

プロジェクト名(タイトル):

## 量子多体問題に対する計算手法の開発とその応用

利用者氏名:

○白川 知功(1,2)、Qinfang Zhang(3)

理研における所属研究室名:

(1) 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

(2) 量子コンピュータ研究センター 量子計算科学研究チーム

(3) 開拓研究本部 柚木計算物性物理研究室

### 1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

遷移金属酸化物、希土類-アクチノイドを含むf電子系化合物、および、分子性導体などに代表される物質群の電子状態は、電子が飛び回るホッピング項と電子間の相互作用項の両者を重要な役割を果たしていると考えられ、こうした系は量子多体系と呼ばれている。こうした量子多体系のシュレーディンガー方程式は量子多体問題と呼ばれ、解析的に解くことが難しいため、理論的解明には大規模な数値シミュレーションが大きな役割を果たしてきた。これまでに、第一原理バンド計算、量子モンテカルロ法、繰り込み群法、クラスター近似法など、様々な量子多体問題を解くための方法が考案され、発展してきたが、すべての問題に有効な万能な計算手法というものは現時点ではない。

そこで、本課題では、量子多体系を解くための数値計算手法を発展させるとともに、その手法の応用を試みてきた。特に、前年度までに、量子多体系のダイナミクスに関連する計算手法のコード開発や、量子計算機を用いる量子-古典ハイブリッド計算に関する研究も行ってきた。

本年度は、昨年度に引き続き、これまで開発してきた方法の応用研究に加え、テンソルネットワーク法を基にした量子多体問題を解くための量子-古典ハイブリッド計算方法の計算手法開発に取り組んだ。また、これと並行して、並列計算機用のテンソルネットワーク計算用のライブラリ開発にも取り組んだ。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

#### 【炭素欠陥グラフェンの電子状態計算】

グラフェンに炭素欠陥や元素吸着を導入すると、常磁性が生じることが実験的に報告されている。特に、炭素欠陥を導入した場合、スピン 1/2 の常磁性の磁化曲線をよく示す磁性が発生するが、キャリアドーブに依存して変化するものと変化しないものが存在することが報告されているが、これ

を説明する微視理論に基づく計算は報告されていなかった。

そこで、本研究では、炭素欠陥周りの  $sp^2$  ダングリング軌道と伝導帯に対応する  $\pi$  軌道を取り込んだ有効不純物 Anderson 模型[図 1 参照]を考え、これをこれまでの本利用課題で開発した Block-Lanczos DMRG 法を用いて解析した。

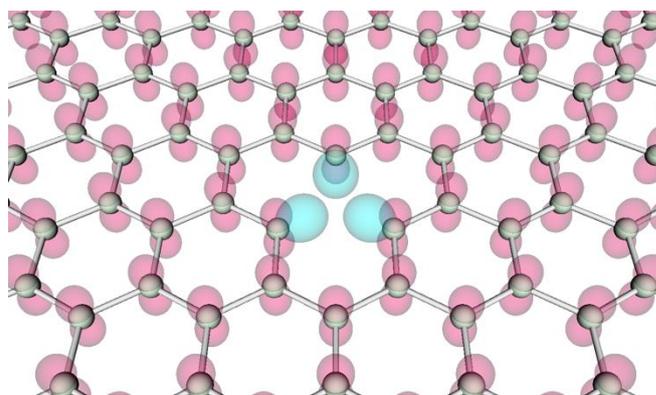


図1:炭素周りの  $sp^2$  ダングリング軌道(シアン)とグラフェンの伝導帯を構成する  $\pi$  軌道(マゼンダ)から構成される有効不純物アンダーソン模型。

#### 【多量子ビットユニタリ演算子の近似的構成法】

古典的に与えられた任意の状態を、量子計算機の入力状態として用意する場合、これをなんらかの形で回路として表現する必要がある。そこで、我々は、この問題について、デバイスの形状に応じて、より良い回路を自動構築する方法の開発に取り組んでいる。

特に、本年度は、前年度の構成方法の学習率を向上させる目的で、多量子ビットユニタリ演算子(つまり、2つ以上の量子ビット上に採用するユニタリ演算子)に対する最適化法を検討し、数値シミュレーションによるパフォーマンスの検証を行った。特に、本年度は、「K 量子ビットユニタリ演算子を (K-1) 量子ビットユニタリ演算子の積で近似的に表す」、という操作を2量子ビットユニタリ演算子になるまで繰り返し

行う「階層的最適化法」について検討した[図2参照]。

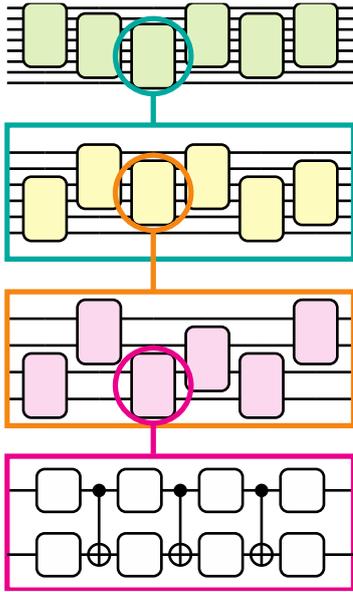


図2:階層的最適化法の概要図。大きなユニタリ演算子を、それより小さなユニタリ演算子の積で近似する操作を2量子ビットユニタリ演算子まで繰り返し、2量子ビットユニタリ演算子をデバイスで与えられている基本ゲートセットに置き換えることで、デバイス上で実行可能な量子回路を近似的に構築する。

### 3. 結果

#### 【炭素欠陥グラフェンの電子状態計算】

Block-Lanczos DMRG 法による解析から、我々は(1)炭素周りでは局所的に spin-1 の multiplet を形成するが、周りの伝導電子によってそのうちの spin-1/2 が partial screening を受けるため、結果として spin-1/2 の自由スピンの現れることがわかった。さらに、(2)この partial screening の結果として現れる spin-1/2 の自由スピンは、グラフェン上のキャリアドープに対して影響を受けないことがわかった。また、(3)局所的に形成される上記の multiplet は、欠陥周りの3重対称性の既約表現のうち、2重縮退した E 状態に属する状態となっていた。このことは、先行する第一原理計算等で、欠陥周りで面内の格子歪みが起こることと無矛盾であると同時に、この歪みが起こること自体は、自由スピンの発現の主たる要因ではないことが示唆される。さらに、不純物スピンと伝導電子間のスピン相関関数を調べた結果、(4)上記の partial screening 機構とは別に、グラフェンの擬ギャップ構造に由来するスピン相関の強調が確認された。このことは、実験事実が示す、キャリアドープに対して robust な spin-1/2 の自由スピンと、キャリアドープに対して敏感な spin-1/2 の自由スピンの存在が示唆された実験結果と符

合している。以上のことから、グラフェンの炭素欠陥周りの電子状態は、今回考えたダングリングボンドを全て考慮した有効不純物アンダーソン模型によって、うまく説明できることがわかった。

#### 【多量子ビットユニタリ演算子の近似的構成法】

階層的最適化法の有効性を調べるために、本課題では、まず、ハールランダムな K 量子ビットユニタリ演算子を、M 個の K-1 量子ビットユニタリ演算子の積で近似した場合に、どれくらいの精度が出るかを検証した。その結果、K>2 の場合には、M=6 で誤差  $10^{-8}$  程度の精度が出せることがわかった。また、上記と同様に、ハールランダムな K 量子ビットユニタリ演算子を K-2 量子ビット演算子の積で近似した場合には、M=36 程度で同様の精度が出るということがわかった。他方、それよりもサイズが異なる場合は、収束が遅くなり、実用的ではないことがわかった。

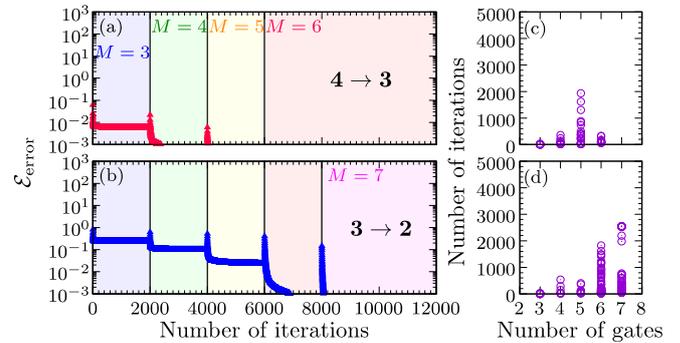


図3(a)(b): K 量子ビットユニタリ演算子 ((a)K=4, (b)K=3) を K-1 量子ビットユニタリ演算子の積で近似する際の最適化を行った場合の平均的な精度。M は K-1 量子ビットユニタリ演算子の数を表す。図3(c)(d):  $10^{-3}$  の精度になるまでに必要となる最適化のイタレーションの回数。

そこで、上記の結果を基に、ハイゼンベルグ模型の基底状態を出力として近似するような量子回路を近似的に構築する問題に応用してみた。この計算では、まず初めに、最も大きな K 量子ビットユニタリ演算子の積で、ハイゼンベルグ模型の基底状態を近似する最適化から行う。その結果、ユニタリ演算子のサイズ K を大きくすることで、指数関数的な学習効率の改善が確認された。次に、得られた K 量子ビットユニタリ演算子の積として表されている量子回路について、階層的最適化法を用いて、2量子ビットユニタリ演算子の積にまで変換する。実際に、16サイトのハイゼンベルグ模型の基底状態に対して、K=4 のユニタリ演算子の積で構成される回路 (fidelity にして  $10^{-3}$  程度) を得た後、上記の階層的最適化法を行った例を図3に記す。特に、K=4 のユニタリ

演算子を 3 量子ビットユニタリ演算子の積として表す場合 (図3(a))、元々の精度に到達するために必要な量子ゲートの個数  $M$  はほとんどが  $M=6$  より小さい数で達成できることがわかった。他方、3 量子ビットユニタリ演算子を 2 量子ビットユニタリ演算子の積として表す場合は、収束が遅くなるが、 $M=7$  まで取れば十分に収束できることがわかった。

したがって、上記の方法を用いることで、精度に応じて、回路長を柔軟に変更できることがわかった。この点は、NISQ 利用に適した方法論であると考えられる。

#### 4. まとめ

本年度は、これまでの利用と通じて開発してきた手法を用いて、グラフェン上の炭素欠陥周りの電子状態の解析を行った。その結果、実験結果をうまく説明する微視模型が特定でき、自由スピンの発現機構に関する新たな知見が得られた。

また、これとは並行して、量子多体問題を解くための新たな方向性として、量子計算手法の開発に取り組んだ。その結果、学習率を大きく向上できる一つの方向性を示すことができた。

#### 5. 今後の計画・展望

本年度開発した量子計算手法は、学習率を大きく向上させることには成功しているが、その反面、実機で利用できる範囲より多くのゲート数が出てしまうため、ゲート数を減らす効率的な方法論の開発が望まれる。そこで、今後の展望としては、計算コストの削減も兼ねて、対称性を考慮した多量子ビットユニタリ演算子の近似的構築方法や、他の量子コパイラとの併用などを検証し、より実用的な方法論の開発に努めたい。

2022年度 利用研究成果リスト

**【雑誌に受理された論文】**

[1] Tomonori Shirakawa and Seiji Yunoki, “Local multiplet formation around a single vacancy in graphene: An effective Anderson model analysis based on the block-Lanczos DMRG method”, *Physical Review B* **105**, 184110 (2022).

**【口頭発表】**

[2] 白川知功、“テンソルネットワーク法を基にした量子-古典情報の変換”、サステイナブル量子 AI 研究拠点「量子埋め込みグループ」研究課題説明会、2022年12月1日、オンライン開催

[3] 白川知功、“(量子機械学習に関連する)理研の取り組み”、サステイナブル量子 AI 研究拠点「量子機械学習グループ」研究課題説明会、2022年12月6日、オンライン開催

[4] 白川知功、上田宏、柚木清司、“テンソルネットワーク法に基づく量子多体状態の量子回路化”、日本物理学会2023年春季大会、2023年3月22日—25日、オンライン開催

**【ポスター発表】**

[5] Tomonori Shirakawa, Seiji Yunoki, “Density-matrix renormalization group study of local multiplet around a single vacancy in graphene”, 29<sup>th</sup> International Conference on Low Temperature Physics (LT29), Aug 18-24, 2022, Sapporo, Japan (Poster).