

プログラム名：量子人工脳を量子ネットワークでつなぐ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 27 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：

国立研究開発法人理化学研究所

研究開発責任者：

永長 直人

# I 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

当初、平成 27 年度は単一量子ドット系を記述する単一サイト近藤模型の熱平衡状態に対するダイアグラム量子モンテカルロ法のコード開発・シミュレーションを行い、厳密解等との比較を通じてプログラムの性能評価を行うことを目標にしていたが、年度途中で有限温度及び多フェルミオン系の量子モンテカルロ法について大きな進歩があったことと、量子アニーリングの研究計画追加があったため、(i)有限温度ポーラロン問題と高温超伝導体設計に直接関係する多フェルミオン-フォノン相互作用系のグリーン関数とフォノンスペクトルの厳密解を求めること、(ii)量子アニーリング解析のための量子マスター方程式の導出、を第一目標とした。

## 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

単一サイト近藤模型のダイアグラムモンテカルロ法については、コード開発を行ってきたが、年度内に研究計画の変更がなされたことに伴い、量子アニーリングの研究を新たに開始した。また、量子シミュレーションの中心的研究テーマである高温伝導体の設計という目的に、より直接に関係する有限温度の解析接続法と多フェルミオン系の量子モンテカルロ法において進展があり、この方法論を用いて、長年の懸案であった有限温度におけるポーラロンの易動度の計算と、多電子-フォノン結合系のスペクトル関数の計算が進んだ。また、非平衡量子多体系の研究の一環として、光励起中の定常状態における電流-シフトカレント-の理論的枠組みを発展させた。量子アニーリングに関しては、27 年度内に、従来使われてきた量子マスター方程式をモデルケースについて検討しなおすとともに、より広い汎用性をもつ量子マスター方程式を定式化し、論文にその成果をまとめるまでに至った。

### 2-2 成果

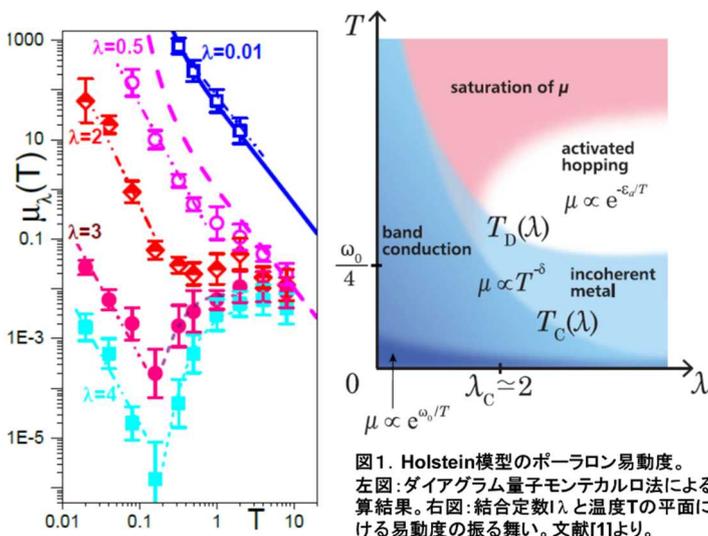


図1. Holstein模型のポーラロン易動度。  
左図:ダイアグラム量子モンテカルロ法による計算結果。右図:結合定数 $\lambda$ と温度 $T$ の平面における易動度の振る舞い。文献[1]より。

ダイアグラム量子モンテカルロ法: (i) 確率的解析接続法を有限温度に拡張することに成功し、ポーラロンの易動度の温度依存性を基本模型であるホルシュタインモデルに対して計算した。図1にその結果を示す。結合定数の強さにより、温度の関数として非単調な振る舞いを示す場合があること、また平均自由行程が格子間隔より短いのに金属的な温度変化を示す場合があること、などの事実を見出し、これらを総合して、5つの異なる領域が、温度-相互作用平面で存在

することを見出した[1]。(ii)量子シミュレーション結果と ARPES の実験結果を組み合わせて LSMO [2]および LAO-STO 界面[3]の電子格子相互作用の詳細を明らかにした。(iii)クーロン相互作用と電子格子相互作用の両者を取り入れて励起子スペクトルを計算し、新しい共鳴構造などを見出した。(iv)有限濃度のフェルミオン系のダイアグラム量子モンテカルロ法を開発し、フェルミエネルギーとフォノンのエネルギーの比を変えながら、電子スペクトルを計算した。これにより電子の有効質量と準粒子ピークの大きさが、断熱極限から非断熱極限へとどのように変化するかを系統的に調べられるようになった。(v) 金属における電子スペクトルとフォノンスペクトルをクーロン相互作用まで含めて自己無動着に決めるという最も基本的な問題に対して研究を進め、従来の GW 近似の限界を見極めるとともに、コーン異常性が実際よりも大きく見積もられていることを見出した[4]。これらは、断熱近似を使わない最初の計算例であり、高い  $T_c$  を持つ超伝導体の設計につながるものである。

**量子アニーリング**：非断熱遷移+開放系の性質をうまく捉えることのできる量子マスター方程式 (QME)を開発することを目指し研究を行った。その結果、Weak coupling 領域ではHamiltonianの時間変化の速さに関わらず、瞬間的固有状態近似を用いたQMEが有効であることを見出し、この枠組みで得られた数値計算結果と Dissipative Landau-Zener (DLZ) model で知られている厳密解との間には、極めて良い一致が得られることを確認した。この成果は論文にまとめてPhysical Review Letters誌に投稿中である。

**非線形光学過程におけるトポロジと量子太陽電池**：光励起下の非平衡定常状態における量子系をKeldysh グリーン関数で記述することと、Floquet バンドのアイデアを組み合わせることで、後者のトポロジ的な性質が非線形光学過程にどのように現れるかを考察し、反転対称性を持たない結晶では、ベリー接続がシフトカレントとして現れることを示した[5]。

1. A. S. Mishchenko et al., *Phys. Rev. Lett.* 114, 146401 (2015).
2. L. L. Lev et al. *Phys. Rev. Lett.* 114, 237601 (2015)
3. C. Cancellieri et al., *Nat. Commun.* 7, 10386 (2016)
4. I.S. Tupitsyn et al., arXiv:1603.06409.
5. T. Morimoto and N. Nagaosa, arXiv:1510:08112 accepted by Science Advances.

## 2-3 新たな課題など

高温超伝導に関しては、クーロン相互作用と電子格子相互作用を両方取り込んだモデルの超伝導相関関数の解析に進む必要があるとともに、モデル計算を超えてより現実的な電子状態を取り入れることが必須である。後者の方向性に関しては、有田亮太郎理研 TL のグループとの連携を進めてゆきたい。

## 3. アウトリーチ活動報告

RIKEN Research Highlights Electrons take a phonon bath (Aug. 28, 2015)

<http://www.riken.jp/en/research/rikenresearch/highlights/8052/>