

令和 6 年 6 月 6 日現在

機関番号：82401

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2019～2023

課題番号：19K23433

研究課題名（和文）ドープされたモット絶縁体における擬ギャップ現象の研究

研究課題名（英文）Study of pseudogap phenomena in doped Mott insulators

研究代表者

関 和弘 (Seki, Kazuhiro)

国立研究開発法人理化学研究所・量子コンピュータ研究センター・研究員

研究者番号：40708533

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究ではドープされたモット絶縁体で観測される現象の解明を目指して、量子多体系の基底状態や有限温度物性の計算に取り組んだ。具体的にはHubbard-Holstein模型に対する量子モンテカルロ法を用いた基底状態相図の計算や、リング交換相互作用のあるHeisenberg模型の有限温度物性の計算を行なった。

また、本研究開始時期の前後から進展を続けている量子コンピュータの量子多体系計算への応用可能性に着目し検討を行なった。具体的には量子スピン模型の解析に有用な一種の共鳴原子価結合（RVB）型変分波動関数を量子回路上で構築する方法の提案や、量子多体系研究のための量子アルゴリズム提案等を行なった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

Hubbard模型やHeisenberg模型や横磁場Ising模型は、量子力学に従い相互作用する固体中の多数の粒子（電子やスピン）の模型として、物性物理学分野で物性の理解に役立てられている。一方で近年の量子コンピュータ研究開発の盛り上がりの中で、これらの模型が示すダイナミクスや基底状態等は、物性物理の枠を超えて量子コンピュータ研究開発を行う企業等の研究グループによりベンチマークとして用いられる機会が増してきている。本研究成果の中で、とりわけ初期に行なったRVB型波動関数の量子回路表現と実機による実証を行なった研究は、近年のこのような流れに先駆けたものである点に学術的意義がある。

研究成果の概要（英文）：In this study, we aimed to explore phenomena in doped Mott insulators and tackled the calculation of the ground state and finite-temperature properties of quantum many-body systems. Specifically, we calculated the ground state phase diagram of the Hubbard-Holstein model using the quantum Monte Carlo method and calculated the finite-temperature properties of the Heisenberg model with ring exchange interactions.

Furthermore, along with the rapid advancement of quantum computing devices, we focused on the potential applications of quantum computers to quantum many-body system calculations. Specifically, we proposed methods for constructing a type of resonating-valence-bond (RVB) variational wave function, useful for analyzing quantum spin models, on quantum circuits and proposed several quantum algorithms for the study of quantum many-body systems.

研究分野：物性物理

キーワード：量子多体系 強相関電子系

## 様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

電子密度がハーフフィリングの状況では、一電子近似では電子系は金属状態になると予測される。しかし実際にはハーフフィリングの状況で電子相関によって絶縁体状態となる Mott 絶縁体がある。Mott 絶縁体が実現しているハーフフィリングの状況からドーピング等により電子密度をわずかにずらした状況では、電子系は金属状態だが一電子近似に基づく理論のみの記述では不十分である。なぜなら電子密度や温度の関数として起こる一電子励起スペクトルウェイトの再編成は、一電子近似では再現されないからである。特に有機モット絶縁体系では飛び移り積分のエネルギースケールが数十 meV と遷移金属酸化物の 1/10 程度であり、温度に対して電子状態が変化しやすく、基底状態を超えた温度効果の研究はより一層重要である。

一方で量子多体系は一般にその構成要素(電子やスピン)の数に関して計算コストが指数関数的に増加する困難がある。そこで着目した現象を説明するのに適切な近似を導入する必要がある。本研究では数値計算を用いたアプローチをとる。

### 2. 研究の目的

電子密度や温度の関数として起こる一電子励起スペクトルウェイト再構成の様子を自己エネルギーから解き明かすことを目的とした。

### 3. 研究の方法

上記の目的のために、手法開発を行いつつ各種格子模型の基底状態や有限温度の性質を解析した。

なお上記の目的を達成するためには、本研究のアプローチでは有限温度における量子多体系のダイナミクス(動的相関関数等)を計算する手法が必要である。研究提案時点ではそのような計算手法と変分クラスター近似法を用いて解析を行うとし、その一環として以下の研究成果に示すように有限温度 block Lanczos 法の提案と実装を行なった。しかし、以下に示すように量子多体系の研究に向けた量子コンピュータの応用の可能性を検討し、量子コンピュータを用いた変分波動関数の提案や有限温度計算手法の提案や手法開発を行なった。

### 4. 研究成果

Hubbard-Holstein 模型は電子電子相互作用と電子格子相互作用を含む基本的な模型であり、電子格子相互作用のために Hubbard 模型よりも解析が難しい。

これに関して本研究では、補助場量子モンテカルロ法の連続的な補助場を離散化してモンテカルロ積分を行う方法を考案して実装し、ハーフフィリングの Hubbard-Holstein 模型の相関を調べた。実装した離散化の方法は、電子電子相互作用  $U$  が電子格子相互作用(の大きさのひとつの測り方)と同じかそれより大きい状況で有効である。連続的な補助場をハミルトン力学に従って仮想的な時間で時間発展させサンプリングする従来の方法に比べて、手で選ぶパラメータが離散化の次数のみであり精度も簡単にコントロールでき、効率が良かった。実際に考案した方法を用いることで幅広いパラメータに対してスピンスピン相関関数などを計算することができた。そしてその計算結果を相関の解明・特に反強磁性-金属転移を起こすパラメータの見積りに役立てた。詳細は以下の論文に報告した[Natanael C. Costa, Kazuhiro Seki, Seiji Yunoki, and Sandro Sorella, Communications Physics 3, 80 (2020), Natanael C. Costa, Kazuhiro Seki, and Sandro Sorella, Phys. Rev. Lett. **126**, 107205 (2021)]。

金属絶縁体転移に近い Mott 絶縁体の状況では、電荷自由度を凍結させた有効模型としては、ホッピング  $t$  とオンサイト斥力相互作用  $U$  を持つ三角格子上で定義されたハーフフィリングの Hubbard 模型を出発点として、 $t/U$  展開の二次摂動から得られる 2 体の交換相互作用の他に、 $t/U$  展開の四次摂動(の一部)から得られる 4 体の交換相互作用も取り込む必要があると考えられている。

本研究では有限温度物性を調べる目的で、有限温度 Lanczos 法を block Lanczos 法に拡張した計算プログラムを作成し、同有効模型の比熱やエントロピーや磁化率の計算を行い、特徴的な比熱の温度依存性を見出した。Block Lanczos 法に拡張した利点としては、複数の状態ベクトルに対してハミルトニアンを同時に演算できるために、当時用いた計算環境では計算の効率が向上したことがあげられる。この効果は特にハミルトニアン行列要素を on the fly で作成して状態ベクトルに演算するとき顕著となる。なぜなら、例えば  $M$  本の状態ベクトルに対してスピン配置や状態番号を探索する手間が  $M$  回ではなく 1 回で済むためである。また、パスカルの三角形上での最短経路と磁化固定のヒルベルト空間のスピン配置の対応を利用した状態番号の探索方法を考案し、計算に必要なメモリを減らす工夫も行うことで、36 spin 系のような比較的大きな系に対してモデルパラメータを複数振って計算を行った[Kazuhiro Seki and Seiji Yunoki, Phys. Rev. B **101**, 235115 (2020)]。

本研究開始時期の前後から、量子コンピュータの開発が盛り上がってきており、その潜在的計算能力が量子化学分野などで注目を集めていた。

本研究では磁性体の基本的なモデルである  $S=1/2$  Heisenberg 模型を考え、その基底状態を近似する変分波動関数を量子回路上で作成し、変分パラメータは古典計算機で最適化するという変分量子固有値解法(VQE)を、古典計算機上でシミュレートした。変分波動関数としては、全スピン量子数を保存するように、スピンシングレット対状態の直積状態に2体の Heisenberg 相互作用(SWAP)を指数関数の肩に乗せてパラメトライズした eSWAP ゲートを作用させる回路を採用し、そのプログラムを実装した。また、今回採用した量子回路はある種の共鳴原子価結合(RVB)状態を表すことを論じた。これについては、すでに先行研究でもほぼ同様の量子回路が提案 RVB 状態についても短く言及されていたが、より詳しく論じた。詳細は以下の論文に報告した[Kazuhiro Seki, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki, Phys. Rev. A **101**, 052340 (2020)]。

さらに、フェルミ粒子系の量子計算手法の発展に取り組んできた。フェルミ粒子系はその反対称性を扱うために fermionic SWAP ゲート等の扱いが必要になるが、その方法の要点をまとめ、さらにフェルミ粒子系に対する空間群や回転群の対称操作及びそれを用いた射影演算子を実現するための量子回路を設計した[Kazuhiro Seki and Seiji Yunoki, Phys. Rev. A **105**, 032419 (2022)]。また、量子計算機を用いた、エルミート行列のべき乗をベクトルに対して効率的に演算する計算方法の提案[Kazuhiro Seki and Seiji Yunoki, PRX Quantum **2**, 010333 (2021)]や、補助場量子モンテカルロで用いる離散 Hubbard-Stratonovich 変換に基づいて Gutzwiller 波動関数を量子回路上で作る方法の提案[Kazuhiro Seki, Yuichi Otsuka, and Seiji Yunoki, Phys. Rev. B **105**, 155119 (2022)]を行なった。

また、量子コンピュータを用いた有限温度計算の可能性も検討し、部分トレース操作を用いた純粋状態の粗視化により現れる部分系の密度行列と適当な温度のカノニカル集団の密度行列が似ている (fidelity が大きい) こと指摘[Kazuhiro Seki and Seiji Yunoki, Phys. Rev. Research **2**, (2020)]や、適切なランダム状態に関する時間発展演算子の期待値のフーリエ変換から物理量のミクロカノニカル期待値を計算する手法の提案[Kazuhiro Seki and Seiji Yunoki Phys. Rev. B **106**, 155111 (2022)]を行なった。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 16件／うち国際共著 3件／うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Seki Kazuhiro, Yunoki Seiji	4. 巻 106
2. 論文標題 Energy-filtered random-phase states as microcanonical thermal pure quantum states	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155111-1/21
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.106.155111	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 Xie Qing, Seki Kazuhiro, Yunoki Seiji	4. 巻 106
2. 論文標題 Variational counterdiabatic driving of the Hubbard model for ground-state preparation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155153-1/12
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.106.155153	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 Watanabe Hiroshi, Shirakawa Tomonori, Seki Kazuhiro, Sakakibara Hirofumi, Kotani Takao, Ikeda Hiroaki, Yunoki Seiji	4. 巻 35
2. 論文標題 Monte Carlo study of cuprate superconductors in a four-band d-p model: role of orbital degrees of freedom	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 195601 ~ 195601
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1361-648X/acc0bf	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 Seki Kazuhiro, Yunoki Seiji	4. 巻 105
2. 論文標題 Spatial, spin, and charge symmetry projections for a Fermi-Hubbard model on a quantum computer	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 1-34
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.105.032419	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 Seki Kazuhiro, Otsuka Yuichi, Yunoki Seiji	4. 巻 105
2. 論文標題 Gutzwiller wave function on a quantum computer using a discrete Hubbard-Stratonovich transformation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1-17
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.155119	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 Watanabe Hiroshi, Shirakawa Tomonori, Seki Kazuhiro, Sakakibara Hirofumi, Kotani Takao, Ikeda Hiroaki, Yunoki Seiji	4. 巻 3
2. 論文標題 Unified description of cuprate superconductors using a four-band $\langle \text{mml:math} \text{xmlns:mml="http://www.w3.org/1998/Math/MathML"} \langle \text{mml:mrow} \langle \text{mml:mi} \rangle \text{d} \langle \text{mml:mi} \rangle \langle \text{mml:mtext} \rangle ? \langle \text{mml:mt} \text{ext} \rangle \langle \text{mml:mi} \rangle \text{p} \langle \text{mml:mi} \rangle \langle \text{mml:mrow} \rangle \langle \text{mml:math} \rangle \text{ model}$	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.033157	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 Seki Kazuhiro, Yunoki Seiji	4. 巻 101
2. 論文標題 Thermodynamic properties of an S=12 ring-exchange model on the triangular lattice	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235115/1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.235115	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 Seki Kazuhiro, Shirakawa Tomonori, Yunoki Seiji	4. 巻 101
2. 論文標題 Symmetry-adapted variational quantum eigensolver	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 052340/1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.101.052340	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 Seki Kazuhiro, Yunoki Seiji	4. 巻 2
2. 論文標題 Emergence of a thermal equilibrium in a subsystem of a pure ground state by quantum entanglement	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 043087/1-19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.043087	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 Otsuka Yuichi, Seki Kazuhiro, Sorella Sandro, Yunoki Seiji	4. 巻 102
2. 論文標題 Dirac electrons in the square-lattice Hubbard model with a d-wave pairing field: The chiral Heisenberg universality class revisited	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235105/1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.235105	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 Shirakawa Tomonori, Seki Kazuhiro, Yunoki Seiji	4. 巻 3
2. 論文標題 Discretized quantum adiabatic process for free fermions and comparison with the imaginary-time evolution	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 013004/1-32
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.013004	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 Seki Kazuhiro, Yunoki Seiji	4. 巻 2
2. 論文標題 Quantum Power Method by a Superposition of Time-Evolved States	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 PRX Quantum	6. 最初と最後の頁 010333/1-45
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PRXQuantum.2.010333	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 Costa Natanael C., Seki Kazuhiro, Sorella Sandro	4. 巻 126
2. 論文標題 Magnetism and Charge Order in the Honeycomb Lattice	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 107205/1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.126.107205	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 Costa Natanael C., Seki Kazuhiro, Yunoki Seiji, Sorella Sandro	4. 巻 3
2. 論文標題 Phase diagram of the two-dimensional Hubbard-Holstein model	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Communications Physics	6. 最初と最後の頁 80/1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42005-020-0342-2	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 Kazuhiro Seki, Tomonori Shirakawa, Seiji Yunoki	4. 巻 -
2. 論文標題 Symmetry-adapted variational quantum eigensolver	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 Kazuhiro Seki, Seiji Yunoki	4. 巻 -
2. 論文標題 Thermodynamic properties of an $S=1/2$ ring-exchange model on the triangular lattice	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 -

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 関和弘
2. 発表標題 ミクロカノニカル集団のための 量子古典ハイブリッド計算法
3. 学会等名 量子物理学・ナノサイエンス第353回セミナー（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 関和弘
2. 発表標題 ミクロカノニカル集団のための量子古典ハイブリッド計算法
3. 学会等名 物性研究のための量子アルゴリズム最前線（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kazuhiro Seki
2. 発表標題 Quantum-classical hybrid algorithm for microcanonical ensembles
3. 学会等名 Quantum Many-Body Systems In and Out of Equilibrium（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kazuhiro Seki
2. 発表標題 Quantum-classical hybrid method for microcanonical ensembles
3. 学会等名 Workshop on Quantum Simulation Research（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 関和弘
2. 発表標題 Symmetry-adapted variational quantum eigensolver
3. 学会等名 分野横断ワークショップ「量子コンピュータ研究開発の現在とこれから 量子ビットからソフトウェア・アプリケーションまで 」
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

量子コンピュータを用いたべき乗法 - 量子多体問題に対する新しい量子アルゴリズムを提案 -  
[https://www.riken.jp/press/2021/20210310\\_1/](https://www.riken.jp/press/2021/20210310_1/)

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
---------	---------