

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：量子人工脳及び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 28 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

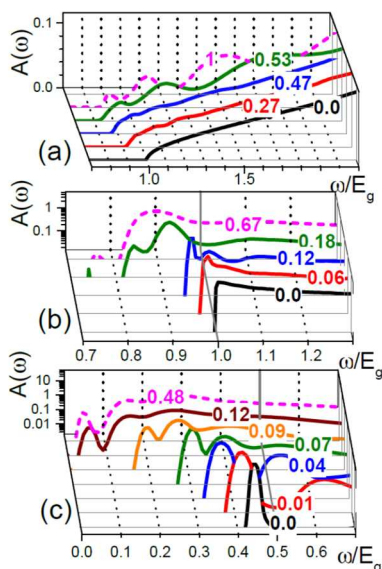
絶縁体における電子・フォノンおよび電子・正孔相互作用の両者を取り入れたモデルの光吸収スペクトルの計算を行う。多電子・フォノン結合系の1粒子および2粒子グリーン関数の計算を行い、非断熱極限から断熱極限へのクロスオーバー領域における光電子分光、光吸収スペクトルの振る舞いを明らかにする。コヒーレントイジングマシンの解析に用いられてきた、量子マスター方程式、伊藤型量子確率微分方程式、複素 Langevin 型確率方程式などの有効性を、コヒーレント XY マシンに対していくつかの極限的な場合につき検証する。

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

励起子スペクトル、つまり絶縁体における電子・フォノンおよび電子・正孔相互作用の計算は完成し、論文執筆および投稿を行った。また、金属におけるクーロン相互作用と電子・フォノン相互作用を自己無動着に取り入れる計算も行い、フォノンの分散およびスペクトル関数を得た。この結果を論文にして出版した。多電子・フォノン結合系については、弱結合から強結合、断熱極限から非断熱極限の広い範囲にわたり計算を行い、1粒子グリーン関数および角度分解光電子分光スペクトルの計算は完成させた。一方、2粒子グリーン関数および超伝導相関関数の計算については、コードの開発途中であり、来年度に引き続き継続して進める。以上、年度当初の計画以外に、確率過程解析接続法の新たな応用として、量子ハイゼンベルク模型の量子モンテカルロ法のデータからスペクトル関数を計算し、スピノンの非閉じ込めに対応する結果を得た。コヒーレントイジングマシンの解析については、量子状態を直接取り扱える量子マスター方程式を用いて解析することを試み、出発点となる Hamiltonian や伊藤型/ストラトのビッチ型量子確率微分方程式の再検証などを行った。

2-2 成果



電子・正孔クーロン引力 U による励起子束縛と、電子・フォノン相互作用 λ による束縛状態間の関係を、ダイアグラム量子モンテカルロ法と確率過程解析接続法を用いた光学スペクトルの計算によって明らかにした。(図1) この図では、上から下へ U を増加させたときの各曲線上に示す λ に対応する光吸収スペクトルが示されている。この結果から、 U と λ は協力して束縛状態の形成に寄与すること、しかし、スペクトル形状は両者の相対的大きさによって異なることが分かった。

金属においても、クーロン相互作用と電子・フォノン相互作用が共存する。この共存は、固体物理の基本的な問題として、フォノンの分散がどのように決定されるかという問題と密接に関わっている。

図1 励起子による光吸収スペクトル

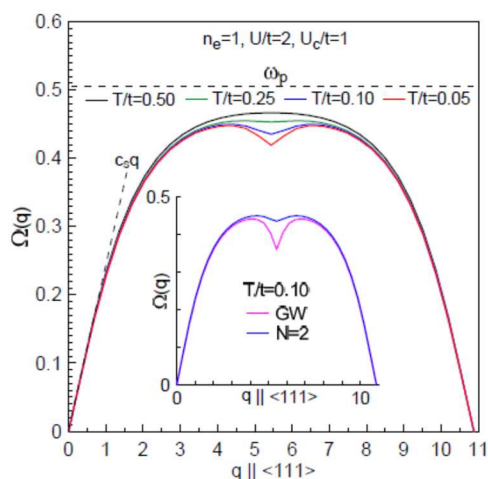


図2 音響フォノンの分散
インセットは従来の近似による結果

多電子・フォノン結合系に関しては、相互作用に強さと電子密度の両者に関して広い範囲のパラメーターでの計算を行い、グリーン関数および角度分解光電子分光（ARPES）に対応するスペクトル関数を得た。図3は、その1例である。フェルミエネルギーをよぎるエネルギー分散とフォノンエネルギーだけ離れた分散とが、はっきりと同定できる。これから、質量の増加やキルクの大きさなど実験と直接比較できる情報が得られる。また、電子濃度を増やしたときに、実効的な電子・フォノン相互作用 λ が増大するか、減少するか、という問題に対して、 λ が小さいときには増大するが、 λ が大きい時には最初は減少し次に増大するという非単調な振る舞いを見出した。

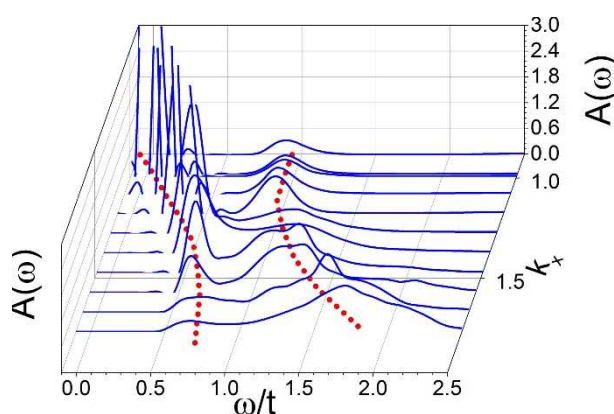


図3 ARPES の計算結果

コヒーレントイジングマシンに関しては、量子マスター方程式でも超演算子形式を用いることで pump field の断熱消去が可能になること、および、量子系同士の "カップリング" を表す超演算子は直感的に導入できること、さらには導出した量子マスター方程式の古典極限を考えると、これまでに使用されてきた古典理論とコンシステントになることなどが明らかになった。

2-3 新たな課題など

超伝導転移温度の計算と直結する2粒子グリーン関数のコード開発および計算を継続して行う。量子ハイゼンベルク模型のスペクトル関数の計算は、スピノンの非閉じ込めと言う30年来の基本的な問題の解決につながるので、より正確な結果を出して結論を出したい。

3. アウトリーチ活動報告

なし