rangle$	$ 1M; B_2 1\rangle$	$ 1M; E1\rangle$	$ 1M; E2\rangle$	$ 2M; A_1 1\rangle$
$ 00; 00\rangle$	$\sqrt{3}/2$	$1/2$	0	0	0	0
$ 11; 00\rangle$	$-1/2$	$\sqrt{3}/2$	0	0	0	0
$ 01; 1M\rangle$	0	0	$1/\sqrt{2}$	0	$1/\sqrt{2}$	0
$ 10; 1M\rangle$	0	0	$1/\sqrt{2}$	0	$-1/\sqrt{2}$	0
$ 11; 1M\rangle$	0	0	0	1	0	0
$ 11; 2M\rangle$	0	0	0	0	0	1

Матрица преобразования подобия для другой четверки спинов (подкластеры) определяется аналогично:

	$ 00; A_1 1\rangle$	$ 00; B_2 1\rangle$	$ 1M; B_1 1\rangle$	$ 1M; E1\rangle$	$ 1M; E2\rangle$	$ 2M; A_1 1\rangle$
$ 00; 00\rangle$	$\sqrt{3}/2$	$1/2$	0	0	0	0
$ 11; 00\rangle$	$-1/2$	$\sqrt{3}/2$	0	0	0	0
$ 01; 1M\rangle$	0	0	$1/\sqrt{2}$	$1/2$	$1/2$	0
$ 10; 1M\rangle$	0	0	$1/\sqrt{2}$	$-1/2$	$-1/2$	0
$ 11; 1M\rangle$	0	0	0	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$	0
$ 11; 2M\rangle$	0	0	0	0	0	1

Двойные неприводимые тензорные операторы кластера $U_{q\mu_1}^{1\Gamma_1}$ и $W_{q\mu_1}^{1\Gamma_1}$, преобразующиеся по неприводимым представлениям $\Gamma_{1\mu_1}$ точечной группы симметрии D_4 , также рассчитываем методом проекционного оператора:

$$\begin{aligned}
 U_{q1}^{1A_1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(S_{1q} + S_{2q} + S_{3q} + S_{4q}), & U_{q1}^{1B_2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(S_{1q} - S_{2q} + S_{3q} - S_{4q}), \\
 U_{q1}^{1E} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(S_{1q} + S_{2q} - S_{3q} - S_{4q}), & U_{q2}^{1E} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(S_{1q} - S_{2q} - S_{3q} + S_{4q}), \\
 W_{q1}^{1A_1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(S_{\alpha q} + S_{\beta q} + S_{\gamma q} + S_{\eta q}), & W_{q1}^{1B_1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(S_{\alpha q} - S_{\beta q} + S_{\gamma q} - S_{\eta q}), \\
 W_{q1}^{1E} &= S_{\alpha q} - S_{\gamma q}, & W_{q2}^{1E} &= S_{\eta q} - S_{\beta q}.
 \end{aligned} \tag{14}$$

Редуцированные матричные элементы неприводимых операторов, входящих в выражение (11), могут быть получены напрямую из соотношения

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} \gamma & \Gamma' & \Gamma \\ \nu & \mu' & \mu \end{bmatrix}^* \langle S\Gamma \| W^{1\gamma} \| S'\Gamma' \rangle &= \\
 = \sum_{S_{12}, S_{34}} \sum_{S'_{12}, S'_{34}} \hat{T}_{S_{12}S_{34}S; S\Gamma\mu}^* \hat{T}_{S'_{12}S'_{34}S'; S'\Gamma'\mu'} \langle S_{12}S_{34}; S \| W_{\nu}^{1\gamma} \| S'_{12}S'_{34}; S' \rangle, & \tag{15}
 \end{aligned}$$

непосредственно вытекающего из теоремы Вигнера–Экарта и преобразования подобия (13). Чтобы рассчитать редуцированные матричные элементы, которые входят в правую часть соотношения (15), следует выразить $\hat{U}_{q\mu}^{1\Gamma}$, $\hat{W}_{q\mu}^{1\Gamma}$ через линейные комбинации (14) и воспользоваться выражениями для редуцированных матричных

$$\begin{aligned}
 \langle S_{12}S_{34}; S_I \| S_{12} \| S'_{12}S'_{34}; S'_I \rangle &= (-1)^{1+S_{12}+S_{34}+S'_{12}+S'_I} [S_{12}, S'_{12}, S_I, S'_I]^{1/2} \times \\
 &\times \left\{ \begin{matrix} S'_{12} & 1 & S_{12} \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S'_I & 1 & S_I \\ S_{12} & S_{34} & S'_{12} \end{matrix} \right\} \left\langle \frac{1}{2} \left\| S \right\| \frac{1}{2} \right\rangle \delta_{S_{34}, S'_{34}}, \\
 \langle S_{12}S_{34}; S_I \| S_2 \| S'_{12}S'_{34}; S'_I \rangle &= (-1)^{1+2S'_{12}+S_{34}+S'_I} [S_{12}, S'_{12}, S_I, S'_I]^{1/2} \times \\
 &\times \left\{ \begin{matrix} S'_{12} & 1 & S_{12} \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S'_I & 1 & S_I \\ S_{12} & S_{34} & S'_{12} \end{matrix} \right\} \left\langle \frac{1}{2} \left\| S \right\| \frac{1}{2} \right\rangle \delta_{S_{34}, S'_{34}}, \\
 \langle S_{12}S_{34}; S_I \| S_3 \| S'_{12}S'_{34}; S'_I \rangle &= (-1)^{1+S_{12}+2S'_{34}+S'_I} [S_{34}, S'_{34}, S_I, S'_I]^{1/2} \times \\
 &\times \left\{ \begin{matrix} S'_{34} & 1 & S_{34} \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S'_I & 1 & S_I \\ S_{34} & S_{12} & S'_{34} \end{matrix} \right\} \left\langle \frac{1}{2} \left\| S \right\| \frac{1}{2} \right\rangle \delta_{S_{12}, S'_{12}}, \\
 \langle S_{12}S_{34}; S_I \| S_4 \| S'_{12}S'_{34}; S'_I \rangle &= (-1)^{1+S_{12}+S_{34}+S'_{34}+S'_I} [S_{34}, S'_{34}, S_I, S'_I]^{1/2} \times \\
 &\times \left\{ \begin{matrix} S'_{34} & 1 & S_{34} \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S'_I & 1 & S_I \\ S_{34} & S_{12} & S'_{34} \end{matrix} \right\} \left\langle \frac{1}{2} \left\| S \right\| \frac{1}{2} \right\rangle \delta_{S_{12}, S'_{12}}.
 \end{aligned} \tag{16}$$

Выполнив необходимые вычисления и воспользовавшись соотношением (15), получим следующие выражения для редуцированных матричных элементов, входящих в (11):

$$\begin{aligned}
 \langle S_I \Gamma_I \| U^{1A_1} \| S'_I \Gamma'_I \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_I \| S \| S_I \rangle \delta_{S_I, S'_I} \delta_{\Gamma_I, \Gamma'_I}, \\
 \langle S_{II} \Gamma_{II} \| W^{1A_1} \| S'_{II} \Gamma'_{II} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_{II} \| S \| S_{II} \rangle \delta_{S_{II}, S'_{II}} \delta_{\Gamma_{II}, \Gamma'_{II}}, \\
 \langle S_I \Gamma_I \| U^{1E} \| S'_I \Gamma'_I \rangle &= \begin{bmatrix} & 0A_1 & 0B_1 & 1B_2 & 1E & 2A_1 \\ 0A_1 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0B_1 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 \\ 1B_2 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 \\ 1E & -1 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} & 0 & -\sqrt{5} \\ 2A_1 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{10} & 0 \end{bmatrix}, \\
 \langle S_{II} \Gamma_{II} \| W^{1E} \| S'_{II} \Gamma'_{II} \rangle &= \begin{bmatrix} & 0A_1 & 0B_2 & 1B_1 & 1E & 2A_1 \\ 0A_1 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0B_2 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 1B_1 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 \\ 1E & -1 & -\sqrt{3} & -\sqrt{3} & 0 & -\sqrt{5} \\ 2A_1 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{10} & 0 \end{bmatrix}.
 \end{aligned} \tag{17}$$

Теперь мы можем определить номенклатуру возможных состояний окружения и рассчитать энергии и собственные функции любого из них. Приведем результаты для основного состояния. Наши расчеты показывают, что оно принадлежит сектору гильбертова пространства с квантовыми числами $S = 1/2$ и $\Gamma = A_1$. Поэтому мы ограничимся лишь теми состояниями окружения, которые необходимы для получения состояний кластера с $S = 1/2$ и $\Gamma = A_1$, а именно $S_u \Gamma_u = 0A_1, 1A_1$.

Таблица 1. Состояния окружения симметрии $0A_1$

i_u	$\alpha_{0A_1 0A_1}^{i_u 0A_1}$	$\alpha_{1E1E}^{i_u 0A_1}$	$\alpha_{2A_1 2A_1}^{i_u 0A_1}$	$E_{i_u 0A_1}$
1	0.071	0.449	0.890	$-3.651J$
2	0.569	0.715	-0.406	$-0.726J$
3	-0.819	0.535	-0.205	$0.377J$

Таблица 2. Состояния окружения симметрии $1A_1$

i_u	$\alpha_{0A_3 1A_3}^{i_u 1A_1}$	$\alpha_{1A_4 0A_4}^{i_u 1A_1}$	$\alpha_{1E1E}^{i_u 1A_1}$	$\alpha_{2A_1 2A_1}^{i_u 1A_1}$	$E_{i_u 1A_1}$
1	0.153	0.153	-0.478	-0.851	$-3.128J$
2	-0.470	-0.470	0.566	-0.487	$-1.202J$
3	-0.505	-0.505	-0.672	0.196	$1.330J$
4	-0.707	0.707	0	0	0

Используя соотношение (11) и явные выражения для ненулевых сумм коэффициентов Клебша–Гордана группы D_4 (см. ниже формулу (20))

$$F(A_1 A_1 A_1; A_1, A_1, A_1) = F(E E A_1; A_1 A_1 E) = F(E E A_1; E E A_1) = 1,$$

$$F(A_1 A_1 A_1; E E E) = \frac{1}{2},$$

получаем

$$\hat{H}_u^{(0A_1)} = \begin{bmatrix} 0 & -J/\sqrt{3} & 0 \\ -J/\sqrt{3} & -J & -J\sqrt{5/3} \\ 0 & -J\sqrt{5/3} & -3 \end{bmatrix}$$

в базисе состояний $|0A_1 0A_1; 00A_1\rangle$, $|1E1E; 00A_1\rangle$, $|2A_1 2A_1; 00A_1\rangle$. Диагонализация дает три состояния окружения симметрии $0A_1$ (см. табл. 1).

Аналогичное рассмотрение для оператора $\hat{V}$ с $S_u = 1$ приводит к матричному представлению

$$\hat{H}_u^{(1A_1)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & J & 0 \\ 0 & 0 & J & 0 \\ J & J & -J/2 & -\sqrt{5}J/2 \\ 0 & 0 & -\sqrt{5}J/2 & -5J/2 \end{bmatrix}$$

в базисе состояний $|0B_1 1B_1; 1MA_1\rangle$, $|1B_2 0B_2; 1MA_1\rangle$, $|1E1E; 1MA_1\rangle$, $|2A_1 2A_1; 1MA_1\rangle$. В табл. 2 приведены данные о состояниях окружения симметрии $1A_1$. Используя рекуррентное соотношение (12) с начальными значениями (17), определяем редуцированные матричные элементы на базисе окружения $|i_u S_u A_1\rangle$. Подставляя их в соотношение (4), находим целевые состояния кластера $|i \frac{1}{2} MA_1\rangle$ (см. (5)) и их энергии $E_{i \frac{1}{2} A_1}$, $i = 1, \dots, 7$.

Данные для основного состояния приводятся в табл. 3. Энергия связи в основном состоянии, рассчитанная по формуле (6), равна $\varepsilon_g = -0.3442J$. Для сравнения приведем известные значения энергии связи: $\varepsilon_g = -0.32679J$ (DMRG на квадратной

ТАБЛИЦА 3. Основное состояние кластера

$\beta_{10A_1}^g$	$\beta_{20A_1}^g$	$\beta_{30A_1}^g$	$\beta_{11A_1}^g$	$\beta_{21A_1}^g$	$\beta_{31A_1}^g$	$\beta_{41A_1}^g$	E_g
-0.712	0.044	0.010	-0.695	0.0048	-0.090	0.011	-4.749

решетке размера 20×20 с 150 базисными функциями [15]); $\varepsilon_g = -0.3346J$ (DMRG, экстраполяция на бесконечную решетку [15]); $\varepsilon_g = -0.3347J$ (QMC [16]).

Среднее значение S_z -проекции центрального спина составляет

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{2} \left(\sum_{i_u} |\beta_{i_u 0A_1}^g|^2 - \frac{1}{3} \sum_{i_u} |\beta_{i_u 1A_1}^g|^2 \right) \approx \frac{1}{2} \times 0.375,$$

что дает величину намагниченности $M = \sqrt{3\langle S_z \rangle^2} = 0.299$. Для сравнения результатов, полученный методом QMC [16], дает значение $M = 0.3070$.

Напомним, что мы выбрали кластер минимальных размеров в методических целях, чтобы детально описать алгоритм построения базисных функций, имеющих полный спин и преобразующихся по определенному неприводимому представлению, а также работу с этим базисом. Полученные с этим базисом параметры основного состояния, естественно, не могут претендовать на точность, но тем не менее позволяют сделать несколько качественных выводов.

1. Основное состояние окружения и полного кластера относится к тождественному представлению A_1 .
2. В волновую функцию основного состояния с подавляющим весом входят нижние по энергии состояния окружения соответствующей симметрии:

$$|\beta_{10A_1}^g|^2 + |\beta_{11A_1}^g|^2 \approx 0.989.$$

Следует отметить, что коэффициенты $|\beta|^2$ соответствуют диагональным элементам редуцированной матрицы плотности в методе DMRG [2].

3. Предлагаемый нами способ расчета энергии связи позволяет заметно улучшить точность при неизменных размерах кластера. Среднее значение энергии связи составляет $E_g/12 = -0.396J$, что существенно хуже.

Детально рассмотрев алгоритм, вернемся к системе, состоящей из двух координатных сфер, – ромбу $\sqrt{13} \times \sqrt{13}$. Его конструкция использует такие же коннекторы, как и в предыдущем случае, но подкластеры α (β , γ , η) состоят из спиновых пар с энергиями

$$E_{S_\alpha} = \frac{J}{2} \left[S_\alpha(S_\alpha + 1) - \frac{3}{2} \right], \quad S_\alpha = 0, 1.$$

Предполагается, что спины $S_{1\alpha}$ и $S_{2\alpha}$ в паре находятся в первой и второй конфигурационных сферах, соответственно. В базисе полного спина $|1/2 \ 1/2; S_\alpha M_\alpha\rangle$ их редуцированные матричные элементы имеют вид

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} S_\alpha \left\| S_{1\alpha} \right\| \frac{1}{2} \frac{1}{2} S_{\alpha'} \right\rangle = \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix},$$

Таблица 4. Разложение гильбертова пространства, связанного с четырьмя подкластерами. Число в скобках указывает степень вырождения состояния

$S_{II} = 0$	$S_{II} = 1$	$S_{II} = 2$	$S_{II} = 3$	$S_{II} = 4$
$ 0E_\nu\rangle$ (2)	$ 1E_\nu\rangle$ (8)	$ 2E_\nu\rangle$ (4)	$ 3E_\nu\rangle$ (2)	$ 4A_1\rangle$ (1)
$ 0B_2\rangle$ (3)	$ 1B_2\rangle$ (1)	$ 2B_2\rangle$ (3)	$ 3B_1\rangle$ (2)	
$ 0B_1\rangle$ (1)	$ 1B_1\rangle$ (5)	$ 2B_1\rangle$ (3)	$ 3A_1\rangle$ (1)	
$ 0A_2\rangle$ (1)	$ 1A_2\rangle$ (3)	$ 2A_2\rangle$ (1)		
$ 0A_1\rangle$ (5)	$ 1A_1\rangle$ (3)	$ 2A_1\rangle$ (5)		

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} S_\alpha \left\| S_{2\alpha} \right\| \frac{1}{2} \frac{1}{2} S_{\alpha'} \right\rangle = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}.$$

Эти значения используются в качестве начальных в расчетах по формулам (11), (12). Базисные функции неприводимых представлений строятся тем же способом, который использовался для кластера 3×3 . Связанное с четырьмя подкластерами гильбертово пространство $|S_\alpha S_\beta (S_{\alpha\beta}) S_\gamma S_\eta S_{\gamma\eta}; S_{II} M_{II}\rangle$ может быть представлено в виде прямой суммы

$$\tilde{H} = \bigoplus_{S_{II}=0,\dots,4} \tilde{H}_{S_{II}}, \quad \dim \tilde{H} = 70,$$

со следующими размерностями подпространств: $\dim \tilde{H}_0 = 14$, $\dim \tilde{H}_1 = 28$, $\dim \tilde{H}_2 = 20$, $\dim \tilde{H}_3 = 7$, $\dim \tilde{H}_4 = 1$. Эти базисные функции обеспечивают представления $D^{(S_{II})}$ группы D_4 , которые могут быть разложены на неприводимые представления. Такая декомпозиция соответствует разложению гильбертова пространства в сумму секторов (см. табл. 4). Из-за двукратного вырождения состояний $|S_{II} E_\nu\rangle$, $\nu = 1, 2$, матрицы, образованные из редуцированных матричных элементов $\langle i_{II} S_{II} \Gamma_{II} \| W^{1\gamma} \| i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II} \rangle$, $\gamma = A_1, E$, сокращаются до размера 54×54 . Кроме того, в отличие от результата для кластера 3×3 , матрица $\langle i_{II} S_{II} \Gamma_{II} \| W^{1A_1} \| i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II} \rangle$ не является диагональной. Построение базиса для коннекторов $|S_I m_I \Gamma_I \mu_I\rangle$ не изменится по сравнению с предыдущим случаем. Дальнейшие действия воспроизводят ход процедуры, использовавшейся для кластера 3×3 . Вначале строится базисный набор окружения $|S_I \Gamma_I i_2 S_{II} \Gamma_{II}; S_u M_u \Gamma_u \mu_u\rangle$, а затем используются соотношения (11), (4), (6) для нахождения спектров и собственных функций окружения и полного кластера.

Результаты, полученные для кластера $\sqrt{13} \times \sqrt{13}$, весьма поучительны. Непосредственный расчет показал, что основное состояние окружения обладает квантовыми числами $S_u = 2$ и $\Gamma_u = A_1$. Это означает, что ромб, несмотря на то что он топологически более совершенен (все внутренние узлы имеют по четыре соседа, а граничные – по три), служит плохой моделью бесконечной решетки. Очевидно, добавление четырех новых узлов нарушило условие равенства узлов в подрешетках, что и привело к снижению точности.

Основное состояние кластера имеет симметрию $\frac{5}{2} A_1$, для определения его энергии потребовались состояния окружения с $S \Gamma_u = 2A_1, 3A_1$. Редуцированные матричные элементы, появляющиеся в выражении (4), образуют матрицы размерностей

41×41 и 22×22 , соответственно. Следовательно, гамильтониан полного кластера имеет размерность 63×63 . Энергия основного состояния равна $E_g(52A_1) = -5.779J$. Значение энергии связи, как и следовало ожидать, далеко от истинного значения $\varepsilon_g = -0.30925J$.

Анализ всего спектра энергий связи центрального узла дает еще один интересный результат: минимальное значение энергии связи равно $\varepsilon_{\min} = -0.3229J$ (получено из состояния симметрии $\frac{3}{2}A_1$). Похожая ситуация, когда минимальная энергия связи соответствует не основному состоянию кластера, наблюдалась и в расчетах спектра антиферромагнитных цепочек методом DMRG [2].

Тем не менее результаты, полученные при диагонализации кластера $\sqrt{13} \times \sqrt{13}$, подтвердили качественные выводы, сделанные ранее при анализе основного состояния квадрата 3×3 : 1) основное состояние и окружения, и полного кластера вновь имеет симметрию A_1 ; 2) из 63 базисных состояний вклад трех нижних по энергии уровней окружения $2A_1$ и нижнего уровня симметрии окружения $3A_1$ в сумму диагональных элементов матрицы плотности полного кластера составляет 0.993.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной статье представлен полуаналитический кластерный алгоритм расчета полного спектра и собственных функций для изотропной модели Гейзенберга. Формализм основан на теоретико-групповом анализе точечной группы симметрии кластера, технике спиновой неабелевой $SU(2)$ -симметрии и специальном способе аппроксимации энергетического спектра в термодинамическом пределе.

Благодаря встроенному теоретико-групповому анализу состояния кластера можно разложить на сектора, принадлежащие различным неприводимым представлениям точечной группы и значениям полного спина, что позволяет работать с каждым состоянием в отдельности (см. замечание в конце раздела 2). Очевидно, что это дает дополнительные преимущества для параллельных вычислений.

К достоинствам метода следует отнести и то, что его можно использовать при любой величине спина на решетке любой симметрии. Это один из немногих методов, который дает информацию о полном спектре системы.

Основным недостатком предлагаемого метода является большой объем предварительных вычислений, поэтому применять его целесообразно именно в тех случаях, когда действительно необходима дополнительная информация о системе, которую предоставляет метод.

Для дальнейшего развития метода нужно решить проблему расширения кластера до размеров, обеспечивающих требуемую точность вычислений, а также задачу восстановления трансляционной симметрии решетки. Отметим, что простое добавление новых узлов к исходному кластеру быстро ведет к экспоненциальному росту вычислений, поэтому возможным решением является процедура сокращения гильбертова пространства расширенного кластера с использованием квантовых чисел исходного кластера и добавляемых фрагментов решетки. Возможный способ сокращения базиса можно определить из анализа структуры соответствующих собственных функций. Результаты этих исследований будут представлены нами отдельно.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Вычислим матричный элемент взаимодействия между спинами подкластеров и коннекторов:

$$\begin{aligned}
 & \langle i_I S_I \Gamma_I i_{II} S_{II} \Gamma_{II}; S_u M_u \Gamma_u \mu_u | \hat{H}_u | i'_I S'_I \Gamma'_I i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II}; S'_u M'_u \Gamma'_u \mu'_u \rangle = \\
 & = (E_{i_I S_I \Gamma_I} + E_{i_{II} S_{II} \Gamma_{II}}) \times \\
 & \quad \times \delta_{i_I, i'_I} \delta_{i_{II}, i'_{II}} \delta_{S_I, S'_I} \delta_{S_{II}, S'_{II}} \delta_{\Gamma_I, \Gamma'_I} \delta_{\Gamma_{II}, \Gamma'_{II}} \delta_{S_u, S'_u} \delta_{M_u, M'_u} \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u} + \\
 & \quad + J \sum_{\gamma, \nu} \sum_q (-1)^q \begin{bmatrix} \gamma & \gamma & A_1 \\ \nu & \nu & 1 \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} \Gamma_I & \Gamma_{II} & \Gamma_u \\ \mu_I & \mu_{II} & \mu_u \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} \Gamma'_I & \Gamma'_{II} & \Gamma'_u \\ \mu'_I & \mu'_{II} & \mu'_u \end{bmatrix} \times \\
 & \quad \times \begin{bmatrix} S_I & S_{II} & S_u \\ m_I & m_{II} & M_u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S'_I & S'_{II} & S'_u \\ m'_I & m'_{II} & M'_u \end{bmatrix} \times \\
 & \quad \times \langle i_I S_I m_I \Gamma_I \mu_I | W_{q\nu}^{1\gamma} | i'_I S'_I m'_I \Gamma'_I \mu'_I \rangle \langle i_{II} S_{II} m_{II} \Gamma_{II} \mu_{II} | U_{q\nu}^{1\gamma} | i'_{II} S'_{II} m'_{II} \Gamma'_{II} \mu'_{II} \rangle. \quad (18)
 \end{aligned}$$

Вычисление матричных элементов операторов $\hat{W}^{1\gamma}$ и $\hat{U}^{1\gamma}$ по теореме Вигнера–Эккарта порождает суммы произведений коэффициентов Вигнера группы вращений и коэффициентов Клебша–Гордана точечной группы. Первая рассчитывается по формуле (см., например, [14])

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\chi, \psi, \rho, \sigma, \tau} (-1)^{p-\psi+q-\chi+r-\rho+s-\sigma+t-\tau} \begin{pmatrix} p & a & q \\ \psi & -\alpha & \chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q & r & t \\ -\chi & \rho & \tau \end{pmatrix} \times \\
 & \quad \times \begin{pmatrix} r & a & s \\ -\rho & \alpha' & \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & p & t \\ -\sigma & -\psi & -\tau \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{a-\alpha}}{2a+1} \left\{ \begin{matrix} q & p & a \\ s & r & t \end{matrix} \right\} \delta_{a, a'} \delta_{\alpha, \alpha'}. \quad (19)
 \end{aligned}$$

Сумма пяти коэффициентов Клебша–Гордана для точечной группы также может быть сведена к 6Г-символу [17]

$$\begin{aligned}
 F(\Gamma_I \Gamma_{II} \Gamma_u; \Gamma'_I \Gamma'_{II} \gamma) & = \sum_{\nu, \mu_I, \mu_{II}, \mu'_I, \mu'_{II}} \begin{bmatrix} \gamma & \gamma & A_1 \\ \nu & \nu & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_I & \Gamma_{II} & \Gamma_u \\ \mu_I & \mu_{II} & \mu_u \end{bmatrix}^* \times \\
 & \quad \times \begin{bmatrix} \Gamma'_I & \Gamma'_{II} & \Gamma'_u \\ \mu'_I & \mu'_{II} & \mu'_u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma & \Gamma'_I & \Gamma_I \\ \nu & \mu'_I & \mu_I \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} \gamma & \Gamma'_{II} & \Gamma_{II} \\ \nu & \mu'_{II} & \mu_{II} \end{bmatrix}^* \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u} \sim \\
 & \quad \sim \left\{ \begin{matrix} \Gamma_I & \Gamma_{II} & \Gamma_u \\ \Gamma'_I & \Gamma'_{II} & \gamma \end{matrix} \right\} \begin{bmatrix} A_1 & \Gamma'_u & \Gamma_u \\ 1 & \mu'_u & \mu_u \end{bmatrix}^* \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u}. \quad (20)
 \end{aligned}$$

На практике более удобным оказывается расчет этой суммы напрямую, в связи с чем для нее и введено обозначение $F(\Gamma_I \Gamma_{II} \Gamma_u; \Gamma'_I \Gamma'_{II} \gamma)$. Подставляя (20) и (19) в (18), получаем матричный элемент (11).

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Получим выражение для матричного элемента

$$\begin{aligned}
 & \langle i_u S_u M_u \Gamma_u \mu_u | W_{q1}^{1A_1} | i'_u S'_u M'_u \Gamma'_u \mu'_u \rangle = \\
 & = \sum_{i_I, S_I, \Gamma_I} \sum_{i_{II}, S_{II}, \Gamma_{II}} \sum_{i'_I, S'_I, \Gamma'_I} \sum_{i'_{II}, S'_{II}, \Gamma'_{II}} \alpha_{i_I S_I \Gamma_I; i_{II} S_{II} \Gamma_{II}}^{i_u S_u \Gamma_u} \alpha_{i'_I S'_I \Gamma'_I; i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II}}^{i'_u S'_u \Gamma'_u} \times \\
 & \quad \times \langle i_I S_I \Gamma_I i_{II} S_{II} \Gamma_{II}; S_u M_u \Gamma_u \mu_u | W_{q1}^{1A_1} | i'_I S'_I \Gamma'_I i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II}; S'_u M'_u \Gamma'_u \mu'_u \rangle. \quad (21)
 \end{aligned}$$

Используя (9) и свойство ортогональности коэффициентов Клебша–Гордана

$$\sum_{\mu_I, \mu_{II}} \begin{bmatrix} \Gamma_I & \Gamma_{II} & \Gamma_u \\ \mu_I & \mu_{II} & \mu_u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_I & \Gamma_{II} & \Gamma'_u \\ \mu_I & \mu_{II} & \mu'_u \end{bmatrix}^* = \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u},$$

получаем для матричного элемента (21) следующее выражение:

$$\begin{aligned} & \sum_{i_I, S_I, \Gamma_I} \sum_{i_{II}, S_{II}, \Gamma_{II}} \sum_{i'_I, S'_I, \Gamma'_I} \alpha_{i_I S_I \Gamma_I; i_{II} S_{II} \Gamma_{II}}^{i_u S_u \Gamma_u} \alpha_{i_I S_I \Gamma_I; i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II}}^{i'_u S'_u \Gamma'_u} (-1)^{S_{II} - m_{II}} \begin{pmatrix} S_{II} & 1 & S'_{II} \\ -m_{II} & q & m'_{II} \end{pmatrix} \times \\ & \times \langle i_{II} S_{II} \Gamma_{II} \| W^{1A_1} \| i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II} \rangle \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u} \begin{bmatrix} S_I & S_{II} & S_u \\ m_I & m_{II} & M_u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_I & S'_{II} & S'_u \\ m_I & m'_{II} & M'_u \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Выполняя суммирование по индексам m_I , m_{II} и m'_{II} с помощью формулы (см. [14])

$$\begin{aligned} & \sum_{\chi, \psi, \rho} (-1)^{p - \psi + q - \chi + r - \rho} \begin{pmatrix} p & a & q \\ \psi & \alpha & -\chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q & b & r \\ \chi & \beta & -\rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r & c & p \\ \rho & \gamma & -\psi \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} a & b & c \\ -\alpha & -\beta & -\gamma \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} a & b & c \\ r & p & q \end{Bmatrix}, \end{aligned} \quad (22)$$

получаем

$$\begin{aligned} & \langle i_u S_u M_u \Gamma_u \mu_u | W_{q1}^{1A_1} | i'_u S'_u M'_u \Gamma'_u \mu'_u \rangle = (-1)^{S_u - M_u} \begin{pmatrix} S_u & 1 & S'_u \\ -M_u & q & M'_u \end{pmatrix} \times \\ & \times \sum_{i_I, S_I, \Gamma_I} \sum_{i_{II}, S_{II}, \Gamma_{II}} \sum_{i'_I, S'_I, \Gamma'_I} \alpha_{i_I S_I \Gamma_I; i_{II} S_{II} \Gamma_{II}}^{i_u S_u \Gamma_u} \alpha_{i_I S_I \Gamma_I; i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II}}^{i'_u S'_u \Gamma'_u} \times \\ & \times (-1)^{1 + S_I + S'_{II} + S_u} \sqrt{(2S_u + 1)(2S'_u + 1)} \begin{Bmatrix} S_u & 1 & S'_u \\ S'_{II} & S_I & S_{II} \end{Bmatrix} \times \\ & \times \langle i_{II} S_{II} \Gamma_{II} \| W^{1A_1} \| i'_{II} S'_{II} \Gamma'_{II} \rangle \delta_{\Gamma_u, \Gamma'_u} \delta_{\mu_u, \mu'_u}, \end{aligned}$$

что немедленно приводит к результату (12).

ПРИЛОЖЕНИЕ В

В этом приложении мы даем детальный вывод матриц представления группы D_4 в базисе четырех спаренных спинов коннекторов (рассмотрен более общий случай произвольных спинов)

$$\begin{aligned} & |S_1 S_2 (S_{12}) S_3 S_4 (S_{34}) S M\rangle = \\ & = \sum_{m_1, m_2, m_3, m_4, m_{12}, m_{34}} \begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_3 & S_4 & S_{34} \\ m_3 & m_4 & m_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{12} & S_{34} & S \\ m_{12} & m_{34} & M \end{bmatrix} \times \\ & \times |S_1 m_1\rangle |S_2 m_2\rangle |S_3 m_3\rangle |S_4 m_4\rangle. \end{aligned}$$

Рассмотрим для примера элемент $\hat{C}_4$ – поворот на угол $\pi/2$ вокруг оси z :

$$\begin{aligned} \hat{C}_4 |S_1 S_2 (S_{12}) S_3 S_4 (S_{34}) S M\rangle &= \\ &= \sum_{m_1, m_2} \sum_{m_3, m_4} \sum_{m_{12}, m_{34}} \begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_3 & S_4 & S_{34} \\ m_3 & m_4 & m_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{12} & S_{34} & S \\ m_{12} & m_{34} & M \end{bmatrix} \times \\ &\quad \times |S_2 m_2\rangle |S_3 m_3\rangle |S_4 m_4\rangle |S_1 m_1\rangle = \\ &= \sum_{m_1, m_2} \sum_{m_3, m_4} \sum_{m_{12}, m_{34}} \begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_3 & S_4 & S_{34} \\ m_3 & m_4 & m_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{12} & S_{34} & S \\ m_{12} & m_{34} & M \end{bmatrix} \times \\ &\quad \times \sum_{\bar{m}_1, \bar{m}_2} \sum_{\bar{m}_3, \bar{m}_4} |S_2 \bar{m}_2\rangle |S_3 \bar{m}_3\rangle |S_4 \bar{m}_4\rangle |S_1 \bar{m}_1\rangle \delta_{\bar{m}_2, m_2} \delta_{\bar{m}_3, m_3} \delta_{\bar{m}_4, m_4} \delta_{\bar{m}_1, m_1}. \end{aligned}$$

Используем свойство ортогональности для коэффициентов Клебша–Гордана

$$\begin{aligned} \delta_{\bar{m}_2, m_2} \delta_{\bar{m}_3, m_3} \delta_{\bar{m}_4, m_4} \delta_{\bar{m}_1, m_1} &= \sum_{S_{14}, m_{14}} \sum_{S_{23}, m_{23}} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ m_2 & m_3 & m_{23} \end{bmatrix} \times \\ &\quad \times \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ \bar{m}_2 & \bar{m}_3 & m_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ m_4 & m_1 & m_{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ \bar{m}_4 & \bar{m}_1 & m_{14} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} \hat{C}_4 |S_1 S_2 (S_{12}) S_3 S_4 (S_{34}) S M\rangle &= \\ &= \sum_{m_1, m_2} \sum_{m_3, m_4} \sum_{m_{12}, m_{34}} \begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_3 & S_4 & S_{34} \\ m_3 & m_4 & m_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{12} & S_{34} & S \\ m_{12} & m_{34} & M \end{bmatrix} \times \\ &\quad \times \sum_{\bar{m}_1, \bar{m}_2} \sum_{\bar{m}_3, \bar{m}_4} |S_2 \bar{m}_2\rangle |S_3 \bar{m}_3\rangle |S_4 \bar{m}_4\rangle |S_1 \bar{m}_1\rangle \times \\ &\quad \times \sum_{S_{14}, m_{14}} \sum_{S_{23}, m_{23}} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ m_2 & m_3 & m_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ \bar{m}_2 & \bar{m}_3 & m_{23} \end{bmatrix} \times \\ &\quad \times \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ m_4 & m_1 & m_{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ \bar{m}_4 & \bar{m}_1 & m_{14} \end{bmatrix} = \\ &= \sum_{m_1, m_2} \sum_{m_3, m_4} \sum_{m_{12}, m_{34}} \begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_3 & S_4 & S_{34} \\ m_3 & m_4 & m_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{12} & S_{34} & S \\ m_{12} & m_{34} & M \end{bmatrix} \times \\ &\quad \times \sum_{\bar{m}_1, \bar{m}_2} \sum_{\bar{m}_3, \bar{m}_4} |S_2 \bar{m}_2\rangle |S_3 \bar{m}_3\rangle |S_4 \bar{m}_4\rangle |S_1 \bar{m}_1\rangle \times \\ &\quad \times \sum_{S_{14}, m_{14}} \sum_{S_{23}, m_{23}} \sum_{\bar{m}_{14}, \bar{m}_{23}} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ m_2 & m_3 & m_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ \bar{m}_2 & \bar{m}_3 & \bar{m}_{23} \end{bmatrix} \times \\ &\quad \times \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ m_4 & m_1 & m_{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ \bar{m}_4 & \bar{m}_1 & \bar{m}_{14} \end{bmatrix} \delta_{\bar{m}_{23}, m_{23}} \delta_{\bar{m}_{14}, m_{14}} = \\ &= \sum_{m_1, m_2} \sum_{m_3, m_4} \sum_{m_{12}, m_{34}} \begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_3 & S_4 & S_{34} \\ m_3 & m_4 & m_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{12} & S_{34} & S \\ m_{12} & m_{34} & M \end{bmatrix} \times \\ &\quad \times \sum_{\bar{m}_1, \bar{m}_2} \sum_{\bar{m}_3, \bar{m}_4} |S_2 \bar{m}_2\rangle |S_3 \bar{m}_3\rangle |S_4 \bar{m}_4\rangle |S_1 \bar{m}_1\rangle \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{S_{14}, m_{14}} \sum_{S_{23}, m_{23}} \sum_{\bar{m}_{14}, \bar{m}_{23}} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ m_2 & m_3 & m_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ \bar{m}_2 & \bar{m}_3 & \bar{m}_{23} \end{bmatrix} \times \\
& \times \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ m_4 & m_1 & m_{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ \bar{m}_4 & \bar{m}_1 & \bar{m}_{14} \end{bmatrix} \times \\
& \times \sum_{\bar{S}, \bar{M}} \begin{bmatrix} S_{23} & S_{14} & \bar{S} \\ m_{23} & m_{14} & \bar{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{23} & S_{14} & \bar{S} \\ \bar{m}_{23} & \bar{m}_{14} & \bar{M} \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Произведение шести коэффициентов Клебша–Гордана приводит к $9j$ -символу [14]:

$$\begin{aligned}
& \sum_{m_1, m_2} \sum_{m_3, m_4} \sum_{m_{12}, m_{34}} \begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_3 & S_4 & S_{34} \\ m_3 & m_4 & m_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{12} & S_{34} & S \\ m_{12} & m_{34} & M \end{bmatrix} \times \\
& \times \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ m_4 & m_1 & m_{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ m_2 & m_3 & m_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{23} & S_{14} & \bar{S} \\ m_{23} & m_{14} & \bar{M} \end{bmatrix} = \\
& = (-1)^{S_1+S_4-S_{14}} (-1)^{S_3+S_4-S_{34}} (-1)^{S_{23}+S_{14}-\bar{S}} \times \\
& \times \sum_{m_1, m_2} \sum_{m_3, m_4} \sum_{m_{12}, m_{34}} \begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_3 & S_4 & S_{34} \\ m_3 & m_4 & m_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{12} & S_{34} & S \\ m_{12} & m_{34} & M \end{bmatrix} \times \\
& \times \begin{bmatrix} S_1 & S_4 & S_{14} \\ m_1 & m_4 & m_{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ m_2 & m_3 & m_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{14} & S_{23} & \bar{S} \\ m_{14} & m_{23} & \bar{M} \end{bmatrix} = \\
& = (-1)^{S_1+S_4-S_{14}} (-1)^{S_3+S_4-S_{34}} (-1)^{S_{23}+S_{14}-\bar{S}} \times \\
& \times [(2S_{12}+1)(2S_{14}+1)(2S_{23}+1)(2S_{34}+1)]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ S_4 & S_3 & S_{34} \\ S_{14} & S_{23} & S \end{matrix} \right\} \delta_{S, \bar{S}} \delta_{M, \bar{M}},
\end{aligned}$$

где использовано соотношение симметрии для коэффициентов Клебша–Гордана

$$\begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ m_1 & m_2 & m_{12} \end{bmatrix} = (-1)^{S_1+S_2-S_{12}} \begin{bmatrix} S_2 & S_1 & S_{12} \\ m_2 & m_1 & m_{12} \end{bmatrix}.$$

Оставшаяся сумма дает вектор базиса

$$\begin{aligned}
& |S_2 S_3 (S_{23}) S_4 S_1 (S_{14}) \bar{S} \bar{M}\rangle = \\
& = \sum_{\bar{m}_1, \bar{m}_2} \sum_{\bar{m}_3, \bar{m}_4} \sum_{\bar{m}_{14}, \bar{m}_{23}} \begin{bmatrix} S_2 & S_3 & S_{23} \\ \bar{m}_2 & \bar{m}_3 & \bar{m}_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_4 & S_1 & S_{14} \\ \bar{m}_4 & \bar{m}_1 & \bar{m}_{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{23} & S_{14} & \bar{S} \\ \bar{m}_{23} & \bar{m}_{14} & \bar{M} \end{bmatrix} \times \\
& \times |S_2 \bar{m}_2\rangle |S_3 \bar{m}_3\rangle |S_4 \bar{m}_4\rangle |S_1 \bar{m}_1\rangle.
\end{aligned}$$

В итоге получаем

$$\begin{aligned}
\hat{C}_4 |S_1 S_2 (S_{12}) S_3 S_4 (S_{34}) S M\rangle & = \sum_{S_{14}, S_{23}} (-1)^{S_1+S_4-S_{14}} (-1)^{S_3+S_4-S_{34}} (-1)^{S_{23}+S_{14}-\bar{S}} \times \\
& \times [(2S_{12}+1)(2S_{14}+1)(2S_{23}+1)(2S_{34}+1)]^{1/2} \times \\
& \times \left\{ \begin{matrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ S_4 & S_3 & S_{34} \\ S_{14} & S_{23} & S \end{matrix} \right\} |S_2 S_3 (S_{23}) S_4 S_1 (S_{14}) S M\rangle.
\end{aligned}$$

Действие оператора $\hat{C}_4$ определяется через матрицу представления:

$$\hat{C}_4|\kappa SM\rangle = \sum_{\kappa'} D_{\kappa'\kappa}^{(S)}(\hat{C}_4)|\kappa' SM\rangle,$$

где матрица $D_{\kappa'\kappa}^{(S)}(\hat{C}_4)$ имеет вид

$$\begin{aligned} D_{\kappa'\kappa}^{(S)}(\hat{C}_4) = & \delta_{S_2, S'_1} \delta_{S_3, S'_2} \delta_{S_4, S'_3} \delta_{S_1, S'_4} \delta_{S_{23}, S'_{12}} \delta_{S_{14}, S'_{34}} \times \\ & \times [(2S_{12} + 1)(2S_{14} + 1)(2S_{23} + 1)(2S_{34} + 1)]^{1/2} \times \\ & \times (-1)^{S_1 + S_4 - S_{14}} (-1)^{S_3 + S_4 - S_{34}} (-1)^{S_{23} + S_{14} - \bar{S}} \begin{Bmatrix} S_1 & S_2 & S_{12} \\ S_4 & S_3 & S_{34} \\ S_{14} & S_{23} & S \end{Bmatrix}. \end{aligned}$$

Мы ввели мультииндекс $\kappa' = \{S'_1 S'_2 (S'_{12}) S'_3 S'_4 (S'_{34})\}$ для краткого обозначения векторов базиса. Другие операции симметрии группы D_4 рассматриваются аналогично.

Благодарности. Работа частично поддержана грантом NREC-005 US CRDF. В. Е. Синицын благодарит за поддержку Фонд “Династия” и Международный центр фундаментальной физики в Москве.

Список литературы

- [1] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.*, **66** (1994), 763.
- [2] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.*, **69** (1992), 2863; *Phys. Rev. B*, **48** (1993), 10345.
- [3] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, K. Hallberg (eds), *Density-Matrix Renormalization. A New Numerical Method in Physics* (Lectures of a seminar and workshop held at the Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden, Germany, August 24 – September 18, 1998), *Lect. Notes Phys.*, **528**, Springer, Berlin, 1999.
- [4] U. Schollwöck, *Rev. Mod. Phys.*, **77** (2005), 259.
- [5] G. Sierra, T. Nishino, *Nucl. Phys. B*, **495** (1997), 505.
- [6] W. Tatsuaki, *Phys. Rev. E*, **61** (2000), 3199.
- [7] I. P. McCulloch, M. Gulasci, *Austral. J. Phys.*, **53** (2000), 597.
- [8] I. P. McCulloch, M. Gulasci, *Europhys. Lett.*, **57** (2002), 852.
- [9] S. Ostlund, S. Rommer, *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995), 3537; *Phys. Rev. B*, **55** (1997), 2164.
- [10] J. Dukelsky, M. A. Martin-Delgado, T. Nishino, G. Sierra, *Europhys. Lett.*, **43** (1998), 457.
- [11] J. M. Roman, G. Sierra, J. Dukelsky, M. A. Martin-Delgado, *J. Phys. A*, **31** (1998), 9729.
- [12] D. D. Betts, H. Q. Lin, J. S. Flynn, *Can. J. Phys.*, **77** (1999), 353.
- [13] G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, H. Statz, *Properties of the Thirty-Two Point Groups*, MIT Press, Cambridge, MA, 1963.
- [14] Д. А. Варшавович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Л., 1975.
- [15] D. J. J. Farnell, *Phys. Rev. B*, **68** (2003), 134419.
- [16] A. W. Sandvik, *Phys. Rev. B*, **56** (1997), 11678.
- [17] J. S. Griffith, *The Irreducible Tensor Method for Molecular Symmetry Groups*, Prentice-Hall, Englewood Cliffe, NJ, 1962.

Поступила в редакцию 17.04.2006