

プロジェクト名(タイトル):

## 非平衡強相関係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. 本プロジェクトの研究の背景、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により、光照射後の極めて短時間に発現する新規の量子相転移や量子多体相関に由来した新たな秩序相の可能性が近年注目を集めており、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いる。これら物性現象の理論を構築し、解明することは、光により超高速制御できるデバイスの構築など様々な分野への応用可能性が期待されている。また、このような非平衡量子状態の研究は、これまでに確立してきた平衡系の物性現象に対しても新たな視点や解釈を与えることから、非平衡量子系を対象とした数値シミュレーションやその手法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伴って、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計算やエンタングルメントといった指標の評価が可能となる。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ふというデメリットをもつ。

## 3. 結果

本年度はモット絶縁体の光照射によって生じる伝導状態に

関して、ハバード模型を用いた数値解析を行った。特に、光照射後の非平衡量子状態に関して、多くのモット絶縁体に対するポンププローブ分光実験では金属性や超伝導性が生じること指摘されている。しかし、光によるドーピングが問題であるとしても、どのような状況で伝導度がより増大するかという点や、どのように超伝導性が引き起こされるのかという点は十分に理解されてこなかった。一方で近年のハバード模型のシミュレーションでは、 $\eta$ -SU(2)対称性が光によって壊されることによって生じる  $\eta$  ペアリング状態への励起によって長距離の超伝導相関を引き起こされることが指摘されており(Phys. Rev. Lett. **122**, 077002 ('19))、このような励起は Drude weight に対して正の寄与を与えることが指摘された(Phys. Rev. Res, **2**, 032027 ('20))。これは光によるダブロン・ホロン対生成のパターンが金属性と超伝導性に起因することを意味する。しかし、Drude weight それ自体は ideal conductor を特徴づける指標であるが、不純物散乱が大きい系で現れる non-ideal conductor や開いた境界条件で消失する点など汎用な金属性の指標でないことから、より普遍的な指標を用いた非平衡状態の理解が必要である。

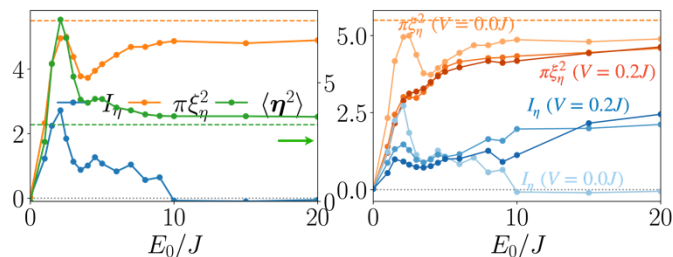


図 1 (左図) SWM 積分  $I_\eta$  と電荷相関関数  $\xi_\eta$  と擬スピン  $\eta$  の大きさの関係。  $\eta$  が最も大きくなる電場で SWM 積分が最大になる。(右図) SWM 積分  $I_\eta$  のサイト間相互作用  $V$  依存性。  $V$  が大きくなるにつれて  $E_0=2.1$  のピークが抑制される。

そこで本研究では、このような指標として Souza Wilken Martin (SWM) 積分を非平衡定常状態に対して定式化し、実際計算することによって光照射状態がどのような伝導性を示すかについて数値シミュレーションを行った。その結果、

光照射状態のうち最も  $\eta$  (対応する擬スピンの大きさ) が大きくなるような非平衡状態では SWM 積分は最大となり強い伝導性を占めることがわかった。また  $\eta$ -SU(2)対称性を壊すようなサイト間斥力を導入すると、 $\eta$  が抑えられるのと同時に SWM 積分も抑制されることがわかった。この結果が示すように、光照射状態がより強い伝導性を示すためにはより大きな  $\eta$  をもつ状態への励起が必要であり、サイト間相互作用が強い系では  $\eta$ -SU(2)対称性を壊すことによる熱化により伝導性が悪化する。また SWM 積分は分極演算子の反対称動的相関関数の周波数積分に対応するが、これらの増大に寄与するのは、非平衡状態に含まれる固有状態に対して励起可能な連続状態が高エネルギー側により多く連続的に存在するという状況である。これはダブロン・ホロンからなるヒルベルト空間での有効ハミルトニアンを考えれば、斥力系では  $\eta$  の大きい状態がより低いエネルギー状態にあることが重要であることを意味する。実際に、光照射によりそのような状態により多く励起すれば、電場により高エネルギーのダブロン・ホロン対への励起が可能となるので、そのことにより伝導性の増大が引き起こされていると考えることができる。本研究結果は現在論文出版準備中である。

#### 4. まとめ

本研究では、1次元斥力ハバード模型を用いて、モット絶縁状態に対する光照射の数値シミュレーションを行った。その結果、光励起された  $\eta$  ペアリング状態の擬スピンの大きさと光照射された状態の伝導性には強い相関があることや、斥力系の有効ハミルトニアンとの関連性を明らかにした。本研究結果はこれまでの実験結果の解釈や、より光応答性の強いデバイスの設計や構築の手助けになるものであり、今後の発展性が期待される。

#### 5. 今後の計画・展望

本研究では光照射状態の伝導性という観点で議論してきたが、今回用いた SWM 積分による非平衡量子状態の解析は今回のハバード模型を除いて十分に議論されていない。そこで今後の研究ではこのような指標を電子格子相互作用を含む系やスピン系の非平衡状態へ適用した場合にどのような非平衡伝導現象を示すかという点や、より大規模な非平衡系に適用した場合にどうなるかという点について議論したいと考える。またこの研究では熱化や加熱を物理量によって議論するのではなく、固有状態分布の変化という視点からも議論を行ってきた。このような分布を様々な物理量やエネルギーに対して議論することにより、時間結晶などの非平衡状態の新たな観測方法や、エンタングルメントスペク

トラムに替わるような量子状態間の類似性の評価基準として用いる方法を提案したいと考える。

2021 年度 利用研究成果リスト  
該当なし。