相関設計で挑む量子創発

News Letter Vol. 1

2025年7月 発行

目次

「相関設計で挑む量子創発」発足にあたって	1
計画班メンバーリスト	2
A01 スピン相関が拓く創発物性	4
A02 班の紹介:量子金属における創発現象の相関設計	5
A03 班 エキゾチック超伝導体の相関設計	6
B01 トポロジカル物性の設計と創成	7
B02 非平衡・非線形が導く創発物性	8
B03 データ駆動と計算科学で加速する物質設計	9
キックオフミーティング報告	10
研究会報告 "Kyoto International Workshop on Exotic Superconductors"	12
相関設計のホームページの概要	13
受賞報告・人事異動・アウトリーチ・プレスリリース	14
開催報告	14
今後の予定・その他お知らせ	15
編集後記	17



令和7年度~令和11年度 相関設計で挑む量子創発

https://cds.phys.s.u-tokyo.ac.jp/

「相関設計で挑む量子創発」発足にあたって

領域代表 有田亮太郎

令和7年度科学研究費助成事業「学術変革領域研究(A)」において、「相関設計で挑む量子創発」が採択されました。まず、本研究課題の申請に際しまして、計画研究班のメンバーの先生方はもとより、領域外の多くの先生方からも多大なるご支援とご助力を賜りましたこと、心より御礼申し上げます。



図1:「相関設計で挑む量子創発」のロゴ。

物質には、電荷・スピン・軌道・格子と

いった多様な量子力学的自由度が存在し、これらの相関効果によって、我々の予想を超える機能や物性、すなわち量子創発現象が現れます。これらの自由度の絡み合いの可能性は実に広大であり、セレンディピティに頼るアプローチではその全容を探究することは困難です。本領域では、現象論や理論模型の提案から、第一原理計算による物質設計、さらに物質合成・測定までを一気通貫に行う「相関設計学」の構築を目指します。

この枠組みの中で、高温・強磁場・擾乱に対しても頑健に量子物性を示す「頑健物質」、超巨大あるいは超高速といった特異な応答を示す「特異応答物質」、さらには新たな法則や原理、現象の発見の揺籃となりうる「揺籃物質」の開発を進めます。また、超伝導転移温度など物性値において記録を塗り替えるような成果や、相関設計の対象領域を拡張する取り組みも展望しています。あわせて、次世代への資産となる汎用的な計算コードやデータベースの整備にも力を注ぐ所存です。

本領域では、量子創発現象をめぐる中心的な研究対象・概念として、「スピン相関」「量子金属」「エキゾチック超伝導」「トポロジー」「非平衡・非線形」「データ駆動」の6つのキーワードを設定しました。班構成としては、物質の特徴に関わるキーワードに着目した A01~A03 の3 班、物質に依らない視点に基づく B01・B02 の2 班、さらに数値計算基盤やデータ駆動科学の応用を担う B03 班という、二次元的な構成としています。また、理論と実験の有機的な連携を重視し、両者を分離するのではなく、同一班内に理論研究者と実験研究者が共存する編成としました。理論・実験の共同研究で豊富な実績を有する計30名の強力な研究者にご参画いただいております。さらに、周辺分野への波及効果を高めるべく、公募班との密接な連携も期待しています。こうした班内・班間の連携を通じて、「相関設計学」という統一的な学術基盤の確立を目指してまいります。

領域の発足後は、ウェブページの開設、キックオフミーティングの開催に加え、3件の国際会議の開催が計画され、領域のロゴも選定されました。ロゴ選定にあたっては生成 AI を活用し、「創発現象」というキーワードから、平凡な要素が集まって意外性のある模様を形作る点描画をイメージした複数案を作成しました。その中から、大空へ飛び立つ前に一歩立ち止まり、思索するシマエナガの姿(図 1)が、本領域の現在と未来を最もよく象徴するものとして採用されました。

従来、量子創発現象の設計には、アイデアの提唱から物質の合成、現象の測定まで 10 年以上を要することが一般的でした。私たちは、相関設計学の構築により、この時間スケールを大幅に短縮し、物性科学に革新をもたらすことを目指しています。

関係各位におかれましては、今後ともご指導、ご鞭撻を賜りますよう、何卒よろしくお願い申し上げます。

計画班メンバーリスト

A01 班 スピン相関が拓く創発物性

磁性体を舞台に研究を進める。フラストレート磁性体を中心とした新しい量子相の開拓、トポロジカル磁気構造における電子相関やスピンモアレエンジニアリング、交替磁性体 (Altermagnet) や多極子秩序系における交差相関応答などの新しい物性現象の開拓、非相反・非平衡・非線形現象の開拓、ドメイン効果の解明に取り組む。

木村 剛	東大工	単結晶合成・電気磁気測定・光学測定
求 幸年	東大工	物性理論・モデル計算・物質設計
N. Shannon	OIST	物性理論・理論的概念創出・モデル計算
大串 研也	東北大理	物質開発・高圧合成・輸送測定

A02 班 量子金属における創発現象の相関設計

新規量子金属に関する研究を行う。カゴメ格子超伝導体、多層グラフェン、銅系・鉄系高温超伝導体といった物質における新しい量子相の探索に取り組む。特に、奇パリティ秩序、強相関トポロジカル相転移、電子対密度波、準結晶超伝導、非相反応答に着目しつつ、NVセンターを用いた新しい実験手法による量子相の同定および観測理論の確立にも挑戦する。

田財 里奈	京大基研	物性理論、量子相転移
遠山 貴巳	東理大	物性理論、強相関電子系
芝内 孝禎	東大新領域	磁気トルク測定・マイクロ波測定
小林 研介	東大理	量子スピン顕微鏡・量子センサ
紺谷 浩	名大理	物性理論、新規超伝導
高橋 英史	阪大基礎工	新物質開発、高圧合成

A03 班 エキゾチック超伝導体の相関設計

エキゾチック超伝導体の制御法とプローブ法の確立、新機能の探索を行う。特にスピン三 重項超伝導体やパリティが欠如した超伝導体、二次元へテロ構造を対象に、超伝導理論や強 相関系理論、物質開発、極限環境測定、スピントロニクスの専門家が総力を結集する。

柳瀬 陽一	京大理	超伝導理論
星野 晋太郎	千葉大理	強相関理論
花栗 哲郎	理研	トンネル分光
青木 大	東北大金研	極限環境測定
成田 秀樹	名大 RCMS	ナノ物質作製

B01 班 トポロジカル物性の設計と創成

物質中の相関を利用して新規なトポロジカル物質や状態を設計・探索する。具体的には磁性ワイル半金属の探索およびスピン素子の提案・設計、非従来型超伝導体の新しい対称性同定法の確立と新機能の解明、開放系トポロジカル相の実験的検出と新機能の探索、2次元物質接合系における創発量子物性の開拓に取り組む。

野村 健太郎	九大理	物質設計
中辻 知	東大理	バルク実験
佐藤 昌利	京大基研	概念創出
塚崎 敦	東大工	薄膜実験
水島 健	阪大基礎工	モデル計算
近藤 猛	東大物性研	スペクトロスコピー

B02 班 非平衡・非線形が導く創発物性

平衡状態では見られなかった新しい非平衡量子相を探索する。特に、ピコ秒以下の超高速な時間スケールにおいて、新しい電子状態の理論的な提案と実験的な観測を目指す。そのために、時間・空間・元素分解を可能とする、テラヘルツから X 線の広い周波数帯における新しい測定法を開発する。

和達 大樹	兵県大理	軟X線・レーザー・高次高調波発生
辻 直人	東大理	物性理論・非平衡動的平均場・テンソルトレイン
佐藤 正寛	千葉大理	物性理論・量子マスター方程式・フロッケ理論
石坂 香子	東大工	時空間分解・光電子分光・電子顕微鏡
島野 亮	東大理	超伝導・テラヘルツ分光・ヒッグスモード

B03 班 データ駆動と計算科学で加速する物質設計

理論駆動の物質開発の基礎となる方法論開発、データベース構築を行う。効率的な強相関第一原理計算の方法論開発、開発したコードの積極的な公開にも取り組む。

只野 央将	NIMS	非調和フォノン理論・データ駆動物質設計
東後 篤史	NIMS	自動計算技術・計算ソフトウェア開発
有田 亮太郎	東大理	磁気・スピン空間群・超伝導状態の理論計算
黒木 和彦	阪大理	動的平均場理論·非従来型超伝導

A01 スピン相関が拓く創発物性

A01 班 木村 剛

本計画研究班は、理論家 2名[求幸年(東大工)、SHANNON, Nic(OIST)]と実験家 2名[木村剛 (東大工)、大串研也(東北大理)]から構成され、理論による概念創出・モデル計算・物質設計から、実験による物質合成・精密測定を密接な連携のもと行うことにより、量子物質中の電子が持つスピン自由度が関与する相関がもたらす新しい創発物性の開拓を図ります。より具体的には、以下の研究項目に取り組みます。

- ①フラストレート磁性体を中心とした量子スピン液体やスピン液晶など新規量子相の開拓
- ②トポロジカル磁気構造における電子相関や外場を用いたスピンモアレエンジニアリング
- ③磁気多極子や磁気・電気トロイダルといった多彩な多極子がもたらす新規物性の開拓
- ④対称性と電子相関に基づいたピエゾ磁気効果をはじめとする新規交差相関応答の開拓
- ⑤非線形応答、非平衡現象、及び散逸による新規量子現象の開拓
- ⑥開拓した物性現象に対するドメイン及び欠陥や乱れの効果の解明

これらの研究項目に対して、それぞれの班員が以下の担当により研究を遂行します。

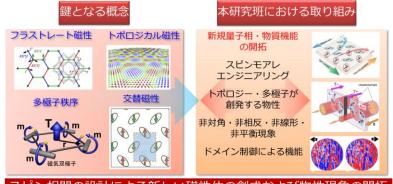
<u>木村</u>:磁気単極子、磁気トロイダル、電気トロイダルといった多様な多極子秩序に起因する新規物性発現の舞台となる物質開発を担当します。さらに、求、Shannon らとの協力により、それらの秩序状態の観測を可能とする新規測定手法を開発し、制御を可能とする手法を明らかにし、実証します。

<u>求</u>:第一原理計算、現象論及び微視的なモデル構築、解析計算、量子多体計算などを相補的に用い、量子スピン液体・液晶、トポロジカル磁気構造、電気磁気効果、交替磁性に関する新しい理論提案を行います。木村、大串らとの連携により、理論提案の実装を進め、実験からのフィードバックを基に理論をさらに先鋭化するサイクルを班内全体で活性化します。

Shannon:量子スピン系への量子情報アプローチの応用に取り組みます。特に、実験的な直接観測が難しい量子エンタングルメントに関して、観測手法の理論提案を行います。さらには、量子スピン液体と格子ゲージ理論の類似性から、重力といった基本的な力との関係を解明し、木村、大串らと連携し、新規量子現象の開拓を行います。

大串:求、Shannon らと連携し、キタエフスピン液体周辺の物質開発と交替磁性体の物性開拓に取り組みます。酸化物・ハライド・カルコゲナイドなどの多彩な物質群を対象に据え、高圧合成法・ソフト化学法など多様な手法を駆使した新物質開発を進めます。交替磁性体における反強磁性ドメインの制御・可視化を進め、ピエゾ磁気効果などの機能を高度化します。

以上の計画研究と相補的・相乗的な研究を展開できる研究者を公募研究で加え、さらに他班 との連携も行うことにより、スピン相関が拓く創発物性の実現を図ります。



スピン相関の設計による新しい磁性体の創成および物性現象の開拓

A02班の紹介:量子金属における創発現象の相関設計

A02 班 田財 里奈

学変―相関設計が始動しました。5月の東大でのキックオフでは、面白そうな研究テーマが多くあり、5年間で是非解明したいと思いました。記念すべき第1号の本記事は、A02 班の紹介です。A02 班の目標は「金属を舞台とする新規量子相の相関設計」です。金属が示す量子相には、多くの未解明問題が存在すると同時に、そのバリエーションは年々増えています。A02 班では、こんな金属の可能性を最大限に引き出すべく、第一原理や多体計算と、物質合成や観測手法の開発を互いにフィードバックして行い、誰も見たことがない量子相を発見したいです。班員は、実験・理論が半々の6名で、以下に各々の研究を紹介します。

新規量子相の機構・応答の理論的解明:田財里奈(京都大)

新規量子相の理論構築を担いたいと思います。これまで、幾何学フラストレーションを有するカゴメ金属の新規量子相の可能性を探ってきました。今後も、日夜進化を続ける実験からのインプットを大切に、金属電子理論を構築したいです。

高圧合成による量子相の開拓: 高橋英史(大阪大)

10 GPa 級高圧合成と第一原理エンタルピー計算を統合し、新規量子相を設計・創製します。 特に、磁性・結晶対称性・バンドトポロジーなど複数自由度が相互作用して生み出される超 伝導や交差相関応答といった現象を体系的に探索します。計算と実験のフィードバックによ り物質候補を網羅的に開拓し、単結晶の高品質化を図り、応答の巨大化と解明を目指します。 量子スピン顕微鏡による量子相の観測:小林研介(東京大)

新規量子相を研究する手法として量子スピン顕微鏡を開発します。具体的にはダイヤモンド結晶中の窒素空孔欠陥(NV中心)や六方晶窒化ホウ素(hBN)結晶中におけるホウ素空孔欠陥などの量子センサを用いて測定対象物質からの漏れ磁場をイメージングします。本手法は、静磁場だけでなく、磁気ゆらぎ・温度・圧力のイメージングも可能であり、今後の物性物理においてユニークなプローブとなる可能性を持ちます。

ピエゾ素子や高周波ホール効果測定などによる量子相の観測 : 芝内孝禎(東京大)

新規量子相における対称性の破れを観測するために、様々な手法を駆使します。例えば、回転対称性の破れについては、微小試料において回転磁場下での磁気トルクや比熱の精密測定や、ピエゾ素子を用いた一軸歪み下での物性測定を行います。時間反転対称性の破れについては、円偏波マイクロ波を使用した高周波ホール効果測定など、新たな手法を用います。

カゴメ・N i 系超伝導の理論: 紺谷浩(名古屋大)

フラストレート構造を有するカゴメ格子金属における多重量子相転移や、Ni 酸化物における新規高温超伝導現象に興味をもっています。最近目覚ましい発展を遂げた魅力的な分野であり、実験家や理論家の皆様と協力して、ユニークで面白い研究を進めたいと思います。

カゴメ・準結晶格子構造中の多体電子の理論:遠山貴巳(東京理科大)

カゴメ金属の量子相や、強相関電子系のダイナミクスを調べるため、独自開発している 2 次元密度行列繰り込み群法を用いて「富岳」などのスーパーコンピュータを活用しながら研究します。また、ペンローズタイルのような二次元準結晶の超伝導に関する研究も行っており、準結晶特有の電子状態が生み出す特異なトポロジカル超伝導状態の設計に取り組みます。

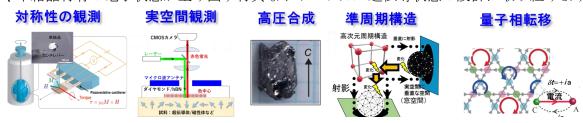


図:A02 班の研究の特色。金属の新規量子相を発見するため、新しい観測方法(左 2 つ)と新物質の 開拓(中央)、そして新規量子相の多体電子論の構築(右2つ)を互いに協力して行います。

A03 班 エキゾチック超伝導体の相関設計

A03 班 栁瀬陽一

A03 エキゾチック超伝導班のメンバーと専門分野、本研究課題での役割は以下の通りです。

● 栁瀬陽一(京都大学 理学研究科)

物性理論·超伝導理論

● 星野晋太郎(千葉大学 理学研究院)

物性理論・強相関系理論

● 花栗哲郎(理化学研究所 CEMS)

低温物性実験・トンネル分光

● 青木大(東北大学 金属材料研究所)

物質開発 · 極限環境測定

● 成田秀樹(名古屋大学 物質科学国際研究センター)ナノ物質作製・スピントロニクス





メンバー写真

左:成田

右上:星野

右下: 左から青木、栁瀬、花栗

若手?を推してみました。

本研究課題では、エキゾチック超伝導体の基礎概念を確立し、その理解に基づいて新奇な 超伝導体を創り、計測し、制御します。同時に特異応答を発見して新機能性を開拓します。 その目標の実現に向けて、以下の研究項目に取り組みます。

項目1:3次元エキゾチック超伝導 (柳瀬、星野、青木、花栗)

項目2:1次元、2次元エキゾチック超伝導 (柳瀬、成田、花栗)

項目3:超伝導体の新機能性開拓 (栁瀬、星野、青木、成田)

項目4:トポロジカル超伝導 (栁瀬、青木、成田、花栗)

<u>項目5:超伝導体のアクティブ物性制御 (栁瀬、星野、青木、成田)</u> 項目6:量子幾何学、相対論的量子力学を用いた新理論 (栁瀬、星野)

例として、強相関電子系や二次元電子系でしばしば見られる、内部自由度があるエキゾチック超伝導体を解明し、新現象を探索します。超伝導体における新しい内部自由度の設計と実証にも取り組みます。光や電流などを用いた超伝導体の動的制御法を確立し、未知の超伝導相を実現することも重要な目標です。これらと並行して、超伝導ダイオード効果をはじめとする非相反・非線形な特異応答を開拓します。また、量子幾何学や相対論的量子力学を用いた理論により物質設計の新原理を導きます。3次元超伝導体の研究と1,2次元人工量子系の研究を統合し、理論と実験の協力の下でチーム型研究を実施することにより、これらの目標の達成を目指します。もちろん、研究内容は上で述べたものに限定されるものではなく、研究を進めていく中で新たな研究項目が次々と立ち上がっていくことを理想とします。

上の研究項目では、班内での仮の研究担当者を示しました。しかし、他の計画班やこれから加わる公募班の方々との連携が充実した研究への実質的な道であることは疑いありません。研究協力を歓迎しますので、ご検討いただけますと有難いです。もちろん、領域外の方々とも積極的に協同して研究課題を進めていく予定です。

なにはともあれ、今後5年間皆様にお世話になります。どうぞよろしくお願いいたします。 この5年間がその先の未来につながっていくことを期待しつつ、研究を楽しく進めて参りた いと思います。

B01 トポロジカル物性の設計と創成

B01 班 野村健太郎

トポロジカル物質の概念は、幾何学(トポロジー)と物質科学という異なる学問の交差点から誕生しました。トポロジーとは、連続的な変形に対して不変な構造を記述する数学的理論です。トポロジーによる物質設計の思想は、電子や原子の複雑な相互作用により生じる物性を、トポロジー的に安定な構造に注目することで、理論的に制御可能な自由度の範囲に収める考え方といえます。実際、このアイデアに基づき、トポロジカル絶縁体やワイル半金属など、多くのトポロジカル物質が理論的に予言され、実験的に検証されてきました。B01 班は物質中のバンドトポロジーと相互作用の協奏がもたらす新しいタイプの磁性や超伝導、非平衡現象の創発の可能性を追求します。また、異種の物質を組み合わせることや、レーザー電場などの外場によって非平衡状態にすることで、元の物質にはない新しい性質を設計することも可能です。このように、トポロジーと相互作用を協奏的に活用することで、新現象を設計(相関設計)することを目指しています。B01 班「トポロジカル物性の設計と創成」の計画班は以下の6名から構成されます。

- 野村健太郎(九州大学・理学研究院・物質設計)
- 佐藤昌利(京都大学・基礎物理学研究所・概念提唱)
- ・水島健(大阪大学・基礎工学研究科・モデル計算)
- ・中辻知(東京大学・理学系研究科・バルク実験)
- ・塚﨑敦 (東京大学・工学系研究科・薄膜実験)
- ・近藤猛(東京大学・物性研究所・スペクトロスコピー)

B01 班は、学術フロンティアの創成と次世代スピン素子やトポロジカル量子計算への応用を視野に入れ、以下の課題に取り組みます。(1) スピン磁化がゼロの新規磁性

体(反強磁性体,補償 フェリ磁性体, 交替磁 性体)のバンドトポロ ジーがもたらす低損 失巨大スピン応答の 研究。(2)物質中の散逸 やエネルギー交換の 影響をトポロジーに より積極的に制御す ることで得られるト ポロジカル非平衡現 象の解明。(3)トポロジ カル量子計算の基盤 要素となる非可換準 粒子を生成する物理 系の理論設計と実証

本研究班における 鍵となる理論 他研究班との連携 B01 トポロジカル物性 取り組み トポロジー 異常応答物質 量子幾何 A01班 の相関設計 相 対称性と応答 磁気テクスチャーと 理論提案とバルク・薄膜・スペクトロスコピーによる実現 トポロジカル物性の協奏 異常応答 設 量子開放系 交差相関応答 計 スピン-雷荷結合 の相関設計 異常応答物質の実現 AO2班 バルクフェルミアークの観測 固体例外素子の設計と実証 モアレ系における強相関 量子開放系 トポロジカル物性の解明 磁性体のマグノンに 創 非エルミート物理の実装 非平衡系の量子論 発 強相関物質 量 の相関設計 AO3班 強相関効果 子 トポロジカル応答による 非可換準粒子の創成 強相関トポロジカル相 非可換準粒子 トポロジカル量子ビット の提案 超伝導発現機構の解明 非可換準粒子の解明

図1:B01 班における取り組み

実験。これらの現象の背後にある数理構造の解析を基軸に従来の理論体系では予測できなかった**創発量子現象**の発見・検証や、従来の実験では実現しえなかった**エキゾチック頑健物質**の設計・創成を目指します。

野村健太郎(九州大学・理学研究院・教授)

研究室 HP: https://sites.google.com/view/mbp-phys-kyushu-u/hom

B02 非平衡・非線形が導く創発物性

B02 班 和達 大樹

21世紀に入り、超短パルスレーザー照射による超高速消磁や、絶縁体金属転移などの興味深い現象が報告され、平衡から遠く離れた系が注目を集めています。これらの系に対し、年々向上する計算機パワーや機械学習・量子計算の手法からの解析が期待されますが、非平衡現象を定量的に予言し実際の物質で実現するためには、理論手法の発展と新しい実験手法の開拓が必要です。B02 班の計画班 5 名は、下記のように非平衡系の相関設計学を発展させます。

○和達 大樹(兵庫県立大学・大学院理学研究科) (B02 班代表)

超短パルスレーザーからの高次高調波発生により軟 X 線を発生させ、磁気光学効果の測定による磁性体のスピンダイナミクス計測を目指します。この手法でナノメートルの空間分解能とフェムト秒の時間分解能の下で、元素別にスピンダイナミクス観測が得られます。この超高速な励起後のダイナミクスを時間・空間・元素分解して観測する新しい測定手法の実現により、超短パルスレーザー照射で身近な元素のみを用いた巨大磁化反転や磁気スキルミオン形成などを探索します。ラマン散乱による格子振動・磁気励起の測定なども行います。

○ 計 直人 (東京大学・大学院理学系研究科)

非平衡強相関系の解析手法を発展させ、それをもとに非平衡・非線形領域における新奇物性・新奇量子相の探索に取り組みます。テンソルトレインの手法を用いた負符号問題を回避する量子不純物ソルバーの開発、および非平衡動的平均場理論への応用を目指します。ターゲットとなる物理現象としては、超伝導非線形ホール効果、強相関超伝導体における集団励起モード、光誘起超伝導、超伝導量子渦のダイナミクス、光渦を含めた空間的に非一様な光電場による応答などにアプローチします。

○佐藤 正寛 (千葉大学・大学院理学研究院)

まず、非平衡系を記述する汎用性の高い理論を発展させ、相関設計学に貢献したいと考えています。特に「周期駆動散逸系に対するフロッケ理論」「散逸系の時間発展を記述する量子マスター方程式の方法」の発展を目指します。一方、具体的で魅力的な非平衡現象の解析や予言にも注力します。散逸系のフロッケ・エンジニアリング、高次高調波発生、トポロジカル光波による光学応答、光・電磁場・温度勾配などによるスピンテクスチャや準粒子の高速制御・操作、新現象を観測するための実験方法、などに関する理論成果を探求します。

○石坂 香子 (東京大学·大学院工学系研究科)

物質中の多様な自由度が織りなす時空間構造を、nm~sub-mm、ps~μs の広いスケールで観測することを目指し、超高速時間分解透過型電子顕微鏡(UTEM)の開発と応用を進めています。UTEM は、フェムト秒レーザーと電子顕微鏡を融合した装置で、非平衡状態のダイナミクスを高分解能で可視化できます。これまでに音響フォノンや磁気スキルミオンの運動を解明し、現在は相転移の核形成の可視化にも取り組んでいます。今後は、理論や計算と連携した新たな物性の創発に向け、時空間構造の計測と学理構築を両輪に研究を進めます。

○島野 亮 (東京大学・低温科学研究センター)

超伝導体や磁性体、トポロジカル物質を対象に超短光パルスやテラヘルツ波パルスによって励起、駆動された非平衡状態の観測を行い、隠れた量子相の探求や競合・共存秩序相の相関の解明を目指します。光の場の最適設計、時間分解テラヘルツポンププローブ分光、磁気光学測定、中赤外ポンププローブ分光など様々な非線形分光手法を組み合わせて、相関電子系における非平衡状態の生成とダイナミクスの解明を進めます。フロッケ・エンジニアリングも含めた量子多体系の非平衡系理論と比較することで、量子物質ならではの巨大光応答と量子相操作を探求します。

B03 データ駆動と計算科学で加速する物質設計

B03 班 只野 央将

現代の物質科学研究において、計算機シミュレーションは実験や理論に並ぶ重要な研究手段として広く認められています。特に多体問題を有効的な一体問題へ帰着させ、それを近似的に解く密度汎関数理論 (DFT) は広く利用されています。近年では、高圧下で高温超伝導を示す水素化合物が DFT 計算によって予測され、その後の実験でその予測が確認されるなど、計算機シミュレーション主導での物質開発の成功例も報告されつつあります。さらに、計算データ・実験データと機械学習を組み合わせるデータ駆動型の研究が急速に進展しており、これまで人間が見落としていた規則性や特徴量を見出したり、新物質を迅速に探索したりすることが可能になりつつあります。このような流れの中で、「理論モデル」と「実際の物質」をつなげるための新しい第一原理計算手法やデータ駆動手法の基盤構築をおこない、本領域が目指す理論主導の物質設計に貢献することが私たち B03 班のミッションです。

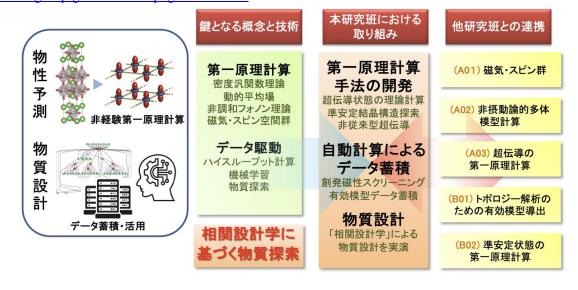
B03 班には 4 名が参画しており、それぞれの専門技術を生かしながら班間や実験グループと有機的に連携して研究計画 (**下図**) を実施します。領域の目標達成に貢献すると同時に、最終的には業界標準となる計算手法や計算ソフトウェアを開発することも目標です。以下に各メンバーの主な研究計画を簡単に紹介します。

<u>只野央将(NIMS)</u>: 外場(温度、電場など)を加えたときの準安定結晶構造を計算する第一原理計算手法を開発し、物性計算に応用します。また、計算データの蓄積とそれを用いた物質設計にも取り組みます。研究室 HP: https://www.nims.go.jp/group/spintheory/ja-jp/

有田亮太郎(東京大学): 磁気空間群やスピン空間群を利用した創発磁性材料のスクリーニングや有効模型データの蓄積、超伝導状態のシミュレーション手法開発などに取り組みます。研究室 HP: https://arita-lab.t.u-tokyo.ac.jp

<u>黒木和彦(大阪大学)</u>: 非従来型超伝導物質を代表とする強相関電子系を記述するための動的平均場理論(DMFT)を高精度化・高効率化します。開発した手法を超伝導物質の転移温度予測へ応用します。研究室 HP: http://ann.phys.sci.osaka-u.ac.jp/index.html

<u>東後篤史(NIMS)</u>: スピン自由度を考慮しながら結晶の対称性を判定するソフトウェア開発と応用をおこないます。また、スーパーセルを用いた汎用的な電子格子相互作用係数の計算手法と自動計算ワークフロー構築にも取り組みます。研究室 HP: https://computational-materials-science-group.github.io/webpage/index.html



キックオフミーティング報告

B02 班 计 直人

学術変革領域研究(A)「相関設計で挑む量子創発」の発足にあたり、5月8日(木)に東京大学理学部1号館小柴ホールにてキックオフミーティングが開催されました。対面とオンラインの併用によるハイブリッド形式で行われ、計画班員以外にも公開されました。学期期間中にも関わらず、対面で54名、オンラインで11名の合計65名の参加者が集まりました。有田領域代表の概要説明にはじまり、各計画研究班のメンバーが研究計画と今後の展望について紹介を行いました。スピン系、強相関系、超伝導体、トポロジカル系、光物性、第一原理計算、データ科学、量子多体計算などの各分野から研究者が集まり、量子創発現象の設計という目標のもと、活発な議論が行われました。特に理論家と実験家の間でアイディアを交換する場面が多く見られました。また、若手の理論研究者が多く参加されていて、質疑応答を含めてミーティング中の議論に積極的に参加していたことも印象に残りました。相関設計学の新学理構築を目指す本学術変革領域にとって象徴的なスタートとなりました。下記にプログラムを掲載しました。また、ミーティングの最後に領域評価委員の川上則雄先生、小池洋二先生、松田祐司先生よりコメントを頂きました。最後に、本ミーティングを開催するにあたって協力していただいた有田研の秘書の小南さん、辻研の秘書の木村さん、そして会議運営を手伝ってくれた学生さんに感謝申し上げます。



図1 キックオフミーティングでの集合写真 (小柴ホール前にて)

学術変革領域研究「相関設計で挑む量子創発」キックオフミーティングプログラム

日時: 5月8日(木)

場所: 東京大学理学部1号館小柴ホール

10:00 - 10:10 領域代表の挨拶 (有田亮太郎)

10:10 - 10:50 A01 班: スピン相関が拓く創発物性 (木村剛)

10:50 - 11:30 A02 班: 量子金属における創発現象の相関設計 (田財里奈)

(集合写真、昼休み)

14:00 - 14:40 A03 班: エキゾチック超伝導体の相関設計 (柳瀬陽一)

14:40 - 15:20 B01 班: トポロジカル物性の設計と創成 (野村健太郎)

15:20 - 15:40 (休憩)

15:40 - 16:20 B02 班: 非平衡・非線形が導く創発物性 (和達大樹)

16:20 - 17:00 B03 班: データ駆動と計算科学で加速する物質設計 (只野央将)

17:00 - 17:10 終わりの挨拶 (有田亮太郎)

17:40 - 19:40 懇談会 (山上会館)

研究会報告 "Kyoto International Workshop on Exotic Superconductors" A03 班 柳瀬陽一



図 1:研究会初日の全体写真。スクリーンに映っているのはオンライン講演者の皆さん。

本学術変革領域のご支援をいただいて、6月11,12日に"Kyoto International Workshop on Exotic Superconductors"が開催されました。この研究会は、2023年に姫路で開催された"International Workshop on the Dual Nature of f-Electrons"、続いて2024年に京都で開催された国内研究会の後継として企画されました。

その経緯もあり、研究会の主要なトピックスは重い電子系超伝導体でした。なかでもスピン三重項超伝導体の有力候補と考えられている UTe₂ に対する研究成果が数多く報告されました。ほかに、多重超伝導相が発見



図2:ポスターセッションのひとこま。 賑わいました。

されパリティ転移の可能性が注目されている $CeRh_2As_2$ などに関する報告があり、 $CeSb_2$ において結晶構造を磁場により自在に制御した研究も印象的でした。また、ニッケル系超伝導体やカゴメ超伝導体に関する発表もあり、前者に関して、本領域メンバーの黒木和彦氏から、理論設計から研究の現在地までの総合的なレビュー報告がありました。

研究会のプログラムなど、詳細については研究会 HP (https://sites.google.com/view/kyotoworkshop/) をご参照ください。なお、国外からの参加者に対するサポートは特にありませんでしたが、多くのスピーカーが国外から来訪されました。研究会の魅力でしょうか、あるいは京都の魅力でしょうか。いずれにしろ、昨今の状況を見聞きする限り、この点は大変ありがたいことだったと思います。一部来日が難しかった講演者はオンラインで講演されました。

研究会初日は若干天気に恵まれなかったものの、6月の京都にしては過ごしやすい気候で、研究会終了後には参加者の皆さんが満足そうな表情をされていたのが印象的でした。組織委員の主力としてご活躍いただいた藤森伸一さん(原子力機構)と徳永陽さん(原子力機構)、会場の使用に際してご尽力をいただいた山上浩志さん(京都産業大学)に深くお礼申し上げます。

柳瀬陽一(京都大学・理学研究科・教授) 研究室 HP: https://cond.scphys.kyoto-u.ac.jp/

相関設計のホームページの概要

総括班 和達 大樹

学術変革領域研究(A)「相関設計で挑む量子創発」(令和 7~11 年度)のスタートに伴い、ホームページなどを担当させていただくことになりました。どうぞよろしくお願いいたします。

今年の4月より、領域ホームページとして

https://cds.phys.s.u-tokyo.ac.jp/

を立ち上げております。



NEWS

主な内容は、領域代表挨拶、研究概要、研究組織、研究成果、イベント、内部向け、となっています。研究成果の取りまとめについては、researchmap との連携により、効率よく行えることを目指します。今後、「相関設計」の若手コロキウムやセミナーを含め、多くの研究会を宣伝できるようにいたします。

ホームページへの掲載依頼は、内部向けページにもありますように、下記の Form https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSdMmp4WdRO7R1ya7FBV-TBSeJ2pQEyLeGs8-PDtw1p43aMBrg/viewform

からお出しください。

さらに、

YouTube チャンネル: https://www.youtube.com/@correlationdesign

X: https://x.com/design61366

も開設しております。今後、研究成果の紹介にこれらも最大限に活かしたいと思っています。 それではこれから5年間、皆様のご協力をお願いいたします。

和達 大樹 (兵庫県立大学・大学院理学研究科・教授)

受賞報告

A01 班 求研 葛西章也: <u>CEMS Symposium on Emergent Quantum Materials 2025</u>, Nature Materials Poster Prize (2025 年 5 月)

B02 班 石坂研 白鳥惇也: <u>日本顕微鏡学会第 81 回学術講演会</u> 優秀口頭発表賞 (2025 年 6 月)

B03 班 有田研 松田仁: Workshop on Altermagnets and School on Magnetic Symmetry, Best Poster Award (2025 年 6 月)

人事異動

成田秀樹特任講師が7月1日付で名古屋大学大学院 工学研究科から名古屋大学 物質科学 国際センター 准教授に異動しました。

アウトリーチ

プレスリリース

開催報告

第1回「相関設計」若手コロキウムを6/20(金)にオンライン開催しました。

日時:6/20(金)16:00-、オンライン

プログラム:

北村 泰晟 (理化学研究所創発物性科学研究センター)

周期結晶中の Bloch 電子の性質はそのエネルギー分散と Bloch 波動関数により特徴づけられる。従来、Bloch 波動関数の性質はトポロジカル物質科学の文脈で研究が行われていたが、トポロジーを包含するより広い量子幾何学的な性質が Bloch 波動関数には内在しており、これが種々の物理現象に現れることが徐々に明らかとなりつつある。本発表では、中でも量子凝縮相における量子幾何学について発表を行う。まず、主要な研究対象である平坦バンド系の解説から初め、その後平坦バンドを持たない系での量子幾何効果について最近の進展について紹介する[1,2,3]。

- [1] T. Kitamura et al., Phys. Rev. Research 4, 023232 (2022).
- [2] T. Kitamura et al., Phys. Rev. Lett. 132, 036001 (2024).
- [3] T. Kitamura et al., arXiv:2505.01089 (2025).

16:35-17:10 「フラストレーションを内包する希土類化合物 YbCuS2 の磁気構造と準粒子励起」

堀 文哉 (東北大学大学院理学研究科)

近年、希土類化合物を舞台とした磁気フラストレーションの研究が注目されている。磁性半導体 YbCuS2 は、希土類の Yb がジグザグ鎖を形成しており、磁気フラストレーションの効果が期待できる。最近、我々は YbCuS2 に対して核四重極共鳴(NQR) 測定を行い、秩序モーメントが縮んだ非整合反強磁性秩序や新奇な中性準粒子の存在を明らかにした[1, 2]。本セミナーでは、YbCuS2 における特異な磁気状態の起源について議論する。

- [1] F. Hori et al., Commun. Mater. 4, 55 (2023).
- [2] F. Hori et al., arXiv:2412.17575.

約90名の聴衆に恵まれ、活発な質疑応答がなされました。今後も定期的に開催する予定ですので、皆様のご参加をお待ち申し上げます。

今後の予定

第2回「相関設計」若手コロキウム

日時:7/22(火)15:30-, オンライン(下記から事前登録をお願いします)

https://zoom.us/meeting/register/cFZJGoaNRO-F48T9Rn2dVA

プログラム: 座長 高橋 龍之介(兵庫県立大学)

15:30-16:00

今井 涉平(東京大学大学院理学系研究科)

「量子光誘起多体電子ダイナミクス」

近年の光技術の発展により、多数の光子を含む量子的な光(真空スクイーズド光やシュレディンガーの猫状態光など)が生成可能となってきた。我々はこのような量子光を用いて、これまで古典的なレーザー光で行われてきた光誘起多体電子ダイナミクスを再検討する研究を進めている[1,2]。

本発表では、巨視的な量子光の下での電子ダイナミクスを記述する有効理論の導出や、巨視的な量子物性の変化に必要な要素について、最近の成果を紹介する。

- [1] S. Imai, A. Ono, and N. Tsuji, arXiv:2501.16801.
- [2] S. Imai, in preparation.

16:00-16:30

金賀 穂 (千葉大学大学院理学研究院)

「電子系・スピン系の動的応答制御と特性検出:高次高調波・光整流・スピンゼーベック効果」本講演では、光・熱励起による電子/スピン系の動的応答制御と特性検出に関する最新の理論成果を報告する。第一に、グラフェンにおける二色レーザー誘起光整流・高次高調波を取り上げる。散逸効果を含む量子マスター方程式の数値解析により、二色レーザー下で応答のパラメータ依存性を網羅的に解析し、空間反転対称な系における光整流や高次高調波の定量的制御の指針を与えた[1]。

第二に、BKT 転移を示す擬二次元反強磁性体 BaNi 2V208 のスピンゼーベック効果 (SSE) を論じる。ランダウーリフシッツーギルバート方程式に基づき、磁性体と金属の接合系において、界面の非摂動効果も取り込んだトンネルスピン流の数値解析法を開発した。この数値解析法から得られたスピン流の磁場・温度依存性が実験と整合することを示し、観測された SSE が BKT 相の強いスピンゆらぎに由来することを見出した[2]。

- [1] M. Kanega and M. Sato, Phys. Rev. B 112, 045306 (2025).
- [2] K. Nakagawa, M. Kanega, T. Yokouchi, M. Sato, and Y. Shiomi, Phys. Rev. Materials 9, L011401 (2025).

16:30-17:00

林田 健志 (HFML-FELIX, Radboud University)

「時間反転対称性の破れた反強磁性体における電場誘起方向二色性の観測/

THz 自由電子レーザー施設 FELIX のご紹介」

反強磁性体は、磁気モーメントが全体の磁化を打ち消すように秩序化した材料として定義される。この広義の定義にはさまざまな種類の反強磁性体が含まれるため、どのような現象や機能が現れるかを考える場合、磁気秩序によって生じる対称性の破れに基づいた分類が必要

となる。特に、時間反転(T)対称性の破れは特異な現象を引き起こす。本講演では、時間反転奇(T-odd)な反強磁性体の中でも、磁化のような T-odd なベクトル量ではなく、T-odd な「スカラー量」によって特徴づけられる反強磁性体[2] に着目する。そのような物質では、異常ホール効果のような強磁性体的な振る舞いとは異なる、特異な効果が生じうる。その一例が、対角の電気トロイダル(ET)効果[3]であり、これは電場 E を印加すると、それと平行な方向にトロイダルモーメント T (磁気双極子の渦状配列) が誘起される現象を指す。本講演では、電場誘起の非相反方向二色性を用いることで ET 効果を観測できることを示し、さらに、この手法が反強磁性ドメイン構造の可視化にも有効であることを紹介する [4]。また、現在所属する FELIX Laboratory (https://hfml-felix.com/)では THz 領域の自由電子レーザーを用いた測定、特に様々な秩序状態の THz 光照射による制御に取り組んでいる。FELIX では、外部ユーザーの利用も募集しているため、講演の後半では施設の特徴について紹介する。

- [1] Y. Tokura and N. Nagaosa, Nat. Commun. 9, 3740 (2018).
- [2] S. Hayami et al., Phys. Rev. B 108, L140409 (2023).
- [3] H. Schmid et al., Ferroelectrics 252, 41-50 (2001).
- [4] T. Hayashida et al., Adv. Mater. 37, 2414876 (2025).

公募研究について(第1期)

令和8年度の科研費・学術変革領域研究(A)の公募要領が文部科学省HPにて公開されています。本年度の公募は9月17日が締め切りとなっています(各所属機関内での〆切は異なりますのでご注意下さい)。

令和8(2026)年度科学研究費助成事業 公募要領・研究計画調書のダウンロードサイト

B02 班の研究員公募を開始しました。

募集要項: https://www.phys.s.u-tokyo.ac.jp/advt/46122/

B01 班の特定プロジェクト助教公募を開始しました。

募集要項: https://kobo.jimu.kyushu-u.ac.jp/pdf/20250605120724.pdf

理化学研究所の特別研究員公募を開始しました。

理化学研究所創発物性科学研究センター 創発物性計測研究チーム

(チームディレクター: 花栗 哲郎) の特別研究員公募を開始しました。

募集要項: https://www.riken.jp/careers/researchers/20250616_1/index.html

International Workshop "Challenges in Designing Room Temperature Superconductors

"(CDRTS 2025)が開催されます。

日時: July 21st - 24th, 2025

場所: Hongo, Tokyo

詳細: https://cdrts2025.wordpress.com/

The International Workshop on Exotic Quantum Phases due to Unhappy Electrons (IWUE2025)が開催されます。

日時: November 12(Wed) -14(Fri), 2025

場所: Takeda Hall, Hongo-Asano Campus, University of Tokyo, Japan

詳細: https://crystal.k.u-tokyo.ac.jp/IWUE2025/

その他お知らせ

Quantum Materials Accelnet (QMAC) のメンバーとなりました。

編集後記

本年度より新学術領域「相関設計で挑む量子創発」がスタートし、私たちがニュースレター編集局を担当させていただくこととなりました。本号が記念すべき第 1 号となります。関係者の皆様に心より御礼申し上げますとともに、今後ともどうぞよろしくお願いいたします。私たちの領域では、年 2 回(7 月・2 月)の発行を目指し、柔軟かつ親しみやすいスタイルを心がけてまいります。特に、ニュースレターは PDF 形式での配信のみとし、広く研究者・学生・一般の方々に情報をお届けできるよう工夫していきたいと考えております。また、専門性の高い研究内容も、できる限り平易な表現で紹介し、学部生や科学に関心を持つ方々にも親しみやすい紙面づくりを目指します。さらに、年 2 回という発行ペースを活かして、公募情報や関連イベントの案内なども適宜盛り込み、領域内外の円滑な情報交換の場となることを願っております。

このニュースレターが「相関設計で挑む量子創発」の研究の広がりと深まりを支える一助となれば幸いです。そして何よりも、読者の皆様にとって「読みたくなる」紙面をつくるために、領域メンバーの皆様からの積極的な情報提供とご協力を、編集局一同、心よりお待ちしております。どうぞ今後ともよろしくお願い申し上げます。

相関設計ニュースレター編集局: 小林研介(東京大学) kensuke@phys.s.u-tokyo.ac.jp

近藤猛(東京大学) <u>kondo1215@issp.u-tokyo.ac.jp</u> 高橋英史(大阪大学) takahashi@mp.es.osaka-u.ac.jp

相関設計で挑む量子創発

文部科学省科学研究費補助金 「学術変革領域研究(A)」(令和7年度~11年度)学術変革領域研究(A)

「相関設計で挑む量子創発」ニュースレター 第1号

2025年7月 発刊

領域事務局: correlationdesign81@gmail.com

領域ホームページ: https://cds.phys.s.u-tokyo.ac.jp/