

課題名(タイトル):

非平衡強相関系の数値シミュレーション

利用者氏名:

○宮腰 祥平(1)

理研における所属研究室名:

(1)創発物性科学研究センター 計算量子物性研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、ポンププローブ分光実験や冷却原子系において、強相関量子多体系の非平衡ダイナミクスに由来した新たな物性現象が注目を集めている。その中でも、パルス光照射によって引き起こされる金属絶縁体転移や超伝導転移といった可能性が指摘されており、これら物性現象の理論を構築し、解明することは、非平衡過程を用いた新たな実験方法やデバイスの構築といった応用可能性につながる。また、このような非平衡量子系の研究は、これまで活発に研究されてきた平衡系の量子状態に対する非線形応答現象など新たな応用可能性への視点を与えることから、非平衡量子系を取り扱う数値シミュレーションの構築は重要である。本研究ではポンププローブ分光実験や冷却原子系といった系で観測される非平衡強相関量子現象の理解を目的として、数値シミュレーションを実行し、非平衡量子状態に潜む普遍性を明らかにする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究は非平衡量子系を研究対象として数値シミュレーションを実行し、光誘起金属絶縁体転移や超伝導転移などの非平衡過程により現れる物性現象を議論する。特に本研究課題では厳密対角化や密度行列くりこみ群を用いた数値計算によって、非平衡量子多体系の数値シミュレーションを行う。これら計算手法はバイアスを含まない計算手法であり、未知の量子現象を議論する上で有効である。このような長所の一方で、この計算手法はシステムサイズの大きい量子多体系や長時間のダイナミクスを議論するには複数回の大規模疎行列計算を要するため、非常に計算コストが高くなってしまふという短所を持つ。また、非平衡強相関量子多体系は未開拓な分野であり、多数のパラメータ調整を含めた議論が必要となる。

3. 結果

本年度はモット絶縁体への光照射によって生じる物性現象に着目し、ハバード模型を用いた数値解析を行った。

特に光照射によって生じる eta-pairing 状態と呼ばれる超伝導相関を示す非平衡量子状態に着目し、それらの発生する原理や模型の対称性、さらには実際のポンププローブ分光実験で観測される結果との関連性を議論した(図1参照)。その中でも次の2つの課題に取り組んだ。: (i) eta-pairing 状態の一般格子系への拡張性、(ii) eta-pairing 状態の金属性。

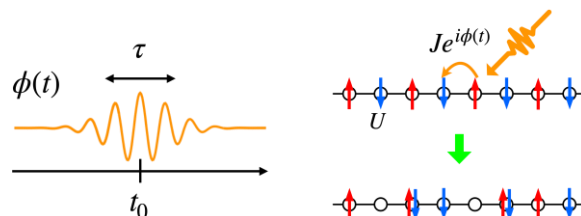


図 1 本研究で取り扱う系の概念図。本研究では左図のようなパルス幅 τ のガウス型電磁場をホッピングにパイエルズ位相として導入した系を考察し、光照射後の非平衡量子状態を議論する。

研究(i)では、これまでバイパータイト格子系上のハバード模型で定義されてきた eta-pairing 状態を非バイパータイト格子系に拡張するための条件について対称性に基づく議論を行った。ところで eta-pairing 状態とは電荷保存則に対応する $U(1)$ 対称性を部分群にもった $SU(2)$ 対称性(このような対称性を eta-pairing 対称性と呼ぶ)に対し、カシミア演算子の期待値が非ゼロとなる非平衡量子状態であり、斥力ハバード模型の基底状態には現れない。これまでの研究では斥力ハバード模型であっても、光照射によって生じる非平衡量子状態ではこのような状態が可能であり、光誘起超伝導転移など様々な非平衡量子現象との関連性が指摘されている。

特に本研究では、eta-pairing 対称性とスピンの対称性はハバード模型に課せられたパイエルズ位相のゲージ対称性により一般化可能であり、ゲージ場の位相的な拘束条件を適切に選ぶことによって、系の対称性を系統的に制御できることがわかった。またこの研究では具体的な非バイパータイト格子系を構築することにより、光照射

の数値解析を行った。その結果、バイパータイト格子系のハバード模型の結果と同様に、光照射による eta-pairing 状態の動的な形成とそれに伴う超伝導相関の発達を確認することができた。

研究(ii)では、これまでの数値計算で議論されてきた eta-pairing 状態の物理的な意味付けを、現実の実験系で観測されている光誘起金属絶縁体転移等の結果との関連性を考察するため、非平衡状態に対する光学応答との関連性という側面から議論を行った。特に電荷相関関数の相関長は、電気分極の大きさと密接な関連性を持つだけでなく、光学応答で観測される金属性と絶対零度で対応する。

そこで本研究ではハバード模型に生じる eta-pairing 状態に対して、電荷相関関数の相関長を金属性の指標とした数値解析を行った。また電荷相関関数の相関長を取り扱うため、分極演算子を指数関数の肩にのせることで定義されるツイスト演算子の数値解析を行った。その結果、eta-pairing 状態がより顕著となる領域では eta-pairing 状態に由来した長距離の超伝導相関が発生するだけでなく、電荷相関関数の相関長が増大(ツイスト演算子の期待値が減少)し、金属的な振る舞いを同時に示すことがわかった(図2参照)。

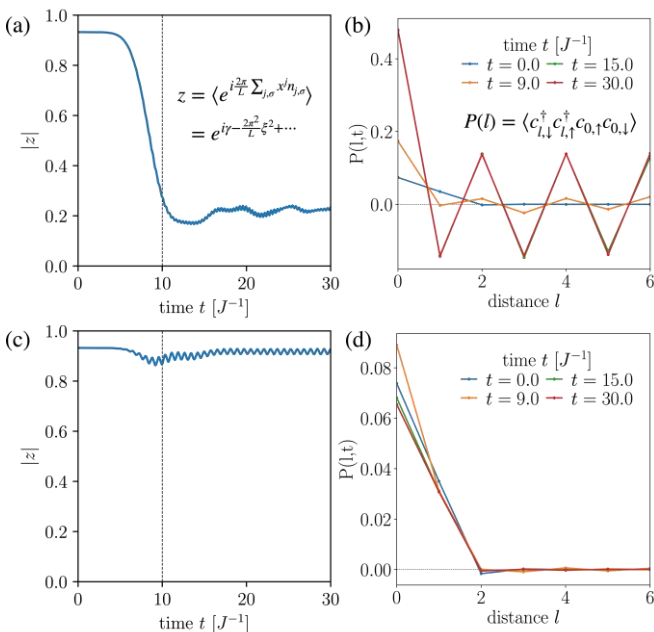


図 2 eta-pairing 状態と光誘起金属絶縁体転移の関連性に関する数値シミュレーションの結果。(a)(b)は強い eta-pairing を示す光照射後の状態に対するツイスト演算子の期待値 $|z|$ と超伝導相関を示し、(c)(d)は弱い eta-pairing を示す光照射後の状態の結果を示す。強い eta-pairing を示す(a)(b)の非平衡状態は長距離の超伝

導相関だけでなく、ツイスト演算子の期待値が減少することから、強い金属的な特徴を示す。

4. まとめ

本研究は、斥力ハバード模型におけるモット絶縁体に対して、光照射によって引き起こされる非平衡量子現象に関して数値シミュレーションを行った。その結果、これまでハバード模型の非平衡量子状態として議論されてきた eta-pairing 状態の一般の電子系への拡張性とゲージ場の位相固定条件の関連性や、近年のポンププローブ分光実験で観測されている光誘起金属絶縁体との関連性を明らかにした。特に、これら研究成果はこれまでの実験結果の解釈に新たな視点を与えるだけでなく、新たな実験系の構築方法の基礎を与えるものであり、今後の発展性が期待される。また今回行った2つの研究成果はともに現在論文出版準備中である。

5. 今後の計画・展望

本年度はハバード模型における光照射後の物理を考えてきたが、その際に現れる eta-pairing 状態は非平衡量子状態であり、ポンププローブ分光実験で観測される極めて短時間の時間発展や、冷却原子系におけるクエンチ直後の非平衡量子状態を議論する上で重要である。しかし、現実の物質系でこのような非平衡量子状態がどのように熱平衡状態に緩和するかという問題は非自明であり、系の置かれている環境に強く依存する。例えば、現実の物質系では格子振動や不純物散乱による影響を考慮すべきであるが、冷却原子系は理想的な孤立系であるため、熱平衡状態への緩和の取り扱いが系によって異なる。

来年度はこのような緩和の伴う物理系を取り扱うことを念頭におき、スピンや格子といった「環境」と接触した電子系を取り扱うことにより、電子系の非平衡量子状態の制御方法について数値解析的な議論を行う。特に、本年度行ってきた研究の発展として、取り扱う格子系やそれらと接触する環境や照射する光の偏光性をコントロールすることにより、目的の量子状態を生成・制御・観測する方法を議論する。そのうえで、フロケ理論に基づく有効模型の議論や、大規模量子多体系に対する非平衡開放系を取り扱う手法を構築する。またこのように準備した枠組みのもとで、スカーミオン等のトポロジカル励起状態の非平衡量子ダイナミクスの制御に関する研究や、量子回路を用いた各種量子状態の構築方法や検出方法に関して、数値解析的な研究を行う。

2019年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

[1] 宮腰祥平、柚木清司、「光誘起 η ペアリング機構の一般格子系への拡張」、日本物理学会秋季大会 2019、2019/9/10-2019/9/13、岐阜大学、口頭発表。

【ポスター発表】

[2] S. Miyakoshi, T. Kaneko, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “Photoinduced eta-pairing in a Mott insulator”, CEMS symposium on Emergent Quantum Material, Tokyo, 2019/5/22-2019/5/24.

[3] S. Miyakoshi, T. Kaneko, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “Photoinduced superconductivity by eta pairs in a Mott insulator”, Spectroscopies in Novel Superconductors (SNS2019), Tokyo, 2019/6/16-2019/6/21.

[4] S. Miyakoshi, and S. Yunoki, “Possible extension of the photoinduced η -pairing mechanism in strongly correlated systems”, Strongly Correlated Electron Systems (SCES2019), Okayama, 2019/9/24-2019/9/28.

[5] S. Miyakoshi, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “Photo-induced superconductivity by eta-pairing mechanism in a Mott insulator”, 第5回理研-産総研量子技術イノベーションコア Workshop, Tokyo, 2019/12/2.