

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

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、量子状態操作の方法の開発、さらに量子シミュレーションや量子アニーリングなど新しいタイプの量子情報操作に関する研究を進めている。特に、光格子系や分子磁性体など制御性に優れ、実験的にも研究が進んでいる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。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、さらに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んでいる。さらに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ている。西森グループでは、量子アニーリング法の開発に取り組み、この方法の収束条件など基礎的な性質を明らかにするとともに、具体的な方法の応用の際に現れる種々の量子ダイナミクスの特徴を明らかにした。羽田野グループでは、デバイスとプローブ（具体的には導線と強く結合したメゾスコピック系）が強く結合した系について研究を進め、透過係数における量子効果や共鳴状態の構造を明らかにし、さらに多体系の散乱制御に研究を進めている。

2. 研究実施内容

20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) 光格子の上での粒子操作、あるいは半導体の上での電子操作などで重要になる**ポテンシャル井戸による粒子位置の制御**に関する研究も遂行中である。特に、移動の始まりでの突然操作をはじめることによる非断熱遷移と状態変化の際のパラメー

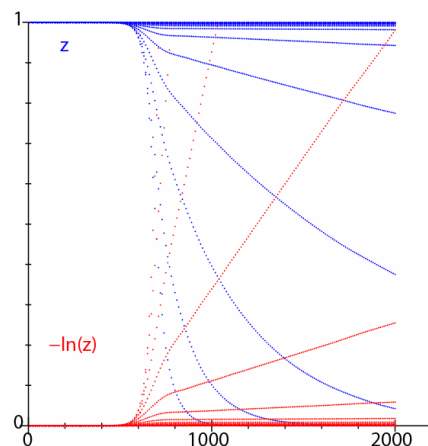


図 1

タ加速によって生じる非断熱遷移の二つのタイプが存在（図1）する問題は、西森グループの研究で調べられた量子アニーリングの外場操作における非断熱変化でも発見され、量子制御の最適化問題において一般的に現れる問題であることが明らかになった。この問題を羽田野グループが研究を進めている共鳴状態の固有値問題として定式化すべく研究を進展している。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。この問題は、光格子などにトラップされた粒子が格子を作っているレーザー位置の変化によってどのように振る舞うか実験可能であり、実験的な検証に向けての提案を考察中である。

- (2) 量子ダイナミクスで重要な役割をするレベル交差でのエネルギーギャップのパラメータ依存性に関して、一軸性異方性をもつ単分子磁石においてギャップが横磁場の大きさによって変化する興味深い現象をスピンの対称性から説明し、さらに高次の異方性の効果を詳しく調べた結果、ギャップの外場依存性にこれまで知られていなかった量子効果が存在することを発見した。
- (3) また、光格子での「量子シミュレーション法の実現」のテーマとしても重要なものになりうる次の二つのテーマに関して研究を進めた。(3-1)まず、**長岡強磁性**の問題では、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ためには粒子を取り除く操作が必要である。従来この変化に関する考察がなかったが、具体的な方法を提案し、そのプロセスでの動的変化に関する理論的な定式化を行った。また、そのようにして実現される状態は、全スピンは最大であるが磁化自身は0であるいわゆる Dicke 状態であることを指摘し、その状態の特徴である超放射の効果がどのように現れるかについて考察し、実験への提案を準備中である。さらに、光格子系では、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**が実現される。特に、ボース粒子系の磁性はこれまでにない全く新奇なものであることを指摘した。そのような系の性質を明らかにし、さらにボース粒子による磁性なども含めて光格子系における新しい現象として研究を進めている。(3-2)もう一つは、いわゆる**超固体**の研究を詳しく進めている。世界的にも初めての3次元系、有限温度の場合の計算機シミュレーションを行い、有意な範囲で超固体が現れることを明らかにした。ヘリウム系での実験との違いは計算機で用いられるいわゆる格子上の強結合モデルによる所が大きいと考えられる。光格子系では、実際に格子が存在しその上を粒子が運動するため、計算機が扱っている状況に近い状況にあると思われる。そのような状況を“シミュレート”することはたいへん興味深く、光格子での実験への提案をしていきたいと考えている。
- (4) 散逸がある場合の量子ダイナミクスを記述する理論的枠組みの整備に関しては、量子マスター方程式を導出に関して方法論的な曖昧性のない議論を展開し、**動的応答関数の理論構築**を行った。これによって、ミクロな情報を反映させた、散逸効果が議論できるようになることが期待される。
- (5) 東大・工・物工の藤堂眞治氏と協力のもとで、方法論的な開発、特に、**大規模な数値的解析法の開発**を行っている。具体的には次のような成果をあげた。(5-1) フォノン系などの全粒子数の保存しない系に対して、粒子数のカットオフなどの人為的なパラメータを導入することなく、効率的に量子モンテカルロサンプリングを行うことが可能になる**非局所更新量**

子モンテカルロ法を開発した。この手法をスピンの自由度と格子の自由度の強くカップリングしたスピン・パイエルス系に実際に適用し、一次元ではスピン液体状態とダイマー状態との間の量子相転移が、また、三次元系ではネール状態とスピン・パイエルス状態との間の有限温度相転移が起こることを確認した。特に三次元系におけるこの結果は、今までに他の方法では得られていなかった結果である。今後、この手法を用いて、格子フォノンの分散の効果、非磁性不純物の効果を調べる予定である。(5-2)長距離相互作用を持つ系に対するオーダーN モンテカルロ手法をこれまで困難であった強いフラストレーションのあるスピン系などに適用し種々の新しい状態の性質を明らかにした。

- (6) また、物質・材料研究機構の西野正理氏と協力して、集積的な機能分子物質の典型例であるスピנקロスオーバー系の相転移の研究を遂行している。スピנקロスオーバー(SC)系では、**電子状態の双安定性**のため温度や光によるスイッチング現象が注目されており、その機構を支配する相転移機構やダイナミクスについて研究を進めた。特に、電子状態と格子自由度の結合のため実効的な長距離相互作用が新しい物性を出すことを明らかにした。これらのダイナミクスを分子動力学法で取り扱う場合の困難な問題の一つに、系に付加的なエントロピーの取り扱いの問題があったが、それを可能にする方法論を開発し、SC系の外場(温度や圧力)による体積や high spin の割合などの秩序変数の定量的解析を行った。また、ミクロな電子状態の量子力学的構造やダイナミクスについても研究を進めている。

東大羽田野グループ

- (7) 導線と強く結合した量子ドットの電気伝導を**開放量子系の散乱問題**という立場から解析してきた。この問題に対し、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。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(図2)。また、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、導線に周期境界条件を課したり導線を途中でカットしたりすることなく、有限のハミルトニアンを扱うだけで半無限の導線の効果を正確に取り入れることを可能にした。
- (8) 相互作用のある開放量子系での厳密解を用いて新しい特徴の発見を調べた。2007年に、任意の粒子数の散乱状態を ベーテ仮説の方法によって得ていたが、その解はいくつか不自然点を持つ状態であった。今年度、ベーテ仮説を超える新しい解を求めることに成功し、入射前には無相関な(スレーター行列式の)2粒子が、散乱後に2

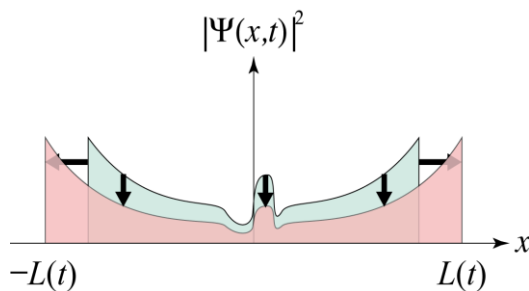


図 2

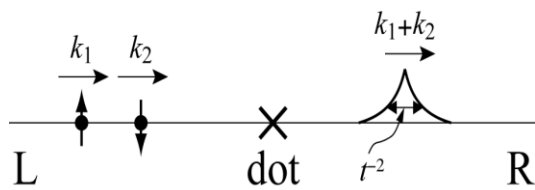


図 3

体の束縛状態を作るという、非常に自然かつ興味深い状態を発見した。(図3)。さらに最近、同じ手法を アンダーソン模型に適用したところ、無相関な2粒子を入射すると散乱後にシングレットを形成した成分のみが出てくることがわかった。これは、粒子の入射による「エンタングルメント発生装置」とでも呼ぶべき重要な現象と考えられ、系を外部から制御する新しい方法の開発につながると期待している。

東工大西森グループ

- (9) 量子アニーリングにおけるダイナミクスの詳しい研究を行っている。特に、具体的なモデルにおける量子アニーリングの実現において個々の系の量子ダイナミクスの特徴を詳しく調べている。たとえば、基底状態が縮退している系の量子アニーリングにおいては、各時刻における定常量子状態のエネルギースペクトルは、図4のような構造をしており、時刻 0

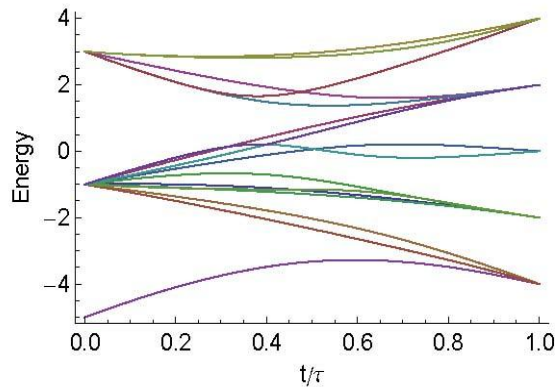


図 4

で基底状態から出発して、断熱的に最終時刻 τ に達する際に、励起状態からもいくつかの状態が合流して縮退をもたらす。したがって、ゆっくりと断熱的に遷移すればするほど、励起状態から合流する最終基底状態を見逃すという事態が生じることが明らかになった。この点に関して、非断熱遷移を利用するように、ある程度の有限速度を持って遷移すればやや改善されるが、一般的に、どのような速度で制御すればよいかという指針はまだ明らかになってない。今後の重要な研究課題の一つである。

- (10) 量子アニーリングの方法は、広い応用範囲を持ち宮下グループでも強くフラストレートし通常の温度アニーリングが働かない系において、この方法が有効であることを示している。また、フラストレートの一つの特徴である、温度によって相関の符号が変わるいわゆるリエントラント現象が量子ゆらぎにおいても実現することが発見されている。また、統計処理の重要なテーマであるクラスターへの分類法や、変分的 Bayes 推定法への応用も進められている。

さらに、年度末にクレスト主催の研究会「量子応答・量子ダイナミクスの新展開」を開き、我々の成果を発表するとともに、関連する研究者たちからの情報を収集した。これらの活動により、量子ダイナミクスの理論的取り扱いの現状を把握することができ、さらにそれらの相互の関係についての理解が進んだ。

3. 研究実施体制

(1)「東京大学」グループ

①研究分担グループ長： 宮下 精二（東京大学大学院、教授）

②研究項目

量子相互作用による動的現象の理論的研究

多体系の伝導現象の理論

巨視的に広がった格子において量子的なユニットして働く局所的な構造の探索

量子相互作用による動的現象の理論的研究

(2)「東京工業大学」グループ(研究機関別)

①研究分担グループ長： 西森 秀稔（東京工業大学大学院、教授）

②研究項目

縮退のある系の量子アニーリング

量子アニーリングにおける計算量評価

量子アニーリングにおける残留エネルギーの評価

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表（原著論文）

1. K. Boukheddaden, M. Nishino, and S. Miyashita, “Molecular Dynamics and Transfer Integral Investigations of an Elastic Anharmonic Model for Phonon-Induced Spin Crossover” Phys. Rev. Lett. 100, 177206 (2008)
2. C. Guven, A. N. Berker, M. Hinczewski and H. Nishimori, “Reentrant and forward phase diagrams of the anisotropic three-dimensional Ising spin glass” Phys. Rev. E 77, 061110 (2008)
3. S. Miyashita, “Adiabatic Change from Mott Insulator to Nagaoka Ferromagnetic State”, Prog. Theor. Phys. 120, 785 (2008)
4. M. Ohzeki, H. Nishimori and A. N. Berker, “Multicritical points for the spin glass models on hierarchical lattices”, Phys. Rev. E 77, 061116 (2008)
5. D. Yamamoto, S. Todo, and S. Kurihara, “Green’s function theory for spin-1/2 ferromagnets with an easy-plane exchange anisotropy”, Phys. Rev. B 78, 024440 (2008)
6. 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 41, 324012 (2008)
7. K. Saito and Y. Utsumi, “Symmetry in Full-Counting Statistics, Fluctuation Theorem, and Relations among Nonlinear Transport coefficients in the presence of a Magnetic field”, Phys. Rev. B 78, 115429 (2008)

8. Keiji Saito, “Energy Dissipation and Fluctuation-Response in Driven Quantum Langevin Dynamics”, *Europhys Letters* 83, 50006 (2008)
9. K. Takahashi and K. Takeda, “Dynamical correlations in the Sherrington-Kirkpatrick model in a transverse field”, *Phys. Rev. B* 78, 174415 (2008)
10. S. Morita and H. Nishimori, “Mathematical foundation of quantum annealing”, *J. Math. Phys.* 49, 125210 (2008)
11. T. Mori and S. Miyashita, “Dynamics of the Density Matrix in Contact with a Thermal Bath and the Quantum Master Equation”, *J. Phys. Soc. Jpn.* 77, 124005 (2008)
12. S. Todo and A. Shibasaki, “Improved chain mean-field theory for quasi-one-dimensional quantum magnets”, *Phys. Rev. B* 78, 224411 (2008)
13. K. Sasada and N. Hatano, “Calculation of the Self-Energy of Open Quantum Systems”, *J. Phys. Soc. Jpn.* 77, 025003 (2008)
14. 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)
15. 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).
16. K. Hijii and S. Miyashita, “Structure of energy-level degeneracy of a single-spin model from a viewpoint of symmetry of the spin anisotropy and its nontrivial spin dependence on the higher-order anisotropy”, *Phys. Rev. B* 78, 214434 (2008).
17. M. Matsuo, A. Endo, N. Hatano, H. Nakamura, R. Shirasaki and K. Sugihara, “Quantum Nernst Effect in a Bismuth Single Crystal”, in *Proceedings of the 9th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology – ISQM Tokyo ’08*, eds. S. Ishioka and K. Fujikawa (World Scientific) to be published.
18. K. Fukui and S. Todo, “Order-N Cluster Monte Carlo Method for Spin Systems with Long-range Interactions”, *J. Comp. Phys.* (in press)
19. M. Nishino, K. Boukheddaden, and S. Miyashita “Molecular dynamics study on thermal expansion and compression of spin-crossover solids by a microscopic model of elastic interactions”, *Phys. Rev. B* (in press)
20. Tomoyuki Obuchi, Yoshiyuki Kabashima, and Hidetoshi Nishimori “Complex Replica Zeros of $\pm J$ Ising Spin Glass at Zero Temperature”, *J. Phys. A: Math. Theor.* 42 (2009) 075004
21. M. Ohzeki, “Locations of multicritical points for spin glasses on regular lattices”, *Phys. Rev. E* 79, 021129 (2009)
22. Nishino, T. Imamura and N. Hatano “Exact scattering eigenstates, “Many-body bound states, and nonequilibrium current in an open quantum dot system”, *Phys. Rev. Lett.* 102, 146803 (2009)

23. M. Nishino, K. Boukheddaden, and S. Miyashita “Molecular dynamics study on thermal expansion and compression of spin-crossover solids by a microscopic model of elastic interactions”, Phys. Rev. B. 79, 012409 (2009).
24. M. Nishino, K. Boukheddaden, S. Miyashita, and F. Varret, “Dynamical property of nucleation in spin crossover depending on the system boundary”, J. Phys. Conf. Ser. 148, 012034 (2009).
25. K. Fukui and S. Todo, “Order-N Cluster Monte Carlo Method for Spin Systems with Long-range Interactions, J. Comp. Phys. 228, 2629 (2009).
26. M. Saeki, “Transverse Susceptibilities of Ferromagnetic Spin Wave Interacting with Photon Reservoir”, Prog. Theor. Phys. 121, 165-191 (2009).
27. K. Yamamoto, S. Todo and S. Miyashita, “Successive phase transitions at finite temperatures towards the supersolid state in a three-dimensional extended Bose-Hubbard model”, Phys. Rev. B, 79 094503 (2009).

(2) 特許出願

平成 20 年度 国内特許出願件数：0 件（CREST 研究期間累積件数：0 件）