

早稲田大学大学院 先進理工学研究科

博士論文審査報告書

論文題目

時間依存ハミルトニアンの下での離散量子系のダイナミクス

Dynamics of discrete quantum systems under time-dependent
Hamiltonians

申請者

鈴木 貴大

Takayuki SUZUKI

物理学及応用物理学専攻 量子力学基礎論研究

2023年2月

力学系に含まれるパラメータを系の典型的時間スケールに比べて十分ゆっくりと変化させた際の運動は断熱過程と呼ばれる。断熱過程で古典周期系のエネルギーや振動数は時間とともに変化するが、その比に等しい作用変数は断熱不変量となり、その値がプランク定数の整数倍に限定されるとした Sommerfeld–Wilson の量子条件を通して量子力学の導入につながった。量子力学構築の過程で重要な役割を果たした断熱過程は、量子論でも重要な位置を占める。時間に陽に依存するハミルトニアン系の量子ダイナミクス、特にハミルトニアンが極めてゆっくりと変化する場合の物理過程（量子断熱過程）において不変となるのは物理量ではなく量子状態である。この場合、ハミルトニアンの固有状態とエネルギー固有値はいずれも時間とともに変化するため、ある時刻にその時刻のハミルトニアンの n 番目の固有状態（瞬間固有状態）に状態を準備しても、後の時刻にはその時刻のハミルトニアンの n 番目の固有状態に留まり続けることはなく、一般には n 番目とは異なる固有状態への遷移（非断熱遷移）が起こる。しかし、ハミルトニアンの時間変化を無限にゆっくりとする極限（断熱極限）では、異なる準位間の遷移は消滅し、初期時刻のハミルトニアンの n 番目の固有状態に準備された状態は、任意の時刻でその時刻のハミルトニアンの n 番目の固有状態に留まり続ける。これが量子断熱定理であり、この特徴を利用すれば、基底状態が既知で容易に準備可能な初期ハミルトニアンから出発し、パラメータを調整して問題を解きたい系のハミルトニアンへと十分ゆっくり時間変化させることで後者の基底状態に到達すること、すなわち問題とする系の基底状態を求めることが可能になる。このような量子断熱過程を利用した量子状態操作が量子アニーリングの手法であり量子計算での有力な手法の一つであるが、現実的には有限の速さで変化させても近似的に断熱過程と見なせるかどうかの条件が実際的重要性を持つ。実は、量子断熱近似が成立する条件としては、瞬間固有状態の時間変化と準位間エネルギー差の比で表される標準的な関係式が知られていたが、今世紀になってからその反例が提出されるなど、適切な条件をめぐっては混乱と論争が続いていた。

このような背景の中で申請者は、量子断熱過程とも関係の深い、時間に陽に依存するハミルトニアン系の量子ダイナミクスを主に二つの視点から調べている。本論文は5章と Appendix から構成されている。以下、各章の概要と評価を述べる。

第1章は序論であり、量子断熱過程に関わる事項が歴史的に概観されている。

第2章ではまず、量子断熱定理と量子断熱近似の成立条件が標準的な方法で導出されている。時間間隔を T として時間変数をスケール変換し、Schrödinger 方程式から時間発展演算子を瞬間固有状態への射影演算子を使って書き下すと、この時間発展演算子と状態間遷移を起こさない演算子との差は十分大きな T においては $1/T$ で抑制される、すなわち、準位間遷移が $1/T$ で抑制されることが導かれる。この過程で、断熱過程と見なされる条件（量子断熱近似の成立条件）は瞬間固有状態の時間変化（の行列要素）が準位間のエネルギー差に比べて無視できること

であると導かれる。続いて、長らく正しいと信じられてきたこの条件式が、実は断熱近似成立のためには不十分であることを具体的な反例を挙げて紹介し、反例が生まれてしまう原因がどこにあったかの分析も提示されている。

第2章後半以降が申請者の研究成果に基づく内容であり、離散準位量子系のもっとも単純な場合である量子2準位系に話を限定し、時間に陽に依存する一般的ハミルトニアンの下での準位間遷移振幅がパラメータ表示を使って陽に書き下されている。このパラメータ表示は時間発展演算子の媒介変数表示に相当し、ハミルトニアンに含まれるパラメータとは間接的ではあるものの陽に結びつけられていることが特徴である。その結果、遷移振幅も陽なパラメータ表示が可能となり、瞬間固有状態間の遷移が禁止される、あるいは抑制される条件が媒介パラメータを通してハミルトニアンのパラメータにどのような条件を課すことになるかが明らかにされる。こうして断熱過程と見なすことができるのは量子2準位系の瞬間固有状態を特徴づける二つのパラメータの時間変化がいずれもハミルトニアンの特徴的時間スケールに比べて無視できる場合であることが示され、断熱近似成立の必要十分条件が詳細に明らかにされている。このような明確な評価が可能になったのは、従来の形式的議論とは異なり、遷移振幅そのものが陽に書き下されていたからであり、特筆すべき独自の成果である。またこの結果は、従来の条件式はハミルトニアンに含まれるパラメータの特定の組み合わせに条件を課しているだけで個々の評価となっていなかった点に問題があったことを明らかにしている。

続く第3章は断熱瞬間近似を一般化した一般化断熱瞬間近似の提案とその評価に充てられている。ここで対象とする離散量子系は、Landau-Zener(-Stückelberg-Majorana)模型のように、ある時刻で交差するような時間依存性（典型的には1次関数、あるいは三角関数）を持った対角成分と、準位間相互作用を表す定数の非対角成分を持ったハミルトニアンに支配される系である。この場合、非対角成分の存在により時間依存ハミルトニアンのエネルギー固有値には準位反発が起こり、時間の関数としてエネルギー固有値を描くとそれらの値が接近した点は擬交差点となる。このような系の時間発展演算子を、擬交差点以外の時間領域では断熱過程、擬交差点では瞬間的に Landau-Zener 遷移が起こるとして近似する経験的手法（断熱瞬間近似）が知られていた。これは、2準位 Landau-Zener 模型の解析解を数値的に評価すると、準位間遷移が擬交差点付近でのみ起こることを示していたからであり、素朴な直感的イメージにも合うものであるが、いくつかの原理的、技術的問題が残されていた。一つには、そもそも経験的に導入された手法であって系の確率保存を保証するユニタリー性が自明でなかったことであり、一方応用上では特に準位数が増えた場合には取り扱いが実際上困難となることである。申請者は、このような系に対しいわゆる完全 WKB 解析の手法を使って散乱行列を構築し、そのユニタリー性を明白に示すことに成功している。散乱行列は、WKB 解の接続公式を使って表された擬交差点付近での接続行列を順次掛け合わせると

もに、WKB漸近解の規格化因子を取り入れて構成されているが、単純な変換を施すとすべてユニタリ行列の積となることが示され、明白な形でユニタリー性が保証されている。断熱瞬間近似同様、結果は素朴で直感的な描像に沿ったものであるが、各擬交差点での遷移には離れた擬交差点の影響が位相として残っており、量子干渉性の表れとして大変興味深い。また断熱瞬間近似で仮定されていた断熱過程は導入していないため、技術的問題の解消にもつながっている。この結果は従来の断熱瞬間近似の精緻化と一般化に相当しており、その有効性は数値的にも確認されている。応用上での幅広い活用が期待される成果である。

第4章では、対角成分に時間の2次関数依存性を持つハミルトニアンで与えられる多準位離散量子系のダイナミクスが、当該離散準位の生存確率を近似的に求めることを通して議論されている。ハミルトニアンに含まれるパラメータを、擬交差点での非断熱遷移が起こるようなパラメータ領域から擬交差点を一切持たず断熱過程のみとなるようなパラメータ領域に変化させ、それぞれの状況下で生存確率の振る舞いを調べている。その結果、非断熱遷移確率を特徴づけていた量（擬交差点によって囲まれる面積に相当）は、断熱過程のみのパラメータ領域では遷移振幅の位相として寄与することが明らかにされている。散乱行列に見られる解析性が、多準位離散量子系の近似的遷移振幅にも出現していることは大変興味深い。

第5章はまとめと今後の展望に充てられている。

以上述べてきたように、本論文ではまず、標準的とされてきた量子断熱近似の成立条件に代わる適切な条件を独自の視点から導出し、従来の条件のどこが不十分であったかを明らかにしている。その一方で、時間に陽に依存する多準位離散量子系の時間発展演算子（散乱行列）を完全WKB解析の手法を用いて近似的に導出し、従来の断熱瞬間近似の精緻化、一般化を図るとともに、その妥当性を数値的にも確認している。これらの成果は量子力学の基礎に関わる理解を深めただけでなく、量子情報分野への重要な貢献ともなっており、本論文は博士（理学）の学位にふさわしいものと認める。

2023年2月

審査員

主査	早稲田大学教授	理学博士 早稲田大学	中里弘道
	早稲田大学教授	博士（理学） 広島大学	安倍博之
	早稲田大学教授	博士（理学） 早稲田大学	湯浅一哉