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 29 年度

研究開発課題名：

非平衡強相関系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

超伝導相も扱える動的バーテックス近似(DΓA)法の確立。これに基づく、現実の高温超伝導体の転移温度(Tc ドーム)の、FLEX+DMFT 法におけるより精度の高い評価。また、DΓA 法を用いた、平坦バンドなど特徴的なバンド構造をもつ系のペア散乱機構の解明と Tc の評価、超伝導揺らぎの扱い。平坦バンド超伝導の２次元系などへの拡張。d 波超伝導体における集団励起モードの検討。AC 駆動された超伝導体のフロッケ理論の構成。とくに、電子格子系の基本的な模型に外部電場をえた状況でフロッケグリーン関数を用いた数値計算を行い非平衡定常状態の計算を行う。特にはじめは静電場中の１次元系を考察することで電子が受け取ったエネルギーがフォノンに散逸する様子を観察する。また、iTEBD や DMRG など数値計算手法を用いて、低次元スピン系の動的性質を明らかにする。特に時間相関関数を正確に求めることにより、動的帯磁率や伝導率などの量を計算し、実験結果と直接比較ができるようにする。更に、連続空間量子モンテカルロ法により、グラファイト表面に吸着されたヘリウム系を念頭においた希薄低温状態の平衡状態計算によって高精度の相図を描くとともに、テンソルネットワーク法により、カゴメ格子など典型的なフラストレート磁性体について、新奇磁性相を解明する。また、精度を一けた程度向上させる近似法を開発する。

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

青木グループによるダイナミカル・バーテックス近似(DΓA)の進捗としては、青木、北谷、Held（ウィーン工科大学）が、動的平均場理論(DMFT)のダイアグラマティックな拡張の一つである動的バーテックス近似(DΓA)を超伝導相に拡張し、2 次元斥力 Hubbard 模型の超伝導不安定性を計算し、バーテックス補正がどのように転移温度に影響するかを調べた。第２に、動的平均場理論(DMFT)における slave-particle impurity solver の開発に関する進捗としては、2017 年度から ImPACT で雇用している博士研究員の Sharareh Sayyad 博士が、動的平均場近似に基づく新しい理論を構築した。第３に、平坦バンド超伝導の解明に関する進捗としては、ダイアモンド鎖に対する DMRG（密度行列繰り込み群；テンソルネットワーク法の一種）による計算を進めた。第４に、超伝導体における Higgs モード共鳴に関しては、青木グループが、島野（東大）の実験グループと共同で、THG 共鳴への Higgs モードの寄与と密度揺らぎの寄与の各々が、レーザーの偏光方向と結晶軸のなす角度などに関する解析などから、Higgs モードの役割を解明した。

川島グループは、量子モンテカルロ法については、H28 年度に開発した連続空間モンテカルロ法のコードを利用して、非常に希薄な領域における計算を実施し、ボーズ凝縮相の平衡状態を計算機で再現することに成功した。テンソルネットワーク法については、H28 年度に利用可能としたコードを利用して高度にフラストレートしたサイズ無限大の量子スピン系の計算を行うことに成功した。

岡グループでは、モット絶縁体の電流下非平衡定常状態の研究を進めている。新手法である非平衡グリーン関数と多体摂動論を組み合わせた数値計算スキームが完成した。今後は実験的に興味を持たれる様々な系に適用していく。

高吉は、密度行列繰り込み群とチェビシェフ多項式展開を併用した。また、数値計算手法を開発した。これを動的磁気構造因子や動的電気伝導率の計算に応用することを検討している。引き続きレーザーを磁性体に照射したときの応答を調べており、磁性体を用いた高次高調波発生の可能性を探っている。

2-2 成果

これまで様々な手法で調べられてきたにもかかわらず十分に理解されていない銅酸化物超伝導体の代表的なモデルである 2 次元斥力 Hubbard 模型での d 波超伝導、とくに、超伝導転移温度 Tc が電子のエネルギー・スケールから二桁も落ちる理由などの解明は本 ImPACT においても重要な課題である。青木、北谷、Held（ウィーン工科大学）らは、動的平均場理論(DMFT)を超伝導相に拡張して、バーテックス補正がどのように転移温度に影響するかを調べたところ、Tc はドーピングに対しドーム状になるという良く知られた実験結果を再現するとともに、そこで Tc を支配する主な要因を追跡することができた。これにより、従来専ら扱われてきた particle-hole チャンネルに加え、particle-particle チャンネルのバーテックス関数の動的な構造（振動数依存性）が、ペアリング相互作用を通して超伝導に重要な影響を与えることを明らかにした。

第２に、Sayyad(物性研)と青木は、自己無撞着ループで数値的に解く際に鍵となる impurity solver に slave particle（補助場）を用いることを提案した。Hubbard 模型には、スピン SU(2)対称性だけでなく、もう一つの SU(2)対称性（η-SU(2)とも呼ばれる）が内在しているが、この SU(2)xSU(2)対称性を尊重しながら slave particle 法を構成し、その上で DMFT と FLEX（揺らぎ交換近似）を組み合わせることで、超伝導と磁性などの対角秩序を同等に扱えることが新しい方法論の強みである。

第３の成果は、平坦バンド超伝導に関連している。超伝導を増強できる可能性がある平坦バンド系の研究を推進するためエネルギーを制御出来る平坦バンド模型の構成が重要と考えられるが、青木のグループは、2 次元格子において第 3 隣接ホッピングまで考慮したタイトバインディング模型のハミルトニアンの構造を調べることで、平坦バンドが生じ得る補助条件を見出した。これにより、平坦バンド模型において分散バンドとの間にギャップを持ち、かつ平坦バンドのエネルギーがチューンできる模型が構成された。

第４に、超伝導体における Higgs モード共鳴は、３次の非線形高調波(THG)の発生に関わっていることが島野等（2014 年）により観測されるなど関心が高まっているが、これについて、青木の理論グループは、島野の実験グループと共同で、THG 共鳴への Higgs モードの寄与と密度揺らぎの寄与の各々が、レーザーの偏光方向と結晶軸のなす角度にどのように依存するかを明らかにし、Higgs の寄与が支配的であることを結論した。

川島のグループは、希薄領域におけるボーズ気体のボーズ凝縮体を調べ、系の全エネルギーと密度の関係について Lee-Huan-Yang 予想を数値的に検証することに成功した。この結果、最初の２つの補正項（密度の１次と１．５次）だけでは振る舞いを説明することができないが、次の２項（対数補正項と２次）を含めることで説明が可能になることを見出した。同時に、希薄領域における格子系と連続空間系の対応関係をも正確に明らかにした。テンソルネットワーク計算については、カゴメ格子から派生したフラストレートスピン系の計算に成功し、磁気４重極相や量子無秩序相を発見した。特に後者が確かにあらゆる意味で無秩序相になっていることを数値的に立証した。

岡グループでは、京都大学の前野グループとの共同研究として電流下のモット絶縁体に発現する非平衡半金属状態、そしてその巨大反磁性に関する理論を構築した。

高吉は、フランス・グルノーブルの実験グループとイジング的異方性のある低次元量子スピン系物質の中性子散乱スペクトルに関する共同研究を行った。infinite time-evolving block decimation を用いて動的磁化率を計算し、実験で得られたスペクトルを定量的に再現することができた。

2-3 新たな課題など

ダイナミカル・バーテックス近似に関しては、バーテックス関数の動的な構造がペアリング相互作用を通して超伝導に重要な影響を与えることを明らかにした。通常の超伝導機構は、フォノン機構であれ電子機構であれ、「ボゾン交換」機構であるが、それを超えるものを扱える枠組みになっている可能性があり今後それを検討したい。

Sharareh Sayyad 博士が中心となって構築した理論については、高温超伝導において重要な課題である、いかに超伝導と磁性などの他の秩序との共存・競合問題をミクロに理解するか、いわゆる擬ギャップ相をどう理解するか、などを解明する方法論となり得るため、その可能性を追求したい。

平坦バンド超伝導に関しては、平坦バンド模型に変形を導入することで、平坦バンドと分散バンドが交差する模型を実際構成することができ、上記のバンド間ペア散乱の増強により超伝導に資することが期待される。

川島グループの活動に関しては、これまでテンソルネットワーク表現を利用した繰り込み群の方法では、局所的なエンタングルメントを除去することが困難であったが、３次元以上の計算では、これが重要となることが分かっている。H29 年度には、臨界点以外でこのエンタングルメントを効率的に除去するテクニックを開発したが、H30 年度ではそれを臨界点にも利用できる形に定式化し、それを利用して新しい臨界現象の研究手段を確立したい。

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、昨年度に引き続きマニュアルの整備などを行い、最新版をアップロードした。