

量子開放系非平衡ダイナミクスシミュレータの開発

Development of simulators for the nonequilibrium dynamics of open quantum systems

佐藤駿丞
東北大学

1. 研究目的

光による物性制御や新奇非平衡状態の創出は、光物性物理学における重要な課題である。近年の高強度・超短パルスレーザー技術および超高速計測技術の発展により、物質中の電子がアト秒からフェムト秒スケールで光電場に駆動される過程を実時間で観測できるようになってきた。こうした光誘起電流、キャリア生成、非線形光応答の微視的機構を理解するには、外場下の電子ダイナミクスを記述する理論・数値シミュレーション手法が不可欠である。

我々はこれまで、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく第一原理電子ダイナミクス計算により、強レーザー場中の固体電子ダイナミクスを研究してきた。一方、実際の物質中の電子は格子振動、不純物、熱浴などの環境と相互作用しており、散逸・緩和を含む量子開放系としての記述が必要である。本研究では、量子マスター方程式と強束縛模型を組み合わせ、光で駆動される固体電子系の非平衡開放系ダイナミクスを解析するシミュレータを開発し、実励起・仮想励起・緩和過程を統一的に扱う基盤を整備することを目的とする。

2. 研究成果の内容

本年度は、量子マスター方程式と強束縛模型を組み合わせた非平衡電子ダイナミクスシミュレータの基盤開発を進めた。特に、強レーザー場で駆動される固体電子系において散逸・緩和を物理的に整合した形で扱うため、従来の Houston 状態を拡張した「分極 Houston 状態 (polarized Houston states)」に基づく理論的枠組みを構築した。

一次元ダイマー鎖模型による検証の結果、分極 Houston 状態は非物理的励起および仮想励起を大きく抑制し、強電場領域で電場ピーク近傍に生じる実キャリア注入を明瞭に抽出できることを確認した。さらに、これを量子マスター方程式の緩和時間近似における参照状態として実装し、従来法で問題となる絶縁体中の非物理的な直流電流が大幅に抑制され、静電場・線形応答極限では消失することを示した。以上により、環境効果を含む光誘起非平衡現象を、実励起、仮想励起、散逸・緩和過程に分けて解析する基盤的手法を確立した。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

本研究課題は、光物性物理、非平衡量子統計、物性理論、数値シミュレーションが交差する学際的な研究である。強レーザー場中の固体電子ダイナミクスを理解するには、光による実励起・仮想励起の解析に加え、格子、不純物、熱浴などの環境効果を含む量子開放系としての記述が必要となる。

学際共同利用プログラムは、このような開放量子系非平衡ダイナミクスの理論開発と数値検証を進める上で重要な役割を果たした。

4. 今後の展望

今後は、本年度に構築した分極 **Houston** 状態に基づく量子開放系非平衡ダイナミクスシミュレータを発展させ、より現実的な固体材料および多次元系への適用を進める。本研究では一次元ダイマー鎖模型を用いて理論の有効性を検証したが、今後は多バンド強束縛模型、二次元・三次元結晶、実材料に基づく模型へ拡張し、実験で観測される超高速光応答との比較を可能にする。さらに、第一原理計算との接続を進め、実材料のバンド構造や強束縛パラメータに基づく開放系ダイナミクス計算の枠組みを整備する。これにより、アト秒からフェムト秒スケールの電子励起、キャリア注入、緩和、光誘起電流、非線形光応答などを、環境効果を含めて解析できるようにする。

最終的には、本シミュレータを光による物性制御や新奇非平衡相の探索に応用し、強レーザー場下での実キャリア生成、散逸を伴う光誘起輸送現象、絶縁体・半導体における非線形応答の理解を通じて、超高速光物性実験の解釈に資する理論基盤の確立を目指す。

5. 成果発表

(1) 学術論文

Shunsuke A. Sato, Hannes Hübener, Umberto De Giovannini, Angel Rubio,
 "Polarized Houston State Framework for Nonequilibrium Driven Open Quantum
 Systems", arXiv:2507.20160 [quant-ph]

(2) 学会発表

(3) その他

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*		
		当初配分	移行*	一般利用による追加
Pegasus	○	672		
Miyabi-G	○	756		
Miyabi-C				
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				