

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

|                   |  |
|-------------------|--|
| 題目(和文)            | 量子多体系のための有効模型アプローチによる電子相関解析と量子アルゴリズム開発：量子多体系としての電子化物への応用   |
| Title(English)    | Electron correlation analysis and quantum algorithm development by an effective model approach for quantum many-body systems; application to electriles as quantum many-body systems           |
| 著者(和文)            | 菅野志優   |
| Author(English)   | Shu Kanno  |
| 出典(和文)            | 学位:博士(理学),<br>学位授与機関:東京工業大学,<br>報告番号:甲第11707号,<br>授与年月日:2022年3月26日,<br>学位の種別:課程博士,<br>審査員:多田 朋史,細野 秀雄,神谷 利夫,大場 史康,北野 政明,松石 聡,合田 義弘,松下 雄一郎  |
| Citation(English) | Degree:Doctor (Science),<br>Conferring organization: Tokyo Institute of Technology,<br>Report number:甲第11707号,<br>Conferred date:2022/3/26,<br>Degree Type:Course doctor,<br>Examiner:,,,,,,,, |
| 学位種別(和文)          | 博士論文   |
| Category(English) | Doctoral Thesis  |
| 種別(和文)            | 論文要旨   |
| Type(English)     | Summary  |

## 論文要旨

THESIS SUMMARY

|  |          |          |   |                 |      |
|--|----------|----------|---|-----------------|------|
| 系・コース：<br>Department of, Graduate major in | 材料<br>材料 | 系<br>コース | 申請学位 (専攻分野)：<br>Academic Degree Requested | 博士<br>Doctor of | (理学) |
| 学生氏名：<br>Student's Name                    | 菅野 志優    |          | 指導教員 (主)：<br>Academic Supervisor(main)    | 多田 朋史 特任教授      |      |
|  |          |          | 指導教員 (副)：<br>Academic Supervisor(sub)     | 北野 政明 准教授       |      |

### 要旨 (和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters )

電子化物は空隙中の s 電子がアニオンとして振る舞う物質群である。近年、電子化物において量子多体系の振る舞いを示すものが現れ、それらの高精度物性計算が必要とされている。本博士論文は有効模型アプローチによる量子多体系としての電子化物解析 (第二章、第三章) と、量子多体系の高精度計算のための量子アルゴリズム開発 (第四章、第五章) に関するものである。

第一章では研究背景として、量子多体系としての電子化物、量子多体系を解析するための有効模型アプローチやソルバー、そしてソルバーとしての量子アルゴリズムの現状を概説した。またそれらを踏まえた上で本論文の研究目的と本論文全体の概要を記した。

第二章では、電子化物の電子相関の傾向を第一原理計算から系統的に調べた。最局在 Wannier 関数 (以降 Wannier 関数) と制限付き乱雑位相近似 (cRPA) を用いて、0 次元から 3 次元系までの 19 種類の無機電子化物のアニオン電子に対する強相関度 (アニオン電子における有効 Coulomb エネルギーと運動エネルギーの比) を計算した。得られた強相関度はアニオン電子の次元性と強く相関しており (0D  $\gg$  1D  $>$  2D  $\approx$  3D の順で変化)、この傾向は実験的な傾向とよく一致することを見出した。また、今回取り扱ったすべての 0D 系と一部の 1D 系では、強相関度が 10 を超える結果を得ており、10 は電子相関に起因する強相関物性の発現を示す指標であることから、多くの低次元電子化物で強相関物性が期待できる。1D 系では、アニオン電子を囲むカチオンの種類が  $\text{Ca}^{2+}$ 、 $\text{Sr}^{2+}$ 、 $\text{Ba}^{2+}$  の順に電子相関が強くなり、 $\text{Ba}_5\text{As}_3$  では強相関度が 10 を超えた。これらの結果から、0D 系および 1D 系の電子化物が、従来の d, f 電子系に加えて量子多体系の新たな研究対象になることを見出した。

第三章では計算コストの高い強相関度計算を、低い計算コストで見積もるための方法について説明した。強相関度計算のうち特に計算コストが高いのは有効オンサイト Coulomb 反発  $U$  の計算であるため、 $U$  を簡便に見積もる方法を提案した。まず、いくつかの球対称波動関数 (例: Slater 型関数) について裸のオンサイト Coulomb 相互反発  $V$  と波動関数の分散に関連する物理量 ( $A$  とする) の間に  $V$ - $A$  の比例関係が成り立つことを解析的に導出し、第一原理計算で得られたアニオン電子軌道 (に対応する Wannier 関数) の  $V$  と  $A$  との間にも同様な比例関係が成り立つことを明らかにした。次に、解析計算により有効オンサイト Coulomb 反発  $U$  と  $A$  の間にも  $A$  が大きな領域では線形関係が成立することを示した。そこで cRPA から得られた  $U$  と  $A$  のデータを用いることで、アニオン電子軌道の  $A$  から  $U$  を推定する関係式を得た ( $A$  は Wannier 関数を計算すれば得られる量であるため計算コストは低い)。フィッティングに使用しなかった電子化物の  $U$  も同関係式から予測される  $U$  とよく一致した。よって電子化物における電子相関は低コストで定量評価可能であることを示した。

第四章では第一原理計算による有効模型構築に基づいた、周期系の量子多体系において量子アルゴリズムを実行するためのワークフロー及び新規量子アルゴリズムを提案した。このワークフローでは、Wannier 関数と cRPA を用いて有効模型を構築し、その模型に対して基底状態計算用の量子アルゴリズムである変分量子固有値ソルバー (VQE) を実行することで物性値を取得する。また VQE 実行においては、量子回路上で制限付きボルツマンマシン (ニューラルネットワークの一種) を実装することで、周期系の波動関数に必須な複素数成分を持つ波動関数を生成する量子アルゴリズムを提案した。ベンチマークとしてグラフェンの平均場ハバードモデルの有効模型を作成しバンド構造を本アルゴリズムにより計算したところ、数 meV の精度で厳密対角化の結果と一致した。この結果から、量子コンピューターは周期系の量子多体問題を高速かつ正確に解きうることを示した。

第五章では、中～大規模量子多体系の計算を量子アルゴリズムで実行する際に要求されるリソース (量子ビット数、ゲート数) を見積もった。具体的には、有効ハミルトニアン の時間発展計算 (ハミルトニアンシミュレーション) の実行に必要なリソースを見積もった。対象物質は、有機系超伝導体、鉄系超伝導体、二元系遷移金属酸化物、ペロブスカイト酸化物に分類される 13 の化合物である。対象化合物の有効ハミルトニアンは Wannier 関数と cRPA から取得した。また現在主流の超伝導型量子計算機でハミルトニアンシミュレーションを実行するにはフェルミオニックスワップネットワークという遠距離相互作用を量子計算機上で演算させる手法が必要だが、これを今回の交換相互作用を含む有効ハミルトニアンで適用可能とするための手順を考案した。結果として、例えば中規模系において、必要となる量子ゲート数と量子ビット数は、平均してそれぞれ約  $10^7$  と約  $10^3$  であった。また中規模系では、有効ハミルトニアン の相互作用項数、特に Coulomb 相互作用の項数が要求されるゲートリソースの支配的因子であるが、系のサイト数が多くなると、フェルミオニックスワップ演算数が支配的となることを明らかにした。現在の量子コンピューターにおける実行可能ゲート数は  $10^3$  程度 (量子ビット数は  $10^2 \sim 10^3$  程度) である。そのため現在の量子計算機では中規模の量子多体系の量子計算実行は難しく、今後実行を可能にするためには、特に Coulomb 相互作用の項数が少なくなるような有効ハミルトニアンの設計が必要となることを示した。

第六章では本論文における結果を総括した。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1 copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ (T2R2) にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

(博士課程)  
Doctoral Program

## 論文要旨

THESIS SUMMARY

|  |          |          |  |                 |      |
|--|----------|----------|--|-----------------|------|
| 系・コース：<br>Department of, Graduate major in | 材料<br>材料 | 系<br>コース | 申請学位 (専攻分野) :<br>Academic Degree Requested | 博士<br>Doctor of | (理学) |
| 学生氏名 :<br>Student's Name                   | 菅野 志優    |          | 指導教員 (主) :<br>Academic Supervisor(main)    | 多田 朋史 特任教授      |      |
|  |          |          | 指導教員 (副) :<br>Academic Supervisor(sub)     | 北野 政明 准教授       |      |

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words )

Electrides are unique materials in which s-electrons confined at crystalline voids behave as anions. Recently, quantum many-body effects have been observed in some inorganic electrides, and thus the calculation of the physical properties with high accuracy is required for electrides. This doctoral thesis is devoted to the quantum many-body analysis of inorganic electrides and to the development of quantum algorithms for calculating quantum many-body systems with high accuracy, which is based on the effective model approach from first principles.

In the first part of the thesis (Chapter 2 and Chapter 3), I analyzed the electron correlation of electrides as a quantum many-body system. The electron correlation is quantitatively evaluated from the calculation of the effective model parameters, such as effective Coulomb interactions and transfer integrals, from first principles. I found i) the strength of the electron correlation depends on the dimensionality of anionic electrons, and ii) the 0D and 1D electrides can be new research targets as quantum many-body systems.

In the second part of the paper (Chapter 4 and Chapter 5), I developed a quantum algorithm for the calculations of periodic quantum many-body systems with quantum computers, which are expected for computations with high accuracy. The new quantum algorithm for the calculations of periodic quantum many-body systems is based on the effective model construction. In the proposed algorithm, a restricted Boltzmann machine which is one of the neural networks is implemented on a quantum circuit to generate a complex-valued wavefunction that is essential for the calculation of a periodic system. I applied the algorithm to a graphene band calculation and showed that the quantum algorithm can be used to calculate the physical properties in the periodic quantum many-body systems with high accuracy of  $\sim$ meV by using the effective model approach. I also estimated the required number of qubits and gates for the execution of the quantum algorithm for large-scale quantum many-body systems.

備考 : 論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意 : 論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).