

配信先：大阪科学・大学記者クラブ、文部科学記者会、科学記者会

2025年2月4日
大阪公立大学

局所的な量子もつれの度合いを計算する公式を新たに導き出し ナノサイズ材料におけるその振舞いを解明

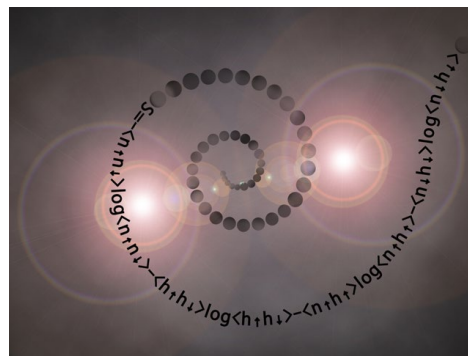
<ポイント>

- ◇強相関電子系^{*1}を構成する原子集団から任意に選ばれた一つまたは二つの原子と、系のその他部分である環境系間の局所的な量子もつれに着目。
- ◇導出した公式をナノサイズの人工磁性体や希薄磁性合金^{*2}に適用し、量子もつれの様相を解明。

<概要>

量子もつれ状態は、例えば量子コンピュータの演算に重要な役割を果たします。これまで磁性や超伝導などの性質を示す物質内の量子もつれの研究は、物質の詳細に依存しない普遍的な性質の追究が主でした。

大阪公立大学大学院理学研究科の西川 裕規講師と吉岡 智紀大学院生(博士前期課程2年)は、強相関電子系を構成する原子集団から任意に選ばれた一つまたは二つの原子と、系のそれ以外の部分である環境系間の局所的な量子もつれに着目し、その度合い(エンタングルメントエントロピー等)を計算する公式を導き出しました。そして、原子が直鎖状に並んだナノサイズの人工磁性体に公式を適用し、磁性体内の各原子とその環境系の量子もつれ、さらに磁性体内の二つの原子間の量子もつれを調べ、その振舞いを明らかにしました。また希薄磁性合金の系に適用し、近藤遮蔽^{*3}の過程が明確に現れる量子情報量を明らかにしました。本研究で導き出した公式をさまざまな系に適用することにより、物性の理解に新たな視点を提供することが期待できます。



本研究成果は2025年1月7日に、国際学術誌「Physical Review B」にオンライン掲載されました。

<西川 裕規講師のコメント>

エンタングルメントエントロピーを計算する式が、最終的には簡単な式になる事を見つけたのは嬉しい驚きでした。またナノサイズ人工磁性体での量子もつれの振舞いは、当初の単純な予想と異なり意外なものでした。一方、近藤遮蔽を明確に捉える量が、量子相対エントロピーであるということにたどり着くには試行錯誤が必要でした。

<研究の内容>

本研究では、強相関電子系を構成する原子集団から任意に選ばれた一つまたは二つの原子と、系のそれ以外の部分である環境系との局所的な量子もつれに着目しました。まず、その量子もつれの度合い（エンタングルメントエントロピー等）を計算する公式を導き出しました。例えば、一つの原子とその環境系のエンタングルメントエントロピー S を表す公式は下記のとおりです。

$$S = -(n_{\uparrow}n_{\downarrow})\log(n_{\uparrow}n_{\downarrow}) - (h_{\uparrow}h_{\downarrow})\log(h_{\uparrow}h_{\downarrow}) - \langle n_{\uparrow}h_{\uparrow} \rangle \log \langle n_{\uparrow}h_{\uparrow} \rangle - \langle n_{\downarrow}h_{\downarrow} \rangle \log \langle n_{\downarrow}h_{\downarrow} \rangle^{*4}$$

次に、原子が直鎖状に並んだナノサイズの人工磁性体の系に、導出した公式を適用しました。系内の各原子とその環境系の量子もつれ度合いは図1のようになり、必ずしも真ん中の原子とその環境系の量子もつれが大きいわけではないことが分かりました。これは、この系において磁気を持つ反強磁性が実現されているからであると解釈ができます。次に、この系内の二つの原子間の量子もつれを調べました。おおよその傾向としては、図2に示すように、2原子間の距離が大きいほど量子もつれの度合いは減少しますが、必ずしも単調に減少していないことが分かりました。すなわち、1番目と4番目の原子間の量子もつれは、距離がより小さい3番目の原子間量子もつれより大きいことが見て取れます。これは、この系内で電子が波的に振舞いつつも粒子的に振舞うという量子論の特徴的な性質から説明ができます。最後に、希薄磁性合金に適用しました。ここでは、1962年に数学者の梅垣 壽春氏によって導入された量子相対エントロピーという量に着目し、近藤遮蔽過程が明確に捉えられることを明らかにしました。

U/t=2 での結果。U は電子の原子内反発エネルギー、t は電子の原子間移動エネルギー。

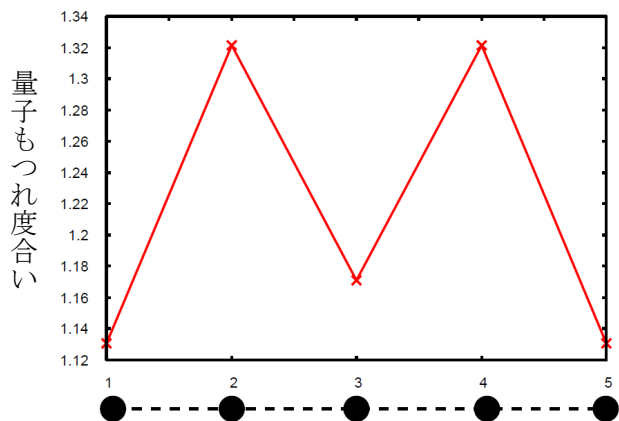


図1 五つの原子（黒丸）からなるナノ磁性体の各原子のエンタングルメントエントロピー

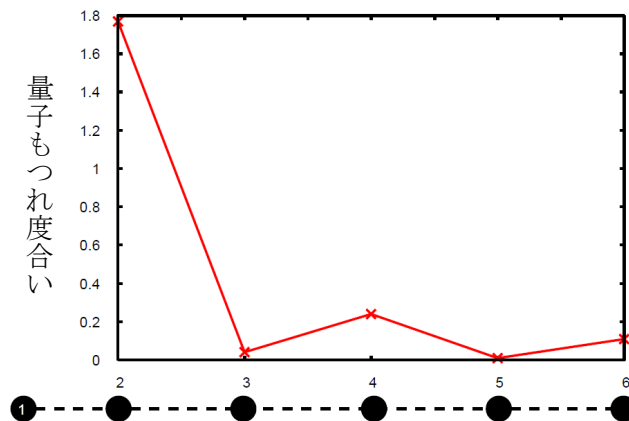


図2 六つの原子（黒丸）からなるナノ磁性体で1番目の原子（左端）と他の原子（2,...,6）の量子もつれ度合い

<期待される効果・今後の展開>

本研究で導出した公式は、他の種々の物性を示す系にも適用可能です。今後の研究により、さまざまな物性の理解に新たな視点を提供することが期待されます。

<用語解説>

- ※1 強相関電子系：電子間の反発力による相関効果が顕著な物質系。遷移金属元素、希土類元素を含む物質系やナノサイズの人工的な電子閉じ込め構造である量子ドットを含む系にその典型例がある。銅酸化物高温超伝導体も一つの例。
- ※2 希薄磁性合金：鉄などの磁性を持った原子が、金などの磁性を持たない金属に希薄に溶解している合金。
- ※3 近藤遮蔽：希薄磁性合金は通常の金属と異なり、温度を下げていくと電気抵抗の値が極小を示す近藤効果と呼ばれる現象が表れる。この現象は、低温になるにつれ電流を運ぶ担い手の多数の伝導電子が、磁性原子の磁性を遮蔽することで起きる。この遮蔽を近藤遮蔽と呼ぶ。
- ※4 n_{\uparrow} 、 n_{\downarrow} 、 h_{\uparrow} 、 h_{\downarrow} ：それぞれ注目する原子内のアップ、ダウン電子数、アップ、ダウンの正孔数（演算子）。これらの積はその相関を表す。注目する全体の状態が全粒子数、全磁化を保存する場合に適用可能な公式。

<掲載誌情報>

【発表雑誌】 Physical Review B

【論文名】 Quantum entanglement in a pure state of strongly correlated quantum impurity systems

【著者】 Yunori Nishikawa and Tomoki Yoshioka

【掲載 URL】 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.111.035112>

【研究内容に関する問い合わせ先】

大阪公立大学大学院理学研究科
講師 西川 裕規（にしかわ ゆうのり）
TEL : 06-6605-2610
E-mail : nishikaway@omu.ac.jp

【報道に関する問い合わせ先】

大阪公立大学 広報課
担当：谷
TEL : 06-6967-1834
E-mail : koho-list@ml.omu.ac.jp