

強相関第一原理電子状態計算と分光学実験データの統合による トポロジカル物質の理論物質設計手法創出

山地 洋平(東京大学大学院・工学系研究科・特任准教授)

(H29-H32年度)

研究の概要

本研究課題では、多数の電子が強く相互作用することで発現する高温超伝導や強相関トポロジカル絶縁体といった特異な機能性を備えた量子力学的な相を示す物質を設計する指針を導き出すことを目指しています。理論科学、計算科学、及び実験科学の成果を、データ科学的知見に基づいて統合することで、電子が他の電子や不純物、格子欠陥によって散乱される様子を記述する自己エネルギーと呼ばれる物理量を抽出し、現行の理論科学・計算科学・実験科学的手法だけでは取り出すことができなかった固体中の多体電子系の情報にアクセスします。そのために、理論科学と計算科学による『順解法』を用いた自己エネルギー計算手法の整備、および機械学習を用いた非線形逆問題解法による実験データからの自己エネルギー抽出、そしてこれらの手法の統合を進めてきました。さらに、抽出された自己エネルギーの情報は、理論物質設計のみならず手法の改良へフィードバックしていきます。

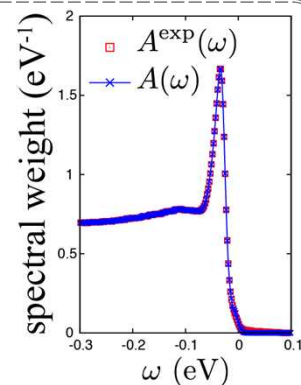
研究の成果

機能性物質の中でも高精度な実験データが得られている銅酸化物高温超伝導体をターゲットとして、ボルツマン機械を用いた機械学習によって、特定の運動量 k およびエネルギー ω における電子状態の密度を表す、スペクトル関数と呼ばれる観測量から自己エネルギーを抽出する方法論を開発し、典型的な高温超伝導体 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ の角度分解光電子分光方の実験データに適用しました。右図では、90Kで超伝導転移を示す $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ の温度11Kにおいて、もっとも超伝導ギャップが大きい区なる運動量 k でのスペクトル関数を解析した結果を示しています。常伝導成分および超伝導成分に見られるピーク構造が互いに打ち消し合うことで、観測されるスペクトル関数と直接対応する全自己エネルギーにはその痕跡が残らないことがわかりました。さらに、打ち消されたピーク構造が高温超伝導状態を生み出していることを確認しています。開発された手法は強相関トポロジカル物質を始めとする機能性物質の理解を革新することが期待されます。

研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的
マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」
(研究総括: 常行真司、H27年度発足)

研究の概要と成果

観測量:
分光学スペクトル



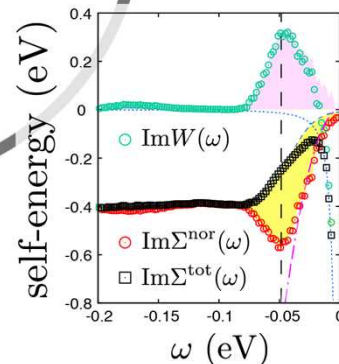
理論科学 事前知識 データ 実験科学

データ科学

物質設計へ

- ・隠れた物理の抽出
- ・理論・計算手法の改善

$\Sigma(\omega)$
自己エネルギー



参考文献・リンク

順解法の整備: M. Kawamura, K. Yoshimi, T. Misawa, Y. Yamaji, S. Todo, and N. Kawashima, Comp. Phys. Commun. 217, 180 (2017);

<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/339>

機械学習による自己エネルギー抽出: Y. Yamaji, T. Yoshida, A. Fujimori, and M. Imada (2019), submitted.

https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah27-4.html