Lewis-Riesenfeld Invariant の解説

1 Lewis-Riesenfeld Invariant とは

Lewis-Riesenfeld (LR) Invariant とは，時間依存するハミルトニアン $H(t)$ で記述される量子系において，その期待値が時間に対して一定に保たれるエルミート演算子 $I(t)$ のことです [1]．この不変量を用いることで，時間依存シュレーディンガー方程式の解を，不変量の固有状態（力学モード）の重ね合わせとして系統的に表現することが可能になります．

2 数学的定式化

2.1 不変条件

あるエルミート演算子 $I(t)$ が LR 不変量であるための条件は，以下の式で与えられます．

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

ここで，$H(t)$ は系のハミルトニアンです．以降では簡単のため，$I(t)$ の固有値の縮退はないものとする．

2.2 不変量の固有状態とシュレーディンガー方程式の解

LR 不変量 $I(t)$ はエルミート演算子であるため，その固有値 λ_n は実数となり，後で示すように時間によりません．一方，固有ベクトル $|\phi_n(t)\rangle$ は時間に依存します．

$$I(t)\,|\phi_n(t)\rangle = \lambda_n\,|\phi_n(t)\rangle \tag{2}$$

時間依存シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\Psi(t)\rangle = H(t)\,|\Psi(t)\rangle \tag{3}$$

の一般解 $|\Psi(t)\rangle$ は，後で示すように，不変量の固有ベクトル $|\phi_n(t)\rangle$ を用いて次のように展開できます．

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{i\alpha_n(t)}\,|\phi_n(t)\rangle \tag{4}$$

ここで，c_n は初期状態によって決まる時間によらない複素係数です．$\alpha_n(t)$ は Lewis-Riesenfeld 位相と呼ばれ，以下の式で定義されます．

$$\alpha_n(t) = \frac{1}{\hbar}\int_0^t \langle\phi_n(t')|\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t'} - H(t')\right)|\phi_n(t')\rangle\,dt' \tag{5}$$

この位相があるため，$|\phi_n(t)\rangle$ 自身はシュレーディンガー方程式の解ではありませんが，$e^{i\alpha_n(t)}\,|\phi_n(t)\rangle$ という「力学モード」が解の基底を形成します．

2.2.1 不変量の固有値の時間不変性

ここで，LR 不変量の固有値 λ_n が時間によらない定数であることを証明します．固有値方程式 (2) の両辺を時間 t で微分すると，

$$\frac{dI}{dt}\,|\phi_n\rangle + I\frac{d\,|\phi_n\rangle}{dt} = \frac{d\lambda_n}{dt}\,|\phi_n\rangle + \lambda_n\frac{d\,|\phi_n\rangle}{dt}$$

となります（表記の簡略化のため，(t) を省略）．この式の両辺に左から $\langle\phi_n|$ をかけると，

$$\langle\phi_n|\,\frac{dI}{dt}\,|\phi_n\rangle + \langle\phi_n|\,I\frac{d\,|\phi_n\rangle}{dt} = \frac{d\lambda_n}{dt}\,\langle\phi_n|\phi_n\rangle + \lambda_n\,\langle\phi_n|\,\frac{d}{dt}\,|\phi_n\rangle$$

I がエルミート演算子であることから $\langle\phi_n| I = \lambda_n \langle\phi_n|$ であり，また固有ベクトルの規格化条件 $\langle\phi_n|\phi_n\rangle = 1$ を用いると，

$$\begin{aligned}\langle\phi_n| \frac{dI}{dt} |\phi_n\rangle + \lambda_n \langle\phi_n| \frac{d}{dt} |\phi_n\rangle = \frac{d\lambda_n}{dt} + \lambda_n \langle\phi_n| \frac{d}{dt} |\phi_n\rangle \\ \frac{d\lambda_n}{dt} = \langle\phi_n| \frac{dI}{dt} |\phi_n\rangle\end{aligned}$$

となります．ここで不変条件 (1) から $\frac{dI}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H, I]$ を代入すると，

$$\begin{aligned}\frac{d\lambda_n}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle\phi_n| [H, I] |\phi_n\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\langle\phi_n| HI |\phi_n\rangle - \langle\phi_n| IH |\phi_n\rangle) \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\lambda_n \langle\phi_n| H |\phi_n\rangle - \lambda_n \langle\phi_n| H |\phi_n\rangle) \\ &= 0\end{aligned}$$

よって，固有値 λ_n は時間に依存しない定数であることが示されました．

2.2.2 シュレーディンガー方程式の一般解の証明

シュレーディンガー方程式 (3) の一般解が，式 (4) の形で与えられることを証明します．まず，任意の解 $|\Psi(t)\rangle$ を，不変量の固有ベクトル（完全正規直交基底）$\{|\phi_n(t)\rangle\}$ を用いて展開します．

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n d_n(t) |\phi_n(t)\rangle$$

ここで，$d_n(t)$ は時間依存する展開係数です．これをシュレーディンガー方程式 (3) に代入すると，

$$i\hbar \sum_n \left(\dot{d}_n(t) |\phi_n(t)\rangle + d_n(t) \left|\dot{\phi}_n(t)\right\rangle \right) = \sum_n d_n(t) H(t) |\phi_n(t)\rangle$$

となります．この式の両辺に左から $\langle\phi_m(t)|$ をかけると，

$$i\hbar \dot{d}_m(t) + i\hbar \sum_n d_n(t) \left\langle \phi_m \middle| \dot{\phi}_n \right\rangle = \sum_n d_n(t) \langle\phi_m| H |\phi_n\rangle$$

移項すると，$\dot{d}_m(t)$ に関する連立微分方程式が得られます．

$$\dot{d}_m(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n d_n(t) \left(\langle\phi_m| H |\phi_n\rangle - i\hbar \left\langle \phi_m \middle| \dot{\phi}_n \right\rangle \right) \tag{6}$$

ここで，不変条件 (1) の行列要素を計算すると（$m \neq n$ の場合），後で示すように，H の非対角要素は $\langle\phi_m| H |\phi_n\rangle = i\hbar \left\langle \phi_m \middle| \dot{\phi}_n \right\rangle$ となることが示せます．これにより，式 (6) の右辺の和のうち，$n \neq m$ の項はすべてゼロになります．したがって，方程式は非対角項が消え，対角項のみが残る非結合な形になります．

$$\dot{d}_m(t) = \frac{1}{i\hbar} d_m(t) \left(\langle\phi_m| H |\phi_m\rangle - i\hbar \left\langle \phi_m \middle| \dot{\phi}_m \right\rangle \right)$$

ここで，Lewis-Riesenfeld 位相 $\alpha_m(t)$ の時間微分は，

$$\dot{\alpha}_m(t) = \frac{1}{\hbar} \left(i\hbar \left\langle \phi_m \middle| \dot{\phi}_m \right\rangle - \langle\phi_m| H |\phi_m\rangle \right)$$

であるため，$\dot{d}_m(t)$ の方程式は次のように書き換えられます．

$$\dot{d}_m(t) = i\dot{\alpha}_m(t) d_m(t)$$

この微分方程式を解くと，c_m を時間によらない積分定数として，

$$d_m(t) = c_m e^{i\alpha_m(t)}$$

が得られます．これを展開式に代入することで，シュレーディンガー方程式の一般解が式 (4) の形で書けることが証明されました．

2.2.3　ハミルトニアンの非対角要素の導出

不変条件 (1) から，ハミルトニアンの非対角要素に関する重要な関係式を導出します．まず，不変条件を不変量の固有状態 $|\phi_m\rangle, |\phi_n\rangle$ で挟んで行列要素を計算します．

$$\langle\phi_m| i\hbar\frac{\partial I}{\partial t}|\phi_n\rangle - \langle\phi_m|[H,I]|\phi_n\rangle = 0$$

右辺の交換子の項を展開すると，

$$\begin{aligned}\langle\phi_m|[H,I]|\phi_n\rangle &= \langle\phi_m|(HI - IH)|\phi_n\rangle \\ &= \langle\phi_m|HI|\phi_n\rangle - \langle\phi_m|IH|\phi_n\rangle \\ &= \lambda_n\langle\phi_m|H|\phi_n\rangle - \lambda_m\langle\phi_m|H|\phi_n\rangle \\ &= (\lambda_n - \lambda_m)\langle\phi_m|H|\phi_n\rangle\end{aligned}$$

次に，左辺の時間微分の項を計算します．I の行列要素の時間微分 $\frac{d}{dt}\langle\phi_m|I|\phi_n\rangle$ は，

$$\frac{d}{dt}\langle\phi_m|I|\phi_n\rangle = \frac{d}{dt}(\lambda_n\delta_{mn}) = 0$$

です．一方，積の微分法則を適用すると，

$$\frac{d}{dt}\langle\phi_m|I|\phi_n\rangle = \left\langle\dot{\phi}_m\middle|I|\phi_n\right\rangle + \langle\phi_m|\frac{\partial I}{\partial t}|\phi_n\rangle + \left\langle\phi_m\middle|I\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle = 0$$

となります．これを $\langle\phi_m|\frac{\partial I}{\partial t}|\phi_n\rangle$ について解くと，

$$\begin{aligned}\langle\phi_m|\frac{\partial I}{\partial t}|\phi_n\rangle &= -\left\langle\dot{\phi}_m\middle|I|\phi_n\right\rangle - \left\langle\phi_m\middle|I\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle \\ &= -\lambda_n\left\langle\dot{\phi}_m\middle|\phi_n\right\rangle - \lambda_m\left\langle\phi_m\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle\end{aligned}$$

ここで，規格直交条件 $\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn}$ の時間微分を考えると，$\left\langle\dot{\phi}_m\middle|\phi_n\right\rangle + \left\langle\phi_m\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle = 0$ なので，$\left\langle\dot{\phi}_m\middle|\phi_n\right\rangle = -\left\langle\phi_m\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle$ となります．これを用いると，

$$\langle\phi_m|\frac{\partial I}{\partial t}|\phi_n\rangle = -\lambda_n(-\left\langle\phi_m\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle) - \lambda_m\left\langle\phi_m\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle = (\lambda_n - \lambda_m)\left\langle\phi_m\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle$$

となります．以上から，不変条件の行列要素は，

$$i\hbar(\lambda_n - \lambda_m)\left\langle\phi_m\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle - (\lambda_n - \lambda_m)\langle\phi_m|H|\phi_n\rangle = 0$$

と書き直せます．$m \neq n$ かつ固有値が縮退していない（$\lambda_n \neq \lambda_m$）場合，両辺を $(\lambda_n - \lambda_m)$ で割ることができ，

$$\langle\phi_m|H|\phi_n\rangle = i\hbar\left\langle\phi_m\middle|\dot{\phi}_n\right\rangle$$

という関係式が証明されました．

3　断熱系における LR 不変量とその解

ハミルトニアン $H(t)$ の変化が無限にゆっくりである断熱極限において，LR 不変量は非常に簡単な形で近似的に構成できます．

3.1　断熱極限における不変量

断熱過程では，系はハミルトニアン $H(t)$ の瞬時固有状態 $|n(t)\rangle$ に留まり続けます．この性質から，ハミルトニアンのスペクトル分解に似た形で，次のような演算子 $I_{ad}(t)$ を定義します．

$$I_{ad}(t) = \sum_n \lambda_n |n(t)\rangle\langle n(t)| \tag{7}$$

ここで，$|n(t)\rangle$ は $H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle$ を満たす $H(t)$ の瞬時固有状態，λ_n は任意の定数です．

この $I_{ad}(t)$ が不変条件を満たすことを確認します．まず，交換子を計算すると，

$$[H(t), I_{ad}(t)] = \sum_n \lambda_n [H(t), |n(t)\rangle \langle n(t)|] = \sum_n \lambda_n (E_n(t) - E_n(t)) |n(t)\rangle \langle n(t)| = 0$$

となり，常にゼロです．次に，$I_{ad}(t)$ の時間微分を計算すると，

$$\frac{\partial I_{ad}(t)}{\partial t} = \sum_n \lambda_n \left(|\dot{n}(t)\rangle \langle n(t)| + |n(t)\rangle \langle \dot{n}(t)|\right)$$

となります．したがって，不変条件 (1) は，

$$i\hbar \sum_n \lambda_n \left(|\dot{n}(t)\rangle \langle n(t)| + |n(t)\rangle \langle \dot{n}(t)|\right) = 0$$

となります．この式が成立するためには，$|\dot{n}(t)\rangle$ がゼロ，つまり固有状態が時間変化しない必要があります．これは，ハミルトニアンの変化が無限にゆっくりであるという断熱近似の条件 ($|\dot{n}(t)\rangle \to 0$) そのものです．よって，式 (7) で定義される $I_{ad}(t)$ は，断熱極限において LR 不変量となります．

3.2 断熱系における一般解

断熱系では，LR 不変量の固有ベクトルはハミルトニアンの瞬時固有状態 $|n(t)\rangle$ そのものになります．したがって，シュレーディンガー方程式の一般解は式 (4) より，

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{i\alpha_n(t)} |n(t)\rangle$$

と書くことができます．このときの Lewis-Riesenfeld 位相 $\alpha_n(t)$ を計算します．不変量の固有状態として $|\phi_n(t)\rangle = |n(t)\rangle$ を位相の定義式 (5) に代入すると，

$$\begin{aligned}
\alpha_n(t) &= \frac{1}{\hbar} \int_0^t \langle n(t')| \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') \right) |n(t')\rangle \, dt' \\
&= \int_0^t \left(i \langle n(t')|\dot{n}(t')\rangle - \frac{1}{\hbar} \langle n(t')| H(t') |n(t')\rangle \right) dt' \\
&= i \int_0^t \langle n(t')|\dot{n}(t')\rangle \, dt' - \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'
\end{aligned}$$

となります．これは，よく知られた断熱定理における位相と同じです．

- **動的位相（Dynamical Phase）**：$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'$
- **幾何学的位相（Geometric Phase / Berry Phase）**：$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle n(t')|\dot{n}(t')\rangle \, dt'$

これらを用いると，断熱系におけるシュレーディンガー方程式の一般解は，

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \right] \exp\left[i\gamma_n(t) \right] |n(t)\rangle$$

と具体的に書き下すことができます．これは，各瞬時固有状態がそれぞれの動的位相と幾何学的位相を獲得しながら時間発展していく様子を表しています．

4 時間周期系における LR 不変量とその解

ハミルトニアンが時間周期的 $H(t) = H(t+T)$ であり，その Floquet 解が既知である場合，LR 不変量を厳密かつ簡単に構成できます．

4.1 周期系における不変量の構成と証明

Floquet 理論によれば，周期系のシュレーディンガー方程式の解の基底は，準エネルギー ϵ_n と周期的状態 $|u_n(t)\rangle$ を用いて $|\Psi_n(t)\rangle = e^{-i\epsilon_n t/\hbar} |u_n(t)\rangle$ と書けます．この周期的状態 $|u_n(t)\rangle$ は，Floquet 方程式と呼ばれる以下の固有値方程式を満たします．

$$\left(H(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) |u_n(t)\rangle = \epsilon_n |u_n(t)\rangle \tag{8}$$

この既知の Floquet 状態を用いて，LR 不変量を次のように構成します．

$$I(t) = \sum_n \lambda_n |u_n(t)\rangle \langle u_n(t)| \tag{9}$$

ここで λ_n は任意の定数です．この $I(t)$ が LR 不変条件 $i\hbar\frac{\partial I}{\partial t} - [H, I] = 0$ を満たすことを証明します．まず，$I(t)$ の時間微分は，

$$i\hbar\frac{\partial I(t)}{\partial t} = i\hbar\sum_n \lambda_n \left(|\dot{u}_n(t)\rangle \langle u_n(t)| + |u_n(t)\rangle \langle \dot{u}_n(t)|\right)$$

となります．次に，交換子 $[H(t), I(t)]$ を計算します．Floquet 方程式 (8) を変形すると，$H|u_n\rangle = \epsilon_n|u_n\rangle + i\hbar|\dot{u}_n\rangle$ となります．これを用いて，

$$\begin{aligned}
[H, I] &= \sum_n \lambda_n \left(H|u_n\rangle\langle u_n| - |u_n\rangle\langle u_n|H\right) \\
&= \sum_n \lambda_n \left((\epsilon_n|u_n\rangle + i\hbar|\dot{u}_n\rangle)\langle u_n| - |u_n\rangle(\epsilon_n\langle u_n| - i\hbar\langle\dot{u}_n|)\right) \\
&= \sum_n \lambda_n i\hbar\left(|\dot{u}_n\rangle\langle u_n| + |u_n\rangle\langle\dot{u}_n|\right)
\end{aligned}$$

となります．両者を比較すると，

$$i\hbar\frac{\partial I(t)}{\partial t} = [H(t), I(t)]$$

が厳密に成立することがわかります．よって，Floquet 状態から構成した演算子 (9) は厳密な LR 不変量です．

4.2 周期系における一般解

時間周期系では，LR 不変量の固有ベクトルは Floquet の周期的状態 $|u_n(t)\rangle$ そのものになります（$|\phi_n(t)\rangle = |u_n(t)\rangle$）．したがって，シュレーディンガー方程式の一般解は，

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{i\alpha_n(t)}|u_n(t)\rangle$$

と書くことができます．このときの Lewis-Riesenfeld 位相 $\alpha_n(t)$ を計算します．位相の定義式に $|\phi_n(t)\rangle = |u_n(t)\rangle$ を代入すると，

$$\alpha_n(t) = \frac{1}{\hbar}\int_0^t \langle u_n(t')|\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t'} - H(t')\right)|u_n(t')\rangle\, dt'$$

となります．ここで，被積分関数は Floquet 方程式 (8) のエルミート共役から，$-\epsilon_n$ に等しいことがわかります．よって，位相は非常に簡単な形になります．

$$\alpha_n(t) = \frac{1}{\hbar}\int_0^t (-\epsilon_n)dt' = -\frac{\epsilon_n t}{\hbar}$$

これを代入すると，時間周期系におけるシュレーディンガー方程式の一般解は，

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i\epsilon_n t/\hbar}|u_n(t)\rangle$$

と具体的に書き下すことができます．これは，Floquet 理論によって与えられる一般解の表現と完全に一致しており，LR 不変量の理論が Floquet 理論を自然に内包していることを示しています．

5 不変量を用いたハミルトニアンの逆問題工学

LR 不変量の理論は，特定の状態遷移を実現するようなハミルトニアン $H(t)$ を設計する「逆問題工学」に応用できます．これは，まず所望の状態遷移を達成する不変量 $I(t)$ を設計し，その不変量からハミルトニアンを逆算する手法です．

1. **不変量の設計**：初期時刻 $t = 0$ と終状態 $t = t_f$ での状態を指定し，その境界条件を満たすように不変量の固有ベクトル $|\phi_n(t)\rangle$ の時間発展を設計します．不変量 $I(t)$ は，そのスペクトル分解によって定義されます．

$$I(t) = \sum_n \lambda_n |\phi_n(t)\rangle\langle\phi_n(t)|$$

2. **ハミルトニアンの構築**：設計した不変量と，任意に設定できる Lewis-Riesenfeld 位相 $\alpha_n(t)$ から，対応するハミルトニアン $H(t)$ を構築します．これは，時間発展演算子 $U(t) = \sum_n e^{i\alpha_n(t)} |\phi_n(t)\rangle \langle\phi_n(0)|$ をシュレーディンガー方程式 (3) に代入し，$H(t)$ について解くことで得られます．結果として，ハミルトニアンは次のように書くことができます．

$$H(t) = F(t) + i\hbar \sum_n |\partial_t \phi_n(t)\rangle \langle\phi_n(t)|$$

ただし，$F(t)$ は不変量の基底 $\{|\phi_n(t)\rangle\}$ で対角的な演算子であり，以下で定義されます．

$$F(t) = -\hbar \sum_n \dot{\alpha}_n(t) |\phi_n(t)\rangle \langle\phi_n(t)|$$

この手法により，断熱的な過程を任意の短い時間で実現する断熱ショートカット（Shortcut to Adiabaticity）を設計することが可能となります [2].

References

[1] H. R. Lewis and W. B. Riesenfeld, *An Exact Quantum Theory of the Time-Dependent Harmonic Oscillator and of a Charged Particle in a Time-Dependent Electromagnetic Field*, J. Math. Phys. **10**, 1458 (1969).

[2] X. Chen, E. Torrontegui, and J. G. Muga, *Lewis-Riesenfeld invariants and transitionless quantum driving*, Phys. Rev. A **83**, 062116 (2011).