

令和元年6月2日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K17746

研究課題名(和文) 多体数値計算手法の革新で拓く量子界面物性

研究課題名(英文) Exotic quantum phenomena at interfaces revealed by improvement of numerical methods for many-body systems

研究代表者

三澤 貴宏 (Misawa, Takahiro)

東京大学・物性研究所・特任研究員

研究者番号：10582687

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：強相関電子系を取り扱う高精度に取り扱う計算手法の開発を行い、銅酸化物高温超伝導体の界面での超伝導発現機構の解析を行った。その結果、界面ではドーピング量によらず超伝導の大きさ(超伝導転移温度)がバルク物質の場合の最適値になるという、モデルの詳細によらない普遍的な機構があることを発見した。この結果は、界面では超伝導を最適化するにあたって、ドーピング量の注意深い制御の必要がないことを意味しており、高特性超伝導を探索する研究の新しい方向性を提示した。また、開発した計算手法をオープンソースソフトウェアmVMC,Hとして公開を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高温超伝導などの興味深い現象の舞台となっている強相関電子系を高精度に取り扱える汎用的な数値計算手法の開発を行った。開発した計算手法を用いて、銅酸化物界面での高特性高温超伝導の発現機構、量子スピン液体の有限温度物性などの解析を行った。これらの研究成果は今後の新高温超伝導体・新量子スピン液体の開発につながる期待できる。また、開発した計算手法をオープンソースソフトウェアとして公開を行い、ソフトウェアに関する講習会を開催することで、計算手法の普及活動を行った。

研究成果の概要(英文)：We have developed numerical methods that can accurately treat the strongly correlated electron systems. By using the developed methods, we analyzed the superconductivity at the interfaces of the cuprates. As a result, we find that the amplitudes of the superconductivity are pinned at the optimal value in the bulk system. We also show that this mechanism is universal and does not depend on details of models. This results indicates that the interfaces is an ideal to stabilize and optimize the superconductivity without fine tuning of the carrier densities. We also release the open-source software packages mVMC and H, which implement the developed numerical methods.

研究分野：物性理論

キーワード：強相関電子系 高温超伝導 量子スピン液体 厳密対角化法 変分モンテカルロ法

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19(共通)

### 1. 研究開始当初の背景

固体中の電子間に働く強い相互作用は高温超伝導に代表される興味深い現象を発現させることが知られている。電子相関の高精度な理論的な取り扱いが難問として知られていたが、この10年間で理論手法・計算手法が急速に発展しており、現実の物質の電子相関効果を非経験的かつ高精度に取り扱える計算手法(第一原理ダウンフォールディング法)の開発が行われ、現実の物質への適用が可能になっている。実際に、研究開始当初は、この第一原理ダウンフォールディング法を用いて、研究代表者が中心となって鉄系超伝導体への適用を行い、超伝導を含む実験結果を再現することに成功していた。さらに、鉄系超伝導における超伝導機構を解析することで、一様な電荷感受率の増大が超伝導と連動していることを明らかにしていた。この超伝導機構が他の高温超伝導体、例えば、銅酸化物高温超伝導体でも成立しているのかを明らかにするのが課題であった。さらに、研究開始当初は、高温超伝導体の界面では超伝導転移温度が金属側のドーピング濃度によらないということが実験的に発見されたばかりであり、その現象を理論的に解明することが課題であった。

また、研究代表者が中心となって、強相関電子系を解析する汎用的な数値計算手法である多変数変分モンテカルロ法の開発を行っていたが、ユーザーインターフェースなどは整備されておらず、計算手法に精通していないと計算を行うことが困難であった。多変数変分モンテカルロ法は量子多体系を高精度に取り扱える数少ない計算手法であり、分野内外に大きな波及効果をもたらすことが期待できるため、その公開は急務であった。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、強相関電子系を記述する有効模型を高精度に解析する計算手法の開発・改良を行い、それを用いて強相関電子系で発現する新奇現象の解明を行うことが目的である。例えば、銅酸化物高温超伝導体の界面での新奇超伝導の起源、バルクの銅酸化物高温超伝導体の超伝導発現機構を解明することが目的である。また、開発を行った計算手法をオープンソースソフトウェアとして、整備して公開を行うことで、計算手法の普及活動を行うことも本研究の目的である。

### 3. 研究の方法

本研究では、強相関電子系を取り扱う計算手法として多変数変分モンテカルロ法(mVMC)の開発・改良を行い、それを用いて銅酸化物高温超伝導体の界面の有効模型の解析、銅酸化物超伝導体に対する第一原理有効ハミルトニアン解析などを行った。また、少数サイト系に対して、基底状態および有限温度・動的物理量の厳密な計算を行えるソフトウェア「HΦ」の開発も行った。このHΦを用いて、幾何学フラストレーションを持つ二次元磁性体の有限温度の性質の解析を行った。

### 4. 研究成果

まず、本研究で行った計算手法・ソフトウェア開発の面での主な研究成果を以下に挙げる。

#### (1) 多変数変分モンテカルロ法のソフトウェア「mVMC」の開発・公開:

低エネルギー有効ハミルトニアン解析に主に用いてきた多変数変分モンテカルロ法(mVMC)の拡張を行った。従来の多変数変分モンテカルロ法ではスピンのz成分が0に固定された場合しか計算を行えなかったが、これをz成分が非保存の場合(スピン軌道相互作用がある場合など)にも適用できるように拡張を行った。また、最適化手法としてSorellaらが提案している確率的再配置法[Stochastic Reconfiguration (SR) method]を用いていたが、この手法ではメモリの確保がボトルネックとなって数万程度までの変分パラメータまでしか取り扱えなかった。そこで、Neuscammanら[Phys. Rev. B 85, 045103 (2012)]が提案した改良したSR法の実装を行

い、メモリの制限を大幅に緩和した。これによって、数十万程度の変分パラメータまで最適化が可能になり、自由度が非常に大きい界面などの計算も可能になった。これらの機能を実装したオープンソースソフトウェア「mVMC」を物性研究所のソフトウェア高度化プロジェクトの支援を受けて整備・開発を行い、公開している（<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/81>）。

(2) 厳密対角化法のソフトウェア「HΦ」の開発・公開：

厳密対角化法によって基底状態の計算および熱的純粋量子状態によって有限温度計算をおこなうソフトウェア「HΦ」の開発をおこなった。この開発も、物性研究所のソフトウェア高度化プロジェクトの支援を受けている。HΦでは数億次元以上の大規模な行列-ベクトル積の演算に対して並列化を行うことで、遍歴電子系で18サイト程度、スピン1/2の局在スピン系で36サイト程度までの計算可能になった。また、シフトクリロフ部分空間法に基づいた動的な物理量を計算する機能、実時間発展を行う機能などの拡張も行った。これらの機能は公開版HΦで使用可能となっている。（<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/339>）。

(3) ソフトウェアの普及活動：(1), (2)で開発したソフトウェアの講習会を行い、ソフトウェアの広報・普及活動を行った。また、これらのソフトウェアを物性研のスーパーコンピュータにプレインストールすることで、スーパーコンピュータを用いた大規模計算を容易に行える環境を整備している

（<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/visitor/applications>）。

また、HΦに関しては東京工業大学、名古屋大学、九州大学のスーパーコンピュータにも高度科学技術研究機構(RIST)の協力のもとプレインストールされており、幅広いユーザーが使用できるようになっている（[http://www.hpci-office.jp/pages/appli\\_hphi](http://www.hpci-office.jp/pages/appli_hphi)）。

次にこれらの計算手法・ソフトウェアを用いて得られた、主な研究成果を以下に挙げる。

(4) 銅酸化物高温超伝導体の界面の有効モデルの解析：銅酸化物高温超伝導体の界面の有効モデルの解析を、mVMCを用いて行った。その結果、銅酸化物界面で実験的に観測されていた、超伝導転移温度が金属側のドーピングに依存せずバルクの場合の最適値に固定される現象を再現することに成功した。さらに、界面では積層方向の自由度を利用して、面内に内在する相分離への不安定性を自発的に解消することがこの現象の起源であることを明らかにした。この結果は、高温超伝導体の界面では、自動的に超伝導転移温度の最適化が行われる可能性があることを示しており、高特性高温超伝導を実現する新しい方向性を示している。

(5) 銅酸化物高温超伝導の第一原理有効ハミルトニアンの導出・解析：今までの第一原理ダウンフォールディング法のさらなる拡張を行い、一体レベル補正を適切に行うことで、銅酸化物高温超伝導体の母物質の磁性・電子状態を非経験的計算から再現することに成功した（arXiv:1901.00763）。さらに、ドーピング効果を調べることによって、超伝導状態を含めた実験結果を再現することにも成功している（arXiv:1902.00122）。また、銅酸化物高温超伝導体においても超伝導が一樣な電荷感受率と連動していることを明らかにした。この結果は、この超伝導機構が強相関電子系において普遍的な高温超伝導機構であることを示唆している。

(6) 幾何学フラストレーションを持つハバードモデルの有限温度解析：HΦに実装した熱的純粋量子状態を用いて幾何学的フラストレーションを持つハバードモデルの有限温度物理量の解析を行った。その結果、量子スピン液体が発現すると期待されている領域では、他の秩序相が基底状態になる場合に比べて、エントロピーの開放は遅く、比較的高温でもエントロピーが大きく残るといふ顕著な性質があることを明らかにした。この結果は、有限温度の残留エントロピーを

計測することで、基底状態で量子スピン液体が判定できる可能性を示しており、今後の新しい量子スピン液体探索の指針を示す結果となっている。

5. 主な発表論文等 [雑誌論文] (計 7 件)

1. [査読あり] Takahiro Misawa, Satoshi Morita, Kazuyoshi Yoshimi, Mitsuaki Kawamura, Yuichi Motoyama, Kota Ido, Takahiro Ohgore, Masatoshi Imada, and Takeo Kato, “mVMC -Open-source software for many-variable variational Monte Carlo method”, *Comput. Phys. Commun.* **235**, 447 (2019).
2. [査読あり] Motoaki Hirayama, Youhei Yamaji, Takahiro Misawa, and Masatoshi Imada, “Ab initio effective Hamiltonians for cuprate superconductors”, *Phys. Rev. B* **98**, 134501 (2018).
3. [査読あり] Takahiro Misawa and Youhei Yamaji, “Finite-Temperature Signatures of Spin Liquids in Frustrated Hubbard Model”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 023707 (2018).
4. [査読なし] 山地洋平, 三澤貴宏, 吉見一慶, 河村光晶, 藤堂眞治, 川島直輝, “量子格子模型の汎用数値対角化パッケージ  $H\Phi$  -スピン液体近傍の熱・スピン励起への適用-“, *固体物理* **52**, No. 10 (2017).
5. [査読なし] 三澤貴宏, 今田正俊, “<コラム>mVMC 多変数変分モンテカルロ法のオープンソースソフトウェア”, *固体物理* **52**, No. 11 (2017).
6. [査読あり] Mitsuaki Kawamura, Kazuyoshi Yoshimi, Takahiro Misawa, Youhei Yamaji, Syngye Todo, and Naoki Kawashima, “Quantum lattice model solver  $H\Phi$ ”, *Comput. Phys. Commun.* **217**, 180 (2017).
7. [査読あり] Takahiro Misawa, Yusuke Nomura, Silke Biermann, and Masatoshi Imada, “Self-optimized superconductivity attainable by interlayer phase separation at cuprate interfaces”, *Sci. Adv.* **2**, e1600664 (2016).

[学会発表] (計 26 件)

1. 井戸康太, 三澤貴宏, “変分モンテカルロ法を用いたKitaev模型の磁化過程の研究”, 日本物理学会年次大会, 3/14-17 (2019), 九州大学伊都キャンパス.
2. 三澤貴宏, 野村健太郎, “トポロジカルディラック電子系におけるポンピングの半量子化とスピン軌道トルク”, 日本物理学会年次大会, 3/14-17 (2019), 九州大学伊都キャンパス.
3. Kota Ido and Takahiro Misawa, “Variational Monte Carlo study on a magnetization process of the Kitaev honeycomb model under a magnetic field”, APS March Meeting, 3/4-3/8 (2019), Boston.
4. Takahiro Misawa and Kentaro Nomura, “Semi-Quantized Pumping and Spin-Orbit Torque in Topological Dirac Semimetals”, APS March Meeting, 3/4-3/8 (2019), Boston.
5. [招待講演] 三澤 貴宏, “Applications to topological materials to spintronics”, PCoMS シンポジウム&計算物質科学スパコン共用事業報告会, 10/22-23 (2018), 東北大金属材料研究所.
6. Takahiro Misawa, “Applications of quantum lattice model solver  $H\Phi$  to frustrated magnets”, OIST Seminar, 2018, 9/28

7. Takahiro Misawa and Kentaro Nomura, "Inverse Spin Hall Effect and Magnetization Switching in Topological Dirac Semimetals", International Conference on Magnetism 2018, 7/16-20, Sanfrancisco
8. Takahiro Misawa, Yuichi Motoyama, and Youhei Yamaji, "Asymmetric melting of one-third plateau in kagome quantum antiferromagnets", International Conference on Highly Frustrated Magnetism 2018, 7/9-14 (2018), U.C. Davis
9. 三澤 貴宏, "多変数変分モンテカルロ法のオープンソースソフトウェアmVMCの強相関超伝導への適用", 京都大学基礎物理学研究所研究会「電子相関が生み出す新規な秩序と超伝導現象:トポロジー、液晶状態、動的現象」, 5/7-5/9 (2018), 京都大学基礎物理学研究所 湯川記念館パナソニックホール.
10. 三澤貴宏, 野村健太郎, "トポロジカルディラック電子系のスピンホール効果を利用したスピンスイッチング", 日本物理学会年次大会, 3/22-25 (2018), 東京理科大学野田キャンパス.
11. Takahiro Misawa and Kentaro Nomura, "Spin Pumping and Inverse Spin Hall Effect in Topological Dirac Semimetals", APS March Meeting, 3/5-3/9 (2018), Los Angeles.
12. Takahiro Misawa, "Short tutorial for software for exact diagonalization package HΦ", FOR 1807, Winter School 2018, 2/19-23 (2018), Marburg.
13. Takahiro Misawa, "mVMC - Open-source software for many-variable variational Monte Carlo method", FOR 1807, Winter School 2018, 2/19-23 (2018), Marburg.
14. 三澤貴宏, 本山裕一, 山地洋平, "かごめ格子量子ハイゼンベルグ模型の有限温度磁化過程", 第二回量子スピン液体研究の新展開, 12/13-15 (2017), 東京大学本郷キャンパス, 工学部6号館
15. [招待講演]三澤 貴宏, "トポロジカル物質における量子輸送現象", PCoMSシンポジウム&計算物質科学スパコン共用事業報告会, 11/9-10 (2017), 東北大金属材料研究所.
16. 三澤貴宏, 野村健太郎, "トポロジカルディラック電子系におけるスピン注入による量子輸送現象", 日本物理学会秋季大会, 9/21-24 (2017), 岩手大学.
17. [招待講演]三澤 貴宏, "多変数変分モンテカルロ法のオープンソフトウェア mVMC の開発", 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」4/3-4 (2017), 東京大学物性研究所.
18. 三澤貴宏, 本山裕一, 山地洋平, "かごめ格子上のハイゼンベルグ反強磁性模型における 1/3 プラトンの有限温度効果", 日本物理学会年次大会, 3/17-20 (2016), 大阪大学.
19. Takahiro Misawa and Youhei Yamaji, "Finite-temperature Signature of Spin Liquids in Frustrated Hubbard model", APS March Meeting, 3/13-3/17 (2017), New Orleans.
20. [招待講演]三澤 貴宏, "強相関系に対するソフトウェア入門 -初めてのHΦ、mVMC-", 有機固体若手の会, 3/9-10 (2017), 湯河原温泉
21. [招待講演]三澤 貴宏, "強相関効果による高温超伝導発現機構", 九州工業大学第 29 回物性グループセミナー. 3/3 (2017), 九州工業大学
22. [招待講演]三澤 貴宏, "強相関効果による高温超伝導発現機構と界面構造を利用した超伝導の制御可能性, 第 59 回化合物新磁性材料専門研究会, 12/5 (2016), 東京大学工学部 6 号館
23. [招待講演]三澤 貴宏, "銅酸化物界面における超伝導の最適化機構", "PCoMS シンポジウム & 計算物質科学スパコン共用事業報告会", 10/17-18 (2016), 仙台

24. [招待講演]三澤 貴宏, ” 層間相分離による銅酸化物界面での超伝導最適化機構”, 高温超伝導フォーラム第4回会合, 9/12 (2016), 金沢
25. [招待講演]三澤 貴宏, ” 超伝導・新機能デバイス材料—高温超伝導体” 東工大元素戦略拠点(TIES)テクニカルミーティング, 8/6 (2016), 東工大田町キャンパス
26. [招待講演]三澤 貴宏, ” 強相関電子系における高温超伝導の計算科学的研究, 新機能デバイス・高性能材料のための産官学連携フォーラム第一回会合, 5/30 (2016), 東京大学

[図書] (計0件) [産業財産権] ○出願状況 (計0件) ○取得状況 (計0件)  
[その他]

ホームページ:

<http://pcoms.issp.u-tokyo.ac.jp/cultivation/youngresearchersmisawateam/members/misawa>  
プレスリリース:

銅酸化物界面の高温超伝導安定化機構解明の結果(業績リスト原著論文21の結果)について以下のプレスリリースを行った。「なぜ高温超伝導体は界面で優れた特性を持つか? — 銅酸化物界面で超伝導転移温度が安定に最適化される機構を解明」

[https://www.t.u-tokyo.ac.jp/shared/press/data/setnws\\_20160801104150830990252730\\_785959.pdf](https://www.t.u-tokyo.ac.jp/shared/press/data/setnws_20160801104150830990252730_785959.pdf)

受賞:

三澤貴宏、「計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)次世代研究者奨励賞」, 2018年3月)

オープンソースソフトウェアの公開:

mVMC

MateriApps: <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/81>

GitHub: <https://github.com/issp-center-dev/mVMC>

HΦ

MateriApps: <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/339>

GitHub: <https://github.com/issp-center-dev/HPhi>

ホームページ: <http://issp-center-dev.github.io/HPhi/index.html>

公開したソフトウェアに関する講習会:

1. 行事名: CCMS ハンズオン: 2016年度HΦ講習会  
実施日: 2016/7/26  
参加者数: 8名程度  
場所: 東京大学物性研究所 6階 A614
2. 行事名: CCMS ハンズオン: 2017年度HΦ講習会 (TIA “かけはし” 連携講座)  
実施日: 2017/6/29  
参加者数: 10名  
場所: 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205号室
3. 行事名: CCMS ハンズオン: mVMC講習会 (TIA “かけはし” 連携講座)  
実施日: 2017/8/30  
参加者数: 5名  
場所: 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205号室
4. 行事名: CCMS ハンズオン: 2018年度HΦ講習会 (TIA “かけはし” 連携講座)  
実施日: 2018/12/12  
参加者数: 7名  
場所: 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205号室
5. 行事名: 情報基盤研究開発センターハンズオン: HΦ講習会-ITOを用いたハンズオン-  
実施日: 2019/3/18  
参加者数: 10名程度  
場所: 九州大学 伊都キャンパス (福岡県福岡市) 情報基盤研究開発センター

## 6. 研究組織

※科研究費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。