

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

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近年注目を集めている。その中でも、遷移金属化合物に光を照射すること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、これまでに確立してきた平衡系の量子状態に対して、新たな視点や解釈を与えることから、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。

このような背景のもとで、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を理解することを目的として、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

本研究は光誘起金属絶縁体転移や超伝導転移などの非平衡量子系により現れる物性現象をターゲットとして数値シミュレーションを実行し、系の応答関数や各種物理量の変化を調べることに、非平衡量子状態を分析する。

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り、非平衡量子系の数値シミュレーションを行う。これら計算手法は時間依存シュレーディンガー方程式を直接的に解くため、非平衡量子状態の様々な物理量の調査が可能であるというメリットがある。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、計算コストが高くなってしまおうというデメリットをもつ。

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

(図1参照)。特に光照射によって生じる η ペアリングに伴った超伝導相関を示す非平衡量子状態の形成やポンププローブ分光実験で観測される光誘起金属絶縁体転移との関連性を議論した。

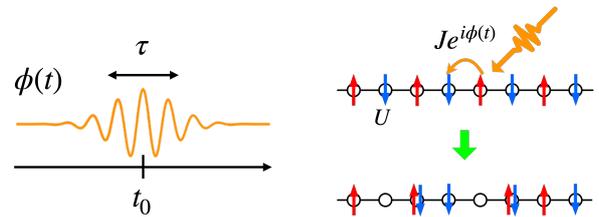


図 1 本研究で取り扱う系の概念図。左図のようなパルス幅 τ を持つ光をパイエルズ位相によって導入することにより、右図下に対応する光照射後の非平衡量子状態を議論する。

ところで、 η ペアリングとは電荷保存則に対応する $U(1)$ 対称性を拡張させた $SU(2)$ 対称性に関連する量子状態であり、光照射によって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る。特に η ペアリング状態はス波変換によりスピン系の言葉に書き換えることができ、横スピンの相関がペア相関に対応することから、光照射によって引き起こされる長距離のペア相関の起源として、光誘起超伝導転移との関連性が指摘されている。

本研究では η ペアリング状態におけるペア相関に着目するのではなく、縦スピンの相関に対応した電荷相関の意味付けについて議論を行った。特に、平衡系における電荷相関の相関長は基底状態の金属性を示す指標として知られており、ポンププローブ分光実験により指摘されている光誘起金属絶縁体転移との関連性が期待できる。

そこでこの研究では非平衡系における相関長の意味づけについて議論を行った。その結果、非平衡系では光学伝導度の Souza-Wilken-Martin (SWM) 和の発散が系の金属性を特徴づける指標となっており、平衡系での SWM 和は相関長と一致し、非平衡系では SWM 和の上限を与えることがわかった。このことから、相関長が発散しないならば、SWM 和も発散せず絶縁体的となることがわかる。この結果

を利用し、本研究では電荷の動的相関関数と相関長に対応するツイスト演算子の数値解析を行った。その結果、Hubbard 模型において η ペアリングが顕著となる領域では超伝導相関の増大に伴って、電荷相関の相関長が増大し、より金属的な振る舞いを示すことがわかった(図2参照)。

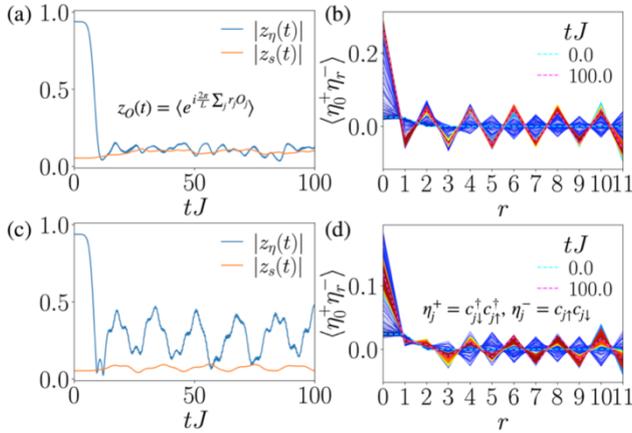


図 2 光照射後の非平衡状態におけるツイスト演算子の期待値(a)(c)と超伝導相関(b)(d)の数値シミュレーション結果。(a)(b)は強い超伝導相関を示す外場での結果であり、(c)(d)は弱い超伝導相関を示す。この結果から、より強い超伝導相関を示す領域では、ツイスト演算子の期待値が光照射後の時間平均として減少する傾向にあり、金属的な特徴を示す。

4. まとめ

本研究は、斥力 Hubbard 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する数値シミュレーションを行った。その結果、ポンププローブ分光実験で指摘されている光誘起金属絶縁体転移と η ペアリング形成との関連性を明らかにした。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。

5. 今後の計画・展望

本年度は主として光照射後の非平衡ダイナミクスに着目してきたが、これは十分に孤立系とみなせる短時間もしくは不純物や格子振動などの影響が極端に少ないとみなせる系の量子状態の研究であり、通常の実験で観測されるような定常状態とは大きく異なった非平衡領域の研究である。一方で長時間のダイナミクスを考えたときには、不純物や格子といった環境との接触により新たな定常状態の可能性が考えられる。

来年度はこのような系を含めた非平衡系のダイナミクスを数値解析することにより、目的の量子状態を制御・観測する方

法について議論する。特に、空間非一様な流れを持つ定常状態では物質内部を流れる電流の渦に伴い、スピン渦度結合による内部のスピン秩序の変化やスピン流を伴った新たな定常状態の可能性が指摘されている。そこで、来年度は非一様系や界面のある量子系に着目し、非平衡ダイナミクスや定常状態を議論する数値解析手法を構築し、これら非平衡量子状態の構築方法や観測方法について研究を行う。

2020 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 -pairing 状態の金属性」、日本物理学会春季大会 2020,2020/3/16-2020/3/19、名古屋大学(コロナウイルス拡大のため現地開催中止、発表資料をウェブにて公開)。
- [2] 宮腰祥平、柚木清司、「光誘起 η -pairing 状態に対するボンド交替の効果」、日本物理学会秋季大会 2020、2020/9/8-2020/9/11、オンライン開催。