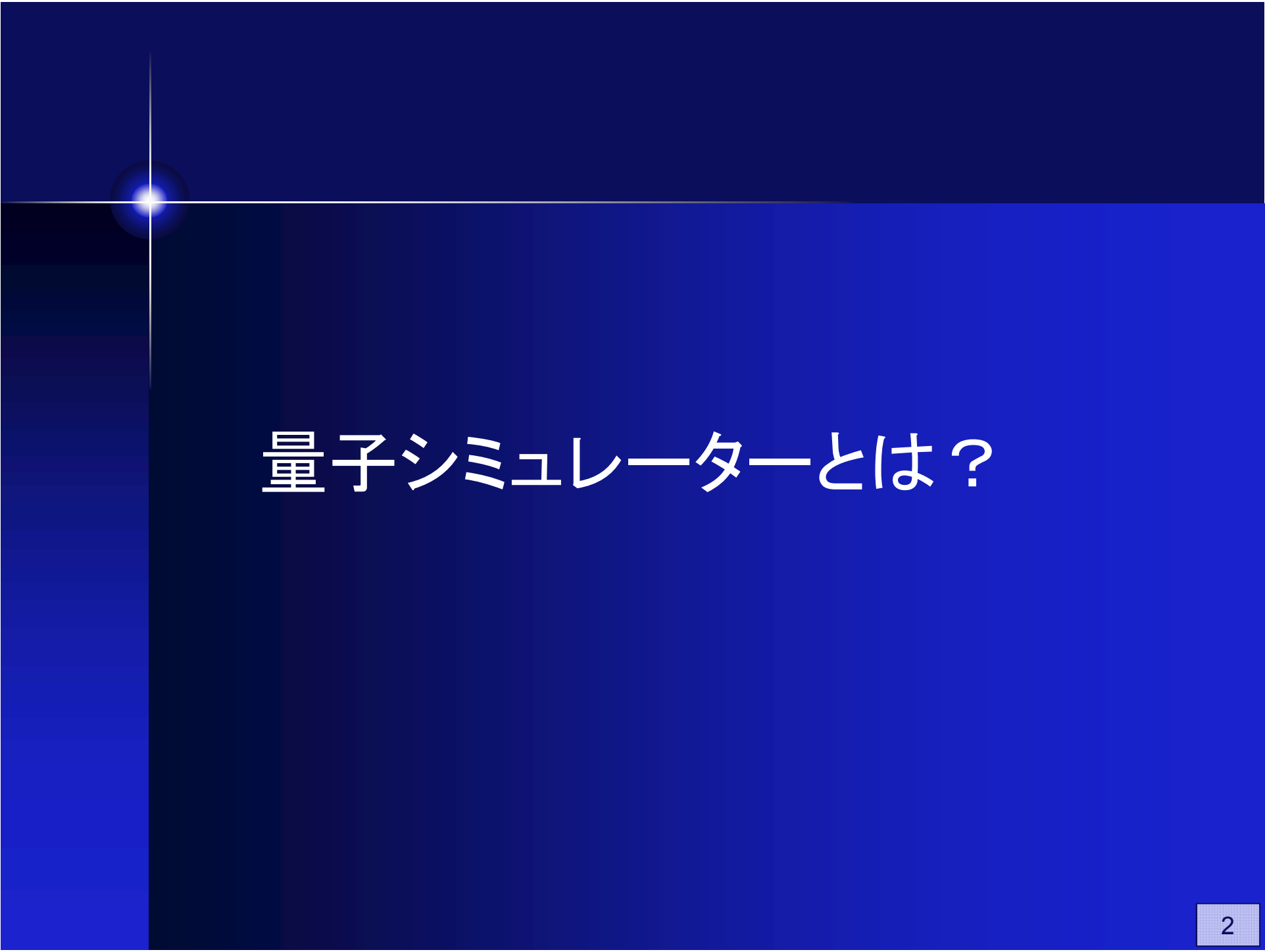


科学技術・学術審議会 先端研究基盤部会 量子科学技術委員会(第4回) 参考資料

量子シミュレーターの概念と研究動向

自然科学研究機構 分子科学研究所
大森 賢治

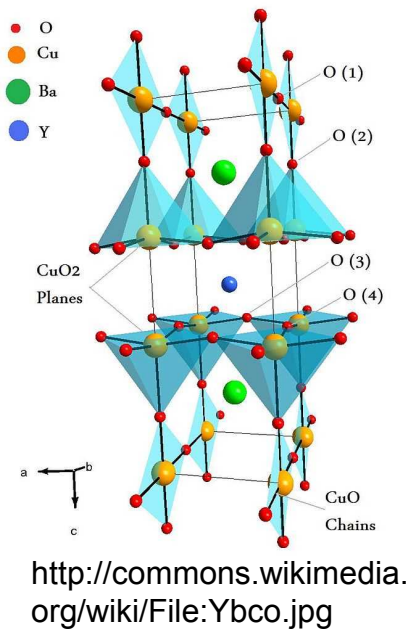


量子シミュレーターとは？

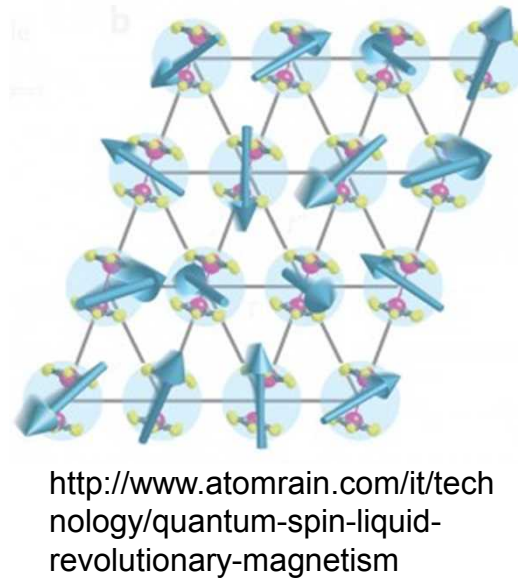
量子多体問題

多体相互作用は多くの重要な物理・化学現象を支配している

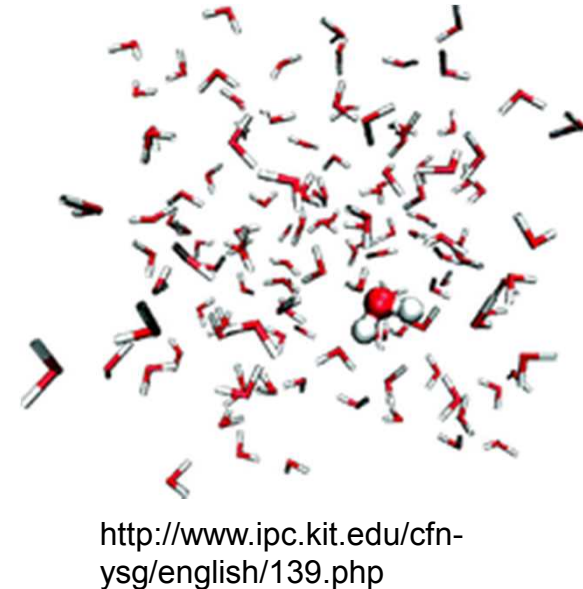
超伝導



磁性



溶媒効果



平均場近似を超えて多体相互作用を理解する

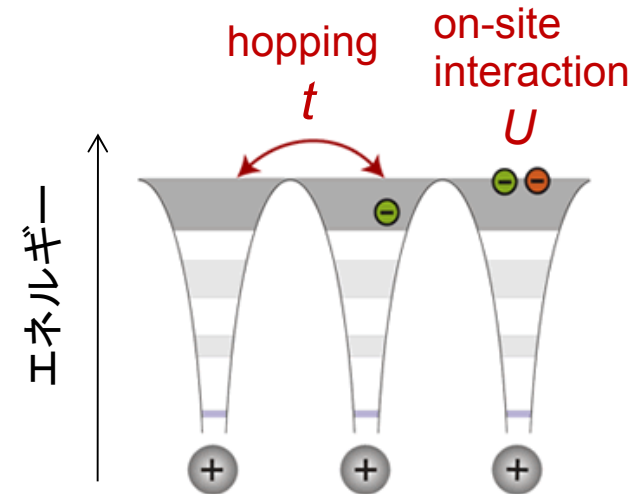
➡ 現代科学における中心課題の一つ

量子多体問題

例) Hubbard模型:

固体中で多体相互作用する電子を記述する最も単純なモデルの一つ

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$



<https://www.quantum-munich.de/research/ultracold-fermions-in-optical-lattices/>

- ✓ ポスト京コンピューター(2020年完成予定)でも30粒子以上のHubbard模型は解けない
- ✓ 1000粒子なら 10^{274} 年かかる



<http://www.aics.riken.jp/learnmore/sitetour/>

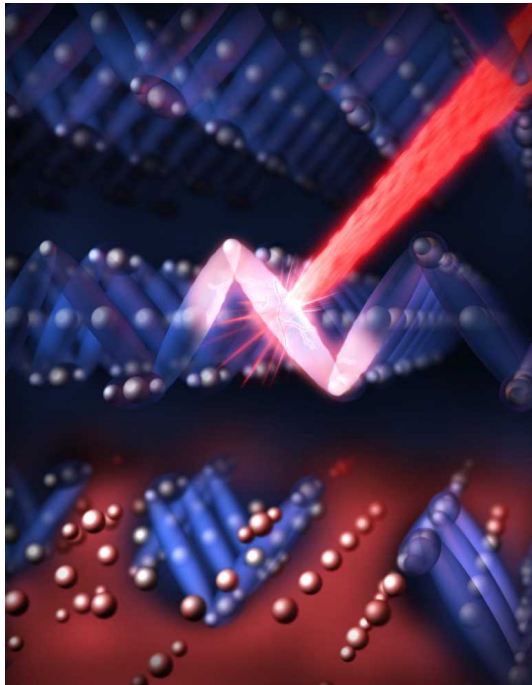
量子多体系の古典計算アルゴリズム

	格子点数	モデルの制限	次元の制限	精度
厳密対角化法 (ED)	< 30	なし	なし	数値誤差の精度内で 厳密
密度行列 繰り込み群法 (DMRG)	~ 1,000	なし	1次元	<u>16サイトの比較でED</u> に対して9桁程度
量子モンテ カルロ法 (QMC)	~ 10,000	あり ⁽¹⁾	なし	<u>16サイトの比較でED</u> に対して3桁程度
経路積分 繰り込み群法 (PIRG)	~ 1,000	なし	なし	負符号問題が生じな い場合 ⁽²⁾ のQMCに 対して3桁程度

- (1) ボゾン系では数万格子サイトでも計算可能; フェルミオン系やフラストレートスピン系では負符号問題のため有意な結果が得られない場合がある
- (2) 量子モンテカルロ法によるフェルミオン系の計算でも、ハバードモデルのhalf-fillingの場合(アップスピンとダウンスピンの数が同じ)は、負符号問題が生じない

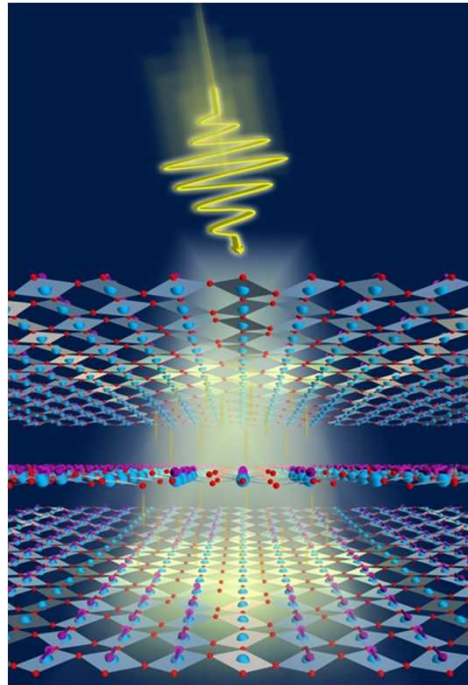
量子多体ダイナミクス

マグネタイト Fe_3O_4 に近赤外フェムト秒光パルス照射して1兆分の1秒で絶縁体から金属に変化させる
de Jong *et al.*, *Nature Mat.* **12**, 882 (2013)



<https://www6.slac.stanford.edu/news/2013-07-28-Speed-Limit-Set-Ultrafast-Electrical-Switch.aspx>

銅酸化物 $\text{La}_{1.675}\text{Eu}_{0.2}\text{Sr}_{0.125}\text{CuO}_4$ に中赤外フェムト秒光パルス照射して1兆分の1秒で超伝導体に変化させる



https://www.mpg.de/986735/Laser_bewirkt_Supraleitung?page=1

光などの外部刺激で量子多体系を制御

中赤外フェムト秒光パルスは K_3C_{60} の高温超伝導を誘起する？
Mitrano *et al.*, *Nature* **530**, 461 (2016)

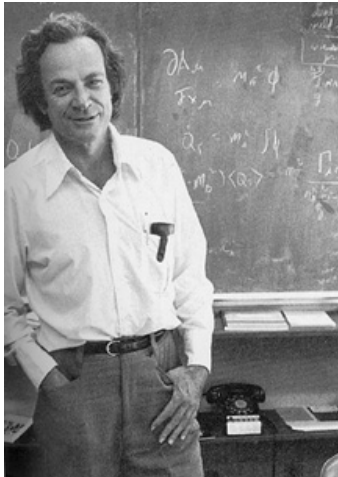
都合により掲載
できません

Nature Phys. **12**, 202 (2016)

刺激後の非定常な時間発展(ダイナミクス)が重要

ダイナミクスの計算は定常状態の計算よりずっと難しい

量子シミュレーターとは？



..., because nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy.

R. P. Feynman, Int. J. Theor. Phys. 21, 467 (1982).

量子的現象を古典計算機でシミュレートすると指数関数的な時間が必要となるが、量子計算機ならばそうはならない。

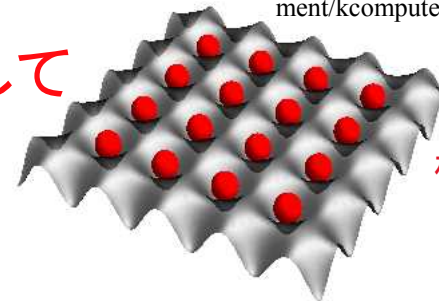
量子多体問題を古典計算機で解くのは困難



人工的な量子多体系にマッピングして
実験的にシミュレートする



<http://www.riken.jp/en/research/environment/kcomputer/>



極低温原子集団
マイクロ～ナノ
ケルビン

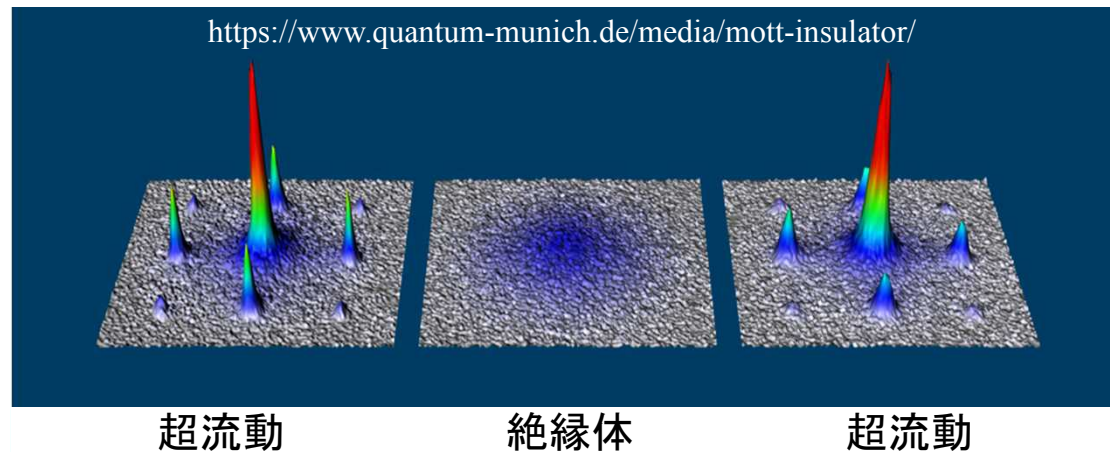
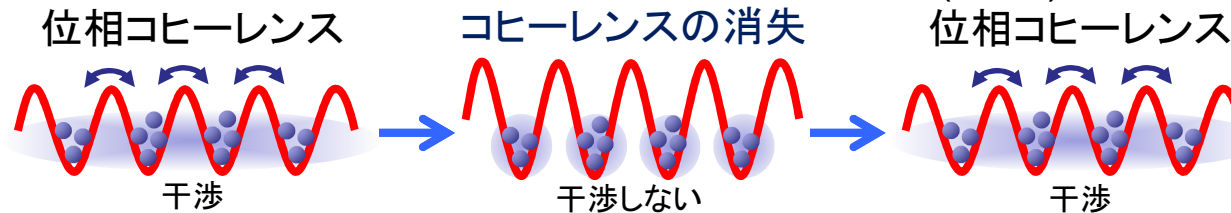
冷却原子を用いた量子シミュレーターの提案と実現

光格子ポテンシャル中の冷却原子を用いた
Hubbard模型の量子シミュレーションの理論提案;
超流動 – Mott絶縁体相転移

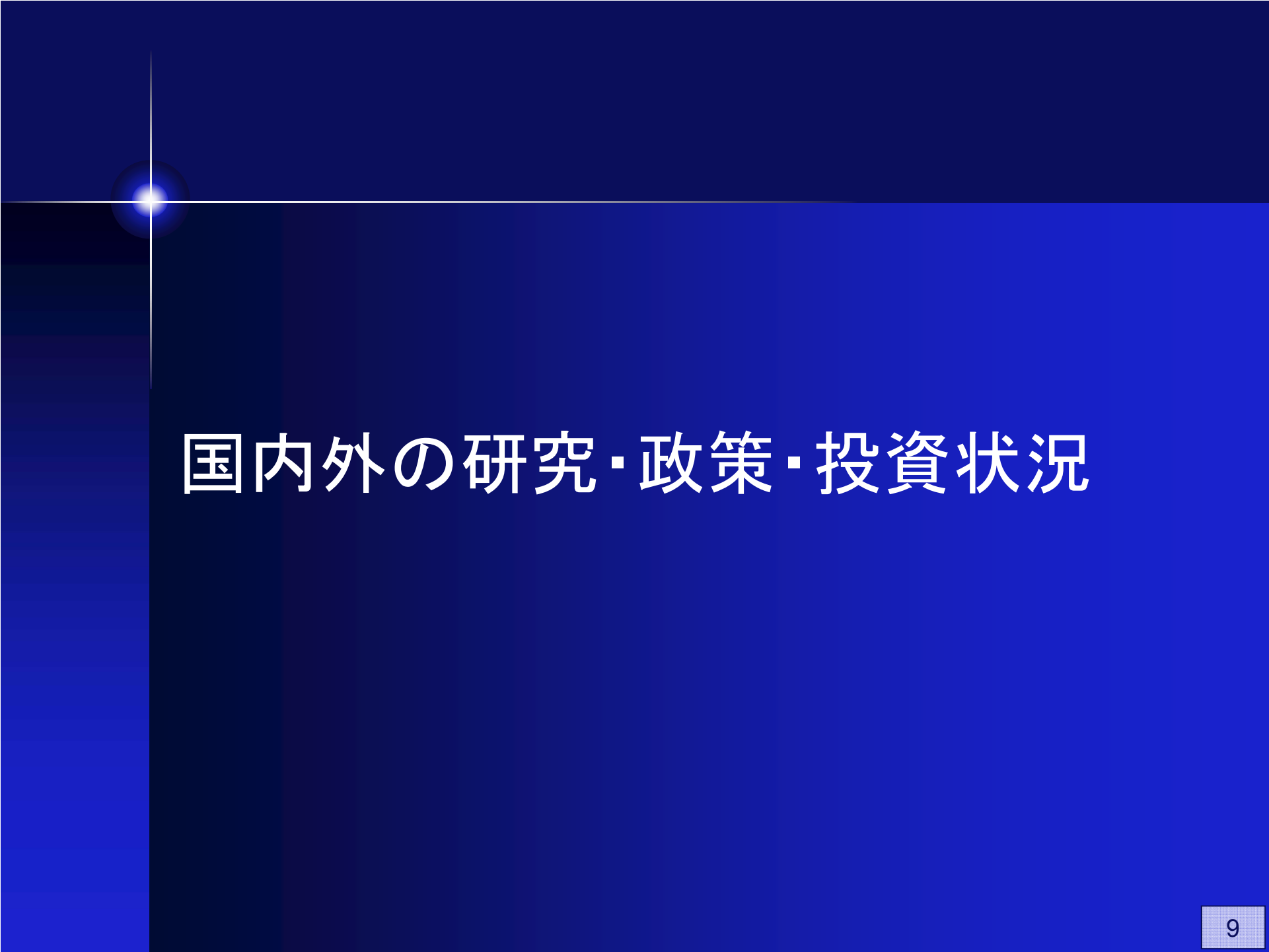
D. Jaksch et al, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).



実験: M. Greiner et al, *Nature* **415**, 39 (2002)



1000粒子を100ミリ秒以内にシミュレートできる(ポスト京なら 10^{274} 年かかる)



国内外の研究・政策・投資状況

量子シミュレーターの実装方式

方式	利点	最大サイト数	課題	研究グループ
冷却原子・分子	多様な多体系を再現可能 (相互作用etc.)	数10万サイト	単一格子レベルの制御	Bloch@MPQ(ドイツ), Greiner@Harvard大(米国), Esslinger@ETHZ(スイス), Ye/Jin@JILA(米国), Ketterle@MIT(米国), etc.
イオントラップ	単一イオンの制御・観測が容易	約300サイト Bollinger@NIST(米国), Nature 484 , 489 (2012)	多体系への拡張	Monroe@JQI(米国), Blatt@Innsbruck大(オーストリア), Schaetz@Freiburg大(ドイツ), Wineland@NIST(米国), etc.
超伝導量子ビット (量子アニーリング)	特定の問題に対する高い 制御性・拡張性	512サイト D-Wave Systems (カナダ)	真に高速化できているか議論中 (2016年現在)	Martinis@UCSB(米国), D-Wave Systems(カナダ), etc.
線形光学素子	制御性	6サイト Pan@中国科学技術大 (中国)、Phys. Rev. Lett. 102 , 030502 (2009)	大規模化	O'Brien@Bristol大(英国), White@Queensland大(オーストラリア), etc.

国外の研究動向・現状

冷却原子・分子

・短距離相互作用のシミュレーションから長距離相互作用のシミュレーションへ

極性分子を用いたスピン模型

Ye/Jin@JILA(米国)

Nature **501**, 521 (2013)

共振器中で長距離相互作用を実現

Esslinger@ETHZ(スイス)

Nature **532**, 476 (2016)

磁性原子による拡張ボーズ・ハバード模型

Ferlaino@Innsbruck大(オーストリア)

Science **352**, 201 (2016)

都合により掲載できません

・個々の原子のイメージング・マニピュレーション

- ボゾンの原子(2010年～)

Greiner@Harvard大(米国), Bloch@MPQ(ドイツ), 他

- フェルミオンの原子(2015年～)

Kuhr@Strathclyde大(英国), Zwierlein@MIT(米国), 他

フェルミオン原子のモット絶縁体の
単一サイトイメージング

Greiner@Harvard大(米国), Science **351**, 953 (2016)

都合により掲載できません

・様々な量子現象・物理現象のシミュレーション

- 量子輸送現象 例: Esslinger@ETHZ(スイス), Science **350**, 1498 (2015)

- 量子ホール効果 例: Inguscio@Florence大(イタリア), Science **349**, 1510 (2015)

- 宇宙論 例: Chin@Chicago大(米国), Science **341**, 1213 (2013)

- 光合成 例: Weidemüller@Heidelberg大(ドイツ), Science **342**, 954 (2014)

量子ポイントコンタクトでの輸送現象のシミュレート

Esslinger@ETHZ(スイス)

Science **350**, 1498 (2015)

都合により掲載できません

国外の研究動向・現状

イオントラップ

・イジング模型; 2体から多体系へ

2体での実証

Schaez@MPQ(ドイツ), Nature Phys. **4**, 757 (2008)

1次元トラップ(最大16個のイオン)での反強磁性の観測

Monroe@JQI(米国), Science **340**, 583 (2013)

2次元トラップへ拡張(約300個のイオン)
Bollinger@NIST(米国), Nature **484**, 489 (2012)

都合により掲載できません

都合により掲載
できません

・フラストレートスピン系へ応用

反強磁性イジング相互作用を積極制御

Monroe@JQI(米国), Nature **465**, 590 (2010)

都合により掲載できません

超伝導量子ビット

(量子アニーリング以外)

・様々な理論モデルの提案

Solano@Basque大(スペイン), Phys. Rev. Lett. **112**, 200501 (2014)

Girvin@Yale大(米国), Phys. Rev. A **82**, 043811 (2010)

Nori@理研, Phys. Rev. B **81**, 014505 (2010)

・実証実験の開始

2個の量子ビットを用いたイジング, ハイゼンベルグ模型の実証

Wallraff@ETZH(スイス), Phys. Rev. X **5**, 021027 (2015)

都合により掲載できません

国内の研究動向・現状

京都大学・高橋義朗グループ

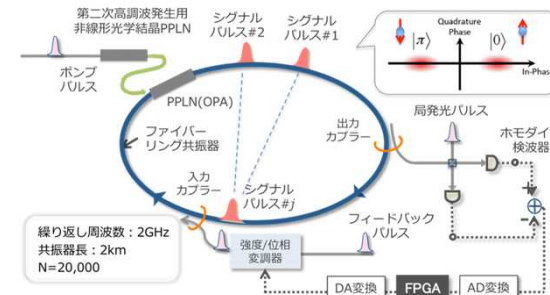
- ・冷却原子
- ・光リープ格子の平坦バンドを利用
- ・銅酸化物高温超伝導体をシミュレート

都合により掲載できません

Science Advances 1, e1500854 (2015)

NII・山本喜久グループ

- ・レーザー／OPOネットワーク
- ・コヒーレント・イジングマシン
- ・イジング模型をシミュレートし、組合せ最適化問題を解く



NII山本・宇都宮グループのホームページより

(<https://qistokyo.wordpress.com/research/coherent-ising-machine/>)

理研・中村泰信グループ

- ・超伝導量子ビット
- ・ジョセフソン接合を多数配列
- ・量子多体系をシミュレート

都合により掲載できません

量子ニュース 16, 7 (2015)

大阪大学・占部伸二グループ

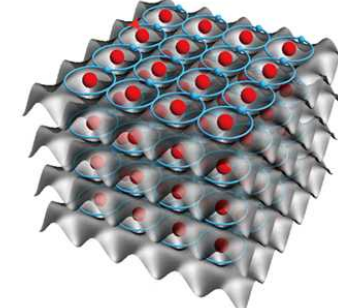
- ・イオントラップ
- ・イオンの内部状態とフォノンを利用
- ・Jaynes-Cummings-Hubbardモデル

都合により掲載できません

Phys. Rev. Lett. 111, 160501 (2013)

分子研・大森賢治グループ

- ・冷却原子
- ・強相関リユードベリ原子集団
- ・超高速多体電子ダイナミクス



科研費・特別推進研究(H28～)

国内外の政策・投資状況1

ダボス会議でのEC副議長の演説

Neelie Kroes (Vice-President of the European Commission)

“A vision for Europe” @ World Economic Forum ; Davos, 22 January 2014

において量子テクノロジー研究への投資の重要性を強調

英国の量子テクノロジー政策 (2014 ~)

UK National Quantum Technologies Programme 500億円 / 5年

オランダの量子テクノロジー政策 (2015 ~)

IntelとQuTech (オランダ応用科学研究機構TNO+Delft工科大) が提携 240億円 / 10年

米国の量子テクノロジー政策 (2006 ~)

国家安全保障局(NSA)・国立標準技術研究所などが共同量子研究所(JQI)を設立

中国の量子テクノロジー政策 (2014 ~)

中国科学アカデミー5大重点分野:

- 1) 量子情報および量子物理
- 2) 青海チベット高原における地球システム科学
- 3) 素粒子物理
- 4) 脳科学
- 5) 熔融塩原子炉

“The CAS Center for Excellence Quantum Information and Quantum Physics”

ロシアの量子テクノロジー政策 (2010 ~)

“Russian Quantum Center (RQC)” @ Skolkovoイノベーション特区

日本の量子テクノロジー政策 (2015 ~)

文部科学省・科学技術・学術審議会に量子科学技術委員会が発足

国内外の政策・投資状況2

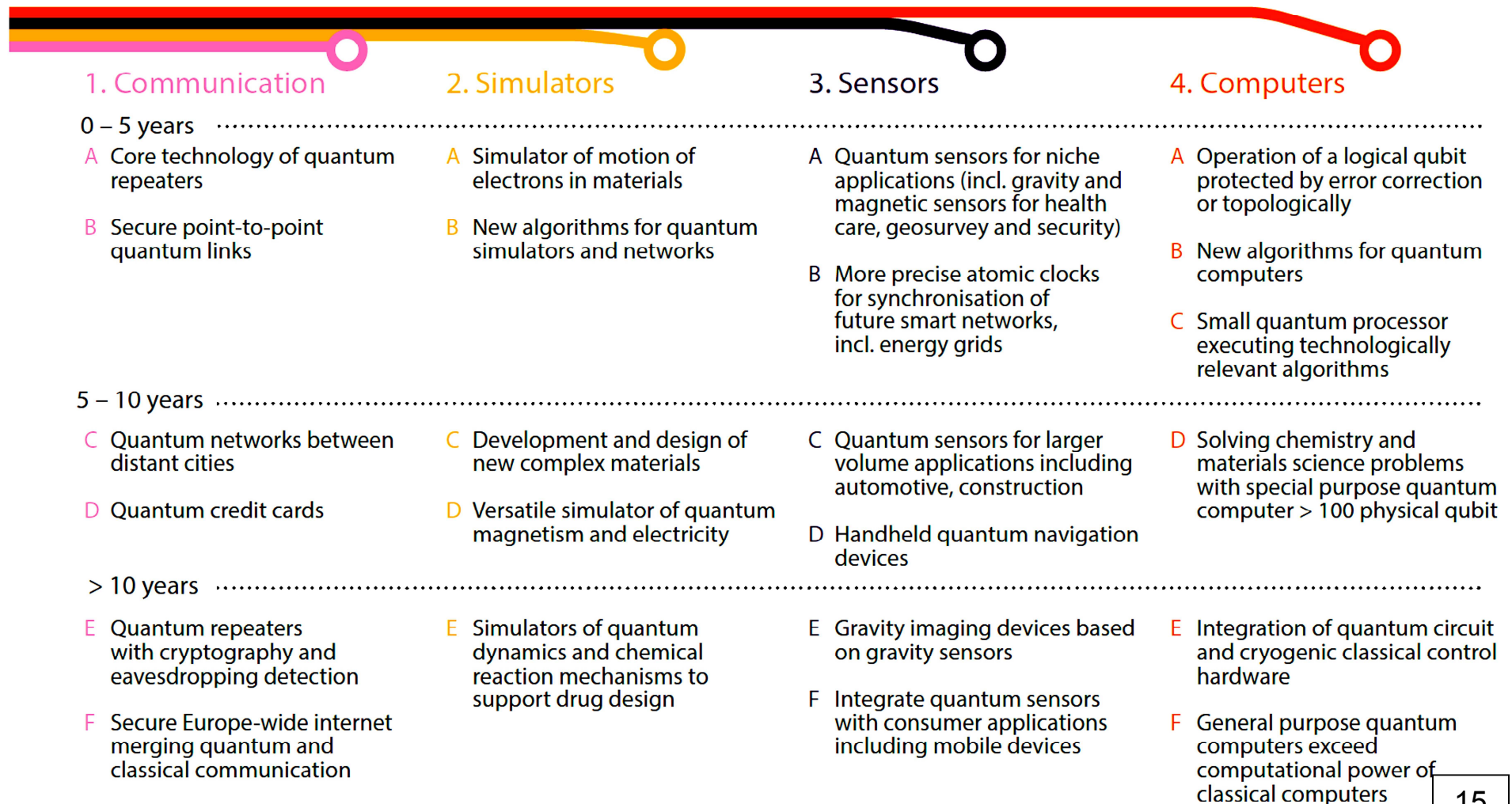
EC Future & Emerging Technologies (FET) Flagships:

1. Graphene

2. The Human Brain Project

3. Quantum Manifesto (申請中): 10億ユーロ / 10年

http://qurope.eu/system/files/u7/93056_Quantum%20Manifesto_WEB.pdf



まとめ; 現状と今後の方向性

現状

- 量子シミュレーターは主要各国の量子科学技術政策におけるキラードメインの一つ
- 量子格子模型 (Hubbard, Heisenberg, Ising など) の定常状態のシミュレーションは欧米が大幅に先行

今後の方向性

- 時間発展 (ダイナミクス) のシミュレーション
- 不規則系 (ガラス・液体 など) のシミュレーション