

プログラム名：量子人工脳を量子ネットワークでつなぐ高度知識社会基盤の実現

PM名：山本 喜久

プロジェクト名：量子シミュレーション

委 託 研 究 開 発

実 施 状 況 報 告 書 (成 果)

平成 2 7 年 度

研究開発課題名：

非平衡強相関係に対する非平衡動的平均場理論とテンソル・ネットワーク法

を中心とした量子シミュレーション手法の開拓とシナジー

研究開発機関名：

国立大学法人東京大学

研究開発責任者

青木秀夫

# I 当該年度における計画と成果

## 1. 当該年度の担当研究開発課題の目標と計画

平成 27 年度は、全体計画書に記載の、非平衡動的平均場理論(DMFT)をはじめとして、非平衡揺らぎ交換法(FLEX)、ボソン系 QMC、密度行列繰り込み群(DMRG)、テンソル・ネットワーク法をスタートさせる。特に平成 27 年度には、DMRG, TEBD など 1 次元系に対するテンソル・ネットワーク法を組み込む準備段階として、テンソル・ネットワーク法の整備を先ず行う。

非平衡に関しては、特に時間周期外場中の多体量子系の研究を目標とする。

川島グループは、青木、岡グループとの連携を見据えて、テンソル・ネットワーク法や量子モンテカルロ法などに関する方法論開発を分担する。平成 27 年度については特に、テンソル・ネットワーク法の基礎理論的側面の解明と、量子モンテカルロ法のオープンソースコード開発を目標とする。

## 2. 当該年度の担当研究開発課題の進捗状況と成果

### 2-1 進捗状況

青木グループでは以下の開発を行った。山本プログラムにおいて最上位課題である銅酸化物高温超伝導体に関しては、その相図で最も顕著な特徴の一つは、電子の band filling に対して  $T_c$  が上に凸 (dome 状) になることであるが、満足行く説明は従来あまりなかった。2 次元斥力 Hubbard 模型における d 波超伝導に対して、揺らぎ交換(FLEX)近似は、反強磁性スピン揺らぎに媒介される運動量依存ペアリング相互作用を記述できるが、母物質の Mott 絶縁相を記述できない。他方、Mott 絶縁相を記述できる動的平均場理論(DMFT)を出発点としたクラスター拡張では小さなクラスター (粗い k 空間) しか扱えない。そこで青木グループは、DMFT と FLEX を組み合わせて自己無撞着なループを構成することにより、局所的なダイアグラムの寄与を DMFT で、非局所的なダイアグラムを FLEX で取り込む”DMFT+FLEX”法を新たに提案した。現在、この仕事の発展として、Held (ウィーン工科大学)との共同研究により、FLEX よりさらにソフィスティケートされた DΓA と呼ばれるダイアグラム展開手法を、超伝導相に初めて拡張することにより、さらなる理解を得ることを現在遂行中である。この方法は計算時間がかかるため、大規模計算となる。以上は、 $T_c$  を高める理論戦略の指針となり得ると考えている。

青木・岡のグループでは、山本プログラムにおける課題の一つである非平衡という観点からも超伝導を探っている。ここでは、特に ac 外場による非平衡定常状態である Floquet 状態に着目して、強相関電子系とそのスピン励起について、レーザーを用いて発現させる新奇な現象や、エキゾチックな超伝導を調べている。

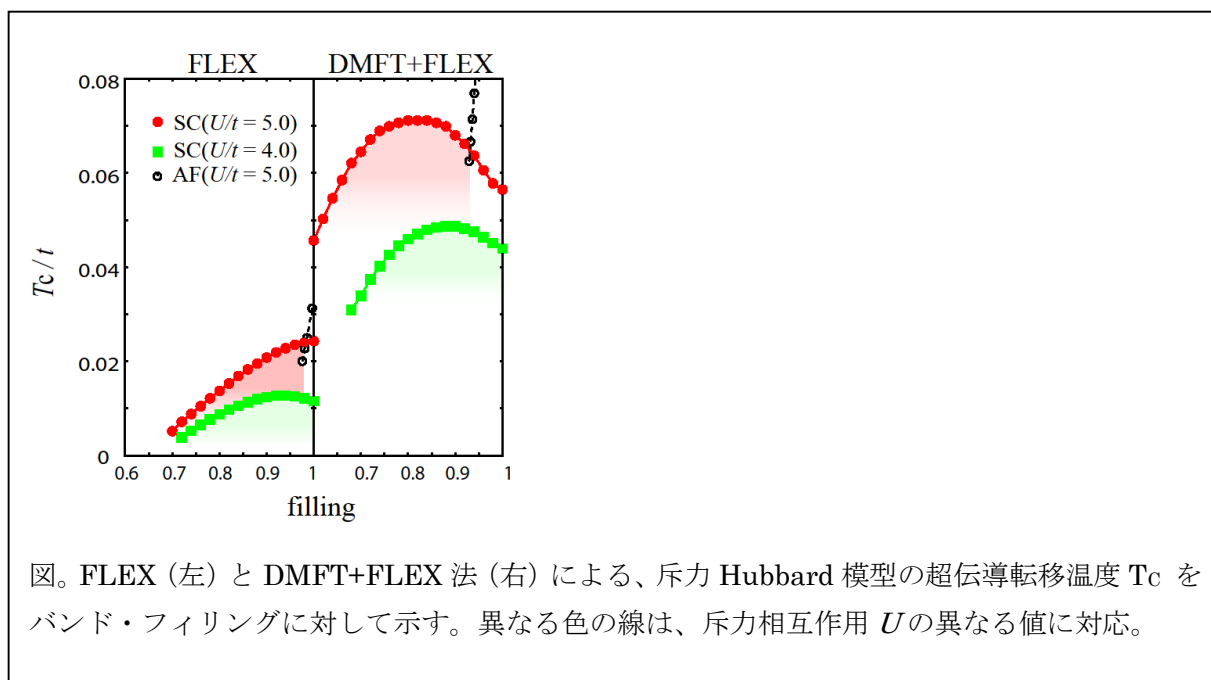
川島・原田グループでは、臨界現象を評価する手法としてのテンソル・ネットワーク (TN) 法に注目して、最適化したテンソル自体の情報を利用した臨界指数や演算子積展開係数などの臨界現象を特徴づける研究を行っている。また、TN 法の並列化を目指した研究を遂行中である。さらに、TN 法の応用として、量子スピン液体相の解明を遂行中である。

また、川島・原田グループでは、東大理学系研究科福山研究室で行われているグラファイト表面上に吸着されたヘリウム原子系などのボーズ系実験と定量的に対照可能な第一原理計算的量子モンテカ

ルロ法も開発中である。さらに、量子モンテカルロ法のプログラムの公開についても、活動を進めている。

## 2-2 成果

DMFT+FLEX 法については、これを 2 次元 Hubbard 模型に適用した結果、 $T_c$  dome を得ることに成功した (下図)。Dome の起源は、FLEX で過大評価された自己エネルギーが DMFT で filling 依存して補正されるためである。



図。FLEX (左) と DMFT+FLEX 法 (右) による、斥力 Hubbard 模型の超伝導転移温度  $T_c$  をバンド・フィリングに対して示す。異なる色の線は、斥力相互作用  $U$  の異なる値に対応。

非平衡における超伝導に関しては以下を示した。超伝導においては普通は全運動量がゼロのクーパー対が凝縮するのに対し、原理的にはノンゼロの対が凝縮しても良いが、磁場中等以外では起きにくい。青木のグループは、引力 Hubbard 模型を時間的に周期的な外場 (直線偏光) 中に置くと、「 $\eta$  ペアリング」と呼ばれる、重心運動量がノンゼロ( $\pi, \pi$ )のペアが凝縮した超伝導が実現する可能性を見出した。外場の早い時間スケールを繰り込んだ有効ハミルトニアンでは、ホッピングや相互作用は平衡のものとは著しく異なり、特に  $\eta$  ペアリング状態が、動的不安定性を介したプロトコルを用いれば実現することが期待される。非平衡に関しては、関連するスピン系についての研究から、スピン軌道相互作用により DM 項が存在するマルチフェロイック物質にレーザー光を照射することでスピン流を制御する方法も理論的に提案し、成果を投稿した。

超伝導体における集団励起については以下を示した。超伝導体中の Higgs モードの解析は BCS 理論によるものが主であり、強結合電子・格子系における理解は十分ではない。特に、遅延効果を含む有効相互作用や、フォノン振動自体との関連の理解は重要である。青木のグループは Werner (Fribourg 大) と共同で、Holstein 模型に対し、非平衡 DMFT と Migdal 近似を用いてフォノン媒介超伝導体における Higgs モードの性質を調べた。結果として、BCS 理論から予言される Higgs エネルギーと超伝導ギャップの関係が強結合においても成立する事が分かった。また、Higgs モードとは別に、フォノン振動と秩序パラメータとの結合から生じる第二の集団励起モードが存在することも見出した。また、青木のグル

ープは、2バンド超伝導体における Higgs モードおよび Leggett モード（2個の超流動秩序が逆位相で振動する位相モード）、ならびにそれらと光との共鳴を理論的に調べ、(i) 2個存在する Higgs モードは異なる共鳴幅をもつ、(ii) Leggett モードは非線形効果により電場により励起され得て、特徴的な温度依存をもつ、などを示した。

テンソル・ネットワーク (TN) に関しては、川島のグループは、単一のテンソルの情報から臨界現象を特徴づける方法を見出し、これを簡単な系に応用して方法の有用性を確認した（現在論文執筆中）。また、大規模計算向けにその中核的な部分であるテンソルの特異値分解のために乱数を利用した並列化アルゴリズムを検討し、実装した。また、並列化効率について、テスト計算を行い 1,000 並列程度の範囲内では、十分に高い効率で計算可能であることを実証した（現在論文執筆中）。

さらに、TN 法の応用として、最近盛んに研究されているカゴメ格子反強磁性体に対して、TN 法の一つである PEPS (Projected Entangled Pair State) 法を適用して、磁化曲線などを調べた結果、テンソル次元の関数としてよい収束性をみせており、先行研究と比較しても信頼度の高い計算を行うことに成功した（現在論文執筆中）。

量子モンテカルロ法については、第一原理計算的量子モンテカルロ法として、連続空間ワームアルゴリズムの実装を行い、性能実証計算を行った。現実のヘリウム原子間ポテンシャルを精度よく表現しているとされるポテンシャルを用いた計算で、気液相転移がよく再現されることを確認した。

### 2-3 新たな課題など

本テーマでは実験との関連も視野に入れるのが有用とおもわれ、例えば、強電場中の非線形伝導の実験が最近精力的に行われており、そこから、電子・格子系の非平衡定常状態の解明が重要な課題であることが分かりつつある。

## 3. アウトリーチ活動報告

離散空間上でのボゾン、スピン系に対するワームアルゴリズムに基づいた量子モンテカルロ法プログラムパッケージの並列化コードを GPL ライセンスのもとで誰もが無償で利用できるよう公開した。

(<https://github.com/qmc/dsqss/wiki>)