2 次元 4 状態スプリットステップ量子ウォークの固有値解析

船川　大樹 (Daiju Funakawa)*
北海道大学大学院理学研究院　専門研究員

概要

本研究は，2 次元 4 状態の量子ウォークについて，局在化がどのような条件の下で起こるのか調べたものである。量子ウォークとは，ランダムウォークの量子版とも言えるモデルである。本紙では特に 2 次元の格子点の上をウォークする内部自由度 4 の粒子についての量子ウォークに限定している。この 2 次元 4 状態の量子ウォークは 1 次元スプリット・ステップ量子ウォークの拡張版である。量子ウォークが局在化を起こすことは，量子ウォークの時間発展を記述するユニタリ作用素 U の固有値問題と対応しており，本紙では U が固有値を持つための条件をできる限り精密に調べていく。尚，本研究は北海道大学の布田徹氏，笹山智司氏，信州大学の鈴木章斗氏との共同研究である。

1　1 次元 2 状態の量子ウォークの定義と局在化

本章では，まず 2 次元スプリット・ステップ量子ウォークの基礎となる 1 次元 2 状態の量子ウォークについて，その定義と性質を解説する。1 次元 2 状態の量子ウォークは 2010 年に Kitagawa らによって定式化された 1 次元スプリット・ステップ量子ウォーク [4] が基となって定義されている。1 次元スプリット・ステップ量子ウォークとは，次で与えられたモデルである：$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}$ とする．この行列による $\mathcal{H}$ 上の掛け算作用素も同じ記号で $R(\theta)$ と書くことにする。さらに，$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素 $S_\pm$ を

$$(S_+\Psi)(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x-1) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}, \quad (S_-\Psi)(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x+1) \end{pmatrix}, \quad \Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2, \quad \Psi \in \mathcal{H}$$

と定義する。このとき，1 次元スプリット・ステップ量子ウォークは

$$U_{\mathrm{ss}}(\theta_1, \theta_2) := S_- R(\theta_2) S_+ R(\theta_1), \quad \theta_1, \theta_2 \in [0, 2\pi)$$

と定義される。ここで，θ_1, θ_2 は $x \in \mathbb{Z}$ に依存した関数 $\theta_1 = \theta_1(x)$, $\theta_2 = \theta_2(x)$ としても良い。以下，上記の 1 次元スプリット・ステップ量子ウォークを一般化した 1 次元 2 状態の量子ウォークを考える。そのため，状態のヒルベルト空間を

$$\mathcal{H} := \{\Psi : \mathbb{Z} \to \mathbb{C}^2 \mid \sum_{x \in \mathbb{Z}} \|\Psi(x)\|^2_{\mathbb{C}^2} < \infty\}.$$

* 博 (理) 北海道大学大学院理学研究院数学部門（〒060-0810 札幌市北区北 10 条西 8 丁目，E-mail:funakawa@math.sci.hokudai.ac.jp）

と定義する。上記に挙げた 1 次元スプリット・ステップ量子ウォーク $U_{\mathrm{ss}}(\theta_1,\theta_2)$ もヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素である。1 次元 2 状態の量子ウォークとして，本紙では特に次の時間発展を考える：

$$\Psi_{t+1}(x)=P(x+1)\Psi_t(x+1)+Q(x-1)\Psi_t(x-1)+R(x)\Psi(x),\quad (x,t)\in\mathbb{Z}\times\mathbb{N} \tag{1}$$

ただし，$P(x),Q(x),R(x)$ は $x\in\mathbb{Z}$ に依存した 2×2 の行列であり，$\Psi_t(x)$ とは $\Psi_t\in\mathcal{H}$ を満たす，t 回時間発展した際の位置 $x\in\mathbb{Z}$ における状態を表す。以下，(1) の時間発展を記述する $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素を定義する。まず，ヒルベルト空間 $\ell^2(\mathbb{Z})$ 上の作用素 L を

$$(Lf)(x):=f(x+1),\quad f\in\mathcal{H},\quad x\in\mathbb{Z}$$

と定義する。この時，ユニタリ作用素 $S:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ を

$$S:=\begin{pmatrix} pI & qL \\ q^*L^* & -pI\end{pmatrix}$$

と定義する。ただし，L^* は L の共役作用素，I は $\ell^2(\mathbb{Z})$ 上の恒等作用素，$(p,q)\in\mathbb{R}\times\mathbb{C}$ は $p^2+|q|^2=1$ を満たす数であり，q^* は q の複素共役を意味する。この S は**シフト作用素**と呼ばれ，粒子の移動に対する時間発展を記述している。
次に各 $x\in\mathbb{Z}$ に対して，$C(x)\in U(2)$ を取る。この $C(x)$ による掛け算作用素を $C:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ と表すことにする, i.e.

$$(C\Psi)(x):=C(x)\Psi(x),\quad \Psi\in\mathcal{H},\quad x\in\mathbb{Z}.$$

この C は $C(x)\in U(2)$ なため，ユニタリ作用素であり，**コイン作用素**と呼ばれる粒子の内部自由度に対する時間発展を記述している。上記の S と C の積によって

$$U:=SC \tag{2}$$

と $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素を定義する。この U が (1) の時間発展を記述するユニタリ作用素である。実際，

$$C(x)=\begin{pmatrix} a(x) & b(x) \\ c(x) & d(x)\end{pmatrix}$$

と表すとき

$$P(x)=q\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a(x) & b(x)\end{pmatrix},\quad Q(x)=\bar{q}\begin{pmatrix} c(x) & d(x) \\ 0 & 0\end{pmatrix},\quad R(x)=p\begin{pmatrix} a(x) & b(x) \\ -c(x) & -d(x)\end{pmatrix}$$

と定義すると，$\Psi_t=U^t\Psi_0$ は，(1) を満たす。ここで，$\Psi_0\in\mathcal{H}$ ($\|\Psi_0\|=1$) は，初期状態である。さらに重要な性質として，次の条件 (*) の下で U と $U_{\mathrm{ss}}(\theta_1,\theta_2)$ はユニタリ同値である [6]。実際，パウリ行列 $\sigma_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}$ について，$p:=\sin\frac{\theta_2}{2}$，$q:=\cos\frac{\theta_2}{2}$，$C(x):=R(x)\sigma_1$ としたとき (*),

$$U=\sigma_1 U_{\mathrm{ss}}(\theta_1,\theta_2)\sigma_1$$

を直接計算によって示すことができる。このため，U と 1 次元スプリット・ステップ量子ウォーク $U_{\mathrm{ss}}(\theta_1,\theta_2)$ はスペクトルの構造が全く同一である。よって，以下では (2) で定義した U のことを 1 次元スプリット・ステップ量子ウォークと呼ぶことにする。本研究において調べる量子ウォークの性質は次で定義した**局在化**と呼ばれる現象についてである：

定義 1 U が初期状態 Ψ_0 の下で局在化を起こすとは，$\lim_{t\to\infty}\|(U^t\Psi_0)(x)\|^2 > 0$ となるような $x \in \mathbb{Z}$ が存在することである。

量子ウォークが局在化を起こすと Grover の探索アルゴリズムの解が導出可能であると言われている。Grover の探索アルゴリズムとは量子コンピュータへの応用が期待されたアルゴリズムであるため，量子ウォークの局在化がいつ起こるのかは大変重要な問題である。本紙の量子ウォークに限らず，様々な量子ウォークに対して，局在化についての研究は多々見られる。[5]
さて，局在化には同値条件が存在する：

命題 1.1 U は特異連続スペクトルを持たないとする。
このとき，U が初期状態 Ψ_0 の下で局在化を起こすことと，Ψ_0 が U の固有空間と overlap することは同値である。

上記の命題によって，U が固有値を持つときに，その固有空間と overlap するように初期状態 Ψ_0 を取ることによって局在化を起こすことができる。例えば，U が固有値 λ を持つときにその固有空間 $\ker(U-\lambda)$ と overlap するようなベクトルとは U の λ に対する固有ベクトルが挙げられる。以下では量子ウォークが局在化を起こすことを示すために，U の固有値の有無を議論する。特に (2) で定義された 1 次元スプリット・ステップ量子ウォーク U の局在化については次の先行研究がある：

定理 1.2 (T.Fuda, D.Funakawa, A.Suzuki (2017)[3]) 次の条件を満たすとき, U は ± 1 の固有値を持つ (よって局在化が起こる):

$$\limsup_{x\to+\infty}\left|\frac{(p\pm 1)\,\bar{\chi}_2(x)}{q\bar{\chi}_1(x)}\right| < 1 \text{ かつ } \limsup_{x\to-\infty}\left|\frac{q\bar{\chi}_1(x)}{(p\pm 1)\,\bar{\chi}_2(x)}\right| < 1. \text{ (複合同順)}$$

2 多次元量子ウォークへの拡張と先行結果

本章では，前章で定義した 1 次元スプリット・ステップ量子ウォーク (2) の空間次元を多次元に拡張した次のモデルを考える：
まず，状態のヒルベルト空間を

$$\mathcal{H} := \ell^2(\mathbb{Z}^d;\mathbb{C}^{2d}) := \{\Psi : \mathbb{Z}^d \to \mathbb{C}^{2d} \mid \sum_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{Z}^d}\|\Psi(x)\|^2 < \infty\}$$

として定義する。次に $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ 上の線形作用素 L_j を

$$(L_j f)(\boldsymbol{x}) := f(\boldsymbol{x}+\mathbf{e}_j),\quad \boldsymbol{x}\in\mathbb{Z}^d,\quad f\in\ell^2(\mathbb{Z}^d),\ j=1,\dots,d$$

として定義する。ただし，$\{\mathbf{e}_j\}_j$ とは $\mathbb{Z}^d$ 上の標準基底である。この L_j を基にシフト作用素 $S:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ を次のように定義する：

$$S := \oplus_{j=1}^d S_j,\quad S_j := \begin{pmatrix} p_j I & q_j L_j \\ q_j^* L_j^* & -p_j I \end{pmatrix},\quad (p_j,q_j)\in\mathbb{R}\times\mathbb{C},\ p_j^2+|q_j|^2=1,\ j=1,\cdots,d.$$

さらにコイン作用素 $C:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ を次で定義する：

$$(C\Psi)(\boldsymbol{x}) := C(\boldsymbol{x})\Psi(\boldsymbol{x}),\quad C(\boldsymbol{x})\in U(2d)\text{:エルミート},\ \boldsymbol{x}\in\mathbb{Z}^d,\ \Psi\in\mathcal{H}.$$

上記のシフト作用素 S とコイン作用素 C を使って d 次元 $2d$ 状態の量子ウォークの時間発展を記述するユニタリ作用素 $U:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ を

$$U := SC \tag{3}$$

で定義する。(3) のことをしばしば多次元量子ウォークとも呼ぶ。多次元量子ウォークに対する局在化の定義も定義 1 と同様に定義する：

定義 2 U が初期状態 Ψ_0 の下で局在化を起こすとは，$\lim_{t\to\infty}\|(U^t\Psi_0)(\boldsymbol{x})\|^2>0$ となるような $\boldsymbol{x}\in\mathbb{Z}^d$ が存在することである。

多次元量子ウォークの局在化も 1 次元の時と同様に，U の固有値解析へと帰着する。多次元量子ウォーク U の固有値解析を行うために以下のような準備を行なう。

定義 3 (One-defect)
コイン C は次を満たすように取る：

$$C(\boldsymbol{x}) := \begin{cases} C_0, & \boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}, \\ C_1, & \boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}. \end{cases}$$

このようなコイン C に対して U を **one-defect** モデルと呼ぶ。

さて，C はユニタリな自己共役作用素であるから，C のスペクトル $\sigma(C)$ は $\sigma(C)\subset\{\pm1\}$ を満たす。特に，多次元量子ウォークにおいては次を仮定する：

$$\dim\ker(C(\boldsymbol{x})-1)=1$$

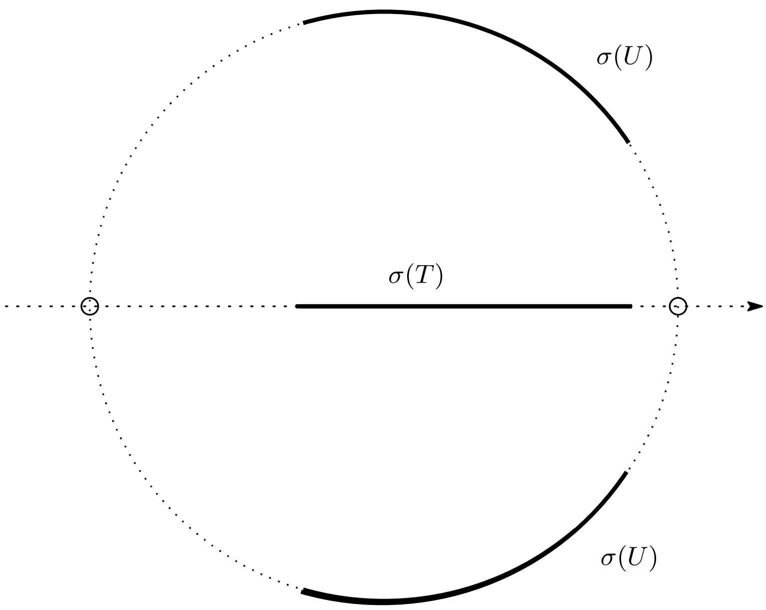
このとき，$\chi(\boldsymbol{x})\in\ker(C(\boldsymbol{x})-1)$, $\|\chi(\boldsymbol{x})\|=1$ とすると，$C(\boldsymbol{x})=2|\chi(\boldsymbol{x})\rangle\langle\chi(\boldsymbol{x})|-1$ とスペクトル分解することができる。特に $d:\mathcal{H}\to\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ を $(d\Psi)(\boldsymbol{x}):=\langle\chi(\boldsymbol{x}),\Psi(\boldsymbol{x})\rangle$, $\boldsymbol{x}\in\mathbb{Z}^d$ と定義すると，コイン作用素 C は $C=2d^*d-1$ を満たす。この d を使って discriminant operator $T:\ell^2(\mathbb{Z}^d)\to\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ を次で定義する：

$$T := dSd^*.$$

Discriminant operator T のスペクトルは U のスペクトルとある意味で対応している。実際，次の定理が存在する：

定理 2.1 (スペクトル写像定理 [7])
$\{e^{i\arccos\xi}\mid\xi\in\sigma_\#(T)\}\subset\sigma(U)$, $\sigma_\#=\sigma,\sigma_{\mathrm{p}}$.
ただし，線形作用素 A に対して，$\sigma_{\mathrm{p}}(A)$ は“A の固有値の集合”を表している。

スペクトル写像定理は次のような図を意味している。



故に，T が固有値を持てば U も固有値を持つことを意味し，局在化を起こすことが出来る。このことから T の固有値問題に帰着する。よって，以下 T を陽に書き下す。そのため，次の記号を導入する。まず，$\chi(\boldsymbol{x}) \in \ker(C(\boldsymbol{x})-1) \subset \mathbb{C}^{2d}$ より，

$$\chi(\boldsymbol{x}) = {}^t(\chi_{1,1}(\boldsymbol{x}), \chi_{1,2}(\boldsymbol{x}), \chi_{2,1}(\boldsymbol{x}), \chi_{2,2}(\boldsymbol{x}), \cdots, \chi_{d,1}(\boldsymbol{x}), \chi_{d,2}(\boldsymbol{x})), \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{Z}^d \tag{4}$$

と成分表示する。今，U は one-defect モデルなので，$\Omega := \chi(\mathbf{0})$, $\Phi := \chi(\boldsymbol{x} \neq \mathbf{0})$ と記述する。(4) と同様に Ω, Φ も以下のように成分表示する：

$$\Omega = {}^t(\omega_{1,1}, \omega_{1,2}, \ldots, \omega_{d,1}, \omega_{d,2}), \quad \|\Omega\| = 1,$$
$$\Phi = {}^t(\phi_{1,1}, \phi_{1,2}, \cdots, \phi_{d,1}, \phi_{d,2}), \quad \|\Phi\| = 1.$$

このとき，$T = dSd^*$ を計算すると以下を得る：

$$T = \sum_{j=1}^{d} \{p_j \left(|\chi_{j,1}|^2 - |\chi_{j,2}|^2\right) + q_j \chi_{j,1}^* L_j \chi_{j,2} + \left(q_j \chi_{j,1}^* L_j \chi_{j,2}\right)^2\}.$$

ここで $\chi_{j,i} \quad (i = 1, 2, j = 1, \cdots, d)$ は $\chi_{j,i}(\boldsymbol{x})$ による掛け算作用素である。この T の固有値を探すために以下の Feshbach map を利用する：
射影作用素 $\Pi := |\mathbb{1}_{\{\mathbf{0}\}}\rangle\langle\mathbb{1}_{\{\mathbf{0}\}}|$, $\Pi^\perp := I - \Pi$ によって，T の Feshbach map を

$$F(\lambda) := \Pi^\perp(T-\lambda)\Pi^\perp - \Pi^\perp T\Pi \left(\Pi(T-\lambda)\Pi\right)_{\mathrm{Ran}\Pi}^{-1} \Pi T \Pi^\perp, \quad \lambda \in \mathbb{C}.$$

と定義する。このとき次の補題に注意する。

補題 2.2　次の 2 つは必要十分である：
(1) $(\Pi(T-\lambda)\Pi)_{\mathrm{Ran}\Pi}^{-1}$ が存在する。
(2) $\lambda \neq a_0(\mathbf{p}) := \sum_{j=1}^{d} p_j \left(|\omega_{j,1}|^2 - |\omega_{j,2}|^2\right)$.

Feshbach map は上記の補題によって $\lambda \neq a_0(\mathbf{p})$ の下で well-defined である。Feshbach map が有用な理由は次の定理からくる：

定理 2.3 ([1]) 次の 2 つは必要十分である：
(1) $\lambda \in \sigma_{\mathrm{p}}(T)$ である。
(2) $F(\lambda)\psi_\lambda = 0$ となる $\psi_\lambda \in \mathrm{Ran}\Pi^\perp \setminus \{\mathbf{0}\}$ が存在する。

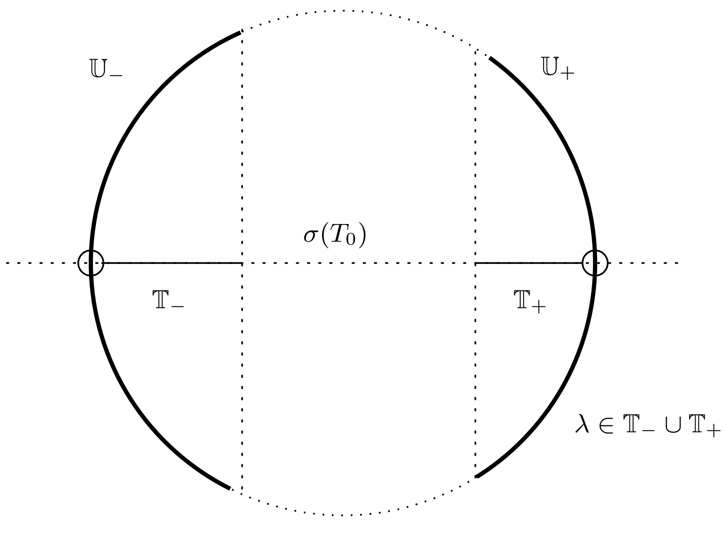
Feshbach map$F(\lambda)$ は直接計算によって次のように表示される：

$$F(\lambda) = \Pi^\perp \left(T_0 - \lambda - \frac{|\varphi\rangle\langle\varphi|}{a_1(\mathbf{p}) - \lambda} \right) \Pi^\perp.$$

ただし，T_0 は $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ 上の自己共役作用素，φ は $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ 上のベクトルであり，次で定義されるものである：

$$\begin{aligned}
T_0 &:= a_1(\mathbf{p}) + \sum_{j=1}^{d} \{ q_j \phi_{j,1}^* \phi_{j,2} L_j + (q_j \phi_{j,1}^* \phi_{j,2} L_j)^* \}, \\
a_1(\mathbf{p}) &:= \sum_{j=1}^{d} p_j \left(|\phi_{j,1}|^2 - |\phi_{j,2}|^2 \right), \\
\varphi &:= \sum_{j=1}^{d} \left(q_j \omega_{j,1} \phi_{j,2}^* \mathbb{1}_{\{-\mathbf{e}_j\}} + q_j^* \omega_{j,2} \phi_{j,1}^* \mathbb{1}_{\{\mathbf{e}_j\}} \right).
\end{aligned}$$

さて，$\lambda_0 := 2\sum_{j=1}^{d} |q_j \phi_{j,1} \phi_{j,2}|$ とすると，$\sigma_{\mathrm{ess}}(T) = \sigma(T_0) = [a_1(\mathbf{p}) - \lambda_0, a_1(\mathbf{p}) + \lambda_0]$ が得られる。よって以下では，$\mathbb{T}_- := (-1, a_1(\mathbf{p}) - \lambda_0)$，$\mathbb{T}_+ := (a_1(\mathbf{p}) + \lambda_0, 1)$ として，$\mathbb{T}_- \cup \mathbb{T}_+$ 上で T の固有値を探していく。



上図のように，$\mathbb{T}_\pm$ 上に T の固有値が現れれば，U は $\mathbb{U}_\pm$ 上に固有値を持つことがスペクトル写像定理より分かる。今，特に $\left(T_0 - \lambda - \frac{|\varphi\rangle\langle\varphi|}{a_1(\mathbf{p}) - \lambda} \right) \psi_\lambda = 0$ を満たす $\psi_\lambda \in \mathrm{Ran}\Pi^\perp \setminus \{0\}$ は $F(\lambda)\psi_\lambda = 0$ も満たす。そのため，$\left(T_0 - \lambda - \frac{|\varphi\rangle\langle\varphi|}{a_1(\mathbf{p}) - \lambda} \right) \psi_\lambda = 0$ について考察するが，このような ψ_λ は

$$\psi_\lambda = (T_0 - \lambda)^{-1} \varphi$$

の定数倍に限られることが示される。また，ここから $\left(T_0 - \lambda - \frac{|\varphi\rangle\langle\varphi|}{a_1(\mathbf{p})-\lambda}\right)\psi_\lambda = 0$ と

$$f(\lambda) := \lambda - a_1(\mathbf{p}) + \langle\varphi, (T_0 - \lambda)\varphi\rangle = 0$$

は同値であることが確かめられる。さらに，本章では以下，次の仮定を設ける。

仮定 2.4
(1) 全ての $j = 1, \cdots, d$ に対して，$\omega_{j,1}\phi_{j,2} + \omega_{j,2}\phi_{j,1} = 0$ が成立する。
(2) ある $l = 1, \cdots, d$ に対して $\omega_{j,1}\phi_{j,2} \neq 0$ が成立する。

この仮定の下で次が成り立つ：

補題 2.5
(i) 仮定 2.4(1) が成立するとき，$\psi_\lambda \in \mathrm{Ran}\Pi^\perp$ である。
(ii) 仮定 2.4(2) が成立するとき，$\varphi \neq 0$ である。
特に仮定 2.4 の下で $\psi_\lambda \in \mathrm{Ran}\Pi^\perp \backslash \{0\}$ となる。

故に f の零点が存在すれば U が局在化を起こすことが分かる。先行研究 [2] では，上記の議論を経て f の零点の存在を証明した：

定理 2.6 (T.Fuda, D.Funakawa, A.Suzuki (2017)[2])
任意の $j = 1, \cdots, d$ に対して集合 D_j を

$$D_j := \{(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{C}^d \mid p_j q_j \neq 0\}$$

と定義する。ある $\mathbf{p}_0 \in \{-1, 1\}^d$ が存在し，$a_0(\mathbf{p}_0) \neq a_1(\mathbf{p}_0)$ を満たすとする。また，仮定 2.4(2) を見たす番号を l と書くことにする。このとき，$(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \in \mathcal{D}_l$ であり，$\|(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - (\mathbf{p}_0, \mathbf{0})\|$ が十分小さいならば，f は $\mathbb{T}_- \cup \mathbb{T}_+$ 上に零点を持つ。故に，U は局在化を起こす。

上記の定理によって，任意の空間次元 $d \in \mathbb{N}$ に対して多次元量子ウォークが局在化を起こすための十分条件を提示することが出来た。次章では“$\mathbf{q}$ が $\mathbf{0}$ に十分近い”という条件を外すことを考える。

3 2 次元 4 状態量子ウォークと主結果

本章では，前章の空間次元を $d = 2$ で固定することによって，f が零点を持つための必要十分条件を提示する。特に本紙では以下のモデルの解析を行なう：

$$U := SC \quad \text{acting on} \quad \mathcal{H} := \ell^2(\mathbb{Z}^2; \mathbb{C}^4) = \left\{\Psi : \mathbb{Z}^2 \to \mathbb{C}^4 \;\middle|\; \sum_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{Z}^2} \|\Psi(\boldsymbol{x})\|^2_{\mathbb{C}^4}\right\},$$

$$S := \begin{pmatrix} 0 & L_1 \\ L_1^* & 0 \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} 0 & L_2 \\ L_2^* & 0 \end{pmatrix} \quad \text{on} \quad \mathcal{H}.$$

C は 4×4 のユニタリかつエルミートな行列 $C(\boldsymbol{x})$ による掛け算作用素で定義される。さて，正規化された $\mathbb{R}^4$ 上のベクトル Ω, Φ を $\Omega = {}^t(\omega_{1,1}, 0, \omega_{2,1}, \omega_{2,2}) \in \mathbb{R}^4$, $\Phi = {}^t(\phi_{1,1}, 0, \phi_{2,1}, \phi_{2,2}) \in \mathbb{R}^4$ として取る。ただし，各成分は次を満たすものとする：

$$\omega_{2,1}\omega_{2,2}\phi_{2,1}\phi_{2,2} \neq 0,$$
$$\omega_{2,2}\phi_{2,1} + \omega_{2,1}\phi_{2,2} = 0.$$

また，本研究のモデルにおいて，$C(\boldsymbol{x})$ は以下を満たすように定義する：

$$C(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} C_0 = 2|\Omega\rangle\langle\Omega| - 1, & (\boldsymbol{x} = \mathbf{0}), \\ C_1 = 2|\Phi\rangle\langle\Phi| - 1, & (\boldsymbol{x} \neq \mathbf{0}). \end{cases}$$

本章のモデルにおいては，$p_j = 0$ であるから $a_1(\mathbf{p}) = 0$ となる。また，$q_j = 1$ なので $\sigma_{\mathrm{ess}}(T) = [-2|\phi_{2,1}\phi_{2,2}|, 2|\phi_{2,1}\phi_{2,2}|]$ であることが直接計算によって確かめられる。故に，本モデルでは $\mathbb{T}_\pm$ を $\mathbb{T}_- = (-1, -2|\phi_{2,1}\phi_{2,2}|)$，$\mathbb{T}_+ = (2|\phi_{2,1}\phi_{2,2}|, 1)$ となることが分かる。先行研究よりも f の零点の存在について精度よく調べていくと次の結果を得る：

定理 3.1　次の 2 つは同値である：
(1) T が $\mathbb{T}_- \cup \mathbb{T}_+$ 上に固有値を持つ。
(2) T が $\mathbb{T}_-$ と $\mathbb{T}_+$ に固有値を一つずつ持つ。
(3) $|\phi_{2,2}| < |\omega_{2,2}|$ が成り立つ。

次の系は定理 3.1 から直ちに従う。

系 3.2　$\omega_{1,1} = 0$ を仮定する。このとき，定理 3.1 の (3) は常に成り立つ。よって，$\omega_{1,1} = 0$ の下で，U が局在化を起こすような初期状態 Ψ_0 は常に取ることができる。

以上の結果によって，$\mathbf{q}$ が $\mathbf{0}$ に近くない場合 (特に $q_j = 1, \ \ j = 1, 2$ の場合でも)，U は局在化を起こすことが証明できた。以下，f の零点について少し補足をする。まず，f の定義の中に $(T_0 - \lambda)^{-1}$ が使われていることと，今回 ± 1 が固有値であるか否かを考慮していないため，f の定義域を $\mathbb{T}_- \cup \mathbb{T}_+$ としていた。しかし，元々の Feshbach map $F(\lambda)$ に立ち戻れば，$\lambda \neq a_0(\mathbf{p})$ でさえあれば Feshbach map を定義できた。今 $a_0(\mathbf{p}) = 0$ であるから，T の固有値の候補である λ は $(-1, 1)\backslash\{0\}$ から探しても良いことになる。よって，以下では f の零点問題について少し λ の範囲を広げた議論を行なう。今後，$\Lambda_\pm := \pm 2|\phi_{2,1}\phi_{2,2}|$ とし，ψ_λ のことを改めて ψ_a と書くことにする。ただし，$a := \frac{\lambda}{2\phi_{2,1}\phi_{2,2}}$ で定義する。この時，$\phi_{2,1}\phi_{2,2}$ の符号に依存して $\lambda \to \Lambda_\pm$ は $a \to \pm 1$ と同値であることに注意されたい。今，f について，次のことが分かる：

命題 3.3　$|\phi_{2,2}| = |\omega_{2,2}|$ を仮定する。この時

$$\lim_{a \to 1+0} f(\lambda) = \lim_{a \to -1-0} f(\lambda) = 0.$$

よって，$\lambda = \pm 2|\phi_{2,1}\phi_{2,2}|$ も T の固有値の候補となるが，この場合 $\psi_{\pm 1} \notin \ell^2(\mathbb{Z}^2)$ である。この事実は $\ell^2(\mathbb{Z}^2) \to L^2([0, 2\pi), \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2})$ でのフーリエ変換

$$(\mathcal{F}\psi)(\mathbf{k}) := \sum_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{Z}^2} e^{-\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}}\psi(\boldsymbol{x}), \ \ \psi \in \ell^2(\mathbb{Z}), \ \ \mathbf{k} = (k_1, k_2) \in [0, 2\pi)^2$$

を使い，$\hat{\psi}_{\pm 1} := (\mathcal{F}\psi_{\pm 1}) \notin L^2([0, 2\pi), \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2})$ を示すことによって確かめられる。上記のように，固有方程式を満たしても，固有ベクトルがヒルベルト空間の元ではないような λ は**レゾナンス**と呼ばれる。しかし，T が $\ell^2(\mathbb{Z}^2)$ 上の作用素であることから，「$T\psi_{\pm 1} = \Lambda_\pm\psi_{\pm 1}, \ \ \psi_{\pm 1} \notin \ell^2(\mathbb{Z}^2)$」などと書くことは宜しくない。よって，本研究では以下のようにレゾナンスを処理する。

まず，正値な関数 ρ に対して，$L^2_\rho := L^2([0,2\pi)^2, \frac{\rho(\mathbf{k})d\mathbf{k}}{(2\pi)^2})$ と書くことにする。また，関数の集合 $\mathcal{D}_\pm$ を次のように定義する：

$$\mathcal{D}_+ := \left\{ \rho : [0,2\pi)^2 \to \mathbb{R}_+ \mid \begin{array}{c} \rho(\mathbf{k}) = O(k_2^{1+\varepsilon}),\ (k_2 \to 0)\ \ \mathbf{k} = (k_1,k_2) \in [0,2\pi)^2,\ \varepsilon > 0, \\ \int_{[0,2\pi)^2} \rho(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} < \infty \end{array} \right\},$$

$$\mathcal{D}_- := \left\{ \rho : [0,2\pi)^2 \to \mathbb{R}_+ \mid \begin{array}{c} \rho(\mathbf{k}) = O\left((k_2 - \pi)^{1+\varepsilon}\right),\ (k_2 \to \pi)\ \ \mathbf{k} = (k_1,k_2) \in [0,2\pi)^2,\ \ \varepsilon > 0, \\ \int_{[0,2\pi)^2} \rho(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} < \infty \end{array} \right\}.$$

このとき，次の結果が得られる：

定理 3.4　任意の $\rho_\pm \in \mathcal{D}_\pm$ に対して次が成り立つ：

$$\hat{\psi}_{\pm 1} \in L^2_{\rho_\pm}, \quad \lim_{a \to \pm 1 \pm 0} \|\hat{\psi}_a - \hat{\psi}_{\pm 1}\|_{L^2_{\rho_\pm}} = 0.$$

参考文献

[1] V. Bach, J. Fröhlich, I.M. Sigal, Renormalization group analysis of spectral problems in quantum field theory, *Adv. Math. 137* (1998) 205298

[2] T. Fuda, D. Funakawa, A. Suzuki, Localization of a multi-dimensional quantum walk with one defect, Quantum Inf. Process. (2017).

[3] T.Fuda, D.Funakawa, A.Suzuki, Localization of a One-Dimensional Split-Step Quantum Walk with a Position-Dependent Coin, in preparation.

[4] T. Kitagawa, M. S. Rudner, E. Berg. E. Demler, Exploring topological phases with quantum walks, *Phys. Rev. A* (2010).

[5] 今野 紀雄, 量子ウォーク, 森北出版株式会社 (2014).

[6] H. Ohno, Unitary equivalent classes of one-dimensional quantum walks, *Quantum Inf. Process.* (2016).

[7] E. Segawa, A. Suzuki, Generator of an abstract quantum walk, *Quantum Stud.: Math. Found. 3* (2016) 11-30.