

領域①人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓

4. 量子物質の創発と機能のための基礎科学

—「富岳」と最先端実験の一体化による
革新的強相関電子科学

Basic Science for Emergence and Functionality
in Quantum Matter

— Innovative Strongly-Correlated Electron Science
by Integration of “Fugaku” and Frontier Experiments —

令和2年度の研究成果の中のいくつかの例

研究背景: 量子物質

これまで詳細に研究されてきた物質群

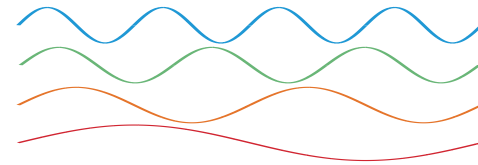
量子もつれの構造を利用して
様々なシミュレーション手法が開発されてきた

『粒子』としての電子間に
量子もつれのない状態:
自明な絶縁体



例) シリコン結晶

『波』としての電子間に
量子もつれのない状態:
単純な金属と低温超伝導体



例) 銅

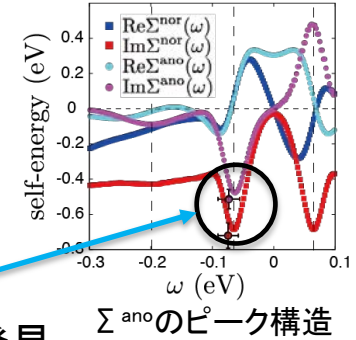
一方、本研究課題では「富岳」を用いて
多数の電子間の量子もつれが重要な役割を果たす
量子物質の本性解明に挑む

最先端の量子物質

1. 強相関高温超伝導体
2. 量子流体

高温超伝導研究の成果: 実験との密連携

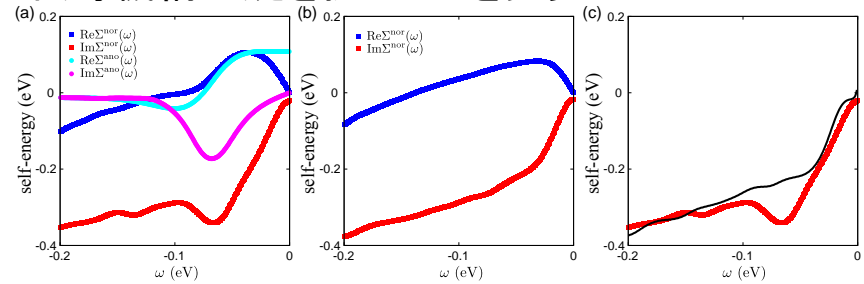
角度分解光電子分光データから機械学習によって抽出した高温超伝導を引き起こす自己エネルギー Σ の信頼性を確立



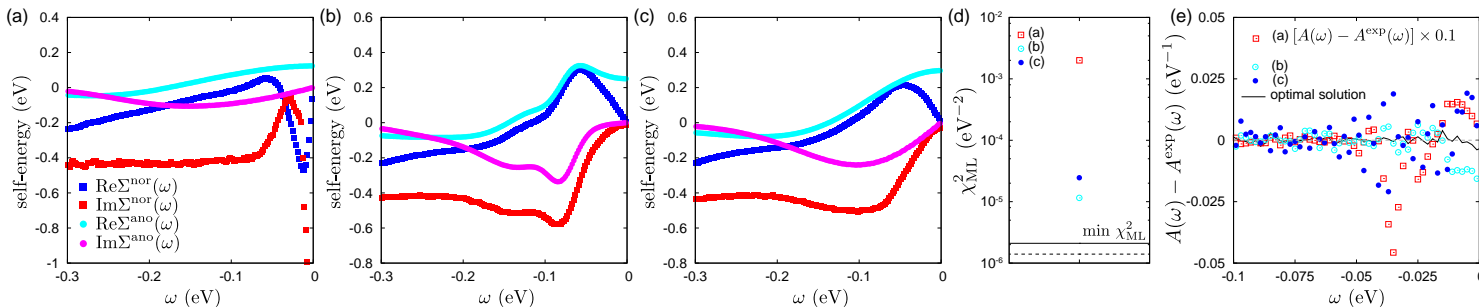
背景1. 超伝導はクーパー対と呼ばれる電子対が凝縮して発生
 背景2. 電子対を作る引力の情報を Σ の超伝導成分 Σ^{ano} が含む
 これまでの成果: 高温超伝導を引き起こす鍵となる Σ^{ano} のピーク構造を見つけ、
 先行研究を覆し、このピークが実験で隠れているが超伝導機構の鍵を握ることを発見

先行研究との比較検証

先行研究(Bok *et al.* (2016))の手法((c)黒線)では正当化できない仮定を使ったため、超伝導を引き起こす Σ のピーク構造が消えることを検証し、仮定を取り除いた我々の結果((c)赤線)で得たピーク構造の信頼性の高さを示した



信頼性検証 我々が得たピーク構造以外の Σ (例: 下図(a),(b),(c)) では実験データを再現できないことを立証(右2図)



Yamaji, Yoshida, Fujimori, and Imada, submitted
 東京大学物性研究所 近藤グループとの連携

自己エネルギー回帰分析のコスト関数

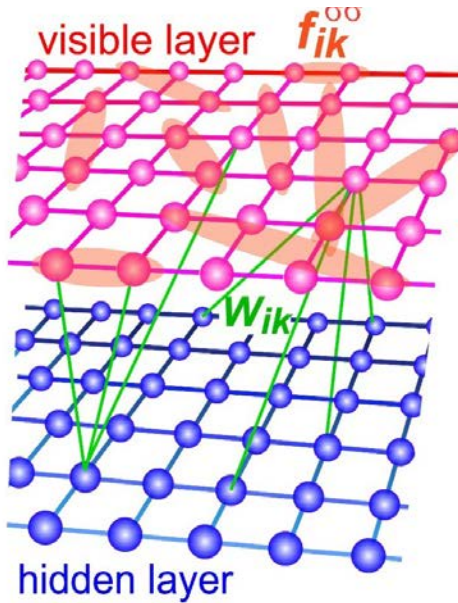
→ 電子対間の量子もつれの定量化による超伝導転移温度予測と大規模分光実験データ(トンネル分光および共鳴非弾性X線散乱データ)と「富岳」を駆使した統合検証への手掛かり

量子流体研究の成果

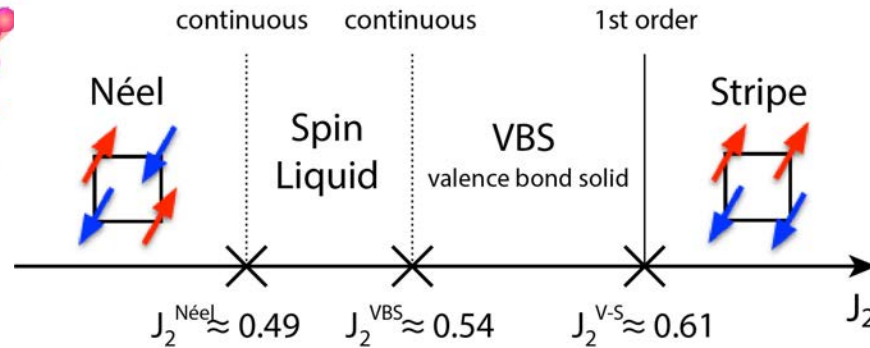
人工ニューラルネットワーク(ANN)と「富岳」の駆使により典型的な量子スピン系の一つ J_1 - J_2 ハイゼンベルグ模型で量子スピン液体が存在することを確立、1つのスピンの2つのスピノンと呼ばれる粒子の複合粒子であることを立証

Nomura and Imada, Phys. Rev. X 11, 031034 (2021)

プレスリリース; https://www.riken.jp/press/2021/20210813_1/

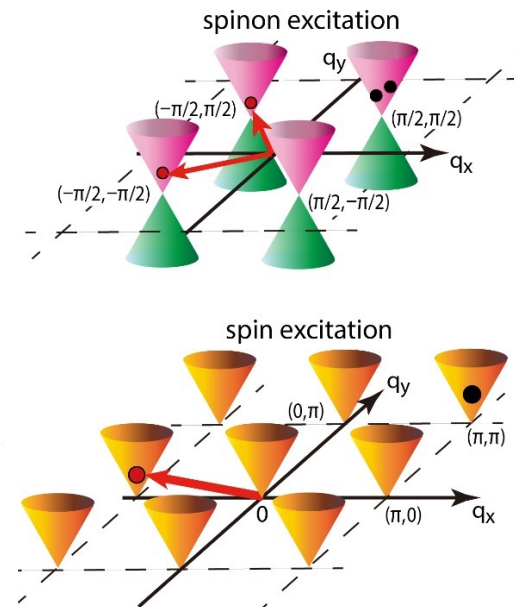


ANNが表現する電子間量子もつれ



J_1 - J_2 ハイゼンベルグ模型の相図

- Spin Liquid: 量子スピン液体
- Néel, Stripe: 磁気秩序相
- VBS: 量子的にもつれたスピン対が整列した秩序相



スピン励起とスピノンの関係

マクロな量子もつれの本性の解明の基礎が得られた

手法の高度化と国際連携

量子計算への応用が活発に研究されているマヨラナ粒子が発現する
キタエフのスピ液体物質の大規模並列シミュレーション手法の確立



マヨラナ粒子
発現機構の提唱者
A. キタエフ

トポロジカル物質のシミュレーションに欠かせない
相対論効果(スピン軌道相互作用)を取り入れた第一原理手法の開発

-強相関第一原理計算ソフトRESPACK+スピン軌道相互作用

Charlebois, Morée, Nakamura, Nomura, *et al.*, Phys. Rev. B 104, 075153 (2021).

量子多体問題解法の精度検証と
実験と大規模シミュレーションの統合手法確立へ向けた国際連携

国際会議『Emergence and Functionality of Quantum Matter』(EFQM2020)

世界をリードする物性理論・計算機シミュレーション手法開発者と実験研究者が結集

-ワークショップ 2020年9月29日~10月2日 -ウェビナー 2020年10月5日, 6日, 13日, 19日, 20日

<https://fugaku-efqm.github.io/EFQM2020/>



Biermann
(Paris)



Georges
(Paris/NY)



Carleo
(Lausanne)



Valenti
(Frankfurt)



Corboz
(Amsterdam)



Werner
(Fribourg)



Wang
(Beijing)



Kim
(Toronto)



Kotliar
(New Jersey)



Zhang
(New York)



Millis
(New York)

国際協力での量子多体ソルバーのベンチマークプロジェクトと
将来の量子計算の精度検証データ準備が進んでいる。