

課題名(タイトル): 光照射下における量子開放系のダイナミクスに対する数値計算法の開発

利用者氏名: ○高橋佑瑚(1)

理研における所属研究室名: (1)計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係

[研究背景]

近年、強相関係に対して光パルスやテラヘルツ電場を用いて物質を非平衡状態へ駆動し、新しい量子相を誘起・制御する研究が急速に発展している。特に、レーザー励起によって平衡状態では現れない電子秩序や相転移を一時的に生成する光誘起量子相は、非平衡物性研究の最前線の一つとなっている。

実験的には、銅酸化物高温超伝導体において、光励起後に超伝導に特有な応答が観測される結果が多く報告されている。例えば、近赤外ポンプ-テラヘルツプローブ分光により、臨界温度以上でもジョセフソンプラズマ共鳴に対応する応答が現れることが示され、光照射によって超伝導を示唆する状態が誘起される可能性が議論されている[1]。一方で同様の銅酸化物系において、光照射により競合するストライプ秩序が融解するものの、必ずしも超伝導秩序そのものが形成されるわけではないことも報告されており、光誘起状態の物理的実体については現在も議論が続いている[2]。モット絶縁体では、超高速光励起によって絶縁体—金属転移が誘起され、その過程が電子相関だけでなく、格子歪みや弾性波の伝播と密接に関係していることが時間分解測定によって明らかにされている[3]。スピン軌道相互作用を伴う強相関酸化物 Sr_2IrO_4 においても、光誘起によってギャップが閉じ、電子構造が変わる事が観測され、非平衡ダイナミクスが基底状態の性質理解そのものに利用できることが示されている[4]。

[研究目的]

非マルコフ的な散逸を伴う量子開放系のダイナミクスを厳密に計算可能な Block-Lanczos-Time-Evolving Block Decimation for Open Quantum Systems (BL-TEBD-OQS) の開発を目的とする。

[本研究課題との関係]

光照射下の非平衡ダイナミクスは環境系と相互作用する非平衡量子開放系として記述されるべきであるが、既存の理論的研究の多くは着目系のみユニタリ時間発展や環境への相互作用が小さいマルコフ的散逸を扱い、必ずしも実験結果を再現しない。励起後の非平衡ダイナミクスは緩和過程に強く依存した非マルコフ的な散逸を強相関係で

扱う数値計算法はまだ十分に確立されていない。このことにより、観測される光誘起状態が新規量子相か過渡的な応答なのかを理論的に判定する枠組みが不足しており、新規数値計算法の開発が急がれる。

2. 具体的な利用内容、計算法

[計算法]

量子開放系に対して Block-Lanczos 法(BL 法)を用いることで着目系と環境系を一次元のテンソルトレインに焼き直す [5]。その後、一次元系のダイナミクス計算に強力な手法である Time-Evolving Block Decimation (TEBD 法)を用いて計算する。TEBD は Improved Parallelizable MPS Compression (IPMC)を実行することでテンソル間を繋ぐ結合次元を効率的に圧縮し、波動関数のノルムを減少させずに安定した並列計算をする[6]。

[利用方法]

計算法の確立に向けて、不純物スピンと伝導電子が相互作用する s-d 模型を舞台にして、外部環境と結合した非マルコフ的なダイナミクスを計算実行する。非マルコフ的な散逸を扱う場合、時間発展に伴って量子エンタングルメントが急速に増大し、計算コストが指数関数的に増加する。したがって、大規模メモリ、長時間計算を必要とする数値シミュレーションとなる。HOKUSAI の計算資源は、BL-TEBD-OQS の開発に向けた試行計算を並列に実行するために利用した。

3. 結果

図 1 は正方格子からなる s-d 模型を舞台に不純物と結合する環境系を記述する BL 基底の空間的な広がりを示している。不純物を中心に正方格子の幾何的特性を反映した 4 回対称性を保ちながら BL 基底の波動関数が広がることを確認し、BL 法のベンチマークを完了とした。

図 2 は、一次元横磁場イジング模型に対して、量子エンタングルメントと局所磁化のダイナミクス計算である。量子エンタングルメントは時間に対して線形に成長する典型的な振

る舞いが得られた。局所磁化は初期状態がダウンスピンから始まり、横磁場によって減衰振動し、収束する事が確認できた。これらの結果から TEBD 法の確立をするベンチマークを完了した。

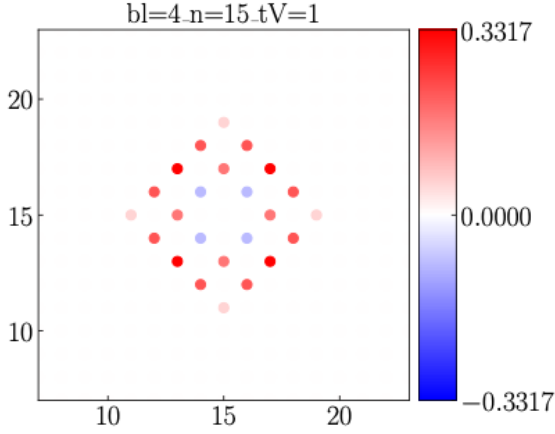


図 1: BL 基底の空間的な広がり

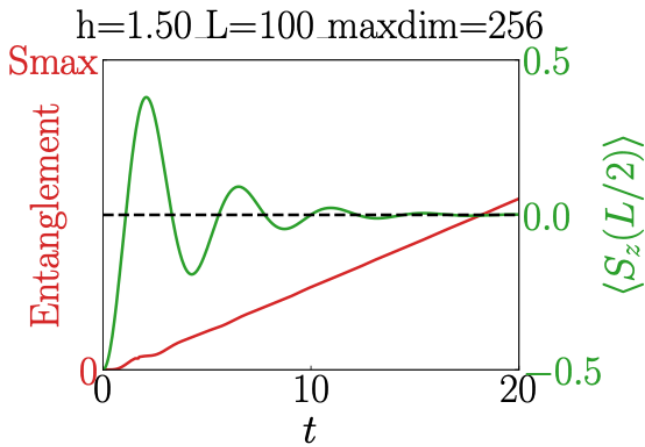


図 2: エンタングルメントと磁化の時間発展

4. まとめ

本課題では、光照射下の強相関系を非マルコフ的散逸を伴う量子開放系として記述するための数値計算法 BL-TEBD-OQS の構築を目的として計算を実施した。BL 法による環境系の自由度を一次元テンソルトレインへ射影し、正方格子上的 s-d 模型に対する BL 基底の構造を解析し、格子対称性を保持した結果を確認した。TEBD 法のベンチマークとして一次元横磁場イジング模型の時間発展計算を実施し、エンタングルメントエントロピーの線形成長と局所磁化の減衰振動と収束という典型的な物理的な挙動を再現した。これにより、本研究で採用した TEBD 法が安定に動作することを確認した。したがって、非マルコフ的散逸を伴う量子開放系ダイナミクスの計算基盤を構築した。本手法では時間発展に伴うエンタングルメント増加により計算資源を要するため、大規模並列計算環境を用いた検証が不

可欠であり、本課題における HOKUSAI 資源が重要な役割を果たした。

5. 今後の計画・展望

BL 法と TEBD 法を統合した BL-TEBD 法の確立を目的に強相関系の非平衡ダイナミクス解析へ段階的に発展させる予定である。まず、不純物スピンの真空状態中に置かれた初期状態から時間発展させ、伝導電子との相互作用によって近藤シングレットが形成される過程をシミュレーションする。次に、BL-TEBD 法を量子開放系へと拡張を行う。開放系では時間発展はリウビル演算子で記述されるため、有効的なユニタリ演算子として近似する手法を導入し、BL-TEBD へ組み込むことで、非マルコフ的散逸を含むダイナミクス計算の実現を目指す。量子開放系ダイナミクスのベンチマークとしては、高速磁化ダイナミクスの計算を対象とする。近年、報告された超高速磁化応答の実験結果[7]を参照し、外場駆動下における磁化緩和過程を理論的に再現可能か検証する予定である。

本研究で開発する BL-TEBD-OQS を用いて、光照射下の強相関系における非平衡緩和過程を長時間スケールで解析し、光誘起状態が新規量子相として安定化する条件を理論的に明らかにすることを最終的な目標とする。

[参考文献]

- [1] M. Nishida, *et al.*, Phys. Rev. B, **110**, 224515 (2024)
- [2] S. J. Zhang, *et al.*, Phys. Rev. X, **14**, 011036 (2024)
- [3] T. Amano, *et al.*, Nat. Phys, **20**, 1778 (2024)
- [4] D. Choi, *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci., **121**, (2024)
- [5] T. Shirakawa, *et al.*, Phys. Rev. B, **90**, 195109 (2014)
- [6] R. Sun, *et al.*, Phys. Rev. B, **110**, 084149 (2024)
- [7] A. Seneviratne, *et al.*, ACS. Omega, **9**, 9666 (2024)

2025 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

【会議の予稿集】

【口頭発表】

【ポスター発表】

Yugo, Takahashi, Numerical method for open quantum systems including the memory effects, Riken autumn school, Oct 14th
2025, Tsukuba

【その他(著書、プレスリリースなど)】