

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 量子多体協力現象の解明と制御

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名(研究機関名・職名は研究参加期間終了時点)：

研究代表者

宮下 精二 (東京大学大学院理学系研究科 教授)

主たる共同研究者

西森 秀稔 (東京工業大学大学院理工学研究科 教授)

羽田野 直道 (東京大学生産技術研究所 准教授)

藤堂 眞治 (東京大学大学院工学研究科 講師)

西野 正理 (物質・材料研究機構 主任研究員)

3. 研究実施概要

本チームは、量子情報処理の基礎となる量子運動、そこでの散逸機構の理論的定式化や新しい方式の提案を行うため、量子状態の能動的な制御をめざし、特徴ある量子多体状態の性質の発見、解明、それらの外部パラメータに対する応答に関する理論的研究を進めた。また、最近実験的に進んできた光格子などでのミクロな量子操作を利用して興味深い多体量子現象の実現をめざす**量子シミュレーション**のテーマ開発に取り組み、その対象として、超固体現象、遍歴電子系での強磁性現象、ポテンシャルトラップによる量子粒子移送の問題などを提案した。また、そこで期待される特異な量子現象について研究を進めた。多様な量子現象が協力的に働いている光誘起現象の相転移の問題についても研究を進めた。量子運動における散逸効果も含めた応答現象の解析、量子非破壊現象の機構解明や量子観測に依る状態制御などについても研究を行った。

また、従来の量子コンピュータとは異なる量子情報処理として、**量子アニーリング**の方法を取り上げ、その理論的基礎づけや具体的な応用について研究を進めた。量子アニーリングは、一種の最適化問題でトンネル効果を利用して状態探索を行い、次第に量子ゆらぎを小さくして最終的に目的とする最適解に到達することを目指す方法である。本 CREST 研究において、量子アニーリングの基礎理論を構築した。1990 年代に提案され、数値計算による実証研究がなされてきたが、量子ゆらぎの制御方法についての理論的な枠組みは構築されてなかった。量子アニーリングにより最適解に到達するための十分条件を検討し、量子ゆらぎの大きさを決定する係数を時間の逆べきで制御すればどのような問題に対しても無限時間の極限で最適解が求められることを証明した。この結果は、量子アニーリングの古典計算機によるシミュレーション、量子計算機によるシュレディンガー方程式の直接的な解、いずれの場合にも成立する極めて一般的な定理である。これにより、量子アニーリングの収束条件については、古典的なシミュレーテッドアニーリングの収束条件と同程度の理論的基礎が確立された。さらに、量子アニーリングと非平衡統計力学におけるジャルジンスキー等式を組み合わせることにより、エネルギーギャップに起因する速度低下なしに最適解に到達できる手法を提案し検証した。

また、外部からの入出力に関して、**開放系の量子力学**が示す非エルミートの振る舞いと量子応答の関係に着目し、相互作用のある量子ドット系の電流電圧特性を厳密に計算する方法論を開発した。まず、量子ドット系の量子散乱状態を厳密に構成した。それを基に、有限電位差が存在する状況での電流の統計力学的期待値を得た。従来の理論的手法としては、ケルディッシュ・グリーン関数を使った摂動計算や、数値計算がある。ここで用いた手法は、これらとは全く独立で正確な手法である。この分野では実験が大きく先行し、対応する理論の開発が遅れている。ここで用いた方法論は、実験結果を再現する理論の構築に向けた大きな成果である。さらに、入出力の間で系での相互作用によるエンタングルメントの発生機構などを明らかにした。また、量子系特有の問

題である観測による状態変化やその効果を利用した量子操作の機構についても明らかにした。他にも、熱電効果の一つであるネルンスト効果において、量子効果がどのように現れるかを定量的に計算し、実験結果を再現することに成功した。

4. 事後評価結果

4-1. 研究の達成状況及び得られた研究成果(論文・口頭発表等の外部発表、特許の取得状況等を含む)

量子統計力学理論のエキスパートが量子情報処理という工学的応用分野の基礎を支える理論の構築に取り組んだ最初のチームであった。原理的、概念的に新しい研究が進んだことは、多数の論文発表が裏付けている。特に、量子シミュレーション(長岡磁性など)、量子アニーリングの研究で興味深い成果が得られた。

主な論文とその要旨を以下にまとめる。

- 1) Phys. Rev. B, 80, 174422 (1-6) (2009), "Nagaoka ferromagnetism in large-spin fermionic and bosonic systems", S. Miyashita, M. Ogata, and H. De Raedt.
要旨: 光格子上で、これまでにない大きなスピンによる遍歴磁性の存在を発見し、量子シミュレーションのテーマとして提案した。
- 2) Journal of Mathematical Physics, 49, 125210 (2008), "Mathematical Foundation of Quantum Annealing", Satoshi Morita and Hidetoshi Nishimori.
要旨: 収束定理や最適スケジュールなど量子アニーリングに関する数学的な基礎付けをまとめた。
- 3) Physical Review B, 80, 245323 1-8 (2009), "Entanglement generation through an open quantum dot: Exact two-electron scattering state in the Anderson model", T. Imamura, A. Nishino and N. Hatano.
要旨: アンダーソンモデルによる散乱状態を厳密に導いた。エンタングルしていない電子対を入射すると、エンタングルした状態のみが透過することを示し、透過率を厳密に計算した。エンタングルメント生成として利用できる可能性を示した。
- 4) Physical Review Letters, 102, 146803 1-4 (2009), "Exact scattering eigenstates, many-body bound states, and nonequilibrium current in an open quantum dot system", A. Nishino, T. Imamura and N. Hatano.
要旨: 量子ドットの模型で厳密に散乱状態を計算し、電流電圧特性を得た。実験に対して理論が遅れている状況で、実験と正確に対応できる理論である。
- 5) Phys. Rev. Lett., 105 050401 (2010), "Quantum Annealing with Jarzynski Equality", M. Ohzeki.
要旨: 量子アニーリングの領域横断的側面を駆使して非平衡統計力学との関連を利用した新しいタイプの結果であり、今後の発展への基礎作りとなることが予想される。
- 6) Phys. Rev. A, 81, 013403 (1-7) (2010), "Symmetry for the nonadiabatic transition in Floquet states", K. Hijii and S. Miyashita.
要旨: 周期的な外場のもとでの量子ダイナミクスで見られる coherent destruction of tunneling と呼ばれる現象と外場の時間反転対称性の関係を明らかにし、フロケの擬エネルギーの反撥擬交差での非断熱遷移の定量的性質を明らかにした。
- 7) Phys. Rev. E, 80, 021128 1-16, (2009), "Master equation approach to line shape in dissipative systems", C. Uchiyama, M. Aihara, M. Saeki and S. Miyashita.
要旨: 外部熱浴と接した系の量子力学的運動のもとでの複素アドミッタンスの正確な表式を求め、単分子磁石の ESR スペクトラムの角度依存性などを求めた。
- 8) Phys. Rev. Lett., 105, 120603 (2010), "Markov Chain Monte Carlo without Detailed Balance", H. Suwa and S. Todo.

要旨:従来の局所的な詳細釣り合いでなく、グローバルな重みづけによってより効率のよいモンテカルロ法が実現されることを一般的に示し、量子モンテカルロ法などに大きな進展をもたらした。

- 9) Phys. Rev. Lett., 98, 247203-(1-4) (2007), "Monte Carlo Simulation of Pressure-Induced Phase Transitions in Spin-Crossover Materials", M. Nishino, K. Boukheddaden, Y. Konishi, and S. Miyashita.

要旨:"電子状態の双安定状態をもつ分子の集合での体積変化が生み出す弾性エネルギーの効果による相転移機構を明らかにした。

- 10) J. Phys. Soc. Jpn., 76, 104003 1-11 (2007), "Conveyance of Quantum Particles by a Moving Potential Well", S. Miyashita.

要旨:トラップポテンシャルによる量子粒子移送における非断熱遷移について相反する2つの要素を明らかにし、それらの間の最適化問題を論じた。

主な受賞リストを以下にまとめる。

1. 西森秀稔(東工大): 第 52 回仁科記念賞『ランダムスピン系における「西森線」の発見』(2006 年)
2. 鈴木 正(東工大): 第 1 回日本物理学会 若手奨励賞(領域 11) (2007 年 9 月)
3. 西野晃徳(東大): 第 4 回日本物理学会若手奨励賞(領域 11) (2010 年)
4. 大関真之(東工大): 手島記念賞博士論文賞 (2010 年 3 月)
5. 羽田野直道(東大): 第 14 回久保亮五記念賞 『非エルミート量子力学の方法による非平衡量子現象の研究』 (2010 年 10 月)

4-2. 研究成果の科学技術や社会へのインパクト、戦略目標への貢献

このチームは、領域の若手研究者の育成に大きく貢献している。優秀な若手研究者が育っていることは、本プロジェクト成果の重要な部分として評価すべきものである。また、チームリーダーは、国際ワークショップを組織運営し、国内外の研究者間の交流を図ると共に、研究成果の外部発信に努めた。今後は、この領域の専門家の枠を超えたより広い範囲への情報発信(アウトリーチ活動)を行っていくことを期待する。

4-3. 総合的評価

量子統計力学のトップ研究者が、量子情報処理技術を研究開発している実験家集団からなる本領域に参加したことは極めて有意義であった。将来の研究方向をリードする新たなスキームや理論が提示され、領域全体が刺激を受けた。今後の量子シミュレーションの研究の発展が楽しみである。