

関連設計で挑む量子創発

	研究代表者	東京大学・大学院理学系研究科・教授
	有田 亮太郎（ありた りょうたろう）	研究者番号：80332592
研究課題情報	課題番号：25A201	研究期間：2025年度～2029年度
	キーワード：関連効果、量子創発現象、物質設計、新物質開発、精密物性測定	

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

20世紀初頭、物理学の急速な発展は実験科学と理論科学の分化をもたらした。以来100年以上にわたって、実験科学と理論科学はお互いに強い影響を及ぼし合いながら発展を続けている。この中で、近年、物性物理学における両科学の果たす役割が大きく変わりつつある。その背景には、実験技術の長足の進歩により、これまで**作れなかった物質が合成されたり、未到の極限環境が実現されたり、測定困難な物理量が計測できるようになったことがある**。このため、物性物理学が研究対象とする物質、環境、時空間スケールはかつてない爆発的な勢いで広がっており、その学術的にも応用的にも豊富な資源が眠るフロントニアの開拓が急務となっている。

このような状況の中、量子力学的な効果が顕著にあらわれる量子物質に対する研究において、**理論家のアイデアや計算の結果が新物質の合成や新現象の観測に直接つながる成功例**が多く見られるようになった。この傾向は高温超伝導などの量子物質における創発現象の研究においてははっきりとあらわれている。量子創発現象は電荷・スピン・軌道・格子といった量子力学的自由度の間に働く関連効果の結果としてあらわれ、しばしば予想、予測を超越した物性・機能を実現するが、この多様な自由度の絡み合いの広大無辺な可能性は、**偶然の発見に頼るアプローチでは到底探究し尽くせるものではない**。そこで、本学術変革領域では、物質中の量子創発現象に対し、現象論やモデルの提案から第一原理計算に基づく物質設計、そして物質合成・測定までを一貫通貫に行う**関連設計学を構築し、物性物理学に新たな展開をもたらすこと**を目標とする。

●研究の背景

物性物理学における理論研究の役割が大きく変化している背景には、対象となる物理量を第一原理的に評価する方法論の開発や、多自由度の複合模型を高精度に解析する**計算手法の開発が急速なスピード**で進んでいることがある。今まで計算が難しいため見落とされてきた現象が、**精密かつ非経験的に**計算されるようになった。一方、**実験技術の進展**によって、合成可能な物質の種類が増え、物理量の測定精度が向上したこと、また実現可能な実験環境が拡大したことも、本学術変革領域が構想されるに至った重要な背景である。加えて、**爆発的な成長を遂げている人工知能(AI)**も多大な影響を与えている。昨今の自然言語処理技術の活用によって、計算科学の分野においては、コード解析・コード生成・コード検証などで大幅な効率化が進んでいる。こういった新技術の発展は、計算科学やデータ科学の分野にとどまらず、物質開発全体に新しい革命をもたらすと期待される。「室温超伝導」というキーワードを与えたときに、生成AIがその物質名のみならず、その合成法も答える時代を実現するため、今こそ**理論研究と実験研究がデータ蓄積の面でも密接に協力**していくことが重要であることは論を俟たない。

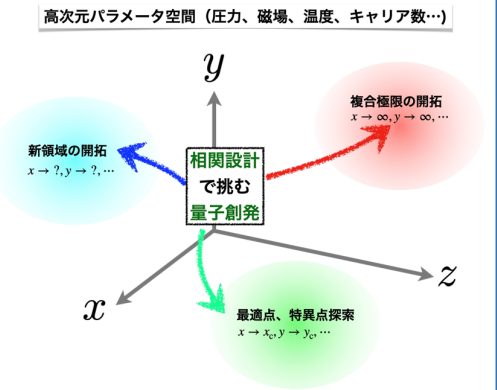


図1 量子創発現象の高次元パラメータ空間と関連設計学による物質設計、探索の概念図。

●研究の目的

量子創発現象の発現の舞台は高次元の広大な空間である。この空間の中のどこに興味深い物質や現象があるかを示す地図を与えるのが関連設計学である。本学術変革領域ではこの**関連設計学を構築し**、その結果として**新しいクラスの物質群、現象**を見つけることを目標とする。具体的には、できるだけ広いパラメータ空間で観測でき、応用分野への波及効果がある、かつ、物性物理学における新概念を育む舞台となる以下の量子物質を具現化することを目指す。

- 1) 高温・強磁場・擾乱などに耐える頑健な物性を示す量子物質（**頑健物質**）
- 2) 超巨大応答・超高速応答といった特異応答を示す量子物質（**特異応答物質**）
- 3) 新法則・新原理・新現象発見の揺籃地となりうる量子物質（**揺籃物質**）



図2 本領域がターゲットとする量子物質（頑健物質、得意応答物質、揺籃物質）の概念図。

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●研究体制と計画研究の目標

計画研究は、関連設計を考える際に最も重要な舞台である磁性体、量子金属、エキゾチック超伝導体に焦点を当てた研究項目(A01-A03)と、物質の境界を越えて今日の物性物理学において最も重要なキーワードであるトポロジ、非平衡・非線形、データ駆動・計算科学を軸とする研究項目(B01-B03)から構成される。

A01は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。

A02は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、銅酸化物・ニッケル酸化物・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。

A03は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、二次元ヘテロ構造を対象に、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 of 専門家が総力を結集する。

B01は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。

B02は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。

B03は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や磁気構造、フォノン分散、輸送係数や応答関数のデータベースを構築する。開発したコードやデータベースの積極的な公開にも取り組む。

●国際強調、人材育成

放射光施設、中性子散乱施設、レーザー施設、強磁場施設、電子線照射施設といった大型施設を使う実験研究はもちろんのこと、理論、計算物理学の分野においても**国際ネットワークとの協調**が不可欠である。この観点から、本学術変革領域と志を同じくする**欧米の大型プロジェクトと密接に連携**する。この分野の数十年単位の時間スケールの将来戦略の一環として、地球規模で進む**若手人材の循環の輪の中に積極的に参加**する。