



# 準結晶の物性研究と量子アルゴリズム開発の融合による量子多体系の新展開

理学研究科 物理学専攻

准教授 竹森 那由多

Researchmap <https://researchmap.jp/takenayu>

## 研究の概要

準結晶は、周期性を持たないにもかかわらず長距離秩序を示す特異な物質であり、従来の結晶やアモルファスでは得られない新しい物性を示します。本研究では、準結晶の電子的・光学的特性の解明に加え、量子コンピュータで動作する新しい量子アルゴリズムを開発し、強相関量子多体系の効率的な解析を目指しています。物質科学と量子計算科学を融合することで、従来困難であった大規模シミュレーションを可能にし、新たな物性の創出と、量子アルゴリズムを通じた物性理解の深化を同時に実現します。

## 研究の背景と結果

準結晶は1984年の発見以来、従来の結晶学の枠組みを超える存在として注目されてきました。周期的な並びを持たないにもかかわらず鋭い回折ピークを示し、対称性の破れや電子状態の特異性を伴うことから、従来材料にはない新しい機能の発現が期待されています。特に、その構造（準周期性）や電子準位の非自明な構造は、エネルギー変換材料や光学制御材料としての応用可能性も指摘されています。

一方で、準結晶の物性は周期系と比較して十分に解明されておらず、これらの特性を産業応用へと結びつけるためには、基礎的理解の深化が不可欠です。

本研究では、二つのアプローチを組み合わせることでこの課題に取り組んでいます。第一は、準結晶およびその近似結晶に対する理論的モデリングと数値計算により、電子状態・光学応答・超伝導といった特性を明らかにするものです。特に、ハイパーユニフォーム（超均質性）の概念に着目し、フォトニック準結晶における構造とバンドギャップ形成の関係性を探っています。周期構造では現れない新たな物性を捉えることで、既存の教科書的理解を根幹から問い直すような新しい物理像の発見を目指します。

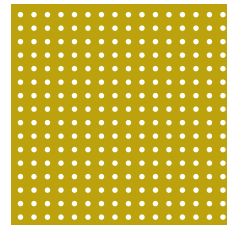
第二は、強相関電子系の解析に向けた新しい量子アルゴリズムの開発であり、特に効率的な縮約密度行列推定法を提案することで、古典計算機では困難であった多体問題の解析を、量子コンピュータ上で現実的に実行可能とする道を拓きました。

これら二つの研究を融合することで、物性物理と量子情報科学を横断する新たな研究基盤が形成されつつあります。得られた知見は、将来的に新規電子材料の設計といった応用に資するのみならず、量子コンピュータそのものの発展にも寄与することが期待されます。こうした多面的な展開を通じて、基礎科学の深化と将来的な社会課題の解決の両立を目指しています。

## 研究の意義と将来展望

準結晶が示す異常な熱伝導や電子状態は、従来の周期系では得られない物性として注目されており、将来的には廃熱利用や光学制御材料の設計への応用が期待されます。一方、本研究で開発する量子アルゴリズムは、強相関量子多体系の解析に特化したものであり、量子コンピュータを活用した新たな物質設計の基盤となる可能性を持っています。ナノ材料科学と量子情報科学という異なる分野を架橋する本研究は、物性理解と情報処理の境界領域に位置しており、量子誤り訂正や量子技術の基礎にも波及効果をもたらすことが期待されています。

### 従来のフォトニック結晶



### 超均質なフォトニック物質

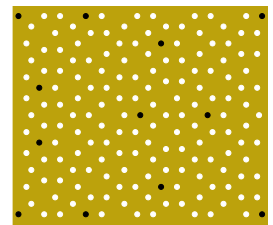
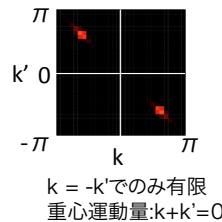
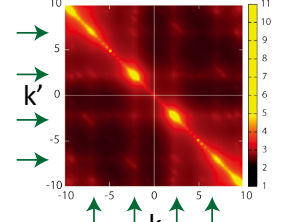


図1：準周期構造と超均質性が可能にする光学制御材料の設計

### 正方格子(BCS)



### 準周期系(非BCS)



$$|\langle C_{k\uparrow} C_{k'\downarrow} \rangle| : \text{フーリエ変換したサイト間秩序変数} \quad \text{OP}_{ij} = \langle c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} \rangle$$

図2：準結晶で現れる有限重心運動量ペア：従来理論の枠組みを超えて

### 特許

### 論文

Takemori, Nayuta; Arita, Ryotaro; Sakai, Shiro. Physical properties of weak-coupling quasiperiodic superconductors. Physical Review B. 2020, 102(11), 115108. doi: 10.1103/PhysRevB.102.115108  
Takemori, Nayuta; Yamamoto, Akiji. Photonic band gaps in quasiperiodic approximants with a consideration of hyperuniformity. Journal of Physics: Condensed Matter. 2025, 37(35), 355701. DOI: 10.1088/1361-648X/adfb9  
Yoshida, Yuichiro; Takemori, Nayuta; Mizukami, Wataru. Ab initio extended Hubbard model of short polyenes for efficient quantum computing. The Journal of Chemical Physics. 2024, 161(8), 084303. doi: 10.1063/5.0213525

参考URL <https://cmqc-lab.jp>

キーワード 準結晶、超伝導、量子アルゴリズム