

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

2023年2月

鈴木 貴大  
Takayuki SUZUKI



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

2023年2月

早稲田大学大学院 先進理工学研究科  
物理学及応用物理学専攻 量子力学基礎論研究

鈴木 貴大  
Takayuki SUZUKI





# 目次

第 1 章	序論	5
第 2 章	2 準位系における無遷移過程	9
2.1	断熱定理と断熱近似	9
2.1.1	断熱定理	9
2.1.2	断熱近似	12
2.2	断熱近似の問題点	13
2.3	2 準位系における無遷移条件	17
2.3.1	2 準位系の瞬間固有状態間の遷移振幅	17
2.3.2	無遷移過程の必要十分条件	22
2.4	例：解析的に時間発展が求まる模型	35
第 3 章	断熱瞬間近似の多準位系への拡張	39
3.1	断熱瞬間近似	39
3.1.1	Landau-Zener-Stueckelberg-Majorana 模型	39
3.1.2	時間に依らない状態を用いる方法	40
3.1.3	瞬間固有状態を用いる方法	44
3.2	先行研究：3 準位 LZSM 模型の完全 WKB 解析	45
3.3	LZSM 格子模型の完全 WKB 解析	50
3.4	断熱瞬間近似との関係	61
3.5	多準位 Landau-Zener-Stueckelberg-Majorana 干渉模型	66
3.5.1	一般化断熱瞬間近似を用いた S 行列の導出	66
3.5.2	例：駆動横磁場 Rabi 模型	69
第 4 章	多準位系における非断熱・断熱過程と生存確率の関係	72
4.1	多準位放物模型	72
4.2	断熱極限における摂動的解析	73
4.3	非摂動的解析	75
4.3.1	$N = 2$ の場合	77
4.3.2	$N = 3$ の場合	80

---

4.3.3	任意の $N$ の場合	83
4.4	生存確率の解析的表式	84
4.4.1	$N = 2$ の場合	84
4.4.2	$N = 3$ の場合	86
4.4.3	任意の $N$ の場合	90
<b>第 5 章</b>	<b>結論</b>	<b>91</b>
	Appendix	94
A	Marzlin-Sanders のパラドックス	94
B	無遷移条件の別証明	95
C	LZSM 模型の厳密解の導出	97
D	放物柱関数に関する基礎事項	99
	D.1 性質	99
	D.2 漸化式	100
	D.3 漸近展開と Stokes 行列	100
E	Stokes 現象	102
	E.1 WKB 近似と Stokes 現象	102
	E.2 Weber 方程式の Stokes 現象と接続行列	104
	E.3 Airy 関数の Stokes 現象	107
	E.4 合流型超幾何関数の Stokes 現象	108
F	多準位 LZSM 模型の完全 WKB 解析	110
	F.1 大域的 WKB 解の構築	111
	F.2 LZSM 模型への帰着	114
	F.3 LZSM 模型の Stokes 現象	118
	F.4 局所的 WKB 解と大域的 WKB 解の接続	121
G	生存確率の導出	125
	G.1 仮定の正当性	125
	G.2 Airy 関数の Fourier 変換	126
	G.3 WKB 近似と最急降下線を用いた評価	132
	G.4 非有界なポテンシャルに対する WKB 近似の妥当性	133
H	多準位放物模型に対する一般化断熱瞬間近似	133
I	生存確率の近似式	135
	I.1 $N = 2$ の場合	135
	I.2 $N = 3$ の場合	136

# 第 1 章

## 序論

「断熱」という概念は、物理の様々な分野で現れる。熱力学において、断熱過程とは系と環境との熱のやりとりが無いという意味であった。系が常に平衡状態と見做せるように変化する（準静的）という条件下での断熱過程では、エントロピーが保存される。統計力学では、エントロピー保存は位相空間における体積の保存を意味している。古典力学では、外部パラメータに依存した周期運動する系において、系の周期に比べて外部パラメータの変化が十分にゆっくりであるとき、位相空間における体積（作用変数）が保存されることが知られている（古典断熱定理）。前期量子論では、この作用変数が量子化されると考えられていた（Bohr-Sommerfeld の量子化条件）。また量子力学では、時間に依存するハミルトニアンの下で、初期状態が初期時刻における  $n$  番目の瞬間固有状態<sup>\*1</sup>であれば、ハミルトニアン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量子断熱定理が知られている [1-3]。以上から分かる通り、古典断熱定理や量子断熱定理では、ハミルトニアンが十分ゆっくり（ $\simeq$  準静的）という意味で「断熱」という言葉を用いている。本稿で議論する系は全て量子系であるため、以降、瞬間固有状態に留まり続けるという意味で「断熱」という言葉を用い、また、量子断熱定理のことを単に断熱定理と呼ぶ。

ここまで断熱性に着目したが、この断熱性を破る現象、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。原子間や分子間の相互作用エネルギーは、原子間・分子間の距離に依存する。衝突過程では距離が時間的に変化するのだから、距離の変化が急激であれば、準位間で非断熱遷移が生じ、衝突後の原子・分子の内部状態が衝突前の原子・分子の内部状態と異なる。それでは、衝突前後で状態が変化する確率はどれほどのものであろうか。Landau, Zener, Stückelberg らは独立にこの問題を簡単な設定の下で解いた [4-6]<sup>\*2</sup>。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、非断熱遷移を制御することが実験的に可能となった [8, 9]。近年では量子技術の進展により、量子制御 [10, 11] や断熱量子計算 [12, 13] 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着目されている。

\*1 時間に依存するハミルトニアンの固有値・固有状態のことを瞬間固有値・瞬間固有状態 (instantaneous eigenvalue/instantaneous eigenstate) と呼ぶ。

\*2 Majorana は、これらの研究と同時期に、位置に依存する磁場下での原子ビームについて考え、同様の解析を行なっている [7]。



---

これまで、断熱性・非断熱性それぞれの着目された経緯とその重要性について紹介してきた。以下では、断熱過程・非断熱過程について分かっていることについて確認する。断熱過程については、前述したように断熱定理が知られている [1–3]。さらに、断熱条件と呼ばれる条件を系が満たせば、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 [3]。この断熱近似は量子制御 [14, 15] をはじめとして様々な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 [16–23]。また、瞬間固有状態間の遷移確率が十分小さい断熱極限において、その遷移確率を与える Dykhne-Davis-Pechukas (DDP) 公式が知られている [24, 25]。この近似公式の適用範囲の拡張は行われているものの [26–28]、一般的な模型に対する適切な公式化は未だなされていない。

非断熱過程に関しては、統一的に理解されていることは少ない。ここでは、ハミルトニアンが  $H(t) = f(t)A + B$  ( $A, B$  は時間に依存しない行列) と表されると仮定し、実数値関数  $f(t)$  の振る舞いごとに、これまでに知られていることを紹介する。まず、 $f(t) \propto t$  と表せるクラスについて紹介する。2 準位系の模型は、Landau-Zener-Stückelberg-Majorana (LZSM) 模型 [4–7] と呼ばれており、時間発展が特殊関数を用いて厳密に求まる。3 準位以上の模型は多準位 LZSM 模型と呼ばれており、無限の時間間隔での遷移確率が厳密に求まる模型がいくつか知られている [29–36]。これらの可解性の背景には可積分系の数理論が潜んでいるという指摘がある [37–39] が、未だ完全な理解には至っていない。次に、ハミルトニアンが時間周期性を持っている、例えば  $f(t) \propto \sin(\omega t)$  等と表せるクラスについて紹介する。このクラスのハミルトニアンは、Floquet の定理が適用でき、これを用いて時間に依存しない無限次元のハミルトニアンに変形できることが知られている。この定理より、これまで作ることが難しかった模型を、周期外場を与えることで擬似的に作るといった、Floquet エンジニアリングが盛んに研究されている [40]。また、ダイナミクスを解析する際の近似手法として、回転波近似や断熱瞬間近似等が知られている。これにより、例えば振動外場中の 2 準位系のダイナミクスは広いパラメータの範囲において近似的に理解することが出来る [41]。最後に、ハミルトニアンの時間依存性がこれまであげたクラスのどれにも属さないクラスについて紹介する。例えば、 $f(t) \propto t^2$  のように時間に依存する模型は放物模型として知られている [42–50]。2 次以上の高次項を含む時間依存性を持つ模型も、断熱極限における遷移確率が近似的に求められている [27, 51, 52]。その他にも Rosen-Zener 模型 [53] や Demkov-Kunike 模型 [54, 55] など、厳密に解ける模型がいくつか提案されている [56–60]。また、2 準位系の性質を利用して、様々な解ける模型を包括的に求める手法も提案されている [61–63]。

本稿の目的は、時間に依存するハミルトニアンで表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。そのために、以下の問題について取り扱う。

- まず、2 準位系における断熱近似の直接的な評価を行う (第 2 章)。断熱近似の成立条件である断熱条件は問題を含んでおり、未だに様々な議論がなされている (Appendix A)。そこで、系を 2 準位系に限り、従来の断熱近似の摂動的な導出とは異なった導出を行う。これにより、瞬間固有状態間の遷移が抑制される条件が導かれる。また、この議論における一部の別証を Appendix B に記載した。
- 次に、多準位系への断熱瞬間近似の拡張を行う (第 3 章)。断熱瞬間近似は 2,3 準位系で用いられてきたが、多準位系、特にハミルトニアンの対角化が数値的に難しい場合に対する断熱瞬間近似の拡張 (一般化断熱瞬間近似と呼ぶ) を考察する。断熱瞬間近似は数学的な裏付けがないまま用いら

れてきたが、この拡張はこれに対し物理的適正化を施した形にもなっている。この導出の過程で必要となる LZSM 模型の厳密解の導出や、その厳密解の性質を Appendix C,D に記載した。また、この証明の元となっている先行研究 [64–66] の議論を Appendix F に記載した。

- 最後に、多準位放物模型を解析する (第 4 章)。この解析により、擬交差点をもつ非断熱過程から擬交差点を持たない断熱過程へパラメータが変化した際に遷移確率の振る舞いが急激に変化する機構を明らかにした。また 3 準位以上の系では、非断熱過程で遷移確率を与える項を複素化したものが断熱極限での相対位相を与えるという、これまで知られていなかった現象も導かれた。この解析の妥当性については Appendix G で議論した。また、第 3 章で導出した一般化断熱瞬間近似を用いた解析については Appendix H で議論し、導出した近似式の詳しい式変形については Appendix I で議論した。

第 5 章では、本稿のまとめとこれからの方向性について述べる。

また、第 2 章、第 4 章で重要な役割を果たす幾つかの特殊関数の Stokes 現象については、Appendix E にまとめた。



## 第 2 章

# 2 準位系における無遷移過程

この章では、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。第 2.1 節では、断熱定理と断熱近似について紹介する。ここで導出した断熱近似の問題点について第 2.2 節で議論する。第 2.3 節では、2 準位系に限定することで、瞬間固有状態間の遷移が抑制される条件（無遷移条件）を導く。これは断熱近似の導出で用いられる、ハミルトニアンの変化する時間間隔  $T$  による摂動的な解析を用いておらず、さらに断熱定理で仮定されているクラスより広いクラスのハミルトニアンを考えている。第 2.4 節では、今回提案した手法によって解析的に時間発展が求まる例を考えることができるので、この例を通じて無遷移極限での振る舞いを考察する。

### 2.1 断熱定理と断熱近似

#### 2.1.1 断熱定理

時間間隔  $[0, T]$  における量子系の時間発展を考える。ただし、ハミルトニアンは  $H(t/T) =: H(s)$  の形で与えられているとする。このとき、時刻 0 から時刻  $t$  までの時間発展演算子を  $U(t, 0)$  とすると、Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, 0) = H\left(\frac{t}{T}\right) U(t, 0)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U(s, 0; T) = TH(s)U(s, 0; T)$$

と表せる。以降、 $U(s, 0; T) = U(s; T)$  と略記する。

ハミルトニアン  $H(s)$  の離散的な瞬間固有値を  $E_j(s)$ 、これに属する瞬間固有状態を  $|E_j(s)\rangle$ 、瞬間固有空間への射影演算子を  $P_j(s)$  とする。  $s \in [0, 1]$  において瞬間固有値は連続で縮退は無いとし、瞬間固有空間は 1 次元とする<sup>\*1</sup>。さらに、 $N$  準位系を考え、 $j = 1, \dots, N$  とする。

$$P_j(s) = |E_j(s)\rangle \langle E_j(s)|$$

---

<sup>\*1</sup> この仮定は本質的ではないが、本稿で考えるモデルは全て離散的な瞬間固有値を持ち、縮退は無いので、このような簡単な設定にした。

また,  $P_j(s), \frac{dP_j(s)}{ds}, \frac{d^2P_j(s)}{ds^2}$  は  $s \in [0, 1]$  において連続とする\*2. このとき, 時間発展演算子  $U(s; T)$  は次の性質を満たす (断熱定理) [1, 2].

$$\lim_{T \rightarrow \infty} U(s; T)P_j(0) = P_j(s) \lim_{T \rightarrow \infty} U(s; T) \quad (2.1.1)$$

例えば, 初期状態として  $j$  番目の瞬間固有状態  $|E_j(0)\rangle$  を考えると, 時刻  $s$  での状態  $|\psi(s)\rangle$  は,  $T \rightarrow \infty$  において,

$$\begin{aligned} |\psi(s)\rangle &:= \lim_{T \rightarrow \infty} U(s; T) |E_j(0)\rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} U(s; T) P_j(0) |E_j(0)\rangle \\ &= P_j(s) \lim_{T \rightarrow \infty} U(s; T) |E_j(0)\rangle \\ &= P_j(s) |\psi(s)\rangle \end{aligned}$$

と表せる. よって,  $|\psi(s)\rangle \propto |E_j(s)\rangle$ , つまり時刻  $s$  での  $j$  番目の瞬間固有状態  $|E_j(s)\rangle$  に留まるという結論が導かれる,

### 証明 [3]

まず, 次のユニタリ演算子  $A(s)$  とエルミート演算子  $K(s)$  を導入する.

$$\begin{aligned} A(s) &= \sum_{j=1}^N |E_j(s)\rangle \langle E_j(0)| \\ K(s) &= i\hbar \sum_{j=1}^N \left( \frac{d}{ds} |E_j(s)\rangle \right) \langle E_j(s)| \end{aligned}$$

ここで,  $A(s)$  は初期状態が時刻 0 での瞬間固有状態  $|E_j(0)\rangle$  であったときに, 時刻  $s$  での状態が, その時刻  $s$  での瞬間固有状態  $|E_j(s)\rangle$  となる, という時間発展演算子に対応している. よって, この時間発展演算子を用いて回転座標系に移った際に, その座標変換後の系での時間発展が準位間の遷移が起きないものに対応していれば, 断熱定理が示されたことになる. さて, 瞬間固有状態に位相の不定性があるため,

$$\langle E_j(s) | \frac{d}{ds} |E_j(s)\rangle = 0 \quad (2.1.2)$$

と条件を課す. これより

$$P_j(s)K(s)P_j(s) = 0 \quad (2.1.3)$$

が成り立つ.

このユニタリ行列  $A(s)$  によって系を変換し, 変換後の演算子を  $\tilde{\cdot}$  のようにチルダ付きで表す. つまり, 演算子  $B$  に対し, 変換後の演算子  $\tilde{B}$  を

$$\tilde{B} := A^\dagger(s)BA(s)$$

\*2 Marzlin-Sanders のパラドックスと呼ばれる, 断熱条件に関する矛盾が一時盛んに議論された [16-23]. このパラドックスはこの仮定を満たしていないことが原因であった (Appendix A).

と定義する. 例えば, ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}\tilde{H}(s) &= A^\dagger(s)H(s)A(s) \\ &= \sum_{j=1}^N E_j(s)P_j(0)\end{aligned}$$

と表せる. つまり, この系では瞬間固有値のみ時間依存し, 瞬間固有状態は時間依存しないことが分かる. また, 変換後の時間発展演算子は  $\tilde{U}(s; T) = A^\dagger(s)U(s; T)$  と表せる. これより, Schrödinger 方程式は

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \tilde{U}(s; T) &:= i\hbar \frac{\partial}{\partial s} (A^\dagger(s)U(s; T)) \\ &= -A^\dagger(s)K(s)U(s; T) + A^\dagger(s)TH(s)U(s; T) \\ &= \left(-\tilde{K}(s) + T\tilde{H}(s)\right)\tilde{U}(s; T)\end{aligned}\tag{2.1.4}$$

と変形できる.

さて,  $\tilde{K}(s)$  が無視できるとき (実際に  $T$  が十分大きい極限で無視できることをすぐ後に証明する), ハミルトニアンは瞬間固有値のみ時間依存していて, 瞬間固有状態は時間に依存しないため, Schrödinger 方程式は容易に解ける. このときの時間発展演算子を  $\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{U}_0(s; T)$  と表せば,

$$\begin{aligned}\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{U}_0(s; T) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^s ds' E_j(s')} P_j(0) \\ \lim_{T \rightarrow \infty} U_0(s; T) &= \lim_{T \rightarrow \infty} A(s)\tilde{U}_0(s; T) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^s ds' E_j(s')} P_j(s)A(s)\end{aligned}\tag{2.1.5}$$

と求まる. これより,

$$\begin{aligned}\lim_{T \rightarrow \infty} U_0(s; T)P_k(0) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^s ds' E_j(s')} P_j(s)A(s)P_k(0) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^s ds' E_j(s')} P_j(s)P_k(s)A(s) \\ &= P_k(s) \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^s ds' E_j(s')} P_j(s)A(s) = P_k(s) \lim_{T \rightarrow \infty} U_0(s; T)\end{aligned}$$

が成り立つ.  $\lim_{T \rightarrow \infty} U_0(s; T) = \lim_{T \rightarrow \infty} U(s; T)$  が成り立つならば,  $T$  が十分大きい極限で時間発展演算子は断熱定理 (2.1.1) を満たしていることが分かる.

以降, 式 (2.1.4) において,  $T \rightarrow \infty$  の極限で  $\tilde{K}$  が無視できること, つまり  $\lim_{T \rightarrow \infty} U_0(s; T) = \lim_{T \rightarrow \infty} U(s; T)$  が成り立つことを示す. ここで,

$$W(s; T) := \tilde{U}_0^\dagger(s; T)\tilde{U}(s; T)\tag{2.1.6}$$

として, 新たなユニタリ演算子  $W(s; T)$  を導入すると,  $W(s; T)$  の時間発展は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} W(s; T) = -\tilde{U}_0^\dagger(s; T) \tilde{K}(s) \tilde{U}_0(s; T) W(s; T) =: -\bar{K}(s; T) W(s; T) \quad (2.1.7)$$

に従う. これより

$$W(s; T) = I + \frac{i}{\hbar} \int_0^s ds' \bar{K}(s'; T) W(s'; T) \quad (2.1.8)$$

を得る. ここで, 次のように定義される  $\bar{K}(s; T)$  の  $(j, k)$  成分に着目する.

$$\begin{aligned} \bar{K}_{jk}(s; T) &:= P_j(0) \bar{K}(s; T) P_k(0) \\ &= e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^s ds' (E_k(s') - E_j(s'))} P_j(0) \tilde{K}(s) P_k(0) \\ &= e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^s ds' (E_k(s') - E_j(s'))} A^\dagger(s) P_j(s) K(s) P_k(s) A(s) \end{aligned}$$

式 (2.1.3) より, 対角成分は  $\bar{K}_{jj}(s; T) = 0$  となる. 一方, 非対角成分  $\bar{K}_{jk}(s; T)$  ( $j \neq k$ ) については, 縮退がないという条件から位相に停留部分が存在しない. よって,

$$F(s; T) := \int_0^s ds' \bar{K}(s'; T) \quad (2.1.9)$$

とすると, Riemann-Lebesgue の補題より  $F(s; T) = O(1/T)$  が言える. 以上より,

$$\begin{aligned} W(s; T) - I &= \frac{i}{\hbar} F(s; T) W(s; T) - \frac{i}{\hbar} \int_0^s ds' F(s'; T) \frac{\partial}{\partial s'} W(s'; T) \\ &= \frac{i}{\hbar} F(s; T) W(s; T) + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^s ds' F(s'; T) \bar{K}(s') W(s'; T) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0 \end{aligned}$$

となる. よって,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{U}(s; T) = \lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{U}_0(s; T)$$

が成り立つことが示せた. □

## 2.1.2 断熱近似

式 (2.1.5) で定義される断熱的な場合の時間発展演算子を  $U_0(s; T)$  と表す. **断熱近似**とは, ハミルトニアンの変化が十分遅いとき,

$$U(s; T) \simeq U_0(s; T)$$

とみなす近似手法である [3].

この近似が妥当となる条件について考える.  $1/T$  に関する 1 次の摂動まで考えると, 式 (2.1.6), (2.1.8), (2.1.9) より, 時間発展演算子は

$$\begin{aligned} \tilde{U}(s; T) &= \tilde{U}_0(s; T) W(s; T) \\ &\simeq \tilde{U}_0(s; T) \left( I + \frac{i}{\hbar} F(s; T) \right) \end{aligned}$$

と表せる．初期状態が  $|E_i(0)\rangle$  であり，時刻  $s$  で  $|E_j(s)\rangle$  ( $j \neq i$ ) に遷移する確率は

$$\begin{aligned}
 p_{ji}(s) &= |\langle E_j(s) | U(s; T) | E_i(0) \rangle|^2 \\
 &\simeq \frac{1}{\hbar^2} |\langle E_j(0) | F(s; T) | E_i(0) \rangle|^2 \\
 &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle E_j(0) | \int_0^s ds' e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^{s'} ds'' (E_i(s'') - E_j(s''))} \tilde{K}(s') | E_i(0) \rangle \right|^2 \\
 &= \left| \langle E_j(0) | \int_0^s ds' e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^{s'} ds'' \omega_{ij}(s'')} A^\dagger(s') \sum_k \frac{dP_k(s')}{ds'} P_k(s') A(s') | E_i(0) \rangle \right|^2 \\
 &= \left| \int_0^s ds' e^{-i\frac{T}{\hbar} \int_0^{s'} ds'' \omega_{ij}(s'')} \langle E_j(s') | \frac{d}{ds'} | E_i(s') \rangle \right|^2 \\
 &=: \left| \int_0^s ds' e^{-iT \int_0^{s'} ds'' \omega_{ij}(s'')} \alpha_{ji}(s') \right|^2
 \end{aligned}$$

と求まる．ここで，

$$\begin{aligned}
 \omega_{ij}(s) &:= \frac{E_i(s) - E_j(s)}{\hbar} \\
 \alpha_{ij}(s) &:= \langle E_i(s) | \frac{d}{ds} | E_j(s) \rangle
 \end{aligned}$$

と定義し，また

$$K(s) = i\hbar \sum_{j=1}^N \frac{dP_j(s)}{ds} P_j(s)$$

という関係式を用いた．部分積分を実行すると，

$$\begin{aligned}
 \left| \int_0^s ds' e^{-iT \int_0^{s'} ds'' \omega_{ij}(s'')} \alpha_{ji}(s') \right|^2 &= \left| \left[ \frac{1}{-iT\omega_{ij}(s')} e^{-iT \int_0^{s'} ds'' \omega_{ij}(s'')} \alpha_{ji}(s') \right]_0^s + O(T^{-2}) \right|^2 \\
 &\lesssim T^{-2} \max_{s' \in [0, s]} \left| \frac{\alpha_{ji}(s')}{\omega_{ij}(s')} \right|^2
 \end{aligned}$$

と抑えられる．よって，瞬間固有状態間の遷移が起きないとみなす断熱近似の条件として，

$$T \gg \hbar \left| \frac{\langle E_j(s) | \frac{d}{ds} | E_i(s) \rangle}{E_i(s) - E_j(s)} \right| \quad (2.1.10)$$

が導かれる．これを**断熱条件**と呼ぶ．

## 2.2 断熱近似の問題点

断熱条件 (2.1.10) の導出を確認すると，1 次の摂動までしか考えていないため，断熱条件 (2.1.10) が断熱近似の十分条件や必要条件になっているがどうかは自明ではない．必要十分性については様々な議論がある [16–21, 67–71] が，ここでは厳密に解ける回転磁場模型を用いて，断熱条件が十分条件にも必要条件にもなっていないことを示す．



## 例 2.2.1 回転磁場模型における断熱性

次のハミルトニアンを考える.

$$H(t) = \frac{\nu_0}{2} (\sin \theta \cos \phi_\omega(t) \sigma_x + \sin \theta \sin \phi_\omega(t) \sigma_y + \cos \theta \sigma_z) \quad (2.2.1)$$

ただし,  $\phi_\omega(t) = \dot{\phi}_\omega t = 2\pi t / (\alpha T)$  とし,  $\nu_0, \alpha > 0, \theta \in (0, \pi), t \in [0, T]$  とする. また,  $\sigma_i$  はパウリ演算子

$$\sigma_x = |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|, \quad \sigma_y = i|1\rangle \langle 0| - i|0\rangle \langle 1|, \quad \sigma_z = |0\rangle \langle 0| - |1\rangle \langle 1|$$

である. ここで, 定義より  $T$  は周期ではないことに注意しておく. 無次元パラメータ  $\alpha$  は, 時刻  $T$  までに振動した回数の逆数を意味する. 外部磁場  $\mathbf{B}(t)$  中の電子のスピン  $\boldsymbol{\sigma}$  を考えると, ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H(t) &= C\mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= C|\mathbf{B}(t)|(\sin \theta(t) \cos \phi_\omega(t) \sigma_x + \sin \theta(t) \sin \phi_\omega(t) \sigma_y + \cos \theta(t) \sigma_z) \end{aligned}$$

と与えられる ( $C$  は定数). ここで,  $\theta(t), \phi_\omega(t)$  は, それぞれ外部磁場  $\mathbf{B}(t)$  の天頂角と方位角である (図 2.2.1). この観点に立つと, ハミルトニアン (2.2.1) は, 大きさ一定の外部磁場  $\mathbf{B}(t)$  が  $z$  軸を中心に一定の角速度  $\dot{\phi}_\omega$  で回転している模型と捉えることができる. これより, ハミルトニアン (2.2.1) を**回転磁場模型**と呼ぶ. また, 以降では, ハミルトニアンにおける  $\sigma_z$  の係数を**縦磁場**,  $\sigma_x$  と  $\sigma_y$  の係数の大きさ, つまり回転磁場模型における

$$\frac{\nu_0}{2} \sin \theta$$

を**横磁場**と呼ぶことにする. このハミルトニアン (2.2.1) の瞬間固有値は  $E_\pm = \pm \nu_0/2$  であることから,  $\nu_0$  はハミルトニアンのエネルギースケールを特徴づけていることが分かる.

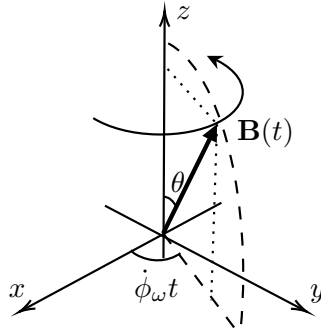


図 2.2.1 回転磁場模型における模式図. 磁場の天頂角を  $\theta$ , 方位角を  $\dot{\phi}_\omega t$  で表す.

瞬間固有状態は

$$|E_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi_\omega(t)}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\phi_\omega(t)}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |E_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi_\omega(t)}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\frac{\phi_\omega(t)}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

である. ここで, 行列表示の基底として  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  を用いた. これより, 断熱条件 (2.1.10) は

$$\nu_0 \gg \hbar \dot{\phi}_\omega \sin \theta = \frac{2\pi \hbar}{\alpha T} \sin \theta \quad (2.2.2)$$

と求まる.

また, 状態を

$$|\psi(t)\rangle = a_-(t) |E_-(t)\rangle + a_+(t) |E_+(t)\rangle$$

と展開し, 初期条件を  $a_-(0) = 1, a_+(0) = 0$  とすると, 係数  $a_+(t)$  は

$$a_+(t) = -i \frac{\dot{\phi}_\omega}{\bar{\omega}} \sin \theta \sin \frac{\bar{\omega} t}{2}$$

と求まる (例 2.3.1 参照). ここで,

$$\bar{\omega} := \sqrt{\left(\frac{\nu_0}{\hbar}\right)^2 + \dot{\phi}_\omega^2 - 2\frac{\nu_0}{\hbar}\dot{\phi}_\omega \cos \theta} \quad (2.2.3)$$

である.

まず十分性 (断熱条件  $\Rightarrow$  断熱近似可能) について議論する. 断熱条件 (2.2.2) を満たし, さらに  $\frac{\nu_0}{\hbar} \cos \theta \simeq \dot{\phi}_\omega$  が成り立っている場合, 例えば  $\frac{\nu_0}{\hbar} \simeq \dot{\phi}_\omega, \theta \simeq 0$  を考える. このとき,

$$\begin{aligned} \bar{\omega} &\simeq \sqrt{\left(\frac{\nu_0}{\hbar}\right)^2 - \dot{\phi}_\omega^2} = \frac{\nu_0}{\hbar} \sin \theta \\ \therefore |a_+(t)| &\simeq \left| \frac{\hbar \dot{\phi}_\omega}{\nu_0} \sin \left( \frac{\nu_0 \sin \theta}{2\hbar} t \right) \right| \end{aligned}$$

と表せるため,  $|a_+(t)|^2 \simeq 1$  となる時刻が  $t \simeq \pi \hbar / (\nu_0 \sin \theta) = \alpha T / (2 \sin \theta)$  と求まる. つまり,  $\alpha < 2 \sin \theta$  が成り立っている場合, 時刻  $t \simeq \pi \hbar / (\nu_0 \sin \theta) < T$  には初期状態とは異なる瞬間固有状態に遷移する. 以上より断熱条件 (2.2.2) が十分条件ではないことが分かる.

次に必要性 (断熱近似可能  $\Rightarrow$  断熱条件) について議論する.  $\theta \simeq 0, \frac{\nu_0}{\hbar} \ll \dot{\phi}_\omega$  のとき,

$$|a_+(t)| \simeq \left| \theta \sin \left( \frac{(\dot{\phi}_\omega - \frac{\nu_0}{\hbar}) t}{2} \right) \right|$$

となり,  $|a_+(t)|^2 \lesssim \theta^2$  より断熱近似可能であると言える. 一方で, このパラメータは必ずしも断熱条件を満たすとは言えない. 以上より断熱条件 (2.2.2) が必要条件でもないことが分かる.

上記の議論は, 図 2.2.2 を見るとより明らかになる. 図 2.2.2 の青色の領域は非断熱領域を表している. 断熱条件 (2.2.2) を満たす一方で非断熱領域に含まれてしまうパラメータが存在することが分かる.

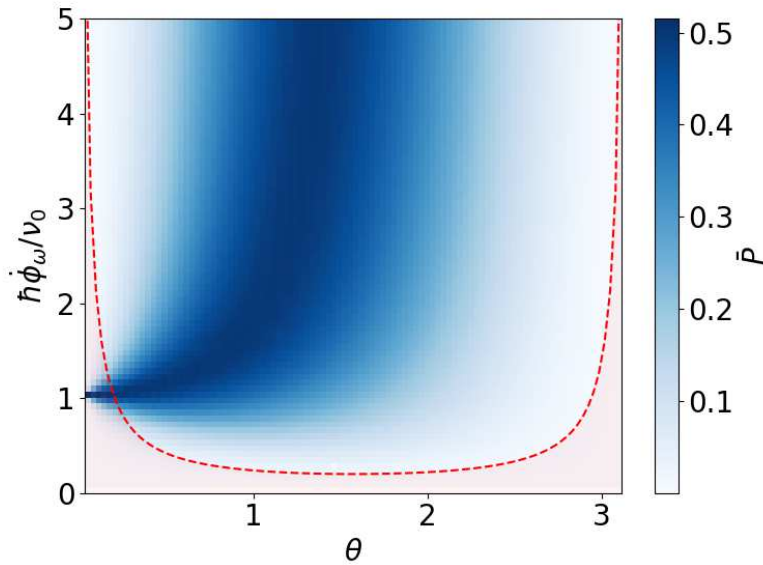


図 2.2.2 時間平均した遷移確率  $\bar{P} = \frac{1}{T} \int_0^T dt |a_+(t)|^2$  のプロット. 赤く塗りつぶされた領域は, 断熱条件 (2.2.2) を満たすパラメータ領域を表している. 赤い破線は, 断熱条件の境目  $\nu_0 = 5\hbar\phi_\omega \sin \theta$  を表している.  $\alpha = 1/50$  とした.

この例より, 断熱条件 (2.1.10) が断熱近似の十分条件にも必要条件にもなっていないことが分かる. このような議論から, 近年では, 従来の断熱条件 (2.1.10) に代わって, 断熱近似の十分条件, もしくは必要条件となるような条件を導くという研究がなされている [22, 23, 72–78].

断熱条件の導出では, ハミルトニアンが  $H(t, T) = H(t/T)$  といった時間依存性を持つと仮定し,  $T$  を十分大きいとして時間発展演算子を  $1/T$  について摂動展開した. もしも時間発展演算子の厳密な解が求まっていれば, 上述した議論をせずとも, 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ハミルトニアンの場合, 2 準位系ですら一般に解くことは難しいが, 時間発展演算子とハミルトニアンの関係をいくつかの変数を介して関係づけることができる [61–63]. 次の節ではこの関係を用いて, ハミルトニアンは必ずしも  $H(t/T) = H(s)$  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探る [79]. この条件を**無遷移条件**と呼び, この条件を満たすダイナミクスを**無遷移過程**と呼ぶことにする.

## 2.3 2 準位系における無遷移条件

### 2.3.1 2 準位系の瞬間固有状態間の遷移振幅

時間に依存する 2 準位系のハミルトニアンは、一般に次のように表せる。

$$H(t) = \begin{pmatrix} \Omega(t) & \omega^*(t) \\ \omega(t) & -\Omega(t) \end{pmatrix}, \quad \omega(t) = |\omega(t)|e^{i\phi_\omega(t)} \quad (2.3.1)$$

ここで、縦磁場  $\Omega(t)$ 、横磁場  $|\omega(t)|$ 、横磁場の方位角  $\phi_\omega(t)$  は実関数である。このハミルトニアンの瞬間固有値は

$$E_\pm(t) = \pm\sqrt{\Omega^2(t) + |\omega(t)|^2}$$

と表され、これらの瞬間固有値に属する瞬間固有状態は、それぞれ

$$\begin{aligned} |E_+(t)\rangle &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}\phi_\omega(t)} \cos \frac{\theta(t)}{2} \\ e^{\frac{i}{2}\phi_\omega(t)} \sin \frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix} \\ |E_-(t)\rangle &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}\phi_\omega(t)} \sin \frac{\theta(t)}{2} \\ -e^{\frac{i}{2}\phi_\omega(t)} \cos \frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix} \\ \tan \theta(t) &= \frac{|\omega(t)|}{\Omega(t)} \end{aligned}$$

と表せる。ここで、 $\theta(t)$  は縦磁場と横磁場の比、つまり天頂角である (図 2.3.1)。

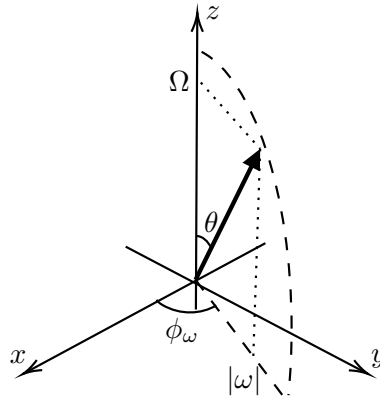


図 2.3.1 ハミルトニアン (太矢印) の縦磁場  $\Omega$ 、横磁場  $|\omega|$  と変数  $\theta, \phi_\omega$  との関係。

さて、ハミルトニアン (2.3.1) の下での時間発展は以下のように表すことができる [63].

$$\begin{aligned} U(t) &= \begin{pmatrix} a(t) & b(t) \\ -b^*(t) & a^*(t) \end{pmatrix} \\ a(t) &= \cos \chi(t) e^{-\frac{i}{2}(\Theta(t) + \phi_\omega(t) + \phi(t) - \phi_\omega(0))} \\ b(t) &= -i \sin \chi(t) e^{-\frac{i}{2}(\Theta(t) + \phi_\omega(t) - \phi(t) + \phi_\omega(0))} \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

ここで,  $\Theta(t)$  は  $\Theta(0) = 0$  を満たす任意の実関数で, また,

$$\chi(t) := \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \cos \Theta(t') \quad (2.3.3)$$

$$\phi(t) := \int_0^t dt' \frac{2|\omega(t')| \sin \Theta(t')}{\hbar \sin 2\chi(t')} \quad (2.3.4)$$

と定義した. さらに, これらの変数は

$$\Omega(t) = \frac{\hbar}{2} \left( \dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}_\omega(t) \right) + \frac{|\omega(t)| \sin \Theta(t)}{\tan 2\chi(t)} \quad (2.3.5)$$

の関係を満たす.

**証明** 次のように時間発展演算子を表す.

$$U(t) = \begin{pmatrix} a(t) & b(t) \\ -b^*(t) & a^*(t) \end{pmatrix}$$

$$a(t) = \cos z(t) e^{-ix(t)}$$

$$b(t) = -\sin z(t) e^{iy(t)}$$

ここで,  $U(0) = I$  より,  $z(0) = x(0) = 0$  である. また, 2準位系のハミルトニアンが式 (2.3.1) のように Lie 代数  $\mathfrak{su}(2)$  の元 (の虚数倍) の線形和で表されている場合, 時間発展演算子は 2 次の特殊ユニタリ群  $SU(2)$  の元として表されるため, 時間発展演算子は  $|a(t)|^2 + |b(t)|^2 = 1$  を満たす必要がある. よって, 上記のような変数の取り方が最も一般的である. ハミルトニアンを式 (2.3.1) として, Schrödinger 方程式に時間発展演算子を代入すると,

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{U}(t) &= H(t)U(t) \\ \begin{cases} i\hbar \dot{a}(t) &= \Omega(t)a(t) + \omega^*(t)b(t) \\ i\hbar \dot{b}(t) &= -\Omega(t)b(t) + \omega(t)a(t) \end{cases} \\ \begin{cases} -i\hbar \dot{z}(t) \sin z(t) + \hbar \cos z(t) \dot{x}(t) &= \Omega(t) \cos z(t) + |\omega(t)| \sin z(t) e^{-i(y(t)-x(t)+\phi_\omega(t))} \\ i\hbar \dot{z}(t) \cos z(t) + \hbar \sin z(t) \dot{y}(t) &= -\Omega(t) \sin z(t) + |\omega(t)| \cos z(t) e^{i(y(t)-x(t)+\phi_\omega(t))} \end{cases} \\ \begin{cases} \dot{x}(t) &= \frac{\Omega(t)}{\hbar} + \frac{|\omega(t)|}{\hbar} \tan z(t) \cos(y(t) - x(t) + \phi_\omega(t)) \\ \dot{y}(t) &= -\frac{\Omega(t)}{\hbar} + \frac{|\omega(t)|}{\hbar} \cot z(t) \cos(y(t) - x(t) + \phi_\omega(t)) \\ \dot{z}(t) &= \frac{|\omega(t)|}{\hbar} \sin(y(t) - x(t) + \phi_\omega(t)) \end{cases} \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

を得る. 式 (2.3.6) の第 3 式より,

$$\begin{aligned} z(t) &= \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \sin(y(t') - x(t') + \phi_\omega(t')) \\ &= - \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \sin \tilde{\Theta}(t') \end{aligned}$$

を得る。ただし,

$$-(y(t) - x(t) + \phi_\omega(t)) =: \tilde{\Theta}(t) \quad (2.3.7)$$

と定義した。また,

$$-\phi_\omega(0) - y(0) = \tilde{\Theta}(0)$$

であることに注意する。式 (2.3.6) の第 1 式と第 2 式の差と和を考えると, 式 (2.3.7) より

$$\begin{cases} \dot{x}(t) - \dot{y}(t) = \dot{\tilde{\Theta}}(t) + \dot{\phi}_\omega(t) = 2\frac{\Omega(t)}{\hbar} + \frac{2|\omega(t)| \cos \tilde{\Theta}(t)}{\hbar \tan\left(2 \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \sin \tilde{\Theta}\right)} \\ \dot{x}(t) + \dot{y}(t) = -\frac{2|\omega(t)| \cos \tilde{\Theta}(t)}{\hbar \sin\left(2 \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \sin \tilde{\Theta}\right)} \end{cases}$$

を得る。ただし,

$$\begin{aligned} \tan z(t) + \cot z(t) &= \frac{2}{\sin(2z(t))} \\ \tan z(t) - \cot z(t) &= -\frac{2}{\tan(2z(t))} \end{aligned}$$

を用いた。以上より

$$\begin{aligned} a(t) &= \cos\left(\int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \sin \tilde{\Theta}(t')\right) \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{i}{2}\left(\tilde{\Theta}(t) + \phi_\omega(t) - \int_0^t dt' \frac{2|\omega(t')| \cos \tilde{\Theta}(t')}{\hbar \sin\left(2 \int_0^{t'} dt'' \frac{|\omega(t'')|}{\hbar} \sin \tilde{\Theta}(t'')\right)} + y(0)\right)\right) \\ b(t) &= \sin\left(\int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \sin \tilde{\Theta}(t')\right) \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{i}{2}\left(\tilde{\Theta}(t) + \phi_\omega(t) + \int_0^t dt' \frac{2|\omega(t')| \cos \tilde{\Theta}(t')}{\hbar \sin\left(2 \int_0^{t'} dt'' \frac{|\omega(t'')|}{\hbar} \sin \tilde{\Theta}(t'')\right)} - y(0)\right)\right) \\ \Omega(t) &= \frac{\hbar}{2}\left(\dot{\tilde{\Theta}}(t) + \dot{\phi}_\omega(t)\right) - \frac{|\omega(t)| \cos \tilde{\Theta}(t)}{\tan\left(2 \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \sin \tilde{\Theta}\right)} \end{aligned}$$

を得る. さらに,  $\tilde{\Theta}(t) = \Theta(t) + \frac{\pi}{2}$ ,  $y(0) = -\phi_\omega(0) - \frac{\pi}{2}$  とすると,

$$\begin{aligned} a(t) &= \cos \left( \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \cos \Theta(t') \right) \\ &\quad \times \exp \left( -\frac{i}{2} \left( \Theta(t) + \phi_\omega(t) + \int_0^t dt' \frac{2|\omega(t')| \sin \Theta(t')}{\hbar \sin \left( 2 \int_0^{t'} dt'' \frac{|\omega(t'')|}{\hbar} \cos \Theta(t'') \right)} - \phi_\omega(0) \right) \right) \\ b(t) &= -i \sin \left( \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \cos \Theta(t') \right) \\ &\quad \times \exp \left( -\frac{i}{2} \left( \Theta(t) + \phi_\omega(t) - \int_0^t dt' \frac{2|\omega(t')| \sin \Theta(t')}{\hbar \sin \left( 2 \int_0^{t'} dt'' \frac{|\omega(t'')|}{\hbar} \cos \Theta(t'') \right)} + \phi_\omega(0) \right) \right) \\ \Omega(t) &= \frac{\hbar}{2} \left( \dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}_\omega(t) \right) + \frac{|\omega(t)| \sin \Theta(t)}{\tan \left( 2 \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \cos \Theta \right)} \end{aligned}$$

となる. また,

$$\begin{aligned} \chi(t) &:= \int_0^t dt' \frac{|\omega(t')|}{\hbar} \cos \Theta(t') \\ \phi(t) &:= \int_0^t dt' \frac{2|\omega(t')| \sin \Theta(t')}{\hbar \sin 2\chi(t')} \end{aligned}$$

と置くと,

$$\begin{aligned} a(t) &= \cos \chi(t) \exp \left( -\frac{i}{2} (\Theta(t) + \phi_\omega(t) + \phi(t) - \phi_\omega(0)) \right) \\ b(t) &= -i \sin \chi(t) \exp \left( -\frac{i}{2} (\Theta(t) + \phi_\omega(t) - \phi(t) + \phi_\omega(0)) \right) \\ \Omega(t) &= \frac{\hbar}{2} \left( \dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}_\omega(t) \right) + \frac{|\omega(t)| \sin \Theta(t)}{\tan 2\chi(t)} \end{aligned}$$

となり, 式 (2.3.2), (2.3.5) を得る. □

以上のように導入した変数を用いて, 瞬間固有状態間の遷移振幅は簡潔な形で表せる. 例えば, 初期状態を  $|E_+(0)\rangle$  としたとき, 終時刻  $t$  で  $|E_-(t)\rangle$  に遷移する遷移振幅は

$$\begin{aligned} &\langle E_-(t) | U(t) | E_+(0) \rangle \\ &= \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}\phi_\omega(t)} \sin \frac{\theta(t)}{2} & -e^{-\frac{i}{2}\phi_\omega(t)} \cos \frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) & b(t) \\ -b^*(t) & a^*(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}\phi_\omega(0)} \cos \frac{\theta(0)}{2} \\ e^{\frac{i}{2}\phi_\omega(0)} \sin \frac{\theta(0)}{2} \end{pmatrix} \\ &= \cos \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \sin \frac{\theta(t) - \theta(0)}{2} - \sin \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \cos \frac{\theta(t) - \theta(0)}{2} \\ &\quad + i \left( \sin \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \cos \frac{\theta(t) + \theta(0)}{2} - \cos \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \sin \frac{\theta(t) + \theta(0)}{2} \right) \end{aligned} \tag{2.3.8}$$

と表せる.

### 例 2.3.1 回転磁場模型

回転磁場模型のハミルトニアン (2.2.1) を考える. ここで, 以下のユニタリ変換を考える.

$$V(t) = e^{i\frac{\dot{\phi}_\omega(t)}{2}\sigma_z}$$

これによって系を変換すると (この系のことを回転座標系と呼ぶ),

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}(V(t)U(t)) &= i\hbar\dot{V}(t)U(t) + i\hbar V(t)\dot{U}(t) \\ &= \left(-\hbar\frac{\dot{\phi}_\omega}{2}\sigma_z + V(t)H(t)V^\dagger(t)\right)V(t)U(t) \\ &= \frac{1}{2}\left((\nu_0 \cos \theta - \hbar\dot{\phi}_\omega)\sigma_z + \nu_0 \sin \theta \sigma_x\right)V(t)U(t) \\ &=: \hbar(A\sigma_x + B\sigma_z)V(t)U(t) \end{aligned}$$

と表せる. ここで,

$$\begin{cases} A := \frac{\nu_0}{2\hbar} \sin \theta \\ B := \frac{1}{2}\left(\frac{\nu_0}{\hbar} \cos \theta - \dot{\phi}_\omega\right) \end{cases} \quad (2.3.9)$$

とした. さらに,  $G := \sqrt{A^2 + B^2}$  とすると, 式 (2.2.3) より

$$G = \frac{\bar{\omega}}{2}$$

となる. これを用いると, この回転座標系での時間発展演算子  $V(t)U(t)$  は

$$\begin{aligned} V(t)U(t) &= e^{-i(A\sigma_x + B\sigma_z)t} \\ &= \cos(Gt)I + i \sin(Gt) \left(\frac{-A}{G}\sigma_x + \frac{-B}{G}\sigma_z\right) \\ &= \begin{pmatrix} \cos(Gt) - i\frac{B}{G}\sin(Gt) & -i\frac{A}{G}\sin(Gt) \\ -i\frac{A}{G}\sin(Gt) & \cos(Gt) + i\frac{B}{G}\sin(Gt) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sqrt{\cos^2(Gt) + \frac{B^2}{G^2}\sin^2(Gt)}e^{i\xi(t)} & -i\frac{A}{G}\sin(Gt) \\ -i\frac{A}{G}\sin(Gt) & \sqrt{\cos^2(Gt) + \frac{B^2}{G^2}\sin^2(Gt)}e^{-i\xi(t)} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と求まる. ここで,

$$\tan \xi(t) := -\frac{B}{G} \tan(Gt)$$

とした. また,  $I$  は  $2 \times 2$  の単位行列とした. 以上より, 回転座標系に移る前の, 元の系での時間発展演算子は

$$U(t) = V^\dagger(t) \begin{pmatrix} \sqrt{\cos^2(Gt) + \frac{B^2}{G^2}\sin^2(Gt)}e^{i\xi(t)} & -i\frac{A}{G}\sin(Gt) \\ -i\frac{A}{G}\sin(Gt) & \sqrt{\cos^2(Gt) + \frac{B^2}{G^2}\sin^2(Gt)}e^{-i\xi(t)} \end{pmatrix}$$



と求まる.

以上より, 回転磁場模型での変数  $\chi(t), \Theta(t), \phi(t)$  は, 式 (2.3.2) と見比べると,

$$\begin{cases} \cos \chi(t) = \sqrt{\cos^2(Gt) + \frac{B^2}{G^2} \sin^2(Gt)} \\ \sin \chi(t) = \frac{A}{G} \sin(Gt) \\ \Theta(t) = \phi(t) = -\arctan\left(-\frac{B}{G} \tan(Gt)\right) \end{cases} \quad (2.3.10)$$

となることが分かる. 瞬間固有状態間の遷移振幅は, 式 (2.3.8) より,

$$\begin{aligned} \langle E_-(t)|U(t)|E_+(0) \rangle &= i(\sin \chi(t) \cos \theta - \cos \chi(t) \sin \Theta(t) \sin \theta) \\ &= i\left(\frac{A}{G} \sin(Gt) \cos \theta - \frac{B}{G} \sin(Gt) \sin \theta\right) \\ &= i\left(\frac{\nu_0 \sin \theta}{\hbar \bar{\omega}} \sin\left(\frac{\bar{\omega}}{2}t\right) \cos \theta - \frac{\left(\frac{\nu_0}{\hbar} \cos \theta - \dot{\phi}_\omega\right)}{\bar{\omega}} \sin\left(\frac{\bar{\omega}}{2}t\right) \sin \theta\right) \\ &= i\frac{\dot{\phi}_\omega}{\bar{\omega}} \sin \theta \sin \frac{\bar{\omega}t}{2} \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

と求まる.

ここで,  $\dot{\phi}_\omega(t)$  についてコメントをしておく. 式 (2.3.5) より, ハミルトニアンに対角成分に  $\dot{\phi}_\omega(t)$  が含まれているが, これは回転座標系に移った際に消える項である. つまり, 回転座標系でのハミルトニアンは

$$\tilde{H}(t) = \begin{pmatrix} \Omega(t) - \frac{\hbar}{2}\dot{\phi}_\omega(t) & |\omega(t)| \\ |\omega(t)| & -\left(\Omega(t) - \frac{\hbar}{2}\dot{\phi}_\omega(t)\right) \end{pmatrix}$$

と表せる.

また, 変数の数についてもコメントをしておく. ハミルトニアンに含まれる変数は,  $\Omega(t), |\omega(t)|, \phi_\omega(t)$  (もしくは  $E_+(t), \theta(t), \phi_\omega(t)$ ) の3個であった. 時間発展演算子 (2.3.2) を表現するために新たに導入した変数は  $\chi(t), \phi(t), \Theta(t)$  の3個であり, ハミルトニアンを直接指定する代わりに, これら3個の変数を決めることによってハミルトニアンを指定することも出来る. より一般には, 3個の条件式 (2.3.3), (2.3.4), (2.3.5) があるため,  $\Omega(t), |\omega(t)|, \phi_\omega(t), \chi(t), \phi(t), \Theta(t)$  の6個の変数のうち, 3個の変数を決めることで, 残りの変数を指定することが可能である.

### 2.3.2 無遷移過程の必要十分条件

前節で, 瞬間固有状態間の遷移振幅が変数を用いて簡潔な形で表せることを見た. この遷移振幅が初期時刻から終時刻の間の任意の時間において0となる, つまり無遷移過程となる条件を考える. ここで,  $-\pi/2 < \Theta(t) < \pi/2$  かつ  $-\pi/2 < \phi(t) < \pi/2$  を満たす時刻のみ考えることとする. 初期条件  $\Theta(0) = \phi(0) = 0$  より, 時刻  $t = 0$  は考える時刻に含まれていることに注意する. この  $\Theta(t), \phi(t)$  に関す

る仮定は、無遷移条件を考える上でハミルトニアンを制限するものではない。 $\Theta(t), \phi(t)$  に関する仮定を満たしていない時間領域についても考察したい場合は、この仮定を破る時刻を新たに初期時刻と設定し、同様の議論をすれば良い。

### 2.3.2.1 無遷移過程

式 (2.3.8) より、遷移が全く起きない条件として、

$$\tan \frac{\theta(t) + \theta(0)}{2} = \tan \chi(t) \frac{\cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2}}{\sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2}}, \quad \tan \frac{\theta(t) - \theta(0)}{2} = \tan \chi(t) \frac{\sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2}}{\cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2}} \quad (2.3.12)$$

が導かれる。ハミルトニアンには 3 個の独立変数  $\Omega(t), |\omega(t)|, \phi_\omega(t)$  が含まれていたが、無遷移過程の条件 (2.3.12) が 2 個あるため、独立変数は 1 個に減ることが分かる。式 (2.3.12) より

$$\begin{aligned} \tan \theta(t) &= \frac{\tan \frac{\theta(t) + \theta(0)}{2} + \tan \frac{\theta(t) - \theta(0)}{2}}{1 - \tan \frac{\theta(t) + \theta(0)}{2} \tan \frac{\theta(t) - \theta(0)}{2}} \\ &= \frac{\tan \chi(t) \left( \cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} + \sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \right)}{\sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} - \tan^2 \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2}} \\ &= \frac{2 \tan \chi(t) \cos \phi(t)}{(1 - \tan^2 \chi(t)) \sin \Theta(t) \cos \phi(t) + (1 + \tan^2 \chi(t)) \sin \phi(t) \cos \Theta(t)} \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

$$\begin{aligned} \tan \theta(0) &= \frac{\tan \frac{\theta(t) + \theta(0)}{2} - \tan \frac{\theta(t) - \theta(0)}{2}}{1 + \tan \frac{\theta(t) + \theta(0)}{2} \tan \frac{\theta(t) - \theta(0)}{2}} \\ &= \frac{\tan \chi(t) \left( \cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} - \sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \right)}{\sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} + \tan^2 \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2}} \\ &= \frac{2 \tan \chi(t) \cos \Theta(t)}{(1 - \tan^2 \chi(t)) \sin \phi(t) \cos \Theta(t) + (1 + \tan^2 \chi(t)) \sin \Theta(t) \cos \phi(t)} \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

を得る。ここで、各変数の関係を簡潔に表すため、

$$y(t) := \frac{|\omega(t)|}{\hbar} \sin \Theta(t)$$

と、新たな変数を導入する。この変数  $y(t)$  を用いると、式 (2.3.3), (2.3.4), (2.3.5) を用いて、各変数は

$$\begin{cases} \Omega(t) = \frac{\hbar}{2} \left( \dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}_\omega(t) \right) + \frac{\hbar y(t)}{\tan 2\chi(t)} \\ |\omega(t)| = \hbar \sqrt{y^2(t) + \dot{\chi}^2(t)} \\ \tan \Theta(t) = \frac{y(t)}{\dot{\chi}(t)} \\ \dot{\phi}(t) = \frac{2y(t)}{\sin 2\chi(t)} \end{cases} \quad (2.3.15)$$

と表せる. つまり, 3 個の独立変数  $\chi(t), \phi_\omega(t), y(t)$  を指定することで, その他の変数を指定することが出来る. ここで,

$$\begin{aligned} \frac{2\dot{\chi}(t)}{\sin 2\chi(t)} &= \frac{\dot{\chi}(t)\dot{\phi}(t)}{y(t)} \\ &= \frac{\dot{\phi}(t)}{\tan \Theta(t)} \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

の関係が成り立つことに注意する. 式 (2.3.15) を用いて, 式 (2.3.13), (2.3.14) を変形すると, 以下の微分方程式が導かれる.

$$\begin{cases} \dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}_\omega(t) = \frac{2\dot{\chi}(t)}{\sin 2\chi(t)} \tan \phi(t) \\ \frac{d}{dt} \left[ \cos \chi(t) \left( \sin \chi(t) \sin \phi(t) + \frac{\cos \chi(t)}{\tan \theta(t)} \right) \right] = 0 \end{cases} \quad (2.3.17)$$

証明 (2.3.17) の第 1 式は, 式 (2.3.13) より,

$$\begin{aligned} \tan \theta(t) &= \frac{2 \tan \chi(t) \cos \phi(t)}{\sin \Theta(t) \cos \phi(t) (1 - \tan^2 \chi(t)) + \cos \Theta(t) \sin \phi(t) (1 + \tan^2 \chi(t))} \\ &= \frac{\sin 2\chi(t)}{\sin \Theta(t) \cos 2\chi(t) + \frac{\sin \Theta(t)}{\tan \Theta(t)} \tan \phi(t)} \\ &\stackrel{(2.3.15)}{=} \frac{|\omega(t)|}{\hbar} \frac{1}{\frac{y(t)}{\tan 2\chi(t)} + \frac{\dot{\chi}(t)}{\sin 2\chi(t)} \tan \phi(t)} \\ \frac{\dot{\chi}(t)}{\sin 2\chi(t)} \tan \phi(t) &= \frac{|\omega(t)|}{\hbar} \frac{1}{\tan \theta(t)} - \frac{y(t)}{\tan 2\chi(t)} \\ &= \frac{\Omega(t)}{\hbar} - \frac{y(t)}{\tan 2\chi(t)} \\ &\stackrel{(2.3.15)}{=} \frac{1}{2} (\dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}_\omega(t)) \end{aligned}$$

と導かれる.

(2.3.17) の第 2 式は,

$$\begin{aligned} \tan \theta(t) &= \frac{2 \tan \chi(t)}{\tan \Theta(t) \cos \phi(t) (1 + \tan^2 \chi(t)) + \sin \phi(t) (1 - \tan^2 \chi(t))} \\ \frac{\sin 2\chi(t)}{\tan \theta(t)} &= \tan \Theta(t) \cos \phi(t) + \sin \phi(t) \cos 2\chi(t) \\ &\stackrel{(2.3.16)}{=} \frac{\dot{\phi}(t) \sin 2\chi(t)}{2\dot{\chi}(t)} \cos \phi(t) + \sin \phi(t) \cos 2\chi(t) \\ 0 &= \dot{\chi}(t) \cos 2\chi(t) \sin \phi(t) + \frac{1}{2} \sin 2\chi(t) \dot{\phi}(t) \cos \phi(t) - \dot{\chi}(t) \frac{\sin 2\chi(t)}{\tan \theta(t)} \\ 0 &= \frac{d}{dt} \left[ \cos \chi(t) \left( \sin \chi(t) \sin \phi(t) + \frac{\cos \chi(t)}{\tan \theta(t)} \right) \right] \end{aligned}$$

と導かれる.

□

以下では、 $\chi(t)$  を唯一の独立変数とし、それ以外の変数が  $\chi(t)$  を用いてどのように表されるかを見ていく。

まず、式 (2.3.17) の 2 つ目の式の解が、

$$\begin{aligned} \cos \chi(t) \left( \sin \chi(t) \sin \phi(t) + \frac{\cos \chi(t)}{\tan \theta(0)} \right) &= \frac{1}{\tan \theta(0)} \\ \sin \phi(t) &= \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \end{aligned} \quad (2.3.18)$$

と求まる。これより  $\phi(t)$  が  $\chi(t)$  を用いて表された。さらに、この式 (2.3.18) は

$$\begin{aligned} \dot{\phi}(t) \cos \phi(t) &= \frac{\dot{\chi}(t)}{\cos^2 \chi \tan \theta(0)} \\ \frac{2y(t)}{\sin 2\chi(t)} \cos \phi(t) &\stackrel{(2.3.15)}{=} \frac{\dot{\chi}(t)}{\cos^2 \chi(t) \tan \theta(0)} \\ y(t) &= \frac{\dot{\chi}(t) \tan \chi(t)}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \end{aligned} \quad (2.3.19)$$

と変形でき、 $y(t)$  が  $\chi(t)$  を用いて表せた。さらに、縦磁場  $\Omega(t)$  や横磁場  $\omega(t)$  も  $\chi(t)$  を用いて表されるが、これは、ハミルトニアン縦磁場や横磁場の天頂角、方位角である  $\theta(t)$ 、 $\phi_\omega(t)$  が時間依存しないという、自明な解を導いてしまう。

**証明** 横磁場  $|\omega(t)|$  や縦磁場  $\Omega(t)$  は、

$$\begin{aligned} |\omega(t)| &\stackrel{(2.3.15)}{=} \hbar \sqrt{y^2(t) + \dot{\chi}^2(t)} \\ &\stackrel{(2.3.19)}{=} \hbar \dot{\chi}(t) \sqrt{\left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \right)^2 + 1} \\ &\stackrel{(2.3.18)}{=} \frac{\hbar \dot{\chi}(t)}{\cos \phi(t)} \end{aligned} \quad (2.3.20)$$

$$\begin{aligned} \Omega(t) &\stackrel{(2.3.15)}{=} \frac{\hbar}{2} \left( \dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}_\omega(t) \right) + \frac{\hbar y(t)}{\tan 2\chi(t)} \\ &\stackrel{(2.3.17)}{=} \frac{\hbar \dot{\chi}(t)}{\sin 2\chi(t)} \tan \phi(t) + \frac{\hbar \dot{\chi}(t) \tan \chi(t)}{\tan \theta(0) \cos \phi(t) \tan 2\chi(t)} \\ &\stackrel{(2.3.18)}{=} \frac{\hbar \dot{\chi}(t) \tan \chi(t)}{\cos \phi(t) \tan \theta(0)} \left( \frac{1}{\sin 2\chi(t)} + \frac{1}{\tan 2\chi(t)} \right) \\ &= \frac{\hbar \dot{\chi}(t)}{\cos \phi(t) \tan \theta(0)} \end{aligned}$$

のように求まる。ただし、仮定  $-\pi/2 < \Theta(t) < \pi/2$ ,  $-\pi/2 < \phi(t) < \pi/2$  を用いた。これより、磁場の天頂角は  $\theta(t) = \theta(0)$  となり、時間に依存しないことが分かる。また、方位角  $\phi_\omega(t)$  については、

$$\begin{aligned} \dot{\phi}_\omega(t) &\stackrel{(2.3.17)}{=} -\dot{\Theta}(t) + 2\dot{\chi}(t) \frac{\tan \phi(t)}{\sin 2\chi(t)} \\ &\stackrel{(2.3.16)}{=} -\dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}(t) \frac{\tan \phi(t)}{\tan \Theta(t)} \end{aligned} \quad (2.3.21)$$

となるが, 第 1 項は

$$\begin{aligned}
\tan \Theta(t) &\stackrel{(2.3.15)}{=} \frac{y(t)}{\dot{\chi}(t)} \\
&\stackrel{(2.3.19)}{=} \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \tag{2.3.22} \\
\frac{\dot{\Theta}(t)}{\cos^2 \Theta(t)} &= \frac{\dot{\phi}(t) \sin \phi(t) \tan \chi(t)}{\tan \theta(0) \cos^2 \phi(t)} + \frac{1}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \frac{\dot{\chi}(t)}{\cos^2 \chi(t)} \\
&\stackrel{(2.3.18)}{=} \left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \right)^2 \frac{\dot{\phi}(t)}{\cos^2 \phi(t)} + \dot{\phi}(t) \frac{\sin 2\chi(t)}{2 \tan \Theta(t)} \frac{1}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \frac{1}{\cos^2 \chi(t)} \\
&\stackrel{(2.3.16)}{=} \dot{\phi}(t) \left( \left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \right)^2 \frac{1}{\cos^2 \phi(t)} + 1 \right) \\
\dot{\Theta}(t) &= \dot{\phi}(t) \left( \left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \right)^2 \frac{1}{\cos^2 \phi(t)} + 1 \right) \frac{1}{1 + \tan^2 \Theta(t)} \\
&\stackrel{(2.3.22)}{=} \dot{\phi}(t)
\end{aligned}$$

のように変形できる. 一方, 式 (2.3.21) の第 2 項の最後の因子は

$$\begin{aligned}
\frac{\tan \phi(t)}{\tan \Theta(t)} &\stackrel{(2.3.22)}{=} \frac{\tan \theta(0) \sin \phi(t)}{\tan \chi(t)} \\
&\stackrel{(2.3.18)}{=} 1
\end{aligned} \tag{2.3.23}$$

と変形できるため,  $\dot{\phi}_\omega(t) = 0$  が求まる. これより, 磁場の方位角  $\phi_\omega(t)$  も時間に依存しないことが示された.

□

次に, ある極限において条件 (2.3.12) を満たすハミルトニアンについて考えていく. まず, 式 (2.3.13), (2.3.14) の右辺を新たに  $\tan \xi_1(t), \tan \xi_0(t)$  と定義する.

$$\begin{aligned}
\tan \xi_1(t) &:= \frac{2 \tan \chi(t) \cos \phi(t)}{(1 - \tan^2 \chi(t)) \sin \Theta(t) \cos \phi(t) + (1 + \tan^2 \chi(t)) \sin \phi(t) \cos \Theta(t)} \\
\tan \xi_0(t) &:= \frac{2 \tan \chi(t) \cos \Theta(t)}{(1 - \tan^2 \chi(t)) \cos \Theta(t) \sin \phi(t) + (1 + \tan^2 \chi(t)) \sin \Theta(t) \cos \phi(t)}
\end{aligned}$$

これより, 式 (2.3.12) と同様の式を満たす.

$$\tan \frac{\xi_1(t) + \xi_0(t)}{2} = \tan \chi(t) \frac{\cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2}}{\sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2}}, \quad \tan \frac{\xi_1(t) - \xi_0(t)}{2} = \tan \chi(t) \frac{\sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2}}{\cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2}}$$

$\xi_1(t) \simeq \theta(t), \xi_0(t) \simeq \theta(0)$  であれば, 瞬間固有状態間の遷移が十分小さいと近似できる. そこで,

$$\tan \theta(t) = (1 + \epsilon_1(t)) \tan \xi_1(t), \quad \tan \theta(0) = (1 + \epsilon_0(t)) \tan \xi_0(t) \tag{2.3.24}$$

として, 変数  $\epsilon_0(t), \epsilon_1(t)$  を導入する. ここで,  $\tan \xi_0(t), \tan \xi_1(t) < +\infty$  に対し,

$$\begin{cases} \epsilon_1(t) \rightarrow 0 \Rightarrow \xi_1(t) \rightarrow \theta(t) \\ \epsilon_0(t) \rightarrow 0 \Rightarrow \xi_0(t) \rightarrow \theta(0) \end{cases} \quad (2.3.25)$$

が成り立つ. 一方で,  $\theta(t), \theta(0) \simeq 0$  ならば, 必ずしも  $\epsilon_1(t), \epsilon_0(t)$  が小さくなくとも,  $\epsilon_0(t), \epsilon_1(t) < +\infty$  に対し,

$$\begin{cases} \xi_1(t) \rightarrow 0, \epsilon_1(t) \neq -1 \Rightarrow \xi_1(t) \rightarrow \theta(t) \\ \xi_0(t) \rightarrow 0, \epsilon_0(t) \neq -1 \Rightarrow \xi_0(t) \rightarrow \theta(0) \end{cases} \quad (2.3.26)$$

が成り立つことに注意する. これらの極限 (2.3.25), (2.3.26) を無遷移極限と呼ぶことにする.

さて, 以下の定理が成り立つ.

定理 2.3.1 瞬間固有状態間の遷移確率を

$$p(t) = |\langle E_-(t) | U(t) | E_+(0) \rangle|^2$$

とする. また, 次の量を導入する.

$$\epsilon_{\pm}(t) = \epsilon_1(t) \sin 2\xi_1(t) \pm \epsilon_0(t) \sin 2\xi_0(t)$$

このとき, 任意の時刻  $t$  に対して, 以下が成り立つ.

- (a).  $\epsilon_{\pm}(t) \rightarrow 0 \Leftrightarrow \epsilon_0(t), \epsilon_1(t) \rightarrow 0$  または  $\xi_0(t), \xi_1(t), \epsilon_1(t)\xi_1(t), \epsilon_0(t)\xi_0(t) \rightarrow 0$
- (b).  $\epsilon_{\pm}(t) \rightarrow 0 \Rightarrow p(t) \rightarrow 0$
- (c).  $p(t) \rightarrow 0 \Rightarrow \epsilon_{\pm}(t) \rightarrow 0$  または  $\epsilon_-(t), \alpha_+(t) \rightarrow 0$

証明 (a) は

$$\begin{aligned} \epsilon_{\pm}(t) &\rightarrow 0 \\ &\Leftrightarrow \epsilon_+(t) \pm \epsilon_-(t) \rightarrow 0 \\ &\Leftrightarrow \epsilon_1(t) \sin 2\xi_1(t) \rightarrow 0, \quad \epsilon_0(t) \sin 2\xi_0(t) \rightarrow 0 \\ &\Leftrightarrow \epsilon_0(t), \epsilon_1(t) \rightarrow 0 \text{ または } \xi_0(t), \xi_1(t), \epsilon_1(t)\xi_1(t), \epsilon_0(t)\xi_0(t) \rightarrow 0 \end{aligned}$$

より成り立つ.

次に, (b) について考える. (a) より,  $\epsilon_+(t), \epsilon_-(t) \rightarrow 0 \Leftrightarrow \xi_0(t), \xi_1(t), \epsilon_1(t)\xi_1(t), \epsilon_0(t)\xi_0(t) \rightarrow 0$  また

は  $\epsilon_0(t), \epsilon_1(t) \rightarrow 0$  である.  $\epsilon_0(t), \epsilon_1(t) \rightarrow 0$  のとき, 式 (2.3.24) より,

$$\begin{aligned}
& \sin \frac{\theta(t) \pm \theta(0)}{2} \\
&= \sin \left( \frac{1}{2} \left( \arctan((1 + \epsilon_1(t)) \tan \xi_1(t)) \pm \arctan((1 + \epsilon_0(t)) \tan \xi_0(t)) \right) \right) \\
&\simeq \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} + \frac{1}{4} (\epsilon_1(t) \sin 2\xi_1(t) \pm \epsilon_0(t) \sin 2\xi_0(t)) \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} \\
&= \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} + \frac{\epsilon_{\pm}(t)}{4} \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} \\
& \cos \frac{\theta(t) \pm \theta(0)}{2} \\
&= \cos \left( \frac{1}{2} \left( \arctan((1 + \epsilon_1(t)) \tan \xi_1(t)) \pm \arctan((1 + \epsilon_0(t)) \tan \xi_0(t)) \right) \right) \\
&\simeq \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} - \frac{1}{4} (\epsilon_1(t) \sin 2\xi_1(t) \pm \epsilon_0(t) \sin 2\xi_0(t)) \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} \\
&= \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} - \frac{\epsilon_{\pm}(t)}{4} \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2}
\end{aligned}$$

と展開できる. また,  $\xi_0(t), \xi_1(t), \epsilon_1(t)\xi_1(t), \epsilon_0(t)\xi_0(t) \rightarrow 0$  のときも同様に,

$$\begin{aligned}
& \sin \frac{\theta(t) \pm \theta(0)}{2} \\
&\simeq \sin \left( \frac{1}{2} \left( \arctan((1 + \epsilon_1(t))\xi_1(t)) \pm \arctan((1 + \epsilon_0(t))\xi_0(t)) \right) \right) \\
&\simeq \sin \left( \frac{1}{2} \left( \xi_1(t) + \frac{\epsilon_1(t)\xi_1(t)}{1 + \xi_1^2(t)} \pm \left( \xi_0(t) + \frac{\epsilon_0(t)\xi_0(t)}{1 + \xi_0^2(t)} \right) \right) \right) \\
&\simeq \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} + \frac{1}{2} \left( \epsilon_1(t) \frac{\xi_1(t)}{1 + \xi_1^2(t)} \pm \epsilon_0(t) \frac{\xi_0(t)}{1 + \xi_0^2(t)} \right) \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} \\
&\simeq \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} + \frac{1}{4} (\epsilon_1(t) \sin 2\xi_1(t) \pm \epsilon_0(t) \sin 2\xi_0(t)) \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} \\
&= \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} + \frac{\epsilon_{\pm}(t)}{4} \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cos \frac{\theta(t) \pm \theta(0)}{2} \\
&\simeq \cos \left( \frac{1}{2} \left( \arctan((1 + \epsilon_1(t))\xi_1(t)) \pm \arctan((1 + \epsilon_0(t))\xi_0(t)) \right) \right) \\
&\simeq \cos \left( \frac{1}{2} \left( \xi_1(t) + \frac{\epsilon_1(t)\xi_1(t)}{1 + \xi_1^2(t)} \pm \left( \xi_0(t) + \frac{\epsilon_0(t)\xi_0(t)}{1 + \xi_0^2(t)} \right) \right) \right) \\
&\simeq \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} - \frac{1}{2} \left( \epsilon_1(t) \frac{\xi_1(t)}{1 + \xi_1^2(t)} \pm \epsilon_0(t) \frac{\xi_0(t)}{1 + \xi_0^2(t)} \right) \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} \\
&\simeq \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} - \frac{1}{4} (\epsilon_1(t) \sin 2\xi_1(t) \pm \epsilon_0(t) \sin 2\xi_0(t)) \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} \\
&= \cos \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2} - \frac{\epsilon_{\pm}(t)}{4} \sin \frac{\xi_1(t) \pm \xi_0(t)}{2}
\end{aligned}$$

と展開できる.

これより、瞬間固有状態間の遷移振幅は、式 (2.3.8) より

$$\begin{aligned}
 & \langle E_-(t)|U(t)|E_+(0) \rangle \\
 &= \cos \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \sin \frac{\theta(t) - \theta(0)}{2} - \sin \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \cos \frac{\theta(t) - \theta(0)}{2} \\
 & \quad + i \left( \sin \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \cos \frac{\theta(t) + \theta(0)}{2} - \cos \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \sin \frac{\theta(t) + \theta(0)}{2} \right) \\
 & \simeq \frac{\epsilon_-(t)}{4} \left( \cos \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \cos \frac{\xi_1(t) - \xi_0(t)}{2} + \sin \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \sin \frac{\xi_1(t) - \xi_0(t)}{2} \right) \\
 & \quad - i \frac{\epsilon_+(t)}{4} \left( \sin \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \sin \frac{\xi_1(t) + \xi_0(t)}{2} + \cos \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \cos \frac{\xi_1(t) + \xi_0(t)}{2} \right) \\
 &= \pm \frac{\epsilon_-(t)}{4} \sqrt{\cos^2 \chi(t) \cos^2 \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} + \sin^2 \chi(t) \sin^2 \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2}} \\
 & \quad \pm i \frac{\epsilon_+(t)}{4} \sqrt{\sin^2 \chi(t) \cos^2 \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} + \cos^2 \chi(t) \sin^2 \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2}} \\
 &=: \pm \frac{\epsilon_-(t)}{4} \alpha_-(t) \pm i \frac{\epsilon_+(t)}{4} \alpha_+(t)
 \end{aligned}$$

と変形できる。ただし、複号はいずれかの組み合わせを表すとする。ここで、

$$\begin{aligned}
 & \left( \cos \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \quad \sin \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \right) \begin{pmatrix} \sin \frac{\xi_1(t) - \xi_0(t)}{2} \\ -\cos \frac{\xi_1(t) - \xi_0(t)}{2} \end{pmatrix} = 0 \\
 & \left( \sin \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \quad \cos \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \right) \begin{pmatrix} \cos \frac{\xi_1(t) + \xi_0(t)}{2} \\ -\sin \frac{\xi_1(t) + \xi_0(t)}{2} \end{pmatrix} = 0 \\
 & \left( \cos \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \quad \sin \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \right) \begin{pmatrix} \cos \frac{\xi_1(t) - \xi_0(t)}{2} \\ \sin \frac{\xi_1(t) - \xi_0(t)}{2} \end{pmatrix} = \pm \alpha_-(t) \\
 & \left( \sin \chi(t) \cos \frac{\Theta(t) - \phi(t)}{2} \quad \cos \chi(t) \sin \frac{\Theta(t) + \phi(t)}{2} \right) \begin{pmatrix} \sin \frac{\xi_1(t) + \xi_0(t)}{2} \\ \cos \frac{\xi_1(t) + \xi_0(t)}{2} \end{pmatrix} = \pm \alpha_+(t)
 \end{aligned}$$

を用いた。ただし、複号はどちらか一方が成り立つとする。また、

$$\alpha_+^2(t) + \alpha_-^2(t) = 1$$

を満たすことに注意する。これより

$$p(t) = |\langle E_-(t)|U(t)|E_+(0) \rangle|^2 = \frac{\epsilon_-^2(t)}{4^2} \alpha_-^2(t) + \frac{\epsilon_+^2(t)}{4^2} \alpha_+^2(t) \rightarrow 0 \quad (2.3.27)$$

が成り立つ。

最後に、(c) について考える。  $p(t) = 0$  を満たす変数の近傍では常に式 (2.3.27) のように展開できる。初期時刻において  $\alpha_+(0) = 0$  であることを考慮すると、

$$p(t) \rightarrow 0 \Rightarrow \epsilon_{\pm}(t) \rightarrow 0 \text{ または } \epsilon_-(t), \alpha_+(t) \rightarrow 0$$

が成り立つ。

□



ここで,

$$\epsilon_{-}(t), \alpha_{+}(t) \rightarrow 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \epsilon_{1}(t) \sin 2\xi_{1}(t) - \epsilon_{0}(t) \sin 2\xi_{0}(t) \rightarrow 0 \\ \chi(t) \rightarrow 0 \\ \Theta(t) + \phi(t) \rightarrow 0 \end{cases}$$

が成り立つ. 式 (2.3.8) より,  $p(t), \chi(t) \rightarrow 0 \Rightarrow \theta(t) - \theta(0) \rightarrow 0$  が成り立つ. また, 式 (2.3.13), (2.3.14) より,  $\Theta(t) + \phi(t) \rightarrow 0 \Rightarrow \theta(t) + \theta(0) \rightarrow 0$  となる. よって, 縦磁場成分のみからなるハミルトニアンに対応しており, 自明な無遷移過程となることが分かる. また, この例は  $\xi_{0}(t), \xi_{1}(t) \rightarrow 0$  となることから,  $\epsilon_{\pm}(t) \rightarrow 0$  に含まれる.

以上の議論より, 瞬間固有状態間の遷移確率が 0 となるための必要十分条件が, 無遷移極限 (2.3.25), (2.3.26) を取ることと同値であることが分かった. 以降, この無遷移極限を取ることが, ハミルトニアンのどのような極限を取ることに対応しているかについて見ていく.

### 2.3.2.2 無遷移極限に対応するハミルトニアンの条件

新たに導入した変数  $\epsilon_{0}(t), \epsilon_{1}(t)$  によって, 式 (2.3.17) に対応する式は以下のように導ける.

$$\begin{aligned} \tan \theta(0) &= (1 + \epsilon_{0}(t)) \tan \xi_{0}(t) \\ &= \frac{2(1 + \epsilon_{0}(t)) \tan \chi(t)}{\tan \Theta(t) \cos \phi(t) (1 + \tan^2 \chi(t)) + \sin \phi(t) (1 - \tan^2 \chi(t))} \\ \frac{(1 + \epsilon_{0}(t)) \sin 2\chi(t)}{\tan \theta(0)} &= \tan \Theta(t) \cos \phi(t) + \sin \phi(t) \cos 2\chi(t) \\ &\stackrel{(2.3.16)}{=} \frac{\dot{\phi}(t) \sin 2\chi(t)}{2\dot{\chi}(t)} \cos \phi(t) + \sin \phi(t) \cos 2\chi(t) \\ \frac{\epsilon_{0}(t) \dot{\chi}(t) \sin 2\chi(t)}{\tan \theta(0)} &= \dot{\chi}(t) \cos 2\chi(t) \sin \phi(t) + \frac{1}{2} \sin 2\chi(t) \dot{\phi}(t) \cos \phi(t) - \dot{\chi}(t) \frac{\sin 2\chi(t)}{\tan \theta(0)} \\ &= \frac{d}{dt} \left[ \cos \chi(t) \left( \sin \chi(t) \sin \phi(t) + \frac{\cos \chi(t)}{\tan \theta(0)} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.3.28)$$

$$\begin{aligned} \tan \theta(t) &= (1 + \epsilon_{1}(t)) \tan \xi_{1}(t) \\ &= \frac{2(1 + \epsilon_{1}(t)) \tan \chi(t) \cos \phi(t)}{\sin \Theta(t) \cos \phi(t) (1 - \tan^2 \chi(t)) + \cos \Theta(t) \sin \phi(t) (1 + \tan^2 \chi(t))} \\ &\stackrel{(2.3.15)}{=} \frac{|\omega(t)|}{\hbar} \frac{1 + \epsilon_{1}(t)}{\frac{y(t)}{\tan 2\chi(t)} + \frac{\dot{\chi}(t)}{\sin 2\chi(t)} \tan \phi(t)} \\ \frac{2\dot{\chi}(t)}{\sin 2\chi(t)} \tan \phi(t) &= 2 \left( \frac{|\omega(t)|}{\hbar} \frac{1 + \epsilon_{1}(t)}{\tan \theta(t)} - \frac{y(t)}{\tan 2\chi(t)} \right) \\ &= 2 \left( \frac{\Omega(t)}{\hbar} - \frac{y(t)}{\tan 2\chi(t)} \right) + \frac{2\Omega(t)}{\hbar} \epsilon_{1}(t) \\ &\stackrel{(2.3.15)}{=} \dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}_{\omega}(t) + \frac{2\Omega(t)}{\hbar} \epsilon_{1}(t) \end{aligned} \quad (2.3.29)$$

$\epsilon_0(t), \epsilon_1(t)$  の寄与によって生じた新たな条件 (2.3.28), (2.3.29) がハミルトニアンにどのような影響を与えるかについて考えていく.

簡単のため, まず  $\epsilon_0(t) = 0$  の場合を考える. このとき,  $\Theta(t), \phi(t), \chi(t)$  を結びつける関係式 (2.3.18), (2.3.19), (2.3.20), (2.3.22) は,  $\epsilon_1(t) = 0$  の場合と同様に成り立つことに注意しておく. よって  $|\omega(t)|$  も変化を受けない.  $\epsilon_1(t) = 0$  の場合の変数を  $\Theta_0(t), \phi_0(t), \chi_0(t), \Omega_0(t), |\omega_0(t)|, \theta_0(t), y_0(t)$  と表記する. これより,  $\Omega(t)$  は

$$\begin{aligned}
 \Omega(t) & \stackrel{(2.3.15)}{=} \frac{\hbar}{2} \left( \dot{\Theta}_0(t) + \dot{\phi}_\omega(t) \right) + \frac{\hbar y_0(t)}{\tan 2\chi_0(t)} \\
 & \stackrel{(2.3.17)}{=} \frac{\hbar \dot{\chi}_0(t)}{\sin 2\chi_0(t)} \tan \phi_0(t) + \frac{\hbar \dot{\chi}_0(t) \tan \chi_0(t)}{\tan \theta_0(0) \cos \phi_0(t) \tan 2\chi_0(t)} - \Omega(t) \epsilon_1(t) \\
 & \stackrel{(2.3.18)}{=} \frac{\hbar \dot{\chi}_0(t) \tan \chi_0(t)}{\cos \phi_0(t) \tan \theta_0(0)} \left( \frac{1}{\sin 2\chi_0(t)} + \frac{1}{\tan 2\chi_0(t)} \right) - \Omega(t) \epsilon_1(t) \\
 & = \frac{\hbar \dot{\chi}_0(t)}{\cos \phi_0(t) \tan \theta_0(0)} - \Omega(t) \epsilon_1(t) \\
 & = \Omega_0(t) - \Omega(t) \epsilon_1(t)
 \end{aligned}$$

と変形できる. また,  $\phi_\omega(t)$  も

$$\begin{aligned}
 \dot{\phi}_\omega(t) & \stackrel{(2.3.29)}{=} -\dot{\Theta}_0(t) + \dot{\phi}_0(t) \frac{\tan \phi_0(t)}{\tan \Theta_0(t)} - \frac{2\Omega(t)}{\hbar} \epsilon_1(t) \\
 & \stackrel{(2.3.16)}{=} -\frac{2\Omega(t)}{\hbar} \epsilon_1(t) \\
 & \stackrel{(2.3.23)}{=} -\frac{2\Omega(t)}{\hbar} \epsilon_1(t)
 \end{aligned}$$

と導ける. つまり,  $\epsilon_1(t)$  を導入したことにより, 横磁場が回転する自由度を持つことが分かる. さらに, 回転座標系に移ると, ハミルトニアンは  $\epsilon_1(t) = 0$  としたものに对应する模型であることが分かる (図 2.3.2).

瞬間固有状態間の遷移が抑えられるための条件から,  $\dot{\phi}_\omega(t)$  に対する制限を導く. まず, 式 (2.3.25) に対応する条件をまず考えると  $\epsilon_1(t) \rightarrow 0$  は

$$\frac{\hbar \dot{\phi}_\omega(t)}{2\Omega(t)} \rightarrow 0 \tag{2.3.30}$$

に対応する. また, 式 (2.3.26) に対応する条件, つまり  $\epsilon_1(t)$  を有限の値で固定し,  $\xi_1(t) \rightarrow 0$  の極限をとることは,  $\dot{\phi}_\omega(t) \hbar / 2\Omega(t)$  を有限の値で固定したまま,  $\theta(t) \rightarrow 0$  の極限をとることに对应する. ただし,

$$\begin{aligned}
 -\frac{\dot{\phi}_\omega(t) \hbar}{2\Omega(t)} & \neq -1 \\
 \dot{\phi}_\omega(t) & \neq \frac{2\Omega(t)}{\hbar}
 \end{aligned}$$

を満たすとする. これは無遷移極限から共鳴条件を除いたことに对应している. また,  $\dot{\theta}(t)$  に関する条件はないことに注意しておく.

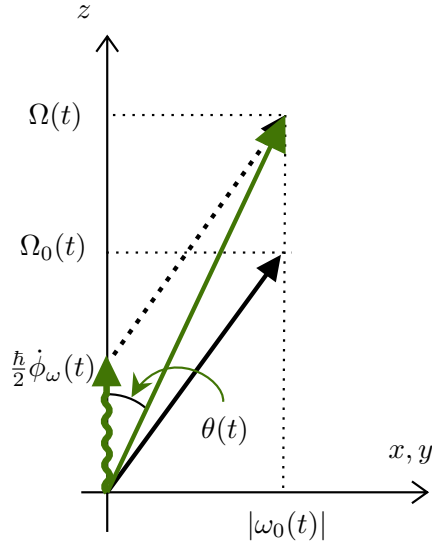


図 2.3.2 黒矢印が無遷移条件を満たすハミルトニアン, 緑矢印が  $\epsilon_1(t)$  の寄与を考慮したハミルトニアンを表す. 回転座標系に移ると, ハミルトニアンは黒点線で示されたものに変化する.

次に  $\epsilon_1(t) = 0$  の場合について考える. この場合, 条件 (2.3.25), (2.3.26) は,  $\xi_0(t)$  と  $\theta(0)$  との距離に関するものであり, 特に条件 (2.3.26) については,  $\xi_0(t)$  と  $\theta(0) = 0$  との距離に関する条件である. 初期時刻の天頂角が  $\theta(0) \neq 0$  であれば, 条件 (2.3.26) は考慮する必要がない. 適切なユニタリ変換によって  $\theta(0) \neq 0$  を常に実現できるので, 以下では条件 (2.3.25) のみを考えれば良い. 条件 (2.3.26) を考えた場合については Appendix B で論じた.

さて, 条件 (2.3.25) に対応する  $\epsilon_0(t) \rightarrow 0$  の極限を考える.  $\epsilon_0(t)\dot{\chi}(t)\sin 2\chi(t) =: \dot{c}(t)$  と定義し,  $\epsilon_0(t)\sin 2\chi(t) \rightarrow 0$ , つまり  $\dot{c}(t)/\dot{\chi}(t)$  が十分小さい状況を考える. 式 (2.3.28) の解として

$$\sin \phi(t) = \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \quad (2.3.31)$$

を得る. また, 式 (2.3.28) より

$$\begin{aligned} \dot{\phi}(t) \cos \phi(t) &= \frac{\dot{\chi}(t)}{\cos^2 \chi(t) \tan \theta(0)} \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \\ &+ \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \left( -2 \frac{c(t)\dot{\chi}(t) \cos \chi(t)}{\sin^3 \chi(t)} + \frac{\dot{c}(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \end{aligned}$$

を得る. ここで,  $\dot{\chi}(t)$  より  $\dot{c}(t)$  が小さいという仮定から,  $\dot{c}(t)$  に比例する項を無視する<sup>\*3</sup>. これより, 以

<sup>\*3</sup> 以下の  $\simeq$  は  $\dot{c}(t)$  を無視するという近似を表す. また, この近似は  $c(t) \gg \epsilon_0(t)$  という仮定にも対応している.  $c(t) \simeq 0$  は  $\theta(t) \simeq \theta(0)$  に対応している. この場合,  $\epsilon_1(t) \neq 0$  の場合に示したように, 任意の  $\dot{\theta}(t), \dot{\phi}_\omega(t)$  が許される. 詳しくは Appendix B 参照.

下のようにして  $y(t)$  が求まる.

$$\begin{aligned}
 \dot{\phi}(t) \cos \phi(t) &\simeq \frac{\dot{\chi}(t)}{\cos^2 \chi(t) \tan \theta(0)} \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) - 2 \frac{\tan \chi(t) c(t) \dot{\chi}(t) \cos \chi(t)}{\tan \theta(0) \sin^3 \chi(t)} \\
 \frac{2y(t)}{\sin 2\chi(t)} \cos \phi(t) &\stackrel{(2.3.15)}{\simeq} \frac{\dot{\chi}(t) \tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \left( \frac{1}{\sin \chi(t) \cos \chi(t)} \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) - 2 \frac{c(t) \cos \chi(t)}{\sin^3 \chi(t)} \right) \\
 y(t) &\simeq \frac{\dot{\chi}(t) \tan \chi(t)}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \tag{2.3.32}
 \end{aligned}$$

ここで求めた  $y(t)$  を用いると, 縦磁場  $\Omega(t)$ , 横磁場  $|\omega(t)|$  の時間依存性が求まる.

$$\begin{aligned}
 \Omega(t) &\stackrel{(2.3.15)}{\simeq} \frac{\hbar}{2} \left( \dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}_\omega(t) \right) + \frac{\hbar}{\tan 2\chi(t) \tan \theta(0) \cos \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \\
 &\stackrel{(2.3.17)}{=} \hbar \frac{\dot{\chi}(t)}{\sin 2\chi(t)} \tan \phi(t) + \frac{\hbar}{\tan 2\chi(t) \tan \theta(0) \cos \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \\
 &\stackrel{(2.3.31)}{=} \hbar \frac{\dot{\chi}(t)}{\sin 2\chi(t) \cos \phi(t)} \left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \right) \\
 &\quad + \frac{\hbar}{\tan 2\chi(t) \tan \theta(0) \cos \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \\
 &= \hbar \frac{\dot{\chi}(t)}{\cos \phi(t)} \frac{1 + 2c(t)}{\tan \theta(0)} \tag{2.3.33}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 |\omega(t)| &\stackrel{(2.3.15)}{\simeq} \hbar \dot{\chi}(t) \sqrt{\left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \right)^2 + 1} \\
 &= \frac{\hbar \dot{\chi}(t)}{\cos \phi(t)} \sqrt{\left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \right)^2 + 1 - \sin^2 \phi(t)} \\
 &\stackrel{(2.3.31)}{=} \frac{\hbar \dot{\chi}(t)}{\cos \phi(t)} \sqrt{1 - \frac{4c(t)(1+c(t))}{\tan^2 \theta(0)}} \tag{2.3.34}
 \end{aligned}$$

を得る. ただし, 仮定  $-\pi/2 < \Theta(t) < \pi/2$ ,  $-\pi/2 < \phi(t) < \pi/2$  を用いた. また,  $\tan \theta(t) = |\omega(t)|/\Omega(t)$  より,

$$\begin{aligned}
 \tan^2 \theta(t) &\simeq \frac{\tan^2 \theta(0) - 4c(t)(1+c(t))}{(1+2c(t))^2} \\
 c(t) &\simeq \frac{1}{2} \left( \frac{\cos \theta(t)}{\cos \theta(0)} - 1 \right) \tag{2.3.35}
 \end{aligned}$$

を得る.  $\theta(t) \simeq 0$  の場合を除くと,  $\dot{c}(t) \rightarrow 0$  は  $\dot{\theta}(t) \rightarrow 0$  を意味することが分かる. 一方, 方位角  $\phi_\omega(t)$  については,

$$\dot{\phi}_\omega(t) \stackrel{(2.3.16)}{=} -\dot{\Theta}(t) + \dot{\phi}(t) \frac{\tan \phi(t)}{\tan \Theta(t)} \tag{2.3.17}$$

となるが、第 1 項は、

$$\begin{aligned}
\frac{\dot{\Theta}(t)}{\cos^2 \Theta(t)} &\stackrel{(2.3.15)}{=} \frac{d}{dt} \left( \frac{y(t)}{\dot{\chi}(t)} \right) \\
&\stackrel{(2.3.32)}{\simeq} \frac{d}{dt} \left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \right) \\
&\simeq \left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \right)^2 \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \frac{\dot{\phi}(t)}{\cos^2 \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \\
&\quad + \dot{\phi}(t) \frac{1}{\tan \Theta(t)} \frac{1}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \left( \tan \chi(t) + \frac{c(t)}{\sin \chi(t) \cos \chi(t)} \right) \\
&\stackrel{(2.3.15)}{=} \left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \right)^2 \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \frac{\dot{\phi}(t)}{\cos^2 \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \\
&\quad + \dot{\phi}(t) \frac{\dot{\chi}(t)}{y(t)} \frac{1}{\tan \theta(0) \cos \phi(t)} \left( \tan \chi(t) + \frac{c(t)}{\sin \chi(t) \cos \chi(t)} \right) \\
&\stackrel{(2.3.32)}{=} \left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \right)^2 \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \frac{\dot{\phi}(t)}{\cos^2 \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right) \\
&\quad + \dot{\phi}(t) \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right)^{-1} \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \\
&= \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \dot{\phi}(t) \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right)^{-1} \\
&\quad \times \left( \left( \frac{\tan \chi(t)}{\tan \theta(0)} \right)^2 \frac{1}{\cos^2 \phi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right)^2 + 1 \right) \\
&= \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \dot{\phi}(t) \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right)^{-1} (1 + \tan^2 \Theta(t)) \\
\dot{\Theta}(t) &\simeq \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \dot{\phi}(t) \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right)^{-1}
\end{aligned}$$

と求まる。一方、第 2 項の因子は

$$\begin{aligned}
\frac{\tan \phi(t)}{\tan \Theta(t)} &\stackrel{(2.3.15)}{=} \frac{\dot{\chi}(t)}{y(t)} \tan \phi(t) \\
&\stackrel{(2.3.32)}{\simeq} \frac{\tan \theta(0) \sin \phi(t)}{\tan \chi(t)} \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right)^{-1} \\
&\stackrel{(2.3.31)}{=} \left( 1 + \frac{c(t)}{\sin^2 \chi(t)} \right) \left( 1 - c(t) \left( \frac{1}{\tan^2 \chi(t)} - 1 \right) \right)^{-1}
\end{aligned}$$

と求まる。これより、磁場の方位角  $\phi_\omega(t)$  の条件は

$$\dot{\phi}_\omega(t) = O(\dot{c}(t))$$

と求まる。

$$\dot{c}(t) \simeq -\frac{1}{2} \dot{\theta}(t) \sin \theta(t)$$

より,  $\epsilon_0(t) \sin 2\chi(t) = \dot{c}(t)/\dot{\chi}(t) \rightarrow 0$  に対応する量は,

$$\epsilon_0(t) \sin 2\chi(t) = \frac{\dot{c}(t)}{\dot{\chi}(t)} \simeq -\frac{\dot{\theta}(t) \sin \theta(t)}{2\dot{\chi}(t)} \rightarrow 0 \quad (2.3.36)$$

となる. これより,  $\epsilon_0(t) \rightarrow 0$  ならば, 磁場の天頂角, 方位角の時間変化は  $\dot{\theta}(t) \sin \theta(t), \dot{\phi}_\omega(t) \rightarrow 0$  を満たす (必要条件). 一方, 縦磁場  $\Omega(t)$  や横磁場  $\omega(t)$  が,  $O(\dot{c}(t))$  として省略した項を陽に書いた上で, いつでも上記のような変数を用いて表せることを考えると,  $\dot{\theta}(t), \dot{\phi}_\omega(t) \rightarrow 0$  のとき,  $\dot{c}(t) \rightarrow 0$  となるが,  $\epsilon_0(t) \simeq \dot{c}(t)/\dot{\chi}(t) \rightarrow 0$  とは限らない.  $\dot{c}(t)/\dot{\chi}(t) \simeq \dot{c}(t)\hbar/|\omega(t)|$  より,  $\dot{\theta}(t) \sin \theta(t), \dot{\phi}_\omega(t) \ll |\omega(t)|/\hbar$  が満たされているときに, 瞬間固有状態間の遷移が抑えられることが分かる (十分条件).

ここまで,  $\epsilon_1(t), \epsilon_0(t)$  がそれぞれ 0 となる場合を考えたが, どちらも 0 でない場合においても, 同様の議論が成り立つ.

## 2.4 例：解析的に時間発展が求まる模型

前節の変数として解析的な関数をいくつか採用し, 無遷移極限で無遷移過程となることを確認する.

### 例 2.4.1 回転磁場模型

式 (2.2.1) で与えられるハミルトニアンを考える. また, 例 2.3.1 で定義した変数  $A, B, G$  を用いる.

まず式 (2.3.35) を確認する. つまり, 無遷移極限  $\dot{c}(t) \rightarrow 0$  で  $c(t) \rightarrow 0$  となることを確認する.  $c(t)$  の定義式 (2.3.31) より

$$\begin{aligned} c(t) &\stackrel{(2.3.31)}{=} \sin^2 \chi(t) \left( \sin \phi(t) \frac{\tan \theta}{\tan \chi(t)} - 1 \right) \\ &\stackrel{(2.3.10)}{=} \sin^2 \chi(t) \left( \sin \left( -\arctan \left( -\frac{B}{G} \tan(Gt) \right) \right) \frac{\tan \theta}{\tan \left( \arcsin \left( \frac{A}{G} \sin(Gt) \right) \right)} - 1 \right) \\ &= \sin^2 \chi(t) \left( \frac{B}{A} \tan \theta - 1 \right) \\ &\stackrel{(2.3.9)}{=} -\sin^2 \chi(t) \frac{\hbar \dot{\phi}_\omega}{\nu_0 \cos \theta} \\ &\stackrel{(2.3.10)}{=} -\left( \frac{\nu_0}{\hbar \bar{\omega}} \sin \theta \sin \frac{\bar{\omega}}{2} t \right)^2 \frac{\hbar \dot{\phi}_\omega}{\nu_0 \cos \theta} \end{aligned}$$

と求まる. これより

$$\begin{aligned} |\dot{c}(t)| &= \left| \frac{\nu_0}{2\hbar \bar{\omega}} \sin(\bar{\omega}t) \frac{\dot{\phi}_\omega \sin^2 \theta}{\cos \theta} \right| =: \dot{c}_{\max} |\sin(\bar{\omega}t)| \\ |c(t)| &= \left| \frac{2\dot{c}_{\max}}{\bar{\omega}} \sin^2 \left( \frac{\bar{\omega}}{2} t \right) \right| \end{aligned}$$

より, 確かに  $\dot{c}(t) \rightarrow 0$  の極限で  $c(t) \rightarrow 0$  となるので, 無遷移極限で式 (2.3.35) を満たしていることが分かる.

次に、式 (2.3.30),(2.3.36) を計算し、瞬間固有状態間の遷移確率の評価を確認する。

$$\begin{aligned}\frac{\dot{c}(t)}{\dot{\chi}(t) \sin 2\chi(t)} &= -\frac{\hbar \dot{\phi}_\omega}{\nu_0 \cos \theta} \\ \frac{\hbar \dot{\phi}_\omega(t)}{2\Omega(t)} &= \frac{\hbar \dot{\phi}_\omega}{\nu_0 \cos \theta}\end{aligned}$$

これより、今回の例では式 (2.3.30),(2.3.36) はどちらも同じ評価式となることが分かる。また、 $\theta \neq \pi/2$  の場合、系の典型的なエネルギー  $\nu_0$  より  $\dot{\phi}_\omega$  が小さければ良いという評価式になっていることが分かる。さて、瞬間固有状態間の遷移確率は、式 (2.3.11) より

$$\begin{aligned}|\langle E_-(t)|U(t)|E_+(0)\rangle|^2 &= \left| \frac{\dot{\phi}_\omega \sin \theta}{\bar{\omega}} \sin \frac{\bar{\omega}t}{2} \right|^2 \\ &\leq \left| \frac{\hbar \dot{\phi}_\omega}{\nu_0 \cos \theta} \frac{\nu_0 \sin 2\theta}{2\hbar\bar{\omega}} \right|^2 \\ &\lesssim \left| \frac{\hbar \dot{\phi}_\omega}{\nu_0 \cos \theta} \right|^2\end{aligned}$$

と評価できる。ここで、 $\theta \neq 0, \pi/2, \pi$  の場合、 $\nu_0 \sin 2\theta / (2\hbar\bar{\omega}) \lesssim O(1)$  であることを用いた。これより、確かに瞬間固有状態間の遷移が抑えられることが分かる。

#### 例 2.4.2 断熱極限に対応する例

変数  $\chi(t), y(t), \phi_\omega(t)$  が

$$\begin{aligned}\tan \chi(t) &= \sin \alpha t \\ y(t) &= \nu_0 \sin \alpha t\end{aligned}$$

の場合を考える。ただし、 $\nu_0 > 0, \alpha = \pi/(2T)$  とする。式 (2.3.15) より、

$$|\omega(t)| = \hbar \sqrt{\nu_0^2 \sin^2 \alpha t + \left( \frac{\alpha \cos \alpha t}{1 + \sin^2 \alpha t} \right)^2} \quad (2.4.1)$$

$$\Omega(t) = \frac{\hbar}{2} \left( \dot{\Theta}(t) - \dot{\phi}_\omega(t) \right) + \frac{\hbar \nu_0}{2} \cos^2 \alpha t \quad (2.4.2)$$

$$\tan \Theta(t) = \frac{\nu_0}{\alpha} (1 + \sin^2 \alpha t) \tan \alpha t$$

$$\phi(t) = \frac{\nu}{4\alpha} (6\alpha t - \sin 2\alpha t)$$

を得る。初期時刻  $t = 0$  では

$$\begin{cases} |\omega(0)| = \hbar \alpha \\ \Omega(0) = \hbar \nu_0 \end{cases}$$

となることが分かる。その後の時刻では、 $\alpha, \dot{\phi}_\omega(t) \simeq 0$  とすると、

$$\begin{cases} |\omega(t)| \simeq \hbar\nu_0 |\sin \alpha t| \\ \Omega(t) \simeq \frac{\hbar\nu_0}{2} \cos^2 \alpha t \end{cases}$$

と近似でき、終時刻  $t = T$  では

$$\begin{cases} |\omega(T)| = \hbar\nu_0 \\ \Omega(T) = \frac{\hbar}{2} \left( \frac{\alpha^2}{2\nu_0} - \dot{\phi}_\omega(T) \right) \end{cases}$$

となる (図 2.4.1(a),(b)). つまり、この例は縦磁場から横磁場へと外場が時間依存しているスピン 1/2 の系に対応している。また、 $\nu_0$  は系の典型的なエネルギー、 $\alpha$  は時間依存するハミルトニアン of 典型的な周波数に対応していることが分かる。

このように変数が全て解析的に求まっているので、瞬間固有状態間の遷移確率も解析的に求まる (図 2.4.1(c)). これより、 $\nu_0 T \gg 1$  の極限で遷移確率が 0 に近づいていくことが分かる。

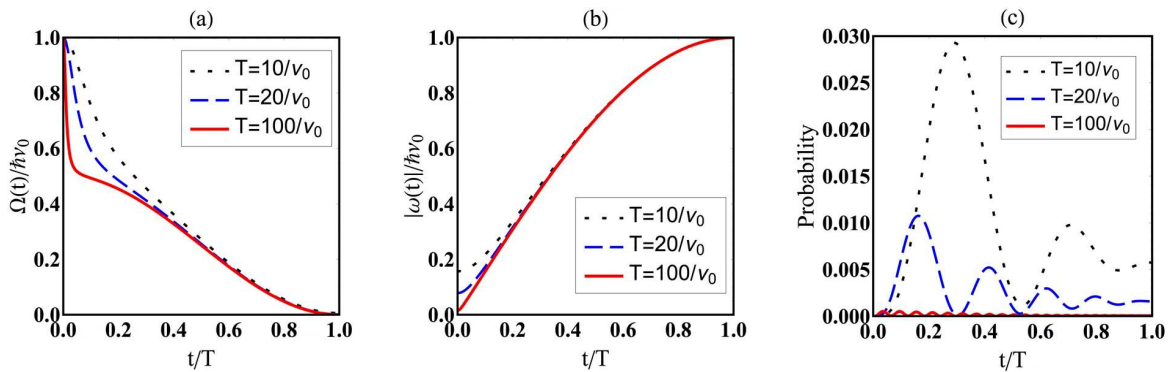


図 2.4.1 (a) ハミルトニアン of  $\sigma_z$  の係数 (式 (2.4.2)). (b) ハミルトニアン of  $\sigma_z$  の係数 (式 (2.4.1)). (c) 瞬間固有状態間の遷移確率. パラメータは  $T\nu_0 = 10$  (黒の点線),  $T\nu_0 = 20$  (青の破線),  $T\nu_0 = 100$  (赤の実線).

これまでの例からも分かる通り、今回導いた結論は、磁場の天頂角  $\theta(t)$  と方位角  $\phi_\omega(t)$  の変化を十分ゆっくりにした場合、瞬間固有状態間の遷移確率が 0 に近づいていくという意味において、断熱定理と似ている。しかし、次の例で見ていくように、今回導いた結果はより広いクラスを含むものとなっている。

例 2.4.3 次のような変数を考える。

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \nu_0 t \\ c(t) &= -\frac{1}{2} \left( \frac{t}{T} \right)^3 \\ \phi_\omega(t) &= 0 \end{aligned}$$



このとき、式 (2.3.31) より、 $\chi(t)$  が求まる。式 (2.3.15) より、 $\chi(t), \phi(t)$  を用いて  $y(t)$  を求める。このようにして全ての変数を決定することができる。  $T$  が十分大きい、つまり  $\dot{c}(t)$  が十分小さい極限を考えると、ハミルトニアン  $H(t)$  の天頂角は式 (2.3.35) より

$$\cos \theta(t) \simeq 1 - \left( \frac{t}{T} \right)^3$$

と表される。一方で、瞬間固有値は、式 (2.3.33), (2.3.34) より、

$$E(t) \simeq \frac{\hbar\nu_0}{2} \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{4(1+c(t))c(t)}{\tan^2 \theta(0) \sin^2(\nu_0 t)}}} \right)$$

と表せる。つまり、ハミルトニアン  $H(t)$  の典型的なエネルギーは  $\nu_0$  となる一方で、瞬間固有状態の時間変化は  $O(1/T)$  となる。確かに、図 2.4.2 より、十分大きな  $T$  に対しても、ハミルトニアン  $H(t)$  の成分である  $\Omega(t)$  や瞬間固有値  $E(t)$  は振動を示すことが分かる一方で、 $\theta(t)$  の時間変化は  $O(1/T)$  となっていることが分かる。瞬間固有状態間の遷移確率は、 $T \rightarrow \infty$  で 0 に近づいていくことが分かる。つまり、この例を通じて、ハミルトニアン  $H(t)$  の時間変化がゆっくりではなくとも、無遷移過程となる例があることを示した。

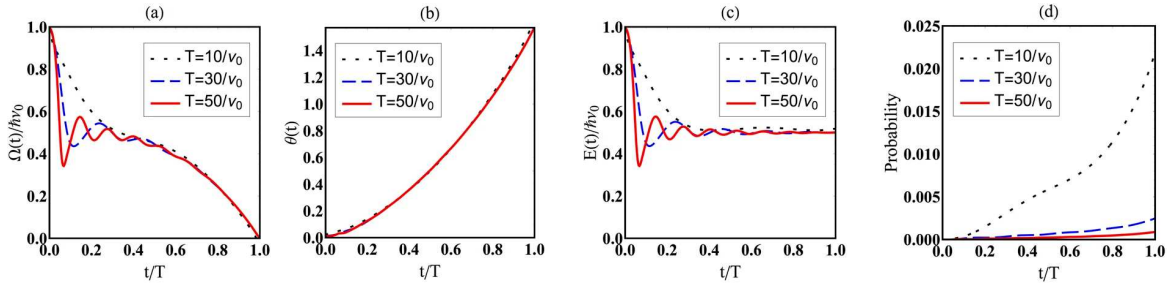


図 2.4.2 (a) ハミルトニアン  $H(t)$  の  $\sigma_z$  の係数  $\Omega(t)$  と (c) 瞬間固有状態値  $E(t)$  は、 $\nu_0 T$  が大きくなっても振動する。一方で、 $\nu_0 T$  が大きくなると、(b) 瞬間固有状態に含まれる角度  $\theta(t)$  の時間変化は小さくなり、瞬間固有状態間の遷移が抑えられることが分かる。パラメータは  $T\nu_0 = 10$  (黒の点線),  $T\nu_0 = 30$  (青の破線),  $T\nu_0 = 50$  (赤の実線)。

## 第 3 章

# 断熱瞬間近似の多準位系への拡張

この章では、多準位系に拡張した断熱瞬間近似について紹介する。まず初めに、2 準位系で用いられる断熱瞬間近似について、第 3.1 節で紹介する。次に、3 準位 Landau-Zener-Stuckelberg-Majorana 模型を完全 WKB 解析を用いて解いた先行研究を第 3.2 節で紹介する。第 3.3 節では、Landau-Zener-Stuckelberg-Majorana 格子模型に対して完全 WKB 解析を適用し S 行列を導出する。さらに、この S 行列がユニタリ行列の積で表せ、この結果が数値計算とよく一致することをみる。第 3.4 節では、この変形した S 行列と断熱瞬間近似の関係についてみることで、多準位系に拡張した断熱瞬間近似（一般化断熱瞬間近似）と捉えられることをみる。最後に、第 3.5 節で、時間周期系に対し、この一般化断熱瞬間近似を適用する。多準位 LZSM 模型に対する完全 WKB 解析は、Appendix F にまとめた。

### 3.1 断熱瞬間近似

断熱瞬間近似 (Adiabatic-Impulse Approximation : AIA) は、ハミルトニアンが時間に依存する 2 準位系や 3 準位系といった、比較的準位数の少ない離散量子系のダイナミクスを近似する手法である。この近似では、後述する擬交差点が存在している時間領域において、ハミルトニアンを Landau-Zener-Stuckelberg-Majorana 模型と近似し、その他の時間領域ではハミルトニアンを断熱的とみなす。この近似によって得られる時間発展演算子は、時間に依らない状態を基底として表す形式と、瞬間固有状態を基底として表す形式の二つが知られている。以下では、第 3.1.1 節で Landau-Zener-Stuckelberg-Majorana 模型を紹介し、これら二つの形式による近似された時間発展演算子を第 3.1.2, 3.1.3 節で導入する。

#### 3.1.1 Landau-Zener-Stuckelberg-Majorana 模型

時間に陽に依存する次のハミルトニアンによって記述されている 2 準位系を Landau-Zener-Stuckelberg-Majorana(LZSM) 模型という [4–7]。

$$H(t) = vt\sigma_z + g\sigma_x = \begin{pmatrix} vt & g \\ g & -vt \end{pmatrix} \quad (3.1.1)$$

ここで、簡単のため  $v, g > 0$  とする。このハミルトニアンの瞬間固有値は

$$E_{\pm}(t) = \pm\sqrt{g^2 + (vt)^2} \quad (3.1.2)$$

で与えられ、瞬間固有状態は

$$|E_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta(t)}{2} \\ \sin \frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix}, \quad |E_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta(t)}{2} \\ -\cos \frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix} \quad (3.1.3)$$

と表せる。ここで、

$$\tan \theta(t) := \frac{g}{vt} \quad (0 \leq \theta(t) \leq \pi)$$

である。ハミルトニアン<sup>1</sup>の非対角成分が0である場合、エネルギー準位は交差する。しかし、非対角成分が0でない場合、エネルギー準位は交差せず、反発する(図 3.1.1)。この開いたエネルギーギャップの箇所を擬交差点と呼ぶ。

時刻  $t = -\infty$  で系の基底状態  $|E_-( -\infty)\rangle$  にあったとする。

$$|\psi(-\infty)\rangle = |E_-( -\infty)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} =: |0\rangle$$

このとき、時刻  $t = +\infty$  で励起状態  $|E_+( \infty)\rangle$  に遷移する確率は

$$p_{\text{LZSM}} := e^{-2\pi \frac{g^2}{2v}} =: e^{-2\pi \kappa} \quad (3.1.4)$$

で与えられることが知られている (Appendix C)。以降、この遷移確率を **LZSM 遷移確率** と呼び、 $\kappa$  を **断熱パラメータ** と呼ぶ。また、時刻  $t = -\infty$  での励起状態を  $|E_+( -\infty)\rangle =: |1\rangle$  と表すことにする。

### 3.1.2 時間に依らない状態を用いる方法

LZSM 模型における時間発展演算子<sup>\*1</sup>

$$U(t, t_0) = \begin{pmatrix} a(t, t_0) & -b^*(t, t_0) \\ b(t, t_0) & a^*(t, t_0) \end{pmatrix}$$

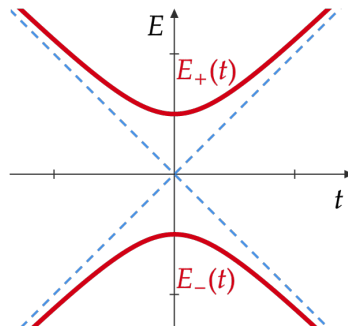


図 3.1.1 LZSM 模型 (3.1.1) の瞬間固有値  $E_{\pm}(t)$  (3.1.2) の時間依存性 (赤線)。青の破線はハミルトニアンの対角成分を表している。  $t = 0$  が擬交差点に対応する。

\*1 計算の都合上、式 (2.3.2) とは異なるパラメータの取り方をした。

において, 十分小さな  $t_0 \rightarrow -\infty$  の極限を考える.  $\tau = \sqrt{2vt}, \tau_0 = \sqrt{2vt_0}$  とすると,

$$\begin{aligned}
 a(\tau, \tau_0) &= \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0) D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) - e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0) D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau)}{e^{-\frac{3\pi}{4}i} D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0) D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) - e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0) D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau)} \\
 &= \begin{cases} e^{-\frac{\pi}{2}\kappa} \frac{e^{-\frac{i}{4}|\tau|^2} |\tau|^{-i\kappa}}{e^{-\frac{i}{4}|\tau_0|^2} |\tau_0|^{-i\kappa}} \left( e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa} + (e^{\pi\kappa} - e^{-\pi\kappa}) e^{-\frac{\pi}{2}\kappa} \right) + O(\tau^{-2}, \tau_0^{-2}) & (\tau \sim \tau_0) \\ \frac{e^{-\frac{i}{4}\tau^2} \tau^{-i\kappa}}{e^{-\frac{i}{4}|\tau_0|^2} |\tau_0|^{-i\kappa}} e^{-\pi\kappa} + O(\tau^{-2}, \tau_0^{-2}) & (\tau \simeq \infty) \end{cases} \\
 &= \begin{cases} \frac{e^{-i\frac{\tau^2}{4}} |\tau|^{-i\kappa}}{e^{-i\frac{\tau_0^2}{4}} |\tau_0|^{-i\kappa}} + O(\tau^{-2}, \tau_0^{-2}) & (\tau \sim \tau_0) \\ \frac{e^{-i\frac{\tau^2}{4}} e^{-\kappa\pi} \tau^{-i\kappa}}{e^{-i\frac{\tau_0^2}{4}} |\tau_0|^{-i\kappa}} + O(\tau^{-2}, \tau_0^{-2}) & (\tau \simeq \infty) \end{cases} \quad (3.1.5)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 b(\tau, \tau_0) &= \frac{-i D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0) D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) + i D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0) D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau)}{e^{-\frac{3\pi}{4}i} D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0) D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) - e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0) D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau)} \\
 &= \begin{cases} O(\tau^{-2}, \tau_0^{-2}) & (\tau \sim \tau_0) \\ \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i} e^{-\frac{\pi}{2}\kappa} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(i\kappa+1)} e^{i\frac{\tau^2}{4}} \tau^{i\kappa}}{e^{-\frac{i}{4}|\tau_0|^2} |\tau_0|^{-i\kappa}} (\tau \simeq \infty) + O(\tau^{-2}, \tau_0^{-2}) \end{cases} \\
 &= \begin{cases} O(\tau^{-2}, \tau_0^{-2}) & (\tau \sim \tau_0) \\ \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i} \sqrt{1 - e^{-2\pi\kappa}} e^{i \arg \Gamma(1-i\kappa)} e^{i\frac{\tau^2}{4}} \tau^{i\kappa}}{e^{-i\frac{\tau_0^2}{4}} |\tau_0|^{-i\kappa}} + O(\tau^{-2}, \tau_0^{-2}) & (\tau \simeq \infty) \end{cases} \quad (3.1.6)
 \end{aligned}$$

と表せる (Appendix C). 一方,

$$\begin{aligned}
 \int_0^t dt' E_{\pm}(t') &= \pm \int_0^t dt' \sqrt{g^2 + (vt')^2} \\
 &= \frac{t\sqrt{g^2 + v^2 t^2}}{2} + \kappa \log \left( \frac{\sqrt{g^2 + v^2 t^2} + vt}{g} \right) \\
 &= \frac{vt^2}{2} \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{g^2}{v^2 t^2} \right) + \frac{\kappa}{2} \log \left( \frac{4v^2 t^2}{g^2} \right) + O\left( \frac{\kappa^2}{vt^2}, \frac{\kappa^2}{\sqrt{vt}} \right) \quad (|t| \simeq \infty) \\
 &= \frac{v}{2} t^2 + \frac{\kappa}{2} (1 - \log \kappa) + \kappa \log \sqrt{2vt^2} + O\left( \frac{\kappa^2}{\tau^2}, \frac{\kappa^2}{\tau} \right) \\
 &= \begin{cases} \pm \left( \frac{\tau^2}{4} + \frac{\kappa}{2} (1 - \log \kappa) + \kappa \log \tau \right) + O\left( \frac{\kappa^2}{\tau^2}, \frac{\kappa^2}{\tau} \right) & (\tau \simeq \infty) \\ \mp \left( \frac{\tau^2}{4} + \frac{\kappa}{2} (1 - \log \kappa) + \kappa \log |\tau| \right) + O\left( \frac{\kappa^2}{\tau^2}, \frac{\kappa^2}{\tau} \right) & (\tau \simeq -\infty) \end{cases}
 \end{aligned}$$

より,

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt' E_{\pm}(t') &= - \int_0^{t_0} dt' E_{\pm}(t') + \int_0^t dt' E_{\pm}(t') \\ &\simeq \begin{cases} \mp \left( \frac{\tau^2}{4} + \kappa \log |\tau| \right) \pm \left( \frac{\tau_0^2}{4} + \kappa \log |\tau_0| \right) & (\tau_0 \sim \tau \simeq -\infty) \\ \pm \left( \frac{\tau^2}{4} + \kappa \log |\tau| \right) \pm \left( \frac{\tau_0^2}{4} + \kappa \log |\tau_0| \right) & (\tau_0 \simeq -\infty, \tau \simeq \infty) \end{cases} \\ \int_{t_0}^0 dt' E_{\pm}(t') + \int_0^t dt' E_{\mp}(t') &= - \int_0^{t_0} dt' E_{\pm}(t') + \int_0^t dt' E_{\mp}(t') \\ &\simeq \mp \left( \frac{\tau^2}{4} + \kappa \log |\tau| \right) \pm \left( \frac{\tau_0^2}{4} + \kappa \log |\tau_0| \right) \quad (\tau_0 \simeq -\infty, \tau \simeq \infty) \end{aligned}$$

と表せる。これより、式 (3.1.5), (3.1.6) はそれぞれ

$$\begin{aligned} a(t, t_0) &= \begin{cases} \exp \left( -i \int_{t_0}^t dt' E_{-}(t') \right) + O \left( \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt}}, \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt_0}} \right) & (t \sim t_0) \\ e^{-\kappa\pi} \exp \left( -i \left( \int_0^t dt' E_{+}(t') + \int_{t_0}^0 dt' E_{-}(t') \right) \right) \\ \quad + O \left( \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt}}, \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt_0}} \right) & (t \simeq \infty) \end{cases} \\ b(t, t_0) &= \begin{cases} O \left( \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt}}, \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt_0}} \right) & (t \sim t_0) \\ e^{-\frac{3\pi}{4}i} \sqrt{1 - e^{-2\pi\kappa}} \exp \left( i \arg \Gamma(1 - i\kappa) - i\kappa(1 - \log \kappa) - i \int_{t_0}^t dt' E_{-}(t') \right) \\ \quad + O \left( \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt}}, \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt_0}} \right) & (t \simeq \infty) \end{cases} \end{aligned}$$

と表せる。この関係式より、断熱的な時間発展と非断熱的な時間発展に分割して表すことができる。例えば、 $t_0 \sim t$  の場合、

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \begin{pmatrix} e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_{-}(t')} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_{+}(t')} \end{pmatrix} + O \left( \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt}}, \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt_0}} \right) \\ &=: U_{\text{ad}}^{-}(t, t_0) + O \left( \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt}}, \frac{\max \{ \kappa^2, 1 \}}{\sqrt{vt_0}} \right) \end{aligned}$$

と、非対角成分を持たない断熱的な時間発展  $U_{\text{ad}}^-(t, t_0)$  のみで表すことができる。一方、 $t \simeq \infty$  の場合、

$$\begin{aligned}
 U(t, t_0) &= \begin{pmatrix} \sqrt{p_{\text{LZSM}}} e^{-i \int_0^t dt' E_+(t')} e^{-i \int_{t_0}^0 dt' E_-(t')} & \sqrt{1 - p_{\text{LZSM}}} e^{-i \phi_{\text{St}}} e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_+(t')} \\ -\sqrt{1 - p_{\text{LZSM}}} e^{i \phi_{\text{St}}} e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_-(t')} & \sqrt{p_{\text{LZSM}}} e^{-i \int_0^t dt' E_-(t')} e^{-i \int_{t_0}^0 dt' E_+(t')} \end{pmatrix} \\
 &+ O\left(\frac{\max\{\kappa^2, 1\}}{\sqrt{vt}}, \frac{\max\{\kappa^2, 1\}}{\sqrt{vt_0}}\right) \\
 &= \begin{pmatrix} e^{-i \int_0^t dt' E_+(t')} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_0^t dt' E_-(t')} \end{pmatrix} \\
 &\times \begin{pmatrix} \sqrt{p_{\text{LZSM}}} & \sqrt{1 - p_{\text{LZSM}}} e^{-i \phi_{\text{St}}} \\ -\sqrt{1 - p_{\text{LZSM}}} e^{i \phi_{\text{St}}} & \sqrt{p_{\text{LZSM}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i \int_{t_0}^0 dt' E_-(t')} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_{t_0}^0 dt' E_+(t')} \end{pmatrix} \\
 &+ O\left(\frac{\max\{\kappa^2, 1\}}{\sqrt{vt}}, \frac{\max\{\kappa^2, 1\}}{\sqrt{vt_0}}\right) \\
 &=: U_{\text{ad}}^+(t, 0) V U_{\text{ad}}^-(0, t_0) + O\left(\frac{\max\{\kappa^2, 1\}}{\sqrt{vt}}, \frac{\max\{\kappa^2, 1\}}{\sqrt{vt_0}}\right) \tag{3.1.7}
 \end{aligned}$$

と、断熱的な時間発展  $U_{\text{ad}}^-(0, t_0), U_{\text{ad}}^+(t, 0)$  と、非断熱的な時間発展  $V$  で分割できることが分かる (図 3.1.2)。ただし、

$$\phi_{\text{St}} := \frac{\pi}{4} + \kappa(\log \kappa - 1) + \arg \Gamma(1 - i\kappa)$$

と置いた。この位相は **Stokes 位相** と呼ばれている\*2。

この結果を一般化し、時間依存性が必ずしも線形でないような一般の時間依存 2 準位系のダイナミクスを、擬交差点以外では断熱的な時間発展  $U_{\text{ad}}$  とし、擬交差点において非断熱的な時間発展  $V$  が瞬間的に起こるとして近似することが考えられる。これを**断熱瞬間近似**と呼ぶ。

しかし、時間に依らない基底を用いた表現 (3.1.7) は、有限の時間間隔での状態の時間発展を考えた際には、近似の解釈に多少の不都合が生じる。例えば、初期時刻  $t_0$  が十分小さくなかった場合、擬交差点前の時刻  $t$  までの時間発展を考えると、

$$U(t, t_0) \simeq U_{\text{ad}}^-(t, t_0) = \begin{pmatrix} e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_-(t')} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_+(t')} \end{pmatrix}$$

となる。しかし、この初期時刻では、例えば

$$|E_+(t_0)\rangle \simeq |1\rangle$$

が成り立っていない可能性がある。また、擬交差点前後の断熱的な時間発展演算子  $U_{\text{ad}}^\pm(t, t_0)$  がハミルトニアン  $H$  の傾き  $v$  の正負に依存するので、この公式を用いる際に多少注意が必要である。これらの問題を解決するために、瞬間固有状態を用いる方法を次に示す。

\*2 この位相は Stokes 現象 (Appendix E) によって現れると理解できるため、Stokes 位相と呼ばれている。

## 3.1.3 瞬間固有状態を用いる方法

瞬間固有状態  $|E_{\pm}(t)\rangle$  を基底として用いることを考える．例えば，断熱的な場合の時間発展演算子は以下のように行列表示できる．

$$\begin{aligned}\tilde{U}_{\text{ad}}(t, t_0) &= \sum_{j=\pm} e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_j(t')} |E_j(t)\rangle \langle E_j(t_0)| \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_+(t')} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_-(t')} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

ここで， $U_{\text{ad}}$  と  $\tilde{U}_{\text{ad}}$  は行列表示したときの基底が異なることに注意する．つまり，ここでは  $|E_j(t)\rangle \langle E_j(t_0)|$  を行列表示の際の基底として用いている．瞬間固有状態は式 (3.1.3) より，次のように表せる．

$$\begin{aligned}|E_+(-\infty)\rangle &= -|E_-(\infty)\rangle = |1\rangle \\ |E_-(-\infty)\rangle &= |E_+(\infty)\rangle = |0\rangle\end{aligned}$$

よって，時間発展演算子は

$$\begin{aligned}U(t, t_0) &= a(t, t_0) |0\rangle \langle 0| + b(t, t_0) |1\rangle \langle 0| - b^*(t, t_0) |0\rangle \langle 1| + a^*(t, t_0) |1\rangle \langle 1| \\ &= a(t, t_0) |E_+(\infty)\rangle \langle E_-(-\infty)| - b(t, t_0) |E_-(\infty)\rangle \langle E_-(-\infty)| \\ &\quad - b^*(t, t_0) |E_+(\infty)\rangle \langle E_+(-\infty)| - a^*(t, t_0) |E_-(\infty)\rangle \langle E_+(-\infty)| \\ &= \begin{pmatrix} -b^*(t, t_0) & a(t, t_0) \\ -a^*(t, t_0) & -b(t, t_0) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

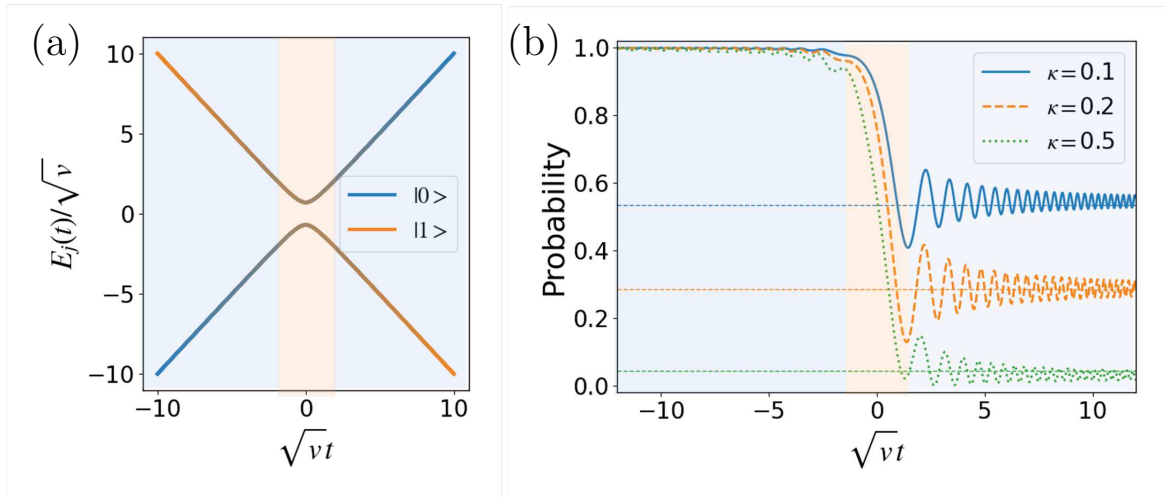


図 3.1.2 LZSM 模型 (3.1.1) の (a) 瞬間固有値  $E_{\pm}(t)/\sqrt{v}$  の時間依存性と (b)  $|0\rangle$  を測定する確率の時間依存性．点線は  $p_{\text{LZSM}}$  を表す．青色の背景が断熱領域，赤色の背景が非断熱領域を表す．エネルギーギャップが小さくなる時間領域で，遷移確率が大きく変化していることが分かる．断熱領域の時間発展を  $U_{\text{ad}}^{\pm}$  で近似し，非断熱領域の時間発展を  $V$  で近似する手法が，断熱瞬間近似である．

と基底  $|E_i(\infty)\rangle \langle E_j(-\infty)|$  を用いて行列表示できる．これより，式 (3.1.7) は，次のように基底  $|E_i(t_F)\rangle \langle E_j(t_I)|$  を用いて行列表示することもできる．

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &\simeq \begin{pmatrix} e^{-i \int_0^t dt' E_+(t')} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_0^t dt' E_-(t')} \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} \sqrt{1 - p_{\text{LZSM}}} e^{-i\phi_{\text{St}}} & \sqrt{p_{\text{LZSM}}} \\ -\sqrt{p_{\text{LZSM}}} & \sqrt{1 - p_{\text{LZSM}}} e^{i\phi_{\text{St}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i \int_{t_0}^0 dt' E_+(t')} & 0 \\ 0 & e^{-i \int_{t_0}^0 dt' E_-(t')} \end{pmatrix} \\ &=: \tilde{U}_{\text{ad}}(t, 0) \tilde{V} \tilde{U}_{\text{ad}}(0, t_0) \end{aligned}$$

ただし，1つ目の行列の基底は  $t_F = t, t_I = 0$ ，2つ目の行列の基底は  $t_F = t_I = 0$ ，3つ目の行列の基底は  $t_F = 0, t_I = t_0$  とした．このように表すと，(3.1.7) とは異なり，擬交差点前後での断熱的な時間発展を表す演算子が  $\tilde{U}_{\text{ad}}(t, t_0)$  と統一されていることが分かる．また，基底を瞬間固有状態としてとったので，十分過去ではない初期時刻に対しても，断熱的な時間発展を表す表示となっている．つまり， $t, t_0 < 0$  に対し，

$$U(t, t_0) |E_j(t_0)\rangle = e^{-i \int_{t_0}^t dt' E_j(t')} |E_j(t)\rangle$$

となる．

## 3.2 先行研究：3準位 LZSM 模型の完全 WKB 解析

先行研究 [64–66] では，以下の 3準位 LZSM 模型を考えている\*3．

$$\begin{aligned} H(t, \eta) &= \eta H_0(t) + \eta^{1/2} H_{1/2} \\ H_0(t) &= \text{diag}(\rho_1(t), \rho_2(t), \rho_3(t)) \\ \rho_i(t) &= v_i t + a_i, \quad (v_1 < v_2 < v_3) \\ H_{\frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} 0 & g_{12} & g_{13} \\ g_{12}^* & 0 & g_{23} \\ g_{13}^* & g_{23}^* & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

ここで， $v_i$  は各準位の時間変化を決めるパラメータで， $a_i$  は  $t = 0$  における各準位の値である．ハミルトニアンを上のように行列表示した際の基底を  $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$  と表す．また， $\eta$  は十分大きいパラメータとする．この  $\eta$  が十分大きいと LZSM 遷移が独立に起こるとみなせる．

**証明**  $j$  番目と  $k$  番目の準位交差が起こる時刻  $t_{jk}$  は， $\rho_j(t_{jk}) = \rho_k(t_{jk})$  を解くことによって与えられる． $\rho_j(t)$  の定義より， $t_{jk}$  は  $\eta$  に依存しないことが分かる．また，この擬交差点付近で 2 準位系に近似でき

\*3 これらの先行研究では時間に関する非線形な模型も考えているが，この章では線形な模型を主に扱うので，簡単のため線形な模型の解析のみを紹介する．次の章では時間に関して非線形な模型も用いるので，Appendix F では非線形な模型も含めた導出を行なっている．



る，つまり LZSM 模型に近似できるとすると，式 (3.1.4) より，断熱パラメータは

$$\begin{aligned}\kappa_{jk} &= \frac{|\sqrt{\eta}g_{jk}|^2}{|\eta(v_j - v_k)|} \\ &= \frac{|g_{jk}|^2}{|v_j - v_k|}\end{aligned}$$

によって与えられる．これより，断熱パラメータ  $\kappa_{jk}$  は  $\eta$  に依存しないことが分かる\*4．ここで着目している  $j$  番目と  $k$  番目の 2 準位に対して断熱瞬間近似を用いる．時刻  $t \in [t_I, t_F]$  におけるダイナミクスに対して断熱瞬間近似を適用すると，式 (3.1.7) より，近似の誤差は

$$O\left(\frac{\max\{\kappa_{jk}^2, 1\}}{\sqrt{\eta}|v_j - v_k|(t_F - t_{jk})}, \frac{\max\{\kappa_{jk}^2, 1\}}{\sqrt{\eta}|v_j - v_k|(t_{jk} - t_I)}\right)$$

と与えられる．ただし， $t_I < t_{jk} < t_F$  とする． $\eta$  が十分大きいとき， $t_F - t_{jk}, t_{jk} - t_I$  が小さくとも，断熱瞬間近似の精度が良くなることが分かる．これは，時間間隔  $[t_I, t_F]$  の間に  $j$  番目と  $k$  番目の準位間の LZSM 遷移が起き，その後，断熱的な時間発展が起こっているとみなせるということの意味している．

一方，準位が交差する時刻  $t_{jk}$  は  $\eta$  に依存しないので，準位が交差する時刻の間隔  $\Delta t_{kl} = |t_{jk} - t_{jl}|$  も  $\eta$  に依存しないことが分かる．これより  $t_F - t_{jk}, t_{jk} - t_I \ll \Delta t_{kl}$  を満たしていれば，LZSM 遷移が独立に起きているとみなせる． $\eta$  を十分大きくとることにより，断熱瞬間近似の誤差を小さくしたまま， $t_F - t_{jk}, t_{jk} - t_I \ll \Delta t_{kl}$  を満たすように  $t_F, t_I$  を取ることが可能である (図 3.2.1)．

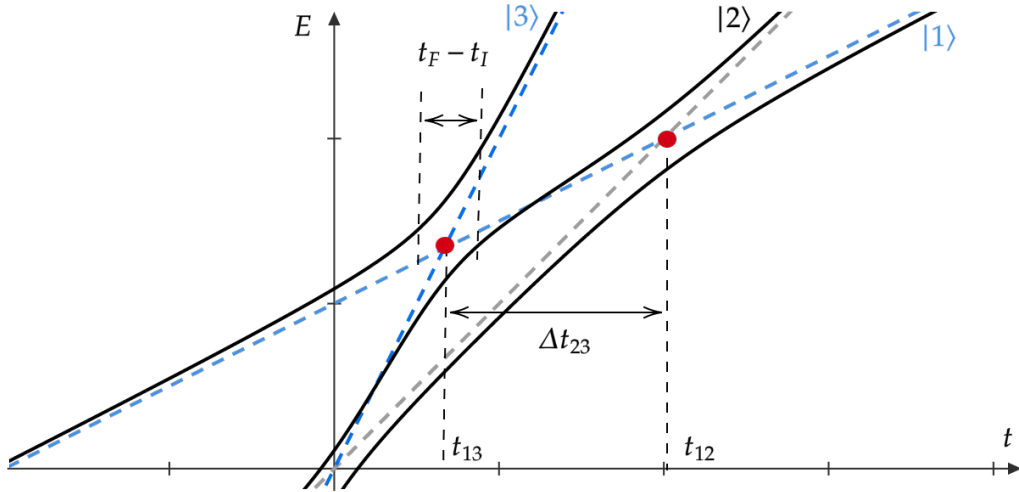


図 3.2.1  $j = 1, k = 3$  とした場合のエネルギー準位図．青色の点線が着目している準位を表している．擬交差点間の時間間隔  $\Delta t_{23}$  は  $\eta$  に依存しない一方で，LZSM 遷移が起きているとみなせる時間間隔  $t_F - t_I$  は， $1/\sqrt{\eta}$  に比例する．よって， $\eta$  を十分大きく取ることにより，各擬交差点における LZSM 遷移は独立とみなせる．

□

\*4 この条件を満たすために，ハミルトニアン の非対角成分に  $\eta^{1/2}$  という係数をつけておいた．

さて、次の Schrödinger 方程式を考える。

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t, \eta)\rangle = H(t, \eta) |\psi(t, \eta)\rangle$$

このように定義された 3 準位 LZSM 模型に対する完全 WKB 解析の概要を以下に示す\*5。まず、WKB 解\*6、つまり Schrödinger 方程式の独立な 3 つの解の  $t \rightarrow \infty$  における漸近解  $|\psi^{(j)}(t, \eta)\rangle$  が、

$$\begin{aligned} |\psi^{(j)}(t, \eta)\rangle &= e^{-i\eta \int^t dt' \rho_j(t')} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^3 \exp\left(-i \frac{|g_{jk}|^2}{\lambda_{jk}} \log(\rho_k(t) - \rho_j(t))\right) |j\rangle + O(\eta^{-1}) \\ &\quad (j = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

と構成できる (Appendix F, 式 (F.3))。ここで、

$$\begin{aligned} \lambda_{jk} &:= v_k - v_j \\ \kappa_{jk} &:= \frac{|g_{jk}|^2}{\lambda_{jk}} \end{aligned}$$

とした。さらに、 $t_{jk}$  を  $j$  番目の準位と  $k$  番目の準位が交差する時刻として導入する。

$$t_{jk} := \frac{a_j - a_k}{\lambda_{jk}}$$

この WKB 解を解析接続することを考える。微分方程式の漸近解を  $t$  に関して解析接続する際、漸近解の振る舞いが特定の複素領域ごとに変わるのが Stokes 現象として知られている (Appendix E)。この Stokes 現象を表す行列を接続行列と呼ぶ。今回の WKB 解は、 $t = t_{jk}$  ( $j < k$ ) の前後で次のように接続される (Appendix F, 図 3.2.2)。

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} |\psi^{(j)}(t, \eta)\rangle \\ |\psi^{(k)}(t, \eta)\rangle \\ |\psi^{(l)}(t, \eta)\rangle \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} p_{jk} & -\alpha_{jk}^- & 0 \\ -\alpha_{jk}^+ & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi^{(j)}(t, \eta)\rangle \\ |\psi^{(k)}(t, \eta)\rangle \\ |\psi^{(l)}(t, \eta)\rangle \end{pmatrix} \\ &=: M_{jk} \begin{pmatrix} |\psi^{(j)}(t, \eta)\rangle \\ |\psi^{(k)}(t, \eta)\rangle \\ |\psi^{(l)}(t, \eta)\rangle \end{pmatrix} \end{aligned}$$

\*5 以下の計算や Appendix F の計算を見ると分かる通り、本稿で計算しているものは全て WKB 近似とみなせる。高階微分方程式の完全 WKB 解析の文脈では、一般に、WKB 近似における転回点以外に、虚転回点 (virtual turning point) を考慮する必要があることが知られている。しかし、本稿で考えている模型は全て実条件 (Appendix F) を満たしているため、虚転回点を考慮する必要がない [64–66]。

\*6 Appendix F では大域的 WKB 解と呼んでいるものに対応。

ここで,

$$\begin{aligned}
 -\alpha_{jk}^- &:= -(2\eta)^{-i\kappa_{jk}} e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa_{jk}} e^{\frac{3\pi}{4}i} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_{jk}}} \frac{g_{jk}^*}{\Gamma(1-i\kappa_{jk})} \\
 &\quad \times \exp\left(-i\eta \int^{t_{jk}} dt' (\rho_j(t') - \rho_k(t'))\right) \exp\left(-i \frac{|g_{jl}|^2}{\lambda_{lj}} \log(\rho_l(t_{jk}) - \rho_j(t_{jk}))\right) \\
 &\quad \times \exp\left(i \frac{|g_{kl}|^2}{\lambda_{lk}} \log(\rho_l(t_{jk}) - \rho_k(t_{jk}))\right) \exp\left(i \frac{|g_{jk}|^2}{\lambda_{jk}} \log(2\lambda_{jk})\right) \exp\left(\frac{|g_{jk}|^2}{\lambda_{jk}} \pi\right) \\
 &=: -(2\eta)^{-i\kappa_{jk}} e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa_{jk}} e^{\frac{3\pi}{4}i} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_{jk}}} \frac{g_{jk}^*}{\Gamma(1-i\kappa_{jk})} \beta_{jk}^{-1} \\
 -\alpha_{jk}^+ &:= -(2\eta)^{i\kappa_{jk}} e^{\frac{\pi}{2}\kappa_{jk}} e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_{jk}}} \frac{g_{jk}}{\Gamma(1+i\kappa_{jk})} \beta_{jk}
 \end{aligned}$$

である.

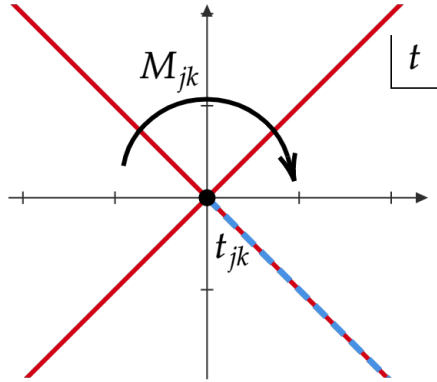


図 3.2.2 行列  $M_{jk}$  は,  $t_{jk}$  をまたぐ際に状態が混ざり合う時間発展演算子のような役割を果たす. しかし, この行列はユニタリ性を満たしていない. 赤線は Stokes 曲線, 青色の破線は分岐を表す. 詳しくは Appendix F 参照.

また, 以下のように, WKB 解 (3.2.1) は  $|t| \rightarrow \infty$  の極限で規格化されていないことが分かる.

$$\left\| \left| \psi^{(j)}(\pm\infty, \eta) \right\rangle \right\| = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^3 \left| \exp\left(-i \frac{|g_{jk}|^2}{\lambda_{kj}} \log(\lambda_{jk}(t - t_{jk}))\right) \right|$$

ここで,  $\log$  の分岐は下半平面に伸びるように入れると,

$$\begin{aligned}
 \lambda_{jk} > 0 &\Rightarrow \text{Im} \log(\lambda_{jk}(t - t_{jk})) = \pi \quad (t < t_{jk}) \\
 \lambda_{jk} < 0 &\Rightarrow \text{Im} \log(\lambda_{jk}(t - t_{jk})) = -\pi \quad (t > t_{jk})
 \end{aligned}$$

として扱える. これより,

$$N^{\pm, (j)} := \frac{1}{\left\| \left| \psi^{(j)}(\pm\infty) \right\rangle \right\|}$$

とすると、例えば、

$$\begin{aligned} \left(N^{-,(1)}\right)^{-1} &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \left| \exp\left(-i \frac{|g_{12}|^2}{\lambda_{21}} \log(\lambda_{12}(t - t_{12}))\right) \right| \left| \exp\left(-i \frac{|g_{13}|^2}{\lambda_{31}} \log(\lambda_{13}(t - t_{13}))\right) \right| \\ &= \exp\left(\frac{|g_{12}|^2}{\lambda_{21}} \pi\right) \exp\left(\frac{|g_{13}|^2}{\lambda_{31}} \pi\right) \\ N^{-,(1)} &= \exp\left(\frac{|g_{12}|^2}{\lambda_{12}} \pi\right) \exp\left(\frac{|g_{13}|^2}{\lambda_{13}} \pi\right) \end{aligned}$$

のように求まる。他の  $j$  についても同様にして、

$$\begin{aligned} N^{-,(2)} &= e^{\frac{|g_{23}|^2}{\lambda_{23}} \pi}, \quad N^{-,(3)} = 1 \\ N^{+,(1)} &= 1, \quad N^{+,(2)} = e^{\frac{|g_{12}|^2}{\lambda_{12}} \pi}, \quad N^{+,(3)} = e^{\frac{|g_{13}|^2}{\lambda_{13}} \pi} e^{\frac{|g_{23}|^2}{\lambda_{23}} \pi} \end{aligned}$$

と求まる。これらの要素を対角成分として持つ行列  $N^\pm$  を規格化行列と呼ぶことにする。

$$N^\pm := \text{diag}(N^{\pm,(1)}, N^{\pm,(2)}, N^{\pm,(3)})$$

交差する時刻が  $t_{23} < t_{13} < t_{12}$  とすると、 $|j\rangle$  から  $|i\rangle$  への遷移振幅は (Appendix F)

$$S_{ij} = \left(N^{+,(i)}\right)^{-1} \left((M_{23}M_{13}M_{12})^T\right)_{ij} N^{-,(j)} \quad (3.2.2)$$

と表せる\*7。例えば、 $a_1 = a, a_2 = a_3 = 0$  のとき、

$$\begin{aligned} \beta_{12} &= \exp\left(i\eta \int^{t_{12}} dt' (\rho_1(t') - \rho_2(t'))\right) \exp\left(i\kappa_{31} \log\left(\frac{a(v_3 - v_2)}{v_2 - v_1}\right)\right) \\ &\quad \times \exp\left(-i\kappa_{32} \log\left(\frac{a(v_3 - v_2)}{v_2 - v_1}\right)\right) \exp(-i\kappa_{12} \log(2(v_2 - v_1))) \exp(-\kappa_{12}\pi) \\ \beta_{13} &= \exp\left(i\eta \int^{t_{13}} dt' (\rho_1(t') - \rho_3(t'))\right) \exp\left(i\kappa_{21} \log\left(\frac{a(v_3 - v_2)}{v_3 - v_1}\right)\right) \exp(-\kappa_{21}\pi) \\ &\quad \times \exp\left(-i\kappa_{23} \log\left(\frac{a(v_3 - v_2)}{v_3 - v_1}\right)\right) \exp(-\kappa_{23}\pi) \exp(-i\kappa_{13} \log(2(v_3 - v_1))) \exp(-\kappa_{13}\pi) \end{aligned}$$

となる。ここで、積分の下端が定まっていないが、遷移確率を計算する場合、絶対値をとるために積分の下端が定まっていない項は寄与してこないことが分かる。よって、全ての積分の下端が同じとなるように基準点を取ってきても良い。以降、積分の下端は  $t' = 0$  として計算を進める。つまり、

$$\begin{aligned} \exp\left(i\eta \int_0^{t_{12}} dt' (\rho_1(t') - \rho_2(t'))\right) &= \exp\left(i\eta \int_0^{t_{12}} dt' (v_1 - v_2)(t - t_{12})\right) \\ &= \exp\left(i\eta \frac{(a_1 - a_2)^2}{2(v_2 - v_1)}\right) \end{aligned}$$

などとする。

\*7 Appendix F で述べた通り、この遷移振幅は絶対値のみが正しく、位相については正しくない。この問題については 3.4 で扱う。

このようにして求められた S 行列 (3.2.2) であるが、いくつか問題を抱えている。この S 行列 (3.2.2) に含まれる規格化行列  $N^\pm$  や行列  $M_{ij}$  はユニタリ行列ではない。つまり、時間発展のユニタリ性が自明ではない。また、規格化行列  $N^\pm$  を必要とするため、無限の過去や未来でハミルトニアンは非有界となっている必要がある。形式的な問題のみでなく、数値計算においても問題がある。規格化行列  $N^\pm$  や行列  $M_{ij}$  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。以上の問題は、S 行列がユニタリ行列の積として表されることによって解決できる [80]。次の第 3.3 節では、実際にこの S 行列がユニタリ行列の積で表されるということを、LZSM 格子模型を用いて説明する。

### 3.3 LZSM 格子模型の完全 WKB 解析

以下の  $2N$  準位系のハミルトニアンで表される LZSM 格子模型を考える。

$$H(t) = \eta A(t) + \sqrt{\eta} B \quad (3.3.1)$$

$$A(t) = \text{diag}(-vt + a_1, \dots, -vt + a_N, vt + a_{N+1}, \dots, vt + a_{2N})$$

$$a_k = a_{k-N} \quad (k \geq N+1)$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & g_{1,N+1} & g_{1,N+2} & \cdots & g_{1,2N} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & g_{2,N+1} & g_{2,N+2} & \cdots & g_{2,2N} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & g_{N,N+1} & g_{N,N+2} & \cdots & g_{N,2N} \\ g_{1,N+1}^* & g_{2,N+1}^* & \cdots & g_{N,N+1}^* & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ g_{1,N+2}^* & g_{2,N+2}^* & \cdots & g_{N,N+2}^* & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ g_{1,2N}^* & g_{2,2N}^* & \cdots & g_{N,2N}^* & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

ここで  $\eta$  は十分大きいパラメータとし、 $v > 0, a_j < a_{j+1}$  とする。この模型では、時間と共に増減する 2 種類の準位 (バンド) が存在し、それぞれの時間変化率が  $\pm v$  として与えられている。また、 $a_j$  はエネルギーの相対的な大きさを表し、それぞれのバンド内のエネルギー差が  $a_{j+1} - a_j$  となる。以下、十分小さい時刻  $t \simeq -\infty$  に対して

$$H(t) |j\rangle \simeq (-vt + a_j) |j\rangle \quad (1 \leq j \leq N)$$

$$H(t) |j\rangle \simeq (vt + a_{j-N}) |j\rangle \quad (N+1 \leq j \leq 2N)$$

を満たす状態として  $|j\rangle$  を定義する (図 3.3.1)。つまり、この状態  $|j\rangle$  を基底として行列表示されたハミルトニアンが式 (3.3.1) である。LZSM 格子模型は、Rydberg 状態のダイナミクスに最初に用いられ [81, 82]、その後量子情報への応用を意図した物理系のダイナミクス [83, 84] や、量子開放系 [85–90] における模型として扱われた。この模型の厳密な解析解は知られておらず、 $a_i$  が小さい場合 [91] を始めとして、様々な近似の下での遷移確率の解析が行われている [28, 84, 92, 93]。



ここで、 $I_N$  は  $N \times N$  の単位行列を表す。この規格化行列は、前節と同様の計算で求まる。例えば、

$$\begin{aligned}
 (\tilde{N}^{-,(1)})^{-1} &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \prod_{k=N+1}^{2N} \left| \exp \left( -i \frac{|g_{1k}|^2}{-2v} \log(2v(t - t_{1k})) \right) \right| \\
 &= \prod_{k=N+1}^{2N} \exp \left( \frac{|g_{1k}|^2}{-2v} \pi \right) \\
 \tilde{N}^{-,(1)} &= \prod_{k=N+1}^{2N} \exp(\kappa_{1k} \pi) \\
 &= \prod_{k=N+1}^{2N} p_{1k}^{-\frac{1}{2}}
 \end{aligned}$$

のように求まる。また、式 (3.3.2) の行列  $M_{jk}$  は、以下のように定義されている。

$$M_{jk} := \begin{pmatrix} I_{j-1} & & & & \\ & p_{jk} & \cdots & -\alpha_{jk}^+ & \\ & \vdots & I_{k-j-1} & \vdots & \\ & -\alpha_{jk}^- & \cdots & 1 & \\ & & & & I_{2N-k} \end{pmatrix} \quad (3.3.4)$$

ここで、この行列の非対角成分に含まれる  $\alpha_{jk}^\pm$  はそれぞれ

$$\begin{aligned}
 \alpha_{jk}^\pm &:= \pm \sqrt{1 - p_{jk}} \exp \left( \pm i \left( \frac{\pi}{4} + \arg \Gamma(1 - i\kappa_{jk}) + \arg g_{jk} \right) \right) (2\eta)^{\pm i\kappa_{jk}} \beta_{jk}^{\pm 1} \quad (3.3.5) \\
 \beta_{jk} &:= (4v)^{-i\kappa_{jk}} \exp \left( i \frac{\eta}{2} \frac{(a_k - a_j)^2}{2v} \right) \prod_{l=1}^{j-1} \sqrt{p_{lk}} \prod_{l=N+1}^{k-1} p_{jl}^{-\frac{1}{2}} \\
 &\quad \times \exp \left( -i \left( \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^N \kappa_{lk} \log |a_l - a_j| + \sum_{\substack{l=N+1 \\ (l \neq k)}}^{2N} \kappa_{jl} \log |a_l - a_k| \right) \right)
 \end{aligned}$$

と定義されている。この  $\alpha_{jk}^{\pm}$  は、式 (F.9) を次のように変形することで得られる。

$$\begin{aligned}
 \alpha_{jk}^- &= (2\eta)^{-i\kappa_{jk}} e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa_{jk}} e^{\frac{3\pi}{4}i} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_{jk}} \frac{g_{jk}^*}{\Gamma(1-i\kappa_{jk})}} \\
 &\quad \times \exp\left(-i\eta \int_0^{t_{jk}} dt' (\rho_j(t') - \rho_k(t'))\right) \prod_{\substack{l=N \\ (l \neq k)}}^{2N} \exp\left(-i \frac{|g_{jl}|^2}{\lambda_{lj}} \log(\rho_l(t_{jk}) - \rho_j(t_{jk}))\right) \\
 &\quad \times \prod_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^N \exp\left(i \frac{|g_{kl}|^2}{\lambda_{lk}} \log(\rho_l(t_{jk}) - \rho_k(t_{jk}))\right) \exp\left(i \frac{|g_{jk}|^2}{2v} \log(4v)\right) \exp\left(\frac{|g_{jk}|^2}{2v} \pi\right) \\
 &= (2\eta)^{-i\kappa_{jk}} e^{\frac{3\pi}{4}i} \sqrt{1 - e^{-2\pi\kappa_{jk}}} \exp(-i(\arg g_{jk} + \arg \Gamma(1 - i\kappa_{jk}))) \\
 &\quad \times (4v)^{i\kappa_{jk}} \exp\left(-i\eta \int_0^{t_{jk}} dt' (\rho_j(t') - \rho_k(t'))\right) \prod_{\substack{l=N+1 \\ (l \neq k)}}^{2N} \exp\left(i \frac{|g_{jl}|^2}{2v} \log |2v(t_{jk} - t_{jl})|\right) \prod_{l=N+1}^{k-1} e^{-\kappa_{jl}\pi} \\
 &\quad \times \prod_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^N \exp\left(i \frac{|g_{kl}|^2}{2v} \log |2v(t_{jk} - t_{lk})|\right) \prod_{l=1}^{N-1} e^{\kappa_{lk}\pi} \\
 &= -(2\eta)^{-i\kappa_{jk}} \sqrt{1 - p_{jk}} \exp\left(-i\left(\frac{\pi}{4} + \arg g_{jk} + \arg \Gamma(1 - i\kappa_{jk})\right)\right) \\
 &\quad \times (4v)^{i\kappa_{jk}} \exp\left(-i \frac{\eta}{2} \frac{(a_k - a_j)^2}{2v}\right) \prod_{l=N+1}^{k-1} p_{jl}^{\frac{1}{2}} \prod_{l=1}^{N-1} p_{lk}^{-\frac{1}{2}} \\
 &\quad \times \exp\left(i \left( \sum_{\substack{l=N+1 \\ (l \neq k)}}^{2N} \kappa_{jl} \log |a_k - a_l| + \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^N \kappa_{lk} \log |a_l - a_j| \right)\right)
 \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
 \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(1-i\kappa)} &= \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{|\Gamma(1-i\kappa)|} e^{-i \arg \Gamma(1-i\kappa)} \\
 &= \sqrt{\frac{2\pi\kappa}{|\Gamma(1-i\kappa)|^2}} e^{-i \arg \Gamma(1-i\kappa)} \\
 &= \sqrt{\frac{2\pi\kappa}{\pi\kappa} \sinh(\pi\kappa)} e^{-i \arg \Gamma(1-i\kappa)} \\
 &= \sqrt{e^{\pi\kappa} - e^{-\pi\kappa}} e^{-i \arg \Gamma(1-i\kappa)}
 \end{aligned}$$

を用いた。  $\alpha_{jk}^+$  についても同様に変形できる。



さて、このようにして求めた S 行列 (3.3.2) は、次のようなユニタリ行列の積に変形することができる。

$$\begin{aligned}
 S &= \tilde{U}_1 \cdots \tilde{U}_{2N-2} \tilde{U}_{2N-1} & (3.3.6) \\
 \tilde{U}_l &:= \prod_{\substack{k-j=l \\ 1 \leq j \leq N < N+1 \leq k \leq 2N}} U_{jk} \\
 U_{jk} &:= \begin{pmatrix} I_{j-1} & & & & \\ & \sqrt{p_{jk}} & \cdots & & -\tilde{\alpha}_{jk}^+ \\ & \vdots & I_{k-j-1} & \vdots & \\ & -\tilde{\alpha}_{jk}^- & \cdots & \sqrt{p_{jk}} & \\ & & & & I_{2N-k} \end{pmatrix} \\
 \tilde{\alpha}_{jk}^\pm &:= \pm \sqrt{1-p_{jk}} \exp\left(\pm i\left(\frac{\pi}{4} + \arg \Gamma(1-i\kappa_{jk}) + \arg g_{jk}\right)\right) (2\eta)^{\pm i\kappa_{jk}} \tilde{\beta}_{jk}^{\pm 1} \\
 &=: \pm \sqrt{1-p_{jk}} e^{\pm i\tilde{\phi}_{jk}} \\
 \tilde{\beta}_{jk} &:= (4v)^{-i\kappa_{jk}} \exp\left(i\frac{\eta}{2} \frac{(a_k - a_j)^2}{2v}\right) \\
 &\quad \times \exp\left(-i\left(\sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^N \log |a_l - a_j|^{\kappa_{lk}} + \sum_{\substack{l=N+1 \\ (l \neq k)}}^{2N} \log |a_l - a_k|^{\kappa_{jl}}\right)\right)
 \end{aligned}$$

**証明** S 行列 (3.3.2) がユニタリ行列の積で表せることを示す。そこで、以下の性質を満たすユニタリ行列  $\tilde{U}_k$  を求めたい。

$$\tilde{M}_k \tilde{N}_k^{(-)} = \tilde{N}_{k-1}^{(-)} \tilde{U}_k \quad (3.3.7)$$

ここで、

$$\tilde{N}_k^{(-)} = \begin{cases} \text{diag} \left( \overbrace{\prod_{l=N+1}^{k+1} p_{1l}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=N+1}^{2N} p_{2N-k-1, l}^{-\frac{1}{2}}}^{2N-k-1}, \overbrace{\prod_{l=N+1}^{2N} p_{2N-k, l}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=N+1}^{2N} p_{Nl}^{-\frac{1}{2}}}^{k-N+1} \right), \\ \vec{I}_{k-N+1}, \overbrace{\prod_{l=1}^1 p_{l, k+2}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=1}^{2N-k-1} p_{l, 2N}^{-\frac{1}{2}}}^{2N-k-1} \end{cases} \quad (k \geq N) \\
 \text{diag} \left( \vec{I}_{N-k}, \overbrace{\prod_{l=N+1}^{N+1} p_{N-k+1, l}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=N+1}^{N+k} p_{N, l}^{-\frac{1}{2}}}^k \right), \\ \overbrace{\prod_{l=1}^{N-k} p_{l, N+1}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=1}^{N-1} p_{l, N+k}^{-\frac{1}{2}}}^k, \overbrace{\prod_{l=1}^N p_{l, N+k+1}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=1}^N p_{l, 2N}^{-\frac{1}{2}}}^{N-k} \end{cases} \quad (k \leq N) \quad (3.3.8)$$

であり, また

$$\vec{I}_n = \overbrace{(1, \dots, 1)}^n$$

と定義した. さらに,

$$\tilde{N}_{2N-1}^{(-)} = \tilde{N}^-$$

が成り立つことに注意する. まず, 式 (3.3.7) によって与えられる  $\tilde{U}_k$  を用いて S 行列を変形する. 次にこの  $\tilde{U}_k$  がユニタリ行列であることを示す.

さて, 式 (3.3.4) によって与えられる行列  $M_{ij}$  は, 任意の  $X_{ij}, Y_{ij} \in \mathbb{C}$  を用いて, 以下のように変形できる.

$$\begin{aligned} M_{ij} &= \begin{pmatrix} I_{i-1} & & & & \\ & X_{ij}^{\frac{1}{2}} & \cdots & & 0 \\ & \vdots & I_{j-i-1} & & \vdots \\ & 0 & \cdots & X_{ij}^{-\frac{1}{2}} Y_{ij}^{-1} & \\ & & & & I_{2N-j} \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} I_{i-1} & & & & \\ & p_{ij} X_{ij}^{-1} & \cdots & -\alpha_{ij}^+ Y_{ij}^{-1} & \\ & \vdots & I_{j-i-1} & \vdots & \\ & -\alpha_{ij}^- Y_{ij} & \cdots & X_{ij} & \\ & & & & I_{2N-j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{i-1} & & & & \\ & X_{ij}^{\frac{1}{2}} & \cdots & & 0 \\ & \vdots & I_{j-i-1} & & \vdots \\ & 0 & \cdots & X_{ij}^{-\frac{1}{2}} Y_{ij} & \\ & & & & I_{2N-j} \end{pmatrix} \\ &=: M_{ij}^{(-)} U_{ij} M_{ij}^{(+)} \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

以下,  $X_{ij} = p_{ij}^{\frac{1}{2}}$ ,  $Y_{ij} = \prod_{l=1}^{i-1} p_{lj}^{\frac{1}{2}} \prod_{l=N+1}^{j-1} p_{il}^{-\frac{1}{2}}$  とする.

(3.3.7) の左辺は

$$\tilde{M}_k \tilde{N}_k^{(-)} = \prod_{\substack{j-i=k \\ (1 \leq i \leq N < N+1 \leq j \leq 2N)}} M_{ij} \tilde{N}_k^{(-)} = \begin{cases} \prod_{1 \leq i \leq 2N-k} M_{i, i+k} \tilde{N}_k^{(-)} & (k \geq N) \\ \prod_{N-k+1 \leq i \leq N} M_{i, i+k} \tilde{N}_k^{(-)} & (k \leq N) \end{cases}$$

のように変形できる. まず,  $k \geq N$  の場合を考える.  $\tilde{N}_k^{(-)}$  を以下のように 2 つに分割する.

$$\begin{aligned} \tilde{N}_k^{(-)} &= \left( \prod_{1 \leq i \leq 2N-k} N_{i, i+k}^{(-)} \right) \tilde{N}_k^{(-), \perp} \\ N_{i, i+k}^{(-)} &:= \text{diag} \left( \vec{I}_{i-1}, \prod_{l=N+1}^{i+k} p_{i, l}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{k-1}, \prod_{l=1}^{i-1} p_{l, i+k}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{2N-i-k} \right) \\ \tilde{N}_k^{(-), \perp} &:= \text{diag} \left( \vec{I}_{2N-k}, \overbrace{\prod_{l=N+1}^{2N} p_{2N-k+1, l}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=N+1}^{2N} p_{N, l}^{-\frac{1}{2}}}^{k-N}, \vec{I}_N \right) \end{aligned}$$

これより,

$$\begin{aligned}
 M_{i,i+k}^{(+)} N_{i,i+k}^{(-)} &= \text{diag} \left( \vec{I}_{i-1}, X_{i,i+k}^{\frac{1}{2}} \prod_{l=N+1}^{i+k} p_{i,l}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{k-1}, X_{i,i+k}^{\frac{1}{2}} \prod_{l=N+1}^{i+k} p_{i,l}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{2N-i-k} \right) \\
 \therefore M_{i,i+k}^{(-)} U_{i,i+k} M_{i,i+k}^{(+)} N_{i,i+k}^{(-)} &= M_{i,i+k}^{(-)} M_{i,i+k}^{(+)} N_{i,i+k}^{(-)} U_{i,i+k} \\
 &= \text{diag} \left( \vec{I}_{i-1}, \prod_{l=N+1}^{i+k-1} p_{i,l}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{k-1}, \prod_{l=1}^i p_{l,i+k}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{2N-i-k} \right) U_{i,i+k} \\
 &=: N'_{i,i+k} U_{i,i+k}
 \end{aligned}$$

と変形できるので, (3.3.7) の左辺は

$$\begin{aligned}
 \tilde{M}_k \tilde{N}_k^{(-)} &= \prod_{1 \leq i \leq 2N-k} (M_{i,i+k}^{(-)} U_{i,i+k} M_{i,i+k}^{(+)} N_{i,i+k}^{(-)}) N_k^{(-), \perp} \\
 &= \tilde{N}_k^{(-), \perp} \prod_{1 \leq i \leq 2N-k} N'_{i,i+k} \prod_{1 \leq i \leq 2N-k} U_{i,i+k}
 \end{aligned}$$

と変形できる. ここで,  $[N'_{i,i+k}, U_{j,j+k}] = 0$  ( $i \neq j$ ) を用いた. 以上より,

$$\begin{aligned}
 \tilde{N}_k^{(-), \perp} \prod_{1 \leq i \leq 2N-k} N'_{i,i+k} &= \text{diag} \left( \vec{I}_{2N-k}, \overbrace{\prod_{l=N+1}^{2N} p_{2N-k+1,l}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=N+1}^{2N} p_{N,l}^{-\frac{1}{2}}}^{k-N}, \vec{I}_N \right) \\
 &\times \prod_{1 \leq i \leq 2N-k} \text{diag} \left( \vec{I}_{i-1}, \prod_{l=N+1}^{i+k-1} p_{i,l}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{k-1}, \prod_{l=1}^i p_{l,i+k}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{2N-i-k} \right) \\
 &= \text{diag} \left( \overbrace{\prod_{l=N+1}^k p_{1,l}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=N+1}^{2N-1} p_{2N-k,l}^{-\frac{1}{2}}}^{2N-k}, \overbrace{\prod_{k=N+1}^{2N} p_{2N-k+1,k}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{k=N+1}^{2N} p_{N,k}^{-\frac{1}{2}}}^{k-N}, \right. \\
 &\quad \left. \vec{I}_{k-N}, \overbrace{\prod_{l=1}^1 p_{l,k+1}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=1}^{2N-k} p_{l,2N}^{-\frac{1}{2}}}^{2N-k} \right) \\
 &= \tilde{N}_{k-1}^{(-)}
 \end{aligned}$$

となる. よって,

$$\tilde{U}_k = \prod_{1 \leq i \leq 2N-k} U_{i,i+k}$$

と定義することで, 式 (3.3.7) が  $k \geq N$  の場合に成り立つことが示された.

同様にして,  $k \leq N$  の場合も示す.  $\tilde{N}_k^{(-)}$  を

$$\begin{aligned}\tilde{N}_k^{(-)} &= \left( \prod_{N-k+1 \leq i \leq N} N_{i,i+k}^{(-)} \right) \tilde{N}_k^{(-),\perp} \\ N_{i,i+k}^{(-)} &= \text{diag} \left( \vec{I}_{i-1}, \prod_{l=N+1}^{i+k} p_{i,l}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{k-1}, \prod_{l=1}^{i-1} p_{l,i+k}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{2N-i-k} \right) \\ \tilde{N}_k^{(-),\perp} &= \text{diag} \left( \vec{I}_{N+k}, \overbrace{\prod_{l=1}^N p_{l,N+k+1}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=1}^N p_{l,2N}^{-\frac{1}{2}}}^{N-k} \right)\end{aligned}$$

のように分割する. これより

$$\begin{aligned}M_{i,i+k}^{(+)} N_{i,i+k}^{(-)} &= \text{diag} \left( \vec{I}_{i-1}, X_{i,i+k}^{\frac{1}{2}} \prod_{l=N+1}^{i+k} p_{i,l}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{k-1}, X_{i,i+k}^{\frac{1}{2}} \prod_{l=N+1}^{i+k} p_{il}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{2N-i-k} \right) \\ \therefore M_{i,i+k}^{(-)} U_{i,i+k} M_{i,i+k}^{(+)} N_{i,i+k}^{(-)} &= M_{i,i+k}^{(-)} M_{i,i+k}^{(+)} N_{i,i+k}^{(-)} U_{i,i+k} \\ &= \text{diag} \left( \vec{I}_{i-1}, \prod_{l=N+1}^{i+k-1} p_{i,l}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{k-1}, \prod_{l=1}^i p_{l,i+k}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{2N-i-k} \right) U_{i,i+k} \\ &=: N'_{i,i+k} U_{i,i+k}\end{aligned}$$

と変形できる. 以上より, (3.3.7) の左辺は

$$\begin{aligned}\tilde{M}_k \tilde{N}_k^{(-)} &= \prod_{N-k+1 \leq i \leq N} (M_{i,i+k}^{(-)} U_{i,i+k} M_{i,i+k}^{(+)} N_{i,i+k}^{(-)}) N_k^{(-),\perp} \\ &= \tilde{N}_k^{(-),\perp} \prod_{N-k+1 \leq i \leq N} (N'_{i,i+k} U_{i,i+k})\end{aligned}$$

と変形でき, これより

$$\begin{aligned}\tilde{N}_k^{(-),\perp} \prod_{N-k+1 \leq i \leq N} N'_{i,i+k} &= \text{diag} \left( \vec{I}_{N+k}, \overbrace{\prod_{l=1}^N p_{l,N+k+1}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=1}^N p_{l,2N}^{-\frac{1}{2}}}^{N-k} \right) \\ &\times \prod_{N-k+1 \leq i \leq N} \text{diag} \left( \vec{I}_{i-1}, \prod_{l=N+1}^{i+k-1} p_{i,l}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{k-1}, \prod_{l=1}^i p_{l,i+k}^{-\frac{1}{2}}, \vec{I}_{2N-i-k} \right) \\ &= \text{diag} \left( \vec{I}_{N-k}, 1, \overbrace{\prod_{l=N+1}^{N+1} p_{N-k+2,l}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=N+1}^{N+k-1} p_{N,l}^{-\frac{1}{2}}}^k \right) \\ &\quad \overbrace{\prod_{l=1}^{N-k+1} p_{l,N+1}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=1}^N p_{l,N+k}^{-\frac{1}{2}}}^k \overbrace{\prod_{l=1}^N p_{l,N+k+1}^{-\frac{1}{2}}, \dots, \prod_{l=1}^N p_{l,2N}^{-\frac{1}{2}}}^{N-k} \\ &= \tilde{N}_{k-1}^{(-)}\end{aligned}$$



この S 行列は、それぞれの準位が交差する時刻でのユニタリ行列の積で表されていることが分かる。これより、この形式は LZSM 格子模型における断熱瞬間近似と関係付けることが出来ると考えられる。この関係性に関しては、第 3.4 節で議論するが、ここで提案した近似的な S 行列のことを一般化断熱瞬間近似 (Generalized Adiabatic-Impulse Approximation : GAIA) と呼ぶことにする。また、それぞれの擬交差点におけるユニタリ行列  $U_{jk}$  の中に、着目している擬交差点  $t_{jk}$  から十分離れた擬交差点に関する情報、例えば  $\kappa_{lk}$  が含まれていることは、直観的には非自明である (図 3.3.2)。この出自も後の第 3.4 節で議論する。

ここで、近似の精度が良くなる  $\eta$  の大きさについて考える。無次元量  $\tau = \sqrt{v}t$  を導入すると、擬交差点間の時間間隔  $\Delta\tau$  は  $O(\sqrt{1/v})$  となる一方で、LZSM 遷移が起きているとみなせる時間間隔は、式 (3.1.7) より、 $\Delta\tau_{\text{LZSM}} \sim \max\{1, \sqrt{\kappa_{jk}}\}/\sqrt{2\eta}$  である。よって、 $\Delta\tau \gg \Delta\tau_{\text{LZSM}}$  を満たす程度に  $\eta$  が大きければ、各 LZSM 遷移が独立に起きるとみなせることが分かる。以下の例で分かる通り、各 LZSM 遷移が独立とみなせるパラメータ領域において、今回導いた S 行列の近似が数値計算とよく一致することが分かる。しかし、このようなパラメータ領域においても、非局所的な効果が消える訳ではないことに注意する。以下の例では、この非局所的な効果が実際にダイナミクスに反映されていることも確認する。

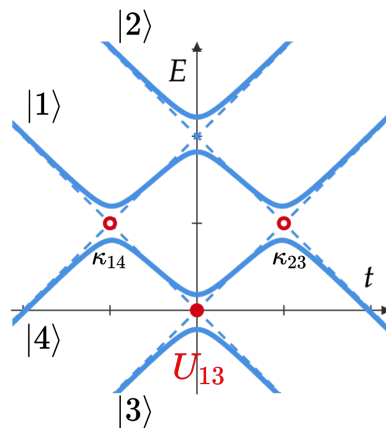


図 3.3.2  $N = 2$  の場合、今回導いたユニタリ行列  $U_{13}$  の行列要素には、 $\kappa_{14}$  や  $\kappa_{23}$  など、着目している擬交差点  $t_{13}$  から離れた箇所にある擬交差点の情報が含まれている。

### 例 3.3.1 2 重量子ドット系

今回導出した S 行列 (3.3.6) の妥当性を評価するために、2 重量子ドット系に対する S 行列 (3.3.6) の結果と数値計算の結果を比較する。2 重量子ドット系においては、電圧に時間依存性を持たせることにより時間に依存するハミルトニアンによって記述される系が実験的に実現されており、そのダイナミクスは近年注目を集めている [94, 95]。そのため、この系のダイナミクスを近似的に記述する手法が様々な提案されている [84, 91, 93]。

ここでは、 $N = 2$ 、つまり 4 準位系を考える。以下では、 $g_{13} = g_{24} = \Delta$ 、 $g_{14} = g_{23} = \gamma$  とする (図

3.3.3). この場合, S 行列は以下のように表される.

$$S = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{p_{14}p_{13}}}{\tilde{\alpha}_{24}^+\tilde{\alpha}_{14}^-\sqrt{p_{23}} + \tilde{\alpha}_{23}^+\tilde{\alpha}_{13}^-\sqrt{p_{14}}} & 0 & -\tilde{\alpha}_{13}^+ & -\sqrt{p_{13}}\tilde{\alpha}_{14}^+ \\ -\tilde{\alpha}_{23}^+\tilde{\alpha}_{24}^+\tilde{\alpha}_{14}^- - \tilde{\alpha}_{13}^-\sqrt{p_{23}p_{14}} & \sqrt{p_{23}p_{24}} & -\tilde{\alpha}_{23}^+\sqrt{p_{13}} & -\tilde{\alpha}_{24}^+\sqrt{p_{23}p_{14}} - \tilde{\alpha}_{23}^+\tilde{\alpha}_{13}^-\tilde{\alpha}_{14}^+ \\ -\sqrt{p_{24}}\tilde{\alpha}_{14}^- & -\tilde{\alpha}_{24}^- & \sqrt{p_{23}p_{13}} & \tilde{\alpha}_{24}^+\tilde{\alpha}_{23}^-\sqrt{p_{14}} + \tilde{\alpha}_{13}^+\tilde{\alpha}_{14}^+\sqrt{p_{23}} \\ & & 0 & \sqrt{p_{24}p_{14}} \end{pmatrix} \quad (3.3.10)$$

この S 行列 (3.3.10) で表される近似的なダイナミクスと, Python のライブラリである QuTiP [96, 97] を用いた数値計算との比較を行う. まず, 各々の LZSM 遷移が独立とみなせるようなパラメタ領域において, 今回求めた S 行列の結果が数値計算とよく一致することを確認した (図 3.3.4(a)). 図 3.3.4(a) において, 背景が薄く赤で塗られている領域は, 各々の LZSM 遷移が独立とみなせない領域  $\sqrt{\eta/va} \gg \sqrt{2} \max_{jk} \{1, \sqrt{\kappa_{jk}}\}$  に対応している. この領域の外側では, 式 (3.3.10) によって得られた結果と数値計算がよく一致していることが分かる.

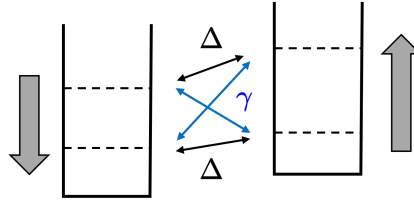


図 3.3.3 考えている 2 重量子ドット系の模式図. 2 つの量子ドットそれぞれに 2 つの準位 (破線) が存在する. それぞれの準位が, 異なる量子ドットに存在する準位と結合  $\Delta, \gamma$  を持つ. 矢印の向きは, 時間が経つにつれてエネルギーが増減する方向を表し, これはハミルトニアンに対角成分に対応する.

次に, 非局所的な効果の遷移確率への寄与について考える. このために, 十分過去の時刻における状態が  $|4\rangle$  (第 1 励起状態) であり, 十分未来の時刻に  $|3\rangle$  (第 2 励起状態) を測定する確率である  $P_{34} = |S_{34}|^2$  を計算すると,

$$P_{34} = P_a + P_b + 2\sqrt{P_a P_b} \cos\left(2 \arg\left(\frac{\Gamma(1 - i\kappa_\gamma)}{\Gamma(1 - i\kappa_\Delta)}\right) + \frac{\eta a^2}{2v} + 2 \log\left(\frac{\eta a^2}{2v}\right)^{-\kappa_\Delta + \kappa_\gamma}\right) \quad (3.3.11)$$

を得る. ここで,  $P_a := p_{14}(1 - p_{24})(1 - p_{23})$ ,  $P_b := (1 - p_{14})(1 - p_{13})p_{23}$ ,  $\kappa_\Delta := \kappa_{13} = \kappa_{24}$ ,  $\kappa_\gamma := \kappa_{14} = \kappa_{23}$  とした.  $P_a, P_b$  は図 3.3.5 中に記された経路の遷移確率に対応しており, 第 3 項はそれらの経路の干渉効果に対応している. 非局所性を表す項はこの干渉項に寄与している. 図 3.3.4(b) において, 灰色の破線が (3.3.11) の零点を表している. この図 3.3.4(b) において, (3.3.11) の零点と数値計算によって求められた遷移確率の零点がよく一致していることがわかる. この結果は, LZSM 遷移が各々独立とみなせる領域においても, 非局所的な効果が本質的な寄与を示していることを意味している.

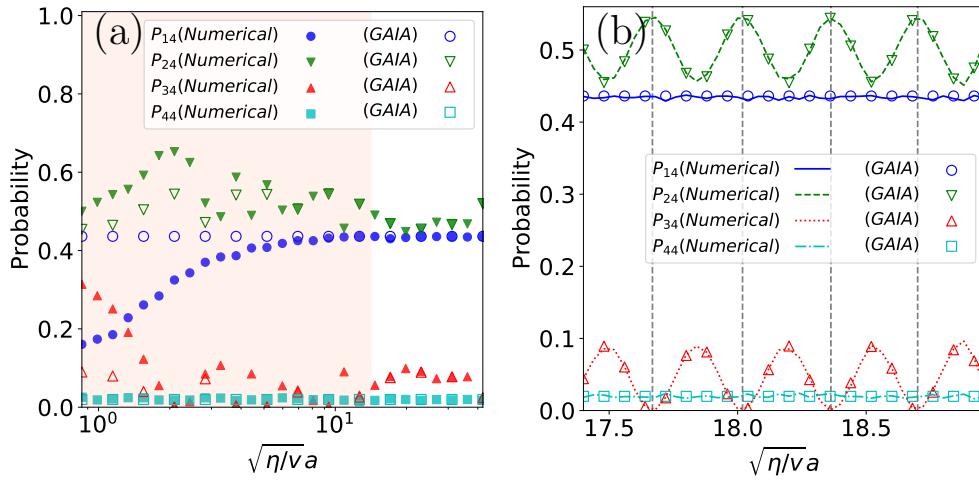


図 3.3.4 (a) 初期状態を  $|4\rangle$  としたときの遷移確率の数値計算（塗りつぶされた点）と式 (3.3.10) における  $P_{j4} = |S_{j4}|^2$  の結果（白抜きの点）のプロット．パラメータは  $\Delta/\sqrt{v} = 0.5$ ,  $\gamma/\sqrt{v} = 1.0$  とした．背景が薄い赤色で塗られたパラメータ領域は LZSM 遷移が独立とみなせない領域  $\sqrt{\eta/va} < 10\sqrt{2}\gamma/\sqrt{v}$  を表している．LZSM 遷移が独立とみなせるパラメータ領域では，数値計算と S 行列の解析的な結果がよく一致することが分かる．(b) (a) の一部を拡大した図．灰色の破線は式 (3.3.11) における  $P_{34}$  の零点を表している．数値計算には Python のライブラリである QuTiP [96, 97] を用いた．

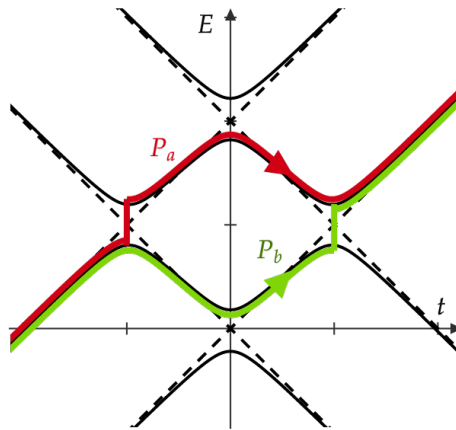


図 3.3.5  $P_a$  と  $P_b$  に対応する経路．式 (3.3.11) の 3 項目がこれらの経路の干渉を表している．

### 3.4 断熱瞬間近似との関係

この節では，求めた S 行列 (3.3.6) と断熱瞬間近似との関係について調べ，この関係性を応用することにより，多準位系における断熱瞬間近似である一般化断熱近似を提案する．第 3.1.2, 3.1.3 節で述べた通り，断熱瞬間近似には 2 通りの定式化，つまり時間に依らない状態  $|i\rangle$  を基底として用いたもの [98, 99]



と、ハミルトニアンの瞬間固有状態  $|\epsilon_i(t)\rangle$  を基底として用いたもの [100, 101] の二つがある。どちらの手法においても、断熱的な時間発展を表す箇所で瞬間固有値やその時間積分が必要となり、厳密対角化が必要となることに注意が必要である。ここでは、時間に依らない状態を基底として用いた定式化について考える。簡単のため、これ以降  $a_n = (n-1)a$  ( $1 \leq n \leq N$ )、 $g_{jk} \in \mathbb{R}$  とする。このとき、断熱瞬間近似 (3.1.7) を LZSM 格子模型に適用すると、次の S 行列が得られる [98]。

$$\begin{aligned}
 S_{\text{AI}} &= U_{\text{ad},1} \tilde{V}_1 \cdots \tilde{V}_{2N-2} U_{\text{ad},2N-1} \tilde{V}_{2N-1} U_{\text{ad},2N} \quad (3.4.1) \\
 \tilde{V}_l &:= \prod_{\substack{k-j=l \\ 1 \leq j \leq N, N+1 \leq k \leq 2N}} V_{jk} \\
 V_{jk} &:= \begin{pmatrix} I_{j-1} & & & & \\ & p_{jk}^{\frac{1}{2}} & \cdots & & -\hat{\alpha}_{jk}^+ \\ & \vdots & I_{k-j-1} & \vdots & \\ & -\hat{\alpha}_{jk}^- & \cdots & p_{jk}^{\frac{1}{2}} & \\ & & & & I_{2N-k} \end{pmatrix} \\
 U_{\text{ad},k} &:= e^{-i \int_{t_k}^{t_{k-1}} dt \text{diag}(E_1(t), E_2(t), \dots, E_{2N}(t))} \\
 \hat{\alpha}_{jk}^{\pm} &:= \pm(1-p_{jk})^{\frac{1}{2}} e^{\pm i \phi_{\text{St},jk}} \\
 \phi_{\text{St},jk} &:= \frac{\pi}{4} + \kappa_{jk} (\ln \kappa_{jk} - 1) + \arg \Gamma(1 - i\kappa_{jk})
 \end{aligned}$$

ここで、 $t_k$  は  $(2N-k)$  回目の交差する時刻を表す。つまり、 $t_{2N} < t_{2N-1} < \cdots < t_1$  である。 $E_j(t)$  は、ハミルトニアンの  $j$  番目の対角要素  $H_{jj}(t)$  に関係した量であり、時刻  $[t_k, t_{k-1}]$  の間の瞬間固有値  $\epsilon_n(t)$  を表す (図 3.4.1)。具体的には、 $1 \leq j \leq N$  に対して、

$$E_j(t) := \begin{cases} \epsilon_{N+j}(t) & t \leq t_{2N-j} \\ \epsilon_{N-k+2j-1}(t) & t_{2N-k} \leq t \leq t_{2N-k-1} \quad (k = j, \dots, j+N-2) \\ \epsilon_j(t) & t_{N+j-1} < t \end{cases}$$

であり、 $N+1 \leq j \leq 2N$  に対して

$$E_j(t) := \begin{cases} \epsilon_{j-N}(t) & t \leq t_{j-1} \\ \epsilon_{2j-l-N}(t) & t_l \leq t \leq t_{l-1} \quad (l = j+1-N, \dots, j-1) \\ \epsilon_j(t) & t_{l-N} < t \end{cases}$$

である。第 3.1.2 節で述べた通り、行列  $V_{jk}$  は非断熱的な遷移を表す一方で、 $U_{\text{ad},j}$  は断熱的な時間発展を表す。

S 行列 (3.4.1) の各成分は、複数の確率振幅の和として表されている。それぞれの確率振幅は、図 3.4.1 のように、エネルギー準位上の経路に対応している。例えば、経路を (初期時刻, 終時刻; エネルギー準位) の順番で  $(t_I, t_F; E_j)$  のように指定すると、一つの経路は

$$(t_I, t_{2N-1}; E_{j_1}) \rightarrow (t_{2N-1}, t_{2N-2}; E_{j_2}) \rightarrow \cdots \rightarrow (t_1, t_F; E_{j_{2N}})$$

のように表すことができる。ここで、 $t_I$  はそれぞれいかなる擬交差点よりも過去にある十分小さい時刻とし、一方  $t_F$  はいかなる擬交差点よりも未来にある十分大きい時刻とした。この経路に対応する遷移振幅

は、式 (3.4.1) より、

$$e^{-i \int_{t_1}^{t_F} dt E_{j_{2N}}(t)} \dots (V_{j_2, j_3})_{j_3, j_2} e^{-i \int_{t_{2N-1}}^{t_{2N-2}} dt E_{j_2}(t)} (V_{j_1, j_2})_{j_2, j_1} e^{-i \int_{t_1}^{t_{2N-1}} dt E_{j_1}(t)} \quad (3.4.2)$$

と表される。ここで、 $(V_{j,k})_{n,m}$  は、行列  $V_{j,k}$  の  $(n,m)$  成分を表すとする。ある擬交差点  $t_{2N-k-1}$  前後に着目すると、この確率振幅 (3.4.2) の一部は以下のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} & e^{-i \int_{t_{2N-k-1}}^{t_{2N-k-2}} dt E_{j_{k+2}}(t)} (V_{j_{k+1}, j_{k+2}})_{j_{k+2}, j_{k+1}} e^{-i \int_{t_{2N-k}}^{t_{2N-k-1}} dt E_{j_{k+1}}(t)} \\ &= e^{-i \int_{t_R}^{t_{2N-k-2}} dt E_{j_{k+2}}(t)} \left( (V_{j_{k+1}, j_{k+2}})_{j_{k+2}, j_{k+1}} e^{-i \int_{t_R}^{t_{2N-k-1}} dt (E_{j_{k+1}}(t) - E_{j_{k+2}}(t))} \right) e^{-i \int_{t_{2N-k}}^{t_R} dt E_{j_{k+1}}(t)} \end{aligned}$$

ここで、 $t_R$  は任意の値をとれる。これを用いると、S 行列 (3.4.1) は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} S_{\text{AI}} &= U'_{\text{ad},1} \tilde{V}'_1 \dots \tilde{V}'_{2N-2} \tilde{V}'_{2N-1} U'_{\text{ad},2N} \quad (3.4.3) \\ \tilde{V}'_l &:= \prod_{\substack{k-j=l \\ 1 \leq j \leq N, N+1 \leq k \leq 2N}} V_{jk}'^{(l)} \\ V_{jk}'^{(l)} &:= \begin{pmatrix} I_{j-1} & & & \\ & p_{jk}^{\frac{1}{2}} & \dots & -\hat{\alpha}_{jk}'^{(l)+} \\ & \vdots & I_{k-j-1} & \vdots \\ & -\hat{\alpha}_{jk}'^{(l)-} & \dots & p_{jk}^{\frac{1}{2}} \\ & & & I_{2N-k} \end{pmatrix} \\ \hat{\alpha}_{jk}'^{(l)\pm} &:= \pm(1 - p_{jk})^{\frac{1}{2}} e^{\pm i \phi_{\text{St},jk}'^{(l)}} \\ \phi_{\text{St},jk}'^{(l)} &:= \frac{\pi}{4} + \kappa_{jk} (\ln \kappa_{jk} - 1) + \arg \Gamma(1 - i \kappa_{jk}) + \int_{t_R}^{t_l} dt (E_j(t) - E_k(t)) \\ U'_{\text{ad},1} &:= e^{-i \int_{t_R}^{t_F} dt \text{diag}(E_1(t), E_2(t), \dots, E_{2N}(t))} \\ U'_{\text{ad},2N} &:= e^{-i \int_{t_1}^{t_R} dt \text{diag}(E_1(t), E_2(t), \dots, E_{2N}(t))} \end{aligned}$$

つまり、S 行列 (3.4.1) に含まれる断熱的な時間発展  $U_{\text{ad},j}$  の寄与を、非断熱遷移を表す  $V_{jk}$  の非対角成分の位相である Stokes 位相に押し込めることができる。

ここで、 $t_R = 0$  とすると、S 行列 (3.4.3) は、前節で求めた S 行列 (3.3.6) と類似していることが分かる。実際、これらを比較すると、

$$S = \tilde{U}_1 \dots \tilde{U}_{2N-2} \tilde{U}_{2N-1} \leftrightarrow S_{\text{AI}} = U'_{\text{ad},1} \tilde{V}'_1 \dots \tilde{V}'_{2N-2} \tilde{V}'_{2N-1} U'_{\text{ad},2N}$$

となる。これより、初期状態が  $|j\rangle$  と  $|k\rangle$  の重ね合わせの状態等を考えると、S 行列 (3.3.6) は正確な時間発展を表さず、式 (3.4.3) の  $U'_{\text{ad},2N}$  と  $U'_{\text{ad},1}$  の寄与を考慮する必要があることが推測できる。この問題は、S 行列 (3.3.6) が  $t_I \rightarrow -\infty$  から  $t_F \rightarrow \infty$  での遷移振幅を与えると考えていた点に起因する。十分小さい時刻  $t_I$  と、十分大きい時刻  $t_F$  での遷移振幅を議論する際には、規格化因子  $N^{\pm, (j)}$  に位相が付く。

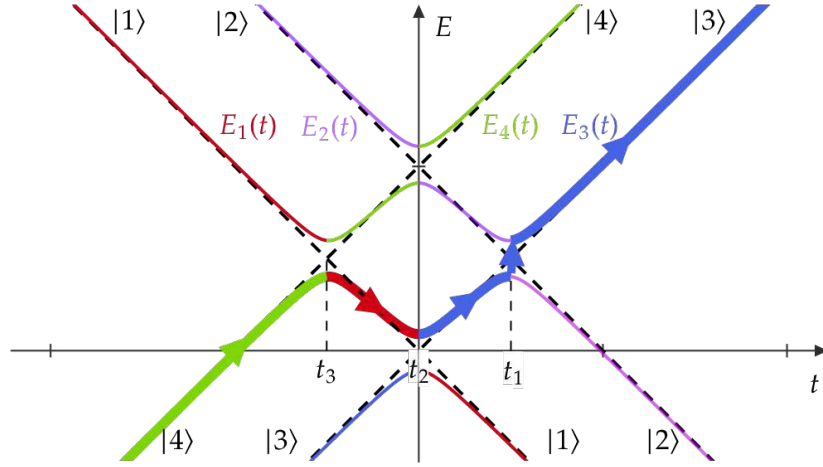


図 3.4.1 遷移振幅と経路との対応. 太線が  $(t_I, t_3; E_4) \rightarrow (t_3, t_2; E_1) \rightarrow (t_2, t_1; E_3) \rightarrow (t_1, t_F; E_3)$  の経路を表している. 瞬間断熱近似では, 時間発展は  $t \neq t_j$  の時間では断熱的とみなされる. もし LZSM 遷移が時刻  $t = t_j$  で起こると, LZSM 遷移確率の寄与を確率振幅に掛ける必要がある. 一方, もし  $t = t_j$  で LZSM 遷移が起きなかった場合, 遷移確率に  $\hat{\alpha}^\pm$  を掛ける必要がある.

Appendix F より, 位相を考慮した際の規格化因子は

$$\begin{aligned}
 N^{+, (j)} &:= \left\langle j \left| \psi^{(j)}(t_F) \right. \right\rangle^{-1} \\
 &= e^{i\eta \int_{t_R}^{t_F} dt' \rho_j(t')} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^{2N} \exp \left( i \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{kj}} \log(\lambda_{jk}(t_F - t_{jk})) \right) \\
 N^{-, (j)} &:= \left\langle j \left| \psi^{(j)}(t_I) \right. \right\rangle^{-1} \\
 &= e^{i\eta \int_{t_R}^{t_I} dt' \rho_j(t')} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^{2N} \exp \left( i \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{kj}} \log(\lambda_{jk}(t_I - t_{jk})) \right)
 \end{aligned}$$

と与えられる. この項を考慮すると, S 行列 (3.3.6) は次のように表される.

$$\begin{aligned}
 S_{ij} &= (\tilde{N}^{+, (i)})^{-1} \left( \tilde{U}_1 \cdots \tilde{U}_{2N-2} \tilde{U}_{2N-1} \right)_{ij} \tilde{N}^{-, (j)} \\
 \tilde{N}^{+, (j)} &:= e^{i\eta \int_{t_R}^{t_F} dt' \rho_j(t')} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^{2N} \exp \left( i \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{kj}} \log |\lambda_{jk}(t_F - t_{jk})| \right) \\
 \tilde{N}^{-, (j)} &:= e^{i\eta \int_{t_R}^{t_I} dt' \rho_j(t')} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^{2N} \exp \left( i \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{kj}} \log |\lambda_{jk}(t_I - t_{jk})| \right)
 \end{aligned}$$

後述するように, このようにして得られた行列  $\tilde{N}^\pm$  は,  $U'_{\text{ad},1}, U'_{\text{ad},2N}$  を  $\eta$  で摂動展開したものと対応していることが分かる.

次に,  $U_{jk}$  や  $\tilde{V}_{jk}^{(l)}$  の非対角成分の位相について考えてみる. これらの値も, それぞれの近似で以下の

ように異なる.

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_{jk} &= \frac{\pi}{4} + \arg \Gamma(1 - i\kappa_{jk}) + \log\left((2\eta)^{i\kappa_{jk}} \tilde{\beta}_{jk}\right) \\ \leftrightarrow \phi_{\text{St},jk}^{(l)} &= \frac{\pi}{4} + \kappa_{jk}(\ln \kappa_{jk} - 1) + \arg \Gamma(1 - i\kappa_{jk}) + \int_{t_R}^{t_l} dt (E_j(t) - E_k(t))\end{aligned}$$

ここで,  $t_R = 0$  とし,  $\phi_{\text{St},jk}^{(l)}$  に含まれる  $E_j(t) - E_k(t)$  の積分を  $\eta$  で摂動展開すると

$$\begin{aligned}\int_0^{t_l} dt (E_j(t) - E_k(t)) &= \int_0^{t_l} dt (H_{jj}(t) - H_{kk}(t)) \\ &+ \int_0^{t_l} dt \left( \sum_{n=1}^N \frac{-\eta g_{nk}^2}{H_{kk}(t) - H_{nn}(t)} + \sum_{m=N+1}^{2N} \frac{\eta g_{jm}^2}{H_{jj}(t) - H_{mm}(t)} \right) \\ &+ O(\eta^{-1})\end{aligned}$$

を得る. ここで,  $H_{jj}(t) \propto \eta$  であることを用いた. しかし,  $H_{nn}(t) - H_{mm}(t) = -2\eta\nu(t - t_{m-n})$  ( $1 \leq n \leq N, N+1 \leq m \leq 2N$ ) であることから, この積分は擬交差点で発散する. このことから, 前節で求めた方法を適用すると, 断熱瞬間近似において現れる発散を回避できていることが分かる. つまり, S 行列 (3.3.6) を求めた方法は, 瞬間固有値の情報を必要とせず, 断熱瞬間近似を多準位系に拡張したものと考えられる.

また, S 行列 (3.3.6) は, 完全 WKB 解析において得られた S 行列 (3.3.2) において規格化行列  $\tilde{N}^\pm$  を無視し, さらに  $\tilde{\beta}_{jk}$  に含まれる  $\log$  の真数に対し絶対値をつけ, 実数とみなすことで得ることができる. このような変形は任意の模型に対し可能であると考えられる. 以上の議論より, 次の手続きによって遷移振幅を求める近似手法を一般化断熱瞬間近似 [80] と呼ぶ.

0.  $N$  準位のハミルトニアンが

$$\begin{aligned}H(t) &= \eta H_0(t) + \sqrt{\eta} H_{\frac{1}{2}} \\ H_0(t) &= \text{diag}(\rho_1(t), \dots, \rho_N(t)) \\ \left(H_{\frac{1}{2}}\right)_{ij} &= \begin{cases} g_{ij} & i < j \\ g_{ji}^* & i > j \\ 0 & i = j \end{cases}\end{aligned}$$

と表せており, 時刻  $t_{ij,m}$  に起きる LZSM 遷移が独立とみなせる程度に  $\eta$  が大きいと仮定する. ここで,  $t_{ij,m}$  は  $i$  番目の準位と  $j$  番目の準位が  $m$  回目交わる時刻である.

1. 次の行列を求める.

$$\begin{aligned}\tilde{N}^\pm &= \text{diag}(\tilde{N}^{\pm,(1)}, \dots, \tilde{N}^{\pm,(N)}) \\ \tilde{N}^{-,(j)} &= e^{-i\eta \int_{t_I}^{t_R} dt' \rho_j(t')} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^N \prod_{m=1}^{F_{jk}} \exp\left(-i \frac{|g_{jk}|^2}{\lambda_{kj,m}} \log |\lambda_{jk,m}(t_I - t_{jk,m})|\right) \\ \tilde{N}^{+,(j)} &= e^{-i\eta \int_{t_R}^{t_F} dt' \rho_j(t')} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^N \prod_{m=1}^{F_{jk}} \exp\left(-i \frac{|g_{jk}|^2}{\lambda_{kj,m}} \log |\lambda_{jk,m}(t_F - t_{jk,m})|\right)\end{aligned}$$

ここで,  $t_I, t_F$  はいかなる擬交差点よりも過去の初期時刻, かなる擬交差点よりも未来の終時刻とし,  $t_R$  は任意の時刻とする. また,  $F_{jk}$  は  $\rho_j(t)$  と  $\rho_k(t)$  が交差する回数を表している. また,

$$\lambda_{jk,m} = \left. \frac{d}{dt} (\rho_k(t) - \rho_j(t)) \right|_{t=t_{jk,m}}$$

と定義した.

2.  $j$  番目の準位と  $k$  番目の準位が  $n$  回目に交差する際のユニタリ行列  $U_{jk,n}$  を以下のようにして求める.

$$U_{jk,n} = \begin{pmatrix} I_{j-1} & & & & \\ & \sqrt{p_{jk,n}} & \cdots & & -\tilde{\alpha}_{jk,n}^+ \\ & \vdots & & I_{k-j-1} & \vdots \\ & -\tilde{\alpha}_{jk,n}^- & \cdots & & \sqrt{p_{jk,n}} \\ & & & & I_{2N-k} \end{pmatrix}$$

$$\tilde{\alpha}_{jk,n}^\pm = \pm \operatorname{sgn}(\lambda_{jk,n}) \sqrt{1 - p_{jk,n}} e^{\pm \operatorname{sgn}(\lambda_{jk,n}) i \theta_{jk,n}}, \quad p_{jk,n} = e^{-2\pi \kappa_{jk,n}}, \quad \kappa_{jk,n} = \frac{|g_{jk}|^2}{|\lambda_{jk,n}|}$$

$$\theta_{jk,n} = \frac{\pi}{4} + \arg \Gamma(1 - i \kappa_{jk,n}) + \arg g_{jk} + \zeta_{jk,n} + \log \left( \frac{\eta}{|\lambda_{jk,n}|} \right)^{\kappa_{jk,n}} - \Theta_{jk,n}$$

$$\begin{aligned} \Theta_{jk,n} = & \log \left( \prod_{\substack{m=1 \\ (m \neq n)}}^{F_{jk}} |\lambda_{jk,m}(t_{jk,n} - t_{jk,m})|^{2\kappa_{jk,n}} \right. \\ & \times \left. \prod_{\substack{m=1 \\ (m \neq n)}}^{F_{jk}} \left( \prod_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^N |\lambda_{lk,m}(t_{jk,n} - t_{lk,m})|^{\kappa_{lk,m}} \prod_{\substack{l=1 \\ (l \neq k)}}^N |\lambda_{jl,m}(t_{jk,n} - t_{jl,m})|^{\kappa_{jl,m}} \right) \right) \\ \zeta_{jk,n} = & \eta \operatorname{sgn}(\lambda_{jk,n}) \int_0^{t_{jk,n}} dt (\rho_j(t) - \rho_k(t)) \end{aligned}$$

3. S 行列を

$$S = \tilde{N}^+ \left( \overleftarrow{\prod} U_{jk,n} \right) \tilde{N}^-$$

と定義する. ここで,  $\overleftarrow{\prod}$  は, 時間順序積のように, 過去の擬交差点に対応するユニタリ行列  $U_{jk,n}$  が右に来るという意味で導入した.

## 3.5 多準位 Landau–Zener–Stückelbelg–Majorana 干渉模型

### 3.5.1 一般化断熱瞬間近似を用いた S 行列の導出

この節では, 多準位 Landau–Zener–Stückelberg–Majorana(LZSM) 干渉模型という, 2 準位系での LZSM 干渉模型 (半古典 Rabi 模型) [100] の多準位系への拡張を考える. この模型は, 例えば, 駆動ス

ピン系と単一モードのボソンが結合している光子補助 LZSM 模型を含んでいる [83, 102–107]. この模型は次のハミルトニアンによって与えられる.

$$\begin{aligned}
 H(t) &= \eta A(t) + \sqrt{\eta} B \\
 A(t) &= \text{diag}(-\sin(vt) + a_1, \dots, -\sin(vt) + a_N, \sin(vt) + a_1, \dots, \sin(vt) + a_N) \\
 B &= \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & g_{1,N+1} & \cdots & g_{1,2N} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & g_{N,N+1} & \cdots & g_{N,2N} \\ g_{1,N+1}^* & \cdots & g_{N,N+1}^* & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{1,2N}^* & \cdots & g_{N,2N}^* & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

ここではまず、実条件 (Appendix F) を満たしている状況、つまり全てのエネルギー準位の反発が擬交差点とみなせる状況を考える [64, 66]. この場合、次の関係が成り立つ.

$$\begin{aligned}
 \frac{\eta}{H_{jj}(t) - H_{kk}(t)} &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\lambda_{jk,m}(t - t_{jk,m})} \quad (3.5.1) \\
 \lambda_{jk,m} &= \frac{1}{\eta} \frac{d}{dt} (H_{kk}(t) - H_{jj}(t)) \Big|_{t=t_{jk,m}}
 \end{aligned}$$

ここで、 $t_{jk,m}$  は  $j$  番目の準位と  $k$  番目の準位が  $m$  回目に交差する時刻を表す. ここで、 $\lambda_{jk,m}$  に正値性を課していないことに注意する. 以降、 $1 \leq j \leq N$ ,  $N+1 \leq k \leq 2N$  のように固定し、 $g_{jk} \neq 0$  のとき  $\lambda_{jk,m} \neq 0$  という条件を課す. 式 (3.5.1) の具体的な値は、 $|a_j - a_k| < 2$  ( $1 \leq j \leq N, N+1 \leq k \leq 2N$ ) を満たしている場合、

$$\begin{aligned}
 &\frac{\eta}{H_{jj}(t) - H_{kk}(t)} \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( (-1)^n 2v \sqrt{1 - \frac{(a_j - a_k)^2}{4}} \left( t + \frac{(-1)^n \arcsin\left(\frac{a_j - a_k}{2}\right) + (n-1)\pi}{v} \right) \right)^{-1}
 \end{aligned}$$

と求まる. これより確かに実条件を満たしていることが分かる.

瞬間固有状態は時刻  $t = \pm\infty$  の極限では定義されないので、先行研究 [64, 66] で用いられていた S 行列の計算はできない. 形式的には  $M_{jk}$  を計算することはできるが、規格化行列  $\tilde{N}^\pm$  が計算できない. 一方前節で、 $M_{jk}$  をユニタリ行列  $U_{jk}$  に置き換え、規格化行列  $\tilde{N}^\pm$  を無視することで同様の S 行列を得られることを計算した. よって、ここでも  $|j\rangle$  と  $|k\rangle$  が  $n$  回目の交差をする箇所でのユニタリ行列  $U_{jk,n}$  に

よって S 行列が得られると考える。このユニタリ行列  $U_{jk,n}$  は

$$U_{jk,n} = \begin{pmatrix} I_{j-1} & & & & \\ & \sqrt{p_{jk,n}} & \cdots & & -\tilde{\alpha}_{jk,n}^+ \\ & \vdots & I_{k-j-1} & & \vdots \\ & -\tilde{\alpha}_{jk,n}^- & \cdots & & \sqrt{p_{jk,n}} \\ & & & & I_{2N-k} \end{pmatrix}$$

$$\tilde{\alpha}_{jk,n}^\pm = \pm \operatorname{sgn}(\lambda_{jk,n}) \sqrt{1 - p_{jk,n}} e^{\pm \operatorname{sgn}(\lambda_{jk,n}) i \theta_{jk,n}}, \quad p_{jk,n} = e^{-2\pi \kappa_{jk,n}}, \quad \kappa_{jk,n} = \frac{|g_{jk}|^2}{|\lambda_{jk,n}|}$$

$$\theta_{jk,n} = \frac{\pi}{4} + \arg \Gamma(1 - i \kappa_{jk,n}) + \arg g_{jk} + \zeta_{jk,n} + \log \left( \frac{\eta}{|\lambda_{jk,n}|} \right)^{\kappa_{jk,n}} - \Theta_{jk,n}$$

$$\Theta_{jk,n} = \log \left( \prod_{\substack{m=-\infty \\ (m \neq n)}}^{\infty} |\lambda_{jk,m}(t_{jk,n} - t_{jk,m})|^{2\kappa_{jk,n}} \right. \\ \left. \times \prod_{m=-\infty}^{\infty} \left( \prod_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^N |\lambda_{lk,m}(t_{jk,n} - t_{lk,m})|^{\kappa_{lk,m}} \prod_{\substack{l=N+1 \\ (l \neq k)}}^{2N} |\lambda_{jl,m}(t_{jk,n} - t_{jl,m})|^{\kappa_{jl,m}} \right) \right)$$

$$\zeta_{jk,n} = \operatorname{sgn}(\lambda_{jk,n}) \int^{t_{(jk),n}} (H_{jj}(t, \eta) - H_{kk}(t, \eta)) dt.$$

と表せる。ここで、 $\Theta_{jk,n}$  は非局所的な項を含んでいるため無限乗積となっているが、

$$\prod_{m=-\infty}^{\infty} |\lambda_{lk,m}(t_{jk,n} - t_{lk,m})|^{\kappa_{lk,m}} = \left| \frac{\sin\left(\frac{v(t_{jk,n} - t_{lk,0})}{2}\right)}{\sin\left(\frac{v(t_{jk,n} - t_{lk,1})}{2}\right)} \right|^{\kappa_{lk,0}}$$

や

$$\prod_{\substack{m=-\infty \\ (m \neq n)}}^{\infty} |\lambda_{jk,m}(t_{jk,n} - t_{jk,m})|^{2\kappa_{jk,n}} = \left| \frac{v}{2\lambda_{jk,n} \sin\left(\frac{v(t_{jk,n} - t_{jk,n+1})}{2}\right)} \right|^{2\kappa_{jk,n}}$$

といった関係式を用いると、以下のように簡単な形に書き直すことができる。

$$\Theta_{jk,n} = \log \left( \left| \frac{v}{2\lambda_{jk,n} \sin\left(\frac{v(t_{jk,n} - t_{jk,n+1})}{2}\right)} \right|^{2\kappa_{jk,n}} \right. \\ \left. \times \prod_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^N \left| \tan\left(\frac{v(t_{jk,n} - t_{lk,0})}{2}\right) \right|^{\kappa_{lk,0}} \prod_{\substack{l=N+1 \\ (l \neq k)}}^{2N} \left| \tan\left(\frac{v(t_{jk,n} - t_{jl,0})}{2}\right) \right|^{\kappa_{jl,0}} \right)$$

## 3.5.2 例：駆動横磁場 Rabi 模型

この節では、具体例として一つの駆動されたスピンの単一モードのボソンと結合している駆動横磁場 Rabi 模型を考える [83, 102–107]. ハミルトニアンは

$$H(t) = -\eta \sin(vt) \sigma_z + \sqrt{\eta} \Delta \sigma_x + \eta \Omega b^\dagger b + \sqrt{\eta} \gamma \sigma_x (b + b^\dagger) \quad (3.5.2)$$

$$=: \eta A(t) + \sqrt{\eta} B$$

$$A(t) = \text{diag}(-\sin(vt), -\sin(vt) + \Omega, \dots, \sin(vt), \sin(vt) + \Omega, \dots)$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & \Delta & \gamma & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \gamma & \Delta & \sqrt{2}\gamma & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sqrt{2}\gamma & \Delta & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \Delta & \gamma & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \gamma & \Delta & \sqrt{2}\gamma & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2}\gamma & \Delta & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

のように表される。ここで、行列表示の際の基底は

$$\{|\uparrow, 0\rangle, |\uparrow, 1\rangle, \dots, |\downarrow, 0\rangle, |\downarrow, 1\rangle, \dots\}$$

とした。図 3.5.1 にハミルトニアンの瞬間固有値を示した。以下の数値計算では、ボソンの Fock 空間の次元を  $N = 5$  と制限する。ハミルトニアンの非対角成分は非有界なので、常に一般化断熱瞬間近似の条件  $\Delta \tau \gg \Delta \tau_{\text{LZSM}}$  を破る。しかし、この条件を破る擬交差点における遷移振幅が 0 である限り、この近似は妥当であると考えられる。

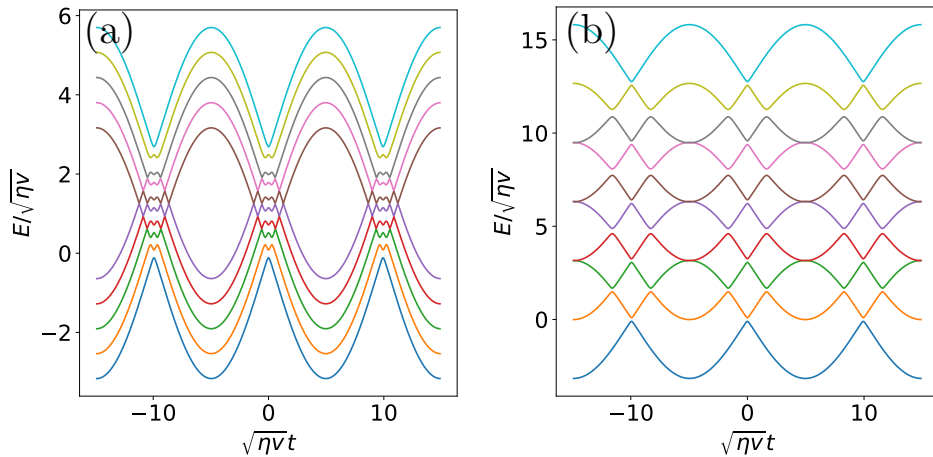


図 3.5.1 ハミルトニアン (3.5.2) の瞬間固有値。パラメータは  $\gamma = 0.1\sqrt{v}$ ,  $\Delta = 0.1\sqrt{v}$ ,  $\eta = 10v$  とし、(a) では  $\sqrt{\eta/v}\Omega = 0.2$ , (b) では  $\sqrt{\eta/v}\Omega = 1.0$  とした。ボソンの Fock 空間の次元は 5 とした。 $g_{j, N+j+3} = 0$  より、(b) において瞬間固有値が接している時刻では遷移が起きない。



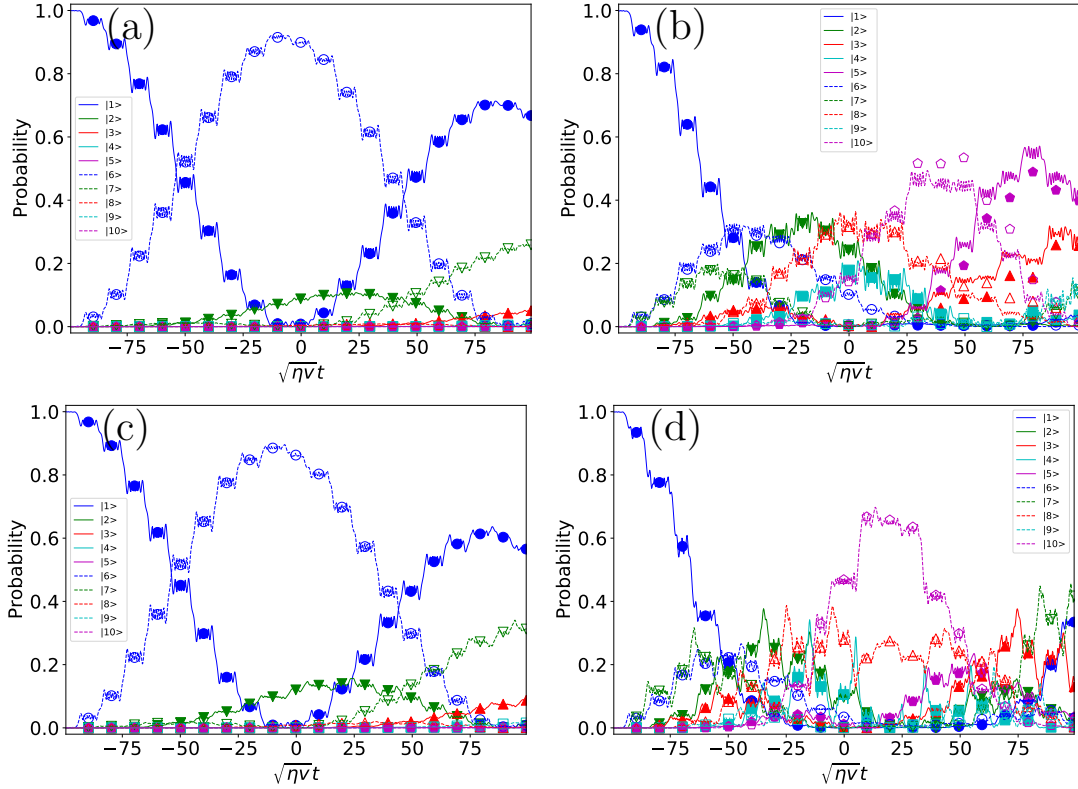


図 3.5.2 遷移確率の時間依存性のプロット．パラメータは (a)  $\sqrt{\eta/v}\Omega = 0.2, \gamma = 0.02\sqrt{v}$ , (b)  $\sqrt{\eta/v}\Omega = 0.2, \gamma = 0.1\sqrt{v}$ , (c)  $\sqrt{\eta/v}\Omega = 1.0, \gamma = 0.02\sqrt{v}$ , (d)  $\sqrt{\eta/v}\Omega = 1.0, \gamma = 0.1\sqrt{v}$  とした．実線や破線は数値計算の結果を表し，白抜きや色付きの点は一般化断熱瞬間近似の結果を表している．

また，もう一つの満たすべき条件として実条件 (Appendix F) がある．この模型では， $|j - k|\Omega < 2$  を満たす準位  $|\uparrow, j\rangle, |\downarrow, k\rangle$  の擬交差点に関しては実条件を満たす．また， $|j - k|\Omega < 2$  を満たしていない場合でも， $\langle \uparrow, j | H | \downarrow, k \rangle = 0$  を満たしていれば，擬交差点は生まれず，一般化断熱瞬間近似は適用可能である (図 3.5.1(b))．

ボソンの Fock 空間を有限次元で打ち切っているので，有限回の振動の範囲内で，つまり有限時間においてのみ近似は妥当であると考えられる．以下では，20 回振動した場合の数値計算と一般化断熱瞬間近似の結果の比較を行った (図 3.5.2)．初期状態は初期ハミルトニアン基底状態である  $|1\rangle$  とした．

最初に  $\sqrt{\eta/v}\Omega = 0.2$  の場合を考える．例えば， $\gamma = 0.02\sqrt{v}$  のとき，20 回の振動の範囲内で数値計算と一般化断熱瞬間近似の結果がよく一致することが分かった (図 3.5.2(a))．一方で， $\gamma = 0.1\sqrt{v}$  のとき，非対角成分が大きいために，一般化断熱瞬間近似は数値計算の結果を精度良く近似しなかった (図 3.5.2(b))．次に  $\sqrt{\eta/v}\Omega = 1.0$  の場合を考える．この場合， $\gamma = 0.02\sqrt{v}$  のみでなく，非対角成分の大きさが大きい  $\gamma = 0.1\sqrt{v}$  の場合でも，数値計算と一般化断熱瞬間近似の結果がよく一致した (図 3.5.2(c,d))．これは  $\eta$  が大きくなることで，一般化断熱瞬間近似の精度がより良くなることを示している．ここで，ボソンの Fock 空間の次元を有限に打ち切っているため， $(2N - 1)$  番目の励起状態の確率振幅が大きくなる時刻以降では，一般化断熱瞬間近似の精度が悪くなり，ハミルトニアン (3.5.2) の下でのダイナミクスとのずれが大きくなることを注意しておく．

干渉現象は時間周期的な 2 準位系のみでなく、多準位系においても重要な役割を果たす [103, 104, 106–111]. 例えば、時間周期的な多準位系の干渉縞は実験的に確認されており、振幅分光法の文脈で議論されている [109–111]. 2 準位系の干渉条件については様々なパラメータ領域でよく研究されているが、多準位系の干渉条件について断熱瞬間近似を用いて直接的に導出されたことはない. しかし、ここで得られた S 行列を用いれば、干渉条件を求めることができる. 例えば、ハミルトニアン (3.5.2) に対して、初期状態が基底状態であった場合、他の状態に遷移しない破壊的干渉の条件は、2 回擬交差点を通過した後に  $S_{11} = 1$  となっている条件である. この値は

$$S_{11} = (1 - p_{1,N+1})e^{i(\theta_{1,N+1,1} + \theta_{1,N+1,2})} + p_{1,N+1}(1 - p_{1,N+2})e^{i(\theta_{1,N+2,1} + \theta_{1,N+2,2})} + p_{1,N+1}p_{1,N+2} \quad (3.5.3)$$

と求まる. これより、もし  $\theta_{1,N+1,1} + \theta_{1,N+1,2} = 2\mathbb{Z}\pi$  かつ  $\theta_{1,N+2,1} + \theta_{1,N+2,2} = 2\mathbb{Z}\pi$  が成り立てば、 $S_{11} = 1$  となり、破壊的干渉が起きる (図 3.5.3). ここで、ボソンの Fock 空間の次元を有限で打ち切っているが、今回考えているハミルトニアンの場合は、干渉条件に影響を与えないことに注意しておく.

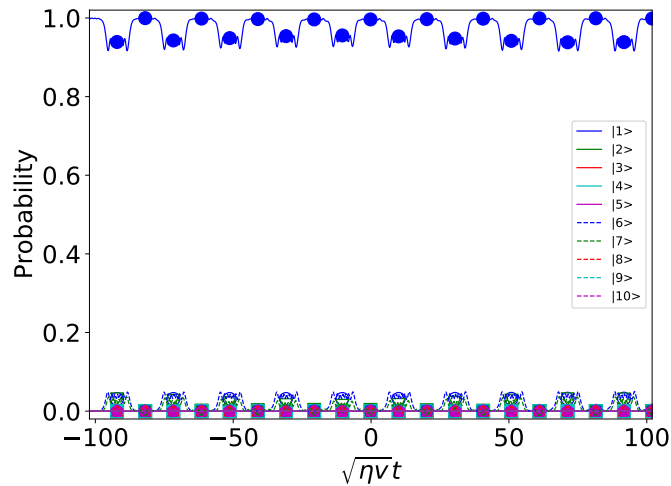


図 3.5.3 破壊的干渉の条件が満たされている場合の遷移確率の時間依存性を示したプロット. パラメータは  $\Delta = \gamma = 0.1\sqrt{v}$ ,  $\sqrt{\eta/v}\Omega = 0.2\sqrt{v}$ ,  $\eta = 10.57v$  とし、これは条件 (3.5.3) を満たしている. 実線や破線は数値計算の結果を表し、白抜きや色付きの点は一般化断熱瞬間近似の結果を表している.

---

## 第 4 章

# 多準位系における非断熱・断熱過程と生存確率の関係

この章では、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。この模型は様々なパラメータ領域で生存確率が近似的に求められる。この模型を通じて、これまで詳しく解析されてこなかった非断熱領域から断熱領域への転移のメカニズム、特に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。第 4.1 節では、多準位放物模型を導入する。第 4.2 節では、2 準位系の断熱極限における摂動的な解析について言及する。第 4.3 節では、非摂動的解析により、生存確率を近似的に求める。第 4.4 節では、この模型の非断熱極限と断熱瞬間近似を比較することで解析の正当性を確かめるとともに、断熱極限を考えることで、多準位系における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。

### 4.1 多準位放物模型

次のハミルトニアンを考える。

$$H(t) = \varepsilon(t)|0\rangle\langle 0| + \sum_{k=1}^{N-1} \varepsilon_k |k\rangle\langle k| + \sum_{k=1}^{N-1} g_k (|0\rangle\langle k| + |k\rangle\langle 0|) \quad (4.1.1)$$

ここで、 $\varepsilon(t) := -wt^2 + h$  ( $w > 0$ ) とし、簡単のため  $g_k > 0$  とする。また、 $\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots < \varepsilon_{N-1}$  とする。このハミルトニアンを多準位放物模型と呼ぶ。最も簡単な  $N = 2$  の場合は既によく調べられているが、解析解は知られていない [42–50]。この模型では  $w \rightarrow \infty$  や  $h \rightarrow -\infty$  が断熱極限に対応している。 $w \rightarrow \infty$  の場合は擬交差点を持つ断熱過程であり、 $h \rightarrow -\infty$  の場合は擬交差点を持たない断熱過程である。本章では、擬交差点を持たない断熱極限に着目し、単に断熱極限と言った場合は擬交差点を持たない断熱極限を指すことにする。

Schrödinger 方程式の解を

$$|\psi(t)\rangle = a_0(t)|0\rangle + \sum_{k=1}^{N-1} a_k(t)|k\rangle$$

と表す。初期条件として  $a_0(-\infty) = 1$  を考える。この模型において、**生存確率**  $p_\infty := |\langle 0|\psi(\infty)\rangle|^2$  を求めることがこの節での目標である。特に本章では、 $h$  を変化させていくことによってどのように遷移確率が変化するか、そのメカニズムを調べる。

ここで、前章との関連をコメントしておく。前章では一般化断熱瞬間近似という近似法を導出したが、これ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手法であった。これにより、各擬交差点が離れている場合の非断熱過程のメカニズムが理解できた。しかし、実条件 (Appendix F) の制約のため、擬交差点を持たないハミルトニアンに対する解析が十分に行えない。一方で、本章では、このような擬交差点を（一部、もしくは全く）持たないハミルトニアンに対して生存確率を求めることにより、非断熱過程、もしくは断熱過程のメカニズムを理解していく。

## 4.2 断熱極限における摂動的解析

この節では、 $h \rightarrow -\infty$  における遷移確率を摂動的に求める。さて、Schrödinger 方程式は以下のように表せる。

$$\begin{cases} i\dot{a}_0(t) = \varepsilon(t)a_0(t) + \sum_{k=1}^{N-1} g_k a_k(t) \\ i\dot{a}_k(t) = g_k a_0(t) + \varepsilon_k a_k(t) \quad (k = 1, \dots, N-1) \end{cases} \quad (4.2.1)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \bar{a}_0(t) &:= \exp\left(i \int_{-\infty}^t dt' \varepsilon(t')\right) a_0(t) \\ \bar{a}_k(t) &:= \exp\left(i \int_{-\infty}^t dt' \varepsilon_k\right) a_k(t) \quad (k = 1, \dots, N-1) \end{aligned}$$

とすると、 $k = 1, \dots, N-1$  に対し、

$$\begin{aligned} i\dot{\bar{a}}_k(t) &= \exp\left(-i \int_{-\infty}^t dt' (\varepsilon(t') - \varepsilon_k)\right) g_k \bar{a}_0(t) \\ |\bar{a}_k(\infty)|^2 &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(-i \int_{-\infty}^t dt' (\varepsilon(t') - \varepsilon_k)\right) g_k \bar{a}_0(t) \right|^2 \end{aligned}$$

と変形できる。ここで、エネルギーギャップに対して準位間の結合が小さい ( $\varepsilon_1 - h \gg g_j (\forall j)$ ) 極限を考えると、断熱近似より  $\bar{a}_0(t) \simeq 1$  と近似できる。よって、 $k = 1, \dots, N-1$  に対し、

$$\begin{aligned} |\bar{a}_k(\infty)|^2 &\simeq g_k^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i \int_{-\infty}^t dt' (\varepsilon(t') - \varepsilon_k)} \right|^2 \\ &= g_k^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(-wt^3/3 + (h - \varepsilon_k)t)} \right|^2 \\ &= 4g_k^2 \pi^2 w^{-2/3} \left| \text{Ai}\left((\varepsilon_k - h)w^{-1/3}\right) \right|^2 \\ &\rightarrow \frac{g_k^2 \pi}{(w(\varepsilon_k - h))^{1/2}} \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{(\varepsilon_k - h)^{3/2}}{w^{1/2}}\right) \quad (h \rightarrow -\infty) \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

と求まる\*1.

もし、 $h > \varepsilon_{N-1}$  であれば、0 番目の準位と  $k$  番目の準位が囲む面積は

$$\begin{aligned}\zeta_k &:= 2 \int_0^{\sqrt{(h-\varepsilon_k)/w}} dt (-wt^2 + h - \varepsilon_k) \\ &= \frac{4}{3} \sqrt{\frac{(h - \varepsilon_k)^3}{w}}\end{aligned}$$

と近似できる (図 4.2.1(a)). つまり、遷移確率 (4.2.2) は、面積  $\zeta_k$  を  $h < \varepsilon_1$  の場合にも拡張した

$$\tilde{\zeta}_k := \frac{4}{3} \sqrt{\frac{|h - \varepsilon_k|^3}{w}} = |\zeta_k|$$

に依存していることが分かる.

この例から、擬交差点を持たないエネルギーギャップが存在する場合 (図 4.2.1(b)), 断熱極限での遷移確率は拡張した面積  $\tilde{\zeta}_k$  で指数関数的に抑えられることが分かる. これは、一般化断熱瞬間近似において、擬交差点を持つ場合に相対位相に  $\zeta_k$  が寄与したことと関連していると考えられる (Appendix H). この  $\zeta_k$  が寄与している相対位相は動的位相と呼ばれ、それ以外の位相は Stokes 位相と呼ばれている (第 3.1 節). つまり、遷移振幅の表式において面積  $\zeta_k$  の働きを考えると、 $h > \varepsilon_k$  の場合  $e^{i\zeta_k}$  のように入り相対位相の役割を果たす (式 (H.1)) が、 $h < \varepsilon_k$  の場合、 $e^{-\tilde{\zeta}_k}$  のように入り遷移確率の役割を果たす.

$$e^{i\zeta_k} (h > \varepsilon_k) \rightarrow e^{-\tilde{\zeta}_k} (h < \varepsilon_k)$$

このことを、パラメータ  $\zeta_k$  の複素化と呼ぶことにする.

この事実から、一般化断熱瞬間近似の結果 (H.1) において、擬交差点を持つ場合に遷移確率を与えていた断熱パラメータ  $\kappa_k$  は、擬交差点を持たない場合には相対位相として寄与すると想定される (図 4.2.1).

$$e^{-2\pi\kappa_k} (h > \varepsilon_k) \xrightarrow{?} e^{-2\pi i\tilde{\kappa}_k} (h < \varepsilon_k)$$

ここで、断熱パラメータは

$$\kappa_k := \frac{g_k^2}{2w^{1/3}\sqrt{h - \varepsilon_k}}$$

であり、 $h < \varepsilon_k$  の場合に拡張した断熱パラメータは

$$\tilde{\kappa}_k := \frac{g_k^2}{2w^{1/3}\sqrt{|h - \varepsilon_k|}} = |\kappa_k| \quad (4.2.3)$$

である. しかし、これまで複素化した断熱パラメータ  $\tilde{\kappa}_k$  の相対位相への寄与が指摘されたことはない. この理由として、上述した摂動的解析では遷移確率しか求められず、相対位相が寄与してくる生存確率を求めることができなかつたためと考えられる.

\*1 この結果は、断熱極限での遷移確率を与える Dykhne-Davis-Pechukas (DDP) 公式 [24, 25] を用いても求まる. この DDP 公式の有用性は、( $h \rightarrow -\infty$  の断熱極限ではなく)  $w \rightarrow \infty$  の断熱極限でも、遷移確率が近似的に求まる点である. この断熱極限の場合でも、遷移確率は後述する  $\zeta_k$  によって指数関数的に抑えられることが言える.

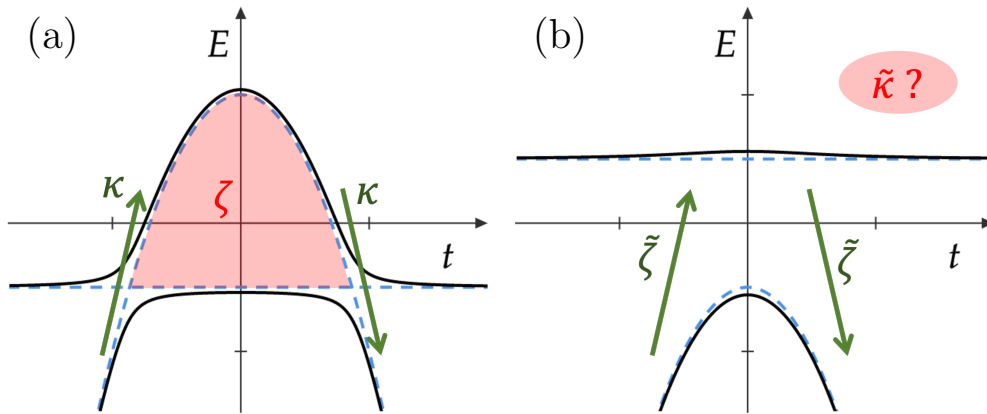


図 4.2.1  $N = 2$  の場合の擬交差点をもつ非断熱過程 (a) と、擬交差点を持たない断熱過程 (b) の概念図. (a) の場合、断熱パラメータ  $\kappa$  が遷移確率を支配しており、面積  $\zeta$  は生存確率において各経路の相対位相を支配している. (b) の場合、複素化した面積  $\tilde{\zeta}$  が遷移確率を支配している一方、複素化した断熱パラメータ  $\tilde{\kappa}$  の相対位相への寄与は確認されていない.

### 4.3 非摂動的解析

Schrödinger 方程式 (4.2.1) において、

$$\begin{cases} a_0(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} \tilde{a}_0(E) \\ a_k(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} \tilde{a}_k(E) \quad (k = 1, \dots, N-1) \end{cases}$$

という変換を施すと、

$$i \frac{d}{dt} \left( \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} \tilde{a}_0(E) \right) = \varepsilon(t) \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} \tilde{a}_0(E) + \sum_{k=1}^{N-1} g_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} \frac{\tilde{a}_0(E)}{E - \varepsilon_k}$$

となる. これより、次の式を得る (Appendix G.1).

$$h \tilde{a}_0(E) = -w \frac{d^2}{dE^2} \tilde{a}_0(E) + \left( E - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{g_k^2}{E - \varepsilon_k} \right) \tilde{a}_0(E) \quad (4.3.1)$$

これは、 $E$  を一次元の位置座標とみなせば、ポテンシャルエネルギー  $E - \sum_{k=1}^{N-1} g_k^2 / (E - \varepsilon_k)$ 、固有値  $h$  の定常 Schrödinger 方程式とみなすことができる. 以下では、無次元化された次の方程式を考えることにする.

$$\begin{aligned} \tilde{h} \tilde{a}_0(x) &= -\frac{d^2}{dx^2} \tilde{a}_0(x) + \left( x - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\tilde{g}_k^2}{x - \tilde{\varepsilon}_k} \right) \tilde{a}_0(x) \\ &=: -\frac{d^2}{dx^2} \tilde{a}_0(x) + V(x) \tilde{a}_0(x) \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

ここで、無次元パラメータはそれぞれ  $x := Ew^{-1/3}$ ,  $\tilde{h} := hw^{-1/3}$ ,  $\tilde{g} := gw^{-1/3}$  のように定義した。さらに、

$$h = E - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{g_k^2}{E - \varepsilon_k}$$

を満たす点  $E = E_i$  を転回点と呼び、 $E_i < E_{i+1}$  を満たすとする。この下で、 $x_i := E_i w^{-1/3}$  と定義する (図 4.3.1)。

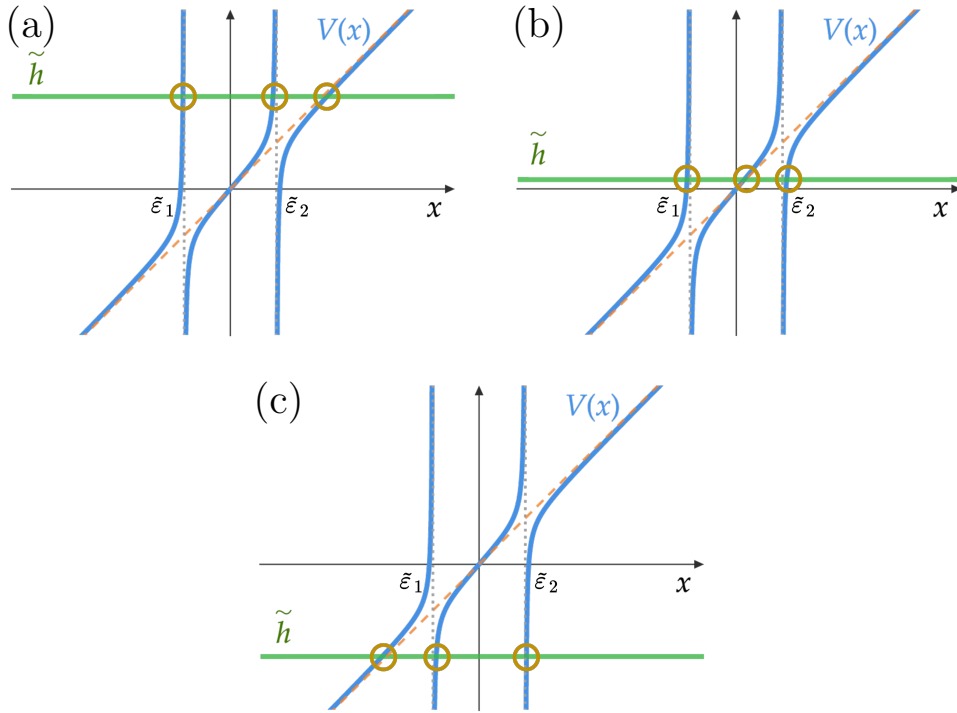


図 4.3.1  $N = 3$  の場合のポテンシャル  $V(x)$  のプロットを青の実線で表した。ポテンシャルが発散する箇所を示す青の破線が  $x = \tilde{\varepsilon}_j$  を表す。また、 $\tilde{h} = V(x)$  を満たす転回点  $x_j$  を黄色の丸で示した。それぞれ、(a)  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \lesssim \tilde{\varepsilon}_2 \ll x_3$ , (b)  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$ , (c)  $x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$  のパラメータ領域に対応している。

生存確率  $p_\infty$  を求めるために、 $\tilde{a}_0(x \rightarrow \infty) = 0$  という境界条件を課す (Appendix G.1)。このとき、式 (4.3.2) の解は  $x \rightarrow -\infty$  において、近似的に以下のように表すことができる。

$$\tilde{a}_0(x \rightarrow -\infty) = C_+ \tilde{a}_+(x) + C_- \tilde{a}_-(x)$$

ここで

$$\tilde{a}_\pm(x) = \frac{1}{Q^{1/4}(x)} \exp\left(\pm \int^x dx' \sqrt{Q(x')}\right)$$

$$Q(x) := V(x) - \tilde{h}$$

は、WKB 解である。このとき、生存確率は次のように与えられる (Appendix G, [112])

$$p_\infty = \left| \frac{C_+}{C_-} \right|^2 \quad (4.3.3)$$

この模型における WKB 近似の妥当性については、Appendix G.4 にて確認した。

### 4.3.1 $N = 2$ の場合

この節では、2 準位系の場合を考える。以下、 $g_1 = g$  と略記し、 $\varepsilon_1 = 0$  としても一般性を失わない。瞬間固有値は図 4.3.2 のような時間依存性を持つ。

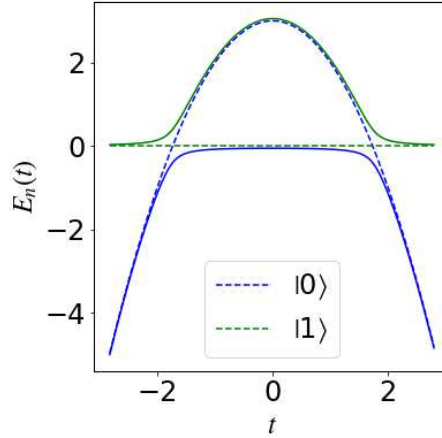


図 4.3.2 瞬間固有値の時間依存性のプロット。破線はハミルトニアンの対角成分を表している。

まず、転回点周辺でのポテンシャル  $V(x) = x - g^2/x$  の形について確認する。  $|x| \gg \tilde{g}$  のとき  $V(x) \simeq x$  であり、  $|x| \ll \tilde{g}$  のとき  $V(x) \simeq -\tilde{g}^2/x$  である。もし転回点のうちの一つが  $x_2 \gg \tilde{g}$  を満たしている場合、  $x_2$  近傍ではポテンシャルは線形とみなすことができる。この条件は

$$\begin{aligned} x_2 &= \frac{1}{2} \left( \tilde{h} + \sqrt{\tilde{h}^2 + 4\tilde{g}^2} \right) \gg \tilde{g} \\ \therefore \frac{\tilde{h}}{2\tilde{g}} + \sqrt{\left( \frac{\tilde{h}}{2\tilde{g}} \right)^2 + 1} &\gg 1 \end{aligned}$$

より、  $\tilde{h} \gg \tilde{g}$  が成り立っていればよい。このとき、もう一方の転回点  $x_1$  近傍では、ポテンシャルは  $-\tilde{g}^2/x$  とみなされる。一方、  $\tilde{h} \ll -\tilde{g}$  の場合には逆の状況となる。  $|\tilde{h}| \lesssim \tilde{g}$  のときには、  $|x_1|, x_2$  は  $\tilde{g}$  と同程度の大きさとなり、WKB 近似は妥当ではなくなる (Appendix G.4)。

#### 4.3.1.1 $\tilde{h} \gg \tilde{g}$ の場合

$\tilde{h} \gg \tilde{g}$  の極限では、各転回点は次のように近似できる。

$$x_1 \simeq -\frac{\tilde{g}^2}{\tilde{h}}, \quad x_2 \simeq \tilde{h} + \frac{\tilde{g}^2}{\tilde{h}}$$



転回点  $x_2$  の前後での解の接続を考える。この転回点の近傍ではポテンシャルは線形近似できるので、WKB 解は Airy 関数を介して接続できる。また、境界条件として  $x \rightarrow \infty$  で  $\tilde{a}(x) \rightarrow 0$  を採用したので、解は次のように接続される。

$$\tilde{a}(x) \propto \tilde{a}_-(x, x_2) \xrightarrow{x > x_2 \rightarrow x < x_2} \tilde{a}_-(x, x_2) + i\tilde{a}_+(x, x_2)$$

次に、 $x_1$  の前後での解の接続を考える。近傍  $x = x_1$  では、式 (4.3.2) において  $x \simeq 0$  と近似できる。この近似の下で、以下の方程式を得る。

$$-\frac{d^2}{dx^2}\tilde{a}_0(x) + \left(-\frac{\tilde{g}^2}{x} - \tilde{h}\right)\tilde{a}_0(x) = 0$$

この方程式の解は合流型超幾何関数  ${}_1F_1(a, b; x)$  を用いて表すことができる。合流型超幾何関数を介して WKB 解を  $x > x_1$  から  $x < x_1$  へ接続すると、以下の接続公式を得る (Appendix E.4)。

$$\begin{aligned} \tilde{a}_+(x, x_1) &\xrightarrow{x > x_1 \rightarrow x < x_1} \tilde{a}_+(x, x_1) \\ \tilde{a}_-(x, x_1) &\xrightarrow{x > x_1 \rightarrow x < x_1} \tilde{a}_-(x, x_1) + \chi\tilde{a}_+(x, x_1) \end{aligned}$$

ここで、

$$\chi := \begin{cases} -(1 - e^{-2\pi\kappa})e^{2i\left(\arg(\Gamma(1+i\kappa)) - \kappa \log(2\sqrt{\tilde{h}})\right)} & (\tilde{h} > 0) \\ -2i\left(2\sqrt{-\tilde{h}}\right)^{2|\kappa|} \frac{\Gamma(1-|\kappa|)}{\Gamma(1+|\kappa|)} \sin(\pi|\kappa|)e^{2i\pi|\kappa|} & (\tilde{h} < 0) \end{cases}$$

$$\kappa := \frac{\tilde{g}^2}{2\sqrt{\tilde{h}}}$$

である。以上をまとめると、 $x = \infty$  から  $x = -\infty$  への接続は以下のようなになる。

$$\begin{aligned} \tilde{a}_-(x, x_2) &\xrightarrow{x > x_2 \rightarrow x < x_2} \tilde{a}_-(x, x_2) + i\tilde{a}_+(x, x_2) \\ &= \gamma_-(x_1, x_2)\tilde{a}_-(x, x_1) + i\tilde{a}_+(x, x_2) \\ &\xrightarrow{x > x_1 \rightarrow x < x_1} \gamma_-(x_1, x_2)(\tilde{a}_-(x, x_1) + \chi\tilde{a}_+(x, x_1)) + i\tilde{a}_+(x, x_2) \end{aligned}$$

よって、生存確率は

$$\begin{aligned} p_\infty &= \left| \frac{\gamma_-(x_1, x_2)\chi + i\gamma_+(x_1, x_2)}{\gamma_-(x_1, x_2)} \right|^2 \\ &= |\chi + i\gamma_+^2(x_1, x_2)|^2 \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

と求まる。ここで、

$$\gamma_\pm(x_1, x_2) := \exp\left(\mp \int_{x_1}^0 dx \sqrt{Q(x)}\right) \exp\left(\mp i \int_0^{x_2} dx \sqrt{-Q(x)}\right).$$

とした。この式により求めた生存確率と、数値計算によって求めた生存確率との比較は図 4.3.3 である。これより、WKB 近似が妥当な領域では特に両者がよく一致しているのがわかる。

4.3.1.2  $\tilde{h} \ll -\tilde{g}$  の場合

$\tilde{h} \ll -\tilde{g}$  の場合, 転回点は以下のように近似できる.

$$x_1 \simeq \tilde{h} + \frac{\tilde{g}^2}{\tilde{h}}, \quad x_2 \simeq -\frac{\tilde{g}^2}{\tilde{h}}$$

$\tilde{h} \gg \tilde{g}$  の場合と同様に, WKB 解を  $x \rightarrow -\infty$  から接続していく.  $x = x_2$  の前後では, 合流型超幾何関数を介して WKB 解を接続することで,

$$\tilde{a}_-(x, x_2) \xrightarrow{x > x_2 \rightarrow x < x_2} \tilde{a}_-(x, x_2) + \chi \tilde{a}_+(x, x_2)$$

を得る. 次に,  $x = x_1$  の前後では, ポテンシャル  $V(x)$  は線形近似できるので, WKB 解は以下のように接続される.

$$\begin{aligned} \tilde{a}_+(x, x_1) &\xrightarrow{x > x_1 \rightarrow x < x_1} \tilde{a}_+(x, x_1) \\ \tilde{a}_-(x, x_1) &\xrightarrow{x > x_1 \rightarrow x < x_1} \tilde{a}_-(x, x_1) + i\tilde{a}_+(x, x_1) \end{aligned}$$

これらをまとめると,  $x = \infty$  から  $x = -\infty$  への WKB 解の接続は

$$\begin{aligned} \tilde{a}_-(x, x_2) &\xrightarrow{x > x_2 \rightarrow x < x_2} \tilde{a}_-(x, x_2) + \chi \tilde{a}_+(x, x_2) \\ &= \gamma_-(x_1, x_2) \tilde{a}_-(x, x_1) + \chi \tilde{a}_+(x, x_2) \\ &\xrightarrow{x > x_1 \rightarrow x < x_1} \gamma_-(x_1, x_2) (\tilde{a}_-(x, x_1) + i\tilde{a}_+(x, x_1)) + \chi \tilde{a}_+(x, x_2) \end{aligned}$$

のように求まる. 以上より, 生存確率は

$$\begin{aligned} p_\infty &= \left| \frac{i\gamma_-(x_1, x_2) + \chi\gamma_+(x_1, x_2)}{\gamma_-(x_1, x_2)} \right|^2 \\ &= |i + \chi\gamma_+^2(x_1, x_2)|^2 \end{aligned} \tag{4.3.5}$$

と求まる.

以上の結果 (4.3.4), (4.3.5) を数値的に計算したものが図 4.3.3 である.  $N = 2$  の場合は, WKB 近似が妥当でない領域も含めて, 数値計算によって求めた生存確率と近似的に求めた生存確率がよく一致していることが分かる.

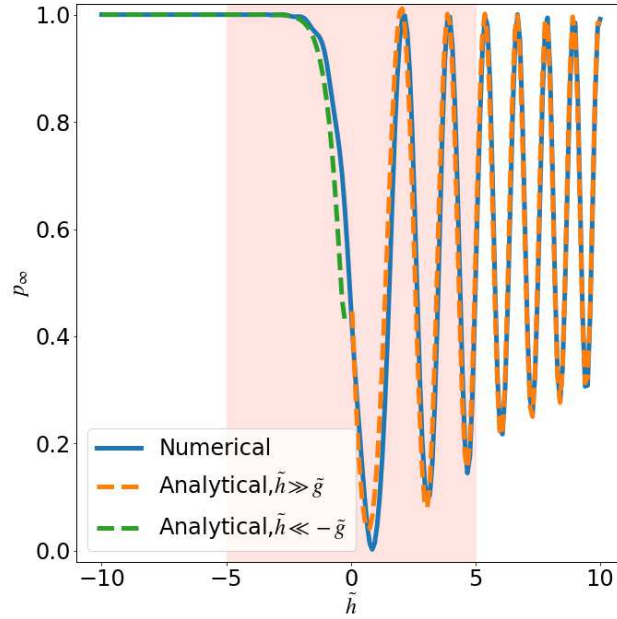


図 4.3.3  $\tilde{g} = 0.5$  における生存確率  $p_\infty$  のプロット．青の曲線が数値計算の結果を表し，黄色や緑色の破線が今回求めた近似式 (4.3.4), (4.3.5) の結果を表している．薄赤色の領域は WKB 近似が妥当でないパラメータ領域  $|\tilde{h}| < 10\tilde{g}$  を表している．

### 4.3.2 $N = 3$ の場合

この節では 3 準位系を考える．ここで，1 番目の準位と 2 番目の準位が十分離れているという  $|\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2| \gg \tilde{g}_1 + \tilde{g}_2$  といった仮定をする．このとき，

$$|x_i - \tilde{\varepsilon}_j| \gg \tilde{g} \quad \text{または} \quad |x_i - \tilde{\varepsilon}_j| \ll \tilde{g}$$

を満たしている場合に，前節同様 WKB 近似が適用できる．ここで，次の量を導入する．

$$r_i := \frac{\tilde{g}_i}{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_i}$$

また，接続する際の係数は以下のように表せる．

$$\chi_k := \begin{cases} -(1 - e^{-2\pi\kappa_k}) e^{2i(\arg(\Gamma(1+i\kappa_k)) - \kappa_k \log(2\sqrt{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_k}))} & (\tilde{h} > \tilde{\varepsilon}_k) \\ -2i \left(2\sqrt{-(\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_k)}\right)^{2|\kappa_k|} \frac{\Gamma(1 - |\kappa_k|)}{\Gamma(1 + |\kappa_k|)} \sin(\pi|\kappa_k|) e^{2i\pi|\kappa_k|} & (\tilde{h} < \tilde{\varepsilon}_k) \end{cases}$$

$$\kappa_k := \frac{\tilde{g}_k^2}{2\sqrt{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_k}}$$

ここで， $\kappa_k$  は前節で導入した断熱パラメータ (4.2.3) と同じものであることに注意する．

さて，上述したパラメータの制限によって，パラメータは三つの場合に場合分けされるので，それぞれの場合について考えていく．この場合分けはそれぞれ，図 4.3.1 の (a), (b), (c) に対応している．

4.3.2.1  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \lesssim \tilde{\varepsilon}_2 \ll x_3$ 

この場合は、図 4.3.1 の (a) に対応している。転回点は以下のように近似できる。

$$\begin{aligned} x_1 &\simeq \tilde{\varepsilon}_1 - r_1^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1) \\ x_2 &\simeq \tilde{\varepsilon}_2 - r_2^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_2) \\ x_3 &\simeq \tilde{h} + r_1^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1) + r_2^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_2) \end{aligned}$$

さらに、 $x = x_3$  の前後でのみポテンシャルを線形に近似できることを考慮すると、生存確率は  $N = 2$  の場合と同様に、

$$\begin{aligned} \tilde{a}_-(x, x_3) &\xrightarrow{x > x_3 \rightarrow x < x_3} \tilde{a}_-(x, x_3) + i\tilde{a}_+(x, x_3) \\ &= \gamma_-(x_2, x_3)\tilde{a}_-(x, x_2) + i\tilde{a}_+(x, x_3) \\ &\xrightarrow{x > x_2 \rightarrow x < x_2} \gamma_-(x_2, x_3)(\tilde{a}_-(x, x_2) + \chi_2\tilde{a}_+(x, x_2)) + i\tilde{a}_+(x, x_3) \\ &= \gamma_-(x_1, x_3)\tilde{a}_-(x, x_1) + \chi_2\gamma_-(x_2, x_3)\tilde{a}_+(x, x_2) + i\tilde{a}_+(x, x_3) \\ &\xrightarrow{x > x_1 \rightarrow x < x_1} \gamma_-(x_1, x_3)(\tilde{a}_-(x, x_1) + \chi_1\tilde{a}_+(x, x_1)) \\ &\quad + \chi_2\gamma_-(x_2, x_3)\tilde{a}_+(x, x_2) + i\tilde{a}_+(x, x_3) \\ p_\infty &= \left| \frac{\chi_1\gamma_-(x_1, x_3) + \chi_2\gamma_-(x_2, x_3)\gamma_+(x_1, x_2) + i\gamma_+(x_1, x_3)}{\gamma_-(x_1, x_3)} \right|^2 \\ &= |\chi_1 + \chi_2\gamma_+^2(x_1, x_2) + i\gamma_+^2(x_1, x_3)|^2 \end{aligned} \tag{4.3.6}$$

と求まる。ここで、

$$\begin{aligned} \gamma_\pm(x_1, x_2) &:= \exp\left(\mp i \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \sqrt{-Q(x)}\right) \exp\left(\mp \int_{x_1}^{\tilde{\varepsilon}_1} dx \sqrt{Q(x)}\right) \\ \gamma_\pm(x_1, x_3) &:= \gamma_\pm(x_1, x_2) \exp\left(\mp i \int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} dx \sqrt{-Q(x)}\right) \exp\left(\mp \int_{x_2}^{\tilde{\varepsilon}_2} dx \sqrt{Q(x)}\right) \end{aligned}$$

とした。

 4.3.2.2  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$ 

この場合、 $x = x_2$  の前後でのみポテンシャルを線形近似できることを考慮すると、生存確率は

$$\begin{aligned} p_\infty &= \left| \frac{\chi_1\gamma_-(x_1, x_3) + i\gamma_-(x_2, x_3)\gamma_+(x_1, x_2) + \chi_2\gamma_+(x_1, x_3)}{\gamma_-(x_1, x_3)} \right|^2 \\ &= |\chi_1 + i\gamma_+^2(x_1, x_2) + \chi_2\gamma_+^2(x_1, x_3)|^2 \end{aligned} \tag{4.3.7}$$

と求まる。

4.3.2.3  $x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$ 

この場合,  $x = x_1$  の前後でのみポテンシャルを線形近似できる. よって, 生存確率は

$$\begin{aligned}
\tilde{a}_-(x, x_3) &\xrightarrow{x > x_3 \rightarrow x < x_3} \tilde{a}_-(x, x_3) + \chi_2 \tilde{a}_+(x, x_3) \\
&= \gamma_-(x_2, x_3) \tilde{a}_-(x, x_2) + \chi_2 \tilde{a}_+(x, x_3) \\
&\xrightarrow{x > x_2 \rightarrow x < x_2} \gamma_-(x_2, x_3) (\tilde{a}_-(x, x_2) + \chi_1 \tilde{a}_+(x, x_2)) + \chi_2 \tilde{a}_+(x, x_3) \\
&= \gamma_-(x_1, x_3) \tilde{a}_-(x, x_1) + \chi_1 \gamma_-(x_2, x_3) \tilde{a}_+(x, x_2) + \chi_2 \tilde{a}_+(x, x_3) \\
&\xrightarrow{x > x_1 \rightarrow x < x_1} \gamma_-(x_1, x_3) (\tilde{a}_-(x, x_1) + i \tilde{a}_+(x, x_1)) + \chi_1 \gamma_-(x_2, x_3) \tilde{a}_+(x, x_2) + \chi_2 \tilde{a}_+(x, x_3) \\
p_\infty &= \left| \frac{i \gamma_-(x_1, x_3) + \chi_1 \gamma_-(x_2, x_3) \gamma_+(x_1, x_2) + \chi_2 \gamma_+(x_1, x_3)}{\gamma_-(x_1, x_3)} \right|^2 \\
&= \left| i + \chi_1 \gamma_+^2(x_1, x_2) + \chi_2 \gamma_+^2(x_1, x_3) \right|^2 \tag{4.3.8}
\end{aligned}$$

と求まる.

以上の近似解 (4.3.6), (4.3.7), (4.3.8) と数値計算の結果をプロットしたものが図 4.3.4, 4.3.5 である. 図 4.3.4 より, WKB 近似が妥当な範囲で生存確率の近似解が数値計算の結果とよく一致していることが分かる. 図 4.3.5 は, 1 番目の準位と 2 番目の準位が十分離れているという仮定  $|\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2| \gg \tilde{g}_1 + \tilde{g}_2$  を満たしていない場合のパラメータ領域におけるプロットである. この図より, 仮定を満たしていない場合でも, WKB 近似が妥当となる領域では数値計算とよく一致していることが分かる.

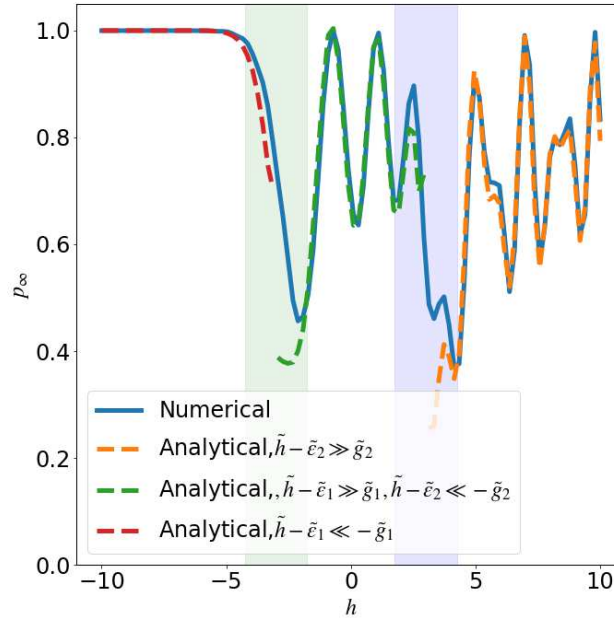


図 4.3.4  $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.25$ ,  $\tilde{\varepsilon}_2 = -\tilde{\varepsilon}_1 = 3.0$  における生存確率  $p_\infty$  の  $h$  依存性のプロット. 青の曲線が数値計算の結果を表し, 黄色や緑色, 赤色の破線が今回求めた近似式 (4.3.6), (4.3.7), (4.3.8) の結果を表している. 薄青色, 薄緑色の領域は WKB 近似が妥当でないパラメータ領域  $|\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_k| < 10\tilde{g}_k$  ( $k = 1, 2$ ) を表している. WKB 近似が妥当な領域では, 数値計算と近似式が良い一致を示している.

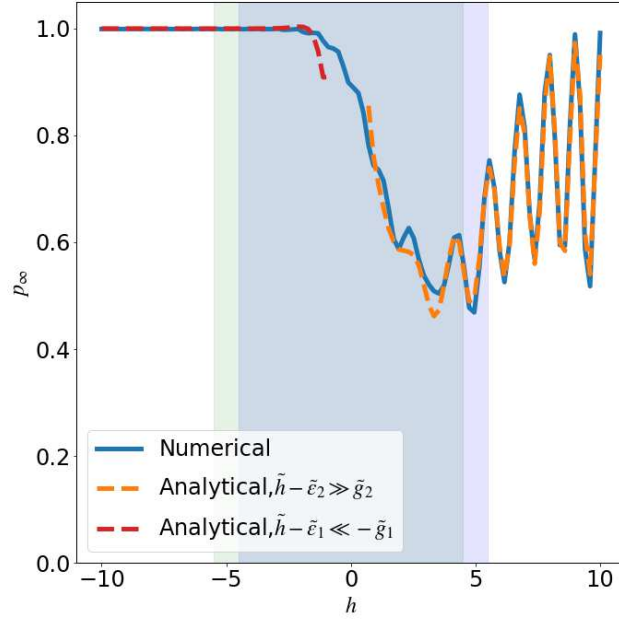


図 4.3.5  $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 1.0$ ,  $\tilde{\varepsilon}_2 = -\tilde{\varepsilon}_1 = 0.5$  における生存確率  $p_\infty$  の  $h$  依存性のプロット. 青の曲線が数値計算の結果を表し, 黄色や赤色の破線が今回求めた近似式 (4.3.6), (4.3.8) の結果を表している. 薄青色, 薄緑色の領域は WKB 近似が妥当でないパラメータ領域  $|\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_k| < 10\tilde{g}_k$  ( $k = 1, 2$ ) を表している. 仮定は満たされていないが, WKB 近似が妥当な領域では, 数値計算と近似式が良い一致を示している.

### 4.3.3 任意の $N$ の場合

以上の議論は, 一般の  $N$  準位の場合に拡張できる. このとき, 図 4.3.1 の (a),(b),(c) のように  $h$  が小さくなるにつれて, 生存確率は

$$p_\infty = \begin{cases} \left| \chi_1 + \chi_2 \gamma_+^2(x_1, x_2) + \chi_3 \gamma_+^2(x_1, x_3) + \cdots + \chi_{N-1} \gamma_+^2(x_1, x_{N-1}) + i \gamma_+^2(x_1, x_N) \right|^2 & (\tilde{\varepsilon}_{N-1} \ll \tilde{h}) \\ \left| \chi_1 + \chi_2 \gamma_+^2(x_1, x_2) + \chi_3 \gamma_+^2(x_1, x_3) + \cdots + i \gamma_+^2(x_1, x_{N-1}) + \chi_{N-1} \gamma_+^2(x_1, x_N) \right|^2 & (\tilde{\varepsilon}_{N-2} \ll \tilde{h} \ll \tilde{\varepsilon}_{N-1}) \\ \vdots \\ \left| i + \chi_1 \gamma_+^2(x_1, x_2) + \chi_2 \gamma_+^2(x_1, x_3) + \cdots + \chi_{N-2} \gamma_+^2(x_1, x_{N-1}) + \chi_{N-1} \gamma_+^2(x_1, x_N) \right|^2 & (\tilde{h} \ll \tilde{\varepsilon}_1) \end{cases} \quad (4.3.9)$$

のように変わっていく. どのパラメータ領域でも  $N$  個の和の絶対値の 2 乗として表されているが, この  $N$  個の和の  $n$  番目に着目すると, 可能な組み合わせは

$$\chi_n \gamma_+^2(x_1, x_n), \quad i \gamma_+^2(x_1, x_n), \quad \chi_{n-1} \gamma_+^2(x_1, x_n), \quad (\chi_0 = \chi_N = 0)$$

であることが分かる。これは、転回点の位置が、「 $V(x) \simeq -1/x$  ( $x < 0$ ) で交わる」、 $V(x) \simeq x$  で交わる」、 $V(x) \simeq -1/x$  ( $x > 0$ ) で交わる」の三種類存在することに対応している。例えば、 $N = 3, n = 2$  の場合、 $x_2$  が「 $V(x) \simeq -1/x$  ( $x < 0$ ) の交点 (図 4.3.1(a))」、 $V(x) \simeq x$  の交点 (図 4.3.1(b))」、 $V(x) \simeq -1/x$  ( $x > 0$ ) の交点 (図 4.3.1(c))」となっていることに対応している。

以上のように、任意の準位に対して、生存確率  $p_\infty$  を  $\chi_n, \gamma_+(x_1, x_n)$  を用いて表すことができた。次の節では、これらの解析的な表式と、その物理的意味を考える。

## 4.4 生存確率の解析的表式

この節では、前節で求めた生存確率  $p_\infty$  の近似的な解析表示を求めていく。

### 4.4.1 $N = 2$ の場合

$\gamma_+(x_1, x_2)$  や  $\chi$  は以下のように近似できる (Appendix I).

$$\begin{aligned}
|\gamma_+(x_1, x_2)| &\simeq \begin{cases} e^{-\pi\kappa} & (\tilde{h} \gg \tilde{g}) \\ e^{-\frac{2}{3}|\tilde{h}|^{3/2}} & (\tilde{h} \ll -\tilde{g}) \end{cases} \\
|\chi| &\simeq \begin{cases} 1 - e^{-2\pi\kappa} & (\tilde{h} \gg \tilde{g}) \\ 2\pi\tilde{\kappa} \left(2\sqrt{|\tilde{h}|}\right)^{2\tilde{\kappa}} & (\tilde{h} \ll -\tilde{g}) \end{cases} \\
\arg(\gamma_+(x_1, x_2)) &\simeq \begin{cases} -\left(\frac{2}{3}\tilde{h}^{3/2} + 2\kappa \left(1 + \log\left(\frac{4\tilde{h}}{\tilde{g}}\right)\right)\right) & (\tilde{h} \gg \tilde{g}) \\ -\pi\tilde{\kappa} & (\tilde{h} \ll -\tilde{g}) \end{cases} \\
\arg(\chi) &\simeq \begin{cases} \pi + 2\arg(\Gamma(1 + i\kappa)) - 2\kappa \log(2\sqrt{\tilde{h}}) & (\tilde{h} \gg \tilde{g}) \\ -\frac{1}{2}\pi + 2\pi\tilde{\kappa} & (\tilde{h} \ll -\tilde{g}) \end{cases}
\end{aligned}$$

ここで、 $\gamma_+^2(x_1, x_2)$  の意味についてコメントしておく。 $\tilde{h} \gg \tilde{g} \simeq 0$  の極限では、

$$-2\arg \gamma_+(x_1, x_2) \simeq 2 \int_0^{\sqrt{h/w}} dt \sqrt{(-wt^2 + h)^2 + 4g^2} \simeq \zeta$$

を満たしており、また、 $\tilde{h} \ll -\tilde{g}$  の極限では、

$$-2\log |\gamma_+(x_1, x_2)| \simeq \frac{4}{3}|\tilde{h}|^{3/2} = \tilde{\zeta}$$

を満たしている。

**証明** ハミルトニアン の 瞬間固有値 の 差 は  $\sqrt{(-wt^2 + h)^2 + 4g^2}$  である。よって、擬交差点の間の面積は

$$2 \int_0^{\sqrt{h/w}} dt \sqrt{(-wt^2 + h)^2 + 4g^2} =: 2 \int_0^{\sqrt{h/w}} dt y(t)$$

となる。ここで、 $y(t)$  の逆関数は

$$\tilde{y}(x) := \frac{1}{\sqrt{w}} \left( -\sqrt{x^2 - 4g^2} + h \right)^{\frac{1}{2}}$$

となるので、十分  $g$  が小さい場合、

$$\begin{aligned} 2 \int_0^{\sqrt{h/w}} dt y(t) &\simeq 2 \int_0^{\sqrt{h^2+4g^2}} dx \tilde{y}(x) \\ &= \frac{2}{\sqrt{w}} \int_0^{\sqrt{h^2+4g^2}} dx \left( -\sqrt{x^2 - 4g^2} + h \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

と変形できる。よって、 $\tilde{g} \ll \tilde{h}$  のとき、

$$\begin{aligned} 2 \int_0^{\sqrt{h/w}} dt y(t) &\simeq 2 \int_0^{\tilde{h}} dx \left( \tilde{h} - x + \frac{2\tilde{g}^2}{x} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\simeq 2 \left( \frac{2}{3} \tilde{h}^{3/2} + 2\kappa \left( 1 + \log \left( \frac{4\tilde{h}}{\sqrt{2}\tilde{g}} \right) \right) \right) \end{aligned}$$

となる。ここで、Appendix I の計算を用いた。以上より、

$$-2 \arg(\gamma_+(x_1, x_2)) - 2 \int_0^{\sqrt{h/w}} dt y(t) \simeq 2\kappa \log \sqrt{2} \simeq 0$$

となる。最後は  $\kappa = \tilde{g}^2/(2\sqrt{\tilde{h}}) \simeq 0$  という近似を用いた。これより、 $0 \simeq \tilde{g} \ll \tilde{h}$  のとき、 $\gamma_+(x_1, x_2)$  の位相がハミルトニアン の瞬間固有値の差の時間積分と近似できることが分かった。

□

これより、例えば  $\tilde{h} \gg \tilde{g}$  の場合、 $\gamma_+(x_1, x_2)$  は LZSM 遷移確率  $p_{\text{LZSM}} = e^{-2\pi\kappa}$  や動的位相  $e^{i\zeta}$  を与えていることが分かる。一方、 $\tilde{h} \ll -\tilde{g}$  の場合、 $\kappa$  や  $\zeta$  を複素化することによって、位相と絶対値の役割が入れ替わっていることが分かる。例えば、 $\gamma_+(x_1, x_2)$  に含まれていた LZSM 遷移確率は、これに対応した位相に変化している。

$$\gamma_+^2(x_1, x_2) \simeq \begin{cases} e^{-2\pi\kappa} e^{-i\zeta} & (\tilde{h} \gg \tilde{g}) \\ e^{-i2\pi\tilde{\kappa}} e^{-\tilde{\zeta}} & (\tilde{h} \ll -\tilde{g}) \end{cases}$$

また、 $\chi$  は、 $\tilde{h} \gg \tilde{g}$  の場合、擬交差点で遷移しない確率  $1 - p_{\text{LZSM}}$  や動的位相以外の相対位相 (Stokes 位相に対応) を与えている。

$$\chi \simeq \begin{cases} (1 - e^{-2\pi\kappa}) e^{i\bar{\phi}_{\text{St}}} & (\tilde{h} \gg \tilde{g}) \\ 2\pi\tilde{\kappa} \left( 2\sqrt{|\tilde{h}|} \right)^{2\tilde{\kappa}} e^{i(-\frac{\pi}{2} + 2\pi\tilde{\kappa})} & (\tilde{h} \ll -\tilde{g}) \end{cases}$$



これより、生存確率は

$$p_\infty \simeq \begin{cases} \left| (1 - e^{-2\pi\kappa}) e^{i\tilde{\phi}_{\text{St}}} + i e^{-2\pi\kappa} e^{-i\zeta} \right|^2 & (\tilde{h} \gg \tilde{g}) \\ \left| i + 2\pi\tilde{\kappa} \left( 2\sqrt{|\tilde{h}|} \right)^{2\tilde{\kappa}} e^{i(-\frac{\pi}{2} + 2\pi\tilde{\kappa})} e^{-i2\pi\tilde{\kappa}} e^{-\tilde{\zeta}} \right|^2 & (\tilde{h} \ll -\tilde{g}) \end{cases}$$

と求まる。  $\tilde{h} \gg \tilde{g}$  の場合は、

$$p_\infty \simeq \left| (1 - p_{\text{LZSM}}) e^{i\phi_{\text{LZSM}}} + p_{\text{LZSM}} \right|^2$$

$$\phi_{\text{LZSM}} := \frac{4}{3} \tilde{h}^{3/2} + 4\kappa \left( 1 + \log \left( \frac{4\tilde{h}}{\tilde{g}} \right) \right) - 2\kappa \log \left( 2\sqrt{\tilde{h}} \right) + \frac{\pi}{2} + \arg \left( \frac{\Gamma(1 + i\kappa)}{\Gamma(1 - i\kappa)} \right)$$

となる。この結果は、一般化断熱瞬間近似と同様に、遷移振幅の和のそれぞれの項がエネルギー準位図中の一つの経路に対応していることを意味している。このことから、今回の近似の妥当性が伺える。 $\tilde{h} \ll -\tilde{g}$  の場合、LZSM 遷移確率に対応した相対位相  $e^{i2\pi\tilde{\kappa}}$  は、 $\chi$  と  $\gamma_+(x_1, x_2)$  で打ち消し合い、 $N = 2$  の場合、生存確率には現れないことが分かる。

$$p_\infty \simeq \left| 1 - 2\pi\tilde{\kappa} e^{-\tilde{\zeta}} \right|^2$$

また、断熱極限  $p_\infty = 1$  からのずれが複素化した動的位相  $\tilde{\zeta} = 4|\tilde{h}|^{3/2}/3$  によって指数関数的に抑えられていることを意味している。この結果は第 4.2 節で見たように、摂動的解析の結果と一致し、これもまた今回の近似が妥当であることを示している。

#### 4.4.2 $N = 3$ の場合

このとき、パラメータは次のように近似できる (Appendix I).

$$|\chi_j| \simeq \begin{cases} 1 - e^{-2\pi\kappa_j} & (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_j \gg g_j) \\ 2\pi\tilde{\kappa}_j \left( 2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_j - \tilde{h}} \right)^{2\tilde{\kappa}_j} & (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_j \ll -g_j) \end{cases}$$

$$\arg(\chi_j) \simeq \begin{cases} \pi + 2 \arg(\Gamma(1 + i\kappa_j)) - 2\kappa_j \log \left( 2\sqrt{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_j} \right) & (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_j \gg g_j) \\ -\frac{1}{2}\pi + 2\pi\tilde{\kappa}_j & (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_j \ll -g_j) \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
 -\arg(\gamma_+(x_1, x_2)) &\simeq \begin{cases} -\frac{2}{3}(\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_2)^{3/2} + \frac{2}{3}(\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1)^{3/2} + \kappa_1 - 2\kappa_1 \log\left(\frac{r_1}{4R_1}\left(1 + \frac{R_1}{R_2}\right)\right) \\ \quad - 2\sqrt{2}\kappa_2 + \kappa_2 + 2\kappa_2 \log\left(\frac{r_2}{4R_2}\left(1 + \frac{R_2}{R_1}\right)\right) \\ \frac{2}{3}(\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1)^{3/2} + \kappa_1 + 2\kappa_1 \log\left(\frac{4}{r_1}\right) - 2\tilde{\kappa}_2 \arctan\left(\sqrt{\frac{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1}{\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h}}}\right) \\ \pi\tilde{\kappa}_1 \end{cases} \\
 -\arg(\gamma_+(x_2, x_3)) &\simeq \begin{cases} \frac{2}{3}(\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_2)^{3/2} + 2\kappa_1 \log\left(\frac{R_2 + R_1}{R_1 R_2}\right) + \kappa_2 + 2\kappa_2 \log\frac{4}{r_2} \\ \pi\tilde{\kappa}_2 \\ \pi\tilde{\kappa}_2 \end{cases} \\
 -\log(|\gamma_+(x_1, x_2)|) &\simeq \begin{cases} \pi\kappa_1 \\ \pi\kappa_1 \\ \frac{2}{3}(\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{h})^{3/2} + 2|\kappa_2| \log\left(\frac{|R_2| + |R_1|}{|R_1 R_2|}\right) + |\kappa_1| + |\kappa_1| \log\frac{16}{r_1^2} \end{cases} \\
 -\log(|\gamma_+(x_2, x_3)|) &\simeq \begin{cases} \pi\kappa_2 \\ \frac{2}{3}(\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h})^{3/2} + |\kappa_2| - 2\kappa_1 \arctan\left(\sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h}}{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1}}\right) + |\kappa_2| \log\left(\frac{16}{r_2^2}\right) \\ -\frac{2}{3}(\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{h})^{3/2} + \frac{2}{3}(\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h})^{3/2} + \tilde{\kappa}_2 - \tilde{\kappa}_2 \log\left(\frac{r_2^2}{16}\left(\frac{|R_2| + |R_1|}{|R_1 R_2|}\right)^2\right) \\ \quad - 2\sqrt{2}\tilde{\kappa}_1 + \tilde{\kappa}_1 + \tilde{\kappa}_1 \log\left(\frac{r_1^2}{16}\left(\frac{|R_1| + |R_2|}{|R_1 R_2|}\right)^2\right) \end{cases}
 \end{aligned}$$

ここで、この場合分けは全て、上から順に

$$\begin{aligned}
 x_1 &\lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \lesssim \tilde{\varepsilon}_2 \ll x_3 \\
 x_1 &\lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3 \\
 x_1 &\ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3
 \end{aligned}$$

対応している。また、

$$R_i := \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{\varepsilon}_1}{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_i}}$$

とした。

$N = 2$  の場合と同様に、これより、 $\gamma_+(x_i, x_j)$  は LZSM 遷移確率や動的位相を与える項であり、擬交

差点がなくなると複素化することが分かる。

$$\gamma_+^2(x_1, x_2) \simeq \begin{cases} e^{-2\pi\kappa_1} e^{-i(\zeta_1 - \zeta_2)} & (x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \\ e^{-2\pi\kappa_1} e^{-i\zeta_1} & (x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \\ e^{-i2\pi\tilde{\kappa}_1} e^{-\tilde{\zeta}_1} & (x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \end{cases}$$

$$\gamma_+^2(x_2, x_3) \simeq \begin{cases} e^{-2\pi\kappa_2} e^{-i\zeta_2} & (x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \\ e^{-i2\pi\tilde{\kappa}_2} e^{-\tilde{\zeta}_2} & (x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \\ e^{-i2\pi\tilde{\kappa}_2} e^{-(\tilde{\zeta}_2 - \tilde{\zeta}_1)} & (x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \end{cases}$$

また,  $\chi_j$  は,  $\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_j \gg \tilde{g}_j$  の場合, 擬交差点で遷移しない確率や動的位相以外の位相 (Stokes 位相に対応) を与えていることも,  $N = 2$  の場合と同様である。

$$\chi_j \simeq \begin{cases} (1 - e^{-2\pi\kappa_j}) e^{i\bar{\phi}_{\text{St},j}} & (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_j \gg \tilde{g}_j) \\ 2\pi\tilde{\kappa}_j \left(2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_j - \tilde{h}}\right)^{2\tilde{\kappa}_j} e^{i(-\frac{\pi}{2} + 2\pi\tilde{\kappa}_j)} & (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_j \ll -\tilde{g}_j) \end{cases}$$

これより, 生存確率は

$$p_\infty \simeq \begin{cases} \left| (1 - e^{-2\pi\kappa_1}) e^{i\bar{\phi}_{\text{St},1}} \right. \\ \quad \left. + (1 - e^{-2\pi\kappa_2}) e^{i\bar{\phi}_{\text{St},2}} e^{-2\pi\kappa_1} e^{-i(\zeta_1 - \zeta_2)} + i e^{-2\pi\kappa_1} e^{-i(\zeta_1 - \zeta_2)} e^{-2\pi\kappa_2} e^{-i\zeta_2} \right|^2 \\ \quad (x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \lesssim \tilde{\varepsilon}_2 \ll x_3) \\ \\ \left| (1 - e^{-2\pi\kappa_1}) e^{i\bar{\phi}_{\text{St},1}} \right. \\ \quad \left. + i e^{-2\pi\kappa_1} e^{-i\zeta_1} + 2\pi\tilde{\kappa}_2 \left(2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h}}\right)^{2\tilde{\kappa}_2} e^{i(-\frac{\pi}{2} + 2\pi\tilde{\kappa}_2)} e^{-2\pi\kappa_1} e^{-i\zeta_1} e^{-i2\pi\tilde{\kappa}_2} e^{-\tilde{\zeta}_2} \right|^2 \\ \quad (x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \\ \\ \left| i + 2\pi\tilde{\kappa}_1 \left(2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{h}}\right)^{2\tilde{\kappa}_1} e^{i(-\frac{\pi}{2} + 2\pi\tilde{\kappa}_1)} e^{-i2\pi\tilde{\kappa}_1} e^{-\tilde{\zeta}_1} \right. \\ \quad \left. + 2\pi\tilde{\kappa}_2 \left(2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h}}\right)^{2\tilde{\kappa}_2} e^{i(-\frac{\pi}{2} + 2\pi\tilde{\kappa}_2)} e^{-i2\pi\tilde{\kappa}_1} e^{-\tilde{\zeta}_1} e^{-i2\pi\tilde{\kappa}_2} e^{-(\tilde{\zeta}_2 - \tilde{\zeta}_1)} \right|^2 \\ \quad (x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \end{cases}$$

と求まる。まず,  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \lesssim \tilde{\varepsilon}_2 \ll x_3$  の場合,  $N = 2$  の場合と同様に, 遷移振幅の和の一つ一つが, エネルギー準位図中の経路に一つずつ対応しているとみなすことができる (図 4.4.1(a))。

$$p_\infty \simeq \left| (1 - p_1) e^{i\bar{\phi}_{\text{St},1}} e^{i\zeta_1} + (1 - p_2) p_1 e^{i\bar{\phi}_{\text{St},2}} e^{i\zeta_2} + i p_1 p_2 \right|^2 \quad (4.4.1)$$

次に,  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$  の場合, 擬交差点が 2 つに減る (図 4.4.1(b))。このとき, 擬交差点を持たない  $N = 2$  の場合と同様に, LZSM 遷移確率を複素化した相対位相  $e^{-2\pi i\tilde{\kappa}_2}$  は相殺し, 遷移確率に影響

響を与えない。

$$p_\infty \simeq \left| (1 - p_1) e^{i\bar{\phi}_{\text{st},1}} + i p_1 e^{-i\zeta_1} \left( 1 - 2\pi\tilde{\kappa}_2 \left( 2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h}} \right)^{2\tilde{\kappa}_2} e^{-\tilde{\zeta}_2} \right) \right|^2 \quad (4.4.2)$$

また、擬交差点をもつ  $|0\rangle, |1\rangle$  準位間においては、相対位相にさえ最大励起状態である  $|2\rangle$  の影響が反映されず、一般化断熱瞬間近似と同様の解釈が可能であることが分かった。  $x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$  の場合 (図 4.4.1(c)), LZSM 遷移確率を複素化した相対位相  $e^{-2\pi i\tilde{\kappa}_1}$  が生存確率に反映される。

$$p_\infty \simeq \left| 1 - 2\pi\tilde{\kappa}_1 \left( 2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{h}} \right)^{2\tilde{\kappa}_1} e^{-\tilde{\zeta}_1} - 2\pi\tilde{\kappa}_2 \left( 2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h}} \right)^{2\tilde{\kappa}_2} e^{-i2\pi\tilde{\kappa}_1} e^{-\tilde{\zeta}_2} \right|^2 \quad (4.4.3)$$

つまり、LZSM 遷移確率を複素化した相対位相  $e^{-2\pi i\tilde{\kappa}_2}$  は、擬交差点を持たない二つの遷移の過程 (図 4.4.1(c) の青線で示された過程) の相対位相として生存確率に影響することが分かった。

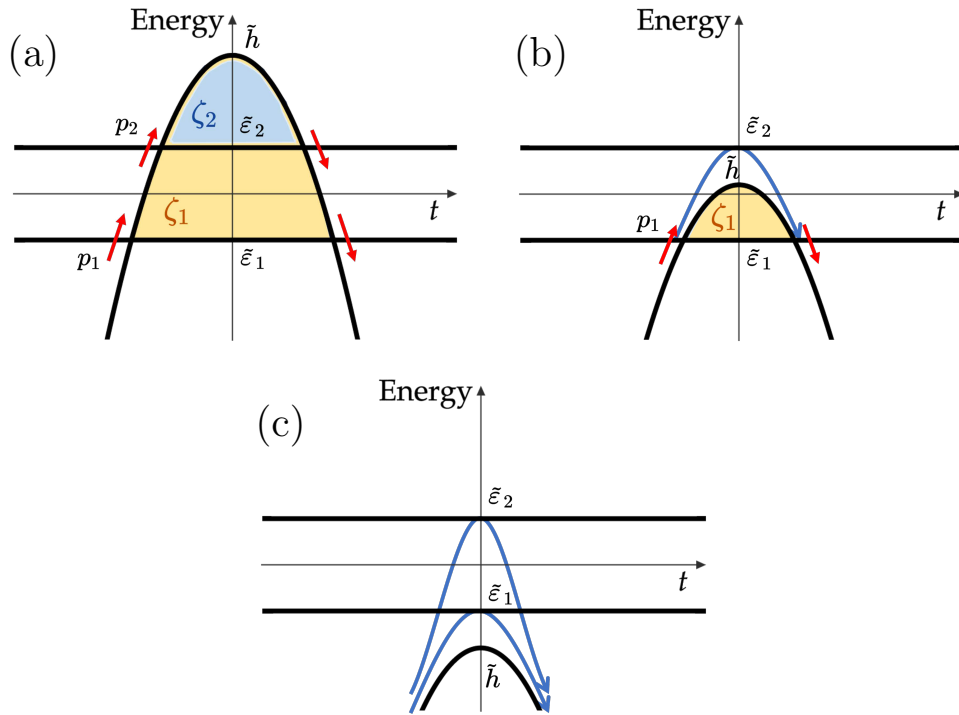


図 4.4.1 ハミルトニアン対角成分 (黒線) と、それぞれのパラメータ領域における遷移 (赤矢印, 青矢印) の過程を表した図。赤矢印は非断熱遷移を表す一方で、青矢印は断熱的な遷移を表している。(a)  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \lesssim \tilde{\varepsilon}_2 \ll x_3$  の場合、式 (4.4.1) より、遷移確率は  $p_1, p_2$  で与えられ、相対位相は  $\zeta_1, \zeta_2$  に依存している。(b)  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$  の場合、式 (4.4.2) より、 $|0\rangle, |1\rangle$  間での非断熱遷移は起きる一方で、 $|2\rangle$  への遷移は  $e^{-\tilde{\zeta}_2}$  で抑えられる。(c)  $x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$  の場合、式 (4.4.3) より、 $|1\rangle, |2\rangle$  への遷移がそれぞれ  $e^{-\tilde{\zeta}_1}, e^{-\tilde{\zeta}_2}$  のように抑えられる。この指数関数的に抑えられた遷移過程の相対位相として、LZSM 遷移確率を複素化した  $e^{-2\pi i\tilde{\kappa}_1}$  が影響を与える。

4.4.3 任意の  $N$  の場合

前節で、生存確率は (4.3.9) で表すことができ、可能な組み合わせは

$$\chi_n \gamma_+^2(x_1, x_n), \quad i\gamma_+^2(x_1, x_n), \quad \chi_{n-1} \gamma_+^2(x_1, x_n), \quad (\chi_0 = \chi_N = 0)$$

であることを示した。ここで、これらの組み合わせは

$$\chi_n \gamma_+^2(x_1, x_n) \simeq q_n e^{i\bar{\phi}_{\text{St},n}} e^{-i(\zeta_1 - \zeta_n)} \prod_{k=1}^{n-1} p_k \quad (4.4.4)$$

$$i\gamma_+^2(x_1, x_n) \simeq i e^{-i\zeta_1} \prod_{k=1}^{n-1} p_k \quad (4.4.5)$$

$$\chi_{n-1} \gamma_+^2(x_1, x_n) \simeq \tilde{q}_{n-1} e^{i\tilde{\phi}_{\text{St},n-1}} e^{-i\zeta_1} e^{-i\tilde{\zeta}_{n-1}} \prod_{k=1}^{m-1} p_k \prod_{k=m}^{n-1} \tilde{p}_k \quad (4.4.6)$$

のように近似できると考えられる。ただし、

$$\begin{aligned} \tilde{p}_k &:= e^{-2\pi i \kappa_k} \\ \tilde{q}_k &:= 2\pi \tilde{\kappa}_k \left( 2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_k - \tilde{h}} \right)^{2\tilde{\kappa}_k} \\ e^{i\tilde{\phi}_k} &:= -i e^{2\pi i \tilde{\kappa}_k} \end{aligned}$$

とした。また、最後の式では、 $\varepsilon_{m-1} < h < \varepsilon_m$  であるということを仮定している。式 (4.4.4) の組み合わせは、 $|n-1\rangle$  が擬交差点を持ち、かつ擬交差点をもつ準位の中で最もエネルギーの高いものではない場合に現れる。式 (4.4.5) の組み合わせは、 $|n-1\rangle$  が擬交差点を持ち、かつ擬交差点をもつ準位の中で最もエネルギーの高いものである場合に現れる。式 (4.4.6) の組み合わせは、 $|n-1\rangle$  が擬交差点を持たない場合に現れる。

これより、非断熱過程から断熱過程への移り変わりが生存確率に与える影響は次のように考えることができる。擬交差点を持つ非断熱過程では、一般化断熱瞬間近似や式 (4.4.1) と同様に、Stokes 位相  $\bar{\phi}_{\text{St},k}$  と動的位相  $\zeta_k$  を位相として持ち、LZSM 遷移確率  $p_k$  によって遷移確率が与えられる。しかし、擬交差点を持たない断熱過程にパラメータが変化すると、擬交差点を持たない準位における遷移確率  $p_k$  や Stokes 位相  $\bar{\phi}_{\text{St},k}$ 、動的位相  $\zeta_k$  が複素化し、それぞれ  $\tilde{p}_k$ 、 $\tilde{\phi}_{\text{St},k}$ 、 $\tilde{\zeta}_k$  のように表せる。そのみでなく、擬交差点を持たない  $|n-1\rangle$  に遷移して戻ってくる確率、つまり  $|0\rangle \rightarrow |n-1\rangle \rightarrow |0\rangle$  という経路を通る確率に、 $|n-1\rangle$  に遷移しない確率を複素化した  $\tilde{q}_{n-1}$  が寄与する。つまり、 $|n-1\rangle$  に遷移する確率を複素化した  $\tilde{p}_{n-1}$  と、 $|n-1\rangle$  に遷移しない確率を複素化した  $\tilde{q}_{n-1}$  の積が  $|n-1\rangle$  に遷移して戻ってくる確率振幅  $\chi_{n-1} \gamma_+^2(x_1, x_n)$  を与えるというのは興味深い。

また、これまで断熱過程の相対位相は考えられてこなかったが、これを考慮すると、LZSM 遷移確率を複素化した  $\tilde{p}_k$  が相対位相として自然に現れることも分かる。

## 第 5 章

# 結論

本稿では、時間に依存するハミルトニアンの下での離散準位量子系のダイナミクスについて解析してきた。

第 2 章では、時間に依存するハミルトニアンの下での量子 2 準位系のダイナミクスを、パラメータを用いる形で表した。これにより、瞬間固有状態間の遷移振幅を明示的に表すことができる。このことを用いて、2 準位系のダイナミクスが常に瞬間固有状態に留まり続けるという条件（無遷移条件）を導いた。ここで、ハミルトニアンが時間にどのように依存するかについては、仮定していない。このため、断熱定理で仮定されているハミルトニアンのクラスを超えた広いクラスのハミルトニアンが対象となっていることに注意する。

断熱瞬間近似は 2 準位系や 3 準位系に対して適用されてきたが、多準位系に対しては適切な導出がなかった。第 3 章では、先行研究 [64, 66] で得られていた S 行列を改良して、多準位系に適用可能な一般化断熱瞬間近似を提案した。また、この結果を LZSM 格子模型や多準位 LZSM 干渉模型に適用し、その有用性を見た。ユニタリ行列の積で S 行列を表したことにより、計算が容易になったのみでなく、断熱瞬間近似と関連した物理的な解釈も可能となった。

第 4 章では、時間に依存するハミルトニアンの下での多準位放物模型における生存確率について議論した。求めた近似的な生存確率は、この解析手法が妥当とされるパラメータ領域で、数値計算に良く一致することを確認した。さらに、複素化した LZSM 遷移確率が断熱過程の間の相対位相として現れることを見た。これは、断熱過程が高々 1 つしか生じない 2 準位系では観測できない一方、3 準位以上の多準位系では観測にかかることを意味している。このような位相が多準位放物模型以外でも現れるのかどうかは興味深い。

今後の展望をいくつか挙げる。まず、第 3 章で扱った多準位系は、擬交差点（ハミルトニアンの対角成分が交差する時刻）が十分離れた系であった。第 3 章での解析は、この系が非断熱過程であれば局所的に LZSM 模型として扱えることを意味している。一方で、第 4 章で扱った多準位系は、基本的に  $t = 0$  での瞬間固有値が十分離れている系であった（例外は図 4.3.5）。これらの近似は同等の評価を与えるものなのか、さらに、これらの近似に関連して、実条件を満たしていない場合の完全 WKB 解析 [65, 66] や DDP 公式などの近似手法との関係性はあるのか等、今後の課題は尽きない。また、これらの手法を実験系に対応させ、非自明な物理現象を予言・記述することも課題である [113–115]。

さらに、今回扱っていないクラスのハミルトニアンとして、複数の擬交差点が十分近い系、つまり第 3

---

章で扱ったハミルトニアンと真逆の系が考えられる。このような強結合系，もしくは擬交差点を持つ断熱系は本質的に LZSM 模型とは異なると考えられる一方，量子アニーリング [13, 116] 等で頻繁に現れる。このようなクラスの可積分模型として，bow-tie 模型が知られている [30, 31]。これを足がかりに近似公式を導出できないか模索していきたい。

これらの擬交差点間の距離の大小の対比は，連続パルスによる量子アルゴリズムという観点では，断熱ショートカット [11, 117] と断熱量子計算 [12, 13] の関係と類似している。断熱ショートカットでは，非断熱遷移を起こすが終状態は基底状態となるように制御する。これは直観的には擬交差点が 2 つ以上あり，それらが離れている状況である [118]。一方で，断熱量子計算ではエネルギーギャップが十分大きいので，擬交差点は一点とみなせる。この対比を離散パルスによる量子アルゴリズムに置き換えると，断熱ショートカットを取り入れた量子近似最適化アルゴリズム [119, 120] と量子近似最適化アルゴリズム (Quantum Approximate Optimization Algorithm : QAOA) [121] の関係とみなすことができる。連続パルスと離散パルスによる量子アルゴリズムの関係性も含めて，これらを非断熱遷移の観点から統一的に理解できるかは興味深い。

最後に，今回考えた系は全て有限次元系であるが，無限次元系，もしくはその縮約をとった開放量子系の問題への展開が考えられる。最も単純な無限次元放物模型の解析においても，転回点が複素平面上に潜り込み [112]，分岐を横切る Stokes 線という見慣れない解析が必要になる。さらに，開放量子系においては，時間に依存するハミルトニアンの下での基礎方程式がどのような形になっているのか，一般的な合意が無い\*<sup>1</sup>。そのため，まずは全体系で厳密に解ける系の解析が必要であると考えられる [123]。

量子技術の発達により，時間に依存するハミルトニアンによって離散量子系を制御することが可能となり，系のダイナミクスの解析は基礎的な面のみでなく，応用面でも重要となってきた。本研究が量子系により深い理解に役立つことを願っている。

---

\*<sup>1</sup> 代表的な例として，断熱極限かつ Born-Markov 近似の下で正しいとされる量子断熱マスター方程式が挙げられる [122]。また，冷却原子系での実験等では，ハミルトニアンのみが時間に依存し，散逸係数は時間に依存しない GKSL マスター方程式に従う系を作ることができる。

## 謝辞

本研究を進めるにあたりご指導頂いた中里弘道教授，安倍博之教授，湯浅一哉教授に感謝いたします。Antonino Messina 教授によるご指導，Roberto Grimaudo 博士との有益な議論に感謝いたします。また，研究の議論に付き合っていたいただいた研究室の方々にも感謝いたします。本研究は JSPS 特別研究員奨励費 21J12952 の助成を受けたものです。また，早稲田大学スーパーグローバル大学創成支援 (SGU) 数物系科学拠点とアーリーバードプログラムの支援を受けたものです。特に，Palermo 大学への渡航の支援をして下さった SGU 数物系科学拠点の石崎由香利様，アーリーバードプログラムにて支援の手続きをして下さった根岸美幸様に感謝いたします。最後に，様々な面で支えて下さった家族に感謝いたします。



# Appendix

## A Marzlin-Sanders のパラドックス

近年, Marzlin, Sanders によってこの断熱条件の問題点が指摘され, 盛んに議論された [16–23]. この問題について紹介する.

彼らによって提起された問題は, 次のようにまとめられる [17].

### 例 A.1 Marzlin-Sanders のパラドックス

あるハミルトニアン  $H^A(t)$  の瞬間固有値を  $E_n^A(t)$ , 瞬間固有状態を  $|E_n^A(t)\rangle$  とする. このハミルトニアン  $H^A(t)$  が断熱条件

$$\left| \frac{\langle E_n^A(t) | \dot{E}_m^A(t) \rangle}{E_n^A(t) - E_m^A(t)} \right| \ll 1 \quad (\text{A.1})$$

を満たしているとする. このとき, 断熱近似より, ハミルトニアン  $H^A(t)$  によって生成される時間発展演算子を  $U^A(t)$  としたとき,

$$|\langle E_n^A(t) | U^A(t) | E_n^A(0) \rangle| \simeq 1$$

が成り立つ.

さて, 次のように定義されるハミルトニアン  $H^B(t)$  を考える.

$$H^B(t) = -(U^A(t))^\dagger H^A(t) U^A(t)$$

このハミルトニアン  $H^B(t)$  の瞬間固有値と瞬間固有状態はそれぞれ

$$\begin{aligned} E_n^B(t) &= E_n^A(t) \\ |E_n^B(t)\rangle &= (U^A(t))^\dagger |E_n^A(t)\rangle \end{aligned}$$

と表され, ハミルトニアン  $H^B(t)$  によって生成される時間発展演算子は

$$U^B(t) = (U^A(t))^\dagger$$

となる. 以上より,

$$\langle E_m^B(t) | \dot{E}_n^B(t) \rangle = iE_m^A(t)\delta_{mn} + \langle E_m^A(t) | \dot{E}_n^A(t) \rangle$$

が成り立つ。式 (A.1) より,  $n \neq m$  のとき,

$$\left| \frac{\langle E_n^A(t) | \dot{E}_m^A(t) \rangle}{E_n^A(t) - E_m^A(t)} \right| = \left| \frac{\langle E_n^B(t) | \dot{E}_m^B(t) \rangle}{E_n^B(t) - E_m^B(t)} \right| \ll 1$$

が導かれる。つまり, ハミルトニアン  $H^B(t)$  も断熱条件を満たしている。これより, 断熱近似が適用できる。しかし, 断熱近似を適用すると,

$$\begin{aligned} 1 &\simeq |\langle E_n^B(t) | U^B(t) | E_n^B(0) \rangle| = |\langle E_n^A(t) | U^A(t) (U^A(t))^\dagger | E_n^A(0) \rangle| \\ &= |\langle E_n^A(t) | E_n^A(0) \rangle| \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

が導かれる。断熱条件 (A.1) を満たし, かつ条件 (A.2) を満たさないハミルトニアン  $H^A(t)$  が存在するため, 断熱条件 (A.1) は断熱近似の十分条件ではない。

実はこのハミルトニアン  $H^B(t)$  は, 断熱定理 (第 2.1.1 節) の仮定を満たしていないため, 断熱的なハミルトニアンではないことが知られている [20, 21]。  $H^B(t)$  について断熱定理の証明を適用してみる。まず, 瞬間固有状態の位相の不定性に関する議論 (式 (2.1.2)) から, 瞬間固有状態は

$$|E_n^B(s; T)\rangle = e^{-iT \int_0^s ds' E_n^A(s')} (U^A(s))^\dagger |E_n^A(s)\rangle$$

と表され, 時間発展演算子は

$$U_B(s; T) = \sum_n e^{-iT \int_0^s ds' E_n^A(s')} (U^A(s))^\dagger |E_n^A(s)\rangle \langle E_n^A(0)|$$

と表せる。よって, 式 (2.1.7) より,

$$\bar{K}^B(s) = i \sum_{m,n} \langle E_m^A(s) | \dot{E}_n^A(s) \rangle |E_m^A(0)\rangle \langle E_n^A(0)|$$

となる。以上より,  $\bar{K}(s)$  の非対角成分は振動因子を含まず, 断熱定理の証明が破綻することが分かる。振動因子を含まない原因は, 射影演算子の連続性の仮定を破っている点にある。実際,

$$P_n^B(s; T) = P_n^A(0) - \frac{i}{T E_n^A(s)} \sum_m e^{-iT \int_0^s ds' (E_n^A(s') - E_m^A(s'))} \langle E_m^A(s) | \dot{E}_n^A(s) \rangle |E_m^A(0)\rangle \langle E_n^A(0)|$$

より,  $T \rightarrow \infty$  で  $\partial P_n^B(s; T)/\partial s$  が定義されず, 連続性の仮定を満たしていないことが分かる。

このように Marzlin-Sanders のパラドックスは断熱定理の前提を満たしていないことが原因であったが, この問題を契機に断熱近似や断熱条件が見直されることとなった。

## B 無遷移条件の別証明

この節では, 節 2.3.2.2 にて考慮しなかった,  $\xi_0(t) \rightarrow 0, \epsilon_0(t) \neq 0$  という場合について議論する。 $\xi_0(t) \rightarrow 0$  は,  $\theta(0) \rightarrow 0$  に対応しており, 式 (2.3.14) より,  $\chi(t) \rightarrow 0$  もしくは  $\Theta(t) \rightarrow \pi/2$  によっ

て実現されることが分かる。まず  $\chi(t) \rightarrow 0$  の極限を考える。  $\epsilon_0(t)\dot{\chi}(t) \sin 2\chi(t) =: \dot{c}(t)$  と定義し、  $\epsilon_0(t) \sin 2\chi(t) \rightarrow 0$  を考える。これは節 2.3.2.2 で考えた状況と全く同じである。同様の議論によって、

$$c(t) \simeq \frac{1}{2} \left( \frac{\cos \theta(t)}{\cos \theta(0)} - 1 \right)$$

$$\dot{\phi}_\omega(t) = O(\dot{c}(t))$$

と求まる。

$$\dot{c}(t) \simeq -\frac{1}{2} \dot{\theta}(t) \sin \theta(t)$$

より、  $\epsilon_0(t) \sin 2\chi(t) = \dot{c}(t)/\dot{\chi}(t) \rightarrow 0$  に対応する量は、

$$\epsilon_0(t) \sin 2\chi(t) = \frac{\dot{c}(t)}{\dot{\chi}(t)} \simeq -\frac{\dot{\theta}(t)}{2\dot{\chi}(t)} \sin \theta(t) \rightarrow 0$$

となる。ここでは  $\theta(t) \rightarrow 0$  を考えているので、  $\dot{\theta}(t)/\dot{\chi}(t) < +\infty$  ならば、無遷移過程となることが分かる。さて、  $\epsilon_0(t) \neq -1$  という条件は、式 (2.3.14) の右辺が発散することを意味しており、  $\Theta(t) + \phi(t) \neq 0$  が導かれる。このとき、  $\chi(t) \rightarrow 0$  に注意すると、式 (2.3.15),(2.3.17) より、この条件は

$$\Omega(t) \neq 0$$

に対応していることが分かる。

次に  $\Theta(t) \rightarrow \pi/2$  について考える。このとき、式 (2.3.15) より、

$$\frac{\dot{\chi}(t)}{y(t)} \rightarrow 0$$

$$|\omega(t)| \rightarrow \hbar y(t)$$

$$\Omega(t) \simeq \frac{\hbar \dot{\chi}(t) \tan \phi(t)}{\sin 2\chi(t)} + \frac{\hbar y(t)}{\tan 2\chi(t)}$$

$$\rightarrow \frac{\hbar y(t)}{\tan 2\chi(t)}$$

$$= \frac{|\omega(t)|}{\tan 2\chi(t)}$$

$$\theta(t) \rightarrow 2\chi(t)$$

$$\dot{\phi}(t) \rightarrow \frac{2|\omega(t)|}{\hbar \sin \theta(t)}$$

が成り立つ。  $\chi(t) = \theta(t)/2$  より、この極限は断熱極限に対応していることが分かる。また、この極限では

$$\frac{\hbar \dot{\theta}(t)}{2|\omega(t)|} \Rightarrow 0$$

が成り立つことが分かる。また、条件  $\epsilon_0(t) \neq -1$  は、式 (2.3.14) より、  $\chi(t) = \pi/2$  もしくは  $\phi(t) \neq \pi/2$  に対応しており、

$$\theta(t) = \pi$$

もしくは

$$\begin{aligned} \cos \phi(t) &\neq 0 \\ \int_0^t dt' \frac{2E(t')}{\hbar} &\neq (2n+1)\frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

に対応している。これは無遷移極限であっても、 $\cos \phi(t) = 0$  を満たす時刻においては微小な遷移が起きることを意味している。

## C LZSM 模型の厳密解の導出

LZSM 模型 (3.1.1) を以下に再掲する。

$$H(t) = \begin{pmatrix} vt & g \\ g & -vt \end{pmatrix}, \quad (v, g > 0)$$

このハミルトニアンの下での Schrödinger 方程式を考える ( $\hbar = 1$  とする)。

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (\text{C.1})$$

この方程式の解を以下のように表す。

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \alpha(t) |0\rangle + \beta(t) |1\rangle \quad (\text{C.2})$$

ただし、係数  $\alpha(t), \beta(t)$  は以下の関係を満たす。

$$|\alpha(t)|^2 + |\beta(t)|^2 = 1$$

(C.2) を式 (C.1) に代入すると

$$\begin{cases} i \frac{d\alpha(\tau)}{d\tau} = \frac{\tau}{2} \alpha(\tau) + \sqrt{\kappa} \beta(\tau) \\ i \frac{d\beta(\tau)}{d\tau} = \sqrt{\kappa} \alpha(\tau) - \frac{\tau}{2} \beta(\tau) \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

$$\begin{cases} \frac{d^2 \alpha(z)}{dz^2} + \left( -i\kappa + \frac{1}{2} - \left( \frac{z}{2} \right)^2 \right) \alpha(z) = 0 \\ \frac{d^2 \beta(z)}{dz^2} + \left( -i\kappa - \frac{1}{2} - \left( \frac{z}{2} \right)^2 \right) \beta(z) = 0 \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

を得る。ここで、 $z := e^{\frac{\pi}{4}i} \tau$ ,  $\tau := \sqrt{2vt}$ ,  $\kappa := \frac{g^2}{2v}$  と置いた。

さて、これらの微分方程式が放物柱関数  $D_\nu(z)$  の満たす微分方程式 (Weber 方程式)

$$\frac{d^2 D_\nu(z)}{dz^2} + \left( \nu + \frac{1}{2} - \left( \frac{z}{2} \right)^2 \right) D_\nu(z) = 0$$

となっていることが分かる。

よって,  $\alpha(z)$  は Weber 方程式の独立な解  $D_{-i\kappa}(z), D_{i\kappa-1}(-iz)$  を用いた線形結合で書けることが分かる (Appendix D).

$$\alpha(\tau) = c_1 D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + c_2 D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \quad (\text{C.5})$$

一方,  $\beta(z)$  は  $D_{-i\kappa-1}(z), D_{i\kappa}(-iz)$  が独立な解である. 式 (C.3) より,

$$\begin{aligned} \beta(\tau) &= c_1 e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + c_2 \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \\ &= c_1 e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{i\kappa-1}^*(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau^*}) + c_2 \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} D_{-i\kappa}^*(e^{\frac{\pi}{4}i\tau^*}) \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

を得る.

ここで, 初期時刻  $\tau = \tau_0$  の状態  $|\psi(\tau_0)\rangle = (\alpha(\tau_0) \beta(\tau_0))^T$  が与えられているとき, 重ね合わせの係数は

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{\frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0})\alpha(\tau_0) - D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0})\beta(\tau_0)}{\frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0})D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0}) - e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0})D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0})} =: c_1(\tau_0) \\ c_2 &= \frac{e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0})\alpha(\tau_0) - D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0})\beta(\tau_0)}{D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0})e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0}) - D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0})\frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0})} =: c_2(\tau_0) \end{aligned}$$

と表せる. これより, 時刻  $\tau$  における状態は

$$\begin{aligned} |\psi(\tau)\rangle &= \begin{pmatrix} c_1(\tau_0) D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + c_2(\tau_0) D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \\ c_1(\tau_0) e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + c_2(\tau_0) \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{d\alpha(\tau_0) - b\beta(\tau_0)}{ad - bc} D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + \frac{c\alpha(\tau_0) - a\beta(\tau_0)}{bc - ad} D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \\ \frac{d\alpha(\tau_0) - b\beta(\tau_0)}{ad - bc} e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + \frac{c\alpha(\tau_0) - a\beta(\tau_0)}{bc - ad} \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{ad - bc} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} dD_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) - cD_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) & -bD_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + aD_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \\ e^{\frac{\pi}{4}i} \left( \sqrt{\kappa} dD_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) - \frac{ic}{\sqrt{\kappa}} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \right) & e^{\frac{\pi}{4}i} \left( \frac{ia}{\sqrt{\kappa}} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) - \sqrt{\kappa} bD_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) \right) \end{pmatrix} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \alpha(\tau_0) \\ \beta(\tau_0) \end{pmatrix} \\ &=: U(\tau, \tau_0) \begin{pmatrix} \alpha(\tau_0) \\ \beta(\tau_0) \end{pmatrix} \\ a &:= D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0}) \\ b &:= D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0}) \\ c &:= e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0}) \\ d &:= \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0}) \end{aligned}$$

と表せる. ここで,  $\tau_0, \tau \in \mathbb{R}$  のとき,

$$\begin{aligned}
U(\tau, \tau_0) &= \begin{pmatrix} f(\tau, \tau_0) & -g^*(\tau, \tau_0) \\ g(\tau, \tau_0) & f^*(\tau, \tau_0) \end{pmatrix} \\
f(\tau, \tau_0) &:= \frac{dD_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) - cD_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau)}{ad - bc} \\
&= \frac{\frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}}D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0)D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) - e^{\frac{\pi}{4}i}\sqrt{\kappa}D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0)D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau)}{e^{-\frac{3\pi}{4}i}D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0)D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0) - e^{\frac{\pi}{4}i}\sqrt{\kappa}D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0)D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0)} \\
g(\tau, \tau_0) &:= \frac{e^{\frac{\pi}{4}i}\sqrt{\kappa}dD_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) - e^{-\frac{3\pi}{4}i}\frac{c}{\sqrt{\kappa}}D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau)}{ad - bc} \\
&= \frac{-iD_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0)D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) + iD_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0)D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau)}{e^{-\frac{3\pi}{4}i}D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0)D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0) - e^{\frac{\pi}{4}i}\sqrt{\kappa}D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau_0)D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau_0)}
\end{aligned}$$

と, ユニタリな時間発展演算子を用いた形で表せる.

## D 放物柱関数に関する基礎事項

Weber 方程式

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4}\right)\psi(z) = 0$$

の解を放物柱関数 (Weber 関数) と呼び,  $\psi(z) = D_\nu(z)$  で表す. この節では, 放物柱関数の基本的な性質を紹介する.

### D.1 性質

Weber 方程式の基本解は  $D_\nu(\pm z), D_{-\nu-1}(\pm iz)$  のうち 2 つを採用する. それぞれ

$$\begin{aligned}
\sqrt{2\pi}D_\nu(\pm iz) &= \Gamma(\nu + 1) \left( e^{\mp i\pi\nu} D_{-\nu-1}(z) + e^{\pm i\frac{\pi}{2}\nu} D_{-\nu-1}(-z) \right) \\
\sqrt{2\pi}D_{-\nu-1}(z) &= \Gamma(-\nu) \left( e^{\mp i(\frac{\pi}{2}\nu + \frac{\pi}{2})} D_\nu(\pm iz) + e^{\pm i(\frac{\pi}{2}\nu + \frac{\pi}{2})} D_\nu(\mp iz) \right) \\
D_{-\nu-1}(z) &= \pm i e^{\pm i\pi(\nu+1/2)} D_{-\nu-1}(-z) + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\nu+1)} e^{\pm i\frac{\pi}{2}\nu} D_\nu(\pm iz)
\end{aligned}$$

といった関係にある. また,

$$D_\nu^*(z) = D_{\nu^*}(z^*)$$

が成り立つ.

## D.2 漸化式

以下の漸化式が成り立つ.

$$\begin{aligned} D_\nu(z) &= \frac{1}{\nu+1} (zD_{\nu+1}(z) - D_{\nu+2}(z)) \\ D_\nu(z) &= (\nu-1)D_{\nu-2}(z) - zD_{\nu-1}(z) \end{aligned}$$

また, 放物柱関数の微分に関して, 以下の関係式が成り立つ.

$$\begin{aligned} \frac{dD_\nu(z)}{dz} &= \frac{1}{2}zD_\nu(z) - D_{\nu+1}(z) \\ \frac{dD_\nu(z)}{dz} &= \nu D_{\nu-1}(z) - \frac{1}{2}zD_\nu(z) \\ \frac{dD_\nu(z)}{dz} &= \frac{1}{2}(\nu D_{\nu-1}(z) - D_{\nu+1}(z)) \end{aligned}$$

## D.3 漸近展開と Stokes 行列

放物柱関数の漸近展開は, 変数の偏角に依存して次のように与えられる [124].

$$D_\nu(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} \begin{cases} e^{-\frac{z^2}{4}} z^\nu (1 + O(z^{-2})) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} \frac{e^{-i\pi\nu + \frac{z^2}{4}}}{z^{\nu+1}} (1 + O(z^{-2})) & -\frac{\pi}{2} < \arg z < -\frac{\pi}{4} \\ e^{-\frac{z^2}{4}} z^\nu (1 + O(z^{-2})) & |\arg z| < \frac{3}{4}\pi \\ e^{-\frac{z^2}{4}} z^\nu (1 + O(z^{-2})) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} \frac{e^{i\pi\nu + \frac{z^2}{4}}}{z^{\nu+1}} (1 + O(z^{-2})) & \frac{\pi}{4} < \arg z < \frac{5}{4}\pi \\ e^{-2\pi i\nu} e^{-\frac{z^2}{4}} z^\nu (1 + O(z^{-2})) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} \frac{e^{i\pi\nu + \frac{z^2}{4}}}{z^{\nu+1}} (1 + O(z^{-2})) & \frac{3}{4}\pi < \arg z < \frac{3}{2}\pi \end{cases} \quad (\text{D.1})$$

例 D.1  $\kappa \in \mathbb{R}$  とする.  $\tau \rightarrow \infty$  において,

$$\begin{aligned} D_{i\kappa} \left( e^{\frac{3\pi}{4}i\tau} \right) &\simeq e^{\frac{i}{4}\tau^2} e^{-\frac{3\pi}{4}\kappa} \tau^{i\kappa} \\ D_{-i\kappa} \left( e^{\frac{\pi}{4}i\tau} \right) &\simeq e^{-\frac{i}{4}\tau^2} e^{\frac{\pi}{4}\kappa} \tau^{-i\kappa} \\ D_{-i\kappa-1} \left( e^{\frac{5\pi}{4}i\tau} \right) &\simeq \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(i\kappa+1)} e^{\frac{i}{4}\tau^2} e^{-\frac{\pi}{4}\kappa} \tau^{i\kappa} \\ D_{i\kappa-1} \left( e^{-\frac{\pi}{4}i\tau} \right) &\simeq 0 \\ D_{-i\kappa} \left( e^{\frac{5\pi}{4}i\tau} \right) &\simeq e^{-\frac{i}{4}\tau^2} e^{-\frac{3\pi}{4}\kappa} \tau^{-i\kappa} \\ D_{i\kappa-1} \left( e^{\frac{3\pi}{4}i\tau} \right) &\simeq \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-i\kappa+1)} e^{-\frac{i}{4}\tau^2} e^{-\frac{\pi}{4}\kappa} \tau^{-i\kappa} \\ D_{-i\kappa-1} \left( e^{-\frac{\pi}{4}i\tau} \right) &\simeq 0 \\ D_{i\kappa} \left( e^{-\frac{\pi}{4}i\tau} \right) &\simeq e^{\frac{i}{4}\tau^2} e^{\frac{\pi}{4}\kappa} \tau^{i\kappa} \end{aligned}$$

が成り立つ。

例 D.2 初期時刻を  $\tau_0 = -\infty$ , 終時刻を  $\tau = \infty$  とするこのとき, 時間発展演算子の成分  $f(\tau, \tau_0), g(\tau, \tau_0)$  はそれぞれ

$$\begin{aligned}
f(\infty, -\infty) &= \lim_{\substack{\tau \rightarrow \infty \\ \tau_0 \rightarrow -\infty}} \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0}) D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) - e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0}) D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau})}{e^{-\frac{3\pi}{4}i} D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0}) D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) - e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0}) D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau})} \\
&= \lim_{\substack{\tau \rightarrow \infty \\ \tau_0 \rightarrow -\infty}} \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i} e^{\frac{i}{4}|\tau_0|^2} |\tau_0|^{i\kappa} e^{-\frac{i}{4}\tau^2} \tau^{-i\kappa} e^{-\frac{\pi}{2}\kappa}}{e^{-\frac{3\pi}{4}i} e^{\frac{\pi}{2}\kappa}} \\
|f(\infty, -\infty)| &= e^{-\pi\kappa} \\
g(\infty, -\infty) &= \lim_{\substack{\tau \rightarrow \infty \\ \tau_0 \rightarrow -\infty}} \frac{-i D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0}) D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + i D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0}) D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau})}{e^{-\frac{3\pi}{4}i} D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau_0}) D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) - e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau_0}) D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau})} \\
&= \lim_{\substack{\tau \rightarrow \infty \\ \tau_0 \rightarrow -\infty}} \frac{i \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(i\kappa+1)} e^{\frac{i}{4}|\tau_0|^2} |\tau_0|^{i\kappa} e^{\frac{i\tau^2}{4}} \tau^{i\kappa}}{e^{-\frac{3\pi}{4}i} e^{\frac{\pi}{2}\kappa}} \\
|g(\infty, -\infty)| &= \left| \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(i\kappa+1)} e^{-\frac{\pi}{2}\kappa} \right|
\end{aligned}$$

と求まる. ここで,

$$\begin{aligned}
e^{-\frac{\pi}{2}\kappa} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(1+i\kappa)} &= e^{-\frac{\pi}{2}\kappa} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{|\Gamma(1+i\kappa)|} e^{-i \arg \Gamma(1+i\kappa)} \\
&= \sqrt{e^{-\pi\kappa} \frac{2\pi\kappa}{|\Gamma(1+i\kappa)|^2}} e^{i \arg \Gamma(1-i\kappa)} \\
&= \sqrt{e^{-\pi\kappa} \frac{2\pi\kappa}{\pi\kappa} \sinh(\pi\kappa)} e^{i \arg \Gamma(1-i\kappa)} \\
&= \sqrt{1 - e^{-2\pi\kappa}} e^{i \arg \Gamma(1-i\kappa)}
\end{aligned}$$

より, 確かにユニタリな時間発展を表していることに注意. 例えば, 初期状態が  $|\psi(-\infty)\rangle = (1 \ 0)^T =: |0\rangle$  のとき, 終状態は

$$|\psi(\infty)\rangle = \begin{pmatrix} a(\infty, -\infty) \\ b(\infty, -\infty) \end{pmatrix}$$

となる. よって, 終時刻に  $|0\rangle$  を測定する確率は

$$p_{\text{LZSM}} := |a(\infty, -\infty)|^2 = e^{-2\pi\kappa}$$

と求まる.



## E Stokes 現象

### E.1 WKB 近似と Stokes 現象

次の 2 階微分方程式を考える.

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \eta^2 Q(z)\right)\psi(z) = 0, \quad (\eta > 0) \quad (\text{E.1})$$

この方程式の  $|z| \rightarrow \infty$  における漸近解である WKB 解は次のように与えられる.

$$\psi_{\pm}(z, z_0) := \frac{1}{Q^{1/4}(z)} \exp\left(\pm \eta \int_{z_0}^z dz' Q^{1/2}(z')\right) \quad (\text{E.2})$$

式 (E.1) の解の漸近展開は, WKB 解 (E.2) の重ね合わせによって表される. この重ね合わせの係数は, 複素平面上の領域によって異なることが知られている. これを Stokes 現象と呼ぶ. また, この領域を区切っている線を Stokes 線と呼び,

$$\text{Im} \int_{z_c}^z dz' Q^{1/2}(z') = 0$$

で定義される. ここで,  $z_c$  は  $Q(z_c) = 0$  を満たす点であり, 転回点と呼ばれる. Stokes 線を超えた際の重ね合わせの係数の移り変わりを表す行列を, 接続行列と呼ぶ. Stokes 線上で WKB 解が増大する関数と減少する関数に分かれる場合, 増大する WKB 解のことを支配的 (dominant) と呼ぶ. また, WKB 解 (E.2) が漸近展開として妥当となる領域は

$$\left| \frac{\frac{dQ(z)}{dz}}{Q^{3/2}(z)} \right| \ll \eta$$

で与えられる.

例 E.1 [125]  $Q(z)$  を多項式, 点  $z_c$  を 1 位の零点 (単純転回点) とする. この転回点から伸びる Stokes 線が 3 本で, 全て無限遠へ流れるとする\*1. このとき, ある Stokes 線を超えて反時計回りに解析接続することを考える. これを領域 I から領域 II への接続と呼ぶことにする (図 E.1). 微分方程式の解の漸近展開を  $\psi_1(z), \psi_2(z)$  と表し, 領域 I での解の漸近展開は WKB 解  $\psi_{\pm}^I(z, z_c)$  を用いて以下のように表されているとする\*2.

$$\begin{pmatrix} \psi_1(z) \\ \psi_2(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+^I(z, z_c) \\ \psi_-^I(z, z_c) \end{pmatrix} \quad (z \in \text{領域 I})$$

\*1 この設定は, 例えば  $Q(z) = z$  (Airy 方程式) の場合に成り立つ.

\*2 WKB 解に明示的に領域を示す添字を付けたが, 領域によって WKB 解の形は変わらないので, 本質的には要らない. この後の接続行列の変化を見やすくするために付けたものであり, これ以降も接続行列を用いる際のみ領域の添字を付ける.

さて、今考えている Stokes 線上で支配的な関数が  $\psi_+(z, z_c)$  であるとする。このとき、領域 II では、解の漸近展開は領域 II での WKB 解を用いて次のように表される。

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_1(z) \\ \psi_2(z) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \psi_+^{\text{II}}(z, z_c) + i\psi_-^{\text{II}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{II}}(z, z_c) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+^{\text{II}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{II}}(z, z_c) \end{pmatrix} \quad (z \in \text{領域 II}) \end{aligned}$$

上記の接続を次のように表すことにする。

$$\begin{pmatrix} \psi_+^{\text{I}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{I}}(z, z_c) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+^{\text{II}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{II}}(z, z_c) \end{pmatrix}$$

この行列を接続行列と呼ぶ。この式は、「領域 I で漸近展開すると  $\psi_+^{\text{I}}(z, z_c)$  で表される微分方程式の解  $\psi_1(z)$  を領域 II で漸近展開すると、 $\psi_+^{\text{II}}(z, z_c) + i\psi_-^{\text{II}}(z, z_c)$  と表せる」という意味である。

一方、ある Stokes 線上で支配的な関数が  $\psi_-(z, z_c)$  であり、この Stokes 線を反時計回りに接続する（領域 II から領域 III への接続と呼ぶことにする）場合、接続行列は以下で与えられる。

$$\begin{pmatrix} \psi_+^{\text{II}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{II}}(z, z_c) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+^{\text{III}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{III}}(z, z_c) \end{pmatrix}$$

上記のような設定で、領域 I から領域 III に接続した場合、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_+^{\text{I}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{I}}(z, z_c) \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+^{\text{II}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{II}}(z, z_c) \end{pmatrix} \\ &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+^{\text{III}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{III}}(z, z_c) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+^{\text{III}}(z, z_c) \\ \psi_-^{\text{III}}(z, z_c) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と、接続行列が合成される。

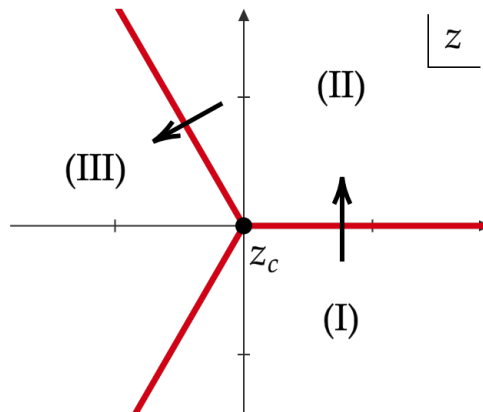


図 E.1 転回点  $z = z_c$  (黒点) から 3 本の Stokes 線 (赤線) が出る。Stokes 線をまたぐ際に微分方程式の解の漸近展開が不連続に変化する。

## E.2 Weber 方程式の Stokes 現象と接続行列

LZSM 模型は  $z := e^{\frac{\pi}{4}i}\tau$ ,  $\tau := \sqrt{2vt}$ ,  $\nu := i\kappa := ig^2/2v$  とすると, 次の Weber 方程式に帰着できる (式 (C.4)).

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4}\right)\psi(z) = 0$$

この微分方程式の解  $\psi(z) = D_\nu(z)$  の漸近展開は, 式 (D.1) より次のように与えられる.

$$D_\nu(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} \begin{cases} \psi_{-, \nu}(z)(1 + O(z^{-2})) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} e^{i\pi\nu} \psi_{+, \nu}(z)(1 + O(z^{-2})) & \frac{\pi}{4} < \arg z < \frac{5}{4}\pi \\ \psi_{-, \nu}(z)(1 + O(z^{-2})) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} e^{-i\pi\nu} \psi_{+, \nu}(z)(1 + O(z^{-2})) & -\frac{5}{4}\pi < \arg z < -\frac{\pi}{4} \\ \psi_{-, \nu}(z)(1 + O(z^{-2})) & |\arg z| < \frac{3}{4}\pi \end{cases}$$

ここで,

$$\begin{aligned} \psi_{+, \nu}(z) &:= e^{\frac{z^2}{4}} z^{-\nu-1} \\ \psi_{-, \nu}(z) &:= e^{-\frac{z^2}{4}} z^\nu \end{aligned}$$

は WKB 解である. 実際,  $z' := \eta^{-\frac{1}{2}}z$  として,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\eta} \frac{d^2}{dz'^2} \psi(z') + \left(\nu + \frac{1}{2} - \eta \frac{z'^2}{4}\right) \psi(z') &= 0 \\ \frac{d^2}{dz'^2} \psi(z') - \eta^2 \left(\frac{z'^2}{4} - \frac{1}{\eta} \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\right) \psi(z') &= 0 \end{aligned}$$

と変形すると,

$$\begin{aligned} \int dz \sqrt{\frac{z^2}{4} - \eta^{-1} \left(\nu + \frac{1}{2}\right)} &\simeq \int dz \frac{z}{2} \left(1 - \frac{2\eta^{-1}}{z^2} \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\right) \\ &= \frac{z^2}{4} - \eta^{-1} \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \ln z \\ \frac{1}{Q^{1/4}(z')} e^{\pm \eta \int dz' \sqrt{Q(z')}} &\simeq \text{const.} \times e^{\pm \eta \frac{z'^2}{4}} z'^{-\frac{1}{2} \mp (\frac{1}{2} + \nu)} \\ &= \text{const.} \times e^{\pm \frac{z^2}{4}} z^{-\frac{1}{2} \mp (\frac{1}{2} + \nu)} \end{aligned}$$

となり,  $\psi_{\pm, \nu}(z)$  と一致する.

また, この漸近形より, 1 価の関数と対応させるためには対数型の分岐が必要となる (本稿では  $\nu$  は常に非整数である). ここでは,  $\arg z = -\pi/2$  の方向に分岐を入れ,  $-\pi/2 < \arg z < 3\pi/2$  を主値とする. さらに, 定義より

$$\psi_{+, -\nu-1}(e^{-\frac{i\pi}{2}}z) = e^{-\frac{i\pi}{2}\nu} \psi_{-, \nu}(z)$$

が成り立つことに注意する.

以上の公式より,  $z$  平面上で, Stokes 線は  $\frac{k}{2}\pi$  ( $k \in \mathbb{N}$ ) の方向に伸びていることが分かる.  $z = e^{i\pi/4}\tau$  より,  $\tau$  平面上では, Stokes 線は  $\frac{2k+1}{4}\pi$  ( $k \in \mathbb{N}$ ) の方向に伸びていることが分かる. また, 図 E.2 のように反時計回りに接続した際の接続行列は,

$$\begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{II}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{II}}(z) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{i\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\nu+1)} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{III}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{III}}(z) \end{pmatrix} \quad (\arg z = 0) \quad (\text{E.3})$$

$$\begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{III}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{III}}(z) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} e^{i\pi\nu} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{IV}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{IV}}(z) \end{pmatrix} \quad (\arg z = \frac{\pi}{2}) \quad (\text{E.4})$$

$$\begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{IV}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{IV}}(z) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -e^{-2i\pi\nu} \frac{i\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\nu+1)} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{I}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{I}}(z) \end{pmatrix} \quad (\arg z = \pi) \quad (\text{E.5})$$

であることが分かる.

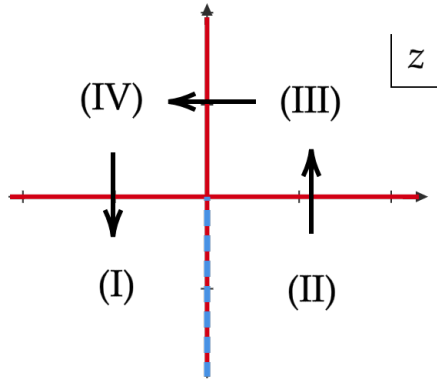


図 E.2 放物柱関数の Stokes 曲線 (赤色). 矢印のように Stokes 曲線を跨いだ際の接続行列が式 (E.3), (E.4), (E.5) で与えられる. 青色の破線は分岐を表している.

例えば, この接続行列より,

$$\begin{aligned} D_\nu(z) &\rightarrow \psi_{-, \nu}^{\text{II}}(z) \quad (-\pi/2 < \arg z < 0) \\ &\rightarrow \psi_{-, \nu}^{\text{III}}(z) \quad (0 < \arg z < \pi/2) \\ &\rightarrow \psi_{-, \nu}^{\text{IV}}(z) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} e^{i\pi\nu} \psi_{+, \nu}^{\text{IV}}(z) \quad (\pi/2 < \arg z < \pi) \end{aligned}$$

となることが分かる. また, 例えば  $t = -\infty$  の解を  $t = \infty$  に接続する際の  $\left( \psi_{+, \nu}(e^{i\pi/4}\tau) \ \psi_{-, \nu}(e^{i\pi/4}\tau) \right)^T$  の接続行列を知りたいとする. これは  $z = e^{5i\pi/4}$  から  $z = e^{\pi/4}$  へ時計回りに接続する際の接続行列であ

る. ここで,  $z = e^{\frac{\pi}{4}i}$  から  $z = e^{5i\pi/4}$  へ反時計周りに接続する際の接続行列は

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{III}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{III}}(z) \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} e^{i\pi\nu} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -e^{-2i\pi\nu} \frac{i\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\nu+1)} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{I}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{I}}(z) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & -e^{-2i\pi\nu} \frac{i\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\nu+1)} \\ -\frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} e^{i\pi\nu} & e^{-2i\pi\nu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{I}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{I}}(z) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となるので, 時計回りに接続すると,

$$\begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{I}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{I}}(z) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} e^{-i\pi\nu} & e^{2i\pi\nu} \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\nu)} \\ \frac{i\sqrt{2\pi}}{\Gamma(\nu+1)} e^{-i\pi\nu} & e^{i\pi\nu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{+, \nu}^{\text{III}}(z) \\ \psi_{-, \nu}^{\text{III}}(z) \end{pmatrix}$$

となる.

### 例 E.2 接続行列を用いた LZSM 模型の解析

放物柱関数の接続行列 (E.3), (E.4), (E.5) の観点から, 状態の時間発展を見直してみる. 厳密解 (C.5), (C.6) の漸近展開を用いる方法を考える. 厳密解の  $\tau := \sqrt{2vt} \rightarrow \infty$  における漸近展開は,

$$\begin{aligned} |\psi(\tau)\rangle &= \begin{pmatrix} \alpha(\tau) \\ \beta(\tau) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} c_1 D_{-i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + c_2 D_{i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \\ c_1 e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} D_{-i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) + c_2 \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} D_{i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \end{pmatrix} \\ &\rightarrow c_1 e^{-\frac{i}{4}\tau^2} \tau^{-i\kappa} e^{\frac{\pi}{4}\kappa} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{\kappa}\tau-1 \end{pmatrix} - c_2 e^{\frac{i}{4}\tau^2} \tau^{i\kappa} e^{\frac{\pi}{4}i} \frac{e^{\frac{\pi}{4}\kappa}}{\sqrt{\kappa}} \begin{pmatrix} -\sqrt{\kappa}\tau^{-1} \\ 1 \end{pmatrix} \\ &=: c_1 e^{\frac{\pi}{4}\kappa} |\varphi_-(\tau)\rangle - c_2 e^{\frac{\pi}{4}i} \frac{e^{\frac{\pi}{4}\kappa}}{\sqrt{\kappa}} |\varphi_+(\tau)\rangle \end{aligned}$$

となる. ここで,

$$\begin{aligned} |\varphi_+(\tau)\rangle &= -e^{-\frac{\pi}{4}\kappa} e^{-\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} \begin{pmatrix} \psi_{-, i\kappa-1}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \\ \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}i}}{\sqrt{\kappa}} \psi_{-, i\kappa}(e^{-\frac{\pi}{4}i\tau}) \end{pmatrix} \\ |\varphi_-(\tau)\rangle &= e^{-\frac{\pi}{4}\kappa} \begin{pmatrix} \psi_{-, -i\kappa}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) \\ e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} \psi_{-, -i\kappa-1}(e^{\frac{\pi}{4}i\tau}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

である.

この漸近解  $|\varphi_{\pm}(\tau)\rangle$  が  $\tau = \infty$  から  $\tau = -\infty$  へと反時計回りに Stokes 線を越えた際の振る舞いについて

て考えると,

$$\begin{aligned}
|\varphi_+^I(\tau)\rangle &= -e^{-\frac{\pi}{4}\kappa} e^{-\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} \left( \begin{array}{c} \psi_{-,i\kappa-1}^{\text{II}}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) \\ e^{-\frac{3\pi}{4}i} \psi_{-,i\kappa}^{\text{II}}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) \end{array} \right) \\
&\rightarrow -e^{-\frac{\pi}{4}\kappa} e^{-\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} \left( \begin{array}{c} \psi_{-,i\kappa-1}^{\text{III}}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) \\ e^{-\frac{3\pi}{4}i} \psi_{-,i\kappa}^{\text{III}}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) \end{array} \right) \quad (\arg \tau = \pi/4) \\
&= |\varphi_+^{\text{II}}(\tau)\rangle \\
&\rightarrow -e^{-\frac{\pi}{4}\kappa} e^{-\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} \left( \begin{array}{c} \psi_{-,i\kappa-1}^{\text{IV}}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1-i\kappa)} e^{i\pi(i\kappa-1)} \psi_{+,i\kappa-1}^{\text{IV}}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) \\ e^{-\frac{3\pi}{4}i} \left( \psi_{-,i\kappa}^{\text{IV}}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-i\kappa)} e^{-\pi\kappa} \psi_{+,i\kappa}^{\text{IV}}(e^{-\frac{\pi}{4}i}\tau) \right) \end{array} \right) \quad (\arg \tau = 3\pi/4) \\
&= |\varphi_+^{\text{III}}(\tau)\rangle + e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa} e^{\frac{3\pi}{4}i} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(1-i\kappa)} |\varphi_-^{\text{III}}(\tau)\rangle \\
|\varphi_-^I(\tau)\rangle &= e^{-\frac{\pi}{4}\kappa} \left( \begin{array}{c} \psi_{-,-i\kappa}^{\text{III}}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) \\ e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} \psi_{-,-i\kappa-1}^{\text{III}}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) \end{array} \right) \\
&\rightarrow e^{-\frac{\pi}{4}\kappa} \left( \begin{array}{c} \psi_{-,-i\kappa}^{\text{IV}}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(i\kappa)} e^{\pi\kappa} \psi_{+,-i\kappa}^{\text{IV}}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) \\ e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\kappa} \left( \psi_{-,-i\kappa-1}^{\text{IV}}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(i\kappa+1)} e^{i\pi(-i\kappa-1)} \psi_{+,-i\kappa-1}^{\text{IV}}(e^{\frac{\pi}{4}i}\tau) \right) \end{array} \right) \quad (\arg \tau = \pi/4) \\
&= |\varphi_-^{\text{II}}(\tau)\rangle + e^{\frac{\pi}{2}\kappa} e^{\frac{\pi}{4}i} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(i\kappa+1)} |\varphi_+^{\text{II}}(\tau)\rangle \\
|\varphi_-^{\text{II}}(\tau)\rangle &\rightarrow |\varphi_-^{\text{III}}(\tau)\rangle \quad (\arg \tau = 3\pi/4)
\end{aligned}$$

を満たす。この接続行列の逆行列を求めれば、 $\tau = -\infty$  から  $\tau = \infty$  へ複素  $\tau$  平面上を時計回りに状態が時間発展していく様子が分かる。つまり、接続行列による状態の変化を、状態の（複素  $t$  平面状での）時間発展とみなすことができる。

### E.3 Airy 関数の Stokes 現象

ポテンシャルが  $V(x) = ax$  ( $a > 0$ ) のときの Schrödinger 方程式を考える。

$$E\psi(x) = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x)$$

WKB 解は

$$\begin{aligned}
\psi_{\pm}(x) &= (ax - E)^{-1/4} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \int^x \sqrt{ax - E} dx\right) \\
&= (ax - E)^{-1/4} \exp\left(\pm \frac{2}{3\hbar a} (ax - E)^{3/2}\right)
\end{aligned}$$

と表せる。また、方程式の解は Airy 関数を用いて表せる。

$$\psi(x) = \text{Ai}\left(\frac{ax - E}{(a\hbar)^{2/3}}\right), \text{Bi}\left(\frac{ax - E}{(a\hbar)^{2/3}}\right)$$

Airy 関数の漸近展開は以下のように表せる。

$$\text{Ai}(z) \simeq \begin{cases} \frac{\exp(-\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} & |\arg(z)| < \pi \\ \frac{\exp(-\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} + i\frac{\exp(\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} & \frac{\pi}{3} < \arg(z) < \frac{5\pi}{3} \\ \frac{\exp(-\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} - i\frac{\exp(\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} & -\frac{5\pi}{3} < \arg(z) < -\frac{\pi}{3} \end{cases}$$

$$\text{Bi}(z) \simeq \begin{cases} -i\frac{\exp(-\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} + \frac{\exp(\frac{2}{3}z^{3/2})}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} & -\pi < \arg(z) < \frac{\pi}{3} \\ i\frac{\exp(-\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} + \frac{\exp(\frac{2}{3}z^{3/2})}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} & -\frac{\pi}{3} < \arg(z) < \pi \\ i\frac{\exp(-\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} + \frac{\exp(\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} & \frac{\pi}{3} < \arg(z) < \frac{5\pi}{3} \\ -i\frac{\exp(-\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} + \frac{\exp(\frac{2}{3}z^{3/2})}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} & -\frac{5\pi}{3} < \arg(z) < -\frac{\pi}{3} \end{cases}$$

これを WKB 解を用いて表せば,

$$\text{Ai}\left(\frac{ax-E}{(a\hbar)^{2/3}}\right) \simeq \begin{cases} \frac{(a\hbar)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}\psi^-(x) & |\arg(ax-E)| < \pi \\ \frac{(a\hbar)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}(\psi^-(x) + i\psi^+(x)) & \frac{\pi}{3} < \arg(ax-E) < \frac{5\pi}{3} \\ \frac{(a\hbar)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}(\psi^-(x) - i\psi^+(x)) & -\frac{5\pi}{3} < \arg(ax-E) < -\frac{\pi}{3} \end{cases}$$

$$\text{Bi}\left(\frac{ax-E}{(a\hbar)^{2/3}}\right) \simeq \begin{cases} \frac{(a\hbar)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}(-i\psi^-(x) + 2\psi^+(x)) & -\pi < \arg(ax-E) < \frac{\pi}{3} \\ \frac{(a\hbar)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}(i\psi^-(x) + 2\psi^+(x)) & -\frac{\pi}{3} < \arg(ax-E) < \pi \\ \frac{(a\hbar)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}(i\psi^-(x) + \psi^+(x)) & \frac{\pi}{3} < \arg(ax-E) < \frac{5\pi}{3} \\ \frac{(a\hbar)^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}(-i\psi^-(x) + \psi^+(x)) & -\frac{5\pi}{3} < \arg(ax-E) < -\frac{\pi}{3} \end{cases}$$

となる。これより、Stokes 線が  $\arg(ax-E) = \frac{2\pi}{3}n$  ( $n \in \mathbb{Z}$ ) の方向へ伸びていることが分かる。

#### E.4 合流型超幾何関数の Stokes 現象

ここでは、 $V(x) = -a/x$  ( $a > 0$ ) とした際の Schrödinger 方程式を考える。

$$E\psi(x) = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x)$$

ここで、とすると、WKB 解は

$$\begin{aligned}
\psi_{\pm}(x) &= \left(-\frac{a}{x} - E\right)^{-1/4} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \int^x \sqrt{-\frac{a}{x} - E} dx\right) \\
&= \left(-\frac{a}{x} - E\right)^{-1/4} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \left(\sqrt{-x(a+Ex)} + \frac{ai}{\sqrt{E}} \log\left(\sqrt{\frac{Ex}{a}} + \sqrt{\frac{Ex}{a} + 1}\right)\right)\right) \\
&\simeq (-E)^{-1/4} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \left(\sqrt{-Ex} + \frac{ai}{2\sqrt{E}} \log \frac{Ex}{a}\right)\right)
\end{aligned}$$

と表せる。一方、方程式の解は合流型超幾何関数となる。

$$\psi(x) = xe^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{-E}x} {}_1F_1\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}; 2; 2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}x\right), \quad xe^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{-E}x} U\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}; 2; 2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}x\right)$$

合流型超幾何関数の漸近展開は次のように表せる [124].

$$\begin{aligned}
{}_1F_1(a; b; z) &\simeq \begin{cases} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} e^{i\pi a} z^{-a} & -\frac{\pi}{2} < \arg(z) < \frac{3\pi}{2} \\ \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} e^{-i\pi a} z^{-a} & -\frac{3\pi}{2} < \arg(z) < -\frac{\pi}{2} \end{cases} \\
U(a; b; z) &\simeq \begin{cases} z^{-a} & -\frac{3\pi}{2} < \arg(z) < \frac{3\pi}{2} \end{cases}
\end{aligned}$$

よって、方程式の解の漸近展開を WKB 解を用いて表すと、

$$\begin{aligned}
&xe^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{-E}x} {}_1F_1\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}; 2; 2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}x\right) \\
&\simeq \begin{cases} \frac{(-E)^{1/4}}{2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}} \left(\frac{\left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{-\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}}{\Gamma\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)} \psi^+(x) + \frac{\left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}}{\Gamma\left(1 + \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)} e^{-i\pi \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}} \psi^-(x)\right) & -\frac{\pi}{2} < \arg(\sqrt{-E}x) < \frac{3\pi}{2} \\ \frac{(-E)^{1/4}}{2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}} \left(\frac{\left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{-\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}}{\Gamma\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)} \psi^+(x) + \frac{\left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}}{\Gamma\left(1 + \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)} e^{i\pi \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}} \psi^-(x)\right) & \end{cases}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&xe^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{-E}x} U\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}; 2; 2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}x\right) \\
&\simeq \begin{cases} \left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{-1+\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}} (-E)^{1/4} \psi^-(x) & -\frac{3\pi}{2} < \arg(\sqrt{-E}x) < \frac{3\pi}{2} \end{cases}
\end{aligned}$$



以上より, Stokes 線が  $\arg(\sqrt{-E}x) = n\pi$  ( $n \in \mathbb{Z}$ ) の方向へ伸びていることが分かる. 例えば,  $\arg(\sqrt{-E}x) = 0$  を反時計回りに接続する際の接続公式は

$$\begin{aligned}\psi^+(x) &\rightarrow \psi^+(x) - \frac{\left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}}{\Gamma\left(1 + \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)}{\left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{-\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}} \left(e^{i\pi\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}} - e^{-i\pi\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}\right) \psi^-(x) \\ &= \psi^+(x) - \left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{\frac{a}{\hbar\sqrt{-E}}} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)} 2i \sin\left(\frac{a\pi}{2\hbar\sqrt{-E}}\right) \psi^-(x) \\ \psi^-(x) &\rightarrow \psi^-(x)\end{aligned}$$

と求まる.

他の有用な例として,  $x \rightarrow \infty + 0i$  から  $x \rightarrow -\infty + 0i$  への接続公式は,  $\arg(\sqrt{-E}x) = \pi$  における Stokes 線を反時計回りに横切ることに対応するので,

$$\begin{aligned}\psi^+(x) &\rightarrow \psi^+(x) \\ \psi^-(x) &\rightarrow \psi^-(x) - \frac{\left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}}{\Gamma\left(1 + \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)}{\left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{-\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}} \left(e^{-i\pi\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}} - e^{-3i\pi\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}}\right) \psi^+(x) \\ &= \psi^-(x) - \left(2\frac{\sqrt{-E}}{\hbar}\right)^{\frac{a}{\hbar\sqrt{-E}}} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}\right)} e^{-2i\pi\frac{a}{2\hbar\sqrt{-E}}} 2i \sin\left(\frac{a\pi}{2\hbar\sqrt{-E}}\right) \psi^+(x) \\ &=: \psi^-(x) + \chi\psi^+(x)\end{aligned}$$

となる.

## F 多準位 LZSM 模型の完全 WKB 解析

以下, 多準位 LZSM 模型の完全 WKB 解析の手法を導出する. 以下の手順は先行研究 [64–66] に従っている. 第 F.1 節では,  $|t| \rightarrow \infty$  における大域的 WKB 解の構築を行い, その規格化因子を求めている. 第 F.2 節では, 擬交差点近傍の時刻のみに着目し, その時刻近傍で LZSM 模型に移り変われることを示す. 第 F.3 節では, LZSM 模型の解が放物柱関数で表せることを利用して, LZSM 模型の Stokes 現象について議論し, 局所的な WKB 解の構築と, それらの接続行列を導出する. 第 F.4 節では, 局所的な WKB 解と大域的な WKB 解を関係づけることにより, 大域的な WKB 解の接続行列を導出する.

次の Schrödinger 方程式を考える.

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} |\psi(t, \eta)\rangle &= \eta H(t, \eta) |\psi(t, \eta)\rangle & (F.1) \\
 H(t, \eta) &= H_0(t) + \eta^{-\frac{1}{2}} H_{\frac{1}{2}} \\
 H_0(t) &= \text{diag}(\rho_1(t), \dots, \rho_N(t)) \\
 \left(H_{\frac{1}{2}}\right)_{ij} &= \begin{cases} g_{ij} & (i < j) \\ g_{ji} & (i > j) \\ 0 & (i = j) \end{cases}
 \end{aligned}$$

ここで, 簡単のため  $g_{ij} \in \mathbb{R}$  とする. また, 以下の条件を課す<sup>\*3</sup>.

$$\text{条件: } \prod_{i < j} (\rho_i(t) - \rho_j(t)) \text{ の零点は実数で, 1 位であるとする.}$$

また,  $|t| \rightarrow \infty$  において, 任意の準位間隔が無限に広がるとする.

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty} |\rho_j(t) - \rho_i(t)| = \infty$$

さて, 次の S 行列を求める問題を考える.

$$S_{ij} = \langle \psi_i(\infty) | U(\infty, -\infty) | \psi_j(-\infty) \rangle$$

ここで, この問題設定について注意を述べておく. 一般に遷移振幅  $\langle \psi_i(t) | U(t, t_0) | \psi_j(t_0) \rangle$  は,  $t \rightarrow \infty, t_0 \rightarrow -\infty$  の極限で一定値を取らない. そのため, この第 F 節では,  $|\psi_j(-\infty)\rangle$  から  $|\psi_i(\infty)\rangle$  への遷移確率に着目し, 初期状態や終状態として, これらの重ね合わせの状態について考えないこととする. 遷移確率は  $S_{ij}$  の絶対値のみに依存し, この絶対値は  $t \rightarrow \infty, t_0 \rightarrow -\infty$  の極限で一定値を取るため, 問題設定として妥当である.

## F.1 大域的 WKB 解の構築

形式的対角化を行うことにより, 大域的 WKB 解の構築を行う. まず, 次の変換を考える.

$$\begin{aligned}
 |\psi(t, \eta)\rangle &= R(t, \eta) |\varphi(t, \eta)\rangle \\
 R(t, \eta) &= I + \eta^{-\frac{1}{2}} R_{\frac{1}{2}}(t) + \eta^{-1} R_1(t) + O(\eta^{-3/2}) & (F.2) \\
 \left(R_{\frac{1}{2}}\right)_{ij}(t) &= \begin{cases} \frac{g_{ij}}{\rho_j(t) - \rho_i(t)} & (i \neq j) \\ 0 & (i = j) \end{cases} \\
 (R_1)_{ij}(t) &= \begin{cases} \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq i, j)}}^N \frac{g_{ik} g_{kj}}{(\rho_j - \rho_k)(\rho_j - \rho_i)} & (i \neq j) \\ 0 & (i = j) \end{cases}
 \end{aligned}$$

<sup>\*3</sup> この条件を満たしていない場合, 局所 WKB 解のみで解を接続する正当性を失う. この場合, 虚転回点 (virtual turning point) と呼ばれる, 従来の転回点とは異なる転回点を考慮して接続する必要がある.

これより、次のような対角化された微分方程式に変換できる。

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} |\varphi(t, \eta)\rangle &= \eta \tilde{H}(t, \eta) |\varphi(t, \eta)\rangle \\ \tilde{H}(t, \eta) &= R(t, \eta)^{-1} \left( H_0(t) + \eta^{-\frac{1}{2}} H_{\frac{1}{2}} \right) R(t, \eta) - i\eta^{-1} R(t, \eta)^{-1} \frac{\partial}{\partial t} R(t, \eta) \\ &= \left( \rho_i(t) + \eta^{-1} \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq i, j)}}^N \frac{g_{ik}^2}{\rho_i(t) - \rho_k(t)} \right) \delta_{ij} + O(\eta^{-3/2}) \end{aligned}$$

よって、 $\eta$  が十分大きい場合、独立な解は

$$|\varphi^{(j)}(t, \eta)\rangle = \exp \left( -i\eta \int_{t_0}^t dt' \left( \rho_j(t') + \eta^{-1} \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^N \frac{g_{jk}^2}{\rho_j(t') - \rho_k(t')} \right) \right) |j\rangle$$

と表せる。ここで、 $|j\rangle$  はハミルトニアンを行列表示した際の基底である。(F.2)において、 $R(t, \eta) \simeq I$  と近似すると、大域的 WKB 解は

$$\begin{aligned} |\psi^{(j)}(t, \eta)\rangle &= \exp \left( -i\eta \int_{t_0}^t dt' \rho_j(t') - i \int_{t_0}^t dt' \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^N \left( \frac{g_{jk}^2}{\rho_j(t') - \rho_k(t')} \right) \right) |j\rangle + O(\eta^{-1}) \\ &= e^{-i\eta \int_{t_0}^t dt' \rho_j(t')} \exp \left( -i \int_{t_0}^t dt' \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^N \sum_{m=1}^{F_{jk}} \left( \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{kj,m}(t' - t_{jk,m})} \right) \right) |j\rangle + O(\eta^{-1}) \end{aligned}$$

と表せる。ここで、 $t_{jk,m}$  は  $\rho_j(t)$  と  $\rho_k(t)$  の小さい方から  $m \in \{1, \dots, F_{jk}\}$  番目の零点で、

$$\lambda_{kj,m} = \dot{\rho}_j(t_{jk,m}) - \dot{\rho}_k(t_{jk,m})$$

とした。また、

$$\frac{1}{\rho_j(t) - \rho_k(t)} = \sum_{m=1}^{F_{jk}} \left( \frac{1}{\lambda_{kj,m}} \frac{1}{t - t_{jk,m}} \right)$$

を用いた。さらに、積分の下端の寄与はここでは明示的に書いたが、全体にかかる定数なので、後述する規格化因子に押しつけることができる。これより、

$$|\psi^{(j)}(t, \eta)\rangle = e^{-i\eta \int_{t_0}^t dt' \rho_j(t')} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^N \prod_{m=1}^{F_{jk}} \exp \left( -i \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{kj,m}} \log(\lambda_{kj,m}(t - t_{jk,m})) \right) |j\rangle + O(\eta^{-1}) \quad (\text{F.3})$$

と表せる。

この大域的 WKB 解は規格化されていないことに注意する。時間を複素平面上に拡張し、大域的 WKB 解を解析接続をすると、前述した通り Stokes 現象によって解の振る舞いが変わる。この Stokes 現象を記述する接続行列  $M$  が求まったとする。

$$\begin{pmatrix} |\psi^{(1)}(t_0, \eta)\rangle \\ \vdots \\ |\psi^{(N)}(t_0, \eta)\rangle \end{pmatrix} \rightarrow M \begin{pmatrix} |\psi^{(1)}(t, \eta)\rangle \\ \vdots \\ |\psi^{(N)}(t, \eta)\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{F.4})$$

ただし、十分小さい時刻  $t_0$  と、十分大きな時刻  $t$  とする。規格化を考慮すると、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ \vdots \\ |N\rangle \end{pmatrix} &= N^- \begin{pmatrix} |\psi^{(1)}(t_0, \eta)\rangle \\ \vdots \\ |\psi^{(N)}(t_0, \eta)\rangle \end{pmatrix} \\ &\rightarrow N^- M \begin{pmatrix} |\psi^{(1)}(t, \eta)\rangle \\ \vdots \\ |\psi^{(N)}(t, \eta)\rangle \end{pmatrix} \\ &= N^- M (N^+)^{-1} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ \vdots \\ |N\rangle \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{F.5})$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} N^\pm &:= \text{diag}(N^{\pm,(1)}, \dots, N^{\pm,(N)}) \\ N^{+, (j)} &:= \langle j | \psi^{(j)}(t) \rangle^{-1} \\ N^{-, (j)} &:= \langle j | \psi^{(j)}(t_0) \rangle^{-1} \end{aligned}$$

とした。前述した通り、ここでは、状態  $|e^j\rangle$  から状態  $|e^k\rangle$  への遷移確率を求めており、初期状態や終状態としてこれらの重ね合わせの状態は考えていない。このため、S 行列の要素  $S_{jk}$  は、その絶対値のみが重要であり、位相は必ずしも遷移振幅と一致していなくとも良い。そこで、 $t \rightarrow \infty, t_0 \rightarrow -\infty$  と極限を取り、

$$N^{\pm, (j)} := \left| \langle j | \psi^{(j)}(\pm\infty) \rangle \right|^{-1} = \frac{1}{\| |\psi^{(j)}(\pm\infty)\rangle \|}$$

として、位相の情報を行列  $N^\pm$  から取り除く。この扱いについては、一般化断熱瞬間近似を定義する際にもう一度考慮し直す。

式 (F.5) は、初期状態が  $|i\rangle$  であったら、終状態は  $\sum_j (N^- M (N^+)^{-1})_{ij} |j\rangle$  で表せるという意味なので、S 行列の絶対値は

$$\begin{aligned} |S_{ji}| &= \left| (N^- M (N^+)^{-1})_{ij} \right| \\ &= \left| ((N^+)^{-1} M^T N^-)_{ji} \right| \end{aligned}$$

と表せる。

大域的 WKB 解のノルムは

$$\left\| \left| \psi^{(j)}(\pm\infty, \eta) \right\rangle \right\| = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^N \prod_{m=1}^{F_{jk}} \left| \exp \left( -i \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{kj,m}} \log(\lambda_{jk,m}(t - t_{jk,m})) \right) \right|$$

と表せるので、分岐を入れることで規格化行列  $N^\pm$  が求まる。よって、これ以降では接続行列  $M$  を求める。

ここで、分岐について注意しておく。ノルムの 1 からのずれは

$$f(t) := \log(\lambda_{jk,m}(t - t_{jk,m}))$$

の項から現れた。これ以降、 $t = -\infty = \infty \times e^{i\pi}$  とし、上半平面上で  $\arg t \in [\pi, 0]$  での解の接続を考えることにする。よって、現れる分岐は全て下半平面に伸びているとする。これより、

$$\begin{aligned} \lambda_{jk,m} > 0 &\Rightarrow \text{Im } f(t) = \pi \quad (t < t_{jk,m}) \\ \lambda_{jk,m} < 0 &\Rightarrow \text{Im } f(t) = -\pi \quad (t > t_{jk,m}) \end{aligned}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} \left\| \left| \psi^{(j)}(\infty, \eta) \right\rangle \right\| &= \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^N \prod_{m=1}^{F_{jk}} \exp \left( -\Theta(-\lambda_{jk,m}) \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{kj,m}} \pi \right) \\ \left\| \left| \psi^{(j)}(-\infty, \eta) \right\rangle \right\| &= \prod_{\substack{k=1 \\ (k \neq j)}}^N \prod_{m=1}^{F_{jk}} \exp \left( \Theta(\lambda_{jk,m}) \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{kj,m}} \pi \right) \end{aligned}$$

と表せる。ここで、 $\Theta(x)$  は Heaviside 関数である。

## F.2 LZSM 模型への帰着

式 (F.1) は、時刻  $t_{jk,m}$  において、 $2 \times 2$  行列で表される LZSM 模型とそれ以外の微分方程式に帰着させることができると予想される。そこで、時刻  $t_{jk,m}$  の近傍において微分方程式をブロック対角化するように、次の変換を考える。

$$|\psi(t, \eta)\rangle = S(t, \eta) |\phi(t, \eta)\rangle, \quad S(t, \eta) = 1 + \eta^{-\frac{1}{2}} S_{\frac{1}{2}}(t) + \eta^{-1} S_1(t) + O(\eta^{-3/2})$$

ここでは、具体的に  $\rho_1(t)$  と  $\rho_2(t)$  が交差する時刻  $t_{12,m}$  に着目するが、他の準位間の交差に対しても同様に議論できる。また、 $\lambda_{12,m} > 0$  とする。この場合\*4、

$$\begin{aligned}
S_{\frac{1}{2}}(t) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{g_{13}}{\rho_3 - \rho_1} & \frac{g_{14}}{\rho_4 - \rho_1} & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{g_{23}}{\rho_3 - \rho_2} & \frac{g_{24}}{\rho_4 - \rho_2} & \cdots \\ -\frac{g_{13}}{\rho_3 - \rho_1} & -\frac{g_{23}}{\rho_3 - \rho_2} & 0 & 0 & \cdots \\ -\frac{g_{14}}{\rho_4 - \rho_1} & -\frac{g_{24}}{\rho_4 - \rho_2} & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\
S_1(t) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & y_{13}(t) & y_{14}(t) & \cdots \\ 0 & 0 & y_{23}(t) & y_{24}(t) & \cdots \\ y_{31}(t) & y_{32}(t) & 0 & 0 & \cdots \\ y_{41}(t) & y_{42}(t) & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\
y_{ij}(t) &= \frac{1}{\rho_i(t) - \rho_j(t)} \left( [H_{\frac{1}{2}}, S_{\frac{1}{2}}(t)] + S_{\frac{1}{2}}(t) [S_{\frac{1}{2}}(t), H_0(t)] \right)_{ij}
\end{aligned}$$

とすると、ハミルトニアンを  $2 \times 2$  行列と  $(N-2) \times (N-2)$  行列にブロック対角化することができる。このブロックに対応させて、状態も  $|\phi(t, \eta)\rangle = |\phi^{(2)}(t, \eta)\rangle \oplus |\phi^{(N-2)}(t, \eta)\rangle$  と分けると、

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} |\phi^{(2)}(t, \eta)\rangle &= \tilde{H}(t, \eta) |\phi^{(2)}(t, \eta)\rangle \\
\tilde{H}^{(2)}(t, \eta) &= \eta \left( \tilde{H}_0^{(2)}(t) + \eta^{-\frac{1}{2}} \tilde{H}_{\frac{1}{2}}^{(2)}(t) + \eta^{-1} \tilde{H}_1^{(2)}(t) + O(\eta^{-3/2}) \right) \\
\tilde{H}_0^{(2)}(t) &= \begin{pmatrix} \rho_1 & 0 \\ 0 & \rho_2 \end{pmatrix} \\
\tilde{H}_{\frac{1}{2}}^{(2)}(t) &= \begin{pmatrix} 0 & g_{12} \\ g_{12} & 0 \end{pmatrix} \\
\tilde{H}_1^{(2)}(t) &= - \begin{pmatrix} \sum_{n=3}^N \frac{g_{1n}^2}{\rho_n - \rho_1} & \sum_{n=3}^N \frac{g_{1n}g_{2n}}{\rho_n - \rho_2} \\ \sum_{n=3}^N \frac{g_{1n}g_{2n}}{\rho_n - \rho_2} & \sum_{n=3}^N \frac{g_{2n}^2}{\rho_n - \rho_2} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} a_1(z) & b_1(z) \\ c_1(z) & d_1(z) \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

と表せる。さらに、

$$\begin{aligned}
|\phi(t, \eta)\rangle &= \left( \exp \left( -\frac{\eta}{2} i \int_{t_{12}}^t (\rho_1(t) + \rho_2(t)) dt \right) T(t, \eta) |\varphi(t, \eta)\rangle \right) \oplus |\phi^{(N-2)}(t, \eta)\rangle \\
w &= \left( \int_{t_{12,m}}^t [\rho_2(t) - \rho_1(t)] dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
T(t, \eta) &= \sum_{n=0}^{\infty} \eta^{-\frac{n}{2}} T_{\frac{n}{2}}(t)
\end{aligned}$$

\*4 以降、行列の要素に現れる時間依存性は、表記の簡略化のために適宜省略する。

のように変数変換する。これにより、着目している空間の Schrödinger 方程式は

$$\begin{aligned} & i |\varphi'(w, \eta)\rangle \\ &= \left( T^{-1}(w, \eta) \left( -\eta w \sigma_z + \frac{2w}{\rho_2(t) - \rho_1(t)} \left( \eta^{\frac{1}{2}} \tilde{H}_{\frac{1}{2}}^{(2)}(t) + \tilde{H}_1^{(2)}(t) \right) \right) T(w, \eta) \right. \\ & \quad \left. - iT^{-1}(w, \eta) T'(w, \eta) \right) |\varphi(w, \eta)\rangle + O(\eta^{-\frac{1}{2}}) \end{aligned}$$

となる（' は  $w$  微分を表す）。これが LZSM 模型の Schrödinger 方程式となるように  $T(w, \eta)$  を調整する。  $T(w)$  を、

$$\begin{aligned} T(w, \eta) &= \tilde{T}_0 \tilde{T}_{\frac{1}{2}} \tilde{T}_1 + O(\eta^{-3/2}) \\ &= \left( P_0 + \eta^{-1/2} Q_{\frac{1}{2}} \right) \left( 1 + \eta^{-1/2} P_{\frac{1}{2}} + \eta^{-1} Q_1 \right) \left( 1 + \eta^{-1} P_1 + \eta^{-3/2} Q_{3/2} \right) + O(\eta^{-3/2}) \\ &= P_0 + \eta^{-1/2} \left( P_0 P_{\frac{1}{2}} + Q_{\frac{1}{2}} \right) + \eta^{-1} \left( P_0 Q_1 + Q_{\frac{1}{2}} P_{\frac{1}{2}} + P_0 P_1 \right) + O(\eta^{-3/2}) \end{aligned}$$

のように展開する。ここで、  $P_i$  は対角行列、  $Q_i$  は非対角成分のみを持つ行列とする。まず  $T(w, \eta) = \tilde{T}_0$  とし、対角成分が時間に線形に依存し、非対角成分が時間に依存しないという条件を課す。これを  $\tilde{T}_{\frac{1}{2}}, \tilde{T}_1, \dots$  と順々に取り入れて同様の条件を課すと、それを満たす行列  $\tilde{T}_{n/2}$  が求まることが示されている。ここでは、最初の  $\tilde{T}_0$  の導出のみ紹介する。

$T(w, \eta) = P_0(w) + \eta^{-\frac{1}{2}} Q_{\frac{1}{2}}(w)$  とし、

$$\begin{aligned} P_0(w) &= \begin{pmatrix} p_0(w) & 0 \\ 0 & q_0(w) \end{pmatrix} \\ Q_{\frac{1}{2}}(w) &= \begin{pmatrix} 0 & r_{\frac{1}{2}}(w) \\ s_{\frac{1}{2}}(w) & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

とする。  $|s_{\frac{1}{2}}(0)| \neq \infty \neq |r_{\frac{1}{2}}(0)|$  とする<sup>\*5</sup>。Schrödinger 方程式の右辺の係数で、  $\eta$  に比例する項は、

$$\begin{aligned} -w P_0^{-1}(w) \sigma_z P_0(w) &= -w \begin{pmatrix} p_0^{-1}(w) & 0 \\ 0 & q_0^{-1}(w) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_0(w) & 0 \\ 0 & q_0(w) \end{pmatrix} \\ &= -w \sigma_z \end{aligned}$$

となり、  $w$  を時間の変数とした LZSM 模型の対角成分となっている。次に  $\eta^{\frac{1}{2}}$  に比例する項については、

$$\begin{aligned} & \left( -P_0^{-1}(w) \sigma_z Q_{\frac{1}{2}}(w) + P_0^{-1}(w) Q_{\frac{1}{2}}(w) P_0^{-1}(w) \sigma_z P_0(w) \right) w + P_0^{-1}(w) H_{\frac{1}{2}}(t) P_0(w) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -2 \frac{r_{\frac{1}{2}}(w)}{p_0(w)} w + g_{12} \frac{q_0(w)}{p_0(w)} \\ 2 \frac{s_{\frac{1}{2}}(w)}{q_0(w)} w + g_{12} \frac{p_0(w)}{q_0(w)} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

\*5 高次の項よりこれらの関数形を求めると、確かにこの条件が満たされていることが分かる。

となる。  $\eta^0$  に比例する項は、

$$\begin{aligned}
& wP_0^{-1}(w)Q_{\frac{1}{2}}(w)P_0^{-1}(w)\sigma_zQ_{\frac{1}{2}}(w) - \frac{2w}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}P_0^{-1}(w)Q_{\frac{1}{2}}(w)P_0^{-1}(w)H_{\frac{1}{2}}(t)P_0(w) \\
& + \frac{2w}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}P_0^{-1}(w)H_{\frac{1}{2}}(t)Q_{\frac{1}{2}} + \frac{2w}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}P_0^{-1}(w)H_1(t)P_0(w) \\
& - w(P_0^{-1}(w)Q_{\frac{1}{2}}(w))^2P_0^{-1}(w)\sigma_zP_0(w) - iP_0^{-1}(w)P_0'(w) \\
& = -2w\frac{s_{\frac{1}{2}}(w)r_{\frac{1}{2}}(w)}{p_0(w)q_0(w)}\sigma_z - i\begin{pmatrix} \frac{p_0'(w)}{p_0(w)} & 0 \\ 0 & \frac{q_0'(w)}{q_0(w)} \end{pmatrix} \\
& + \frac{2w}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}\left(\begin{pmatrix} -g_{12}\frac{r_{\frac{1}{2}}(w)}{q_0(w)} + g_{12}\frac{s_{\frac{1}{2}}(w)}{p_0(w)} \end{pmatrix}\sigma_z + \begin{pmatrix} a_1(w) & \frac{q_0(w)b_1(w)}{p_0(w)} \\ \frac{p_0(w)c_1(w)}{q_0(w)} & d_1(w) \end{pmatrix}\right)
\end{aligned}$$

となる。  $\eta^{\frac{1}{2}}$  に比例する項が定数となり、  $\eta^0$  に比例する項の対角成分が 0 となるという条件より、

$$\begin{aligned}
\mu_{\frac{1}{2}} &= -2w\frac{r_{\frac{1}{2}}(w)}{p_0(w)} + \frac{2wg_{12}}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}\frac{q_0(w)}{p_0(w)} \\
\mu_{\frac{1}{2}} &= 2w\frac{s_{\frac{1}{2}}(w)}{q_0(w)} + \frac{2wg_{12}}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}\frac{p_0(w)}{q_0(w)} \\
0 &= -2w\frac{s_{\frac{1}{2}}(w)r_{\frac{1}{2}}(w)}{p_0(w)q_0(w)} - \frac{2wg_{12}}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}\frac{r_{\frac{1}{2}}(w)}{q_0(w)} \\
& + \frac{2wg_{12}}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}\frac{s_{\frac{1}{2}}(w)}{p_0(w)} + \frac{2wa_1(w)}{\rho_2(w) - \rho_1(w)} - i\frac{p_0'(w)}{p_0(w)} \\
0 &= 2w\frac{s_{\frac{1}{2}}(w)r_{\frac{1}{2}}(w)}{p_0(w)q_0(w)} - \frac{2wg_{12}}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}\frac{s_{\frac{1}{2}}(w)}{p_0(w)} \\
& + \frac{2wg_{12}}{\rho_2(w) - \rho_1(w)}\frac{r_{\frac{1}{2}}(w)}{q_0(w)} + \frac{2wd_1(w)}{\rho_2(w) - \rho_1(w)} - i\frac{q_0'(w)}{q_0(w)}
\end{aligned}$$

を得る。これを解くと、

$$\begin{aligned}
p_0(w) &\simeq \exp\left(-i\int_{t_{12,m}}^t dt' \sum_{n=3}^N \left(\frac{g_{1n}^2}{\rho_1(t') - \rho_n(t')}\right)\right) \\
&\quad \times \exp\left(-i\int_{t_{12,m}}^t dt' \left(\frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m}(t - t_{12,m})} - \frac{g_{12}^2}{\rho_2(t') - \rho_1(t')}\right)\right) \\
q_0(w) &\simeq \exp\left(-i\int_{t_{12,m}}^t dt' \sum_{n=3}^N \left(\frac{g_{2n}^2}{\rho_1(t') - \rho_n(t')}\right)\right) \\
&\quad \times \exp\left(i\int_{t_{12,m}}^t dt' \left(\frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m}(t - t_{12,m})} - \frac{g_{12}^2}{\rho_2(t') - \rho_1(t')}\right)\right) \\
\mu_{\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{2}{\lambda_{12,m}}}g_{12}
\end{aligned}$$



を得る。ただし、他の零点とは十分遠いとし、

$$\rho_2(w) - \rho_1(w) \simeq \lambda_{12,m}(t - t_{12,m})$$

と近似を用いた\*6。以上より、この系では、Schrödinger 方程式は

$$i \frac{d}{dw} |\varphi(w, \eta)\rangle = \left( -\eta w \sigma_z + \eta^{\frac{1}{2}} \mu_{\frac{1}{2}} \sigma_x \right) |\varphi(w, \eta)\rangle \quad (\text{F.6})$$

となり、LZSM 模型に帰着できる。

### F.3 LZSM 模型の Stokes 現象

$v = 1$  とした LZSM 模型での Schrödinger 方程式を考え、次のように変数を変換をすると式 (F.6) を再現できる。

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \begin{pmatrix} -t & \mu_{\frac{1}{2}} \\ \mu_{\frac{1}{2}} & t \end{pmatrix} |\psi(t)\rangle \\ i \frac{d}{dw} |\psi(w)\rangle &= \eta \left( \begin{pmatrix} -w & 0 \\ 0 & w \end{pmatrix} + \eta^{-1/2} \begin{pmatrix} 0 & \mu_{\frac{1}{2}} \\ \mu_{\frac{1}{2}} & 0 \end{pmatrix} \right) |\psi(w)\rangle, \quad (\eta^{\frac{1}{2}} w = t) \end{aligned}$$

この方程式の独立な解の漸近展開は例 E.2 より、次のように表せる\*7。

$$\begin{aligned} |\psi(w)\rangle &= c_1 e^{-\frac{i}{4}\tau^2} \tau^{-i\kappa} e^{\frac{\pi}{4}\kappa} \begin{pmatrix} \sqrt{\kappa}\tau^{-1} \\ 1 \end{pmatrix} - c_2 e^{\frac{i}{4}\tau^2} \tau^{i\kappa} e^{\frac{\pi}{4}\kappa} e^{\frac{\pi}{4}i} \frac{1}{\sqrt{\kappa}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{\kappa}\tau^{-1} \end{pmatrix} \\ &= c_1 e^{\frac{\pi}{4}\kappa} (2\eta)^{-i\kappa/2} |\varphi_-(w)\rangle - c_2 e^{\frac{\pi}{4}\kappa} (2\eta)^{i\kappa/2} e^{\frac{\pi}{4}i} \frac{1}{\sqrt{\kappa}} |\varphi_+(w)\rangle \end{aligned}$$

ただし、

$$\tau = \sqrt{2}t = \sqrt{2\eta}w, \quad \kappa = \frac{\mu_{\frac{1}{2}}^2}{2}$$

とした。また、このときの  $(N-2)$  成分の状態  $|\phi^{(N-2)}(t, \eta)\rangle$  の成分は全て 0 であることに注意。

この漸近解の Stokes 行列は、反時計回りに接続するとき、例 E.2 より以下のように関係づけられる。

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} |\varphi_+^{\text{I}}(w)\rangle \\ |\varphi_-^{\text{I}}(w)\rangle \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ (2\eta)^{i\kappa} e^{\frac{\pi}{2}\kappa} e^{\frac{\pi}{4}i} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(i\kappa+1)} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\varphi_+^{\text{II}}(w)\rangle \\ |\varphi_-^{\text{II}}(w)\rangle \end{pmatrix} \quad \left( \arg w = \frac{\pi}{4} \right) \\ \begin{pmatrix} |\varphi_+^{\text{II}}(w)\rangle \\ |\varphi_-^{\text{II}}(w)\rangle \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & (2\eta)^{-i\kappa} e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa} e^{\frac{3\pi}{4}i} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(1-i\kappa)} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\varphi_+^{\text{III}}(w)\rangle \\ |\varphi_-^{\text{III}}(w)\rangle \end{pmatrix} \quad \left( \arg w = \frac{3\pi}{4} \right) \end{aligned}$$

\*6  $M_{j,k} = 1$  の場合 (例えば  $\rho_i(t)$  が時間の 1 次関数である場合)、第 2 因子は現れず、厳密な解となる。

\*7 例 E.2 とは第 1 成分と第 2 成分が入れ替わっていることに注意。

つまり,  $w = -\infty$  から  $w = \infty$  へ接続する場合,

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} |\varphi_{+}^{\text{III}}(w)\rangle \\ |\varphi_{-}^{\text{III}}(w)\rangle \end{pmatrix} &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -(2\eta)^{-i\kappa} e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa} e^{\frac{3\pi}{4}i} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(1-i\kappa)} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -(2\eta)^{i\kappa} e^{\frac{\pi}{2}\kappa} e^{\frac{\pi}{4}i} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(i\kappa+1)} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\varphi_{+}^{\text{I}}(w)\rangle \\ |\varphi_{-}^{\text{I}}(w)\rangle \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} e^{-2\pi\kappa} & -(2\eta)^{-i\kappa} e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa} e^{\frac{3\pi}{4}i} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(1-i\kappa)} \\ -(2\eta)^{i\kappa} e^{\frac{\pi}{2}\kappa} e^{\frac{\pi}{4}i} \frac{\sqrt{2\pi\kappa}}{\Gamma(i\kappa+1)} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\varphi_{+}^{\text{I}}(w)\rangle \\ |\varphi_{-}^{\text{I}}(w)\rangle \end{pmatrix} \\
&=: \begin{pmatrix} A_{++} & A_{+-} \\ A_{-+} & A_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\varphi_{+}^{\text{I}}(w)\rangle \\ |\varphi_{-}^{\text{I}}(w)\rangle \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

となる.

また, 式 (F.6) の解の漸近展開は

$$\begin{aligned}
|\varphi_{+}(w)\rangle &= e^{\frac{i\eta w^2}{2}} w^{i\mu_{\frac{1}{2}}^2/2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\mu_{\frac{1}{2}}}{2\eta^{\frac{1}{2}}w} \end{pmatrix} \left(1 + O\left(\eta^{-\frac{1}{2}}\right)\right) \\
&= e^{\frac{i\eta w^2}{2}} w^{i\mu_{\frac{1}{2}}^2/2} |1\rangle + O\left(\eta^{-\frac{1}{2}}\right) \\
&\simeq e^{\frac{i\eta}{2} \int_{t_{12,m}}^t dt' (\rho_2(t') - \rho_1(t'))} \left(\frac{\lambda_{12,m}}{2} (t - t_{12,m})^2\right)^{i\mu_{\frac{1}{2}}^2/4} |1\rangle + O\left(\eta^{-\frac{1}{2}}\right) \\
|\varphi_{-}(w)\rangle &= w^{-i\mu_{\frac{1}{2}}^2/2} e^{-\frac{i\eta w^2}{2}} \begin{pmatrix} \frac{\mu_{\frac{1}{2}}}{2\eta^{\frac{1}{2}}w} \\ 1 \end{pmatrix} \left(1 + O\left(\eta^{-\frac{1}{2}}\right)\right) \\
&\simeq \left(\frac{\lambda_{12,m}}{2} (t - t_{12,m})^2\right)^{-i\mu_{\frac{1}{2}}^2/4} e^{-i\frac{\eta}{2} \int_{t_{12,m}}^t dt' (\rho_2(t') - \rho_1(t'))} |2\rangle + O\left(\eta^{-\frac{1}{2}}\right)
\end{aligned}$$

と表せる. ここで, 今考えている領域において,  $\rho_2(t) - \rho_1(t)$  は線形近似できるとして,

$$\begin{aligned}
w &= \left(\int_{t_{12,m}}^t dt' (\rho_2(t') - \rho_1(t'))\right)^{\frac{1}{2}} \\
&\simeq \left(\int_{t_{12,m}}^t dt' \lambda_{12,m} (t' - t_{12,m})\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\frac{\lambda_{12,m}}{2} (t - t_{12,m})^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

と近似した。これを変換の最低次を用いて元の座標系に戻すと、

$$\begin{aligned}
 |\psi_0^{(1)}(t, \eta)\rangle &:= S(t, \eta) \left( \exp \left( -\frac{\eta}{2} i \int_{t_{12,m}}^t dt' (\rho_1(t') + \rho_2(t')) \right) T(t, \eta) |\varphi_+(t)\rangle \oplus |0^{(N-2)}\rangle \right) \\
 &\simeq \exp \left( -\frac{\eta}{2} i \int_{t_{12,m}}^t dt' (\rho_1(t') + \rho_2(t')) \right) T_0(t) |\varphi_+(t)\rangle \oplus |0^{(N-2)}\rangle \\
 &= \exp \left( -i\eta \int_{t_{12,m}}^t dt' \rho_1(t') \right) \exp \left( -i \int_{t_{12,m}}^t dt' \sum_{n=3}^N \left( \frac{g_{1n}^2}{\rho_1(t') - \rho_n(t')} \right) \right) \\
 &\quad \times \exp \left( -i \int_{t_{12,m}}^t dt' \left( \frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m}(t' - t_{12,m})} - \frac{g_{12}^2}{\rho_2(t') - \rho_1(t')} \right) \right) \\
 &\quad \times \left( \frac{\lambda_{12,m}}{2} (t - t_{12,m})^2 \right)^{i \frac{g_{12}^2}{2\lambda_{12,m}}} |1\rangle
 \end{aligned} \tag{F.7}$$

$$\begin{aligned}
 |\psi_0^{(2)}(t, \eta)\rangle &:= S(t, \eta) \left( \exp \left( -\frac{\eta}{2} i \int_{t_{12,m}}^t dt' (\rho_1(t') + \rho_2(t')) \right) T(t, \eta) |\varphi_-(t)\rangle \oplus |0^{(N-2)}\rangle \right) \\
 &\simeq \exp \left( -\frac{\eta}{2} i \int_{t_{12,m}}^t dt' (\rho_1(t') + \rho_2(t')) \right) T_0(t) |\varphi_-(t)\rangle \oplus |0^{(N-2)}\rangle \\
 &\simeq \exp \left( -i\eta \int_{t_{12,m}}^t dt' \rho_2(t') \right) \exp \left( -i \int_{t_{12,m}}^t dt' \sum_{n=3}^N \left( \frac{g_{2n}^2}{\rho_2(t') - \rho_n(t')} \right) \right) \\
 &\quad \times \exp \left( i \int_{t_{12,m}}^t dt' \left( \frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m}(t' - t_{12,m})} - \frac{g_{12}^2}{\rho_2(t') - \rho_1(t')} \right) \right) \\
 &\quad \times \left( \frac{\lambda_{12,m}}{2} (t - t_{12,m})^2 \right)^{-i \frac{g_{12}^2}{2\lambda_{12,m}}} |2\rangle
 \end{aligned} \tag{F.8}$$

となる。

#### F.4 局所的 WKB 解と大域的 WKB 解の接続

ここでは、大域的 WKB 解 (F.3) と、局所的 WKB 解 (F.7),(F.8) をつなぐことを考える。さて、

$$\begin{aligned}
|\psi_0^{(1)}(t, \eta)\rangle &= \exp\left(-i\eta \int_{t_{12,m}}^t dt' \rho_1(t')\right) \exp\left(-i \int_{t_{12,m}}^t dt' \sum_{n=3}^N \left(\frac{g_{1n}^2}{\rho_1(t') - \rho_n(t')}\right)\right) \\
&\quad \times \exp\left(-i \int_{t_{12,m}}^t dt' \left(\frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m}(t' - t_{12,m})} - \frac{g_{12}^2}{\rho_2(t') - \rho_1(t')}\right)\right) \\
&\quad \times \left(\frac{\lambda_{12,m}}{2}(t - t_{12,m})^2\right)^{i\frac{g_{12}^2}{2\lambda_{12,m}}} |1\rangle \\
&= \exp\left(i\eta \int^{t_{12,m}} dt' \rho_1(t')\right) \exp\left(i \sum_{n=3}^N \sum_{m'=1}^{F_{12}} \frac{g_{1n}^2}{\lambda_{n1,m'}} \log(\lambda_{1n,m'}(t_{12,m} - t_{1n,m'}))\right) \\
&\quad \times \exp\left(-i \sum_{\substack{m'=1 \\ (m' \neq m)}}^{F_{12}} \frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m'}} \log(\lambda_{21,m'}(t_{12,m} - t_{12,m'}))\right) \\
&\quad \times \exp\left(-i \frac{g_{12}^2}{2\lambda_{12,m}} \log(2\lambda_{12,m})\right) |\psi^{(1)}(t)\rangle =: \gamma_1 |\psi^{(1)}(t)\rangle \\
|\psi_0^{(2)}(t, \eta)\rangle &= \exp\left(-i\eta \int_{t_{12,m}}^t dt' \rho_2(t')\right) \exp\left(-i \int_{t_{12,m}}^t dt' \sum_{n=3}^N \left(\frac{g_{2n}^2}{\rho_2(t') - \rho_n(t')}\right)\right) \\
&\quad \times \exp\left(i \int_{t_{12,m}}^t dt' \left(\frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m}(t' - t_{12,m})} - \frac{g_{12}^2}{\rho_2(t') - \rho_1(t')}\right)\right) \\
&\quad \times \left(\frac{\lambda_{12,m}}{2}(t - t_{12,m})^2\right)^{-i\frac{g_{12}^2}{2\lambda_{12,m}}} |2\rangle \\
&= \exp\left(i\eta \int^{t_{12,m}} dt' \rho_2(t')\right) \exp\left(i \sum_{n=3}^N \sum_{m'=1}^{F_{12}} \frac{g_{2n}^2}{\lambda_{n2,m'}} \log(\lambda_{2n,m'}(t_{12,m} - t_{2n,m'}))\right) \\
&\quad \times \exp\left(i \sum_{\substack{m'=1 \\ (m' \neq m)}}^{F_{12}} \frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m'}} \log(\lambda_{21,m'}(t_{12,m} - t_{12,m'}))\right) \\
&\quad \times \exp\left(i \frac{g_{12}^2}{2\lambda_{12,m}} \log(2\lambda_{12,m})\right) e^{\frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m}} \pi} |\psi^{(2)}(t)\rangle =: \gamma_2 |\psi^{(2)}(t, \eta)\rangle
\end{aligned}$$

のように大域的 WKB 解と局所 WKB 解は関係している。ここで、

$$\begin{aligned}
\text{Im} \log(\lambda_{kn,m'}(t_{kl,m} - t_{kn,m'})) &= \begin{cases} -\pi & t_{kl,m} > t_{kn,m'}, \quad \lambda_{kn,m'} < 0 \\ \pi & t_{kl,m} < t_{kn,m'}, \quad \lambda_{kn,m'} > 0 \\ 0 & \text{others} \end{cases} \\
&= \text{sgn}(\lambda_{kn,m'}(t_{kl,m} - t_{kn,m'})) \text{sgn}(\lambda_{kn,m'}) \pi
\end{aligned}$$

より,

$$\begin{aligned}
 \gamma_1 &= \exp\left(i\eta \int^{t_{12,m}} dt' \rho_1(t')\right) \\
 &\times \exp\left(i \sum_{n=3}^N \sum_{m'=1}^{F_{12}} \frac{g_{1n}^2}{\lambda_{n1,m'}} \log |\lambda_{n1,m'}(t_{12,m} - t_{1n,m'})|\right) \\
 &\times \exp\left(- \sum_{n=3}^N \sum_{m'=1}^{F_{12}} \frac{g_{1n}^2}{\lambda_{n1,m'}} \operatorname{sgn}(\lambda_{n1,m'}(t_{12,m} - t_{1n,m'})) \operatorname{sgn}(\lambda_{n1,m'})\pi\right) \\
 &\times \exp\left(-i \sum_{\substack{m'=1 \\ (m' \neq m)}}^{F_{12}} \frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m'}} \log |\lambda_{21,m'}(t_{12,m} - t_{12,m'})|\right) \\
 &\times \exp\left(\sum_{\substack{m'=1 \\ (m' \neq m)}}^{F_{12}} \frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m'}} \operatorname{sgn}(\lambda_{12,m'}(t_{12,m} - t_{12,m'})) \operatorname{sgn}(\lambda_{12,m'})\pi\right) \\
 &\times \exp\left(-i \frac{g_{12}^2}{2\lambda_{12,m}} \log(2\lambda_{12,m})\right)
 \end{aligned}$$

とも表せる.

これより, 大域的 WKB 解の接続を考えると,

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} |\psi^{(1)}(t)\rangle \\ |\psi^{(2)}(t)\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \gamma_1^{-1} I_N & 0_N \\ 0_N & \gamma_2^{-1} I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_0^{(1)}(t)\rangle \\ |\psi_0^{(2)}(t)\rangle \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \gamma_1^{-1} I_N & 0_N \\ 0_N & \gamma_2^{-1} I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2(t) \oplus I_{N-2} & 0_N \\ 0_N & u_2(t) \oplus I_{N-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\varphi_+(t)\rangle \oplus |0^{(N-2)}\rangle \\ |\varphi_-(t)\rangle \oplus |0^{(N-2)}\rangle \end{pmatrix} \\
 &\rightarrow \begin{pmatrix} \gamma_1^{-1} I_N & 0_N \\ 0_N & \gamma_2^{-1} I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2(t) \oplus I_{N-2} & 0_N \\ 0_N & u_2(t) \oplus I_{N-2} \end{pmatrix} \\
 &\quad \times \begin{pmatrix} A^{++} I_N & A^{+-} I_N \\ A^{-+} I_N & A^{--} I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\varphi_+(t)\rangle \oplus |0^{(N-2)}\rangle \\ |\varphi_-(t)\rangle \oplus |0^{(N-2)}\rangle \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \gamma_1^{-1} I_N & 0_N \\ 0_N & \gamma_2^{-1} I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2(t) \oplus I_{N-2} & 0_N \\ 0_N & u_2(t) \oplus I_{N-2} \end{pmatrix} \\
 &\quad \times \begin{pmatrix} A^{++} I_N & A^{+-} I_N \\ A^{-+} I_N & A^{--} I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2(t) \oplus I_{N-2} & 0_N \\ 0_N & u_2(t) \oplus I_{N-2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} |\psi_0^{(1)}(t)\rangle \\ |\psi_0^{(2)}(t)\rangle \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \gamma_1^{-1} I_N & 0_N \\ 0_N & \gamma_2^{-1} I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{++} I_N & A^{+-} I_N \\ A^{-+} I_N & A^{--} I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 I_N & 0_N \\ 0_N & \gamma_2 I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi^{(1)}(t)\rangle \\ |\psi^{(2)}(t)\rangle \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

となる. この大域的 WKB 解の接続行列を  $M_{12,m}$  と表す.

$$M_{12,m} := \begin{pmatrix} A^{++} & A^{+-} \gamma_1^{-1} \gamma_2 \\ A^{-+} \gamma_2^{-1} \gamma_1 & A^{--} \end{pmatrix}$$

ここで,

$$\begin{aligned}
\gamma_1^{-1}\gamma_2 &= \exp\left(-i\eta \int^{t_{12,m}} dt' (\rho_1(t') - \rho_2(t'))\right) \\
&\times \exp\left(-i \sum_{n=3}^N \sum_{m'=1}^{F_{12}} \frac{g_{1n}^2}{\lambda_{n1,m'}} \log(\lambda_{1n,m'}(t_{12,m} - t_{1n,m'}))\right) \\
&\times \exp\left(i \sum_{n=3}^N \sum_{m'=1}^{F_{12}} \frac{g_{2n}^2}{\lambda_{n2,m'}} \log(\lambda_{2n,m'}(t_{12,m} - t_{2n,m'}))\right) \\
&\times \exp\left(2i \sum_{\substack{m'=1 \\ (m' \neq m)}}^{F_{12}} \frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m'}} \log(\lambda_{21,m'}(t_{12,m} - t_{12,m'}))\right) \\
&\times \exp\left(i \frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m}} \log(2\lambda_{12,m})\right) \exp\left(\frac{g_{12}^2}{\lambda_{12,m}} \pi\right)
\end{aligned}$$

である.

ここまで,  $\lambda_{12,m} > 0$  を仮定した.  $\lambda_{12,m} < 0$  の場合は, 1 行と 2 行を, 1 列と 2 列を入れ替えて同様の議論を行えば良い. その結果, この場合の接続行列は

$$M'_{12,m} := \begin{pmatrix} A^{--} & A^{-+}\gamma_2^{-1}\gamma_1 \\ A^{+-}\gamma_1^{-1}\gamma_2 & A^{++} \end{pmatrix}$$

と求まる.

以上をまとめると、式 (F.4) における  $M$  は

$$\begin{aligned}
 M &= \overrightarrow{\prod} \bar{M}_{jk,m} \\
 \bar{M}_{jk,m} &= \begin{cases} \begin{pmatrix} e^{-2\pi\kappa_{jk,m}} & \frac{-(2\eta)^{-i\kappa_{jk,m}} e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa_{jk,m}} e^{\frac{3\pi}{4}i} \sqrt{2\pi\kappa_{jk,m}}}{\Gamma(1-i\kappa_{jk,m})} \beta_{jk,m} \\ \frac{-(2\eta)^{i\kappa_{jk,m}} e^{\frac{\pi}{2}\kappa_{jk,m}} e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{2\pi\kappa_{jk,m}}}{\Gamma(i\kappa_{jk,m}+1)} \beta_{jk,m}^{-1} & 1 \end{pmatrix} & \lambda_{jk,m} > 0 \\ \\ \begin{pmatrix} 1 & \frac{-(2\eta)^{i\kappa_{jk,m}} e^{\frac{\pi}{2}\kappa_{jk,m}} e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{2\pi\kappa_{jk,m}}}{\Gamma(i\kappa_{jk,m}+1)} \beta_{jk,m}^{-1} \\ \frac{-(2\eta)^{-i\kappa_{jk,m}} e^{-\frac{3\pi}{2}\kappa_{jk,m}} e^{\frac{3\pi}{4}i} \sqrt{2\pi\kappa_{jk,m}}}{\Gamma(1-i\kappa_{jk,m})} \beta_{jk,m} & e^{-2\pi\kappa_{jk,m}} \end{pmatrix} & \lambda_{jk,m} < 0 \end{cases} \\
 &=: \begin{cases} \begin{pmatrix} e^{-2\pi\kappa_{jk,m}} & -\alpha_{jk}^- \\ -\alpha_{jk}^+ & 1 \end{pmatrix} & \lambda_{jk,m} > 0 \\ \\ \begin{pmatrix} 1 & -\alpha_{jk}^+ \\ -\alpha_{jk}^- & e^{-2\pi\kappa_{jk,m}} \end{pmatrix} & \lambda_{jk,m} < 0 \end{cases} \tag{F.9} \\
 \beta_{jk,m} &= \exp\left(-i\eta \int^{t_{jk,m}} dt' (\rho_j(t') - \rho_k(t'))\right) \\
 &\times \exp\left(-i \sum_{\substack{n=1 \\ (n \neq j,k)}}^N \sum_{m'=1}^{F_{jk}} \frac{g_{jn}^2}{\lambda_{nj,m'}} \log(\lambda_{jn,m'}(t_{jk,m} - t_{jn,m'}))\right) \\
 &\times \exp\left(i \sum_{\substack{n=1 \\ (n \neq j,k)}}^N \sum_{m'=1}^{F_{jk}} \frac{g_{kn}^2}{\lambda_{nk,m'}} \log(\lambda_{kn,m'}(t_{jk,m} - t_{kn,m'}))\right) \\
 &\times \exp\left(2i \sum_{\substack{m'=1 \\ (m' \neq m)}}^{F_{jk}} \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{jk,m'}} \log(\lambda_{kj,m'}(t_{jk,m} - t_{jk,m'}))\right) \\
 &\times \exp\left(i \frac{g_{jk}^2}{\lambda_{jk,m}} \log(2\lambda_{jk,m})\right) \exp\left(\frac{g_{jk}^2}{\lambda_{jk,m}} \pi\right)
 \end{aligned}$$

と表せる。ここで、 $\overrightarrow{\prod}$  は、反時間順序積のように、過去の擬交差点に対応する行列  $M_{jk,m}$  が左にくるようにする乗積として導入した。

## G 生存確率の導出

### G.1 仮定の正当性

ここでは、式 (4.3.1) を

$$i \frac{d}{dt} \left( \int_{\mathcal{C}} e^{-iEt} \tilde{a}_0(E) dE \right) = \varepsilon(t) \int_{\mathcal{C}} e^{-iEt} \tilde{a}_0(E) dE + \sum_{k=1}^{N-1} g_k^2 \int_{\mathcal{C}} dE e^{-iEt} \frac{\tilde{a}_0(E)}{E - \varepsilon_k}$$

から導出することを考える。式 (4.3.1) を導出しようとする際に現れるいくつかの問題を挙げる。

- 右辺第 1 項の変形において、積分経路  $\mathcal{C}$  は表面項  $[e^{-iEt}(-it\tilde{a}_0(E) - \tilde{a}'_0(E))]_{\partial\mathcal{C}}$  が消える経路にとる必要がある。また、 $t \rightarrow \pm\infty$  において、積分経路  $\mathcal{C}$  は最急降下線に変形できる必要がある。しかし、これらの条件を満たす経路  $\mathcal{C}$  は存在しない。

(証明の概略)  $|E| \rightarrow \infty$  にて、 $\tilde{a}_0(E)$  は WKB 解の線型結合で表される： $\tilde{a}_0(E) = c_1(E)\tilde{a}_+(E) + c_2(E)\tilde{a}_-(E)$ \*<sup>8</sup>。  $\tilde{a}_0(E \rightarrow \infty) \propto \tilde{a}_-(E \rightarrow \infty)$  とすると、 $E \rightarrow \infty$  の極限で  $e^{-iEt}(-it\tilde{a}_0(E) - \tilde{a}'_0(E)) \rightarrow 0$  が成り立つ。よって、 $E \rightarrow \infty$  を経路  $\mathcal{C}$  の境界の一端とする。次に、経路  $\mathcal{C}$  のもう一方の境界について考える。この境界が  $E \rightarrow \infty$  と同じ Stokes 領域にあれば、表面項は消えるが、経路を最急降下線に変形することはできない。もう一方の境界が  $E \rightarrow \infty$  と異なる Stokes 領域にあれば、この領域では  $c_1(E) \neq 0 \neq c_2(E)$  が成り立つので、表面項が消えない。

- 左辺の変形において、 $E \rightarrow \partial\mathcal{C}$  にて  $\tilde{a}_0(E) \rightarrow \exp(\pm iE^{3/2})/E^{1/4}$  と WKB 解のように振る舞うとき、微分  $\frac{d}{dt}$  と積分  $\int_{\mathcal{C}}$  が可換ではない。

(証明の概略) もし  $\tilde{a}_0(E) \rightarrow \exp(\pm iE^{3/2})/E^{1/4}$  ならば、被積分関数は  $E \rightarrow \partial\mathcal{C}$  にて  $\exp(-iEt \pm iE^{3/2})/E^{1/4}$  のように振る舞う。これより

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{de^{-iEt}}{dt} \tilde{a}_0(E) dE = \int_{\mathcal{C}} (-iE) e^{-iEt} \tilde{a}_0(E) dE$$

は一様収束しない (被積分関数の絶対値は  $E \rightarrow \partial\mathcal{C}$  にて  $|E^{3/4}|$  のように増加するため)。

これらの問題は、 $|t| \rightarrow \infty$  の極限を先にとることで解決する。ここで、次のような変形を考える。まず、積分経路  $\mathcal{C}$  を有限区間にとる： $\mathcal{C} = (-E_c, E_c)$ 。この場合、微分と積分は可換となる。

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \left( \int_{-E_c}^{E_c} e^{-iEt} \tilde{a}_0(E) dE \right) &= \varepsilon(t) \int_{-E_c}^{E_c} e^{-iEt} \tilde{a}_0(E) dE + \sum_{k=1}^N g_k^2 \int_{-E_c}^{E_c} dE e^{-iEt} \frac{\tilde{a}_0(E)}{E - \varepsilon_k} \\ \int_{-E_c}^{E_c} (E - h) e^{-iEt} \tilde{a}_0(E) dE &= w [e^{-iEt}(-it\tilde{a}_0(E) - \tilde{a}'_0(E))]_{-E_c}^{E_c} \\ &\quad + w \int_{-E_c}^{E_c} e^{-iEt} \tilde{a}_0''(E) dE + \sum_{k=1}^N g_k^2 \int_{-E_c}^{E_c} dE e^{-iEt} \frac{\tilde{a}_0(E)}{E - \varepsilon_k} \end{aligned}$$

\*<sup>8</sup> 係数  $c_1(E), c_2(E)$  は、 $E$  平面上の考えている領域によって変化する (Stokes 現象)。



ここで,  $t \rightarrow \pm\infty$  の極限を考え, この符号に合わせて経路も  $E < 0$  のときに  $\pm\epsilon$  だけ虚軸方向にずらす. 次に  $E_c \rightarrow \infty$  の極限をとると, 表面項が消えることが分かる. これより

$$\int_{-\infty}^{\infty} (E-h)e^{-iEt}\tilde{a}_0(E)dE = w \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iEt}\tilde{a}_0''(E)dE + \sum_{k=1}^N g_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} \frac{\tilde{a}_0(E)}{E-\epsilon_k} \quad (|t| \rightarrow \infty)$$

を得る.

ここで考えた問題は  $|E| \rightarrow \infty$  における WKB 解の振る舞いに起因している. この WKB 解は (Fourier 変換した) Airy 方程式の WKB 解と同じである. よって, Airy 関数についても同様の問題が生じると考えられる (Appendix G.2.1).

## G.2 Airy 関数の Fourier 変換

$|E| \rightarrow \infty$  における式 (4.3.2) は Airy 方程式となるので, WKB 解  $\tilde{a}_{\pm}(E)$  と Airy 関数の性質は同じと考えられる. そこで, この節では Airy 関数  $\text{Ai}(z)$  の Fourier 変換を Stokes 現象や鞍点近似を用いる立場から見直してみる.

Airy 関数  $\text{Ai}(z)$  は

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} ds e^{-\frac{s^3}{3} + zs}$$

と定義されている. Airy 関数の Fourier 変換は

$$\begin{aligned} \tilde{\text{Ai}}(t) &:= \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-izt} \text{Ai}(z) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-i\infty}^{i\infty} ds e^{iz(-t-is)} e^{-\frac{s^3}{3}} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} ds' e^{iz(-t+s')} e^{i\frac{s'^3}{3}} \quad (s = is') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} ds' \delta(-t+s') e^{i\frac{s'^3}{3}} \\ &= e^{i\frac{t^3}{3}} \end{aligned}$$

と求まる. この結果を用いて, 前述した問題について考察する. 次に, この結果を鞍点近似を用いて求める.

### G.2.1 直接的評価

ここではまず, Airy 関数の Fourier 変換に対しても前節同様の問題が現れることを確認する.

Fourier 変換した Airy 関数が満たす方程式は

$$\frac{d}{dt} \tilde{\text{Ai}}(t) = it^2 \tilde{\text{Ai}}(t)$$

である. よって

$$\tilde{\text{Ai}}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-izt} \text{Ai}(z)$$

とすると,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-izt} \text{Ai}(z) &= it^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-izt} \text{Ai}(z) \\ &= \left[ -te^{-izt} \text{Ai}(z) + ie^{-izt} \frac{d}{dz} \text{Ai}(z) \right]_{-\infty}^{\infty} - i \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-izt} \frac{d^2}{dz^2} \text{Ai}(z) \\ &= \left[ -te^{-izt} \text{Ai}(z) + ie^{-izt} \frac{d}{dz} \text{Ai}(z) \right]_{-\infty}^{\infty} - i \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-izt} z \text{Ai}(z) \end{aligned}$$

となる. これより, 微分と積分の非可換性から表面項の寄与が生じていることがわかる.

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-izt} \text{Ai}(z) - \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d}{dt} e^{-izt} \text{Ai}(z) = \left[ -te^{-izt} \text{Ai}(z) + ie^{-izt} \frac{d}{dz} \text{Ai}(z) \right]_{-\infty}^{\infty}$$

前述したように,  $|t| \rightarrow \infty$  の極限を先にとり, 積分経路を無限小だけ変形することによって, この表面項が 0 となり, 微分と積分が可換となる.

## G.2.2 WKB 近似と Stokes 線

Airy 関数の漸近展開, つまり Airy 方程式の WKB 解は

$$\tilde{a}_{\pm}(z) = \frac{1}{z^{1/4}} e^{\pm \frac{2}{3} z^{3/2}}$$

のように表せる. この中には  $z^{1/4}$  や  $z^{3/2}$  が含まれるため, この漸近展開は多値関数である. 一方で Airy 関数は複素平面上で 1 価の関数であることに注意する.

複素平面上のある領域ごとに, 漸近展開が不連続に変化する現象が Stokes 現象として知られている. 例えば Airy 関数の漸近展開は以下の図 G.1 のように変化することが知られている. ここで, 図 G.1 では正の実軸上に分岐を入れた.

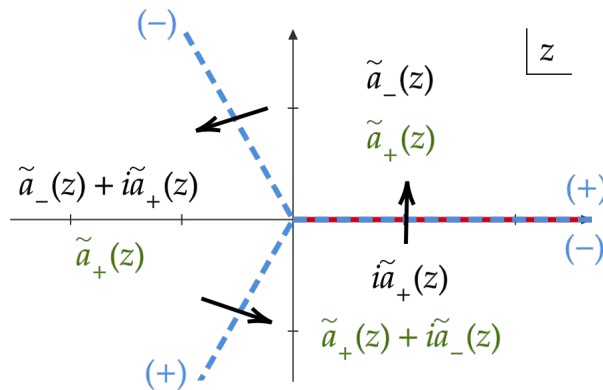


図 G.1 黒字で書かれた式が  $\text{Ai}(z)$  の漸近展開.  $\arg z = \pi k/3$  で仕切られている領域を移り変わる毎に漸近展開の形が変わることが分かる (Stokes 現象). 第 1 象限で  $\tilde{a}_+(z)$  と漸近展開された関数は, 緑字で書かれた式のように漸近展開の形が変わる. この境界を示す青の破線を Stokes 線と呼び, Stokes 線上で支配的な項を (±) で表した. 漸近展開によって得られた WKB 解は多価関数なので, 正の実軸に分岐 (赤線) を入れることによって Airy 関数の 1 価性を保証している.

## G.2.3 鞍点近似

Airy 関数を積分経路  $\mathcal{C}$  上で Fourier 変換することを考える. ここで,  $\mathcal{C}$  が  $z = 0$  から十分離れているとする. このとき, 被積分関数である  $\text{Ai}(z)$  は  $\text{Ai}(z) \simeq \alpha_+ \tilde{a}_+(z) + \alpha_- \tilde{a}_-(z)$  のように, Airy 関数の漸近展開に近似できると考えられる.  $\tilde{a}_\pm(z)$  の Fourier 変換は

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\tilde{a}_\pm(z)](t) &:= \int_{\mathcal{C}} dz e^{-izt} \frac{1}{z^{1/4}} e^{\pm \frac{2}{3} z^{3/2}} \\ &= |t|^{3/2} \int_{\tilde{\mathcal{C}}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{(-it^3 \tilde{z} \pm \frac{2}{3} |t|^3 \tilde{z}^{3/2})} \quad (z = |t|^2 \tilde{z}) \\ &=: |t|^{3/2} \int_{\tilde{\mathcal{C}}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{g_\pm(\tilde{z}, t)} \end{aligned}$$

と変形できる. ここで,  $|t|$  が十分大きい場合を考えると,  $\partial_{\tilde{z}} g_\pm(\tilde{z}, t) = 0$  を満たす  $\tilde{z} = \tilde{z}_\pm$  の近傍での振る舞いが主要な寄与を与える (鞍点近似).  $t > 0$  のとき, 鞍点は

$$\begin{aligned} g_\pm(\tilde{z}, t) &= t^3 \left( -i\tilde{z} \pm \frac{2}{3} \tilde{z}^{3/2} \right) \\ \frac{\partial g_\pm(\tilde{z}, t)}{\partial \tilde{z}} &= t^3 \left( -i \pm \tilde{z}^{1/2} \right) \\ \tilde{z}_\pm^{1/2} &= \pm i \\ \tilde{z}_+ &= e^{i\pi(1+4n)}, \quad \tilde{z}_- = e^{i\pi(3+4n)} \quad (n \in \mathbb{Z}) \end{aligned}$$

となる.  $\arg z \in [0, 2\pi]$  に制限しているのて, 鞍点は  $\tilde{z}_+ = e^{i\pi}$  のみとなる.

他方,  $t < 0$  のとき, 鞍点は

$$\begin{aligned} g_\pm(\tilde{z}, t) &= t^3 \left( -i\tilde{z} \mp \frac{2}{3} \tilde{z}^{3/2} \right) \\ \frac{\partial g_\pm(\tilde{z}, t)}{\partial \tilde{z}} &= t^3 \left( -i \mp \tilde{z}^{1/2} \right) \\ \tilde{z}_\pm^{1/2} &= \mp i \\ \tilde{z}_+ &= e^{i\pi(3+4n)}, \quad \tilde{z}_- = e^{i\pi(1+4n)} \quad (n \in \mathbb{Z}) \end{aligned}$$

となるが, 先ほどの議論と同様に,  $\tilde{z}_- = e^{i\pi}$  のみが鞍点として寄与する.

以上の議論より,  $t > 0$  のとき,  $\tilde{a}_+(z)$  の Fourier 変換が鞍点をもち,  $t < 0$  のときは  $\tilde{a}_-(z)$  の Fourier 変換が鞍点をもつ.

G.2.4  $t \rightarrow -\infty$  の場合

$t \rightarrow -\infty$  の場合の最急降下線を考える. 鞍点  $\tilde{z} = -1$  近傍のみを考えると,

$$\begin{aligned} \tilde{a}_-(t) &= \alpha_- |t|^{3/2} \int_{\tilde{\mathcal{C}}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{g_-(\tilde{z}, t)} \\ &\simeq \alpha_- |t|^{3/2} \int_{\tilde{\mathcal{C}}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{g_-(\tilde{z}_-, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g_-(\tilde{z}_-, t)}{\partial \tilde{z}^2} (\tilde{z} - \tilde{z}_-)^2} \\ &= \alpha_- |t|^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} dR e^{i\theta} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{g_-(\tilde{z}_-, t) + \frac{t^3}{4} e^{-i\pi/2} R^2 e^{i2\theta}} \quad (\tilde{z}_- + Re^{i\theta} = \tilde{z}) \end{aligned}$$

と変形できる．ここで，最急な方向は

$$e^{-i\frac{\pi}{2}+i2\theta} = e^{i2m\pi} \quad (m \in \mathbb{Z})$$

$$\theta = \left(m + \frac{1}{4}\right)\pi$$

となる． $m = 2\mathbb{Z}$  のとき，積分経路は  $5\pi/4$  から  $\pi/4$  へ向かい，

$$\begin{aligned} \tilde{\text{Ai}}_-(t) &= \alpha_- |t|^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} dR e^{i\theta} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{g_-(\tilde{z}_-, t) + \frac{t^3}{4} e^{-i\pi/2} R^2} e^{i2\theta} \\ &\simeq \alpha_- |t|^{3/2} e^{g_-(\tilde{z}_-, t)} e^{i\theta} \frac{1}{\tilde{z}_-^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} dR e^{-\frac{|t|^3}{4} R^2} \\ &= \alpha_- |t|^{3/2} e^{g_-(\tilde{z}_-, t)} e^{i\theta} \frac{1}{\tilde{z}_-^{1/4}} \sqrt{\frac{4\pi}{|t|^3}} \\ &= \alpha_- e^{\frac{t^3}{3}i} e^{\frac{i}{4}\pi} \frac{1}{e^{\frac{i}{4}\pi}} \sqrt{4\pi} \\ &= \sqrt{4\pi} \alpha_- e^{\frac{t^3}{3}i} \end{aligned}$$

と求まる．

最急降下線上では， $\text{Im } g_-(\tilde{z}, t) = \text{const.}$  が成り立つ． $|\tilde{z}|$  が十分大きければ，

$$\begin{aligned} \text{Im } t^3 \left( -i\tilde{z} + \frac{2}{3}\tilde{z}^{3/2} \right) &\simeq \text{Im } t^3 \left( -i\tilde{z}_- + \frac{2}{3}\tilde{z}_-^{3/2} \right) \\ \text{Im} \left( -iRe^{i\theta} + \frac{2}{3}R^{3/2}e^{i\theta 3/2} \right) &\simeq \frac{1}{3} \quad (\tilde{z} = Re^{i\theta}) \\ -R \cos \theta + \frac{2}{3}R^{3/2} \sin(3\theta/2) &\simeq \frac{1}{3} \\ \theta &\simeq +0, 2\pi/3 + 0, 4\pi/3 - 0, 2\pi - 0 \end{aligned}$$

と，最急降下線の方向が分かる．

元の積分経路（図 G.2 の赤線）を最急降下線（図 G.2 の黒線）に変形できるかどうか考える．これらの経路を結んだ領域内に特異点は存在しない<sup>\*9</sup>ので，第三象限におけるこれらの経路を結んだ箇所以外の寄与は存在しない．また，最急降下線上に  $\tilde{a}_+(z)$  由来の鞍点が存在しないため，最急降下線上で積分している関数を  $\tilde{a}_-(z)$  のみと置き換えて良い．この事実と，第三象限では  $\tilde{a}_-(z)$  は  $|z|$  に関して指数的減衰をすることより，Riemann-Lebesgue の補題から第 3 象限における経路を結んだ箇所の寄与は 0 となることが分かる．よって，図 G.2 の黒線で表される最急降下線上での積分は，元の積分経路上での積分と同等の結果を与えることが分かる．

$|t|$  が十分大きいとき， $\tilde{z} = -1 \Leftrightarrow z = -|t|^2$  近傍で  $\text{Ai}(z) \simeq \alpha_- \tilde{a}_-(z) + \alpha_+ i \tilde{a}_+(z)$  と漸近展開できる．

$$\tilde{\text{Ai}}(t) = \alpha_- t^{3/2} \int_{\tilde{c}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{t^3 g_-(\tilde{z})} + \alpha_+ i t^{3/2} \int_{\tilde{c}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{t^3 g_+(\tilde{z})}$$

<sup>\*9</sup> 式 (4.3.1) には確定特異点が存在するが，その特異点の周りで冪級数解を構築すると，1 価の関数となることが分かる．

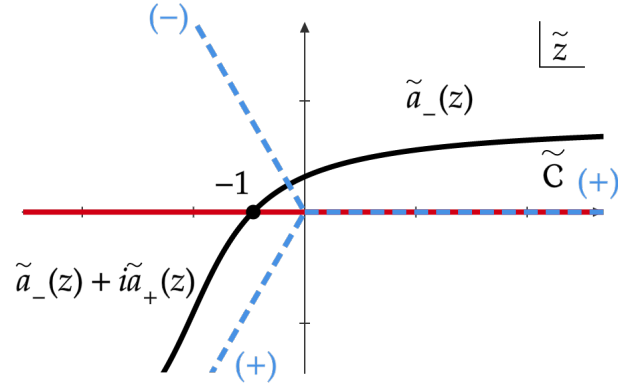


図 G.2 赤線が元の積分経路, 黒線が最急降下線, 黒点が鞍点を表している.

Airy 関数の漸近展開において,  $\alpha_- = \alpha_+ = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$  が成り立つことが知られている.  $g_+(\tilde{z})$  が鞍点を持たないことから,

$$\tilde{\text{Ai}}(t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left( \sqrt{4\pi} e^{\frac{t^3}{3}i} \right) = e^{\frac{t^3}{3}i}$$

が成り立つ. 以上より,  $t \rightarrow -\infty$  における Airy 関数の Fourier 変換を得た.

### G.2.5 $t \rightarrow \infty$ の場合

$t \rightarrow \infty$  における最急降下線を確認する. 鞍点近傍で,

$$\begin{aligned} \tilde{\text{Ai}}_+(t) &= \alpha_+ |t|^{3/2} \int_{\tilde{c}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{g_+(\tilde{z}, t)} \\ &\simeq \alpha_+ |t|^{3/2} \int_{\tilde{c}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{g_+(\tilde{z}_+, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g_+(\tilde{z}_+, t)}{\partial \tilde{z}^2} (\tilde{z} - \tilde{z}_+)^2} \\ &= \alpha_+ |t|^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} dR e^{i\theta} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{g_+(\tilde{z}_+, t) + \frac{t^3}{4} e^{-i\pi/2} R^2 e^{i2\theta}} \quad (\tilde{z}_+ + R e^{i\theta} = \tilde{z}) \end{aligned}$$

と変形できる. ここで,

$$e^{-i\frac{\pi}{2} + i2\theta} = e^{i(2m+1)\pi} \quad (m \in \mathbb{Z})$$

$$\theta = \left( m + \frac{3}{4} \right) \pi$$

より,  $m = 2\mathbb{Z} + 1$  のとき, 積分経路は  $3\pi/4$  から  $7\pi/4$  へ伸びる. 以上より,

$$\begin{aligned}
\tilde{A}i_+(t) &= \alpha_+ |t|^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} dR e^{i\theta} \frac{1}{\tilde{z}_+^{1/4}} e^{g_+(\tilde{z}_+, t) + \frac{t^3}{4}} e^{-i\pi/2} R^2 e^{i2\theta} \\
&\simeq \alpha_+ |t|^{3/2} e^{g_+(\tilde{z}_+, t)} e^{i\theta} \frac{1}{\tilde{z}_+^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} dR e^{-\frac{t^3}{4} R^2} \\
&= \alpha_+ |t|^{3/2} e^{g_+(\tilde{z}_+, t)} e^{i\theta} \frac{1}{\tilde{z}_+^{1/4}} \sqrt{\frac{4\pi}{t^3}} \\
&= \alpha_+ e^{\frac{t^3}{3}i} e^{\frac{7i}{4}\pi} \frac{1}{e^{\frac{\pi}{4}i}} \sqrt{4\pi} \\
&= -i\sqrt{4\pi}\alpha_+ e^{\frac{t^3}{3}i}
\end{aligned}$$

を得る.

最急降下線上では,  $\text{Im } g_+(\tilde{z}, t) = \text{const.}$  が成り立つ.  $|\tilde{z}|$  が十分大きいとき,

$$\begin{aligned}
\text{Im } t^3 \left( -i\tilde{z} + \frac{2}{3}\tilde{z}^{3/2} \right) &\simeq \text{Im } t^3 \left( -i\tilde{z}_+ + \frac{2}{3}\tilde{z}_+^{3/2} \right) \\
\text{Im} \left( -iR e^{i\theta} + \frac{2}{3}R^{3/2} e^{i\theta 3/2} \right) &\simeq \frac{1}{3} \quad (\tilde{z} = R e^{i\theta}) \\
-R \cos \theta + \frac{2}{3}R^{3/2} \sin(3\theta/2) &\simeq \frac{1}{3} \\
\theta &\simeq +0, 2\pi/3 + 0, 4\pi/3 - 0, 2\pi - 0
\end{aligned}$$

となり, 最急降下線の伸びる方向が分かる.

元の積分経路 (図 G.3 の赤線) を最急降下線 (図 G.3 の黒線) に変形できるかどうか考える. これらの経路を結んだ経路内に特異点は無いため, 有限の寄与は第 2 象限から現れる可能性がある. しかし,  $\tilde{a}_-(z)$  は最急降下線上に鞍点がないため, この経路上での被積分関数は  $\tilde{a}_+(z)$  のみとみなすことができる.  $\tilde{a}_+(z)$  は  $2\pi/3 < \arg z < \pi$  において指数的に減衰する項なので, Riemann-Lebesgue の補題よりこれらの経路を結ぶ経路での積分の寄与は 0 とみなせる. よって, 図 G.3 の赤線で示される元の積分経路は, 黒線で示される最急降下線に変形できることが分かる.

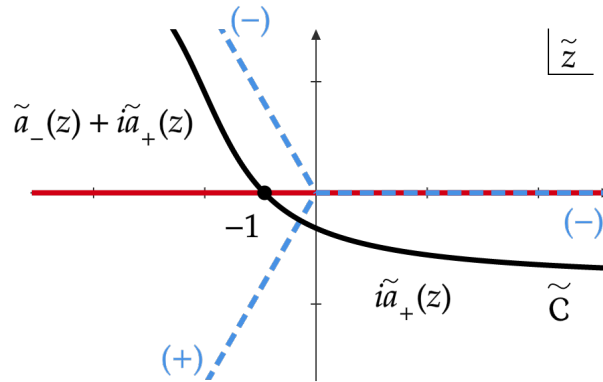


図 G.3 赤線が元の積分経路を表し, 黒線が最急降下線を表す. 黒点は鞍点を表す.

$|t|$  が十分大きいとき、鞍点  $\tilde{z} = -1 \Leftrightarrow z = -|t|^2$  近傍で  $\text{Ai}(z) \simeq \alpha_- \tilde{a}_-(z) + \alpha_+ i \tilde{a}_+(z)$  のように漸近展開できる。

$$\tilde{\text{Ai}}(t) = N_- t^{3/2} \int_{\tilde{c}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{t^3 g_-(\tilde{z})} + N_+ i t^{3/2} \int_{\tilde{c}} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}^{1/4}} e^{t^3 g_+(\tilde{z})}$$

Airy 関数の漸近展開より、 $N_- = N_+ = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$  が成り立つことが分かる。 $g_-(\tilde{z})$  は鞍点を持っていないことから、

$$\tilde{\text{Ai}}(t) = \frac{i}{2\sqrt{\pi}} \left( -i\sqrt{4\pi} e^{\frac{t^3}{3}i} \right) = e^{\frac{t^3}{3}i}$$

が成り立つ。以上より  $t \rightarrow \infty$  における Airy 関数の Fourier 変換を得た。

### G.3 WKB 近似と最急降下線を用いた評価

2 準位系を考え、簡単のため  $\hbar = 0$  とする。 $E$  が転回点から十分離れているとき、ポテンシャル  $V(E)$  は線形近似できる。

$$V(E) \simeq E.$$

よって、WKB 解は

$$\tilde{a}_{\pm}(E) \simeq \frac{1}{E^{1/4}} e^{\pm \frac{2}{3} E^{3/2}}$$

と表せる。この WKB 解の Fourier 変換を考えると、

$$\int_{\tilde{c}} dE \tilde{a}_{\pm}(E) e^{-iEt} = |t|^{3/2} \int_{\tilde{c}} d\tilde{E} \frac{1}{\tilde{E}^{1/4}} e^{(\pm \frac{2}{3} |t|^3 \tilde{E}^{3/2} - i\tilde{E}t^3)} \quad (E = \tilde{E}|t|^2)$$

となる。Airy 関数での議論より、鞍点が  $\tilde{E} = -1$  にあることが分かる。

解が  $\tilde{a}_0(E \sim -\infty) = \alpha \tilde{a}_+(E) + \beta \tilde{a}_-(E)$  のように表されているとき、生存確率は

$$\begin{aligned} \left| \frac{a_0(\infty)}{a_0(-\infty)} \right|^2 &= \left| \frac{\int_{\mathcal{C}(\infty)} dE e^{-iEt} \tilde{a}_0(E)}{\int_{\mathcal{C}(-\infty)} dE e^{-iEt} \tilde{a}_0(E)} \right|^2 \\ &= \left| \frac{\int_{\mathcal{C}(\infty)} dE e^{-iEt} \beta \tilde{a}_-(E)}{\int_{\mathcal{C}(-\infty)} dE e^{-iEt} \alpha \tilde{a}_+(E)} \right|^2 \\ &= \left| \frac{\beta e^{i\frac{t^3}{3}}}{\alpha e^{i\frac{t^3}{3}}} \right|^2 \\ &= \left| \frac{\beta}{\alpha} \right|^2 \end{aligned}$$

のように求まる。

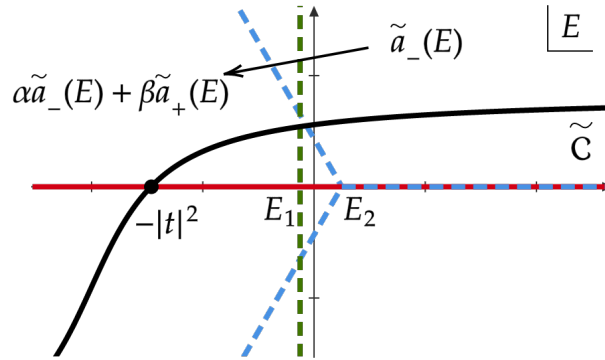


図 G.4  $N = 2$  のときの積分経路. 赤線が元の積分経路を表し, 黒線が  $t \rightarrow -\infty$  における最急降下線を表す. 黒点は鞍点を表す. 青と緑の破線が Stokes 線を表す.

#### G.4 非有界なポテンシャルに対する WKB 近似の妥当性

Schrödinger 方程式 (4.3.2) を近似的に解くために WKB 近似を用いた.  $N = 2$  の場合, WKB 解は

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{\pm}(E, E_n) &= \frac{1}{Q^{1/4}(E)} \exp\left(\pm \int_{E_n}^E \sqrt{Q(E)} dE\right) \\ Q(E) &= V(E) - h \\ E_{1,2} &= \frac{1}{2} \left( h \mp \sqrt{h^2 + 4g^2} \right) \end{aligned}$$

のように表せた. ここで,  $E_{1,2}$  は転回点で,  $E_1 < E_2$  のように定義する. WKB 近似が妥当となる領域は

$$\frac{1}{\sqrt{w}} \gg \left| \frac{\frac{d}{dE} \sqrt{Q(E)}}{Q(E)} \right| = \left| \frac{Q'(E)}{2Q^{3/2}(E)} \right|$$

である. 図 G.5 より, 転回点近傍と, ポテンシャルが発散している領域の近傍では WKB 近似が妥当でないことが分かる.

## H 多準位放物模型に対する一般化断熱瞬間近似

この章では, 一般化断熱瞬間近似 [66, 80] を用いて多準位放物模型に対する生存確率を求める. ここでは, 次のハミルトニアンを考える.

$$H_{\eta}(t) = \eta \varepsilon(t) |0\rangle \langle 0| + \eta \sum_{k=1}^{N-1} \varepsilon_k |k\rangle \langle k| + \sqrt{\eta} \sum_{k=1}^{N-1} g_k (|0\rangle \langle k| + |k\rangle \langle 0|)$$

ここで,  $\eta = 1$  とすると, 式 (4.1.1) のハミルトニアンに戻る. 実条件  $h > \varepsilon_j$  を仮定し, この模型に一般化断熱瞬間近似を適用し,  $\eta = 1$  とすると, 次のように生存確率が求まる.

$$p_{\infty} = \left| \prod_{n=1}^{N-1} p_n + \prod_{n=1}^{N-2} p_n \alpha_{N-1} + \prod_{n=1}^{N-3} p_n \alpha_{N-2} + \cdots + \alpha_1 \right|^2 \quad (\text{H.1})$$



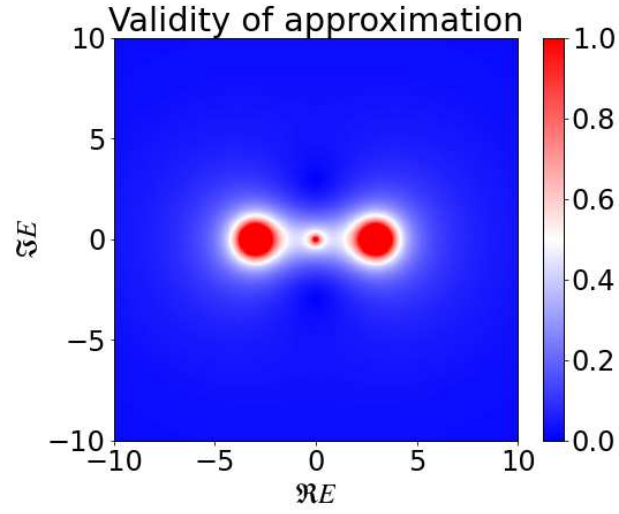


図 G.5  $\left| \frac{Q'(E)}{2Q^{3/2}(E)} \right| \sqrt{w}$  のプロット. パラメータは  $w = 1, g = 3, h = 0$  とした. 赤で示されている領域では方程式の解が WKB 解で近似できないことを表している.

ここで,

$$\begin{aligned} \alpha_j &= (1 - p_j) e^{i\theta_j} \\ \theta_j &= \frac{\pi}{2} + 2 \arg \Gamma(1 - i\kappa_j) + 2 \arg g_j + \zeta_j + 6\kappa_j \log \left( 2\sqrt{\frac{h}{w^{1/3}}} \right) + \Theta_j \\ \kappa_j &= \frac{g_j^2}{2\sqrt{(h - \varepsilon_j)w}} \\ \zeta_j &= \int_{t_{j,1}}^{t_{j,2}} (-wt^2 + h - \varepsilon_j) dt = \frac{4(h - \varepsilon_j)}{3} \sqrt{\frac{h - \varepsilon_j}{w}} \\ \Theta_j &= \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^{N-1} 2\kappa_l \log \left| \frac{\sqrt{h - \varepsilon_j} + \sqrt{h - \varepsilon_l}}{\sqrt{h - \varepsilon_j} - \sqrt{h - \varepsilon_l}} \right|. \end{aligned}$$

である.

## I 生存確率の近似式

この節では、求めた生存確率 (4.3.3) の、高次まで含めた解析的な表示を求める。

### I.1 $N = 2$ の場合

この場合の  $\gamma_{\pm}(x_1, x_2)$  の解析的表示を近似的に求める。ここで、

$$\gamma_{\pm}(x_1, x_2) = \exp\left(\mp \int_{x_1}^0 dx \sqrt{Q(x)}\right) \exp\left(\mp i \int_0^{x_2} dx \sqrt{-Q(x)}\right)$$

である。

#### I.1.1 $\tilde{h} \gg \tilde{g}$

この極限では、

$$\begin{aligned} |\gamma_{\pm}(x_1, x_2)| &= \mp \int_{x_1}^0 dx \sqrt{Q(x)} \\ &= \mp \int_{x_1}^0 dx \sqrt{x - \frac{\tilde{g}^2}{x} - \tilde{h}} \\ &\simeq \mp \int_{x_1}^0 dx \sqrt{-\frac{\tilde{g}^2}{x} - \tilde{h}} \\ &= \mp \kappa \pi =: \mp S_1(\tilde{h}, \tilde{g}) \end{aligned}$$

と求まる。一方、偏角に対しては、 $\tilde{g}/\tilde{h} =: r_1$  とすると、

$$\begin{aligned} \int_0^{x_2} dx \sqrt{-Q(x)} &= \int_0^{x_2} dx \sqrt{\frac{x - x_1}{x} (x_2 - x)} \\ &\simeq \int_0^{x_2} dx \sqrt{x_2 - x} \sqrt{1 + \frac{r_1^2 \tilde{h}}{x}} \\ &= \int_0^{x_2} dx \left( \sqrt{x_2 - x} \sqrt{1 + \frac{r_1^2 \tilde{h}}{x}} - \sqrt{x_2} \sqrt{1 + \frac{r_1^2 \tilde{h}}{x}} \right) + \int_0^{x_2} dx \sqrt{x_2} \sqrt{1 + \frac{r_1^2 \tilde{h}}{x}} \\ &\simeq \frac{2}{3} \tilde{h}^{3/2} + \kappa + \kappa \log\left(\frac{16}{r_1^2}\right) =: S_2(\tilde{h}, \tilde{g}) \end{aligned}$$

と近似できる。以上より、

$$\gamma_{\pm}(x_1, x_2) \simeq \exp(\mp \kappa \pi) \exp\left(\mp i \left( \frac{2}{3} \tilde{h}^{3/2} + \kappa \left( 1 + 2 \log\left(\frac{4\tilde{h}}{\tilde{g}}\right) \right) \right)\right)$$

と求まる。

I.1.2  $\tilde{h} \ll -\tilde{g}$ 

この極限では,  $\tilde{h} \gg \tilde{g}$  の極限との対称性を考慮すると (図 I.1),

$$\begin{aligned}\gamma_{\pm}(x_1, x_2) &= \exp\left(\mp \int_{x_1}^0 dx \sqrt{Q(x)}\right) \exp\left(\mp i \int_0^{x_2} dx \sqrt{-Q(x)}\right) \\ &\simeq \exp\left(\mp S_2(|\tilde{h}|, \tilde{g})\right) \exp\left(\mp i S_1(|\tilde{h}|, \tilde{g})\right) \\ &\simeq \exp\left(\mp \frac{2}{3} |\tilde{h}|^{3/2}\right) \exp(\mp i \pi |\kappa|)\end{aligned}$$

と求まる.

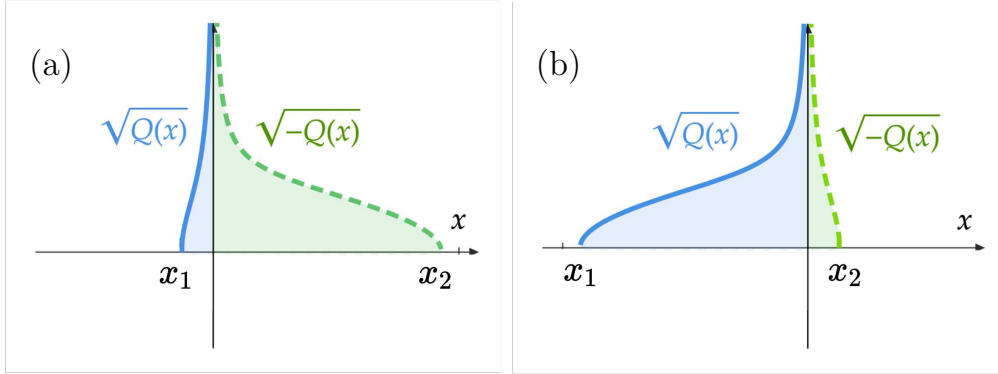


図 I.1 (a)  $\tilde{h} \gg \tilde{g}$  の場合と (b)  $\tilde{h} \ll -\tilde{g}$  の場合の非積分関数  $\sqrt{Q(x)}$ ,  $\sqrt{-Q(x)}$ .  $\tilde{h} \gg \tilde{g}$  の場合の  $\int_{x_1}^0 dx \sqrt{Q(x)}$  が,  $\tilde{h} \ll -\tilde{g}$  の場合の  $\int_0^{x_2} dx \sqrt{-Q(x)}$  に対応していることが分かる.

I.2  $N = 3$  の場合

この場合の  $\gamma_{\pm}(x_1, x_2)$  の解析的表示を近似的に求め,  $p_{\infty}$  の解析的表示を近似的に示す. ここで,

$$\begin{aligned}\gamma_{\pm}(x_1, x_2) &= \exp\left(\mp \int_{x_1}^{\tilde{\varepsilon}_1} dx \sqrt{Q(x)}\right) \exp\left(\mp i \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \sqrt{-Q(x)}\right) \\ \gamma_{\pm}(x_1, x_3) &= \exp\left(\mp \int_{x_2}^{\tilde{\varepsilon}_2} dx \sqrt{Q(x)}\right) \exp\left(\mp i \int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} dx \sqrt{-Q(x)}\right) \gamma_{\pm}(x_1, x_2)\end{aligned}$$

である.

I.2.1  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \lesssim \tilde{\varepsilon}_2 \ll x_3$ 

このとき, 転回点は次のように近似できる.

$$\begin{aligned}x_1 &\simeq \tilde{\varepsilon}_1 - r_1^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1) \\ x_2 &\simeq \tilde{\varepsilon}_2 - r_2^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_2) \\ x_3 &\simeq \tilde{h} + r_1^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1) + r_2^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_2)\end{aligned}$$

この極限において,  $|\gamma_+(x_1, x_i)|$  に寄与する項は, 前節と同様にして,

$$\begin{aligned}
\int_{x_1}^{\tilde{\varepsilon}_1} dx \sqrt{Q(x)} &= \int_{x_1}^{\tilde{\varepsilon}_1} dx \sqrt{\frac{x-x_1}{\tilde{\varepsilon}_1-x} \frac{x_2-x}{\tilde{\varepsilon}_2-x} (x_3-x)} \\
&\simeq \sqrt{x_3-\tilde{\varepsilon}_1} \int_{x_1}^{\tilde{\varepsilon}_1} dx \sqrt{\frac{x-x_1}{\tilde{\varepsilon}_1-x}} \\
&\simeq r_1^2 (\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)^{3/2} \frac{\pi}{2} \\
&= \kappa_1 \pi =: S_1(\tilde{h}, \tilde{\varepsilon}_1, \tilde{g}_1) \\
\int_{x_2}^{\tilde{\varepsilon}_2} dx \sqrt{Q(x)} &\simeq \kappa_2 \pi =: S_3(\tilde{h}, \tilde{\varepsilon}_2, \tilde{g}_2)
\end{aligned}$$

と近似できる. 一方で,  $\arg \gamma_+(x_1, x_i)$  に寄与する項は

$$\begin{aligned}
&\int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \sqrt{-Q(x)} \\
&= \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \sqrt{\frac{x-x_1}{x-\tilde{\varepsilon}_1} \frac{x_2-x}{\tilde{\varepsilon}_2-x} (x_3-x)} \\
&\simeq \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \sqrt{x_3-x} \sqrt{1 + \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1}} \sqrt{1 - \frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{\tilde{\varepsilon}_2-x}} dx \\
&\simeq \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \left( \sqrt{x_3-x} \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1} - \frac{1}{2} \frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{\tilde{\varepsilon}_2-x} \right) \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{x_3-\tilde{\varepsilon}_1} \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1} \right) - \sqrt{x_3-\tilde{\varepsilon}_2} \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{\tilde{\varepsilon}_2-x} \right) \right) \\
&\quad + \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \left( \sqrt{x_3-\tilde{\varepsilon}_1} \sqrt{1 + \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1}} + \sqrt{x_3-\tilde{\varepsilon}_2} \sqrt{1 - \frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{\tilde{\varepsilon}_2-x}} \right) \\
&\simeq -\frac{2}{3} (\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)^{3/2} - 2\kappa_1 \log \left( \frac{r_1}{4R_1} \left( 1 + \frac{R_1}{R_2} \right) \right) + \frac{2}{3} (\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)^{3/2} + 2\kappa_2 \log \left( \frac{r_2}{4R_2} \left( 1 + \frac{R_2}{R_1} \right) \right) \\
&\quad + \kappa_1 - 2\sqrt{2}\kappa_2 + \kappa_2 =: S_2(\tilde{h}, \tilde{\varepsilon}_1, \tilde{\varepsilon}_2, \tilde{g}_1, \tilde{g}_2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} dx \sqrt{-Q(x)} \\
 &= \int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} dx \sqrt{\frac{x-x_1}{x-\tilde{\varepsilon}_1} \frac{x-x_2}{x-\tilde{\varepsilon}_2}} (x_3-x) \\
 &\simeq \int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} dx \sqrt{x_3-x} \sqrt{1+\frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1}} \sqrt{1+\frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{x-\tilde{\varepsilon}_2}} \\
 &\simeq \int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} dx \left( \sqrt{x_3-x} \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1} + \frac{1}{2} \frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{x-\tilde{\varepsilon}_2} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{x_3-\tilde{\varepsilon}_1} \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1} \right) - \sqrt{x_3-\tilde{\varepsilon}_2} \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{x-\tilde{\varepsilon}_2} \right) \right) \\
 &\quad + \int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} dx \left( \sqrt{x_3-\tilde{\varepsilon}_1} \sqrt{1+\frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1}} + \sqrt{x_3-\tilde{\varepsilon}_2} \sqrt{1+\frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{x-\tilde{\varepsilon}_2}} \right) \\
 &\simeq - \left( \kappa_1 \frac{R_1^2}{R_2^2} + \kappa_2 \frac{R_1}{R_2} - 2\kappa_1 - \kappa_2 \frac{R_2}{R_1} \right) + \frac{2}{3} (\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)^{3/2} + \kappa_1 \left( 2 \log \left( \frac{R_2+R_1}{R_1 R_2} \right) \right) + \kappa_2 (2 \log 2) \\
 &\quad - [\kappa_1 R_1^2 + \kappa_2 R_1 R_2 + \kappa_1] + \kappa_2 + \kappa_2 \log \frac{4}{r_2^2} =: S_4(\tilde{h}, \tilde{\varepsilon}_1, \tilde{\varepsilon}_2, \tilde{g}_1, \tilde{g}_2)
 \end{aligned}$$

となる. ここで,  $R_i := \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{\varepsilon}_1}{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_i}}$  とした.

### 1.2.2 $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$

このとき, 転回点は次のように近似できる.

$$\begin{aligned}
 x_1 &\simeq \tilde{\varepsilon}_1 - r_1^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1) \\
 x_2 &\simeq \tilde{h} + r_1^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1) + r_2^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_2) \\
 x_3 &\simeq \tilde{\varepsilon}_2 - r_2^2 (\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_2)
 \end{aligned}$$

まず,

$$\begin{aligned}
 \int_{x_1}^{\tilde{\varepsilon}_1} \sqrt{Q(x)} dx &= S_1(\tilde{h}, \tilde{\varepsilon}_1, \tilde{g}_1) \\
 \int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} \sqrt{-Q(x)} dx &= S_1(-\tilde{h}, -\tilde{\varepsilon}_2, \tilde{g}_2)
 \end{aligned}$$

である. さらに

$$\int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} \sqrt{-Q(x)} dx =: S_5(\tilde{h}, \tilde{\varepsilon}_1, \tilde{\varepsilon}_2, \tilde{g}_1, \tilde{g}_2)$$

と置くと,

$$\int_{x_2}^{\tilde{\varepsilon}_2} \sqrt{Q(x)} dx = S_5(-\tilde{h}, -\tilde{\varepsilon}_2, -\tilde{\varepsilon}_1, \tilde{g}_2, \tilde{g}_1)$$

となる。これより,

$$\begin{aligned}
\int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \sqrt{-Q(x)} &= \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \sqrt{\frac{x-x_1}{x-\tilde{\varepsilon}_1} \frac{x_2-x}{\tilde{\varepsilon}_2-x} (x_3-x)} \\
&\simeq \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \sqrt{x_2-x} \sqrt{1 + \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1}} \sqrt{1 - \frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{\tilde{\varepsilon}_2-x}} \\
&\simeq \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \left( \sqrt{x_2-x} \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1} - \frac{1}{2} \frac{r_2^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2)}{\tilde{\varepsilon}_2-x} \right) \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{x_2-\tilde{\varepsilon}_1} \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1} \right) \right) \\
&\quad + \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} dx \sqrt{x_2-\tilde{\varepsilon}_1} \sqrt{1 + \frac{r_1^2(\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)}{x-\tilde{\varepsilon}_1}} \\
&\simeq \frac{2}{3} (\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1)^{3/2} + \kappa_1 - 2|\kappa_2| \arctan \left( \sqrt{\frac{\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1}{\tilde{\varepsilon}_2-\tilde{h}}} \right) + 2\kappa_1 \log \left( \frac{4}{r_1} \right)
\end{aligned}$$

であり,

$$\begin{aligned}
\int_{x_2}^{\tilde{\varepsilon}_2} \sqrt{Q(x)} dx &= S_2(-\tilde{h}, -\tilde{\varepsilon}_2, -\tilde{\varepsilon}_1, \tilde{g}_2, \tilde{g}_1) \\
&= \frac{2}{3} (\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h})^{3/2} + |\kappa_2| - 2\kappa_1 \arctan \left( \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h}}{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_1}} \right) + |\kappa_2| \log \left( \frac{16}{r_2^2} \right)
\end{aligned}$$

と求まる。

### 1.2.3 $x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$

この場合, 対称性より (図 1.2)

$$\begin{aligned}
\int_{x_1}^{\tilde{\varepsilon}_1} \sqrt{Q(x)} dx &= S_4(-\tilde{h}, -\tilde{\varepsilon}_2, -\tilde{\varepsilon}_1, \tilde{g}_2, \tilde{g}_1) \\
\int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} \sqrt{-Q(x)} dx &= S_3(-\tilde{h}, -\tilde{\varepsilon}_1, \tilde{g}_1) \\
\int_{x_2}^{\tilde{\varepsilon}_2} \sqrt{Q(x)} dx &= S_2(-\tilde{h}, -\tilde{\varepsilon}_2, -\tilde{\varepsilon}_1, \tilde{g}_2, \tilde{g}_1) \\
\int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} \sqrt{-Q(x)} dx &= S_1(-\tilde{h}, -\tilde{\varepsilon}_2, \tilde{g}_2)
\end{aligned}$$

となるので,

$$\begin{aligned}
 \int_{x_1}^{\tilde{\varepsilon}_1} \sqrt{Q(x)} dx &= \frac{2}{3}(\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{h}) + 2|\kappa_2| \log \left( \frac{|R_2| + |R_1|}{|R_1 R_2|} \right) + |\kappa_1| + |\kappa_1| \log \frac{16}{r_1^2} \\
 \int_{\tilde{\varepsilon}_1}^{x_2} \sqrt{-Q(x)} dx &= |\kappa_1| \pi \\
 \int_{x_2}^{\tilde{\varepsilon}_2} \sqrt{Q(x)} dx &= -\frac{2}{3}(\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{h})^{3/2} + \frac{2}{3}(\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{h})^{3/2} + |\kappa_2| - |\kappa_2| \log \left( \frac{r_2^2}{16} \left( \frac{|R_2| + |R_1|}{|R_1 R_2|} \right)^2 \right) \\
 &\quad - 2\sqrt{2}|\kappa_1| + |\kappa_1| + |\kappa_1| \log \left( \frac{r_1^2}{16} \left( \frac{|R_1| + |R_2|}{|R_1 R_2|} \right)^2 \right) \\
 \int_{\tilde{\varepsilon}_2}^{x_3} \sqrt{-Q(x)} dx &= |\kappa_2| \pi
 \end{aligned}$$

と求まる.

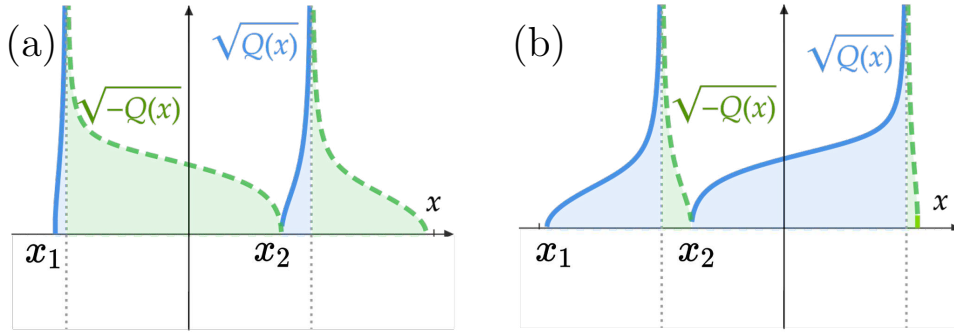


図 I.2 (a)  $x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \lesssim \tilde{\varepsilon}_2 \ll x_3$  の場合と, (b)  $x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3$  の場合の被積分関数  $\sqrt{Q(x)}$ ,  $-\sqrt{Q(x)}$  の概形.

#### 1.2.4 $N = 3$ の場合の生存確率

以上の議論と

$$\begin{aligned}
 |\chi_j| &\simeq \begin{cases} 1 - e^{-2\pi\kappa_j} & (\tilde{h} > \tilde{\varepsilon}_j) \\ 2\pi|\kappa_j| \left( 2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_j - \tilde{h}} \right)^{2|\kappa_j|} & (\tilde{h} < \tilde{\varepsilon}_j) \end{cases} \\
 \arg(\chi_j) &\simeq \begin{cases} \pi + 2 \arg(\Gamma(1 + i\kappa_j)) - 2\kappa_j \log \left( 2\sqrt{\tilde{h} - \tilde{\varepsilon}_j} \right) & (\tilde{h} > \tilde{\varepsilon}_j) \\ -\frac{1}{2}\pi + 2\pi|\kappa_j| & (\tilde{h} < \tilde{\varepsilon}_j) \end{cases}
 \end{aligned}$$

を用いると、生存確率は以下のように求まる。

$$\begin{aligned}
p_\infty &\simeq \begin{cases} |\chi_1 + \chi_2 \gamma_+^2(x_1, x_2) + i \gamma_+^2(x_1, x_3)|^2 & (x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \lesssim \tilde{\varepsilon}_2 \ll x_3) \\ |\chi_1 + i \gamma_+^2(x_1, x_2) + \chi_2 \gamma_+^2(x_1, x_3)|^2 & (x_1 \lesssim \tilde{\varepsilon}_1 \ll x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \\ |i + \chi_1 \gamma_+^2(x_1, x_2) + \chi_2 \gamma_+^2(x_1, x_3)|^2 & (x_1 \ll \tilde{\varepsilon}_1 \lesssim x_2 \ll \tilde{\varepsilon}_2 \lesssim x_3) \end{cases} \\
&= \begin{cases} \left| \begin{aligned} &-(1-p_1)e^{i\zeta_1} e^{i(2\arg(\Gamma(1+i\kappa_1)) - 2\kappa_1 \log(2\sqrt{\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1}))} \\ &-(1-p_2)p_1 e^{i\zeta_2} e^{i(2\arg(\Gamma(1+i\kappa_2)) - 2\kappa_2 \log(2\sqrt{\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_2}))} \\ &\times e^{2i(-\kappa_1 + 2\kappa_1 \log(\frac{r_1}{4R_1}(1+\frac{R_1}{R_2})) + 2\sqrt{2}\kappa_2 - \kappa_2 - 2\kappa_2 \log(\frac{r_2}{4R_2}(1+\frac{R_2}{R_1})))} \\ &+ ip_1 p_2 e^{-2i(\kappa_1 - 2\kappa_1 \log(\frac{r_1}{4}) - 2\sqrt{2}\kappa_2 + 2\kappa_2 + 2\kappa_2 \log(\frac{1}{R_2}(1+\frac{R_2}{R_1})))} \end{aligned} \right|^2 \\ \\ \left| \begin{aligned} &-(1-p_1)e^{i\zeta_1} e^{i(2\arg(\Gamma(1+i\kappa_1)) - 2\kappa_1 \log(2\sqrt{\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1}))} \\ &+ ip_1 e^{-2i(\kappa_1 + 2\kappa_1 \log(\frac{4}{r_1}) - 2|\kappa_2| \arctan(\sqrt{\frac{\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1}{\tilde{\varepsilon}_2-\tilde{h}}})} \\ &- 2i\pi|\kappa_2| e^{2|\kappa_2| \log(2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_2-\tilde{h}})} p_1 e^{-2(\tilde{\zeta}_2/2 + |\kappa_2| - 2\kappa_1 \arctan(\sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}_2-\tilde{h}}{\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1}}) + |\kappa_2| \log(\frac{16}{r_2^2}))} \\ &\times e^{-2i(\kappa_1 + 2\kappa_1 \log(\frac{4}{r_1}) - 2|\kappa_2| \arctan(\sqrt{\frac{\tilde{h}-\tilde{\varepsilon}_1}{\tilde{\varepsilon}_2-\tilde{h}}})} \end{aligned} \right|^2 \\ \\ \left| \begin{aligned} &i - 2i\pi|\kappa_1| e^{2|\kappa_1| \log(2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_1-\tilde{h}})} e^{-2(\tilde{\zeta}_1/2 - 2|\kappa_2| \log(\frac{|R_2|+|R_1|}{|R_1 R_2|}) - |\kappa_1| - |\kappa_1| \log \frac{16}{r_1^2})} \\ &- 2i\pi|\kappa_2| e^{-2i\pi|\kappa_1|} e^{2|\kappa_2| \log(2\sqrt{\tilde{\varepsilon}_2-\tilde{h}})} \\ &\times e^{-2(2|\kappa_1| + \tilde{\zeta}_2/2 + |\kappa_2| - |\kappa_2| \log(\frac{r_2^2}{16}) - 2\sqrt{2}|\kappa_1| + |\kappa_1| \log((\frac{|R_1|+|R_2|}{|R_1 R_2|})^2))} \end{aligned} \right|^2 \end{cases}
\end{aligned}$$



## 参考文献

- [1] M. Born and V. Fock, *Z. Physik* **51**, 165 (1928).
- [2] T. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **5**, 435 (1950).
- [3] A. Messiah, *Quantum mechanics*, Vol. II (North-Holland, Amsterdam, 1962).
- [4] L. D. Landau, *Z. Sowjetunion* **2**, 46 (1932).
- [5] C. Zener, *Proc. R. Soc. A* **137**, 696 (1932).
- [6] E. C. G. Stückelberg, *Helv. Phys. Acta* **5**, 369 (1932).
- [7] E. Majorana, *Nuovo Cimento* **9**, 43 (1932).
- [8] D. Kleppner, M. Littman, and M. Tsimmerman, in *Rydberg states of atoms and molecules* (Cambridge University Press, 1983) pp. 73–116.
- [9] A. D. Bandrauk, in *Frontiers of Chemical Dynamics* (Springer, 1995) pp. 131–150.
- [10] V. Ivakhnenko, S. N. Shevchenko, and F. Nori, *Physics Reports* **995**, 1 (2023).
- [11] D. Guéry-Odelin, A. Ruschhaupt, A. Kiely, E. Torrontegui, S. Martínez-Garaot, and J. G. Muga, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 045001 (2019).
- [12] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser, (2000), arXiv:quant-ph/0001106 .
- [13] T. Albash and D. A. Lidar, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015002 (2018).
- [14] U. Gaubatz, P. Rudecki, S. Schiemann, and K. Bergmann, *J. Chem. Phys.* **92**, 5363 (1990).
- [15] N. V. Vitanov, A. A. Rangelov, B. W. Shore, and K. Bergmann, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 015006 (2017).
- [16] K.-P. Marzlin and B. C. Sanders, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 160408 (2004).
- [17] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, and C. H. Oh, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 110407 (2005).
- [18] M. S. Sarandy, L.-A. Wu, and D. A. Lidar, *Quantum Inf. Process.* **3**, 331 (2004).
- [19] J. Du, L. Hu, Y. Wang, J. Wu, M. Zhao, and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 060403 (2008).
- [20] M. H. S. Amin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 220401 (2009).
- [21] J. Ortigoso, *Phys. Rev. A* **86**, 032121 (2012).
- [22] Z.-Y. Wang and M. B. Plenio, *Phys. Rev. A* **93**, 052107 (2016).
- [23] H.-S. Chou, *Phys. Rev. A* **106**, 032210 (2022).
- [24] A. Dykhne, *Sov. Phys. JETP* **14**, 1 (1962).
- [25] J. P. Davis and P. Pechukas, *J. Chem. Phys.* **64**, 3129 (1976).
- [26] K.-A. Suominen, B. Garraway, and S. Stenholm, *Opt. Commun.s* **82**, 260 (1991).

- [27] N. Vitanov and K.-A. Suominen, Phys. Rev. A **59**, 4580 (1999).
- [28] M. Wilkinson and M. A. Morgan, Phys. Rev. A **61**, 062104 (2000).
- [29] Y. N. Demkov and V. Osherov, Sov. Phys. JETP **26**, 1 (1968).
- [30] S. Brundobler and V. Elser, J. Phys. A Math. Gen. **26**, 1211 (1993).
- [31] V. N. Ostrovsky and H. Nakamura, J. Phys. A Math. Gen. **30**, 6939 (1997).
- [32] Y. N. Demkov and V. N. Ostrovsky, Phys. Rev. A **61**, 032705 (2000).
- [33] Y. N. Demkov and V. Ostrovsky, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **34**, 2419 (2001).
- [34] N. A. Sinitsyn, Phys. Rev. B **66**, 205303 (2002).
- [35] V. L. Pokrovsky and N. A. Sinitsyn, Phys. Rev. B **65**, 153105 (2002).
- [36] V. Y. Chernyak, N. A. Sinitsyn, and C. Sun, J. Phys. A Math. Theo. **51**, 245201 (2018).
- [37] N. A. Sinitsyn, E. A. Yuzbashyan, V. Y. Chernyak, A. Patra, and C. Sun, Phys. Rev. Lett. **120**, 190402 (2018).
- [38] E. A. Yuzbashyan, Annals of Physics **392**, 323 (2018).
- [39] V. Y. Chernyak and N. A. Sinitsyn, J. Phys. A Math. Theo. **54**, 115204 (2021).
- [40] T. Oka and S. Kitamura, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10**, 387 (2019).
- [41] S. N. Shevchenko, *Mesoscopic physics meets quantum engineering* (World Scientific, 2019).
- [42] V. Bikhovskii, E. Nikitin, and M. Y. Ovchinnikova, Soviet Phys. JETP **20**, 500 (1965).
- [43] J. B. Delos and W. R. Thorson, Phys. Rev. Lett. **28**, 647 (1972).
- [44] J. B. Delos and W. R. Thorson, Phys. Rev. A **6**, 728 (1972).
- [45] K.-A. Suominen, Opt. Commun.s **93**, 126 (1992).
- [46] C. Zhu, H. Nakamura, N. Re, and V. Aquilanti, J. Chem. Phys. **97**, 1892 (1992).
- [47] C. Zhu and H. Nakamura, J. Chem. Phys. **97**, 8497 (1992).
- [48] C. Zhu and H. Nakamura, J. Chem. Phys. **98**, 6208 (1993).
- [49] C. Zhu and H. Nakamura, J. Chem. Phys. **101**, 4855 (1994).
- [50] C.-F. Kam and Y. Chen, New J. Phys. **22**, 023021 (2020).
- [51] J. Lehto and K.-A. Suominen, Phys. Rev. A **86**, 033415 (2012).
- [52] J. Lehto, Phys. Rev. A **88**, 043404 (2013).
- [53] N. Rosen and C. Zener, Phys. Rev. **40**, 502 (1932).
- [54] Y. N. Demkov and M. Kunike, Vestn. Leningr. Univ. Fiz. Khim **16**, 39 (1969).
- [55] K.-A. Suominen and B. Garraway, Phys. Rev. A **45**, 374 (1992).
- [56] L. Allen and J. H. Eberly, *Optical resonance and two-level atoms*, Vol. 28 (Courier Corporation, 1987).
- [57] F. Hioe and C. Carroll, Phys. Rev. A **32**, 1541 (1985).
- [58] A. Bambini and P. Berman, Phys. Rev. A **23**, 2496 (1981).
- [59] A. Ishkhanyan, Opt. Commun.s **176**, 155 (2000).
- [60] A. Ishkhanyan, J. Phys. A Math. Gen. **33**, 5539 (2000).
- [61] E. Barnes and S. D. Sarma, Phys. Rev. Lett. **109**, 060401 (2012).
- [62] E. Barnes, Phys. Rev. A **88**, 013818 (2013).

- 
- [63] A. Messina and H. Nakazato, *J. Phys. A Math. Theo.* **47**, 445302 (2014).
- [64] T. Aoki, T. Kawai, and Y. Takei, *J. Phys. A Math. Gen.* **35**, 2401 (2002).
- [65] N. Honda, T. Kawai, and Y. Takei, *Virtual turning points* (Springer, 2015).
- [66] N. Shimada and A. Shudo, *Phys. Rev. A* **102**, 022213 (2020).
- [67] D. M. Tong, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 120401 (2010).
- [68] M. Zhao and J. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 138901 (2011).
- [69] D. Comparat, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 138902 (2011).
- [70] D. M. Tong, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 138903 (2011).
- [71] D. Li and M.-H. Yung, *New J. Phys.* **16**, 053023 (2014).
- [72] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, and C. H. Oh, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 150402 (2007).
- [73] Z. Wei and M. Ying, *Phys. Rev. A* **76**, 024304 (2007).
- [74] D. Comparat, *Phys. Rev. A* **80**, 012106 (2009).
- [75] D. A. Lidar, A. T. Rezakhani, and A. Hama, *J. Math. Phys.* **50**, 102106 (2009).
- [76] S. Boixo and R. D. Somma, *Phys. Rev. A* **81**, 032308 (2010).
- [77] G. Rigolin and G. Ortiz, *Phys. Rev. A* **85**, 062111 (2012).
- [78] C. Guo, Q.-H. Duan, W. Wu, and P.-X. Chen, *Phys. Rev. A* **88**, 012114 (2013).
- [79] T. Suzuki, H. Nakazato, R. Grimaudo, and A. Messina, *Sci. Rep.* **8**, 1 (2018).
- [80] T. Suzuki and H. Nakazato, *Phys. Rev. A* **105**, 022211 (2022).
- [81] D. A. Harmin and P. N. Price, *Phys. Rev. A* **49**, 1933 (1994).
- [82] D. A. Harmin, *Phys. Rev. A* **56**, 232 (1997).
- [83] Z. Sun, J. Ma, X. Wang, and F. Nori, *Phys. Rev. A* **86**, 012107 (2012).
- [84] R. K. Malla and M. Raikh, *Phys. Rev. B* **96**, 115437 (2017).
- [85] N. A. Sinitsyn and N. Prokof'ev, *Phys. Rev. B* **67**, 134403 (2003).
- [86] D. Garanin, R. Neb, and R. Schilling, *Phys. Rev. B* **78**, 094405 (2008).
- [87] A. T. S. Wan, M. H. S. Amin, and S. X. Wang, *Int. J. Quantum Inf.* **07**, 725 (2009).
- [88] M. Wubs, K. Saito, S. Kohler, P. Hänggi, and Y. Kayanuma, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 200404 (2006).
- [89] K. Saito, M. Wubs, S. Kohler, Y. Kayanuma, and P. Hänggi, *Phys. Rev. B* **75**, 214308 (2007).
- [90] S. Ashhab, *Phys. Rev. A* **90**, 062120 (2014).
- [91] V. A. Yurovsky and A. Ben-Reuven, *Phys. Rev. A* **63**, 043404 (2001).
- [92] T. Usuki, *Phys. Rev. B* **56**, 13360 (1997).
- [93] R. K. Malla, V. Y. Chernyak, and N. A. Sinitsyn, (2021), arXiv:2101.04169 .
- [94] X. Mi, S. Kohler, and J. R. Petta, *Phys. Rev. B* **98**, 161404 (2018).
- [95] F. Ginzler, A. R. Mills, J. R. Petta, and G. Burkard, *Phys. Rev. B* **102**, 195418 (2020).
- [96] J. Johansson, P. Nation, and F. Nori, *Comput. Phys. Commun.* **183**, 1760 (2012).
- [97] J. Johansson, P. Nation, and F. Nori, *Comput. Phys. Commun.* **184**, 1234 (2013).
- [98] Y. Kayanuma, *Phys. Rev. A* **55**, R2495 (1997).
- [99] V. N. Ostrovsky, M. V. Volkov, J. P. Hansen, and S. Selstø, *Phys. Rev. B* **75**, 014441 (2007).

- 
- [100] S. N. Shevchenko, S. Ashhab, and F. Nori, *Phys. Rep.* **492**, 1 (2010).
- [101] A. Niranjana, W. Li, and R. Nath, *Phys. Rev. A* **101** (2020).
- [102] M. Werther, F. Grossmann, Z. Huang, and Y. Zhao, *J. Chem. Phys.* **150**, 234109 (2019).
- [103] J. Lidal and J. Danon, *Phys. Rev. A* **102**, 043717 (2020).
- [104] L. Wang, F. Zheng, J. Wang, F. Großmann, and Y. Zhao, *J. Phys. Chem. B* (2021).
- [105] F. Zheng, Y. Shen, K. Sun, and Y. Zhao, (2021), arXiv:2101.02949 .
- [106] P. Neilinger, S. N. Shevchenko, J. Bogár, M. Reháč, G. Oelsner, D. S. Karpov, U. Hübner, O. Astafiev, M. Grajcar, and E. Il'ichev, *Phys. Rev. B* **94** (2016).
- [107] M. Bonifacio, D. Domínguez, and M. J. Sánchez, *Phys. Rev. B* **101** (2020).
- [108] L. Du and Y. Yu, *Phys. Rev. B* **82**, 144524 (2010).
- [109] D. M. Berns, M. S. Rudner, S. O. Valenzuela, K. K. Berggren, W. D. Oliver, L. S. Levitov, and T. P. Orlando, *Nature* **455**, 51 (2008).
- [110] A. M. Satanin, M. V. Denisenko, S. Ashhab, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **85**, 184524 (2012).
- [111] S. N. Shevchenko, A. I. Ryzhov, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **98**, 195434 (2018).
- [112] D. M. Basko, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 016805 (2017).
- [113] C. Sun, V. Y. Chernyak, A. Piryatinski, and N. A. Sinitsyn, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 123605 (2019).
- [114] Z. Zhang, L. Chen, K.-X. Yao, and C. Chin, *Nature* **592**, 708 (2021).
- [115] R. K. Malla, V. Y. Chernyak, C. Sun, and N. A. Sinitsyn, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 033201 (2022).
- [116] T. Kadowaki and H. Nishimori, *Phys. Rev. E* **58**, 5355 (1998).
- [117] M. V. Berry, *J. Phys. A Math. Theo.* **42**, 365303 (2009).
- [118] H. Munoz-Bauza, H. Chen, and D. Lidar, *Npj Quantum Inf.* **5**, 1 (2019).
- [119] J. Wurtz and P. J. Love, *Quantum* **6**, 635 (2022).
- [120] P. Chandarana, N. N. Hegade, K. Paul, F. Albarrán-Arriagada, E. Solano, A. Del Campo, and X. Chen, *Phys. Rev. Res.* **4**, 013141 (2022).
- [121] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, (2014), arXiv:1411.4028 .
- [122] T. Albash, S. Boixo, D. A. Lidar, and P. Zanardi, *New J. Phys.* **14**, 123016 (2012).
- [123] W.-M. Zhang, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **227**, 1849 (2019).
- [124] F. W. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, and C. W. Clark, *NIST handbook of mathematical functions hardback and CD-ROM* (Cambridge university press, 2010).
- [125] A. Voros, in *Annales de l'IHP Physique théorique*, Vol. 39 (1983) pp. 211–338.

## 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 <b>105</b> 022211, 2022, Takayuki Suzuki, Hiromichi Nakazato ○ “Analytic estimation of transition between instantaneous eigenstates of quantum two-level system”, Scientific Reports <b>8</b> 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