

早稲田大学大学院 先進理工学研究科

博士論文概要

論文題目

時間依存ハミルトニアンの下での離散量子系のダイナミクス

Dynamics of discrete quantum systems under time-dependent
Hamiltonians

申請者

鈴木 貴大
Takayuki SUZUKI

物理学及応用物理学専攻 量子力学基礎論研究

2022年12月

量子力学では、時間に依存するハミルトニアンの下で成り立つ、量子断熱定理が知られている。この定理は、初期状態が初期時刻における n 番目の瞬間固有状態であれば、ハミルトニアンの時間変化が十分ゆっくりであるとき、任意の時刻で n 番目の瞬間固有状態に留まり続けるという定理である。この一方で、量子断熱定理を破る現象、つまり瞬間固有状態間で遷移（非断熱遷移）の起こる現象がこの世には溢れている。歴史的には、原子・分子の衝突における非断熱遷移現象が、量子系の非断熱性に着目した最初の例であろう。その後、実験技術の進歩により、電場・磁場を外場として用いることによって、非断熱遷移を観測することが実験的に可能となった。近年では量子技術の進展により、量子制御や断熱量子計算等の文脈で時間に依存するハミルトニアンによって記述される量子系が注目を集めている。

時間に依存しているハミルトニアンの下でのダイナミクスを解くことは、2 準位系ですら難しい。この事実から、ある条件の下で成り立つ近似手法を確立させることが重要となる。そこで、断熱過程・非断熱過程それぞれに対して、これまでに知られている近似手法をいくつか紹介する。断熱過程については、前述した量子断熱定理が知られている。さらに、断熱条件と呼ばれる条件をハミルトニアンが満たせば、他の瞬間固有状態に遷移しないという断熱近似と呼ばれる近似手法が提案されている。この断熱近似は量子制御をはじめとして多分野で用いられている一方で、断熱条件の妥当性に関しては、様々な議論がなされている。特に、断熱近似が適用可能となるための十分条件に関して、従来の断熱条件に取って代わる新たな条件の提案が数多くなされている。また、断熱極限において、指数関数的に小さい遷移確率を求める公式である **Dykhne-Davis-Pechukas (DDP)** 公式が知られている。これによると、非断熱過程において相対位相に寄与するエネルギー準位間の面積が、断熱極限においては非断熱遷移確率を与えるという近似的な結論が導かれる。

一方、非断熱性を示すハミルトニアンの下でのダイナミクスについて、統一的に理解されていることは少ない。最も基本的な模型の一つとして、ハミルトニアンの対角成分が時間に関して線形に依存し、非対角成分が時間に依存しない、**Landau-Zener-Stuckelberg-Majorana (LZSM)** 模型が知られている。この 2 準位系の模型は、時間発展が特殊関数を用いて厳密に求まるという性質を持つ。特に、無限の過去から無限の未来への時間発展を考えると、断熱的な時間発展が起こる時間領域と非断熱的な時間発展が起こる時間領域で、時間発展を分割することができる。この非断熱的な時間発展が起こる時間領域というのは、エネルギー準位差が最も小さくなる時刻に対応しており、この時刻において瞬間的に非断熱遷移が起きるとみなせることを意味している。このように、断熱的な時間発展と瞬間的に起こる非断熱的な時間発展を用いて時間発展を近似する手法を、断熱瞬間近似と呼ぶ。この近似は、前述したように **LZSM** 模型に対しては導出すること

ができる一方で，他の模型に適用する際の導出法は知られていない．そこで，数学的に厳密ではないが，LZSM 模型における議論と同様の議論が他の模型にも適用できるという仮定の下で，断熱瞬間近似が用いられている．また，この近似を用いるためには瞬間固有値を導く必要があり，そのため比較的準位数の少ない系に対してのみ用いられている．

より一般には，上述した断熱過程・非断熱過程が混在している模型が考えられるが，このような一般的な模型に対する近似手法で確立されているものは現状無いに等しい．

本稿の目的は，時間に依存するハミルトニアンによって支配される量子系のダイナミクスについての理論を，断熱性・非断熱性の両端からより深く探ることである．本稿の構成は以下のようになっている．

第 1 章では，本稿の背景や動機を紹介する．

第 2 章では，時間依存ハミルトニアンによって支配される 2 準位系の，瞬間固有状態間の遷移が抑制される条件について考える．はじめに，断熱定理と断熱近似について紹介し，ここで導出した断熱近似の適用条件として考えられている断熱条件に関する問題点について議論する．ここまでの議論では，ハミルトニアンの時間依存性を $H\left(\frac{t}{T}\right)$ と仮定し， T を十分大きいとして時間発展演算子を $\frac{1}{T}$ について摂動展開することで議論を進めている．一方，もしも時間発展演算子の厳密な解が求まっていれば，摂動展開をせずとも，瞬間固有状態に留まり続ける条件を導ける．そこで，系を 2 準位系に限定して議論することにより，このような方向性で瞬間固有状態に留まり続ける条件を考える．時間に依存している 2 準位系のハミルトニアンに関しては，時間発展演算子とハミルトニアンの関係をいくつかのパラメータを介して関係づけることができる．この関係を用いて，ハミルトニアンは必ずしも $H\left(\frac{t}{T}\right)$ の形には限らないというより広い条件の下で，瞬間固有状態間の遷移が起きない条件を求める．さらに，ここで扱った手法によって解析的に時間発展が求まる例を構築することができるため，この例を通じて瞬間固有状態間の遷移がどのように抑制されるのか，その振る舞いを考察する．

第 3 章では，多準位系への断熱瞬間近似の拡張を行う．まず初めに，2 準位系における断熱瞬間近似について紹介する．ここで，前述した通り，一般の模型に対する断熱瞬間近似は数学的に厳密に導出された近似手法ではないことに注意する．さらに，完全 WKB 解析を用いて 3 準位 LZSM 模型を解いた先行研究を紹介する．次に， $2N$ 準位系である LZSM 格子模型に対して完全 WKB 解析を適用し S 行列を導出し，この結果が数値計算とよく一致することを見る．このようにして求められる S 行列は，いくつか問題を抱えている．例えば，この S 行列は非ユニタリ行列の積で表されており，時間発展のユニタリ性が自明ではない．また，扱うハミルトニアンは，LZSM 模型のように，無限の過去や未来で非有界になっている必要がある．形式的な問題のみでなく，数値計算を実行する上でも問題があ

る。S 行列には、ハミルトニアンのパラメータの指数関数として表される項が含まれている。これらの値が指数的に大きい、もしくは小さい場合に、数値計算での誤差が発生しやすくなる。そこで、この S 行列がユニタリ行列の積で表せることを示す。これにより上記の問題が解決される。さらに、この変形によって、導出した S 行列と断熱瞬間近似に対応関係がつくことが分かる。この対応関係を考察すると、断熱瞬間近似の際に必要な瞬間固有値の情報が、今回導出した S 行列においては必要ないことが分かる。つまり、この導出した S 行列は、数学的に厳密に導出された、多準位系に拡張出来る断熱瞬間近似と捉えることができる。このようにして導出した近似法を一般化断熱瞬間近似と呼ぶ。最後に、具体例として、時間周期多準位系に対して一般化断熱瞬間近似を適用し、ダイナミクスの振る舞いを考察する。

一般化断熱瞬間近似という近似法は擬交差点を持つ場合の非断熱過程の遷移確率を与える近似である。しかし、擬交差点を持たないハミルトニアンの下でのダイナミクスの解析には適さない。そこで、第 4 章では、多準位放物模型と呼ばれる 2 次の時間依存性を持つ多準位系のハミルトニアンについて考える。この模型は、特定のパラメータを指定することで、擬交差点を持つ非断熱過程と、擬交差点を持たない断熱過程の両方を含む模型となる。最初に、2 準位系の放物模型で擬交差点を持たない断熱的なパラメータを考える。この断熱極限における生存確率の摂動的な解析を行うと、DDP 公式の結果と同様に、非断熱過程において相対位相に寄与するエネルギー準位間の面積が、断熱極限において非断熱遷移確率を与えることが分かる。次に、非摂動的な解析により、多準位放物模型における生存確率を近似的に求める。様々なパラメータ領域で生存確率を近似的に求めることで、擬交差点を持つ非断熱領域から擬交差点を持たない断熱領域への転移のメカニズムを調べる。また、多準位系において、擬交差点を持たない断熱極限での遷移確率の振る舞いを考察する。これにより、非断熱過程において非断熱遷移確率に寄与する断熱パラメータと呼ばれるパラメータが、断熱極限において相対位相を与えることを示す。さらに、この新たな相対位相が、3 準位以上の多準位系でのみ観測できることを示す。

第 5 章では、本稿のまとめとこれからの研究の方向性について述べる。

早稲田大学 博士（理学） 学位申請 研究業績書

氏名：鈴木 貴大

印

(2022年 11月 現在)

種類別	題名、 発表・発行掲載誌名、 発表・発行年月、 連名者（申請者含む）
論文	○ “Generalized Adiabatic Impulse Approximation”, Physical Review A 105 022211, 2022, Takayuki Suzuki, Hiromichi Nakazato ○ “Analytic estimation of transition between instantaneous eigenstates of quantum two-level system”, Scientific Reports 8 17433, 2018, Takayuki Suzuki, Hiromichi Nakazato, Roberto Grimaudo, Antonino Messina
講演	「Landau-Zener Grid模型の完全WKB解析とその応用」日本物理学会78回秋季大会, 2021/09/21, 鈴木貴大, 中里弘道 「Landau-Zener grid模型の完全WKB解析」第44回量子情報技術研究会, 2021/5/24, 鈴木貴大, 中里弘道
その他	
(講演)	“Implementation of Multi-body Interaction for Quantum Annealing” 20th Asian Quantum Information Science Conference, 2020/12/9, Takayuki Suzuki, Hiromichi Nakazato 「XY相互作用を用いた量子アニーリングにおけるノイズ抑制」日本物理学会76回秋季大会, 2020/09/10, 鈴木貴大, 中里弘道