

III. 量子物性研究部門

III-1. 光科学分野

1. メンバー

教授	矢花 一浩
准教授	全 暁民
講師	前島 展也
学生	大学院生 5名、学類生 2名

教授 日野 健一(学内共同研究員、物質工学域)

2. 概要

物質中の電子ダイナミクス、レーザー照射による原子・分子の状態制御、固体における光誘起相転移等に関する研究を行っている。電子ダイナミクスについては時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく第一原理計算を行い、更に巨視的マクスウェル方程式と微視的TDDFT計算をマルチスケール手法で結びつけ高強度なパルス光が物質中を伝播する様子を記述する新しいシミュレーション法の開発も行っている。原子・分子系では、ダイナミクスおよびそれらの電磁場との相互作用により生じる現象について時間依存シュレディンガー方程式の直接解法で解く方法によりシミュレーションを行っている。これは、強レーザー場における原子・分子の非線形過程や反陽子と原子の衝突などにおけるエキゾチック原子の生成、さらに振動磁場などの外場による物理的な過程の制御方法の探索につながる。また、パルスレーザー照射下における半導体(超格子)中の励起子、コヒーレントフォノン状態の解析、光誘起相転移を起こす系における CW レーザー誘起状態の解析も行なっている。

3. 研究成果

【1】 時間依存密度汎関数理論による物質中の電子ダイナミクス計算

光科学のフロンティアの一つに、高強度で極めて短いパルスレーザーと物質の相互作用に関する研究分野がある。光の瞬間的な最大強度が $10^{14}\text{W}/\text{cm}^2$ 程度を越えると物質は瞬時にプラズマ化される。この光破壊プロセスは、物質を非熱的に加工する手段として注目されている。一方光破壊に近い強度では光と物質の相互作用に著しい非線形性が生じる。このような極限的なパルス光と物質の相互作用をどのように理論的に記述するのか、またどのような応用の可能性があるのかを明らかにすることが課題となっている。

我々は極限的なパルス光と物質の相互作用に対して、実験研究との密接な連携のもと、光電場に

より生じる電子ダイナミクスを TDDFT に基づく第一原理計算で記述し、空間的にはナノメートル以下、時間的にはフェムト秒以下で起こる素過程を明らかにすることを目標に研究を進めている。開発を進めている TDDFT に基づく電子ダイナミクス計算コードの核となるのは、与えられたパルス光電場が引き起こす単位セル中の電子軌道の時間変化の計算である。この単位セル計算から、パルス光による電子ダイナミクスを実時間・実空間で記述し、電子励起の様相を明らかにすることができる。また、この単位セル計算は、入力となる光電場に対して結晶中を流れる電流密度を求めることから、電場と分極を結び付ける（数値的な）構成方程式とみなすことができる。我々はこの観点から、巨視的マクスウェル方程式と微視的 TDDFT 計算をマルチスケール手法で結びつけ、高強度なパルス光が物質中を伝播する様子を記述する巨視的電磁気学シミュレーション法（Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション法）の構築に成功している。この新奇なシミュレーション法は、京コンピュータ程度の今日利用可能な最大規模の計算機を用いてのみ実行可能であり、高強度パルス光と物質の相互作用を自在に記述する手法として注目を集めている。

(1) 高強度パルス光と誘電体薄膜の相互作用（李(APRI、韓国)、佐藤、篠原、乙部（原研）、矢花）

SiO₂ の薄膜及びバルク結晶に高強度パルス光が照射する場合の極限的な光応答に関し、Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーションによる解析結果を論文にまとめた。通常の光学では、薄膜の厚さが光波長の 1/2、1/4 等の場合に表面と裏面における反射波の干渉が起き、この干渉は多層膜ミラーなどに応用されている。本研究では、光強度が増すにつれて非線形相互作用のために干渉効果が消失する様子を明らかにした。また、パルス光から電子へのエネルギー移送により、薄膜にどのようなエネルギー分布を生じるかを明らかにし、光破壊の閾値エネルギーに対する見積もりを与えた。この計算は、京コンピュータの試験利用を用いて得られた成果である。

(2) 高強度パルス光により透明誘電体に生じる超高速電流の生成メカニズム（Wachter 他（ウィーン工科大）、佐藤、矢花、全（計科セ））

最近、透明な誘電体である SiO₂ の表面に高強度パルス光を照射すると、フェムト秒程度の短い時間スケールで表面にキャリアが生じ電流が流れることが実験的に示され、注目されている。我々は、TDDFT に基づく第一原理計算により、高強度パルス光の SiO₂ への照射による電流発生メカニズムを明らかにした。計算では実験で見出されているのと同様に、光破壊に近い強度で電流発生が示された。また、パルス光の照射中のみ起こる電荷移動と光照射後も存在する電流という、異なるメカニズムによる電流発生が見られた。

(3) 光破壊メカニズムの解明と閾値予測（佐藤、篠原、乙部（原研）、李（APRI、韓国）、矢花、

G.F. Bertsch(Univ. Washington))

Maxwell+TDDFT マルチスケールシミュレーション法を用いると、高強度パルス光が透明な誘電体に引き起こす電子励起を求めることができる。電子励起エネルギーが物質の結合エネルギーを上回れば、アブレーション等の不可逆変化が起これると考えられることから、計算により物質の光破壊過程を記述することが可能となると考えられる。SiO₂等の物質での予備的な検討を行い有望な結果が得られつつある。

(4) 高強度パルス光による物質の誘電応答変化に対する数値ポンプ・プローブ実験 (佐藤、篠原、乙部 (原研)、矢花、G.F. Bertsch (Univ. Washington))

高強度パルス光を用いた実験では、しばしばポンプ・プローブ分光と呼ばれる実験手法が用いられる。これは、一つのパルス光をハーフミラー等を用いて時間差を持つ2つのパルス光に分け、最初のパルス光が物質を励起し、2番目のパルス光により励起した物質の性質を探る方法である。本研究では、ポンプ・プローブ分光を模した第一原理シミュレーションを遂行し、パルス光により電子励起した直後の物質の誘電的性質を調べた。高強度なパルス光により誘電体中に自由キャリアが生成し、それが物質の光応答を金属的に変化させる様子を明らかにすることができた。

(5) ハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算の GPU 並列計算 (谷口、佐藤、篠原、矢花)

光電場により物質中に引き起こされる電子ダイナミクスを定量的に調べる上で、エネルギー汎関数の適切な選択は極めて重要である。絶縁体や半導体の場合、物質の電子構造と光応答を規定する最も基本的な物理量はバンドギャップであるが、最も単純な選択肢である局所密度近似を用いると、系統的にバンドギャップが過小評価されることは良く知られている。最近、メタ GGA やハイブリッド汎関数など、密度だけではなく軌道の性質を取り入れた汎関数を用いることにより、局所密度近似によるバンドギャップ過小評価の問題のかなりの部分が解決されることが分かってきた。

ハイブリッド汎関数は、バンドギャップや誘電関数の記述に著しい改善を見せるものとして近年特に注目されているが、一方で局所密度近似と比較すると、計算コストが膨大なものとなる欠点がある。我々は、計算科学研究センターに導入された超並列 GPU 計算機である HA-PACS を用いて、ハイブリッド汎関数を用いた電子ダイナミクス計算の高速化を試みた。ハイブリッド汎関数を用いる場合、比較的小さいサイズの3次元複素離散フーリエ変換を非常に多数回行うことが必要となる。この作業を GPU CUDA ライブラリである cufft を用いて実装する計算コードの開発を行った。

計算の結果、Si 結晶の誘電関数を再現し、さらに高強度レーザー照射によって非線形応答であ

る多光子吸収が現れることがわかった。また、計算時間を計測した結果、GPU ライブラリ cufft を用いると、標準的な CPU ライブラリ FFTW3 に比べて 1 ノード (CPU: 16 コア、GPU: 4) あたり 8 倍の速度で計算できることがわかった。

【2】 強中赤外線レーザーにおける電離過程の解明 (全)

以前実行した大規模数値計算により、電離された電子の運動量分布と波長の関係を短波長(200 nm)から長波長 (2000 nm) まで系統的に研究し、実験グループで観測した現象と一致することが明らかになったが、強中赤外線レーザーにおける電離過程のメカニズムは分かっていなかった。今回、我々が開発した計算手法により、電子の電離過程と電離された電子のレーザー電場中の伝播を分離して、各時刻のレーザー電場の寄与を詳しく分析した。図 1 (a)のように半周期中に電離された電子の運動量分布と図 1 (b)のように全レーザー中に電離された電子の運動量分布を比べて、強中赤外線レーザーにおける電離過程のメカニズムを解明した。その上、多重散乱の寄与もはっきり観測された。この研究結果は Physical Review A に発表された。このメカニズムによって、実験の観測結果と比較することにより原子・分子の内部情報を得ることが可能となる。

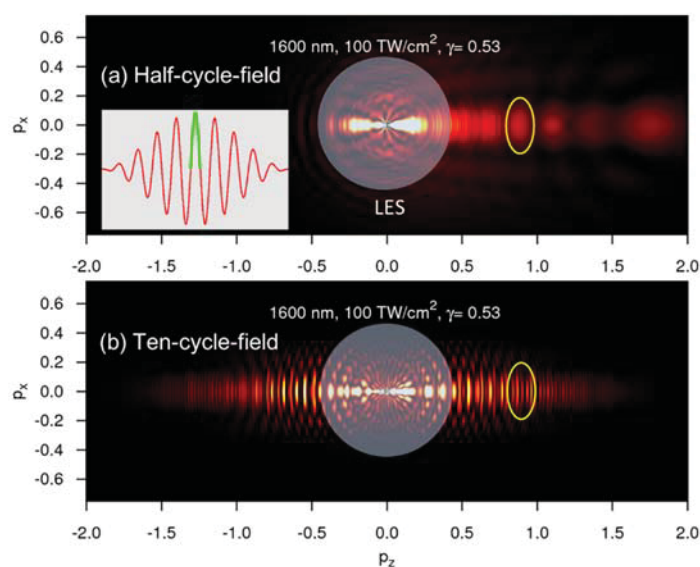


図 1. 強中赤外線レーザー場における水素原子からの光電子運動量の分布：(a) レーザー電場中心の半周期から電離された電子、(b) 全レーザー電場から電離された電子。

【3】 赤外線による分子動的過程アト秒範囲内の制御 (全)

分子の動的過程制御に必要とされるアト秒 (10^{-18} 秒) スケールのパルスレーザーは高次高調波の光源開発により利用可能となっている。しかし、分子軌道の制御には軟X-線電場の波形を精密に制御する必要があるため、現実の動的過程制御の実現は困難とされてきた。最近、アメリカの

Colorado大学のM. Murnane 教授の実験グループで精密な軟X-線電場の形の調整が実現し、その軟X-線を利用して、図2のように強レーザー時間遅延による重水素分子の電離と解離過程がアト秒範囲内で制御された。この実験結果は我々の理論計算によって、電離と解離のルートが解明された。その上、長時間時間遅延によって、分子精密なエネルギー状態の測定が可能ということをも提案して、同じ実験で実現された。共同研究結果はPrecedings of the National Academy of Sciencesに発表された。

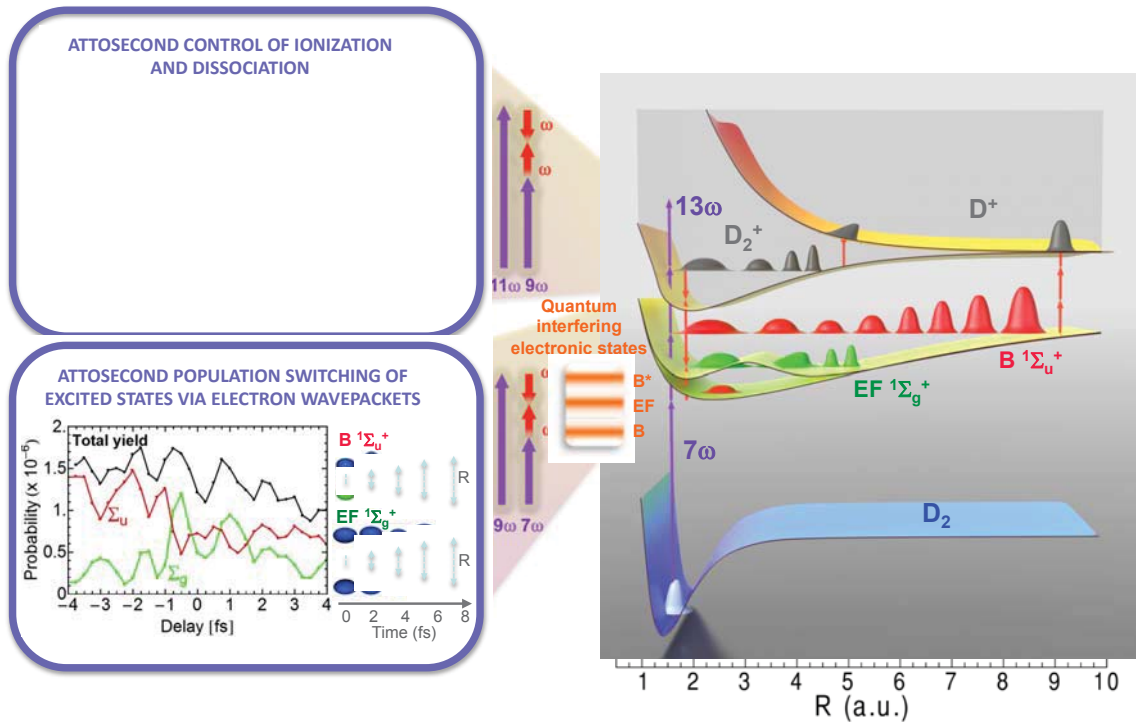


図2：軟X線による重水素分子電離、解離アト秒範囲の制御ルート。

【4】光着衣励起子における動的Fano共鳴（日野、前島）

物質中の電子状態に対する強力な外場による非線形効果は量子ダイナミクスや状態のコヒーレント制御という観点から注目を集めている。特に、強い時間周期レーザー場中において実現するフロケ状態と呼ばれる特殊な状態をりよすることにより電子の状態を自在に制御する研究が実験・理論の両面から行われている。我々は、このフロケ状態で記述される電子と正孔が束縛した光着衣励起子の形成により、半導体超格子の光学応答スペクトルがどのように影響を受けるかを調べた。得られた結果のうちで最も特筆すべき点はファノ共鳴的な非対称ピーク光学応答スペクトルに現れることである。このファ

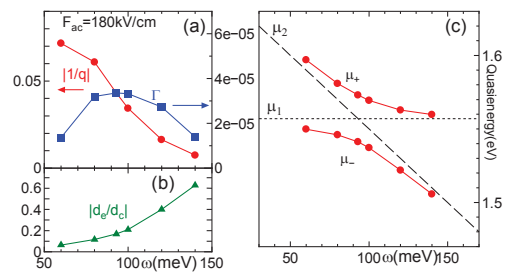


図3 ファノ共鳴ピークのスペクトル幅 Γ 、非対称パラメータ q 、双極子モーメント比 d_e/d_c 、AC-ツェナー結合による2つのミニバンド準位の周波数 ω 依存性

ノ共鳴は強いレーザー外場によって生み出されるAC-ツェナー結合(ZC)によって、光着衣励起子状態と電子正孔対の間に相互作用が発生するためにおこる。またこの相互作用はレーザー外場によって制御可能なため、ファノ共鳴特有の物理パラメータもレーザーによって変化させられることが分かった。その意味で、このファノ共鳴は動的ファノ共鳴と呼ばれるものである。特にレーザー周波数 ω を変化させることによりスペクトル幅 Γ や非対称パラメータ q などのファノ共鳴特有のパラメータを制御できることが分かった(図3)。

【5】 2 軌道縮退ハバード模型における光誘起ダイナミクス

ペロブスカイト型バナジウム酸化物 RVO_3 (R は Y もしくは希土類) における光照射による状態変化を調べるため、 $2 \times 2 \times 2$ クラスタ上の 2 軌道ハバード模型に対する厳密対角化計算を行った。励起光の偏光を z 軸に平行とした場合の計算の結果、基底状態と光励起状態ではスピン構造因子に大きな差異がみられることが明らかとなった。その結果、期待されるスピン軌道秩序が基底状態のものから大きく変化しうることが分かった(図 4)。

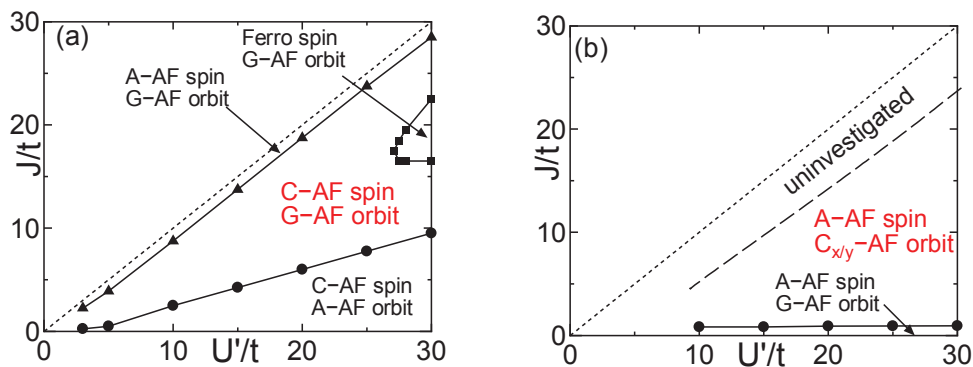


図 4 基底状態(a)および光励起状態(b)における相図。

4. 教育

修士論文

佐藤 駿丞 Theoretical study on optical properties of solids excited by ultra-short laser pulses

卒業論文

井本 文裕 2 軌道縮退ハバード模型におけるスピン・軌道相関と光励起効果の解析
 日高 篤俊 ボゾン化法によるコヒーレントフォノン生成機構の理論的モデルの構築
 樋口 祐葉 2 軌道縮退ハバード模型のスピン・軌道相関に対するヤーン・テラー型格子歪み効果

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(B)、矢花一浩、代表、2011 年度、3250 千円、「固体中のフェムト・アト秒電子ダイナミクスに対する第一原理計算」
2. 日本学術振興会科学研究費、新学術領域研究(研究領域提案型) 公募研究、矢花一浩、代表、2013 年度、1950 千円、「光と電子のダイナミクスを記述する第一原理マルチスケールシミュレーション法の開発」
3. 日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナーシップ共同研究(アメリカ合衆国)、矢花一浩、代表、2013 年度、2320 千円、「超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチ」
4. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、全 暁民(トン ショウミン)、代表、2013 年度、780 千円、「赤外線レーザーの付加による原子・分子高速過程の制御の理論研究」
5. 日本学術振興会科学研究費、基盤研究(C)、日野 健一、代表、2013 年度、650 千円、「超短パルス励起半導体における動的ファノ共鳴と過渡的準粒子生成」
6. 日本学術振興会科学研究費、若手研究(B)、前島 展也、代表、2013 年度、650 千円、「光誘起相転移初期過程における超高速ダイナミクスの量子動力学的研究」

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. Kyung-Min Lee, Chul Min Kim, Shunsuke A. Sato, Tomohito Otobe, Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, and Tae Moon Jeong, “First-principles simulation of the optical response of bulk and thin-film α -quartz irradiated with an ultrashort intense laser pulse”, *J. Appl. Phys.* **115**, 053519 (2014).
2. S.A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, G.F. Bertsch, “Numerical pump-probe experiments of laser-excited silicon in nonequilibrium phase”, *Phys. Rev. B* **89**, 064304 (2014).
3. M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku, “Massively-parallel electron dynamics calculations in real-time and real-space: Toward applications to nanostructures of more than ten-nanometers in size”, *J. Comp. Phys.* **265**, 145 (2014).
4. Georg Wachter, Christoph Lemell, Joachim Burgdörfer, Shunsuke A. Sato, Xiao-Min Tong, Kazuhiro Yabana, “Ab-initio simulation of optical-field induced currents in dielectrics”, *Phys. Rev. Lett.* accepted (arXiv:1401.4357 [cond-mat.mtrl-sci]).
5. Qianqiang Li, Xiao-Min Tong, Toru Morishita, Hui Wei and C. D. Lin, “Fine structures in the intensity dependence of excitation and ionization probabilities of hydrogen atom in intense 800-nm laser pulses”, *Phys. Rev. A* **89**, 023421_1-9 (2014)
6. P. Ranitovic, C. W. Hogle, P. Riviere, A Palacios, X. M. Tong, N. Toshima, A. Gonzalez-Castrillo, L. Martin, F. Martin, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, “Attosecond vacuum UV Coherent Control of Molecular Dynamics”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111**, 912-917 (2014)

7. X. M. Tong, P. Ranitovic, D. D. Hickstein, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn and N. Toshima, “Enhanced multiple-scattering and intra-half-cycle interferences in the photoelectron angular distributions of atoms ionized in mid-infrared laser fields”, *Phys. Rev. A* **88**, 013410_1-5 (2013)
8. X. W. Wang, M. Chini, Y. Cheng, Y. Wu, X. M. Tong, and Z. H. Chang, “Subcycle laser control and quantum interferences in attosecond photoabsorption of neon”, *Phys. Rev. A* **87**, 063413_1-4 (2013)
9. M. G. Pullen, W. C. Wallace, D. E. Laban A. J. Palmer, G. F. Hanne, A. N. Grum-Grzhimailo, K. Bartschat, I. Ivanov, A. Kheifets D. Wells, H. M. Quiney, X. M. Tong, I. V. Litvinyuk, R. T. Sang, D. Kielpinski, “Measurement of laser intensities approaching 10^{15} W/cm² with an accuracy of 1%”, *Phys. Rev. A* **87**, 053411_1-6 (2013)
10. Nobuya Maeshima, Kohei Yamada, and Ken-ichi Hino, “Laser-Controlled Exciton Fano-Resonance in Semiconductor Superlattices”, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 435801_1-6 (2013)
11. Hikaru Takenaka, Nobuya Maeshima and Ken-ichi Hino, “Spin and Orbital Correlations in Photoexcited States of Multi-Orbital Hubbard Models”, *JPS Conf. Proc.* , 017026 (2014)

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. K. Yabana, “Multiscale description for strong electromagnetic fields in solids”, Gordin Research Conference on TDDFT, Univ. New England, Biddeford, ME, Aug. 11-16, 2013.
2. K. Yabana, “Light-matter interactions in time-dependent density functional theory”, *Advances in time-dependent methods for quantum many-body systems*, ECT*, Trento, Italy, Oct. 14-18, 2013.
3. K. Yabana, “First-principles description of strong electromagnetic fields in solids”, Invited talk at focus session: Computer Simulation of Interaction of Electromagnetic fields and Nanostructures, APS Meeting 2014, Colorado Convention Center, Denver, USA, Mar. 3-7, 2014.
4. K. Yabana, “Maxwell + TDDFT multiscale simulation for strong electromagnetic fields in solids”, Quantum Dynamics Research Meeting, Vanderbilt University, Nashville, USA, Mar. 10-12, 2014.

B) 一般講演

1. Yuya Nemoto, Ken-ichi Hino, Nobuya Maeshima, “Quasienergy resonance in a dynamic Wannier-Stark ladder”, APS March Meeting 2014 (March 3 - 7, 2014, Denver, U.S.A.)
2. Ken-ichi Hino, Fumitaka Ohno, Yuya Nemoto, Nobuya Maeshima, “Collapse of Fractal Structure in a Dynamic Fractional Stark Ladder Driven by an Intense THz Laser”, APS March Meeting 2014 (March 3 - 7, 2014, Denver, U.S.A.)
3. Yohei Watanabe, Yuya Nemoto, Ken-ichi Hino, Nobuya Maeshima, “Semiclassical Theory of

Coherent Phonon Generation Accompanying Transient Fano Resonance in Semiconductors”, APS March Meeting 2014 (March 3 - 7, 2014, Denver, U.S.A.)

7. 国内学会・研究会発表

A)招待講演

1. 矢花一浩, “高強度パルス光と物質の相互作用に対する第一原理計算—フェムト秒時間スケールの電子ダイナミクス・シミュレーション”, 物性科学領域横断研究会、東京大学、2013年12月1-2日

B)その他の発表

1. 矢花一浩, “極限的パルス光と結晶の相互作用を記述する第一原理計算”, 新学術領域「コンピュータティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス」平成 25 年度第一回研究会、東大武田先端知ビル、2013年7月8-9日
2. 矢花一浩, “電子ダイナミクス計算と巨視的電磁気学”, 第3回戦略プログラム分野2×分野5異分野交流研究会「量子多体系のダイナミクス計算—原子核から物質科学まで—」、分子科学研究所、2013年11月13-14日
3. 佐藤 駿丞、李畊旻、篠原康、乙部智仁、矢花一浩, “レーザー加工現象における初期過程の第一原理計算”, 日本物理学会 第69回年次大会、東海大学 2014年3月27日-30日
4. Shunsuke A. Sato, “Theoretical study on optical properties of dielectrics near optical break-down”, 第14回光量子科学シンポジウム, 日本原子力研究開発機構, 関西光科学研究所 2013年11月14日-15日
5. 佐藤 駿丞、篠原康、谷口億宇、矢花一浩, “様々な密度汎関数を用いた固体中の電子ダイナミクス計算”, 日本物理学会 2013年秋季大会、徳島大学 2013年9月25日-28日
6. 矢花一浩, “物質中を伝播する高強度パルス光の理論的記述”, 東工大量子物理学ナノサイエンス第75回セミナー、2013年7月10日
7. K. Yabana, “First-principles theory of a strong electromagnetic field in solids”, Seminar at CNR S3, Modena, Italy, Oct. 21, 2013.
8. K. Yabana, “First-principles theory of a strong electromagnetic field in solids”, Seminar at Vanderbilt University, Nashville, USA, Dec. 9, 2013.
9. K. Yabana, “First-principles theory of a strong electromagnetic field in solids”, Seminar at Molecular Foundry, LBNL, USA, Dec. 12, 2013.
10. 前島展也、竹中光、日野健一、"2軌道縮退ハバード模型における光励起状態のスピン・軌道相関 II"、日本物理学会 2013 秋季大会、徳島大学常三島キャンパス、2013年9月25-28日
11. 根本裕也、日野健一、渡辺陽平、前島展也、"過渡的ファノ共鳴を伴ったコヒーレント

フォノンにおける解析的表式の導出"、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日

12. 井本文裕, 前島展也, 日野健一, "2 軌道縮退ハバード模型における光誘起ダイナミクス"、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日

13. 大野文隆, 根本裕也, 日野健一, 前島展也, "分数型動的ワニエ-シュタルク階段におけるフラクタル構造と多チャンネル効果"、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日

8. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 平成 25 年より 2 年間、日本学術振興会二国間交流事業オープンパートナーシップ共同研究 (代表・矢花) のもと、米国バンダービルト大学及びワシントン大学と、超高速電子ダイナミクスに対する第一原理計算アプローチに関する共同研究を推進している。
2. 矢花は光と物質の相互作用に関する第一原理計算に関し、独マックスプランク量子光学研究所のアト秒科学実験グループとの共同研究を推進している。
3. 矢花、及び Tong は、ウィーン工科大学の理論グループと、固体中における光と物質の相互作用に関して共同研究を推進している。
4. 矢花は、韓国光科学研究所のグループと、固体中における光と物質の相互作用に関して共同研究を推進している。
5. 矢花は、宇宙・原子核研究部門原子核分野において、フェルミオン多粒子系の量子ダイナミクスという観点から関連する研究を行っている。その活動については、宇宙・原子核研究部門に記述している。
6. 矢花は、本センターの朴教授のサポートのもと、分子科学研究所の信定准教授のグループが中心となって進めている電子ダイナミクスの大規模計算に関するコード開発を進めている。本年度、計算法に関する論文(M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku, J. Comp. Phys. 265, 145 (2014).)が出版された。

9. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. HPCI 戦略プログラム分野 2 と分野 5 の第 3 回交流研究会「量子多体系のダイナミクス計算－原子核から物質科学まで－」(2013 年 11 月 13~14 日、分子科学研究所) を主催者の一人として開催した (矢花)。

10. 管理・運営

1. 計算科学研究センター共同研究担当主幹を担当 (矢花)
2. 計算科学研究センター共同利用委員会・一般利用 WG (前島)

11. 社会貢献・国際貢献

12. その他

III-2. 電荷-スピン-格子結合系分野

1. メンバー

准教授 小泉 裕康
学生 大学院生 3名、学類生 2名

2. 概要

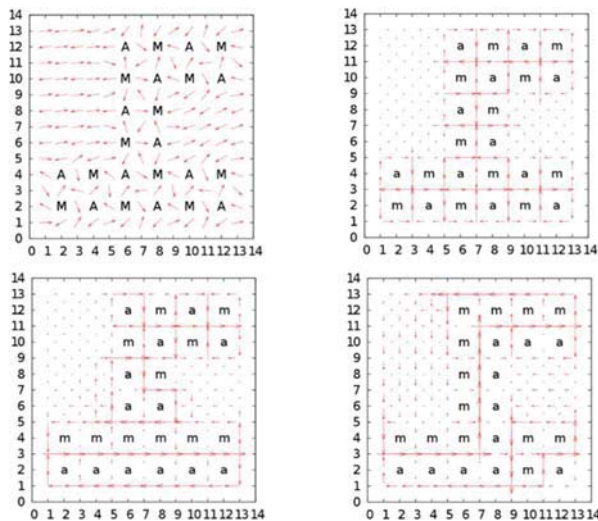
銅酸化物高温超伝導体などの電子の電荷の自由度が電子のスピン自由度及び格子の自由度と密接に結びついた物質についての量子力学的基礎理論およびその応用についての研究を行っている。特に、我々は、銅酸化物にスピン渦誘起ループ電流の存在を予言しており、スピン渦誘起ループ電流に基づく超伝導理論および、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピュータの実現を目指した理論研究を行っている。

3. 研究成果

【1】 銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構の解明に向けた研究: スピン渦誘起ループ電流の計算法の開発。

銅酸化物高温超伝導体の母物質は反強磁性絶縁体であり、そこにホールをドーピングすることにより、超伝導が実現する。ホールは室温では、動き回り電流担体となっているが、低温では擬ヤーン・テラー効果による格子変形によりスモールポーラロン化し、ほとんど動かなくなると考えられる。このことは、ホール係数が低温で正から負に変わること、Cu-O 結合長に変化が現れることなどの実験結果により示されている。銅酸化物の高温超伝導はこのような反強磁性体母物質にスモールポーラロン化したホールが導入された状況で実現している。ホールは動かないので、電流は、母物質で磁性を担っていた伝導電子が担うことになる。母物質同様、反強磁性が保たれていると絶縁体となるが、伝導電子によりスピン渦が形成されると我々が発見した新しい電流生成機構により、電気伝導が可能となる。これは、スピン渦誘起ループ電流による電流生成である。スモールポーラロン化したホールを媒介とした反強磁性的超交換相互作用が、ホールを挟んだ銅原子上の電子間に働き、スピン渦が安定化されると考えられる。スピン渦の存在により、伝導電子はスピンの方向を変化させながら移動することになるが、このとき波動関数の一価性の要請より全体運動が誘起される。我々は、この誘起された全体運動を持つ量子状態に対する波動関数を求める方法を開発した (H. Koizumi, R. Hidekata, A. Okazaki, M. Tachiki, J. Supercond. Nov. Magn. 27, 121 (2014); H. Koizumi, A. Okazaki, M. Abou Ghantous, M. Tachiki, J. Supercond. Nov. Magn. DOI: 10.1007/s10948-014-2626-9)。この波動関数は、試料の端から流入し、他の端から

流出する境界条件で解くこともでき、カメリン-オネスが 1911 年に発見した電位差なしで電流が流れる状態をシミュレートすることもできる。以下の計算例を示す。



図：新たに開発された計算方法で計算したスピン渦誘起ループ電流。

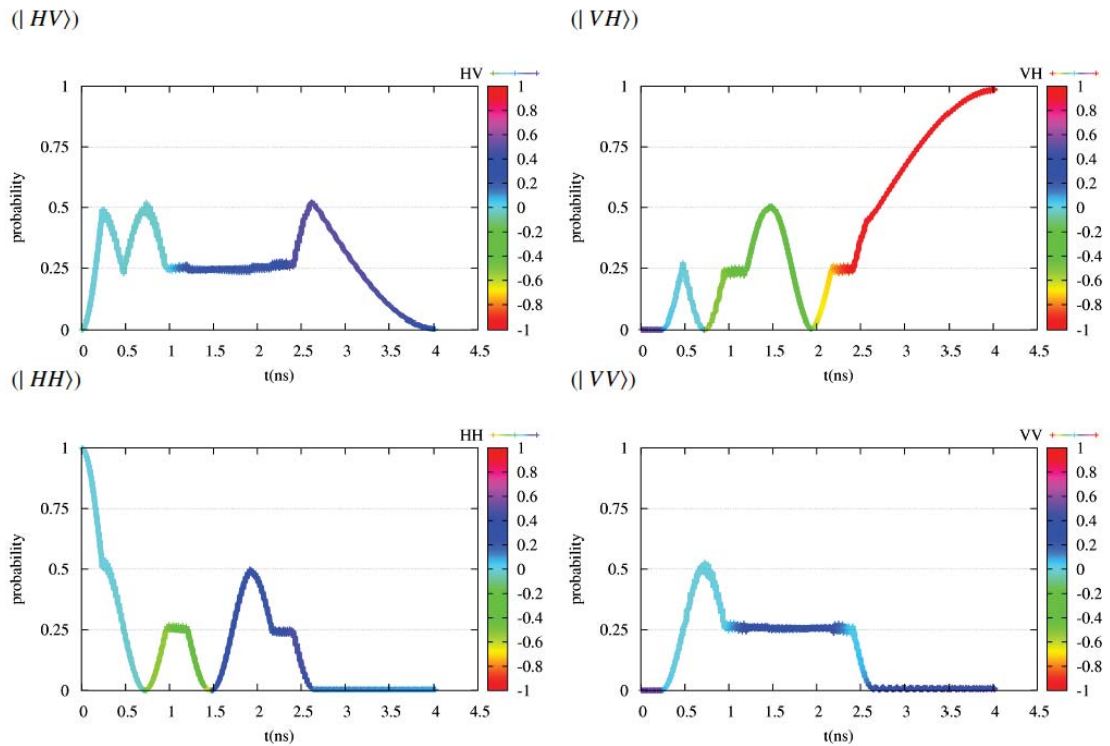
左上：反強磁性の中にスモールポーランを中心にスピン渦が存在するスピン配置図。A が左回りのスピン渦の中心、M が右回りのスピン渦に中心を表す。

右上：基底状態のスピン渦誘起ループ電流。a が左回りのループ電流の中心、m が右回りのループ電流の中心を表す。電流は局在している。

左下：(1,3)から(13,3)に電流が流れているスピン渦誘起ループ電流を持つ状態。右下：(1,3)から(7,3)よ(7,11)をへて(13,11)に電流が流れているスピン渦誘起ループ電流を持つ状態。

【2】 銅酸化物高温超伝導体を使った量子コンピュータ実現に向けた研究

我々がその存在を予言しているスピン渦誘起ループ電流は、右回りと左回りの自由度があり、それを量子ビットとして使うことが可能である。スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピュータ実現に向けたシミュレーションを行った。2量子ビット系でグローバーの検索アルゴリズムを行った結果の例を下に示す。 10^5 V/m の電場を持つレーザー照射により、4ナノ秒で検索が終了するという結果が得られた。これは、ディコヒーレンス時間が十分長くでき且つ多数の量子ビットを扱うことができれば実用に耐える量子コンピュータが可能であることを示唆している。



図：スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした2量子ビット系によるグローバーの検索アルゴリズムのシミュレーション。初期状態は左下の状態で、0.5 ナノ秒後に4つの状態が同等の確率で存在する状態が準備される。そして、右上の状態が4 ナノ秒に検索されている。色は、量子状態の位相を表す。

4. 教育

修士論文

鈴木紀之 銅酸化物超伝導体におけるスピン渦の生成、移動、秩序形成に関する理論研究

若浦光 スピン渦誘起ループ電流を利用した量子コンピューター

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. H. Koizumi, R. Hidekata, A. Okazaki, M. Tachiki, “Persistent current generation by the spin-vortex formation in cuprate with the single-valuedness constraint on the conduction electron wave functions”, J. Supercond. Nov. Magn. **27**, 121 (2014)

(2) 国際会議発表

B) 一般講演

1. H. Koizumi, A. Okazaki, M. Tachiki, “Spin-vortex-induced loop currents in high T_c cuprate superconductors”, First International Symposium on Topological quantum technology, Jan 27-30, 2014, Tokyo Japan
2. H. Wakaura, A. Okazaki, H. Koizumi, A. “Simulation of Grover’s search algorithm using the spin-vortex-induced loop currents in the cuprate”, First International Symposium on Topological quantum technology, Jan 27-30, 2014, Tokyo Japan

(3) 国内学会・研究会発表

B) その他の発表

1. 岡崎智、小泉裕康、秀方遼、”外部からの電流のやりとりがあるスピントル誘起ループ電流の安定性”、日本物理学会 2013 秋季大会、徳島大学常三島キャンパス、2013 年 9 月 25-28 日
2. 小泉裕康、立木昌、”銅酸化物超伝導体の超伝導機構”、日本物理学会 2013 秋季大会、徳島大学常三島キャンパス、2013 年 9 月 25-28 日
3. 若浦光、小泉裕康、”スピントル誘起ループ電流利用した量子ビット”、日本物理学会 2013 秋季大会、徳島大学常三島キャンパス、2013 年 9 月 25-28 日
4. 小泉裕康、立木昌、”ディラックモノポール様特異点と銅酸化物超伝導”、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日
5. 若浦光、小泉裕康、”スピントル誘起ループ電流を量子ビットとした量子計算”、日本物理学会第 69 回年次大会、東海大学湘南キャンパス、2014 年 3 月 27-30 日

(4) 著書、解説記事等

1. 小泉裕康、”ベリー位相入門：ディラックモノポール様特異点の出現から、スピントル誘起ループ電流の生成まで”、応用物理 83 巻、(222-227) 2014.

7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

9. 管理・運営

10. 社会貢献・国際貢献

11. その他