

「量子情報処理システムの実現を目指した新技術の創出」
平成 17 年度採択研究代表者

宮下 精二

東京大学 大学院理学系研究科・教授

量子多体協力現象の解明と制御

1. 研究実施の概要

我々のグループでは、量子状態の能動的な制御をめざし、特徴ある量子状態の性質の発見、解明、さらには外部パラメータの変化に対する応答の理論について研究を進め、量子情報操作の方法の開発に向けて研究を進めている。さらに、これまでの成果を踏まえ、光格子系や分子磁性体など制御性に優れた系における量子操作の具体的な例についての考案を進めている。研究の進捗状況・成果は下記の通りである。

宮下グループでは、散逸効果も含めた量子ダイナミクス、応答現象の解析、量子シミュレーションの対象として、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に取り組み、さらには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や、量子アニーリングの有効な対象としての相互作用の競合する系での緩和現象についても研究を進めている。

西森グループでは、昨年度量子モンテカルロ法による量子アニーリングの収束条件を求め、今年度は、実時間シュレディンガー方程式による量子アニーリングの収束時間を調べた。さらに、収束の加速法も研究した。今後は、一量子アニーリングと量子断熱計算との類似性を活用して、新たな量子計算アルゴリズムの開発に向けて研究を進めている。

羽田野グループでは、量子情報処理システムでのシグナル取り出しのために、構成要素であるデバイスとプローブの強い結合に関する理論を展開している。外界と強く結合した系(具体的に意識しているのは導線と強く結合したメゾスコピック系)における共鳴状態について議論し、共鳴状態についての数学的考察や、共鳴状態を求めるための新しい数値計算方法などを開発した。今後、系の内部に強い相互作用が存在する場合に研究を進めている。

2. 研究実施内容

19年度の具体的な研究内容と成果は以下のとおりである。

東大宮下グループ

(1) 量子操作の具体的な対象として、量子状態の制御に関してポテンシャルによる量子粒子の移送に関する研究を行った。特に、ポテンシャルエネルギーが異なる領域の間での粒子移送は、移動による非断熱遷移とトンネル効果による逃散現象の競合のため最適な移動速度があることを具体的に示し論文として発表した。また、そこで移動の際の加速の仕方の最適化法は、羽田野グループで研究されている共鳴状態や西森グループで明らかにされている操作初期での非断熱現象と深い関連があることがわかり、統一的な理論解析を進めている。また、ポテンシャル内の粒子数制御に関する研究に関しても研究中である。

(2) 光格子にトラップされた粒子系での興味深い現象の候補として、遍歴電子系での磁性に関する長岡強磁性と非磁性のモット絶縁体状態の間を断熱的に変化させる方法を考案し、学会発表を行い、さらにこれまで議論されていなかった大きなスピンを持つ粒子系での遍歴磁性の性質を明らかにし、光格子系における新しい現象として提案し、それに関する論文を準備中である。

(3) 散逸がある系での量子マスター方程式の定式化を行い、さらに ESR や NMR の線形に関する理論を展開した。また、量子ダイナミクス・量子応答に関する、国際、国内会議を開催し、そこでそれらの成果を発表するとともに、関連する話題に関する調査をおこなった。これらの成果の論文を投稿準備中である。

(4) 量子シミュレーションの対象としても興味深い、対角秩序(固体成分)と非対角秩序(超流動成分)の共存に関する超固体について研究を進め、特に、これまで研究が進んでいなかった有限温度での逐次相転移の様子を明らかにし、そこで重要になる両秩序間の競合の機構について明らかにした。これらの成果は、国内外の会議で発表し、論文を準備中である。

(5) 量子スピン系における新しいタイプの量子現象についても研究を進めている。励起状態としてスピンの大きさが 1 と $1/2$ からなる交替鎖において励起状態の構造がサイズによって変わることを発見し論文を発表した。また、量子系の集団運動であるスピン波の伝搬に関する直接量子ダイナミクス法による研究を行い、磁壁での散乱の様子やドメイン構造自身のダイナミクスの研究を行い論文発表した。量子相関を持つ系での観測問題に関する考察を行い、古典系においても見かけ上量子相関と同様な観測結果が得られうることを具体的な例で示し論文発表した。また、量子アンニリングを用いた情報処理の方法を考案し、国際会議で発表し、論文を準備中である。

(6) 多体相互作用系の緩和現象の研究として、系の緩和が必ずしも平衡状態に単調に向かうのではないことを示し、その原因が相互作用の競合にあることを明らかにして論文発表した。また、フラストレート系の緩和現象の特徴としてエントロピーが重要な役割をする場合として、カゴメ格子反強磁性体での低温での緩和機構を明らかにし論文発表した。

(7) 最近、光誘起相転移の舞台として注目されているスピנקロスオーバー物質での相転移に関して、格子変形に由来する弾性エネルギー起因の機構を発見し、国際会議での発表や、論文発

表をした。この系は多様な量子現象が協力的に働いており、そこでの量子操作の可能性について光誘起現象をはじめとして、理論構築を進めている。

(8) 量子熱輸送や電子輸送現象における揺らぎに注目しその解析をした。完全計数統計の枠組みを用い、流れに関する任意の次数のキュムラントを生成する生成汎関数を考察し、「揺らぎの定理」を含んだより一般的な対称性を導出した。それを用いると、輸送係数間に普遍的な関係式を導くことができる。一般に揺らぎが大きいと期待されるメソスコピックスケールの量子輸送現象においては、特に重要になる普遍式であり、現在の実験技術を考えると、必ず観測も可能であると期待される。これらの普遍的な関係式は、電子の流れやスピン流を操作する時でも、定常的な状態では、常に成り立たなければならない関係であり、効率などを考察する上で重要である。

(9) キュービット操作に重要になる交流外場での動的量子現象を研究した。重要な現象として、コヒーレントトンネル消失現象(coherent destruction of tunneling)と、動的局在現象(Dynamic localization)を考察した。この2つの現象はこれまで別々に議論されてきた現象であるが、この2つが実は同じものであることを示した。これにより、これらの奇妙な量子動的現象の深い理解がなされた。

(10) 重要な量子系の非断熱遷移であるランダウ-ツェナー遷移における量子散逸の効果も研究し、環境の温度が絶対零度である時の厳密な遷移確率を導出した。この公式によれば、外界とキュービットの結合が一般に複雑な時には、実験的に遷移確率を測定することにより、量子散逸の強さを定量的に測定することができることになる。また、結合が特別な場合には、遷移確率が無散逸の場合と同じになってしまうという、直観に反する現象も見出された。

(11) 東大・工・理工の藤堂眞治氏と協力のもとで、大規模な数値的解析法の開発を行っている。特に、長距離相互作用するスピン系に対して、従来のスピン数の二乗に比例する計算時間を必要とするものに対し、スピン数に比例した時間で効率的にシミュレーション手法を開発した。この手法によって、磁気双極子相互作用のあるイジング模型の強磁性状態への臨界指数が平均場的であることを示した。これらの成果を国際会議で発表し、投稿準備中である。また、逆二乗相互作用をもつ横磁場量子イジング模型などにも適用し、それらの成果を国際会議で発表し、一部の結果は論文に投稿した。さらに、スピンの自由度と格子の自由度の強く結合したスピン・パイエルス系について、分散をもつ量子的なフォノンにおける相互作用の長距離性を正しく取り込んだ量子モンテカルロ法の定式化を行ない、フォノンの分散の効果を明らかにした。

(12) 物質・材料研究機構の西野正理氏と協力して、スピנקロスオーバー系の相転移の研究を遂行した。特に、これまでのスピנקロスオーバー(SC)相転移のモデルの研究では、スピン様モデルでの解析が主体であった。しかし、モデルのパラメータは現象論から導入されたものであったため、パラメータの起源が不明瞭であり、実在の物質系からパラメータの値を抽出するのが困難であった。そこで、SC系で重要な弾性相互作用に基づくモデルの構築を行い、そのモデルに対する分子動力学法による物性の解析方法を開発した。これにより個々の物質系のポテンシャルなどの情報をモデルのパラメータに反映させる方法論が得られ、相転移の詳細を解析することが可能となった。

東大羽田野グループ

(13) 開放系の量子輸送現象に関して非エルミートハミルトニアンを用いて研究を進めてきており、いわゆる共鳴状態に関して一般的な定式化に成功し、多くの系における量子ダイナミクスをその観点から明らかにしようとしている。まず、共鳴状態の定義に遡って定式化を議論した。開いた量子系の共鳴状態は古くから議論があるが、現在でも未解決の問題が山積している状況である。共鳴状態をシュレディンガー方程式の固有状態として定義する方法について検討し、共鳴状態においても、多少の変更のもとで粒子数保存則が成り立ち、確率解釈が可能であることを示した。共鳴状態は、そのエネルギー固有値に虚部があるため、粒子数保存則が成り立たないと思われがちであるが、共鳴状態が固有状態として物理的に解釈できることを明らかにした。

(14) 複素エネルギー平面上で共鳴状態の位置を求めるための新しい数値計算手法を提案した。一般には、「複素回転法」と呼ばれる解析接続による計算法が使われているが、使えるポテンシャルに限界があったり、物性理論でよく用いられる格子系には不向きであったりした。それに対して、格子系で問題なく機能し、手軽に素早く共鳴状態を求められる手法を開発した。以上の一般論の他に、具体的な系で2つの新しい成果を得た。一つは、導線がチャンネルを2つ持っている系についての議論である。2つのチャンネルのエネルギーバンドが重なっているときには、上側のバンドの下側と、下側のバンドの上側に、非常に長寿命の(実質的には束縛状態と言ってもよいレベルの)共鳴状態が、広いパラメータ領域に亘って出現することを明らかにした。

(15) メゾスコピック系のコンダクタンスに現れる非対称ピーク(ファノ・ピーク)についての議論である。ある構成のメゾスコピック系において、コンダクタンスを全ての束縛状態・共鳴状態・反共鳴状態に関する和のみで表す公式を新たに導いた。その公式から、非対称ピークは、束縛状態と共鳴状態の間の干渉や、共鳴状態間の干渉から起こるという物理的説明ができることを示した。

東工大西森グループ

(16) 実時間シュレディンガー方程式に従って量子アニーリングを実行した場合、横磁場を時間のべきに比例して減衰させると最終的な収束が保証されることを示した。べき減衰則が、量子モンテカルロ法による量子アニーリングの場合にも収束条件として得られることが、昨年度の研究で明らかになっている。量子モンテカルロにおける時間発展と、シュレディンガー方程式による時間発展は本質的に異なるものであるにもかかわらず、量子アニーリングの収束条件としては、横磁場に関して同一の時間依存性が導かれるのは、極めて非自明な結果であり、興味深い。また、量子アニーリングを有限時間で行った場合の残留誤差を低減する方法についても研究した。その結果、アニーリング開始時と終了時において、横磁場の時間微係数が 0 になるように選ぶと、残留誤差のオーダーが下がることを示した。さらに、状態探索を制御する量子ゆらぎの選び方として、横磁場だけでなく横方向の強磁性的相互作用を加えると、問題によっては、励起状態と基底状態のエネルギーギャップが拡大されて、最適解(最終的な基底状態)への到達確率が大きく改善される例があることを示した。

3. 研究実施体制

(1)「東京大学」グループ

① 研究者名: 宮下 精二 (東京大学)

② 研究項目

- ・量子相互作用による動的現象の理論的研究
- ・多体系における導線の自己エネルギー

(2)「東京工業大学」グループ

① 研究者名: 西森 秀稔 (東京工業大学)

② 研究項目

- ・量子効果を用いた情報処理・記憶機構の理論的研究

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

A. F. Albuquerque, F. Alet, P. Corboz, P. Dayal, A. Feiguin, L. Gamper, E. Gull, S. Guertler, A. Honecker, R. Igarashi, M. Koerner, A. Kozhevnikov, A. Laeuchli, S.R. Manmana, M. Matsumoto, I.P. McCulloch, F. Michel, R.M. Noack, G. Pawłowski, L. Pollet, T. Pru, The ALPS project release 1.3: open source software for strongly correlated systems, J. Mag. Mag. Mat. 310, 1187 (2007)

S. Tanaka and S. Miyashita, Slow relaxation processes in Ising-like Heisenberg kagome antiferromagnets due to Macroscopic degeneracy in the ordered state, J. Phys. Cond. Matt. 19, 145256 (2007)

T. Obuchi, H. Nishimori and D. Sherrington, Phase diagram of the p-spin interacting spin glass with ferromagnetic bias and a transverse field in the infinite-p limit, J. Phys. Soc. Jpn. 75, 054002 (2007)

S. Suzuki, H. Nishimori and M. Suzuki, Quantum annealing of the random-field Ising model by transverse ferromagnetic interactions, Phys. Rev. E 75, 051112 (2007)

S. Yuan, H. De Raedt and S. Miyahsita, Domain-wall dynamics near a quantum critical point, Phys. Rev. B 75, 184305 (2007)

M. Nishino, K. Boukheddaden, Y. Konishi, and S. Miyashita, Simple Two-Dimensional Model for the Elastic Origin of Cooperativity among Spin States of Spin-Crossover Complexes, *Phys. Rev. Lett.* 98, 247203–(1–4) (2007)

A. Nishino and N. Hatano, Resonance in an Open Quantum Dot System with a Coulomb Interaction: a Bethe–Ansatz Approach, *J. Phys. Soc. Jpn.* 76, 063002 (2007)

S. Morita and H. Nishimori, Convergence of quantum annealing with real-time Schrodinger Dynamics, *J. Phys. Soc. Jpn.* 76, 064002 (2007)

K. Saito, M. Wubs, S. Kholer, Y. Kayanuma, P. Hanggi, Dissipative Landau–Zener transitions of qubits: bath-specific and universal behavior, *Phys. Rev. B* 75, 214308 (2007)

H. Kitatani, H. Nishimori and A. Aoki, Inequalities for the local energy of random Ising models, *J. Phys. Soc. Jpn.* 76, 074711 (2007)

S. Miyashita, S. Tanaka and M. Hirano, Non-monotonic Relaxation in Systems with Reentrant Type Interaction, *J. Phys. Soc. Jpn.* 76, 083001 (2007)

M. Fujinaga and N. Hatano, The Entanglement of the XY Spin Chain in a Random Magnetic Field, *J. Phys. Soc. Jpn.* 76, 094001 (2007)

S. Tanaka and S. Miyashita, Slow Relaxation of Spin Structure in Exotic Ferromagnetic Phase of Ising-like Heisenberg Kagome Antiferromagnets, *J. Phys. Soc. Jpn.* 76, 103001 (2007)

S. Morita, Faster Annealing Schedules for Quantum Annealing, *J. Phys. Soc. Jpn.* 76, 104001 (2007)

S. Miyashita, Conveyance of quantum particles by a moving potential-well, *J. Phys. Soc. Jpn.* 76, 104003 (2007)

H. De Raedts, K. De Raedts, K. Michielsen, K. Keimpema and S. Miyashita, Event-based computer simulation model of Aspect-type experiments strictly satisfying Einstein’s locality conditions, *J. Phys. Soc. Jpn.* 76, 104005 (2007)

T. Nagao and K. Saito, Semiclassical Approach to Parametric Spectral Correlation with Spin $1/2$,

J. Phys. A: Math. Theor. 40, 12055 (2007)

K. Saito and A. Dhar, Fluctuation Theorem in Quantum Heat Conduction, Phys. Rev. Lett. 99, 180601 (2007)

K. Takahashi, Quantum fluctuations in the transverse Ising spin glass model: A field theory of random quantum spin systems, Phys. Rev. B 76, 184422 (2007)

H. Nakamura, N. Hatano, S. Garmon and T. Petrosky, Quasibound States in the Continuum in a Two Channel Quantum Wire with an Adatom, Phys. Rev. Lett. 99, 210404 (2007)

M. Ohzeki, Multicritical Points of the Potts Spin Glasses on the Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 114003 (2007)

S. Mohakud, S. K. Pati and S. Miyashita, Size-dependent low-energy excitations in an alternating spin-1/spin-1/2 antiferromagnetic chain: Spin-wave theory and density-matrix renormalization-group studies, Phys. Rev. B 76, 014435 (2007)

M. Ohzeki, Multicritical Points of the Potts Spin Glasses on the Triangular Lattice, Physica E (Low dimensional Systems & Nanostructure) 40, 394-397 (2007)

S. Miyashita, Y. Konishi, M. Nishino, H. Tokoro, and P. A. Rikvold, Realization of the mean-field universality class in spin-crossover materials, Phys. Rev. B 77, 0144105 (2008)

Y. Kayanuma and K. Saito, Dynamical Localization, Coherent destruction, and Landau-Zener transition, Phys. Rev. A 77, 010101(R) (2008)

Y. Konishi, H. Tokoro, M. Nishino, and S. Miyashita, Monte Carlo simulation of pressure-induced phase transitions in spin-crossover Materials, Phys. Rev. Lett. 100, 067206 (2008)

K. Sasada and N. Hatano, Calculation of the Self-Energy of Open Quantum Systems, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 025003 (2008)

R. Inoue and T. Takenawa, Tropical spectral curves and integrable cellular automata, International Mathematics Research Notice, 2008, 1-27(rnn019) (2008)

M. Machida, J. Goryo and N. Hatano, Transient Oscillation of Currents in Quantum Hall Effect of Bloch Electrons, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 024713 (2008)

M. Saeki, Relaxation method and TCLE method of linear response in terms of thermo-field dynamics, Physica A 387, 1827 (2008)

N. Hatano, K. Sasada, H. Nakamura and T. Petrosky, Some Properties of the Resonant State in Quantum Mechanics and Its Computation, Prog. Theor. Phys. 119, 187 (2008)

Y. Matsuda, H. Nishimori and K. Hukushima, Distribution of Lee-Yang zeros and Griffiths singularities in the $\pm J$ model of spin glasses, J. Phys. A (to be published)