

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 28 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：

東京大学

研究開発責任者

川島直輝

# 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

青木のグループは、動的平均場理論 (DMFT) 等の量子シミュレーション手法に対し、より優れた、また強相関領域に適用できる開発を行うことが目標である。また、テンソルネットワーク法を駆使することも目標となる。岡のグループは、外場によって電子系を制御する「フロッケ・エンジニアリング」のアイデアをモット絶縁体などの強相関電子系ならびに二次元電子系に対して拡張する。特に円偏光をモット絶縁体に照射することで新たなトポロジカル相が得られるのかを理論的に解析する。高吉のグループは、レーザーを照射した系を記述するのに有効なフロッケ理論と実際の実時間ダイナミクスの関係をより明確にするために、現実的なハミルトニアンについてフロッケ理論と iTEBD (テンソル・ネットワーク法的一种) などの数値計算手法を併用して、外場駆動や非平衡緩和現象の計算・解析をする。川島のグループは、量子モンテカルロ法およびテンソルネットワーク法に基づく新しい計算手法の開発、およびその応用を行う。量子モンテカルロ法に関しては、光格子系やグラファイト表面の二次元ヘリウム系などを念頭におき、現実的な連続空間シミュレーション計算プログラムを開発する。またテンソルネットワーク法については、フラストレートスピン系を解くための手法・コードを開発し、これを典型的な例に応用する。

## 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

メンバー間では、研究開発責任者・川島のグループの ImPACT 内部会議や email 等により、常に緊密に研究連絡を行い、共著論文を書いたりしているが、メンバー毎に進捗状況と成果を記す：

青木のグループは、DMFT の改良については、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 で取り込む自己無撞着な **DMFT+FLEX 法** を提案した。この手法を高温超伝導体の基本模型である正方格子上の Hubbard 模型に適用した結果、 $T_c$  dome を得ることに成功した。さらにフェルミ面が、多体効果のために自発的に低対称化する **Pomeranchuk 不安定性** を DMFT+FLEX 法を用いて調べ、Pomeranchuk 不安定性のために歪んだフェルミ面においては、超伝導のペアリングが d 波から  $d+(\text{extended } s)$  波になり、また歪みが  $T_c$  を上昇させる場合があることを見いだした。一方、DMFT+FLEX 法でもまだ、ペアリング相互作用に対するバーテックス補正は取り入れられておらず、特に強相関においてはそれが重要となる可能性がある。バーテックス補正は、Held (ウィーン工科大学) のグループが dynamical vertex 近似 (D $\Gamma$ A) 法を開発しているが、これは常伝導相に対する定式化であった。青木は Held のグループと共同で、これを超伝導相に拡張した。この結果、 $T_c$  は DMFT+FLEX 法の結果よりは低くなるが、 $T_c$  dome は得られる。より重要な点として、バーテックス補正を入れると、通常は「ボソン交換によるペアリング相互作用」しか考えられていないのに対して、これを超えた枠組みになっていることであり、実際、ペアリング相互作用に強い振動数依存性が生じる等、ボソン交換枠外の効果が見られた。

また、青木は、平坦バンドをもつようなフェルミオン格子模型において、非従来型の超伝導が発現し得るかどうかを、ダイヤモンド鎖上の斥力 Hubbard 模型に対して、テンソルネットワーク法の一つである DMRG および厳密対角化を用いて調べた。結果は、最下バンドが満ち平坦バンドが空という状況直下でペア相関が発達することを見出した。さらに、この **平坦バンド超伝導** はトポロジカル相に隣接しており、ペアリングは、高度に量子もつれをした平坦バンドを中間状態として利用しており、従来のペアリング機構と異なっている

可能性を指摘した。

岡のグループは、青木と協力して、強相関係の低エネルギー状態を記述する有効モデルを導出する方法として平衡系でスタンダードとなっている強結合展開を、レーザーなどの周期外場によって駆動される非平衡系に拡張した。特に円偏光中のモット絶縁体に対して適用することで円偏光レーザーはスカラースピカイラリティを誘起することを明らかにした。

高吉のグループは、岡と協力して、現実的なハミルトニアンとしてマルチフェロイック物質にレーザーを照射した系を想定し、スピカイラリティの変化を調べた。マルチフェロイック物質は交差相関と呼ばれる磁場と電氣的自由度の結合および電場と磁氣的自由度の結合をもつ。そこで絶縁磁性体の場合に注目して、電場と磁化の電気磁気結合および磁場と磁化のゼーマン結合を両方取り入れたモデルを考え、フロッケ変換と周波数の逆数展開およびルンゲ・クッタ法を用いた数値計算による解析をおこなった。

川島のグループは、量子モンテカルロ法については、連続空間モンテカルロ法のコードがほぼ完成し、これを利用して、数値的に強結合近似モデルを導出する手法を開発しつつある。テンソルネットワーク法については、低次元フラストレートスピンモデルに対して一般的に利用可能な手法・コードを開発した。これを利用して典型的なフラストレートスピン系であるカゴメ反強磁性体などの基底状態の性質を解明しつつある。また、トポロジカル相の分類に対するテンソルネットワーク法を用いた新手法を開発中である。

## 2-2 成果

青木のグループは、図1に示すように、上記の Pomeranchuk 歪みの元で、超伝導のペアリングが d 波から

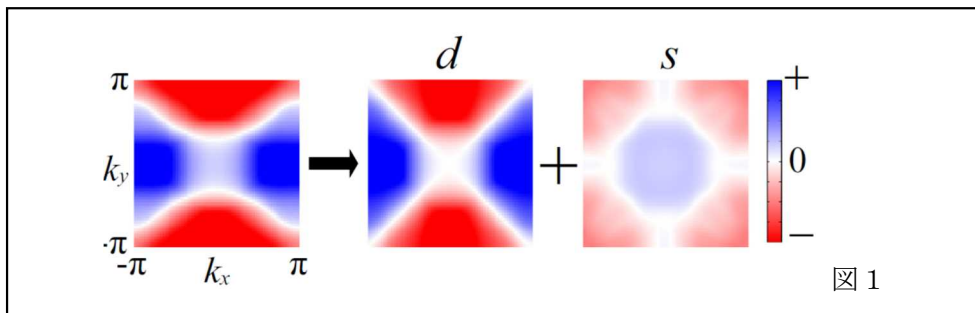


図 1

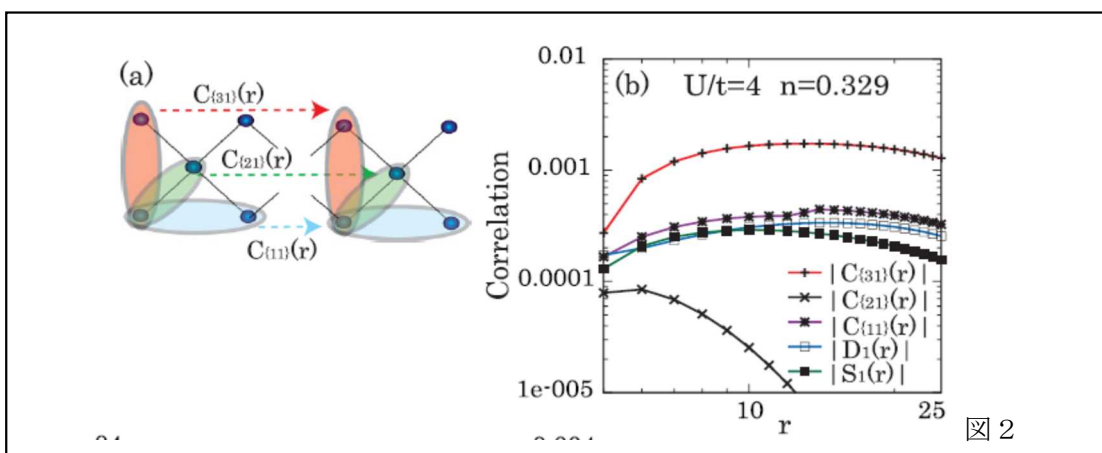


図 2

d+(extended s)波になる、等の知見は、高温超伝導において超伝導以外の秩序に興味もたれているが、その一つの可能性を与えたことになる。図2に示す、平坦バンド系において、DMRGで見いだされた発達したペア相関は、超伝導発現の新たなルートの一つを与えたといえる。

岡のグループは、強相関電子系に対する「フロッケ・エンジニアリング」の拡張という当初の目標に対して、フロッケ版の強結合展開という基礎的な研究成果を得ることができたので十分目標を達成したといえる。さらに、当初の目標を拡張する形で、非平衡系特有の量子ホール効果である「ヘテロダインホール効果」という現象を発見した。これは、振動磁場の中に置かれた二次元電子系において、エネルギー準位がマクロに縮退する現象である。

高吉のグループは、マルチフェロイック物質にレーザーを照射した系について、フロッケ理論を用いて有効モデルを導出すると、新たにジャロシンスキー・守谷相互作用が現れることを明らかにした。この有効相互作用がスピнкаイラリティを誘起することが予想されるが、実際にルンゲ・クッタ法を用いてシュレディンガー方程式を数値的に積分し、スピнкаイラリティの時間発展を数値計算すると、レーザーが直線偏光の場合はカイラリティが生じず、円偏光が右回り・左回りのときに、それぞれ正・負のスピнкаイラリティが生じることが明らかになった。

川島のグループは、テンソルネットワーク法の一つである PEPS 表現を用いた方法を用いて、カゴメ格子の磁場中での基底状態を調べた。この結果、零磁場付近では帯磁率ゼロの領域（プラトー領域）が存在しないか、あるいは非常に狭いことが分かった。これは、従来議論が分かれているゼロ磁場基底状態の性質として、ギャップレススピン液体状態が有力であることを意味する。さらに磁化が飽和磁化の  $1/3$  になる  $1/3$  プラトー状態について、その状態が、カゴメ格子の六角形のうち  $1/3$  についてスピン対共鳴状態が生じていることを示唆する結果を得た。

## 2-3 新たな課題など

上記の「平坦バンド超伝導」は、相図の上でトポロジカル相に隣接しており、超伝導とトポロジカル相との関連（後者が前者を増強する可能性があるか、など）という興味深い問題を提示していると考えられ、これを詰めることが課題となる。

「ヘテロダインホール効果」に関しては、相互作用を考慮することで新しい量子凝縮相、つまり非平衡相転移に結びつく可能性が有る。そのため、相互作用系への拡張、ならびにディラック電子系への拡張について今後考察していく。また、例えば DC 電場中の非平衡定常状態において実現するより一般の強相関電子系の関係する非平衡相転移の理論構築を「フロッケ・エンジニアリング」という観点から行っていく必要がある。

マルチフェロイック物質に関しては、一定の静磁場を印加して円偏光レーザーを照射すると、印加した静磁場のエネルギースケールに対応するレーザー周波数のときに、スピнкаイラリティの共鳴的な変化がみられることが明らかになった。この状況は電子スピンの共鳴の実験セットアップに類似しており、理論的関連性が予想されるがまだ詳しい機構は解明できていないため、引き続きの解析が有意義と考えられる。

これまでテンソルネットワーク法では、スピン液体状態に対して、秩序変数の有無の観点からの分類しかできなかったが、これからはトポロジカルスピン液体などの分類も重要となってくる。テンソルネットワーク法の枠組みのなかでこれを扱う手法を開発することが重要と考えられる。

## 3. アウトリーチ活動報告

GitHub にてソースコードを公開中の量子モンテカルロ法のコード DSQSS (<https://github.com/qmc/dsqss/wiki>) について、最新版をアップロードし、マニュアルを拡充した。