1次元スプリットステップ量子ウォークの Witten指数

和田　和幸*

1　はじめに

本稿は2021年12月に開催された「スペクトル・散乱理論とその周辺」において,「Witten index for 1-dimensional split-step quantum walks under non-Fredholm condition」のタイトルで発表した内容の概要をまとめたものです.証明等の詳しい内容は [9] を参照して頂ければと思います.

本研究は鈴木章斗氏(信州大学),田中洋平氏(信州大学),寺西功哲氏(北海道大学),松澤泰道氏(信州大学)との共同研究に基づきます.

量子ウォーク(QW)は古典ランダムウォークの量子版と称される数理モデルです.量子ウォークには,ランダムウォークでは見られない「局在化」と「線形的広がり」の特徴を持っています.応用の面から物理や工学を始めとする諸分野にも大きな影響を与えています.

本研究は近年物性物理学において盛んに研究されているトポロジカル相の研究に動機付けを持ちます.Kitagawaら [5] は量子ウォークにおけるトポロジカル相を研究するため,スプリットステップ量子ウォーク(SSQW)を提案しました.2相系の設定(原点を境に左右でパラメータが異なっている)の下,SSQWに付随する回転数が0でないときは,いつでも束縛状態が現れる事を説明しました.その後,回転数が保存されているような摂動に対してロバストな束縛状態を実験で観測しました [6].回転数は系のトポロジカルな情報を持っている不変量と考えられており,彼らは回転数に由来する上記の束縛状態の事を「Topologically protected bound states」と呼んでいます.

*八戸工業高等専門学校
National Institute of Technology, Hachinohe College
E-mail:wada-g@hachinohe.kosen-ac.jp

Suzuki は「カイラル対称な QW には超対称量子力学の構造が付随している」という事を指摘し，その一般的な性質を調べました [10]．特に上記で述べた回転数に対応する不変量をフレドホルム指数として捉えました．Fuda-Funakawa-Suzuki[3] では，差分方程式の議論を使い，摂動に対してロバストであり，空間遠方で指数減衰する固有状態が実際に存在する事を示しました．それに続く Suzuki-Tanaka[12], Matsuzawa[7], Tanaka[13] では SSQW のフレドホルム指数が具体的にどのような値を取るのかを明らかにしました．

これまでの研究では，擬エネルギーの 0 付近にギャップがある場合の設定の下で議論が進められてきました．いわゆる，フレドホルム性が成り立つ条件の下での話です．一方で，ギャップが閉じている場合での議論はほとんど進んでいないと思われます．そこで本研究ではギャップが閉じた系の解析の第一歩として，非フレドホルム条件での指数の研究を行いました．フレドホルム指数の拡張として，Witten 指数を採用しその指数公式を明らかにしました．

2　設定と先行研究

本稿では，ヒルベルト空間 $\mathcal{X}$ 上の有界作用素を $\mathcal{B}(\mathcal{X})$, シャッテン p クラス作用素を $S_p(\mathcal{X})$ と表記します．特に，$S_1(\mathcal{X})$ はトレースクラス作用素の全体を表します．更に作用素 A に対して $\sigma(A)$ を A のスペクトルとします．

1 次元 2 状態 SSQW のヒルベルト空間を以下で定めます：

$$\mathcal{H} := l^2(\mathbb{Z}) \oplus l^2(\mathbb{Z}), \quad l^2(\mathbb{Z}) := \left\{ \psi : \mathbb{Z} \to \mathbb{C} \mid \sum_{x\in\mathbb{Z}} |\psi(x)|^2 < \infty \right\}. \tag{1}$$

L を $l^2(\mathbb{Z})$ 上の左シフト作用素として定めます：

$$L : l^2(\mathbb{Z}) \to l^2(\mathbb{Z}), \quad (L\psi)(x) := \psi(x+1), \quad \psi \in l^2(\mathbb{Z}), \quad x \in \mathbb{Z}. \tag{2}$$

a, b, p, q を $l^2(\mathbb{Z})$ 上の掛け算作用素とし，以下の条件を満たすとします．

$$b(x),\ q(x) \geq 0, \quad a(x)^2 + b(x)^2 = 1, \quad p(x)^2 + q(x)^2 = 1, \quad x \in \mathbb{Z}. \tag{3}$$

以上の準備の下，SSQW の時間発展作用素 U を

$$\begin{cases} U & := \Gamma\Gamma', \\ \Gamma & := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & L^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p & q \\ q & -p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & L \end{bmatrix}, \quad \Gamma' := \begin{bmatrix} a & b \\ b & -a \end{bmatrix}. \end{cases} \tag{4}$$

で定めます．Γ と Γ' はユニタリかつ自己共役な作用素です．

Remark 2.1 時間発展作用素 U に現れる a, b, p, q を (3) のように取っても一般性を失わない事は *[8]* の *Corollary 4.4* のユニタリ同値類の結果によります.

以下に述べるユニタリ作用素のカイラル対称性が本研究の土台となります.

Definition 2.1 (Definition 2.1 of [10]) U をヒルベルト空間 $\mathcal{X}$ 上のユニタリ作用素とする．U がカイラル対称性を持つとは，あるユニタリかつ自己共役な作用素 Γ が存在して,

$$\Gamma U \Gamma = U^*.$$

が成立するときをいう.

Lemma 2.1 (Lemma 2.2 of [10]) U をヒルベルト空間 $\mathcal{X}$ 上のユニタリ作用素とする．次は同値である.

1. *U はカイラル対称性を持つ.*
2. *U は二つのユニタリかつ自己共役な作用素の積で表される.*

Lemma 2.1 の 2 つ目の条件と, (4) で定義された U の形から U はカイラル対称性を持ちます．U よりも，U を分解している Γ と Γ' に主眼を置いて．(Γ, Γ') をカイラルペアと呼ぶことがあります.

カイラル対称性の定義が言っている事は,「U と U^* が Γ の下でユニタリ同値」である事を言っています．この帰結として，カイラル対称なユニタリ作用素のスペクトルは実軸に対して対称であることが分かります．U のスペクトルの虚部に着目して，作用素 Q を

$$Q := \frac{U - U^*}{2\mathrm{i}}. \tag{5}$$

と定めます．すぐに分かる事として，$Q\Gamma + \Gamma Q = 0$ が成り立ちます．Q は超対称量子力学の文脈における「超電荷」のアナロジーとなっており，Q を超電荷と呼ぶ事もあります [14].

Γ を恒等作用素ではないユニタリかつ自己共役な作用素とします．すると $\sigma(\Gamma) = \{1, -1\}$ が分かります．Γ と Q の反可換性から，一般に Q は

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & Q_0^* \\ Q_0 & 0 \end{bmatrix}_{\mathrm{Ker}(\Gamma-1)\oplus\mathrm{Ker}(\Gamma+1)}. \tag{6}$$

の表示を持ちます．しかし，この行列表示は $\mathrm{Ker}(\Gamma - 1) \oplus \mathrm{Ker}(\Gamma + 1)$ 上での表示になっているので，Q_0 の具体的な形は見えません．そこで次の命題を用いて Q_0 の形を明らかにさせます.

Proposition 2.1 (Lemma 3.2 of [13]) $\mathcal{H}$ 上の作用素 ϵ を次で定める：

$$\epsilon := \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & L^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{1+p} & -\sqrt{1-p}\\ \sqrt{1-p} & \sqrt{1+p}\end{bmatrix}.$$

このとき，次が成り立つ.

$$\epsilon\Gamma\epsilon^* = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}_{l^2(\mathbb{Z})\oplus l^2(\mathbb{Z})}, \quad \epsilon Q_0\epsilon^* = \begin{bmatrix}0 & Q_{\epsilon_0}^*\\ Q_{\epsilon_0} & 0\end{bmatrix}_{l^2(\mathbb{Z})\oplus l^2(\mathbb{Z})},$$

ここで，$Q_{\epsilon_0} \in \mathcal{B}(l^2(\mathbb{Z}))$ であり，

$$Q_{\epsilon_0} := \frac{\mathrm{i}}{2}\left[\sqrt{1+p}Lb\sqrt{1+p} - \sqrt{1-p}bL^*\sqrt{1-p} - q\{a + a(\cdot+1)\}\right].$$

通常の量子ウォークでは，時間発展作用素 U の解析を行う事がほとんどですが，Q_{ϵ_0} が本研究での主役となる作用素です．以下で見るように，Q_{ϵ_0} は U の ± 1 の固有空間に関する情報を与えてくれます．その事実を紹介するために，フレドホルム指数を思い出しておきます．$A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ がフレドホルムであるとは,「(i) $\dim\ker(A) < \infty$, (ii) $\dim\ker(A^*) < \infty$ (iii) $\mathrm{Ran}(A)$ が閉」の 3 つの条件が成り立っているときを言います．このとき，A のフレドホルム指数を

$$\begin{aligned}\mathrm{ind}(A) &:= \dim\ker(A) - \dim\ker(A^*) &(7)\\ &(= \dim\ker(A^*A) - \dim\ker(AA^*)). &(8)\end{aligned}$$

で定義します．フレドホルム指数の重要な性質として，次の性質を思い出しておきます.

Proposition 2.2 $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ をフレドホルムとする．任意のコンパクト作用素 K に対して $A+K$ はフレドホルムであり，$\mathrm{ind}(A) = \mathrm{ind}(A+K)$ が成り立つ.

つまり，フレドホルム性・フレドホルム指数はコンパクト作用素による摂動に関して不変である事を言っています．次に先行研究に関連して Q_{ϵ_0} のフレドホルム指数について述べていきます．上記のフレドホルムの定義の下，SSQW の場合にフレドホルム性が成り立つ条件は何か，フレドホルム指数は具体的にどの値を取るのかを見ていきます．次の仮定をおきます.

Assumption 2.1 *8* つの実数 $a_\pm, p_\pm, b_\pm, q_\pm$ が存在して，

$$\begin{aligned}a_\pm &:= \lim_{x\to\pm\infty} a(x) \in [-1,1], \quad p_\pm = \lim_{x\to\pm\infty} p(x) \in [-1,1],\\ b_\pm &= \lim_{x\to\pm\infty} b(x) \in [0,1], \quad q_\pm = \lim_{x\to\pm\infty} q(x) \in [0,1].\end{aligned}$$

を満たす.

Theorem 2.1 ([7, 12, 13]) *Assumption 2.1* の下，Q_{ϵ_0} がフレドホルムである必要十分条件は $|p_+| \neq |a_+|$ かつ $|p_-| \neq |a_-|$ である．このとき，次の公式が成り立つ：

$$\mathrm{ind}(Q_{\epsilon_0}) = \begin{cases} \mathrm{sgn}(p_+) - \mathrm{sgn}(p_-) & |p_+| > |a_+|,\ |p_-| > |a_-|, \\ \mathrm{sgn}(p_+) & |p_+| > |a_+|,\ |p_-| < |a_-|, \\ -\mathrm{sgn}(p_-) & |p_+| < |a_+|,\ |p_-| > |a_-|, \\ 0 & |p_+| < |a_+|,\ |p_-| < |a_-| \end{cases} \tag{9}$$

ここで $\mathrm{sgn}(\cdot)$ は符号関数で $\mathrm{sgn}(0) = 1$ とする．

Q_{ϵ_0} のフレドホルム指数は単に SSQW のトポロジカルな情報を反映しているだけでなく，以下のように固有空間の情報を与えてくれます [10].

$$\mathrm{dimker}(U - 1) + \mathrm{dimker}(U + 1) \geq |\mathrm{ind}(Q_{\epsilon_0})|.$$

上の不等式が述べている事は，もし Q_{ϵ_0}の フレドホルム指数が 0 でない場合，U の $+1$ か -1 の少なくとも一方には固有値が存在する事を言っています．フレドホルム指数はコンパクト作用素による摂動に対して不変な量だったので，固有値の存在の情報もコンパクト作用素に対して不変になっています．この事実が Q_{ϵ_0} のフレドホルム指数を求める動機付けの一つとなっています．

3　主結果

「Q_{ϵ_0} がフレドホルム」という条件は，原点にスペクトルギャップが存在する事を仮定しています．本題はここからで,「原点にスペクトルギャップがない場合」はどうなっているのかを考えていきます．スペクトルギャップが無い場合，フレドホルム指数の定義 (7)(8) は意味を持ちません．そこで次のような「良い」指数がないものかを考えてみます：

1. フレドホルムでない作用素に対しても，作用素の特徴を反映するような数値を対応させる事ができる．

2. 作用素がフレドホルムのときにはフレドホルム指数と一致する．

3. その指数はある摂動のクラスに対して不変である．

そのような指数の候補の一つとして，本研究では「Witten 指数」を採用します．Witten 指数は

$$w(A) := \lim_{t \to \infty} \mathrm{ind}_t(A) \tag{10}$$

で極限が存在するときのみ定義します．ここで，

$$\mathrm{ind}_t(A) := \mathrm{Tr}(e^{-tA^*A} - e^{-tAA^*}), \tag{11}$$

であり，$\mathrm{Tr}(\cdot)$ はトレースを表します．作用素 A が $A^*A - AA^* \in \mathcal{S}_1(\mathcal{X})$ のとき，(11) は Well-defined です．Witten 指数とフレドホルム指数との関係は次の通りです．

Proposition 3.1 *[Theorem 3.1 of[2]]* $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ がフレドホルムで $A^*A - AA^* \in \mathcal{S}_1(\mathcal{X})$ のとき，

$$w(A) = \mathrm{ind}(A).$$

Witten 指数は (10) の極限が存在すればよく，更に Proposition 3.1 の事実から我々が望む「良い」指数の一つと言えます．Witten 指数は [2] において，連続版 Dirac 作用素の場合に研究されてきました．本研究も主にこの論文の道筋に沿っています．注意として，$w(\cdot)$ は「トレースクラス摂動に対して不変」である事がフレドホルムの時と異なる部分です [4].

主結果を述べるため，更に次の仮定をおきます．

Assumption 3.1 *Assumption 2.1* に加え，次が成り立つ．

$$\sum_{x\geq 0}[|a(x)-a_+| + |a(-x-1)-a_-|] < \infty, \quad \sum_{x\geq 0}[|p(x)-p_+| + |p(-x-1)-p_-|] < \infty,$$
$$\sum_{x\geq 0}[|b(x)-b_+| + |b(-x-1)-p_-|] < \infty, \quad \sum_{x\geq 0}[|q(x)-q_+| + |q(-x-1)-q_-|] < \infty.$$

$\chi(\cdot)$ を開区間 $(0,1)$ の定義関数とします．次が本研究の主結果です．

Theorem 3.1 *Assumption 3.1* の下，Q_{ϵ_0} がフレドホルムでない必要十分条件は次の *3* つのうち *1* つが成り立つ事である．

1. $|a_+| = |p_+|$ かつ $|a_-| \neq |p_-|$,
2. $|a_+| \neq |p_+|$ かつ $|a_-| = |p_-|$,
3. $|a_+| = |p_+|$ かつ $|a_-| = |p_-|$.

次の公式が成り立つ．

1. $|a_+| = |p_+|$ かつ $|a_-| \neq |p_-|$

$$w(Q_{\epsilon_0}) = \begin{cases} \dfrac{\chi(p_+) - \chi(-p_+)}{2} - 1, & |a_-| < p_-, \\ \dfrac{\chi(p_+) - \chi(-p_+)}{2} + 0, & |p_-| < |a_-|, \\ \dfrac{\chi(p_+) - \chi(-p_+)}{2} + 1, & |a_-| < -p_-. \end{cases}$$

2. $|a_+| \neq |p_+|$ かつ $|a_-| = |p_-|$

$$w(Q_{\epsilon_0}) = \begin{cases} 1 - \dfrac{\chi(p_-) - \chi(-p_-)}{2}, & |a_+| < p_+, \\ 0 - \dfrac{\chi(p_-) - \chi(-p_-)}{2}, & |p_+| < |a_+|, \\ -1 - \dfrac{\chi(p_-) - \chi(-p_-)}{2}, & |a_+| < -p_-. \end{cases}$$

3. $|a_+| = |p_+|$ かつ $|a_-| = |p_-|$

$$w(Q_{\epsilon_0}) = \frac{\chi(p_+) - \chi(-p_+)}{2} - \frac{\chi(p_-) - \chi(-p_-)}{2}.$$

上記の主張か，指数として $3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ を取りうる事が分かります．半整数値を取るときの物理的な意味の検証は今後の課題です．

4 証明の概略

以下では常に $|a_\pm| = |p_\pm|$（非フレドホルムになる条件）を仮定します．最初の方針は Proposition 2.1 で導入された Q_{ϵ_0} を，指数が計算しやすい形に簡約化していくことです．

半直線上のヒルベルト空間 $l^2(\mathbb{Z}_{\geq 0})$ を導入し，$\{\delta_x\}_{x\geq 0}$ を $l^2(\mathbb{Z}_{\geq 0})$ 上の完全正規直交系とします．v を右シフト作用素とし，$\Omega_0 := |\delta\rangle\langle\delta_0|$ と定めます．次が成り立ちます．

$$v\delta_x = \delta_{x+1}, \quad v^*v = 1, \quad vv^* = 1 - \Omega_0. \tag{12}$$

この準備の下，$l^2(\mathbb{Z}_{\geq 0})$ 上の二つの作用素 $F_+(v^*), F_-(v)$ を導入します．

$$F_+(v^*) := \frac{\mathrm{i}}{2}\left[(1+p_+)b_+v^* - (1-p_+)b_+v - 2q_+a_+\right],$$
$$F_-(v) := \frac{\mathrm{i}}{2}\left[(1+p_-)b_-v - (1-p_-)b_-v^* - 2q_-a_-\right],$$

Proposition 4.1 以下の等式が成り立つ．

$$w(Q_{\epsilon_0}) = w(F_+(v^*)) + w(F_-(v)).$$

上の命題から，$w(F_+(v^*))$ と $w(F_-(v))$ を求めればよい事に帰着されます．この命題の証明には,「1 次元系を原点で切って二つの半直線の系とみなす」というアイデアが用いられています [7].

Witten 指数の定義に沿って $F_+(v^*)$ と $F_+(v^*)^*$ との積，$F_-(v)$ と $F_-(v)^*$ との積をそれぞれ考えます．

Lemma 4.1 次の等式が成り立つ.

$$F_+(v^*)^*F_+(v^*) = -\frac{(1-p_+^2)^2}{4}\left[\left\{(v+v^*)+\frac{2a_+p_+}{1-p_+^2}\right\}^2+\frac{2}{1-p_+}\Omega_0\right]+1,$$

$$F_+(v^*)F_+(v^*)^* = -\frac{(1-p_+^2)^2}{4}\left[\left\{(v+v^*)+\frac{2a_+p_+}{1-p_+^2}\right\}^2+\frac{2}{1+p_+}\Omega_0\right]+1,$$

$$F_-(v)^*F_-(v) = -\frac{(1-p_-^2)^2}{4}\left[\left\{(v+v^*)+\frac{2a_-p_-}{1-p_-^2}\right\}^2+\frac{2}{1+p_-}\Omega_0\right]+1,$$

$$F_-(v)F_-(v)^* = -\frac{(1-p_-^2)^2}{4}\left[\left\{(v+v^*)+\frac{2a_-p_-}{1-p_-^2}\right\}^2+\frac{2}{1-p_-}\Omega_0\right]+1.$$

$F_+(v^*)$ と $F_+(v^*)^*$ との積，$F_-(v)$ と $F_-(v)^*$ との積をそれぞれ計算すると，v^2 や $(v^*)^2$ が現れます．そこから，半直線上のラプラシアンの理論を用いたい為に $v+v^*$ の形が登場するように書き換えています．Lemma 4.1 にある 4 つの式の $[\cdots]$ の所だけに着目をして，以下の二つの自己共役作用素を考えます.

$$T(P) := \left\{(v+v^*)-\frac{2P^2}{1-P^2}\right\}^2+\frac{2}{1-P}\Omega_0, \tag{13}$$

$$T_0(P) := \left\{(v+v^*)-\frac{2P^2}{1-P^2}\right\}^2, \quad -1<P<1. \tag{14}$$

これら二つの作用素を導入する事で，$w(F_+(v^*))$ と $w(F_-(v))$ の計算が

$$\mathrm{Tr}(e^{t\alpha_P T(P)}-e^{t\alpha_P T_0(P)}), \quad \alpha_P := \frac{(1-P^2)^2}{4}.$$

の計算に帰着されます.

さて，指数関数型の作用素の差のトレースを計算するには「スペクトルシフト関数 (SSF)」が有効です.

$$\xi(x) := \frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to+0}\mathrm{Arg}\ \Delta_{T(P)/T_0(P)}(x+\mathrm{i}\epsilon), \quad x\in\mathbb{R}, \tag{15}$$

ここで，Arg は $z\in\mathbb{C}\setminus\{0\}$ に対して $\mathrm{Arg}(z)\in(-\pi,\pi]$ となる偏角とします．また，$\Delta_{T(P)/T_0(P)}(\cdot)$ は $(T(P),T_0(P))$ のペアに対する Perturbation Determinant (PD) であり,

$$\Delta_{T(P)/T_0(P)}(z) := \det((T(P)-z)(T_0(P)-z)^{-1}) \tag{16}$$

$$= 1+\frac{2}{1-P}\langle\delta_0,(T_0(P)-z)^{-1}\delta_0\rangle, \quad z\in\mathbb{C}\setminus\mathbb{R}. \tag{17}$$

で定義されます．SSF や PD については [11] の 9 章を参照されるとよいです．SSF を用いる事で

$$\mathrm{Tr}(e^{t\alpha_P T(P)} - e^{t\alpha_P T_0(P)}) = \int_{\mathbb{R}} \left(e^{t\alpha_P x}\right)' \xi(x) dx$$

のようにトレースを積分表示することができ，計算が可能となります．

SSF を明らかにするために，PD を明らかにする必要があります．しかし $T_0(P)$ は 4 階の差分作用素で，PD には $T_0(P)$ のレゾルベントが入っているので，一見 PD の形を明らかにする事は難しいと推測されます．しかし，因数分解と部分分数分解を用いる事で，PD を 2 階の差分作用素の場合に帰着できることが分かりました．以下の命題が本研究の重要な部分です．

Lemma 4.2 任意の $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ に対し，

$$\Delta_{T/T_0}(z) = 1 + \frac{H(\tau_+(z)) - H(\tau_-(z))}{(1-P)\sqrt{z}}, \quad \tau_\pm := 2m_P \pm \sqrt{z}, \quad m_P := \frac{P^2}{1-P^2}$$

ここで複素数の平方根は主値で定めるものとし，$H(z)$ は以下のものである．

$$H(z) := \frac{\sqrt{\frac{z-2}{z+2}} - 1}{\sqrt{\frac{z-2}{z+2}} + 1} = \frac{1}{2\pi} \int_{-2}^{2} \frac{\sqrt{4-t^2}}{t-z} dt, \quad z \in \mathbb{C} \setminus [-2, 2].$$

この後は $z = x + \mathrm{i}\epsilon$ として，$\epsilon \to +0$ の極限を取っていきます．$B(x + \mathrm{i}\epsilon)$ の極限は

$$\lim_{\epsilon \to +0} B(x \pm \mathrm{i}\epsilon) = \begin{cases} \dfrac{-x - \sqrt{x^2-4}}{2}, & x < -2, \\ \dfrac{-x \pm \mathrm{i}\sqrt{4-x^2}}{2}, & -2 < x < 2, \\ \dfrac{-x + \sqrt{x^2-4}}{2}, & x > 2 \end{cases}$$

と ± 2 を境目に値が変わるので，$\tau_\pm(x)$ がいつ $\tau_\pm(x) < -2$, $-2 < \tau_\pm(x) < 2$, $\tau_\pm(x) > 2$ を満たすかを調べる必要があります．このとき，P の値によっても範囲が変わる事に注意が必要です．

いくつかの手続きを経て PD から SSF を計算することができ，SSF は以下の通りになります．$0 < x < 4(1-m_P)^2$ の区間では $\xi(x)$ は非自明な値を取りますが，指数定理には全く影響しないので省略します．指数定理に効いてくるのは $x = 4(1+m_P)^2$ の境界部分だけなので，そこを含む区間の部分だけを記載します．

1. $P = 0$.

$$\xi(x) = \frac{1}{2}, \quad 0 < x < 4.$$

2. $0 < |P| < \dfrac{1}{\sqrt{2}}$.

$$\xi(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi}\mathrm{Arctan}\frac{-2P\sqrt{x} + \sqrt{(2m_P + \sqrt{x})^2 - 4}}{\sqrt{4 - (2m_P - \sqrt{x})^2}},$$
$$4(1 - m_P)^2 < x < 4(1 + m_P)^2.$$

3. $|P| = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$.

$$\xi(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi}\mathrm{Arctan}\frac{-2Px^{1/4} + \sqrt{4 + \sqrt{x}}}{\sqrt{4 - \sqrt{x}}}, \quad 0 < x < 16.$$

4. $\dfrac{1}{\sqrt{2}} < |P| < 1$.

$$\xi(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi}\mathrm{Arctan}\frac{-2P\sqrt{x} + \sqrt{(2m_P + \sqrt{x})^2 - 4}}{\sqrt{4 - (2m_P - \sqrt{x})^2}},$$
$$4(1 - m_P)^2 < x < 4(1 + m_P)^2.$$

$x < 0$ と $x > 4(1+m_P)^2$ では $\xi(x) = 0$ になります．特に後者は詳細に Arctan の分子の正負を詳細に調べなければならず，非自明な主張になっています．SSF を用いると $w(F_+(v^*))$ と $w(F_-(v))$ は次のようになります:

$$\begin{cases} w(F_+(v^*)) &= \dfrac{\chi(p_+) - \chi(-p_+)}{2} \quad \text{if } |a_+| = |p_+|, \\ w(F_-(v)) &= -\dfrac{\chi(p_-) - \chi(-p_-)}{2} \quad \text{if } |a_-| = |p_-|. \end{cases}$$

この公式とフレドホルム指数の結果と Proposition 4.1 を併せると証明完了となります．

5　終わりに

本稿を終えるにあたり，いくつかのコメントを記したいと思います．

1. 今回は 1 次元系を 2 本の半直線の系とみなす事により，以下の二つの作用素を調べる事に帰着させました．

$$F_+(v^*) := \frac{\mathrm{i}}{2}\left[(1 + p_+)b_+v^* - (1 - p_+)b_+v - 2q_+a_+\right],$$
$$F_-(v) := \frac{\mathrm{i}}{2}\left[(1 + p_-)b_-v - (1 - p_-)b_-v^* - 2q_-a_-\right],$$

ここで，$z=e^{ik}$ $(k\in[0,2\pi))$ として次の関数を考えます．

$$
\begin{aligned}
F_+(z^*) &:= \frac{\mathrm{i}}{2}\left[(1+p_+)b_+z^*-(1-p_+)b_+z-2q_+a_+\right],\\
F_-(z) &:= \frac{\mathrm{i}}{2}\left[(1+p_-)b_-z-(1-p_-)b_-z^*-2q_-a_-\right],
\end{aligned}
$$

上二つの関数を，k をパラメータとする曲線として複素平面上に描くと楕円が現れます．フレドホルム性は「楕円が原点を通過しない」という事に対応します．そして「楕円が原点を通過する」ときが非フレドホルム性に対応します．フレドホルム指数は「楕円が原点の周りを何度回転したか」をカウントします．この辺りの事実は Toeplitz 作用素の理論そのものに由来しています．

$F_+(v^*)$ や $F_-(v)$ の Witten 指数と，楕円と原点の関係を眺めると，非フレドホルムのときの Witten 指数はどうやら $-\{$ 原点を通過した回数/2$\}$ の値を返しているように思えます．$F_+(v^*)$ や $F_-(v)$ よりもシンプルな例として，$G(v)=v+1$ を考えます．このとき，$G(z)=z+1$ は 1 を中心とする半径 1 の円に対応し，原点を 1 度だけ通過します．すると Witten 指数として，$w(A(v))=-1/2$ となる事が同様の計算で分かります．この自然な拡張として，n を自然数として $G_n(v):=v^n+1$ と定めれば，$G_n(z)=z^n+1$ は 1 を中心とする半径 1 の円ですが，原点を n 回通過します．すると $w(G_n(v))=-n/2$ が成り立つだろうと予想されます．Witten 指数はフレドホルム指数に比べて幾何学的な情報を豊富に持っていると思われます．

2. 今回 SSF を導入して Witten 指数を計算しましたが，SSF は散乱行列と深い関係があります．今後の研究の方向性として，SSQW から導かれた SSF と U の散乱の情報とどのように結び付いているかを明らかにする事が課題の一つです．

3. 1 次元 SSQW における指数定理は一区切りついたかと思われます．2 次元以上の QW における指数定理はいかなるものかを探究する事が今後の方向性の一つかと思います．

4. 量子ウォークは実装が可能な数理モデルとして知られています．ギャップがある場合の実装は [6] にて成されました．今回研究したギャップが無い場合は実装が可能なのでしょうか？そしてどのような現象が観測されるのでしょうか．

謝辞　本研究は科学研究費補助金（21K13846）の助成を受けております．

参考文献

[1] A. Arai,“Analysis on Fock spaces and Mathematical Theory of Quantum Fields”, World Scientific, (2018).

[2] D. Bollé, F. Gesztesy, H. Grosse, W. Schweiger, B. Simon, Witten index, axial anomaly and Krein's spectral shift function in supersymmetric quantum mechanics, J. Math. Phys., 28 (1987), pp. 1512-1525.

[3] T. Fuda, D. Funakawa and A. Suzuki, Localization for a one-dimensional split-step quantum walk with bound states robust against perturbations, J. Math.Phys. **59**, 082201, 2018

[4] F. Gesztesy and B. Simon, Topological invariance of the Witten index, Journal of Functional Analysis Volume 79, Issue 1, July 1988, Pages 91-102.

[5] T. Kitagawa, M. S. Rudner, E. Berg, E. Demler, Exploring topological phases with quantum walks, Phys. Rev. A. 82 , 033429, 2010.

[6] T. Kitagawa, M.A. Broome, A. Fedrizzi, M.S. Rudner, E. Berg, I. Kassal, A. Aspuru-Guzik, E. Demler, A.G. White Observation of topologically protected bound states in photonic quantum walks Nat. Commun., 3 (1) (2012)

[7] Y. Matsuzawa, An index theorem for split-step quantum walks, Quantum Inf. Process., 19(8), 2020.

[8] Narimatsu, A., Ohno, H. and Wada, K. Unitary equivalence classes of split-step quantum walks. Quantum Inf Process 20, 368 (2021). https://doi.org/10.1007/s11128-021-03323-6.

[9] Y. Matsuzawa, A. Suzuki, Y. Tanaka, N. Teranishi and K. Wada, The Witten index for one-dimensional split-step quantum walks under the non-Fredholm condition, arXiv:2111.04108, 2021.

[10] A. Suzuki, Supersymmetry for chiral symmetric quantum walks, Quantum Inf. Process., 18(12), 2019.

[11] K. Schmüdgen, Unbounded Self-adjoint Operators on Hilbert Space, Graduate Texits in Mathematics, https://doi.org/10.1007/978-94-007-4753-1.

[12] A. Suzuki and Y. Tanaka. The witten index for 1d supersymmetric quantum walks with anisotropic coins.Quantum Inf. Process., 18(12), 2019.

[13] Y. Tanaka, A Constructive Approach to Topological Invariants for One-dimensional Strictly Local Operators, Journal of Mathematical Analysis and Applications Volume 500, Issue 1, 1 August 2021, 125072

[14] B. Thaller, The Dirac Equation, Texts and Monographs in Physics, Springer, Berlin, 1992.