

# 強相関電子系の新原理、新機能の理論的追究

今田 正俊

## 研究目的

1980年代に発見された銅酸化物高温超伝導体は電子間の強い斥力クーロン相互作用の効果によって超伝導が実現すると考えられているが、発見当初以来理論的に確実に言えることは限られ、多くの「シナリオ」が並存して十分な決着を見ていない。転移温度を含めた物性の多様性に対し、予言力のある理論は今も追究途上にある。この典型例に限らず強相関物質は基礎科学の革新と新概念の揺りかごととして、また21世紀の産業創成を担う新機能、新物質相の有力候補として世界的な研究競争が展開されている。20世紀産業革命を担った半導体に比べ、強相関物質は多くの理論的困難を抱えていた。しかしここ10年で本申請者達は強相関物質の持つ特有のエネルギー階層構造を利用し、電子状態を第一原理的に解明し、設計へ繋げる手法(階層的な第一原理電子状態計算法(MACE))を提唱・確立し、その応用が広がった。本研究はこれを強相関物質群に対する定量的と予言力のある手法として応用し、バルク熱平衡状態だけでなく、最近の実験技術の進展が可能にする1.非平衡と2.非周期性(表面・界面)が顕著な強相関物質の原理解明と機能発現というフロンティアを開拓し、強相関物質の学理究明を狙う。

## 研究方法、対象

以上の目的のために機械学習手法、テンソルネットワーク法なども組み合わせながら、高精度の量子多体計算手法を開発、高度化する。これを応用して遷移金属化合物等、強相関物質物性を第一原理的に解明する。

現時点での主要な研究対象の例は以下のとおりである。

1. バルクの銅酸化物高温超伝導体の第一原理的な計算や実験データの機械学習による機構解明、本質的な概念の抽出
2. 電子相関による電子自由度の分割の結果現れる量子スピン液体の解明。特に分子性導体に見られる量子スピン液体挙動の第一原理的解明やこれによって生み出される機能の開拓。
3. 時間発展、ダイナミクスの計算手法の開発を基礎にした、レーザー照射下での銅酸化物など強相関電子系の超伝導増幅等、非平衡状態での特異な物性と機能解明。
4. 界面での超伝導状態の特長、バルクに対する優越性の解明。
5. トポロジカル物質、トポロジカル相と電子相関の絡み合いの解明。両者の共存によって生み出される新たな物性の究明
6. 実験データのみから機械学習から、実験の直接測定量に含まれない重要な理論的知見を抽出する手法の確立とデータ科学的手法の応用。

## 2019 年度研究計画

主として高温超伝導体の解明と物性予測、およびトポロジカル物質の機構解明、機能開拓を進める。

1. バルクの銅酸化物高温超伝導体の第一原理的な計算を進め、水銀化合物の1バンド、3バンド有効ハミルトニアンで、超伝導相を定量的に再現し、超伝導の発現メカニズムを解明するとともに、激しい競合の見られるストライプ相との関係を解明する。バルクに関するより深い知見をもとに、薄膜や界面における第一原理ハミルトニアンを導出したうえで、これを低エネルギーソルバーで解き、超伝導相を解明する。またバルクと比較した特徴を抽出する。
2. 1. の目的にも使えるようにテンソルネットワーク法や機械学習法と変分モンテカルロ法を組み合わせた高精度の数値計算手法の応用を進め、量子スピン液体解明にも応用する。また MACE のアルゴリズムの中に、制限GW法を組み込み、第一原理有効ハミルトニアン導出のためのソフトウェアである RESPACK の改良、多機能化を実装するプロジェクトを完成させて、トポロジカル相追究にも応用する。
3. 実験データ解析のために機械学習法を活用する手法を実験研究者とタイアップして追求するとともに、銅酸化物の実験解析でその有用性を検証し、銅酸化物超伝導の起源となる物理量を抽出する。またこの機械学習手法をより一般的に新たな概念検証の手段として確立する。
4. 多変数変分モンテカルロ法(mVMC)等をもとに、励起スペクトルを計算するアルゴリズムを発展させ、強相関電子系の励起状態を線形応答（一粒子スペクトル関数、スピン、電荷構造因子等）を大規模計算によって解明するためのコードを実装するとともに、これを用いて上記の超伝導相解明に活用する。
5. レーザー照射で実現しうる非平衡高温超伝導について、特定のフォノン励起による超伝導増強について、機構を解明する。
6. イリジウム酸化物およびルテニウム塩化物を出発点として、電子相関による電子自由度の分割の結果現れる量子スピン液体の実現、および分割化されたスピノンと呼ばれる純粋スピンキャリア、およびトポロジカル量子計算の基礎となるマヨラナ粒子の実現のための物質設計指針を策定する。この目標を達成するため、イリジウム酸化物等のモデル系において、量子スピン液体の発現条件を、これまで高度化を行ってきた mVMC、およびテンソルネットワーク法を用いて引き続き評価する。スピノンおよびマヨラナ粒子発現の数値的な確証を得るため、mVMC の拡張による励起スペクトル計算手法の開発と適用を進める。