

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 —

(継承成果:ポスト「京」重点課題7サブ課題C
超伝導・新機能デバイス材料)

課題責任代表 今田 正俊
共同代表 山地 洋平

Trend of Strongly Correlated Electron Research; Superconductivity and Quantum Fluids

Supercond. **Historical Background of Condensed Matter Physics** Semicond. Metal, Insulator

従来型超伝導体=BCS機構
格子振動による超伝導

電子間相互作用の
効果が弱いと
仮定した有効理論

ランダウ・フェルミ液体と電子状態計算
20世紀半導体産業の成功の基礎

20世紀終盤より多くの強相関物質の発見。
遷移金属酸化物(銅酸化物ほか)、有機伝導体、希土類化合物など

多体効果が本質的に重要な
強相関電子物質

高温超伝導体(High-T_c SC)の発見
銅酸化物、鉄系超伝導体など

新しい量子流体(Quantum Fluid) の出現
朝永ラッティンジャー液体、分数量子ホール液体、BKT相
トポロジカル物質(Topological Materials)の出現

実験と理論への大きな挑戦

ほかの電子との強い相関のもとでの
電子の量子挙動が直接わかる
実験の革命的進歩
解像度の3桁以上の向上
質的に新しいデータ

概念と計算手法の革新

★概念: 新しい量子流体の描像

1. 分数化した粒子、複合粒子; 創発粒子- Emergent particles
既存素粒子にない特質・高機能性も持ちうる
例: 量子スピン液体のスピン、マヨラナ粒子
2. 粒子性を失った“量子スープ”, “Quantum Soup” “unparticle”;

例: プランク流体

⇒ 高温超伝導の本質にかかわる提案

- ★量子多体計算が必要、手法の高精度化(mVMC(変分モンテカルロ), テンソルネットワーク、ニューラルネットワーク)の発展
- ★破綻した従来の手法に代わる強相関**第一原理手法**の発展(MACE)

目標と内容; purpose and goal of project

物性物理の2大潮流の根本課題に「富岳」を用いて挑戦する
目標を2つ掲げる。

目標1: 強相関高温超伝導はどうやって生まれるかという問いに答える
How does the strongly correlated high- T_c superconductivity emerges?

目標2: 量子流体の本性は何か?という問いに答える
What is the nature of quantum fluids?

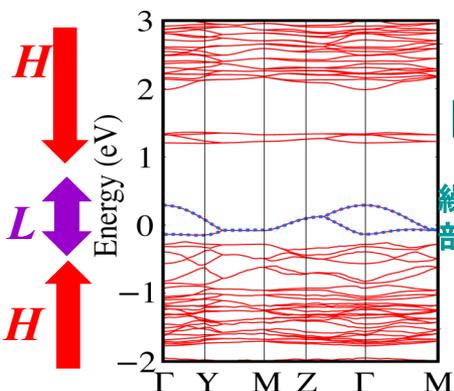
電子にはない機能性をもった創発粒子(スピノンやマヨラナ粒子等)や
“量子スープ”の本性の解明

今までの成果は何か？ Achievements and merit in Post-K project (2015-2019)

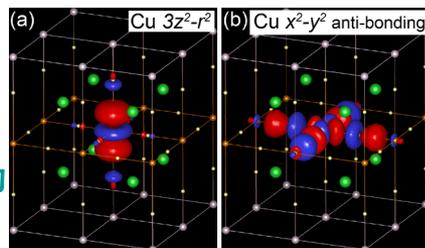
成果: 難問だった強相関電子物質の超伝導、トポロジカル物性の第一原理解明を可能にした。

★強相関第一原理計算手法(2004年に原理、MACE)を開発改良: cGW+SIC

⇒高精度有効ハミルトニアン=任意パラメタなしの第一原理計算の枠組み(改良MACE)2018



繰り込み群的部分対角和



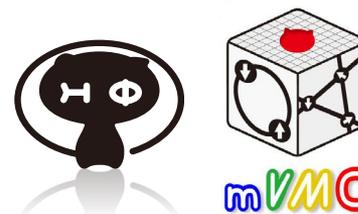
有効ハミルトニアン
の電子軌道
(ワニエ軌道)

$$H = \sum_{kn} \varepsilon_{kn} c_{kn}^\dagger c_{kn} + \frac{1}{2} \sum_{l,l',n,m,n',m'} c_{ln}^\dagger c_{ln} U_{nn',mm'}(l,l') c_{l'm}^\dagger c_{l'm'}$$

Hirayama *et al.* 2018,2019

★導出された有効ハミルトニアン(量子多体問題)を高
精度で解くためのアプリケーション高度化と公開

(HΦ(厳密対角化ソルバー), mVMC(変分モンテカルロソルバー),
RESPACK(有効ハミルトニアン導出ツール))



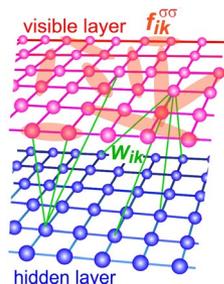
Yamaji, Misawa,
Nakamura, Yoshimi,
Kawamura

世界最高精度
ソルバー

(テンソルネットワーク等を実装し、世界最高精度手法へと高度化、多機能化)

★機械学習を用いて、従来と異なる原理の高精度ソルバー開発にも成功

制限ボルツマンマシン、深層ボルツマンマシン



機械学習による
量子多体系表現

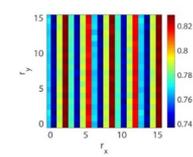
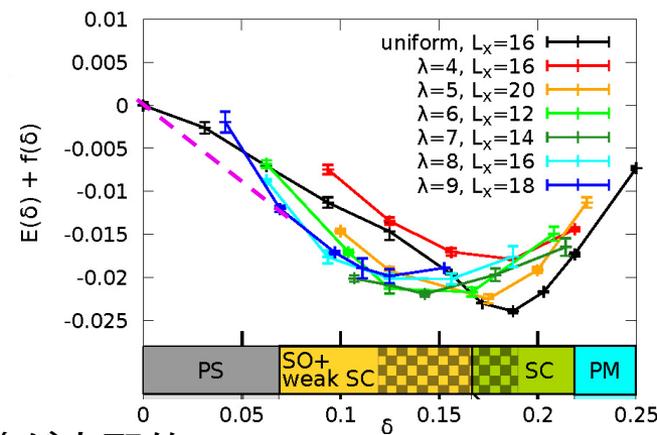
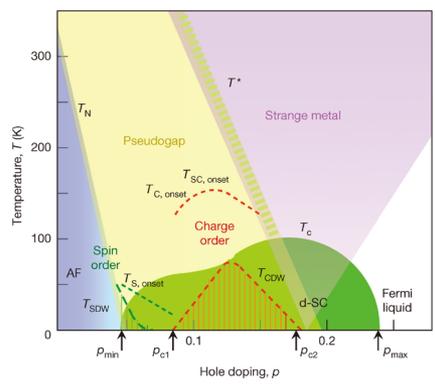
Nomura *et al.* 2017,2018

今までの成果は何か？

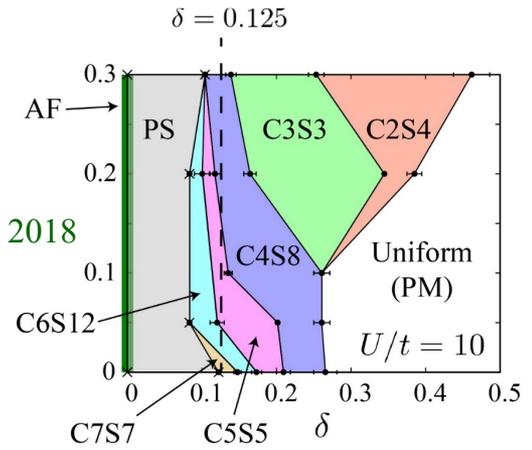
成果：開発手法を駆使し、難問だった銅酸化物高温超伝導の定量再現に典型例で初めて成功

★高温超伝導の理論模型(ハバード模型)の磁性/超伝導相図の国際的合意形成の一翼：超伝導ではなくストライプ相が支配；

クーパー対形成に引力は必要だが引力が強すぎると不均一になる



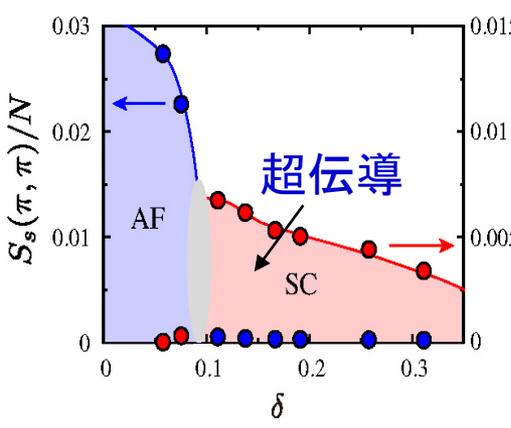
Ido et al. 2017,
Darmawan et al. 2018



実験相図：低温で超伝導が支配的

キャリア濃度 δ のほとんどの領域で黒線の超伝導状態より、いろいろな周期のストライプ秩序(非超伝導)のほうがエネルギーが低い⇔実験と矛盾

★「京」を駆使し、任意パラメタなしで第一原理的に銅酸化物高温超伝導体の実験相図を、発見後32年を経てはじめて、定量的な再現に成功



「物性第一原理計算＝結晶構造と普遍定数のみ与える計算」の重要性立証

Ohgoe et al. 2020,
Misawa et al. 2014,2016

機構解明へ得られた洞察：

1. 有効引力の起源の特定、不均一化との激しい競合
2. 現実の非局所クーロン斥力が不均一相と超伝導相のエネルギー関係を逆転する；ハバードとの違い
3. 創発粒子の存在；隠れたフェルミオンが超伝導を引き起こす

第一原理的に解明された水銀系銅酸化物の相図。
AFは反強磁性、SCは超伝導、灰色部分は電荷秩序

Sakai et al. 2016,
Yamaji et al. 2019

今までの成果は何か？

成果: 量子流体、創発粒子分野の実績、

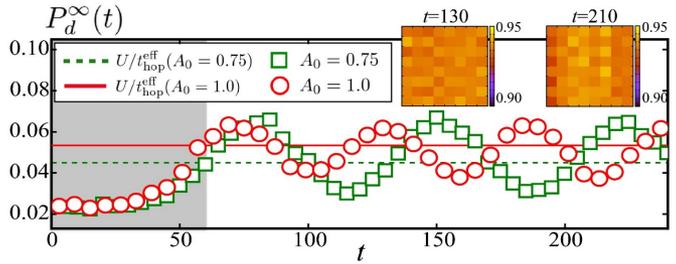
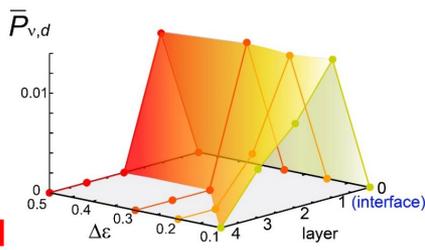
★公開アプリ (HΦ, mVMC) を用い、創発粒子候補物質 (Ir, Ru 酸化物) で
 第一原理的にマヨラナ粒子の実現条件同定 Yamaji *et al.* 2014, 2016, 2018

★HΦの拡張⇒分光スペクトルの高精度計算⇒実験指針を与えた
 物性フロンティア; 非平衡、界面への展開

★ mVMCにより、けた違いに長い時間の非平衡安定シミュレーション実現

★物質科学のフロンティア、表面/界面・非平衡系
 (レーザー照射)の予備モデル計算で超伝導増強の
 仕組みを提唱

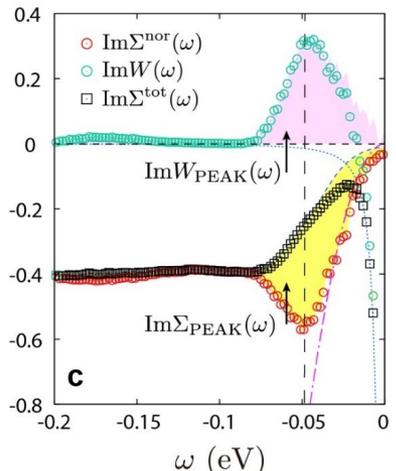
Ido *et al.* 2015, 2017
 Misawa *et al.* 2016



成果: AI最適化手法(機械学習)を用い、実験グループと連携して、理論模型に頼らずに、
 実験データだけから、直接実験では測定できない物理量を抽出

★30年以上隠れていた理論物理量(=自己エネルギー)を機械学習(ボルツマンマシン)で抽出。
 超伝導を引き起こすピークを初めて発見

Sakai *et al.* 2016, Yamaji *et al.* 2019



超伝導に由来する
 異常自己エネルギー
 によるピーク

正常自己エネルギー
 の(負の)ピーク

異常部分ピークが
 超伝導の主因

実験(ARPES, STM)
 で見える相殺した和
 ではピークが隠される

sparseness, K.K.変換や対称性などの
 厳密な拘束条件を課すことで
 劣決定問題の解を求め、
 「人の直感を越えた解」
 を可能に

機械学習活用による銅酸化物超伝導の
 実験データだけから隠れた物理量
 (自己エネルギー)で超伝導の主因を抽出

consistency with
 earlier cDMFT studies
 by Sakai *et al.* 2016

AIの新しい活用の道となる
 本プロジェクトの
 中核となるアイデア

Opening of new materials science approach

「本格実施」では単一データ(ARPESのスペクトル関数)AI解析で隠れた物理量抽出
⇒「富岳」では複数種類の実験手段のデータのAI同時結合解析によって
物理量・機構推定精度の飛躍的向上を図る

従来型の物理学、自然科学

理論—実験



これからの物理学・自然科学の発展の道筋

計算

洞察・直感

+

AIデータ解析
機械学習

実験

理論

実験で直接抽出できない量を多くの実験手段を併用して推定する
⇒ 計算、実験、理論の結びつきを
ヒトの直感・洞察と異なるレベルに拡張・深化

⇔ 通常のmaterials informatics
と異なる

c.f. 界面、非平衡⇔熱平衡

「富岳」活用で基礎科学としての強相関物質科学の奔流へ

高温超伝導研究

未踏量子流体研究

一見全く異なる2つの潮流の合体化
共通の手法を用い、概念の共通普遍化

創発粒子や“量子スープ”が生む
室温超伝導や次々世代デバイスへの期待に基づく
「新たな概念の基礎科学解明」と「機能性開拓」



第一原理強相関電子状態計算改良
スキーム (MACE) (Phys.Rev.B,2018,2019)

今までの成果
準備を活用

開発済み高精度公開ソフト
mVMC, HΦ,RESPACK

非平衡、界面での設計指針実績、

超伝導、量子流体の典型例で得た知見

機械学習、
データ科学の活用

国際連携: 批判的精度検証

最先端実験との
密連携

超伝導と量子流体の統一的な基礎科学解明

「富岳」への準備

ープロジェクトの強みは「本格実施フェーズ」での周到な準備が基礎

2つの目標達成のための

ー「富岳」活用の必要性4つ

- ★多数の物質群の第一原理的網羅計算(高温超伝導体群、創発粒子候補群)
⇒化合物ごとの個性と、個性に依らない普遍性およびその起源の同時抽出が必要
(「京」でたった1種類の化合物計算に数100万~1000万ノード時間を要した。)
 - ★実験では不可能な、現実物質パラメタを越えたパラメタ網羅探索
⇒機構解明、高機能性(超伝導、量子流体)の設計指針抽出
 - ★ AI活用による複数実験の大量のデータ解析が必要
(一例は500x500ピクセル画像データの数十エネルギー一点データ機械学習最適化)
⇒実験-理論-計算を結ぶつなぎ目の洞察の深化、実験で隠れている物理量抽出
 - ★創発粒子(スピノンやマヨラナ粒子)、未踏量子流体の本性解明、特性抽出のための長時間ダイナミクス計算が必要;
世界中の他グループの達成した高精度での最長時間ダイナミクス
(数十フェムト秒)より2-3桁長時間の安定計算が可能になる。
- 網羅計算、AI最適化、長時間(低エネルギー)ダイナミクス計算のために
「富岳」の駆使が必須

「富岳」での成果への確かな見通し; 研究の流れ

実績; 確立した第一原理手法 (MACE)

実績; 高度化した公開アプリ (mVMC, HΦ, RESPACK)

実績; 典型例での実証

実績; 超伝導体の自己エネルギーをAI, 機械学習で抽出

実績; 非平衡、界面での高機能性解明



開発済みアプリ
HΦ, mVMC,
RESPACK

富岳の活用

化合物群への第一原理計算
化合物群網羅計算

パラメタ網羅制御による機構解明

物質設計指針
非平衡、界面: 新フロンティア開拓

機械学習手法展開
ARPESだけでなく複数実験の同時解析

隠れた物理量抽出

機構解明
実験と理論連携による
新しい研究手法

国際会議での発信
アウトリーチ
(プレスリリース)
公開アプリの
講習会、普及
データのリポジトリ公開

開発したアプリケーションの維持・普及
データマネジメントプランを作成し、
それに基づくデータの戦略的な活用
適切な広報、アウトリーチ活動