MPSと対称性（書きかけ）

塩崎　謙

April 11, 2023

Abstract

[1]の計算メモ

MPS

$$|\Psi_L\rangle = \sum_{n_1,\ldots,n_L} \mathrm{tr}\,[A_{n_1}\cdots A_{n_L}]\,|n_1\cdots n_L\rangle \tag{1}$$

を考える．

$$\mathcal{E}(X) := \sum_n A_n X A_n^\dagger, \qquad \mathcal{E}^*(X) = \sum_n A_n^\dagger X A_n \tag{2}$$

を導入する． A_nは，

$$\mathcal{E}(\mathbf{1}) = \mathbf{1}, \tag{3}$$

$$\mathcal{E}(\Lambda) = \Lambda, \tag{4}$$

を満たすように取ることができる．ここでΛは$\Lambda \geq 0$，かつ$\mathrm{tr}\,(\Lambda) = 1$を満たす． Λはエルミートである． （なぜこのように取ることができるのか確認． Λの正値性はエルミート性を含意するのか確認． Λは上の条件を満たすもの全て？それともこのようなΛが存在する，ということ？)

- $|\Psi_L\rangle$が適切な意味で純粋状態であるための必要十分条件が， $\Lambda > 0$かつ，$\mathcal{E}$の絶対値が1の固有値がひとつだけであること．

(これも確認する)

局所基底$|n\rangle$に当たるユニタリー変換u,

$$u = \sum_j e^{i\theta_j}\,|\tilde{j}\rangle\langle\tilde{j}| \tag{5}$$

に対して，

$$\mathcal{E}_u(X) = \sum_{n,n'} \langle n'|u|n\rangle\, A_n X A_{n'}^\dagger = \sum_j e^{i\theta_j} \tilde{A}_j X \tilde{A}_j^\dagger \tag{6}$$

を導入する．$\tilde{A}_j = \sum_n \langle\tilde{j}|n\rangle\, A_n$とおいた．逆変換は$A_n = \sum_j \langle n|\tilde{j}\rangle\, \tilde{A}_j$.

$$\sum_j \tilde{A}_j \tilde{A}_j^\dagger = \sum_{j,n,n'} \langle\tilde{j}|n\rangle\, A_n\, \langle n'|\tilde{j}\rangle\, A_{n'}^\dagger = \sum_n A_n A_n^\dagger = \mathbf{1}, \tag{7}$$

$$\sum_j \tilde{A}_j^\dagger \Lambda \tilde{A}_j = \sum_{j,n,n'} \langle n|\tilde{j}\rangle A_n^\dagger \Lambda \langle \tilde{j}|n'\rangle A_{n'} = \sum_n A_n^\dagger \Lambda A_n = \Lambda, \tag{8}$$

$$\mathcal{E}(X) = \sum_n A_n X A_n^\dagger = \sum_{n,j,j'} \langle n|\tilde{j}\rangle \tilde{A}_j X \langle \tilde{j}'|n\rangle \tilde{A}_j^\dagger = \sum_j \tilde{A}_j X \tilde{A}_j^\dagger, \tag{9}$$

$$\mathcal{E}^*(X) = \sum_n A_n^\dagger X A_n = \sum_{n,j,j'} \langle \tilde{j}|n\rangle \tilde{A}_j^\dagger X \langle n|\tilde{j}'\rangle \tilde{A}_j = \sum_j \tilde{A}_j^\dagger X \tilde{A}_j \tag{10}$$

に注意．演算子Aのスペクトル半径を

$$\rho(A) = \sum_i \max_i |\lambda_i| \tag{11}$$

と書く．

Lemma. $\rho(\mathcal{E}_u) \leq 1$であって，等号は$V$と$e^{i\theta}$が存在して，

$$V^\dagger \tilde{A}_j = e^{i(\theta-\theta_j)} \tilde{A}_j V^\dagger \tag{12}$$

がjに依らず成立するとき．さらに，$\mathcal{E}_u$は高々ひとつの絶対値1の固有値を持つ．

Proof— Vを$\mathcal{E}_u$の固有ベクトルとし，固有値をλとする．つまり，

$$\sum_j e^{i\theta_j} \tilde{A}_j V \tilde{A}_j^\dagger = \lambda V. \tag{13}$$

すると，右から$\Lambda V^\dagger$を乗じて，

$$\lambda V \Lambda V^\dagger = \sum_j e^{i\theta_j} \tilde{A}_j V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda V^\dagger. \tag{14}$$

トレースを取り，絶対値をとって，$V^\dagger V$の正値性に注意すると，

$$|\lambda| \mathrm{tr}\,[V\Lambda V^\dagger] = \Big| \sum_j e^{i\theta_j} \mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda V] \Big| \tag{15}$$

$$\leq \sum_j \Big| \mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda V^\dagger] \Big|. \tag{16}$$

ここで等号成立条件は，複素数$e^{i\theta_j} \mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda V^\dagger]$の$U(1)$位相が揃っていること．つまり，

$$\mathrm{Arg}(e^{i\theta_j} \mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda V^\dagger]) = \theta_j + \mathrm{Arg}(\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda V^\dagger]) \equiv \theta \tag{17}$$

なること．さらに，

$$\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda V^\dagger] = \mathrm{tr}\,[V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda V^\dagger \tilde{A}_j] = \mathrm{tr}\,[V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda^{\frac{1}{2}} \Lambda^{\frac{1}{2}} V^\dagger \tilde{A}_j] = < \Lambda^{\frac{1}{2}} \tilde{A}_j V^\dagger, \Lambda^{\frac{1}{2}} V^\dagger \tilde{A}_j > \tag{18}$$

と内積$< A, B >= \mathrm{tr}\,[A^\dagger B]$の形で書けることに注意． Cauchy=Schwarzの不等式より，

$$|\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda V^\dagger]| = | < \Lambda^{\frac{1}{2}} \tilde{A}_j V^\dagger, \Lambda^{\frac{1}{2}} V^\dagger \tilde{A}_j > | \tag{19}$$

$$\leq | < \Lambda^{\frac{1}{2}} \tilde{A}_j V^\dagger, \Lambda^{\frac{1}{2}} \tilde{A}_j V^\dagger > |^{\frac{1}{2}} | < \Lambda^{\frac{1}{2}} V^\dagger \tilde{A}_j, \Lambda^{\frac{1}{2}} V^\dagger \tilde{A}_j > |^{\frac{1}{2}} \tag{20}$$

$$= |\mathrm{tr}\,[V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda \tilde{A}_j V^\dagger]|^{\frac{1}{2}} |\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j^\dagger V \Lambda V^\dagger \tilde{A}_j]|^{\frac{1}{2}}. \tag{21}$$

等号成立条件は，どちらか一方がゼロか，あるいは

$$\Lambda^{\frac{1}{2}} \tilde{A}_j V^\dagger = \alpha_j \Lambda^{\frac{1}{2}} V^\dagger \tilde{A}_j, \quad \alpha_j \in \mathbb{C} \tag{22}$$

なる場合．このとき，両辺のノルムを取り，

$$|\mathrm{tr}\,[V\tilde{A}_j^\dagger\Lambda\tilde{A}_jV^\dagger]| = |\alpha_j|^2|\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j^\dagger V\Lambda V^\dagger\tilde{A}_j]| \tag{23}$$

に注意．また，このとき，

$$\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_jV\tilde{A}_j^\dagger\Lambda V^\dagger] = \mathrm{tr}\,[V\tilde{A}_j^\dagger\Lambda V^\dagger\tilde{A}_j] = \mathrm{tr}\,[(\Lambda^{\frac{1}{2}}\tilde{A}_jV^\dagger)^\dagger\Lambda^{\frac{1}{2}}V^\dagger\tilde{A}_j] = \alpha_j^*\mathrm{tr}\,[(\Lambda^{\frac{1}{2}}V^\dagger\tilde{A}_j)^\dagger\Lambda^{\frac{1}{2}}V^\dagger\tilde{A}_j] \tag{24}$$

より，

$$\mathrm{Arg}(\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_jV\tilde{A}_j^\dagger\Lambda V^\dagger]) = -\mathrm{Arg}(\alpha_j) \tag{25}$$

にも注意．再び，Cauchy=Schwarz不等式より，

$$\sum_j|\mathrm{tr}\,[V\tilde{A}_j^\dagger\Lambda\tilde{A}_jV^\dagger]|^{\frac{1}{2}}|\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j^\dagger V\Lambda V^\dagger\tilde{A}_j]|^{\frac{1}{2}} \le (\sum_j|\mathrm{tr}\,[V\tilde{A}_j^\dagger\Lambda\tilde{A}_jV^\dagger]|)^{\frac{1}{2}}(\sum_j|\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j^\dagger V\Lambda V^\dagger\tilde{A}_j]|)^{\frac{1}{2}}. \tag{26}$$

等号成立条件は，jに依存しない定数$r\in\mathbb{R}$が存在して，

$$\mathrm{tr}\,[V\tilde{A}_j^\dagger\Lambda\tilde{A}_jV^\dagger]|^{\frac{1}{2}} = r|\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j^\dagger V\Lambda V^\dagger\tilde{A}_j]|^{\frac{1}{2}} \tag{27}$$

なるとき．ここで，

$$\sum_j\mathrm{tr}\,[V\tilde{A}_j^\dagger\Lambda\tilde{A}_jV^\dagger] = \mathrm{tr}\,[V\Lambda V^\dagger], \tag{28}$$

$$\sum_j\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j^\dagger V\Lambda V^\dagger\tilde{A}_j] = \sum_j\mathrm{tr}\,[\tilde{A}_j\tilde{A}_j^\dagger V\Lambda V^\dagger] = \mathrm{tr}\,[V\Lambda V^\dagger] \tag{29}$$

に注意すると，

$$|\lambda|\mathrm{tr}\,[V\Lambda V^\dagger] \le \mathrm{tr}\,[V\Lambda V^\dagger] \tag{30}$$

を得る．つまり，$\mathrm{tr}\,[V\Lambda V^\dagger]\neq 0$でなければ，$|\lambda|\le 1$．これで主張の前半$\rho(\mathcal{E}_u)\le 1$が示された．$|\lambda|=1$，つまり，等号成立条件は，$\alpha_j=|\alpha_j|e^{i\phi_j}$と置くと，$|\alpha_j|=r$が共通で，さらに，

$$\theta_j - \mathrm{Arg}(\alpha_j) \equiv \theta \tag{31}$$

より結局，α_jはj依存せず，

$$\alpha_j = re^{-i(\theta-\theta_j)} \tag{32}$$

と書ける．さらに，$|\alpha_j|$がj依存しないので，(27)においてjの和を取ると，$r=1$．よって，等号成立条件は，

$$\Lambda^{\frac{1}{2}}\tilde{A}_jV^\dagger = e^{-i(\theta-\theta_j)}\Lambda^{\frac{1}{2}}V^\dagger\tilde{A}_j. \tag{33}$$

さらに，Λは可逆だから，主張の後半

$$\tilde{A}_jV^\dagger = e^{-i(\theta-\theta_j)}V^\dagger\tilde{A}_j \tag{34}$$

を得る．このとき，

$$\mathcal{E}_u(V) = \sum_j e^{i\theta}\tilde{A}_j\tilde{A}_jV = e^{i\theta}V \tag{35}$$

より，固有値$\lambda=e^{i\theta}$に注意．さらに，Vがユニタリー行列であることは，以下のように示される．

$$\mathcal{E}(V^\dagger V) = \sum_j\tilde{A}_jV^\dagger V\tilde{A}_j^\dagger = \sum_j V^\dagger\tilde{A}_j\tilde{A}_j^\dagger V = V^\dagger V \tag{36}$$

であるが，仮定（純粋状態）より，$\mathbf{1}$は$\mathcal{E}$の唯一の絶対値1の固有ベクトルであるので，$V^\dagger V = \mathbf{1}$. □

Lemma. さらに，$\mathcal{E}_u$は高々ひとつの絶対値1の固有値を持つ.

Proof— 一意性を示す． V, V'を固有値$e^{i\theta}, e^{i\theta'}$なる$\mathcal{E}_u$の固有ベクトルとする．すると，

$$\mathcal{E}(V^\dagger V') = \sum_j \tilde{A}_j V^\dagger V' \tilde{A}_j^\dagger = \sum_j e^{i(\theta_j-\theta)} V^\dagger \tilde{A}_j e^{-i(\theta_j-\theta')} \tilde{A}_j^\dagger V' = e^{i(\theta'-\theta)} \sum_j V^\dagger \tilde{A}_j \tilde{A}_j^\dagger V' = e^{i(\theta'-\theta)} V^\dagger V' \tag{37}$$

であるが，再び，仮定（純粋状態）より，$\mathcal{E}$の絶対値1の固有ベクトルは$\mathbf{1}$のみなので，

$$V^\dagger V' = \mathbf{1}, \tag{38}$$

かつ

$$e^{i(\theta'-\theta)} = 1 \tag{39}$$

を得る. □

Lemma. さらに，

$$V\Lambda = \Lambda V \tag{40}$$

である.

Proof—

$$\mathcal{E}^*(V\Lambda V^\dagger) = \sum_j \tilde{A}_j^\dagger V \Lambda V^\dagger \tilde{A}_j \tag{41}$$

であるが，(12)より

$$= \sum_j V \tilde{A}_j^\dagger \Lambda \tilde{A}_j V^\dagger = V\Lambda V^\dagger. \tag{42}$$

一方でJordan分解など考えると$\mathcal{E}$と同様に$\mathcal{E}$の$\lambda = 1$なる固有ベクトルも一意であるから，$z \in \mathbb{C}$が存在して

$$V\Lambda V^\dagger = z\Lambda \tag{43}$$

であるが，条件$\mathrm{tr}\,[\Lambda] = 1$より主張を得る. □

References

[1] D. Pérez-García, M. M. Wolf, M. Sanz, F. Verstraete, and J. I. Cirac, *String Order and Symmetries in Quantum Spin Lattices*, Phys. Rev. Lett. **100**, 167202 (2008).