ノート：Knabeの方法

塩崎謙

January 2, 2025

Abstract

Knabeの方法[1]として知られる，nサイトの有限系のOBCにおけるスペクトルギャップから，$N > 2n$サイトのPBCにおけるスペクトルギャップに制限をつける方法についての証明のメモ．

まず次を示す．

- ハミルトニアンHの第 1 励起状態のエネルギーϵ_1が$\epsilon_1 \geq \epsilon$なることは，$H^2 \geq \epsilon H$と同値．

(証明) Hのスペクトル分解を

$$H = \sum_{\epsilon_i > 0} \epsilon_i P_i \tag{0.1}$$

とすると，

$$H^2 - \epsilon H = \sum_{\epsilon_i > 0} \epsilon_i (\epsilon_i - \epsilon) P_i \tag{0.2}$$

より． □

1 1D

2-localの frustration-free (FF) ハミルトニアンを考える．

$$H = \sum_{i=1}^{N} P_{i,i+1}. \tag{1.1}$$

境界条件はPBCとする． $P_{i,i+1}$は射影演算子であり，FF条件は，Hの基底状態への射影をP_0とすると，

$$(1 - P_0) P_{i,i+1} P_0 = 0, \quad i = 1, \dots, N, \tag{1.2}$$

が成立すること． $P_{i,i+1} \geq 0$であるから，FF条件はHの基底状態エネルギーが0, つまり，

$$H P_0 = 0 \tag{1.3}$$

が成立することと等価．

H^2を考える．

$$\begin{aligned} H^2 &= \sum_{i,j=1}^{N} P_{i,i+1} P_{j,j+1} \qquad (1.4) \\ &= \sum_{i=1}^{N} P_{i,i+1} + \sum_{i=1}^{N} (P_{i,i+1} P_{i+1,i+2} + P_{i+1,i+2} P_{i,i+1}) + \sum_{2 \leq |i-j|_N \leq \lfloor N/2 \rfloor} 2 P_{i,i+1} P_{j,j+1}. \qquad (1.5) \end{aligned}$$

第１，第３項は半正定値であるが，第２項は半正定値とは限らない．ここで記号

$$|i-j|_N := \min_{k\in\mathbb{Z}} |i-j+kN| \tag{1.6}$$

を導入した．

$2\le n\le \lfloor N/2\rfloor$なる$n$に対して，円周鎖のある部分区間 $[i,i+n]$ に注目し，その区間におけるOBC ハミルトニアンを

$$h_{n,i} := \sum_{j=i}^{i+n-1} P_{j,j+1} \tag{1.7}$$

と書く．$P_{j+N,j+1+N}=P_{j,j+1}$に注意．このOBC ハミルトニアンの２乗は

$$h_{n,i}^2 = \sum_{j=i}^{i+n-1} P_{j,j+1} + \sum_{j=i}^{i+n-2} (P_{j,j+1}P_{j+1,j+2} + P_{j+1,j+2}P_{j,j+1}) + \sum_{2\le|j-k|_N, i\le j,k\le i+n-1} 2P_{j,j+1}P_{k,k+1}. \tag{1.8}$$

すると，

- $\sum_{i=1}^N h_{n,i}^2$には，(1.5)の第１項はn回出現する．
- $\sum_{i=1}^N h_{n,i}^2$には，(1.5)の第２項は$n-1$回出現する．
- $\sum_{i=1}^N h_{n,i}^2$には，(1.5)の第３項型は，$l=2,\dots,n-1$なるlに対して，距離$|i-j|_N=l$なる項が$n-l$回出現する．

よって，

$$H^2 - \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^N h_{n,i}^2 = \sum_{i=1}^N P_{i,i+1} - \frac{n}{n-1}\sum_{i=1}^N P_{i,i+1} \tag{1.9}$$

$$+ \sum_{2\le|i-j|_N\le\lfloor N/2\rfloor} 2P_{i,i+1}P_{j,j+1} - \frac{1}{n-1}\sum_{l=2}^{n-1}(n-l)\sum_{|i-j|_N=l} 2P_{i,i+1}P_{j,j+1} \tag{1.10}$$

$$= -\frac{1}{n-1}H + \sum_{l=2}^{n-1}\frac{l-1}{n-1}\sum_{|i-j|_N=l} 2P_{i,i+1}P_{j,j+1} + \sum_{l=n}^{\lfloor N/2\rfloor}\sum_{|i-j|_N=l} 2P_{i,i+1}P_{j,j+1}. \tag{1.11}$$

最終行の第２，３項は半正定値であるから，

$$H^2 \ge \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^N h_{n,i}^2 - \frac{1}{n-1}H \tag{1.12}$$

が成立する．

以下の仮定を置く．

- OBC ハミルトニアン $h_{n,i}(2\le n\le\lfloor N/2\rfloor)$は$i$に依存しないスペクトルギャップ$\epsilon_n>0$を持つ．つまり，

  $$h_{n,i}^2 \ge \epsilon_n h_{n,i}. \tag{1.13}$$

  が成立する．

この仮定のもとで以下が成立する．

$$H^2 \geq \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{N}\epsilon_n h_{n,i} - \frac{1}{n-1}H = \frac{n}{n-1}\epsilon_n H - \frac{1}{n-1}H = \frac{n}{n-1}(\epsilon_n - \frac{1}{n})H. \tag{1.14}$$

よって，以下が示された．

- ある$n \in \{2, \ldots, \lfloor N/2 \rfloor\}$が存在して，OBCハミルトニアン $h_{n,i}$がiに依存せず一様なスペクトルギャップ

$$\epsilon_n > \frac{1}{n} \tag{1.15}$$

  を持つならば，Hはスペクトルギャップ

$$\frac{n}{n-1}(\epsilon_n - \frac{1}{n}) \tag{1.16}$$

  を持つ．

- 特に，並進不変なハミルトニアンであれば，ある$n \geq 2$が存在して，サイト数$n+1$のOBCハミルトニアン h_nがスペクトルギャップ

$$\epsilon_n > \frac{1}{n} \tag{1.17}$$

  を持つならば，任意の$N > 2n$に対して，サイト数NのPBCハミルトニアン H はスペクトルギャップ

$$\frac{n}{n-1}(\epsilon_n - \frac{1}{n}) \tag{1.18}$$

  を持つ．

したがって，frustration free かつ並進対称性が存在する場合は，数値計算によってサイト数$n+1$におけるOBCハミルトニアンがスペクトルギャップ$\epsilon_n > 1/n$を持つことが確定できれば，$N \to \infty$におけるPBCのスペクトルのギャップが証明される．

References

[1] Knabe, Stefan. ”Energy gaps and elementary excitations for certain VBS-quantum antiferromagnets.” Journal of statistical physics 52 (1988): 627-638.