

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                   |
| 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)            | 審査の要旨  |
| Type(English)     | Exam Summary   |

(博士課程)

## 論文審査の要旨及び審査員

| 報告番号        | 甲第  | 号     | 学位申請者氏名 | 菅野 志優  |       |
|-------------|-----|-------|---------|--------|-------|
| 論文審査<br>審査員 |     | 氏名    | 職名      | 氏名     | 職名    |
|             | 主査  | 多田 朋史 | 特任教授    | 北野 政明  | 准教授   |
|             | 審査員 | 細野 秀雄 | 特命教授    | 松石 聡   | 准教授   |
|             |     | 神谷 利夫 | 教授      | 合田 義弘  | 准教授   |
|             |     | 大場 史康 | 教授      | 松下 雄一郎 | 特任准教授 |

### 論文審査の要旨 (2000 字程度)

本博士論文は、一連の無機電子化物における電子相関の強さを定量的に評価するための第一原理量子多体モデルに基づいた手法を提案するとともに、量子多体系の高精度物性計算が可能になると期待されている量子コンピュータによる無機固体材料のための量子アルゴリズム開発を行ったものである。本論文は、材料科学、計算科学、量子情報科学と多岐に渡る研究分野に関わっており、材料科学分野から、細野特命教授、神谷教授、北野准教授、松石准教授、計算科学分野から大場教授、合田准教授（材料系金属コース）、量子情報科学分野から松下特任准教授（科学技術創成研究院）に審査員をご担当いただき、当該学生の指導教員である多田（特任教授）が主査として審査を行った。本論文の各章における研究内容は下記にて記載した通りであり、公聴会と最終審査会を実施し審査を行った。

第一章では研究背景が述べられており、量子多体系としての無機電子化物、量子多体系を解析するための有効模型アプローチ（有効ハミルトニアン）とソルバー、そしてソルバーとしての量子アルゴリズムの現状が概説されている。その上で本論文の研究目的が述べられている。

第二章は無機電子化物における電子相関の強さ（強相関度）の第一原理計算による定量評価に関する章である。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関する強相関度（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）が計算されている。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している。また、ここで取り扱われたすべての0D系と一部の1D系では、強相関度が10を超える結果が得られており、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、との結論が得られている。

第三章では無機電子化物における電子相関強さ（強相関度）を低コストで計算するためのオンサイト Coulomb 反発の解析法が提案されている。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  $U$  の第一原理計算であるため、 $U$  を簡便に見積もる方法の提案がなされている。最初に、複数の球対称波動関数（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  $\Omega$  の間に  $V-\Omega^{-0.5}$  の比例関係が成り立つことが解析的に導出されて

おり、第一原理計算で得られたアニオン電子軌道の  $V$  と  $\Omega$  との間にも同様な比例関係が成り立つことが明らかにされている。この関係性を  $U$  に対して適用し、アニオン電子軌道の  $\Omega^{-0.5}$  から  $U$  を推定する関係式を得ることに成功している；なお、波動関数の分散  $\Omega$  は Wannier 関数を計算すれば得られる量であるため、低い計算コストで  $U$  が見積もれることとなる。

第四章では、制限付きボルツマンマシンを用いた変分的量子固有値解法 (VQE) による量子多体系としての無機固体材料の計算法が述べられている。第2章、第3章で用いた量子多体モデルの枠組み (有効ハミルトニアン法) を踏襲し、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、固体 (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が提案されている。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ハミルトニアン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することが報告されている。この結果から、量子コンピューターは量子多体系としての無機固体の固有値問題を高速かつ正確に解きうるものであると結論されている。

第五章では、今後の量子コンピューティングの発展性を考慮し、量子多体計算のための量子リソース見積もり (必要となる量子ビット数と量子ゲート数) が報告されている。現在、量子多体問題を解くための手法が複数種提案されているが (本論文第4章もその一つ)、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) を経由する解法が最も一般的なものであるため、この章ではハミルトニアンシミュレーションの実行に必要な量子リソースが見積もられている。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。得られた結果として、サイト数が  $10^3$  を境に量子リソースの支配因子が変化し、現在のタイプの量子コンピューターでは  $10^3$  サイトを超える大規模な量子多体系の計算は実行が困難であり、今後そのような大規模量子多体系の計算を可能にするためには効果的な有効ハミルトニアンの設計が必要となることが提言されている。

第六章では、本論文の総括と今後の展望が述べられている。