

物性研究所セミナー

標題：Quantum Signal Processing and Optimal Hamiltonian Simulation using Rydberg Atoms

日時：2022年2月4日(金) 午後4時~午後5時

場所：On Zoom

講師：Dr. Sho Sugiura

所属：NTT Research, Inc

要旨：

Quantum algorithms promise an immense improvement to our current information processing capabilities by utilizing interference phenomena in an exponentially large Hilbert space. However, the large size of the Hilbert space also poses a crucial challenge to the experimentalists, who strive to design protocols that navigate the Hilbert space using only a small number of semiclassical control fields.

In this talk, we propose concrete protocols to implement a framework of quantum algorithms on the experimental platform of Rydberg atoms [Sina Zeytinoglu and Sho Sugiura, arXiv:2201.04665]. What enables such an overarching proposal is the recently developed algorithms of Linear Combination of Unitaries (LCU) and Quantum Signal Processing (QSP), which was shown to unify core quantum subroutines such as phase estimation, search and Hamiltonian simulation. We aim to perform a comprehensive study of the implementation of these quantum algorithms in the Rydberg system. Specifically, we (1) identify the tree structure of the data to be loaded into the Rydberg system, (2) give the complete procedure to load the data into the Rydberg system and perform the calculation down to the laser pulse sequences, and (3) analyze the errors this procedure and show that it achieves a near-optimal implementation of the target algorithm, (4) develop a method to make the experimental system scalable with respect to the system size, and (5) calculate the resources required to run an optimal Hamiltonian simulation on the Rydberg system.

While these results are specific to the Rydberg platform, our results highlight the importance of including the details of the native dynamics relevant to a concrete experimental implementation when analysing the performance of quantum algorithms.

標題：Effects of electron-phonon and -magnon scattering on the finite temperature magnetization of permanent magnet materials

日時：2022年2月18日(金) 午後4時~午後5時

場所：Zoom 開催

講師：Prof. Hisazumi Akai

所属：ISSP, The University of Tokyo

要旨：

For the development of permanent magnet materials, it is crucial to improve their magnetic properties at finite temperature including the Curie temperature. In terms of first-principles electronic structure calculations, these properties are rarely addressed because of the difficulties arising from the itinerant nature of the magnetism of these materials. So far, most attempts have been made to use the nonlocal static susceptibility, calculated by, e.g., according to Liechtenstein's prescription, which is mapped to exchange couplings J 's of the classical Heisenberg model, and to apply statistical methods to it. One of the problems of such approaches is that J 's are actually strongly



temperature dependent in the itinerant electron systems is neglected. The effects of electron scattering due to phonons and magnons on J 's are particularly important. In the present study, we include both the effects on electronic structure and hence J 's at moderately high temperatures and discuss finite temperature magnetization and the Curie temperature from first-principles.

標題：テラヘルツ・中赤外光源開発とディラック半金属光制御への応用

日時：2022年2月24日(木) 午後0時15分～午後1時15分

場所：Zoom 開催

講師：神田 夏輝

所属：極限コヒーレント光科学研究センター 松永研究室 助教

要旨：

テラヘルツ帯や中赤外域の光は、物質の低エネルギー応答の観測において重要なツールであるとともに、高強度電場により電子を強く加速したり低エネルギー素励起を大振幅に引き起こしたりすることで、物質を光制御し新たな機能性を見出すことが可能となる。本セミナーでは、松永研究室で進めている光源開発の紹介とともに、ディラック半金属 Cd_3As_2 に関する最近の研究成果について紹介する。

1 THz 帯の高強度光源を用いた実験により、 Cd_3As_2 がディラック電子のコヒーレント加速によって高効率なテラヘルツ高調波を発生させることを見出した[1]。またマルチテラヘルツ帯と呼ばれる 10-50 THz 周波数帯の光源と分光技術の開発を行い[2]、 Cd_3As_2 の光学伝導度を複素量として 30 fs 以下の時間分解能で精密計測するシステムを開発した。これを用いたポンププローブ分光により、光励起キャリアによってマルチテラヘルツ帯の屈折率が 1/5 以下に急激に減少することを見出したほか[3]、周期的な強電場照射下においてフロッケ状態間共鳴とプラズマ振動に起因した巨大コヒーレント応答が現れることを発見した[4]。3次元ディラック半金属の円偏光励起によるフロッケ-ワイル半金属転換についても議論する。

[1] B. Cheng*, N. Kanda* et al., Phys. Rev. Lett. 124, 117402 (2020).

[2] N. Kanda et al., Opt. Express 29, 3479 (2021).

[3] N. Kanda et al., arXiv:2110.09689.

[4] Y. Murotani*, N. Kanda*, et al., arXiv:2112.13113.

*: equal contribution

標題：ISSP Informal Theory Seminar/Kavli IPMU Joint Seminar: The emergibility problem and an anomaly-based framework

日時：2022年3月3日(木) 午後0時～午後1時15分

場所：Zoom 開催

講師：LiuJun Zou

所属：Perimeter Institute

要旨：

One of the central themes of quantum many-body physics and quantum field theory is the emergence of universality classes at large scales out of the microscopic constituents at small scales. However, it is often rather difficult to identify in a controlled manner the universality class based on the microscopic physics of the system. I will discuss the inverse problem of the previous one, i.e. the “emergibility problem”: given a universality class, from which microscopic systems can it emerge? I will argue that quantum anomaly provides powerful insight into the emergibility problem, based on

which I will establish a framework for it. I will present the results obtained by applying this framework to study the emergibility of a family of exotic universality classes, dubbed “Stiefel liquids”. The Stiefel liquids form an infinite family that unify the celebrated deconfined quantum critical point and Dirac spin liquid and generalize them to possibly non-Lagrangian quantum critical states. Our anomaly-based framework for the emergibility problem allows us to predict all different realizations and specific properties of the Stiefel liquids in various frustrated magnets, such as triangular lattice spin-1/2 systems. Most of the realizations we identify were not envisioned before, and some of them cannot be described using the conventional approach.

Refs:

Ye, Guo, He, Wang, Zou, arXiv: 2111.12097.

Zou, He, Wang, arXiv: 2101.07805.

標題：スピン軌道結合金属パイロクロア Cd₂Re₂O₇ における多極子秩序転移：ランダウ理論に基づく磁気トルク解析

日時：2022年3月4日(金) 午前11時～午後0時

場所：Zoom 開催

講師：宇治 進也

所属：物質材料研究機構(NIMS)

要旨：

Re の 5d 電子が伝導体を形成するパイロクロア酸化物 Cd₂Re₂O₇ は、スピン軌道相互作用が比較的強く、スピン軌道結合金属と呼ばれる。室温では立方晶であるが、温度を下げると 200K と 120K でそれぞれ 2 次、1 次の構造相転移を引き起こし、正方晶へと対称性が低下する[1]。

それら相転移温度では、非常に小さな構造変化であるにも関わらず大きな電子状態の変化が観測されるため、スピン軌道相互作用によるフェルミ面構造の不安定性が相転移の起源と考えられている[2]。

対称性が極めて高い物質は、電子系の何らかの不安定性により対称性が落ちることが多いが、その本質となる秩序変数の対称性は、相転移メカニズム解明には重要な情報である。特に、Cd₂Re₂O₇ では多極子秩序転移であるために、一般には秩序変数を見極める実験は限られている。本セミナーでは、小さな単結晶 1 つで測定が可能なマイクロキャンティレバーを用いた磁気トルク信号の異方性を、ランダウ理論に基づき解析することで、秩序変数の対称性やその多極子秩序が決められることを示す。Cd₂Re₂O₇ は金属常磁性状態であるので、この測定ではパウリ常磁性の異方性を観測していることになる。このようなランダウ理論に基づくトルク測定・解析手法は前例がなく、相転移研究に非常に強力であることを紹介したい[3-5]。

本研究は、寺嶋太一 (NIMS)、杉浦栞理、廣瀬陽代、松林康仁 (産総研)、杉浦栞理 (東北大)、長谷川巧 (広島大)、杉井かおり、平井大悟郎、広井善二 (物性研) との共同研究である。

[1] L. Fu, Phys. Rev. Lett. 115, 026401(2015).

[2] Z. Hiroi, et al., J. Phys. Soc. Jpn. 87, 024702 (2018).

[3] Y. Matsubayashi, et. al., Phys. Rev. B 101, 205133(2020).

[4] S. Uji, et. al., Phys. Rev. B 102, 155131 (2020).

[5] S. Uji, et. al., J. Phys. Soc. Jpn. 90, 064714 (2021).



標題：大規模住民コホート調査における解析情報の蓄積と公開

日時：2022年3月11日(金) 午後4時30分～午後5時30分

場所：Zoom 開催

講師：元池 育子

所属：東北大学 東北メディカル・メガバンク機構

要旨：

東北メディカル・メガバンク機構(ToMMo)は、宮城県及び岩手県を中心とした被災地を含む地域の住民約15万人を対象として大規模健康調査を実施してきている。それとともに、協力者の生体試料、健康情報、医療情報等を収集し、ゲノム情報等と併せて解析することにより個別化医療等の基盤形成を目指し、生体試料と情報を統合した複合バイオバンクの構築を行ってきている。

我々はこれまで、日本人集団における対照群としての利用を想定し、生体試料の各種解析結果について、日本人多層オミクスリファレンスパネル(jMorp1)として公開してきている。2015年に約500人の血漿メタボローム/プロテオームの解析結果を公開し、以後年々収載データの量と種類を増やしてきた。現在ではゲノム解析情報やトランスクリプトーム、メチローム、口腔メタゲノム、日本人基準ゲノム配列なども合わせて収載しており2、ヒトに関わる生命科学の総合的な情報を収載するリファレンスパネルを目指している。ここではその取り組みについて紹介する。

[1] <https://jmorp.megabank.tohoku.ac.jp/>

[2] Tadaka et al., Nucleic Acids Research. 2020 Nov 12;gkaa1034.

標題：強磁場フォーラム フロンティア奨励賞の受賞講演

日時：2022年3月24日(木) 午前10時～午後0時

場所：Zoom 開催

要旨：

1. 「はじめに」

東京大学 物性研究所 徳永 将史

2. 「パルス・定常強磁場を併用した NMR 測定によるマイクロな強磁場物性研究」

北海道大学 井原 慶彦 (30分)

3. 「強磁性・反強磁性相互作用の競合する量子磁性体の理論的研究」

慶応義塾大学 古川 俊輔 (30分)

4. 「磁場に依存しない温度計の開発によるウラン系超伝導体におけるメタ磁性転移と超伝導の研究」

東京大学 物性研究所 三宅 厚志 (30分)

5. 「有機ラジカル系によって実現する多彩な量子スピンモデルの強磁場物性」

大阪府立大学 山口 博則 (30分)

標題：Hund Physics Landscape of Two-Orbital Systems

日時：2022年3月25日(金) 午後4時～午後5時

場所：On Zoom

講師：Assoc. Prof. Myung Joon Han

所属：Department of Physics, KAIST

要旨：

Hund metal is a recently coined term to refer to a special type of correlated metals in which atomic Hund interaction plays the key role [1]. In this talk, after a brief introduction to Hund metal, I will present our recent progress on this issue [2]. We conducted a detailed investigation on the two-orbital case which has been on the periphery of the attention. We identify distinctive regimes, particularly the four different correlated metals; one stems from the proximity to a Mott insulator and the other three we call ‘intermediate’ metal, ‘weak Hund’ metal, and ‘valence-skipping’ metal. Defining criteria characterizing these metals is suggested. Contrary to conventional wisdom the current study establishes the existence of Hund metallicity in two-orbital systems. Our result also provides useful insights to understand metallic two-orbital systems such as the recently discovered superconducting infinite-layer nickelates.

Reference

[1] For a review, see, A. Georges et al., *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 4, 137 (2013).

[2] S. Ryee et al., *Phys. Rev. Lett.* 126, 206401 (2021)

標題：Systematic ab initio study on quantum spin liquid in organic solids β' -X[Pd(dmit)₂]₂

日時：2022年3月28日(月) 午後4時～午後5時

場所：Zoom 開催

講師：三澤 貴宏

所属：Beijing Academy of Quantum Information Sciences

要旨：

In this talk, first, I will introduce our activity on developing open-source software packages (mVMC [1], HΦ [2], and RESPACK [3]) for treating strongly correlated electron systems. Combining these software packages, it is now possible to perform fully ab initio (non-empirical) calculations for strongly correlated electron systems. As an example, I will talk about the recent application to the organic solids (β' -X[Pd(dmit)₂]₂, X represents a cation) [4-6], where the quantum spin liquid behavior is found in X=EtMe₃Sb. By deriving and analyzing the ab initio low-energy effective Hamiltonians for all the 9 compounds in β' -X[Pd(dmit)₂]₂, we have found that the magnetic ordered moment is significantly suppressed around the spin-liquid candidate EtMe₃Sb. Using the variational Monte Carlo method, we have also shown that 1D anisotropic quantum spin liquid appears in the effective Hamiltonians of EtMe₃Sb. We have demonstrated that the 1D nature of the quantum spin liquid can explain the thermodynamic quantities observed in EtMe₃Sb such as large thermal conductivity.

[1] <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/mvmc/en/>

[2] <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/hphi/en/>

[3] <https://sites.google.com/view/kazuma7k6r>

[4] T. Misawa, K. Yoshimi, and T. Tsumuraya, *Phys. Rev. Research* 2, 032072 (R) (2020).

[5] K. Yoshimi, T. Tsumuraya, and T. Misawa, *Phys. Rev. Research* 3, 033224 (2021).

[6] K. Ido, K. Yoshimi, T. Misawa, and M. Imada, arXiv:2202.07182.



標題：光電子ホログラフィーによるドーパントの原子配列の観測

日時：2022年3月29日(火) 午後1時30分～

場所：Zoom 開催

講師：松下 智裕

所属：奈良先端科学技術大学院大学

要旨：

角度分解光電子分光は価電子帯のバンド構造の測定に主に利用されている。価電子帯の光電子放出角度分布にはバンド構造が直接反映されるためである。一方で内殻電子からの光電子角度放出分布を測定すると、光電子ホログラムが得られる。これにより光電子を放出した原子の周辺の立体原子配列が得られる。近年は周期境界条件を持たない結晶中のドーパントなどの原子配列測定に応用して、ドーパントが作る独特な原子配列を垣間見ることができるようになった。

例えば、リンをドーパしたダイヤモンドはn型半導体になることが期待されているが、これを達成するのは難しい。そこで、光電子ホログラフィーを用いてリン原子周辺の立体原子配列の解明を行ったところ、リン原子はダイヤモンド中で空孔を伴った配置になることが特定された[1]。他にもSi結晶中のAsドーパント[2]、グラファイト中のCa, Kインターカレーション[3]などの研究成果があり、さらに超伝導物質のドーパント、MoS₂のNaインターカレーション、GaNドーパント、GaN酸化膜の界面構造、ダイヤモンド-絶縁膜の界面構造、Si初期酸化構造などの研究が進められている。

これらの研究を推進するにあたり、新型の小型電子アナライザーの発明[4]と光電子ホログラムのシミュレーション、スパースモデリングを用いた立体原子像再構成理論[5]などの研究も行った。これらについて紹介をする。

[1] T. Yokoya, T. Matsushita, et al., Nano Lett., 19, 5915 (2019).

[2] K. Tsutsui, T. Matsushita, et al., Nano Lett., 17, 7533 (2017).

[3] F. Matsui, T. Matsushita, et al., Sci. Rep., 6, 36258 (2016).

[4] T. Muro, T. Matsushita, et al., J. Synchrotron Rad., 28, 1669 (2021).

[5] T. Matsushita, et al., J. Phys. Soc. Jpn., 87, 061002 (2018).

標題：ポータブル超強磁場装置 PINK とシングルショット量子ビームを利用した超強磁場研究の新展開

日時：2022年3月31日(木) 午後12時15分～午後1時15分

場所：Zoom 開催

講師：池田 暁彦

所属：電通大基盤理工

要旨：

1000 テスラ級の超強磁場におかれたスピン 1/2 のゼーマンエネルギーは温度換算で室温を遙かに超える。この超強磁場環境で物質の磁気モーメントを自在にコントロールすることにより、相互作用の強い系における非自明な物性を解明したり、物質の新規電子磁気状態を発現させたりすることができる。東大物性研では、破壊型磁場装置として最大 300 テスラ発生可能な一巻きコイル 2 台と、新型コンデンサーバンクによる電磁濃縮法装置を 2 台有し、世界でも突出した超強磁場研究施設といえる。近年、新型コンデンサーバンクをもちいて電磁濃縮法による世界最高 1200 テスラ発生に成功した[1]。さらに近年のユニークな研究展開として新測定手法開拓が進み、多様な独自手法による、電気抵抗、磁化、磁歪、超音波などのマクロ物性評価手段が利用可能となってきた。今後、これらの手法を用いた 100-1000 テスラの利用が拡大し、超強磁場科学が発展することが期待される (例として[2- 6])。

一方で近年、様々なシングルショット量子ビーム実験が可能となった。これは、超強磁場にマイクロプローブを持ち込むことが初めて可能となったことを意味する。しかし、従来の 100 テスラ装置は重厚長大で、新型量子ビームと組み合わせることは困難であった。そこで我々はポータブル超強磁場発生装置 PINK-01 を開発し、77 テスラ発生に成功した。さらに、これを X線自由電子レーザー施設 SACLA に持ち込んで実験を行い、世界最高 77 テスラでの X線回折実験に成功し、

低温 78K での X 線回折実験にも成功した[7-9]。現在、より強磁場低温での実験を可能とし、対象物質を広げることを目指し、PINK-02を理研と共同で開発中である。PINKは小型、ポータビリティ、総エネルギーが小さい、制御性が良い、など、従来の超強磁場装置にはない美点を多く持つ。X 線自由電子レーザーにとどまらず、テラヘルツシングルショットパルスなどの新規量子ビームと組み合わせた超強磁場研究の新展開を目指しており、その展望を議論したい。

本研究は、物性研松田康弘研、理研 SACLA ビームライン開発 G との共同研究である。PINK-01 は東電記念財団と科研費挑戦開拓のサポートを受けて開発された。PINK-02 は SACLA 基盤開発プログラムのサポートを受けて開発中である。

[1] D. Nakamura, A. I. et al., Rev. Sci. Instrum. 89, 095106 (2018).

[2] Y. H. Matsuda, A. I. et al. Nat. Commun. 11, 3591 (2020).

[3] D. Nakamura, A. I. et al., Phys. Rev. Lett. 127, 156601 (2021).

[4] A. Ikeda et al., Phys. Rev. Lett. 125, 177202 (2020).

[5] A. Ikeda et al., arXiv:2201.02704.

[6] A. Ikeda et al., Rev. Sci. Instrum. 88, 083906 (2017).

[7] A. Ikeda et al., arXiv:2202.05406.

[8] A. Ikeda et al., unpublished.

[9] A. Ikeda et al., unpublished.

標題：量子ハミルトニアン学習のサンプル複雑性

日時：2022年4月5日(火) 午後4時～午後5時

場所：Zoom 開催

講師：桑原 知剛

所属：理化学研究所

要旨：

量子力学に従って相互作用する粒子系(量子多体系)の性質は、系のハミルトニアンによって完全に決定される。近年の実験的技術の発達に伴い、量子系のミクロな構造を観測することが可能になってきた。このような背景から量子系のハミルトニアンを観測データのみから推定する問題が、物質科学・量子機械学習・量子情報理論などの分野で理論と実験の両側面で大きな注目を浴びている。一方で、現状提案されているハミルトニアン学習のアルゴリズムはヒューリスティックなものがほとんどであり、精度保証は通常非常に困難な問題であった。本研究ではサンプル複雑性、すなわち「ハミルトニアンをある精度以上で学習するために十分なデータ数の数」、を解析した。より具体的には、ハミルトニアンと逆温度 β の量子ギブス分布を考えるこのとき、量子状態を N 回測定してデータを得たときに、そのデータからどの程度良い精度でハミルトニアンが推定できるかが問題となる。この問題については、古典系においては近年の研究で定性的なレベルで解決が得られている一方で、量子系ではギブス状態自体の推定に関しては様々な先行研究がある一方で、ハミルトニアンのサンプル複雑性は未解決であった。我々は、ハミルトニアン学習のサンプル複雑性問題を解決し、精度 ϵ の推定を達成するためのサンプル数に関して、十分条件と必要条件を明らかにして、定性的に $\text{Poly}(n)$ (n : システムサイズ)のサンプル複雑性が最適であることを示した。本講演ではより詳細な研究背景や、サンプル複雑性を得る上で鍵となる性質(強い凸性)について説明する。

文献

[1] A. Anshu S. Arunachalam T. Kuwahara and M. Soleimanifar Nature Physics 17 931-935 (2021).

[2] V. Dunjko Nature Physics 17 880-881 (2021).

