

平成 27 年 3 月 31 日

プログラム名：量子人工脳を量子ネットワークでつなく高度知識社会基盤の実現

PM 名：山本 喜久

プロジェクト名：量子シミュレーション

委 託 研 究 開 発

実 施 状 況 報 告 書（成果）

平成 26 年度

研究開発課題名：

「量子シミュレーションの理論」

研究開発機関名：

「理化学研究所」

研究開発責任者：

（ 永長 直人 ）

当該年度における計画と成果

1．当該年度の担当研究開発課題の目標と計画

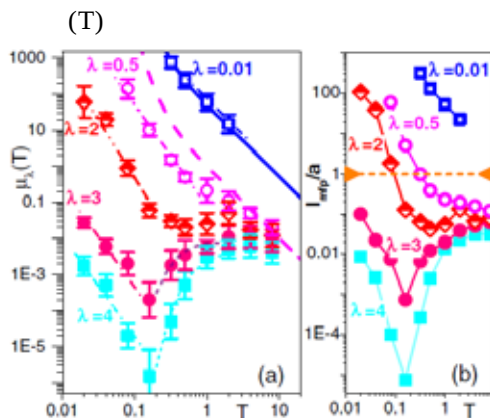
平成 26 年度は、量子シミュレーターの到達目標が、横磁場イジング、ハイゼンベルグ、ボーズハバード、フェルミハバード、4つの基本模型について定量的に設定されることを目標とする。
また、ポラロンの易動度の温度依存性を求めることを目標とする。

2．当該年度の担当研究開発課題の進捗状況と成果

2-1 進捗状況

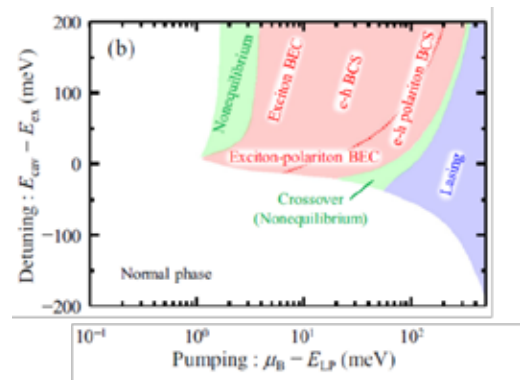
古典コンピューターの現在の限界性能を、横磁場イジング、ハイゼンベルグ、ボーズハバード、フェルミハバードについて調査し、開放系を含むその非平衡量子ダイナミクスが小さいサイズの系を除いてほとんど手が届かないことを結論した。これに基づき、量子シミュレーターの到達目標を、半導体ドット系、超伝導量子ビット系、冷却原子系、それぞれに対して設定することで、実験グループへ指針を与えた。同時に、古典コンピューターによる量子シミュレーションにより、半導体中の量子電荷担体の運動にとって基本的であるポラロンの易動度計算を、ダイアグラムモンテカルロ法によって実行し、その温度依存性に関するバイアスのかからない結果を世界で初めて得た。また、半導体中の電子・正孔と光子の結合系の非平衡状態を理論的に定式化し、レーザー発振と励起子凝縮との関係を明らかにした。

2-2 成果



ダイアグラム量子モンテカルロ法と確率的解析接続法を有限温度に拡張することで、ポラロンの易動度 $\mu(T)$ の温度変化を世界で初めて計算することに成功した。左図はその結果を示しており、粒子—フォノン結合の強さ I によってその温度依存性が大きく異なることを見出した。これにより、温度 T と I の平面で、4種類の多彩な振る舞いが生じることを発見した。(Phys. Rev. Lett. 114, 146401 (2015)).

半導体中の電子・正孔—光結合系に関しては、Keldysh非平衡グリーン関数法を駆使し、光励起中の非平衡量子状態を解析した。これにより、励起子のボーズ凝縮—BCSのクロスオーバーと、レーザー発振との関係が明らかとなり、右図に示すような非平衡相図が、ポンピングの強度（横軸）と光の周波数（縦軸）の平面上で得られた。これは、開放量子多体系の非平衡状態に対して得られた



ほとんど最初の理論的結果である。(Phys. Rev. B91, 115129 (2015))

2-3 新たな課題など

ダイアグラム量子モンテカルロ法を多粒子系、特に多フェルミオン系に拡張するときには負符号問題が発生する。この問題を解決する必要があるが、これに関しては技術的に進展しつつあり、既に予備的な計算結果が出つつある。これをさらに進めて、超伝導の転移温度の予測にまで発展させることが今後の課題である。

3 . アウトリーチ活動報告

特になし