断熱ショートカットとダイナミクスの構造

鳩村 拓矢 日本電信電話株式会社 物性科学基礎研究所 takuya.hatomura.ub@hco.ntt.co.jp

物理系を「理想的」に操作したいと思う ことは、さまざまな場面である.操作とい うと工学的・技術的な問題を想像するが、 そもそも系を操作してその反応を調べるこ と、つまり測定、は科学の基本手段の一つ である.熱力学のように種々の操作を用い て基本原理を明らかにするという体系もあ る.近年は、技術の向上などにより、制御 という視点の研究も多く行われている.操 作に対してどのような反応をするかではな く、望んだ反応を得るためにはどのように 操作したらよいかという問題である.

操作・制御の問題はダイナミクスの問題 と捉えられる.外部パラメータを変化させ ることによって系の状態が時間変化する. 状態の変化を調べるには動的な系(非自励 系)の運動方程式を解く必要があるが,そ の遂行は決して容易ではない.静的な系で はエネルギー保存や定常状態などを足がか りとできるが,動的な系についてわれわれ が共有しているイメージは多くない.

経験的に理解できるが、系を思い通りに 制御する手段の一つは、ゆっくりと操作を 行うことである.そのような準静的操作に よって得られるのが断熱状態である.量子 力学における断熱操作は断熱定理を用いて 基礎づけられ、断熱状態の表現に含まれる 幾何学的位相が非自明な効果を生み出す.

ここで考えたいことは、ゆっくりと動かさ ずに短い時間で望みの状態遷移を得るには どうしたらよいかという問題である。それ には本来想定しているハミルトニアン(時 間発展生成子)とは異なるハミルトニアン を用いて時間発展を行うとよい。これは、 非断熱遷移を防ぐプロトコルを用いること 高橋和孝 東京工業大学 科学技術創成研究院 ktaka@qa.iir.titech.ac.jp

を意味している. このような考え方はさま ざまなアイデアをもたらし、それらは総称 して断熱ショートカット(shortcuts to adiabaticity)とよばれている. 基本的なアイ デアは断熱理論や動的な系の解析手法を転 用したものにすぎないが、制御の方法とし て用いるという視点はそれまでになかった 発展をもたらした. 実験的検証も多く行わ れている.

実装方法は大別すると二つのものがある。 制御項を付加する方法は概念的にわかりや すいが、制御項の公式は実用的ではないし、 得られる制御項が複雑になることが多い. 対称性を活用する・近似的な制御項を用い るなどする.二つめの方法では動的不変量 とよばれる量を用いる.パラメータの調節 のみで制御を行うため実装しやすいが、動 的不変量を得ることは一般に容易ではない. いずれの方法でも、問題に応じてさまざま な実装方法が議論されている.

断熱ショートカットの適用範囲は広く,量 子系だけでなく古典系や確率過程の系など, さまざまな問題にも応用できる.そのこと をよく考えてみると,目的が制御に限られ ないことがわかる.任意の系において時間 発展を特徴づける「ハミルトニアン」は二 つに分割される.一つは瞬間定常状態を特 徴づけ,もう一方はその状態を変化させる 生成子の役割を果たす.分割によって得ら れる生成子は幾何学的な意味をもち,量子 速度限界の概念に自然とつながる.

断熱ショートカットは、この10年の間に 原理的な理解が進み、さまざまな応用が行 われてきた.系統的かつ汎用的であり基礎 が応用に直結するこの方法が、今後も思わ ぬ方向に発展することを期待したい. -Keywords-

断熱状態:

孤立量子系を外部から無限 小の速度で操作することに よって得られる状態.断熱 定理に基づいて定式化され る.状態はハミルトニアン の瞬間固有状態を辿る.断 熱という語は熱力学では外 界と熱のやり取りを遮断し た過程を指すが、ここでは 「準静的」という意味で用い る.

幾何学的位相:

量子状態の時間変化に伴っ て得られる位相項の一部. パラメータ空間の軌道に沿っての積分で表され,パラ メータを動かす速度によら ない.断熱周期操作において Berry 位相をもたらし,幾何 学的効果やトポロジカルな 現象の起源となる.

断熱ショートカット:

断熱状態を制御する手法の 総称.実装にはいくつかの 方法がある.制御項(H_{cd}) を導入するなどする.状態 の時間発展は参照ハミルト ニアンの断熱状態(Ψ_{ad})で 表される.下記概念図参照.

Hcd Ψ_{ad}

動的不変量:

系のダイナミクスを特徴 づける時間依存演算子. Lewis-Riesenfeld 不変量と もよばれる.動的不変量の 固有値は時間によらない. また、Schrödinger 方程式 の解は動的不変量の「断熱 状態」で与えられる.

1. はじめに

水の入ったグラスをトレイにのせて運ぶとき, こぼさな いようにゆっくりと歩く. 慣れると制御の仕方を覚えてく る. ゆっくりと運ぶときの体勢のままで素早く動くとこぼ れてしまうが, トレイを動きに応じて傾けながら運ぶとう まくいく. 走り出すとき自然と前傾姿勢になるのも同じ理 屈である.

これが本稿の主題についての適切なたとえかどうかは議 論の余地があるが、量子状態の時間発展でも類似の問題を考 えることができる.それが断熱ショートカット(shortcuts to adiabaticity)の理論である.

断熱遷移の理論は量子力学の整備がなされた直後から近 年の発展まで独特の役割を果たしている.断熱定理が1928 年にBornとFockによって定式化され¹⁾,加藤によってよ リー般的に証明されている(1950年).²⁾ ハミルトニアンが ゆっくりと変化し、エネルギーギャップが小さくなければ、 状態は系の瞬間固有状態を辿るというものである.ハミル トニアンの固有値を時間の関数としてプロットすることに よってどのような時間発展をするかがわかる(図1).準 位統計の問題では準位の構造をパラメータの関数として調 べるが、それを実時間発展による構造変化と捉えるわけで ある.

瞬間固有状態を辿るという性質は式を追えば簡単に得られる結論であり意外性はあまりないが、断熱状態を正確に 定義すると特徴的な位相項が生じることがわかる.これは 幾何学的位相とよばれるものであり、周期駆動系ではBerry 位相をもたらす.³⁾ 一般化された量は Aharonov-Anandan 位相とよばれる.⁴⁾ 幾何学的位相は幾何学的効果やトポロジ カルな現象の起源となり、さまざまな応用がなされている.

断熱遷移を利用した代表的な応用例は, 誘導 Raman 断熱 遷移 (stimulated Raman adiabatic passage, 略して STI-RAP)である.⁵⁾ 二種類の光パルスを用いることで励起状態 を経ることなく 2 つの固有状態間の効率的・安定的な遷移 を実現させる.

そして近年では、断熱理論は断熱量子計算,量子アニーリングの基礎として注目されている.^{6,7,8,9,10)} ハミルトニアンの基底状態を辿ることによって解きたい最適化問題の答えを得る. その性能は断熱定理を用いて評価される.

断熱遷移はあくまでも理想的な極限であり,実際の時間発展では非断熱遷移が避けられない.特に,エネルギーギャップが小さくなるときに非断熱遷移の確率が大きくなる. ハミルトニアンが時間に線形に依存する系では遷移確率が解析的に得られており, Landau-Zener 公式とよばれている.^{11, 12}

非断熱遷移を抑えるという試みは、現実的に重要な問題 であり、断熱ショートカットの理論の確立以前にも議論が なかったわけではない.ただ、それは個々の問題に応じた議 論であり、体系的なものではなかった.初期の系統的な研究 は、Demirplak-Rice (2003)やBerry (2009)が挙げられ



図1 エネルギー準位の例.パラメータを動かすと準位が互いに反発した りしながら変化する.断熱定理によると、断熱状態は時間発展に応じて一 つの準位を辿るが、準位が接近したり速く動かすことで異なる準位への非 断熱遷移が生じる.

る.^{13,14)} 断熱状態を保つように制御項を導入する方法であ る. "shortcuts to adiabaticity" という語が初めて用いられ たのは、Muga を中心としたグループ(スペイン・中国・ド イツ・フランス)の研究 Chen et al. (2010)においてであ る.¹⁵⁾ かれらは、Lewis-Riesenfeld (1969)の方法¹⁶⁾に注目 し、調和振動子ポテンシャルに閉じ込められた原子の制御 理論を提案した. プロトコルを調節することで、有限速度の 操作を行っているにも関わらず断熱時間発展でのものと同 じ終状態を得る.まさにショートカットである.その時点で は前述した研究との関係はよくわかっていなかったようで あるが、程なくして統一的な理解が得られた.これまで実験 も含めて多くの研究が行われてきたが、それには Muga ら によって精力的に進められた一連の研究の功績が大きい.

最初の実験的検証は,調和振動子型のポテンシャルに閉じ 込められた冷却原子気体において行われた.^{17,18)} ポテンシャ ルを広げて系を膨張させるために断熱ショートカットの方 法が用いられた.二つの準位をもつ系についての初期の実 験は,光格子やダイアモンド NV 中心の系などがある.^{19,20)} 理論・実験を含むさまざまな研究成果はほぼ網羅的に総合 報告にまとめられている.^{21,22)}

断熱ショートカットはいくつかの方法の総称として用いられており、問題に応じて適当な方法を選ぶことができる. Demirplak-Rice (2003)¹³⁾, Berry (2009)¹⁴⁾に基づくものは counterdiabatic driving とよばれている.¹ この方法によって得られる制御項の公式は第3節で議論するが、制御項の具体的な演算子形を得ることが難しかったり、得られた制御項が複雑で実装が困難であることが多い.また、公式から制御項の具体形を得るには、対応する量子状態を必要とする.これは、知らない量子状態を断熱時間発展で得るという量子アニーリングのような手法にとっては大きな問題となる.現実的な応用に向けた方法について、第4節で議

¹Demirplak-Rice は assisted adiabatic passage, Berry は transitionless quantum driving とそれぞれ名づけている. 他にもいくつかの 名があって困惑するが, どれも本質的には同じである.

論する.

一方, Chen et al. (2010)¹⁵⁾ では動的不変量, あるいは Lewis-Riesenfeld 不変量とよばれる量を用いた議論を行っ ている.¹⁶⁾ この手法は, 制御項を導入するものとは全く異な るように見える. ハミルトニアンに制御項を導入すること は行わない. 量子状態が終時刻で望みのものとなるように, ハミルトニアンに現れる時間依存パラメータを定める手法 である. この場合, プロトコルの調節だけで系の制御ができ るので実装上の問題はあまり生じない. 動的不変量の演算 子形を求めることが主な問題となる. 第5節で議論する.

二つの方法がどのような関係にあるかを考察すると,時 間発展のからくりが見えてくる.ダイナミクスの構造につ いてこれまでより踏み込んだ理解ができるようになる.こ のことが第6節の主題となる.

2. 断熱時間発展

ハミルトニアン $H(\lambda(t))$ で記述される量子系を考える. $\lambda(t)$ は時間に依存するパラメータで、例えば電磁場のよう に外部から操作できるものを想定している.断熱時間発展 および非断熱遷移について考えるために、Schrödinger 方程 式に従う状態 $|\Psi(t)\rangle$ をハミルトニアン $H(\lambda(t))$ の瞬間固有 状態 $\{|n(\lambda(t))\rangle\}$ で展開し、 $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n(\lambda(t))\rangle$ と する.このとき、時間に依存する係数 $c_n(t)$ が固有状態間の 遷移、非断熱遷移を記述する.この係数の変化は、パラメー タ $\lambda(t)$ が素早く変化することによって「慣性力」のような ものが働くために起こる.

ハミルトニアン $H(\lambda(t))$ のパラメータ $\lambda(t)$ が時間に対し て十分にゆっくりと変化するときには非断熱遷移はほとん ど起こらない. このとき、状態 $|\Psi(t)\rangle$ は断熱状態

$$\begin{split} |\Psi_{\rm ad}(t)\rangle &= \sum_{n} c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(\boldsymbol{\lambda}(t'))} \\ &\times e^{-\int_C d\boldsymbol{\lambda} \cdot \langle n(\boldsymbol{\lambda}) | \partial_{\boldsymbol{\lambda}} n(\boldsymbol{\lambda}) \rangle} |n(\boldsymbol{\lambda}(t))\rangle \quad (1) \end{split}$$

で近似される.一つ目の動的位相因子は時間非依存系でも 対応する項があるが、二つ目は時間依存系に特有の幾何学 的位相因子である.パラメータの経路 C が閉じているとき には Berry 位相を与える.

実際にこのような時間発展を実現するにはどの程度ゆっ くりとパラメータ $\lambda(t)$ を変化させればよいのだろうか?断 熱定理^{1,2)}によると,おおよそ断熱条件

$$\hbar \left| \frac{\langle m(\boldsymbol{\lambda}(t)) | \dot{n}(\boldsymbol{\lambda}(t)) \rangle}{E_n(\boldsymbol{\lambda}(t)) - E_m(\boldsymbol{\lambda}(t))} \right| \ll 1$$
(2)

を満たせば近似的に断熱時間発展が実現する. ドット記号 は時間による微分を表し, $|\dot{n}(\lambda(t))\rangle = \dot{\lambda}(t) \cdot |\partial_{\lambda}n(\lambda(t))\rangle$ であ る.等式 $\langle m(\lambda)|\partial_{\lambda}n(\lambda)\rangle = \langle m(\lambda)|(\partial_{\lambda}H(\lambda))|n(\lambda)\rangle/(E_n(\lambda))$ $-E_m(\lambda))$ を用いた表現もよく用いられる.前述したように, ハミルトニアンの変化率がエネルギーギャップと比較して 小さければよい. (2) 式の断熱条件はよく用いられる表現であるが、数学的 に厳密に正当化できるようなものではない.条件を満たし ていても非断熱遷移が無視できないことがある.性能保証 のためには厳密な断熱条件を求める必要があり、近年でも さまざまな表現が得られている.¹⁰⁾

制御項の導入

系に対して有限速度の操作を加えると非断熱遷移が起こ る.つまり断熱時間発展に基づく状態操作を実現させるた めには、ゆっくりと操作をおこなわなければならない.とこ ろが、系に働く「慣性力」を打ち消すような力を加えるこ とができれば、たとえ素早く操作をしたとしても、系は元の ハミルトニアンの断熱状態を実現するだろう.

実際に、ハミルトニアン $H(\lambda(t))$ に対して、制御項 (counterdiabatic term)

$$H_{\rm cd}(t) = i\hbar \sum_{\substack{m,n\\(m\neq n)}} |m(\boldsymbol{\lambda}(t))\rangle \langle m(\boldsymbol{\lambda}(t))|\dot{n}(\boldsymbol{\lambda}(t))\rangle \langle n(\boldsymbol{\lambda}(t))|$$
(3)

を加えることによって、非断熱遷移を打ち消すことができる.^{13,14)} つまり、(1) 式の断熱状態 $|\Psi_{ad}(t)\rangle$ は全ハミルトニアン $H(\lambda(t)) + H_{cd}(t)$ の下で Schrödinger 方程式の解となる. この制御項(3) は状態の初期分布 $\{|c_n(0)|^2\}$ に依存しない.(3) 式の表現を(2) 式と比べればわかるように、非断熱効果が大きい時間では強い制御項が必要となる.

いくつかの具体例を通して制御項の性質や物理的な意味 について議論する.まずは2準位系

$$H(\boldsymbol{\lambda}(t)) = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{B}(t)\cdot\boldsymbol{\sigma}$$
(4)

を考える.² ここで時間依存するパラメータ $\lambda(t) = B(t)$ は磁場に相当するもので, $\sigma = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ は Pauli 行列である. 制御項は固有状態を計算することで簡単に構成することができ,

$$H_{\rm cd}(t) = \frac{\hbar}{2} \frac{\boldsymbol{B}(t) \times \boldsymbol{B}(t)}{|\boldsymbol{B}(t)|^2} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$
(5)

で与えられる.^{13, 14)} この制御項(5)は、磁場B(t)とその時間微分 $\dot{B}(t)$ のそれぞれの方向に対して垂直に新たな磁場を加えることを意味している.このように、制御項が元のハミルトニアンと直交する($\operatorname{Tr} H(\lambda(t))H_{\mathrm{cd}}(t) = 0$)という性質は一般に成り立つ.状態は非断熱遷移によって異なるものに変化しようとするため、制御項によって「おさえつけている」わけである.

この2準位系の結果は他の系にも応用することができる. 例えば、1次元の横磁場 Ising 模型や XY 模型, Kitaev 模型 などは自由フェルミオン系に変換することができるが、そ のハミルトニアンは各波数毎に独立な2準位系とみなせる ので、波数空間では2準位系の制御項を用いることができ

 $^{^2}$ ここではスピン1/2の場合を考えるが,(4)式と(5)式の $\hbar\sigma/2$ を一般のスピンSで置き換えてもそのまま成り立つ. $^{14)}$



図 2 STIRAP における断熱ショートカット. (a) STIRAP のエネル ギー構造. Stokes パルス $\Omega_S(t)$ とポンプ・パルス $\Omega_P(t)$ を用いて状態を |1) から |3) へと遷移させる.制御項 $\theta(t)$ は |1) と |3) を結びつける. (b) Stokes パルス, ポンプ・パルス,制御項の波形. STIRAP では Stokes パ ルスを先に加え,後からポンプ・パルスを加える.制御項は 2 つのパルス の切り替わりのタイミングで入れる. (c) 終時刻での時間発展状態と断熱 状態のオーバーラップによってあらわされる成功確率.制御項を加えるこ とによって非断熱遷移が抑えられていることがわかる.

る.^{23, 24)} 他にも, 古典スピン系は有効磁場の下での2準位系 の積状態として記述が可能であるため, 同様に制御項が構 成できる.²⁵⁾

次に、3準位系のハミルトニアン

$$H(\boldsymbol{\lambda}(t)) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega_P(t) & 0\\ \Omega_P(t) & 2\Delta & \Omega_S(t)\\ 0 & \Omega_S(t) & 0 \end{pmatrix}$$
(6)

$$H_{\rm cd}(t) = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & \dot{\phi}\sin\theta & \dot{\theta} \\ -\dot{\phi}\sin\theta & 0 & -\dot{\phi}\cos\theta \\ -\dot{\theta} & \dot{\phi}\cos\theta & 0 \end{pmatrix}$$
(7)

で与えられる.²⁶⁾ ここで $\theta = \theta(t) = \arctan(\Omega_P(t)/\Omega_S(t))$ と $\phi = \phi(t) = [\arctan(\sqrt{[\Omega_P(t)]^2 + [\Omega_S(t)]^2}/\Delta)]/2$ であ る. 二つのパルスと同じ行列成分の項は STIRAP のプロセ スにかかわらない二つの固有状態間の非断熱遷移を抑える 項なので無視してもよい. つまり、 $|1\rangle \ge |3\rangle$ を結びつける 項を導入すればよい. 実際に制御項 $\dot{\theta}(t)$ だけを加えること によって図 2(c) のように時間発展状態が元のハミルトニア ンの断熱状態と一致する. この項は磁気双極子遷移を利用 すれば導入可能であろう. このように、制御したい断熱状態 が特定のものである場合には制御項を簡略化することもで きる.

ここまではスピンのような離散系を想定した例を考えて きたが、今度は連続系の簡単な例として次のハミルトニアン

$$H(\boldsymbol{\lambda}(t)) = \frac{p^2}{2m} + U(q, \boldsymbol{\lambda}(t))$$
(8)

を考えよう. 第1項が運動エネルギー, 第2項が時間に 依存するポテンシャルである. ここでは, ポテンシャルが $U(q, \lambda(t)) = U_0([q - f(t)]/r(t))/[r(t)]^2$ と書ける場合を扱 う. $U_0(q) \ge f(t), r(t)$ はそれぞれ任意の関数である. f(t)は平行移動, r(t)は相似変換を特徴づけるパラメータとな る. 例えば調和振動子はこのハミルトニアンに含まれてい る. このスケーリング則は固有関数に対しても類似のスケー リング則を課し, その性質から制御項は

$$H_{\rm cd}(t) = \dot{f}(t)p + \frac{\dot{r}(t)}{2r(t)} \{ [q - f(t)]p + p[q - f(t)] \}$$
(9)

で与えられることがわかる.^{27, 28)} 第1項は並進運動の生成 子, 第2項は膨張・収縮の生成子に他ならない.

ここで考えたような「スケール不変」な系の例は、ハミ ルトニアンの時間変化が対称性に関連した変換になってい る場合、制御項は対応する生成子で与えられることを示し ている.また、その例では運動量について1次の項が制御 項として得られていることもわかる.問題を逆に捉え、制御 項が運動量について高次項を含むとすると、(8)式のポテン シャルUがKdV方程式(あるいはその高次版)を満たす という結論が導かれる.KdV方程式はソリトン解をもつか ら、ソリトンポテンシャル中の量子力学的粒子の制御法を 得ることができる.²⁹⁾

非線形可積分系の分野では、系の可積分性を表す表現としてLax 形式とよばれるものが知られている.³⁰⁾ Lax ペア とよばれる2種類の演算子が満たす方程式はハミルトニア ンと制御項が満たす方程式に対応している.³ Lax ペアは無 数のものが得られており、KdV 階層をなす.よって制御項 の例を直ちに網羅的に得ることができる.他にもたとえば 戸田方程式を用いて量子スピン系の制御項を得ることもで きる.非線形可積分系では逆散乱法とよばれる量子力学的 な描像に基づいた方法が用いられているが、そこで用いら れる描像がそのまま量子系の制御の問題として捉えられる.

制御項を用いる方法は断熱状態を Schrödinger 方程式の 解にすることが原理となっているが、制御という観点から 言えば、ほしい状態に応じて制御項を定めればよいので断 熱状態である必然性はない. たとえば、早送りの方法では 「早送り」した状態をターゲット状態として制御ポテンシャ ルを求めている.³¹⁾ 断熱状態をターゲット状態として用い る意義は、制御項に幾何学的な意味をもたせることにある. 第6節で議論する.

³後の節で議論するが、それは動的不変量が満たす方程式に他ならない.

4. 非断熱遷移の抑制

4.1. 近似制御項の構成

ここまでさまざまな系における制御項を紹介してきた.しかし,固有状態を求めることは一般に難しい問題である.ハミルトニアンの時間変化が対称性に関係しているとも限らない.また,仮に制御項が求まったとしても多体かつ非局所的な演算子となり実現するのが難しい.量子相転移点で制御項が発散するという問題もある.^{23,24)}

実装可能な制御項を構成する方法が多数提案されてきた. それらを大別すると次のようになる.⁴

- ユニタリー変換を用いてハミルトニアンの異なる表現を得る.例えば(9)式の制御項はゲージ変換により座標演算子のみで表せる.変換によって制御項はパラメータ入(t)の2階微分を含むようになる.
- 状態に依存した制御項を用いる.任意の初期状態に対して断熱時間発展を実現するには(3)式が必要だが、 制御する状態を例えば基底状態に限ると等価な作用をする他の演算子で代替できる.前節でSTIRAPを扱った際に言及した.
- 近似的な制御項を構成する.制御項を何らかのパラ メータで展開して低次の項のみを用いる方法や,元の ハミルトニアンを近似的に簡略化してそれに対する 制御項を構成する方法などがある.

三つ目の例で汎用的なものは, 変分原理に基づく方法で ある.³³⁾ 制御項 *H*_{cd}(*t*) は

$$\left[H(\boldsymbol{\lambda}(t)), \dot{H}(\boldsymbol{\lambda}(t)) - \frac{1}{i\hbar} \left[H_{\rm cd}(t), H(\boldsymbol{\lambda}(t))\right]\right] = 0 \qquad (10)$$

という交換関係式を満たすが,制御項を近似制御項で代替 する場合,左辺の量は当然0にはならない.その量の大きさ がなるべく小さくなるように近似項のパラメータを定める. 変分的に問題を解くのでどのような近似項でも限定的な範 囲で制御項を定めることができる.

どのような制御項を用いたらよいかは、時間発展演算子 を展開することでわかる. $H(\lambda) \ge \partial_{\lambda}H(\lambda)$ の多重交換関 係から得られる演算子があらわれるので、それらの演算子 の線形結合を制御項として用いればよい.³⁴⁾

制御項の条件式(10)は変分法のために導入された関係式 であるが、これを用いると制御項の演算子形を直接求める ことが原理的には可能となる.(3)式のスペクトル表示は形 式的な議論には向いているが、固有状態を求める必要があ るし、そこから演算子形を得ることは決して自明ではない. 代数的に(10)式を解くことが制御項を求める方法となりう る.³⁵⁾制御項を適当な基底演算子で展開すると、係数関数が 満たす線形方程式を得る. その方程式を解けばよい. 基底演 算子による展開を途中で打ち切ると,変分法と等価な結果を 得ることもできる. ただし,(10)式から求められる $H_{cd}(t)$ は一意的でないときもあり,そのときには補助的な条件を 適宜用いる必要がある.³⁵⁾

4.2. 断熱制御の性能評価

ここまでは制御項を実装するときの困難性を主な問題と してきたが、制御項の使い方は他にもある.制御項の表現を 用いると、制御項がないときや近似的な制御項を実装した ときの時間発展がどの程度の性能をもたらすかを調べるこ とができる.

制御項の大きさは、断熱条件との関係からわかるように非 断熱遷移の起こりやすさを表す.量子断熱最速曲線の方法 では、制御項の大きさをコスト関数とみなしてパラメータ に関する変分を取り、パラメータの経路(プロトコル)を 定める.^{36,37)}それによって断熱制御のプロトコルを最適化 する.⁵制御項を導入せずにプロトコルを定めるだけであ るから、実装上の問題は生じない.ただし、得られたプロト コルがどの程度の性能をもたらすかはわからない.

量子速度限界の不等式を用いると明確な性能限界を与えることができる.量子速度限界は初期状態と時間発展状態のオーバーラップ (内積)の大きさについて成り立つ性質であるが、断熱状態と時間発展状態のオーバーラップについても類似の関係が成り立つ.³⁸⁾標準的な量子速度限界の不等式に用いられる $H(\lambda(t))$ の分散は、断熱状態の場合 $H_{cd}(t)$ のものに置き換えられる.

近似制御項 A(t) を用いたときにも不等式を一般化するこ とができる.³⁵⁾

$$\begin{aligned} \arccos |\langle n(\boldsymbol{\lambda}(t)) | \Psi_n(t) \rangle| \\ &\leq \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \sigma [H_{\rm cd}(t') - A(t'), |n(\boldsymbol{\lambda}(t'))\rangle] \quad (11) \end{aligned}$$

 $|\Psi_n(t)\rangle$ は初期状態を $|n(\lambda(0))\rangle$ としたときの時間発展状態 を表す.また, $\sigma[O, |\Psi\rangle] = \sqrt{\langle \Psi | O^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | O | \Psi \rangle^2}$ である. (11)式右辺の量はオーバーラップの大きさの下限を与える. つまり,断熱制御における最悪評価となる.その量は時間発 展状態 $|\Psi_n(t)\rangle$ を用いないで計算できるから,性能評価の手 段として有用である.

図3に1次元横磁場 Ising 模型の例を示す.制御項を有限 個数の演算子で表すことによって近似し、その項数を上げ ていく.操作時間が小さくても厳密な制御項に近づくにつ れて性能が改善されることがわかる.

5. 動的不変量

断熱状態の制御は動的不変量を用いて行うこともできる.¹⁵⁾ Lewis-Riesenfeld (1969)¹⁶⁾ の理論では時間依存調

 $^{^4}$ ここではそれぞれの文献をあげることは避ける. いくつかの総合報告を参照してほしい.^{21, 22, 32)}

⁵量子断熱最速曲線は断熱ショートカットの理論が体系化される前に提 案された.断熱ショートカットとの関係や詳しい比較は後に議論されてい る.³²⁾



図3 量子速度限界を用いた性能評価の例.³⁵⁾(a)赤,緑,青,黄の順(矢 印のガイド参照)で近似的制御項を厳密な制御項に近づけていくことで成 功確率が大きくなっていく.水平な直線は量子速度限界によって得られた 下限を表す(成功確率の一番低いものの下限はゼロとなってしまうので枠 外である).(b)式(11)右辺の被積分関数.量子相転移点に当たる部分で ピークをもつが,厳密な制御項に近づくにつれてピークが抑えられていく.

和振動子の問題を扱っており,制御という視点はなかった が,任意の系への一般化が可能であり,実現可能な制御プロ トコルを得ることができる.

与えられた時間依存ハミルトニアン H(t) に対して

$$\frac{\partial F(t)}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar} [H(t), F(t)] = 0$$
(12)

を満たすエルミート演算子 F(t) を,動的不変量,あるいは Lewis-Riesenfeld 不変量という.古典極限では (12) 式左辺 は dF(t)/dt を表しており,それが 0 となるから不変量とよ んでいる.量子力学的には,F(t)の固有値が時間によらな い定数となる.また,F(t)の固有状態を用いて Schrödinger 方程式の解を展開したとき,展開係数の大きさは時間によ らない.つまり,状態は F(t)の「断熱状態」で与えられる.

運動方程式を解く問題が固有値方程式を解く問題に変わっ たように見えるが、そもそも解くべき(12)式が運動方程式 に代わるものなので、本質は何も変わっていない、それでも 目的に応じて問題を書き換えることで利点が生じる.動的 不変量自体は仮想的な量であるから、それがどれだけ複雑 なものであっても問題はない.

たとえば、調和振動子ハミルトニアンは座標と運動量演 算子について2次形式であるが、F(t)がそれらの演算子に ついて斉次多項式であれば交換関係が閉じて時間依存係数 についての微分方程式を得ることができる。その微分方程 式を解くことは難しいが、ここでは問題を逆に捉える。つま り、F(t)の時間依存係数を適当に定め、H(t)のパラメータ を決定する。微分方程式を解く代わりに、H(t)のパラメー タについて線形の代数方程式を解けばよい。⁶

F(t)の時間依存係数は目的に応じて定める.ここで想定 している制御は、初期時刻でのハミルトニアンの固有状態 から時間発展を始め、終時刻でのハミルトニアンの固有状 態を得ることである.時間発展状態はF(t)の固有状態を辿 るから、目的の遷移を実現するには、HとFが初期時刻と 終時刻のそれぞれで交換すればよい.境界条件の下で係数



図 4 Hilbert 空間上で Bloch ベクトルが動く様子の例. ベクトルは断 熱遷移では zx 面上を動くが (adiabatic, 青線), 制御する (= 経路を定 める = プロトコルを定める) ことによって面を外れた非断熱軌道を描く (inv. eng., 赤).途中の経路は一意的ではなく無数に存在する.始点(白 丸)と終点(黒丸)がそれぞれ一致していればよい.

を定め、それを用いてハミルトニアンのパラメータを表せ ば望みの状態遷移が実現できる.

当然ながら、考えられる解は一意的ではない.境界条件を 満たす経路は無数に存在する(図4).たとえば、係数を の適当な多項式で表現して境界条件を満たすように各べき の係数を定める.¹⁵⁾

Schrödinger 方程式の解が F(t) の断熱状態で与えられることは、状態が元のハミルトニアンについて非断熱状態となっていることを意味している. F(t) の固有状態基底 { $|n(t)\rangle$ } を用いてハミルトニアンをスペクトル分解すると、

$$H(t) = \sum_{n} \epsilon_{n}(t) |n(t)\rangle \langle n(t)|$$

+ $i\hbar \sum_{\substack{m,n \ (m \neq n)}} |m(t)\rangle \langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle \langle n(t)|$ (13)

と書くことができる. $\epsilon_n(t)$ は適当な実関数を表す. この式の 第2項は (3) 式の制御項と同形である. これは, Schrödinger 方程式の解が (13) 式第1項の「参照八ミルトニアン」の断 熱状態で与えられることを示している.

この方法ではハミルトニアンの演算子形は元のものから 変わることがない.前述したように動的不変量自体は仮想 的な量であるし,(13)式の分解も具体的に知る必要はない ので,実装上の問題は生じない.もちろん,(12)式を満たす 演算子 F(t)をみつけることは一般に困難である.経路の設 定によっては非現実的なプロトコルを導くこともあり,問 題に応じた工夫が必要となる.

制御頃を導入する方法において元のハミルトニアン $H(\lambda(t))$ の固有値が時間によらない場合, $H(\lambda(t))$ は動的不変量そのものである. $(F(t), H(t)) \rightarrow (H(\lambda(t)), H_{cd}(t))$ とすると(12)式が成り立つ. (10)式が交換関係をとるまでもなく成り立つことがわかる.

動的不変量に基づいた量子状態制御はホロノミック量子 ゲートにおいても用いることができる. 非断熱操作によっ

⁶このため、この手法は inverse engineering とよばれる. 制御理論で は reverse engineering とよばれる手法が一般的に用いられているが、そ れと同様の考え方である.

て生じるデコヒーレンスを抑える方法の一つとして提案されている.³⁹⁾

6. ダイナミクスの構造

動的不変量の式(12)は目新しいものではない.たとえば, 孤立量子系の密度演算子が満たすvon Neumann 方程式と 同じである.密度演算子は動的不変量の一種と言える.密 度演算子は常に得ることができるから,この関係は任意の 系で(13)式の分割が可能であることを意味している.

さらに言えば、量子最速曲線の方法では最適解を特徴づける式として(12)式の形の方程式が用いられる.^{40, 41, 42)}フロー方程式の方法では(12)式が行列を対角化するダイナミクスを記述するし,^{43, 44)}非線形可積分系におけるLaxペアが満たす式も同形である.²⁹⁾そして、開放量子系の記述に用いられるLindblad方程式(GKLS方程式)は、von Neumann型の方程式に散逸項を加えたもので与えられるが、散逸項を二つに分解することによって(12)式とマスター方程式型の式の2種類の式を得ることができる.⁴⁵⁾

(1) 式の断熱状態を時間微分すると、動的位相の部分と 残りの $\lambda(t)$ に依存する部分にそれぞれ作用する.前者が $H(\lambda(t))$,後者が制御項 $H_{cd}(t)$ を与える. $H(\lambda(t))$ は各固有 状態(断熱状態の基底)に作用してそれぞれのエネルギー 固有値を与える.制御項はベクトル演算子 $\xi(\lambda)$ を用いて $H_{cd}(t) = \dot{\lambda}(t) \cdot \xi(\lambda(t))$ のように表すことができる.この項 は(3)式で表されるように非対角成分のみをもつから、各固 有状態に対してはエネルギー期待値に寄与しない.その代わ り、時間発展によって状態基底の変化をもたらす. $H(\lambda(t))$ による時間発展は状態基底に位相因子を与えるだけである. (13) 式の分解についても同様の解釈ができる.

ハミルトニアンはエネルギーを表す量であるが、状態の 時間発展生成子という意味ももつ.そのような観点からす れば、エネルギーが (13) 式第1項、生成子が第2項というよ うに役割分担がなされているといえる.前者がエネルギー 論、後者が運動論を担っているというわけである.制御項に おいて用いられる $\xi(\lambda)$ はゼロ曲率条件を満たしている.⁴⁶⁾ つまり、制御項による状態変化はパラメータ空間の経路に よらない.

制御項が時間発展において本質的な役割を果たすことや 幾何学的な解釈は、量子速度限界との関係からも読み取れ る.量子速度限界は与えられた時間の下で状態がどれだけ 変化できるかを表した不等式であり、Hilbert 空間の構造に よって決定される幾何学的な性質である.^{47,48)}速度限界を 表す量は制御項を用いて表すことができる.つまり、初期 状態に応じて (13)式の分解を適切に行ったとき、第1項は 状態変化を効率的に行う目的からすれば「無駄」なものと なる.

(3) 式の制御項,より正確には $H_{cd}(t) = \dot{\lambda}(t) \cdot \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\lambda}(t))$ と書いたときの $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\lambda})$,は断熱ゲージポテンシャル(adiabatic



図 5 周期駆動系の例.⁵¹⁾ (a) 系を複数の環境から周期的に駆動して生じるカレントを調べる. (b) 断熱カレントはパラメータ空間の軌道 C がつくる面を貫く「磁束」によって記述されるが、非断熱カレントは拡張された空間の軌道 \tilde{C} を用いて同様に解釈できる. (c) 自明なカレントの寄与 J_d がゼロの場合,主要な寄与は幾何学的効果によって生じる. 断熱近似で得られるカレント J_{ad} は周波数に比例しているが、非断熱効果を取り入れると J_g のように大きく変化する.

gauge potential)ともよばれる.⁴⁹⁾ パラメータの変化に対 する固有状態の変化を生成するゲージポテンシャルである. 一般にゲージポテンシャルは曲がった空間の接続を記述す るために用いられるが,断熱ゲージポテンシャルは固有状態 空間の接続を意味する.この視点に立つと非断熱遷移は固 有状態空間が曲がることによって生じる効果と捉えられる.

与えられた時間依存ハミルトニアン H(t) に対して, (13) 式の分解を行うことは自明ではない. また, Schrödinger 方 程式の解, つまり, (13) 式第 1 項についての断熱状態を特 徴づけるパラメータ $\lambda(t)$ は, H(t) を見るだけではわからな い. それらを得ることがダイナミクスを理解することにつ ながる.

形式論を展開する代わりに具体例を挙げよう. ダイナミ クスの普遍的な構造は,量子力学の運動方程式に限られな い.運動方程式が類似の形をもっていれば同様の分解を行 うことができる.たとえば,Hamilton-Jacobi方程式を用い て古典力学の問題を扱うこともできるし,⁵⁰⁾マスター方程 式を用いて古典確率過程の問題を扱うこともできる.⁵¹⁾

後者の例として、周期的に変化する遷移行列 W(t) をもつ マスター方程式 $\dot{p}_i(t) = \sum_j W_{ij}(t)p_j(t)$ を用いて確率分布 $\{p_i(t)\}$ における非断熱効果を調べる.^{51, 52)}図 5 のように、 系を左右から周期的に駆動させるが、1 周期の平均バイアス がゼロとなるようにする.それでも正味で左から右への有 限のカレントが得られることがあり(図 5(a)),量子系に おける Thouless ポンプと本質的に同じ現象として理解され る.^{53, 54)}断熱ポンプ,幾何学ポンプともよばれるように、断 熱近似を用いて記述され、Berry 位相が非自明なカレントを もたらす.

非断熱効果を調べると、動的に生成される有効パラメータ $\lambda(t)$ が重要な役割を果たすことがわかる.たとえば、二つの パラメータ (λ_1, λ_2) によって特徴づけられる断熱系では、2 次元のパラメータ空間上の面を貫く「磁束」が非自明な断 熱カレントをもたらす.非断熱系を考えると、ダイナミクス を特徴づける時間依存パラメータ λ_3 が生じ、3次元空間上 の面を貫く磁束が非断熱カレントを決める(図5(b)).対応して、遷移行列は前述したように二つに分割され、 $\lambda(t) = (\lambda_1(t), \lambda_2(t), \lambda_3(t))$ を用いて表される.定常状態を特徴づける項はFloquet-Magnus 展開によって得られる有効行列 と関係づけられ、もう一方の幾何学項は非断熱効果を含ん だカレントの非自明な寄与を与える(図5(c)).

断熱近似を超えた部分に幾何学的な意味が生じることは、 微小熱機関^{55,56)} や Landau–Zener 遷移⁵⁷⁾ の系などにおい ても議論されている. 断熱ショートカットの描像を用いる と、さまざまな概念や問題を統一的に捉えることが可能に なる.

7. おわりに

本稿では断熱ショートカットの理論について概観した.筆 者の思い込みが強い部分もあると思われるが、それでもさ まざまな問題への応用可能性があることを読み取ってもら えれば幸いである.

はじめに述べたように、断熱ショートカットは状態制御の 方法として提案された.制御法として提案されている以上, 実際に使われなければ意味がない.これまでに断熱ショート カットの方法を検証する実験研究は数多く行われてきたが, 本来は他の目的を実現するための手段として当然のように 用いられることが理想であろう.本稿では制御法としての 断熱ショートカットをやや狭い意味から捉えている.断熱 状態を有限時間で得るという目的から考えれば,本稿で議 論したような方法に囚われる必要はない.前述した早送り の方法³¹⁾や,制御理論で標準的に用いられているバンバン 制御なども断熱状態の制御として用いることができる.ど のような物理系に対しても理論の適用が可能であり,実装 の仕方にも柔軟性があるこれらの方法が,今後あらゆる実 験で利用されることを期待している.

本稿で議論してきた制御項の構成やハミルトニアンの分 割は原理的にはどのような系でも行うことができるが,現 実的には多体系・多自由度の系では多くの困難を伴う.変 分原理に基づく方法や代数的表式を用いる方法では,相互 作用を実現可能なものに制限するだけで簡単に近似的制御 項を得ることができるが,その性能は必ずしも良いとは限 らない.大局的な視点からダイナミクスの構造を捉えてい くようなアプローチが必要になるだろう.

また、断熱ショートカットの理論が明らかにするダイナ ミクスの構造にも注目したい.第6節で述べたように、断熱 ショートカットの理論の適用範囲は閉じた量子系に限られず、 あらゆる動的な系に適用可能である.分割により得られる ダイナミクスの幾何学的描像は、確率的熱力学(stochastic thermodynamics)や量子熱力学の体系と相性が良い.そこ では情報という概念が近年重要になっているが,情報処理も またダイナミクスという枠組みで捉えることができる.た とえば,ハミルトニアンの分解が情報幾何学におけるピタ ゴラスの定理と密接な関係があることが指摘されている.⁵⁸⁾ そのような立場から新奇な視点や結果が得られることを期 待している.

本稿で記述した内容は多くの研究者との議論や共同研究 によって得られた成果や、それによって培われた視点に基 づく.何らかの形で関わらせていただいた全ての方々に感 謝したい.

参考文献

- 1) M. Born and V. Fock, Z. Phys. 51, 165 (1928).
- 2) T. Kato, J. Phys. Soc. Jpn. 5, 435 (1950).
- 3) M. V. Berry, Proc. R. Soc. A **392**, 45 (1984).
- 4) Y. Aharonov and J. Anandan, Phys. Rev. Lett. 58, 1593 (1987).
- 5) U. Gaubatz et al., J. Chem. Phys. 92, 5363 (1990).
- B. Apolloni, C. Carvalho, and D. de Falco, Stoch. Proc. Appl. 33, 233 (1989).
- 7) A. B. Finnila et al., Chem. Phys. Lett. **219**, 343 (1994).
- 8) T. Kadowaki and H. Nishimori, Phys. Rev. E 58, 5355 (1998).
- 9) E. Farhi et al., arXiv:quant-ph/0001106 (2000).
- 10) T. Albash and D. A. Lidar, Rev. Mod. Phys. 90, 015002 (2018).
- 11) L. Landau, Phys. Sov. Union 2, 46 (1932).
- 12) C. Zener, Proc. Royal Soc. A **137**, 696 (1932).
- M. Demirplak and S. A. Rice, J. Phys. Chem. A 107, 9937 (2003).
- 14) M. V. Berry, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 365303 (2009).
- 15) X. Chen et al., Phys. Rev. Lett. 104, 063002 (2010).
- 16) H. R. Lewis and W. B. Riesenfeld, J. Math. Phys. 10, 1458 (1969).
- 17) J.-F. Schaff et al., Phys. Rev. A 82, 033430 (2010).
- 18) J.-F. Schaff et al., Europhys. Lett. **93**, 23001 (2011).
- 19) M. G. Bason et al., Nat. Phys. 8, 147 (2012).
- 20) J. Zhang et al., Phys. Rev. Lett. **110**, 240501 (2013).
- 21) E. Torrontegui et al., Adv. At. Mol. Opt. Phys. 62, 117 (2013).
- 22) D. Guéry-Odelin et al., Rev. Mod. Phys. 91, 045001 (2019).
- 23) A. del Campo, M. M. Rams, and W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. 109, 115703 (2012).
- 24) K. Takahashi, Phys. Rev. E 87, 062117 (2013).
- 25) T. Hatomura and T. Mori, Phys. Rev. E 98, 032136 (2018).
- 26) X. Chen et al., Phys. Rev. Lett. 105, 123003 (2010).
- 27) C. Jarzynski, Phys. Rev. A 88, 040101(R) (2013).
- 28) A. del Campo, Phys. Rev. Lett. **111**, 100502 (2013).
- 29) M. Okuyama and K. Takahashi, Phys. Rev. Lett. 117, 070401 (2016).
- 30) P. D. Lax, Commun. Pure Appl. Math. 21, 467 (1968).
- 31) S. Masuda and K. Nakamura, Proc. R. Soc. A 466, 1135 (2010).
- 32) K. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. 88, 061002 (2019).
- 33) D. Sels and A. Polkovnikov, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 114, E3909 (2017).
- 34) P. W. Claeys et al., Phys. Rev. Lett. 123, 090602 (2019).
- 35) T. Hatomura and K. Takahashi, Phys Rev. A 103, 012220 (2021).
- 36) A. T. Rezakhani et al., Phys. Rev. Lett. 103, 080502 (2009).
- 37) A. T. Rezakhani et al., Phys Rev. A 82, 012321 (2010).
- 38) K. Suzuki and K. Takahashi, Phys. Rev. Research ${\bf 2},$ 032016(R) (2020).

- 39) U. Güngördü, Y. Wan, and M. Nakahara, J. Phys. Soc. Jpn. 83, 034001 (2014).
- 40) A. Carlini et al., Phys. Rev. Lett. 96, 060503 (2006).
- 41) 古池達彦, 奥平陽介, 細谷暁夫, 日本物理学会誌 62, 513 (2007).
- 42) K. Takahashi, J. Phys. A: Math. Theor. 46, 315304 (2013).
- 43) S. D. Glazek and K. G. Wilson, Phys. Rev. D 48, 5863 (1993).
- 44) F. Wegner, Ann. Phys. **3**, 77 (1994).
- 45) K. Funo, N. Shiraishi, and K. Saito, New J. Phys. 21, 013006 (2019).
- 46) K. Nishimura and K. Takahashi, SciPost Phys. 5, 029 (2018).
- 47) L. Mandelstam and I. Tamm, J. Phys. (Moscow) $\mathbf{9},\,249$ (1945).
- 48) S. Deffner and S. Campbell, J. Phys. A: Math. Theor. 50 453001 (2017).
- 49) M. Kolodrubetz et al., Phys. Rep. 697, 1 (2017).
- 50) M. Okuyama and K. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. 86, 043002 (2017).
- 51) K. Takahashi et al., Phys. Rev. Lett. ${\bf 124},\,150602$ (2020).
- 52) K. Funo et al., Phys. Rev. Lett. ${\bf 124},\,150603$ (2020).
- 53) D. J. Thouless, Phys. Rev. B **27**, 6083 (1983).
- 54) N. A. Sinitsyn and I. Nemenman, Europhys. Lett. 77, 58001 (2007).
- 55) K. Brandner and K. Saito, Phys. Rev. Lett. **124**, 040602 (2020).
- 56) K. Takahashi et al., J. Stat. Phys. ${\bf 181},\,2206$ (2020).
- 57) S. Kitamura, N. Nagaosa, and T. Morimoto, Commun. Phys. **3**, 63 (2020).
- 58) K. Takahashi, New J. Phys. ${\bf 19},\,115007$ (2017).

著者紹介または非会員著者の紹介

鳩村 拓矢: 日本電信電話株式会社 物性科学基礎研究所 研究員. 専門は統計物理学および量子物理学. 高橋 和考: 専問は理論物理学会ズ(理想)

高橋 和孝: 専門は理論物理学全て(理想).

(2021年1月23日原稿受付)

Shortcuts to adiabaticity and structure of dynamics

Takuya Hatomura and Kazutaka Takahashi

abstract: Adiabatic control is one of the promising techniques for manipulating quantum systems. It, however, requires an infinitely slow operation and is of limited use for practical applications. "Shortcuts to adiabaticity" is a series of methods to mimic adiabatic time evolution within a shorter time. We review the recent progress of shortcuts to adiabaticity and discuss universal aspects of dynamics.