

令和 6 年 5 月 28 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2023

課題番号：19K03708

研究課題名（和文）強相関電子系における量子ビットの形成と制御の理論

研究課題名（英文）Theoretical study on quantum bit in strongly correlated systems

研究代表者

柴田 尚和（SHIBATA, NAOKAZU）

東北大学・理学研究科・教授

研究者番号：40302385

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究は、遍歴電子と相互作用する複数の局在スピンの半導体中に存在するときに、複数の局在スピンによって遍歴電子が段階的に一つずつ順次束縛される多段の近藤効果が生じる現象を明らかにしたものである。このときの不連続な束縛電子数の変化は局在スピン間の量子的な相関を大きく変化させるため、遍歴電子と局在スピンの間の結合の強さの調整によって、局在スピンの量子状態を制御できることが明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究が明らかにした多段の近藤効果は、遍歴電子と局在スピンの間の電位差を制御することで、局在スピンと遍歴電子の間で量子状態の組み換えを逐次的に引き起こすという、電圧印可による局在スピン間の量子相関の制御を可能にする技術的意義を有している。また、この多段の近藤効果は、遍歴電子と局在スピンのスピン-重項を形成して局在スピンの磁性が消失する従来の近藤効果とは全く異なり、局在スピンの空間配置と遍歴電子の密度に応じた様々な量子状態間の遷移を可能にする多彩な量子的遷移を生み出す新たな物性現象としての学術的な意義も有している。

研究成果の概要（英文）：In this study, we revealed that when there are multiple localized spins that interact with itinerant electrons, a multistage Kondo effect occurs in which the itinerant electrons are sequentially bound one by one by the multiple localized spins. This discontinuous change in the number of bound electrons greatly changes the quantum correlation between local spins, so by adjusting the strength of the coupling between itinerant electrons and localized spins, it becomes possible to control the quantum state of localized spins. In particular, transitions to various quantum states occur by adjusting the configuration of localized spins and the density of itinerant electrons. It was revealed that the multistage Kondo effect produced by multiple localized spins and itinerant electrons greatly expands the conventional concept of the Kondo effect.

研究分野：物性物理学

キーワード：近藤効果 量子ビット 量子多体効果

### 1. 研究開始当初の背景

近年の半導体微細加工技術の進歩は、情報化社会の発展を支えてきた一方で、微細化が原子スケールに近づいてきた今日では、これまでのような性能向上をより困難なものにしている。この微細化の進展は電子の量子としての性質を顕在化させるため、電子のもつ量子力学的重ね合わせ状態を利用して、組み合わせ最適化の問題を並列処理する量子計算機の実現に期待が寄せられている。すでに実用化されている量子アニーリング専用計算機は、超伝導リングを貫く磁束の向きで量子ビットを表現し、量子性を獲得している。この量子アニーリング専用計算機は、量子力学の原理を利用した量子計算機として大きな意義をもつものであるが、解くべき問題をその理論モデルになっている横磁場イジング模型の問題にマッピングする必要や、有限温度における位相揺らぎや外部環境からのノイズがコヒーレンス時間を制約する問題があり、半導体デバイスの代替となる汎用性の獲得に課題が残っている。

より一般的な量子計算機を実現させるためには、ナノスケールの集積技術を活かした半導体デバイスとのハイブリッドを可能にし、外部環境からのノイズや温度揺らぎによって生み出されるデコヒーレンスを抑える量子ビットの実現が求められている。

### 2. 研究の目的

量子力学的重ね合わせ状態を利用して、従来の計算法では解決が困難な最適化問題や組み合わせ問題の解を得る量子計算機の開発は、物性物理学が主導する成長分野の創出という産学連携の意義だけでなく、近年の情報化社会において蓄積されている膨大な情報資源を生産性の向上に活かす社会と学術研究を繋げる意義をもつ。その実現にはまだ多くの解決すべき課題が残っているが、最も大きな問題は外部環境からの影響を排除する強固な量子ビットとその正確な制御を可能にする量子ゲートの実現である。本研究は、量子力学に基づく電子の波動的性質が強く現れる遍歴電子と粒子的性質が強く現れる局在電子との量子的結合状態に焦点を当て、どのような量子状態の利用が可能であるか明らかにすることを目的としている。

### 3. 研究の方法

量子ビットが担う情報としての量子状態を安定して保持するためには、外部環境から隔離できる局在的性質が必要である。そのため、情報の担い手としては局在スピンを、また、その制御は外部から行う必要があるため、制御のためには遍歴的な伝導電子を利用する。局在スピンの多数の伝導電子の中に単独で存在する状況では、近藤効果によってその磁気モーメントは最終的に失われてしまう。したがって、局在スピンを複数配置して、外部環境との接続制御に利用する局在スピンと情報表現に利用する局在スピンを配置する。(図1)

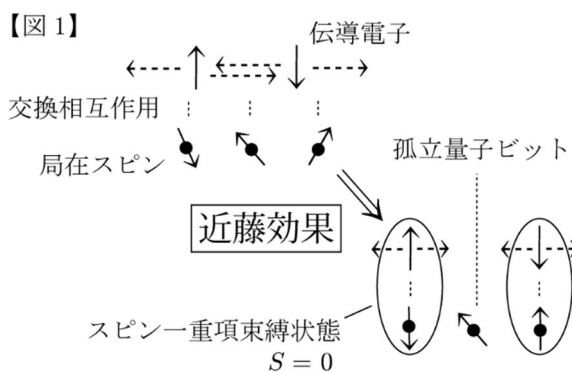
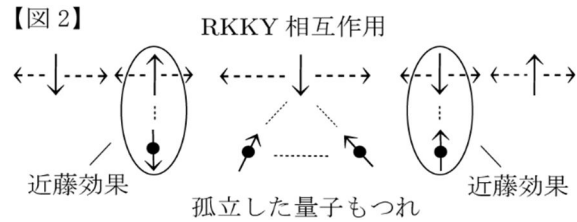


図1) 局在スピンの多数の伝導電子の中に単独で存在する状況では、近藤効果によってその磁気モーメントは最終的に失われてしまう。したがって、局在スピンを複数配置して、外部環境との接続制御に利用する局在スピンと情報表現に利用する局在スピンを配置する。(図1)

このような系において実現する量子多体状態の解析には密度行列繰り込み群を用いる。通常、数値的に扱うことができる有限系で近藤効果を正しく再現するためには、伝導電子のフェルミ面付近の状態を波数空間で対数離散化し、稠密な状態密度を用意する必要があり、実空間の構造が複雑になると解析が困難になる。本研究では、その問題に対処するために局在スピンの存在する系の中央付近から、局在スピンの存在しない系の端に向かってエネルギースケールを減少させるスケール変換をハミルトニアンに施し、低エネルギーの伝導電子に対応する電荷とスピンの自由度を導入することで人為的な離散準位の効果を弱め、量子化条件に依存しない無限系の特徴を再現する。この方法を用いて局在スピンの一つだけのときの近藤効果の厳密解の結果を再現することに既に成功しており、複数の局在スピンの存在するときの正しい結果を得ることも可能になっている。

#### 4. 研究成果

(1) 図2に示すような伝導電子と相互作用する複数の局在スピンの間で形成される量子多体状態を明らかにするため、密度行列繰り込み群とサイン 2 乗変形法(SSD)を用いて複数の不純物スピンによって構成される系の低エネルギー状態を解析した。



得られた結果から、多数の局所的安定状態の形成とその間の転移の存在が明らかになった。これらの量子多体状態は、局所的に形成された多体状態を特徴付ける電子数やスピンの量子数によって分類され、この安定な局所的電子状態と量子情報を対応付けることで情報の表現が可能であることが分かった。

(2) 複数の局在スピンと伝導電子の間の交換相互作用の大きさを変えたときの局在スピン間相関(量子もつれ)の変化を調べた結果、個々の局在スピンの近藤効果によって伝導電子を順次束縛していく過程で、局在スピン間の相関が大きく変化することを明らかにした。この相関の変化は、局在スピンによる伝導電子の束縛によって、局在スピン間の有効相互作用の担い手となる伝導電子数が不連続に変化したことで生じている。このことから、局在スピンと伝導電子の間の局所的な相互作用の強さを変えることによって、空間的に離れた局在スピン間の相関を効果的に制御できることが明らかになった。

(3) 量子ビットを構成する複数の局在スピンの伝導電子を介して結合する際に、近藤雲と呼ばれる局在スピンの周囲に形成されるこの近藤雲は、隣接する局在スピンだけでなく空間的に離れた局在スピンの間にも量子相関を生み出すため、その起源となる局在スピンと伝導電子間の相互作用を変えたときの伝導電子間の相関関数の変化を解析した。その結果、近藤効果のエネルギースケールである近藤温度が近藤雲のべき減衰の空間構造をクロスオーバー的に変化させる特徴的な長さスケールを与えること、また、伝導電子間の斥力相互作用はこの長さスケールを減少させ、有効的に近藤温度を増加させることが明らかになった。

(4) 複数の局在スピンの存在によって近藤効果が受ける影響を解析するために、2つの局在スピンを隣接させて配置したときの局在スピンと伝導電子の間の相関関数を調べた。その結果、局在スピン間の相関が反強磁性的な場合には近藤効果が増強され、有効的に近藤温度が増加し、逆に強磁性的な相関が局在スピン間に形成される場合には、近藤効果が弱められ、実効的な近藤温度が低下することが明らかになった。

(5) 電子のスピン自由度は量子ビットを構成する量子多体状態に不可欠な要素であるが、その自由度は局在電子と伝導電子の波動関数の重なりによって生じる局在状態と非局在状態の間の量子的遷移の影響を受ける。このような電子の量子的遷移によって生じる電荷ゆらぎはスピン自由度だけを持つ理想的な量子スピンには存在しないため、局在電子によって量子ビットを構成したときには、この電荷ゆらぎの効果を考慮した解析が必要になる。このような電荷ゆらぎが複数の電子によって構成される量子多体状態の遷移に与える影響を明らかにするため、電荷ゆらぎの大きさを変化させる軌道間遷移の大きさ $V$ と局在軌道内の電子数の増加によって生じる斥力エネルギーの大きさ $U$ を変化させ、量子多体状態の転移がどのように変化するか調べた。その結果、電荷ゆらぎが大きくなることで、量子状態間の転移に必要な伝導電子と局在スピンの間の交換相互作用の大きさは増大するが、 $U$ が伝導電子のエネルギーバンド幅の2倍程度以上の大きさであれば、電荷ゆらぎの存在自体が量子多体状態の転移を消失させることは無いことが明らかになった。このことより、電荷ゆらぎが存在する一般的な系においても、理想的なスピン自由度だけが存在する理論モデルでの解析が有効であること、さらに、電荷ゆらぎの調整によって転移点の調整も可能になることが明らかになった。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Suzuki Sei, Oshiyama Hiroki, Shibata Naokazu	4. 巻 381
2. 論文標題 Statistics of the number of defects after quantum annealing in a thermal environment	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences	6. 最初と最後の頁 20210411
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1098/rsta.2021.0411	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kamiyama Akinori, Matsuura Masahiro, Moore John N., Mano Takaaki, Shibata Naokazu, Yusa Go	4. 巻 4
2. 論文標題 Real-time and space visualization of excitations of the $\nu=1/3$ fractional quantum Hall edge	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 L012040-1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.4.L012040	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Hayafuchi Yasuaki, Konno Ryota, Noorhidayati Annisa, Fauzi Mohammad Hamzah, Shibata Naokazu, Hashimoto Katsushi, Hirayama Yoshiro	4. 巻 15
2. 論文標題 Even-denominator fractional quantum Hall state in conventional triple-gated quantum point contact	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 025002-1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1882-0786/ac4c35	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Bando Yuki, Susa Yuki, Oshiyama Hiroki, Shibata Naokazu, Ohzeki Masayuki, Gomez-Ruiz Fernando Javier, Lidar Daniel A., Suzuki Sei, del Campo Adolfo, Nishimori Hidetoshi	4. 巻 2
2. 論文標題 Probing the universality of topological defect formation in a quantum annealer: Kibble-Zurek mechanism and beyond	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 033369-1-20
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.2.033369	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Oshiyama Hiroki, Shibata Naokazu, Suzuki Sei	4. 巻 89
2. 論文標題 Kibble Zurek Mechanism in a Dissipative Transverse Ising Chain	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 104002-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.104002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ito Takuya, Shibata Naokazu	4. 巻 103
2. 論文標題 Density matrix renormalization group study of the $\nu=1/3$ edge states in fractional quantum Hall systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115107-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.115107	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sei Suzuki, Hiroki Oshiyama, and Naokazu Shibata	4. 巻 88
2. 論文標題 Quantum Annealing of Pure and Random Ising Chains Coupled to a Bosonic Environment	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 061003-1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.061003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計16件(うち招待講演 0件/うち国際学会 0件)

1. 発表者名 紅林遊野, 柴田尚和
2. 発表標題 1次元少数不純物近藤系における階層的多体状態の形成
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 芦原洋平, 柴田尚和
2. 発表標題 三角構造を有する $S=1$ スピンラダー系の基底状態と磁化プラトー
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木正, 押山広樹, 柴田尚和
2. 発表標題 熱的環境中の量子アニーリングで生成される位相欠損の普遍的な統計則
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 飯野千尋, 柴田尚和
2. 発表標題 捻れた三角スピントラップにおける量子相転移
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 紅林遊野, 柴田尚和
2. 発表標題 1次元少数不純物近藤系の量子相転移と基底状態
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 押山広樹, 鈴木正, 柴田尚和
2. 発表標題 有限温度量子アニーリングにおける残留エネルギーのスケーリング則
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 橋坂昌幸, 伊藤拓哉, 秋保貴文, 佐々木智, 柴田尚和, 村木康二
2. 発表標題 分数-整数量子ホール界面における固有伝播モード形成メカニズム
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金野遼大, 早淵恭章, Annisa Noorhidayati, M. Hamzah Fauzi, 柴田尚和, 橋本克之, 平山祥郎
2. 発表標題 量子ポイントコンタクトの $\nu=3/2$ 構造: センターゲートの重要性
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 早淵恭章, 金野遼大, Annisa Noorhidayati, M. Hamzah Fauzi, 柴田尚和, 橋本克之, 平山祥郎
2. 発表標題 量子ポイントコンタクトの $\nu=3/2$ 構造: 温度、磁場、充填率依存性
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 紅林遊野, 柴田尚和
2. 発表標題 1次元少数不純物近藤系における近藤効果とRKKY相互作用
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岩浅玲奈, 柴田尚和
2. 発表標題 環状共役化合物が縮合した高分子鎖の磁性
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 押山広樹, 鈴木正, 柴田尚和
2. 発表標題 iTEBDIによるボソン環境と結合した1次元横磁場イジング模型の熱力学的性質
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 押山広樹, 鈴木正, 柴田尚和
2. 発表標題 有限温度量子アニーリングにおける残留エネルギーのスケーリング則
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2020年



1. 発表者名 伊藤拓哉, 柴田尚和
2. 発表標題 DMRG法を用いた分数量子ホール系の端状態の解析
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 坂東優樹, 須佐友紀, 鈴木正, 押山広樹, 柴田尚和, 大関真之, Fernando Javier Gomez-Ruiz, Adolf del Campo, Daniel A. Lidar, 西森秀稔
2. 発表標題 一次元横磁場イジング模型の量子アニーラーによるシミュレーション
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 紅林遊野, 柴田尚和
2. 発表標題 正弦二乗変形による1次元少数不純物近藤系の実空間解析
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<a href="http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~shibata/">http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~shibata/</a>
-------------------------------------------------------------------------------------------------------

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------