

量子ラビ模型のスペクトル解析

草本舜輔 (Shunsuke KUSAMOTO) *

九州大学大学院 数理学府 数理学専攻修士課程 2 年

概要

量子計算機の基本素子を与える量子ラビ模型は、Rabi により 1937 年に提出された準古典的模型が、1963 年に Jaynes と Cummings により量子化されたものである。2011 年に Braak による大きな進展があったものの依然としてスペクトルの完全な記述は出来ていない。また、量子ラビ模型は、数論的に見ても興味深い対象であり、表現論を用いた研究がなされている。本講演では、量子ラビ模型のハミルトニアン (非可換係数を持つ微分作用素) のスペクトルゼータ関数についてのある性質について紹介したい。

1 導入

ハミルトニアンのスペクトルは、古くから物理 (特に量子力学) 及び数学 (特にスペクトル理論) で研究されている。多くの場合ハミルトニアン H は、 $H = H_0 + H_1$ の形で表される。ここで、 H_0 は、スペクトルがよく分かっている自己共役作用素である。 H が物理量としての意味を持つためには自己共役作用素であることが要求されるが、一般にこれは非自明である。そのため、ハミルトニアンの解析をするためには、自己共役性を示すことと、そのスペクトルの性質を調べるということが重要である。

次に、(量子) ラビ模型の歴史について、廣川 ([H]) に沿って、簡単に振り返っておく。

ラビ模型とは、1937 年の論文 [R] において Isac Rabi により光と物質の相互作用を記述するモデルとして定式化されたものである。これは、準古典的モデルであったが、その後、Jaynes と Cummings ([JC]) により photon 部分も量子化され、**量子ラビ模型 (Quantum Rabi model ; QRM)** が定式化された。QRM のハミルトニアンは、次で記述される。(詳細は次節)

$$H_{\text{Rabi}}/\hbar := \omega a^\dagger a \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2} + \Delta \mathbb{1}_{L^2(\mathbb{R})} \otimes \sigma_z + g \sigma_x \otimes (a^\dagger + a)$$

しかしながら、QRM は積分可能系であることは期待されず、最近になるまで、その**回転波近似 (Rotating Wave Approximation ; RWA)**として定義されたジェインズ-カミングス模型 (Jaynes-Cummings model ; JCM)

$$H_{\text{JC}} := \omega a^\dagger a + \Delta \sigma_z + g(\sigma^+ a + \sigma^- a^\dagger), \quad (\sigma^\pm := (\sigma_x \pm i \sigma_y)/2)$$

* Kyushu University, e-mail : ma217045@math.kyushu-u.ac.jp

が実験的にも十分に満足できる模型だと考えられていた。実際,

$$N_{\text{JC}} := a^\dagger a + \frac{1}{2}(\sigma_z + \mathbb{1})$$

と可換になることから, 可積分性が従う。なお, JCM は固有状態も明示的に記述できる。

ところが, 実験技術が飛躍的に進み, 強結合状態 (g や Δ などのパラメータの関係の大小) においては, JCM では実験結果と理論の整合性が取れない状況が現れて, QRM に向き合う状況が生まれた。そのような折に, ブレークスルーとされる研究が現れた。2011 年, Rabi による定式化から 70 年余り不明であった解析的解の存在を記述して QRM の可積分性を示した Braak による論文 ([B]) である。最近の関連する進展状況については, [XZBL] を参考にされたい。これにより, スペクトルの具体的明示は, 出来ていないが, 次のような分類が可能になった。量子ラビ模型のスペクトル全体を $\text{Spec}(H_{\text{Rabi}})$ と書くと,

$$\text{Spec}(H_{\text{Rabi}}) = \{ \text{正則固有値} \} \coprod \{ \text{例外型非退化固有値} \} \coprod \{ \text{例外型退化固有値} \}$$

と出来る。

また, $g \gg 1$ のとき, 量子ラビ模型のスペクトルは, $\{n - g^2 \mid n \in \mathbb{N}\}$ の形に二重縮退していることが, 数値計算上分かっている。本研究は, 理論的にもこのことが成立していることを示したものである。

2 準備

以下, 主結果を説明するためにいくつか用語や記号を導入する。

2.1 QRM

QRM のハミルトニアンは, 数学的には次のように解釈できる。

Definition 2.1.

$$H_{\text{Rabi}}/\hbar := \omega a^\dagger a \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2} + \Delta \mathbb{1}_{L^2(\mathbb{R})} \otimes \sigma_z + g \sigma_x \otimes (a^\dagger + a)$$

は, Hilbert 空間 $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2 (\simeq L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C}^2) \simeq L^2(\mathbb{R}) \oplus L^2(\mathbb{R}))$ 上の作用素である。

ここで, $\hbar > 0$ は Dirac 定数,

$$a^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \frac{d}{dx} \right), \quad a := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \frac{d}{dx} \right)$$

は, 角振動数 $\omega > 0$ の bosonic mode に対する生成消滅作用素,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

は, 2 準位系に対する Pauli 行列, $g \geq 0$ は 2 準位系と bosonic mode の間の結合強度, $2\Delta \geq 0$ は 2 準位間のエネルギーの差である。

以下、 $\hbar = \omega = 1$ としても一般性を失わない。

Proposition 2.2. 作用素 H_{Rabi} は、 $\mathcal{H}$ 上の下に有界な稠密に定義された自己共役作用素である。

Proof.

$$A := a^\dagger a \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2} + \Delta \mathbb{1}_{L^2(\mathbb{R})} \otimes \sigma_z, \quad B := g \sigma_x \otimes (a^\dagger + a)$$

として、**Kato-Rellich の定理**を適用すれば良い。([A] や [RS-II] を参照) $\square$

Proposition 2.3. 作用素 H_{Rabi} のすべての固有値 λ は、 $\lambda \geq -g^2 - \Delta$ を満たす。特に、 $\tau > g^2 + \Delta$ を満たすような $\tau \in \mathbb{R}$ に対しては、作用素 $H_{\text{Rabi}} + \tau \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$ は非負である。

Proof. [S] の [Proposition2.2] を参照せよ。 $\square$

2.2 スペクトルゼータ関数

Definition 2.4 (スペクトルゼータ関数). $\mathbb{C}$ -Hilbert 空間 V 上の稠密に定義されている線型作用素 $A : V \rightarrow V$ について、 A が離散スペクトルしかもたない場合を考える。 A のスペクトル λ_n を小さい順に並べたものを $\text{Spec}(A)$ とかく。つまり、

$$\text{Spec}(A) = \{\lambda_n\}_{n=1}^\infty, \quad \lambda_n \leq \lambda_{n+1} \quad (n \in \mathbb{N})$$

である。このとき、

$$\zeta_A(s) := \sum_{\lambda \in \text{Spec}(A)} \frac{1}{\lambda^s} = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{\lambda_n^s} \quad (s \in \mathbb{C})$$

を A の**スペクトルゼータ関数 (spectral zeta function)** という。ただし、 $s \in \mathbb{C}$ は意味をなす範囲で定義するものとする。

また、 $\tau \in \mathbb{C}$ に対して、 $A + \tau \mathbb{1}_V$ のスペクトルゼータ関数を特に、 $\zeta_A(s; \tau)$ とかいて、**フルヴィッツ型スペクトルゼータ関数 (Hurwitz-type spectral zeta function)** という。すなわち、

$$\zeta_A(s; \tau) := \zeta_{A+\tau \mathbb{1}_V}(s) = \sum_{\lambda \in \text{Spec}(A)} \frac{1}{(\lambda + \tau)^s}$$

である。

Example 2.5 (調和振動子のスペクトルゼータ関数). $h_0 = a^\dagger a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right)$ で定義される**調和振動子 (harmonic oscillator)** は、 $L^2(\mathbb{R})$ 上の稠密に定義された自己共役作用素としてよく知られている。スペクトルも具体的に明示出来て、

$$\text{Spec}(h_0) = \left\{ n + \frac{1}{2} \right\}_{n=0}^\infty$$

となることから、 h_0 のスペクトルゼータ関数は、

$$\zeta_{h_0}(s) = \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^s} = (2^s - 1)\zeta(s)$$

となる。ここで、 $\zeta(s) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}$ は、リーマンゼータ関数である。

Remark 2.6. スペクトルゼータ関数は、2つの解釈が出来ることについて述べておく。

(1) 作用素 A^{-s} のトレース

A がトレース型作用素のとき、 V のある完全正規直交系 (CONS) $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$ を用いて、

$$\mathrm{Tr}(A) := \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, Ae_n \rangle_V$$

で定まる量を A のトレースという。特に、 A が自己共役でもあるとき、 A の固有値を λ_n とすると、

$$\mathrm{Tr}(A) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n$$

と表せる。

このことを用いて、

$$\zeta_A(s) = \mathrm{Tr}(A^{-s}) = \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, A^{-s}e_n \rangle_V$$

と解釈できる。

(2) 作用素 A の半群 $\{e^{-tA}\}_{t>0}$ のメルン変換

$$\zeta_A(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} t^{s-1} \mathrm{Tr}(e^{-tA}) dt$$

とも解釈できる。

3 主結果

示したいことは、 $g \gg 1$ のとき、 $\mathrm{Spec}(H_{\mathrm{Rabi}}) = \{n - g^2\}_{n=1}^{\infty}$ となることである。

これは、予め g^2 を H_{Rabi} に加えておいたもの、すなわち、

$$H_g := H_{\mathrm{Rabi}} + g^2 \mathbb{1}_{L^2(\mathbb{R})} \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2} = a^\dagger a \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2} + \Delta \mathbb{1}_{L^2(\mathbb{R})} \otimes \sigma_z + g \sigma_x \otimes (a^\dagger + a) + g^2 \mathbb{1}_{L^2(\mathbb{R})} \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2}$$

の固有値が、 $g \gg 1$ のとき、 $\mathrm{Spec}(H_g) = \{n\}_{n=1}^{\infty}$ となることを示すことと同じである。

固有値は、ユニタリ変換で不変であることに注意すると、

$$\begin{aligned} H_g &\sim \begin{pmatrix} a^\dagger a + \sqrt{2}gx + g^2 & O \\ O & a^\dagger a - \sqrt{2}gx + g^2 \end{pmatrix} - \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =: H'_g \\ &\sim \begin{pmatrix} a^\dagger a & O \\ O & a^\dagger a \end{pmatrix} - \Delta \begin{pmatrix} O & e^{-2\sqrt{2}g\frac{d}{dx}} \\ e^{2\sqrt{2}g\frac{d}{dx}} & O \end{pmatrix} =: H''_g \end{aligned}$$

と出来る。ここで、

$$H'_g = U H_g U^{-1}, \quad U := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$H_g'' = V_g H_g' V_g^{-1}, \quad V_g := \begin{pmatrix} e^{-\sqrt{2}g \frac{d}{dx}} & 0 \\ 0 & e^{\sqrt{2}g \frac{d}{dx}} \end{pmatrix}$$

である。よって、以下、 H_g' または H_g'' の固有値を考えれば良い。

Proposition 3.1. H_g' のすべての固有値 λ'_n について、 $\Delta < 1$ のとき、

$$n - \frac{1}{c} \leq \lambda'_n \leq n + \frac{1}{c}, \quad (c > 1)$$

が成立する。

Proof. [A] の [定理 5.19] を改良したものである。

H_g' を Δ を変数とした作用素 $H(\Delta)$ に見做す。すなわち、

$$H(\Delta) = H_0 + H_1(\Delta) := \begin{pmatrix} a^\dagger a + \sqrt{2}gx + g^2 & O \\ O & a^\dagger a - \sqrt{2}gx + g^2 \end{pmatrix} + \Delta \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

とおくと、 $\{H_1(\Delta)\}_{\Delta \in [0, 1]}$ は対称作用素の族で次の 3 条件を満たす。

- (1) すべての $\Delta \in [0, 1]$ に対して、 $D(H_0) \subset D(H_1(\Delta))$ かつ $H_1(0) = O$ である。
- (2) $\Delta \in [0, 1]$ に依存しうる定数 $a(\Delta)$, $b(\Delta) \geq 0$ が存在して、

$$\|H_1(\Delta)\Psi\|_{\mathcal{H}} \leq a(\Delta) \|H_0\Psi\|_{\mathcal{H}} + b(\Delta) \|\Psi\|_{\mathcal{H}}, \quad \Psi \in D(H_0)$$

が成り立つ。

- (3) $a(0) = 0$, $b(0) = 0$ かつ $\Delta \in [0, 1]$ の関数として、 $a(\Delta)$, $b(\Delta)$ は連続である。

実際、 $a(\Delta) = 0$, $b(\Delta) = \Delta$ として成立している。 $\text{Spec}(H_0) = \text{Spec}(a^\dagger a) \cup \text{Spec}(a^\dagger a)$ であることに注意して、 H_0 の重複度 2 の離散固有値 $E_0 \in \mathbb{N}$ を固定する。

このとき、 $\delta := \inf_{\lambda \in \text{Spec}(H_0) \setminus \{E_0\}} |\lambda - E_0| = 1 > 0$ とし、 $c > 1$ に対し、 $\varepsilon := \frac{\delta}{c}$ とおくと、中心 E_0 、半径 ε の円周

$$K_\varepsilon := \{E \in \mathbb{C} \mid |E - E_0| = \varepsilon\}$$

は、 $K_\varepsilon \subset \rho(H_0)$ を満たす。さて、 $K_\varepsilon \subset \rho(H(\Delta))$ となるような条件を考察する。先の $\Delta \in [0, 1]$ と ε に対して、定数

$$r(\Delta) := a(\Delta) + \frac{(E_0 + \varepsilon)a(\Delta) + b(\Delta)}{\varepsilon}$$

を導入すると、実際は $r(\Delta) = c\Delta$ より、 $r(\Delta) < c$ を満たす。このとき、 $H(\Delta)$ は自己共役であり、 $K_\varepsilon \subset \rho(H(\Delta))$ となり、かつ

$$\|(H(\Delta) - E)^{-1} - (H_0 - E)^{-1}\|_{\mathcal{H}} \leq \frac{r(\Delta)}{\varepsilon(1 - r(\Delta))} \dots \textcircled{1}$$

が成り立つ。

また、このとき、

$$P(\Delta) := -\frac{1}{2\pi i} \int_{K_\varepsilon} (H(\Delta) - E)^{-1} dE, \quad E \in K_\varepsilon$$

で定義される作用素は、正射影作用素となることが分かる。ここで、 $P(0)$ は、 H_0 の固有空間 $\text{Ker}(H_0 - E_0 \mathbb{1})$ への正射影作用素であることが分かる。さて、容易に示される不等式

$$\|P(\Delta) - P(0)\| \leq \frac{\varepsilon}{2\pi} \int_0^{2\pi} \|(H(\Delta) - E_0 - \varepsilon e^{i\theta})^{-1} - (H_0 - E_0 - \varepsilon e^{i\theta})^{-1}\| d\theta$$

および、① によって、

$$\|P(\Delta) - P(0)\| < 1$$

を得る。このことから、 $\dim \text{Ran}(P(\Delta)) = \dim \text{Ran}(P(0)) = 2$ を得る。これは、題意の成立を意味する。 $\square$

Theorem 3.2 (主定理). $(0 < \Delta < 1)$ のとき、 $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$ 上の自己共役作用素 $H_g = a^\dagger a \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2} + \Delta \mathbb{1}_{L^2(\mathbb{R})} \otimes \sigma_z + g \sigma_x \otimes (a^\dagger + a) + g^2 \mathbb{1}_{L^2(\mathbb{R})} \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2}$ のスペクトルゼータ関数は、 $g \rightarrow \infty$ のとき、 $\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素 $H_0 = a^\dagger a \otimes \mathbb{1}_{\mathbb{C}^2}$ のスペクトルゼータ関数になる。すなわち、

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \zeta_{H_g}(s; \tau) = \zeta_{H_0}(s; \tau) \quad (s > 1)$$

である。

Proof. 以下、証明の概略を述べる。 $2 \leq s$ と $1 < s < 2$ の場合に分けて考える。

(1) $s \geq 2$ の場合

$$\zeta_{H_g}(s; \tau) = \sum_{\lambda \in \text{Spec}(H_g)} \frac{1}{(\lambda + \tau)^s} = \sum_{n=1}^{\infty} \langle e_n, (H_g + \tau)^{-s} e_n \rangle_{\mathcal{H}} \quad (\{e_n\}_{n=1}^{\infty} : \text{CONS})$$

と解釈し、 $\langle e_n, (H_g + \tau)^{-s} e_n \rangle_{\mathcal{H}}$ を g に依らない可積分関数で上から押さえ、Lebesgue の優収束定理を適用する。

(2) $1 < s < 2$ の場合

$$\zeta_{H_g}(s; \tau) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} t^{s-1} \text{Tr} \left(e^{-t(H_g + \tau \mathbb{1}_{\mathcal{H}})} \right) dt$$

と解釈する。 $\text{Tr} \left(e^{-t(H_g + \tau \mathbb{1}_{\mathcal{H}})} \right)$ の収束については、任意の $\varepsilon > 1$ に対して、

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(e^{-t(H_g + \tau \mathbb{1})} \right) &= \sum_{n=1}^{\infty} e^{-t(\lambda_n + \tau)} \leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\{(1 + \varepsilon)/e\}^{1+\varepsilon}}{\{(\lambda_n + \tau)t\}^{1+\varepsilon}} \dots \textcircled{2} \\ &= \{(1 + \varepsilon)/e\}^{1+\varepsilon} \zeta_{H_g}(1 + \varepsilon; \tau) t^{-1-\varepsilon} < \infty \end{aligned}$$

となることから従う。

ここで、② は、不等式 $e^{-b} \leq (a/e)^a b^{-a}$ ($a, b > 0$) を $a = 1 + \varepsilon$, $b = (\lambda_n + \tau)t$ として用いた。結局の所、

$$\left| \int_0^{\infty} t^{s-1} \text{Tr} \left(e^{-t(H_g + \tau \mathbb{1}_{\mathcal{H}})} \right) dt - \int_0^{\infty} t^{s-1} \text{Tr} \left(e^{-t(H_0 + \tau \mathbb{1}_{\mathcal{H}})} \right) dt \right| \rightarrow 0 \quad (g \rightarrow \infty)$$

となることを示せば良いが, 積分区間を $R > 0$ を用いて $\int_0^R$ と $\int_R^\infty$ に分けて, 今までに示してきたことを適用することで示せる。

□

参考文献

- [R] I.Rabi: Space quantization in a gyrating magnetic field, Phys.Rev., **51** (1937), 652-654.
- [JC] E.T.Jaynes and F.W.Cummings: Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser, Proc. IEEE **51** (1963), 89-103.
- [B] D. Braak: On the Integrability of the Rabi model, Phys. Rev. Lett. **107** (2011), 100401-100404.
- [RS-I] M. Reed, B. Simon: METHODS OF MODERN MATHEMATICAL PHYSICS I: FUNCTIONAL ANALYSIS, Academic Press (2009).
- [RS-II] M. Reed, B. Simon: METHODS OF MODERN MATHEMATICAL PHYSICS II: FOURIER ANALYSIS, SELF-ADJOINTNESS, Academic Press (2009).
- [RS-IV] M. Reed, B. Simon: METHODS OF MODERN MATHEMATICAL PHYSICS IV: ANALYSIS OF OPERATORS, Academic Press (2009).
- [IW] T. Ichinose and M. Wakayama: Zeta functions for the spectrum of the non commutative harmonic oscillators, Commun. Math. Phys. **258** (2005), 637-739.
- [S] S. Sugiyama: Spectral zeta functions for the quantum Rabi models, Nagoya Math. J. **229** (2018), 52-98.
- [XZBL] Q.-T. Xie, H.-H. Zhong, M.T. Batchelor and C.-H. Lee: The quantum Rabi model: solution and dynamics, J. Phys. A: Math. Theor. **50** (2017), 113001.
- [P] A. Parmeggiani: Spectral Theory of Non-Commutative harmonic oscillators; An Introduction, Lecture Note in Mathematics **1992**, Springer (2010).
- [H] 廣川真男: 数物系に向けたフーリエ解析とヒルベルト空間論: 量子力学への誘い, SGC ライブラリ **135**, サイエンス社 (2017).
- [AE-I] 新井朝雄, 江沢洋: 朝倉物理学大系 7 「量子力学の数学的構造 I」, 朝倉書店 (2001).
- [AE-II] 新井朝雄, 江沢洋: 朝倉物理学大系 8 「量子力学の数学的構造 II」, 朝倉書店 (2001).
- [A] 新井朝雄: 朝倉物理学体系 12 「量子現象の数理」, 朝倉書店 (2006).