

人工ニューラルネットワークで明らかになった高温超伝導の隠れた起源

国立研究開発法人物質・材料研究機構
京都大学
早稲田大学
豊田理化学研究所

概要

1. 国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS)、京都大学、早稲田大学、豊田理化学研究所からなる研究チームは、新たに光電子分光データから人工ニューラルネットワーク(ANN)を活用して『自己エネルギー』と呼ばれる物理量を取り出す手法を開発し、高温超伝導解明の鍵となる引力の痕跡を発見しました。当該成果は今後、実験科学だけでは解決が困難な問題を解く革新的手法へと発展することが期待されます。
2. 低温超伝導体では、電子の運動の履歴を示す自己エネルギーから、超伝導状態の形成に必要な電子のペア(クーパー対)を生み出す引力の存在が実験的に証明されました。しかしながら、銅酸化物高温超伝導体については、高い転移温度に見合う強い引力の痕跡が長年見つかっていませんでした。
3. 今回、研究チームは、理論方程式 (エリアシュベルグ方程式) を用いて実験データを再現し説明する従来の方法に代わって、あらゆる関数を表現できる ANN を用いた機械学習を考案し、銅酸化物高温超伝導体について、実験データを精密に再現する 2 成分の自己エネルギーを決定することに成功しました。自己エネルギーには『正常成分』と『異常成分』の 2 成分があり、後者に引力の痕跡が含まれていることがわかっています。得られた自己エネルギーの解析から、2つの成分に現れる強い電子間の散乱 (正常成分) と強い引力 (異常成分) の影響が、実験データでは見かけ上相殺するために隠れてしまい、引力の痕跡が観測されなかったことがわかりました。また、異常成分のさらなる解析から、強い引力が低温超伝導のような原子振動では説明できないことがわかりました。今回得られた成果は、高温超伝導の起源を解明する重要な手掛かりになります。
4. 今後は、今回開発された実験データ解析手法を様々な物質に適用し、より高い超伝導転移温度を示す物質の設計に活かしていくことを目指します。また、これまで ANN が活用されてきた機械学習では、多数のデータによる学習から未知のデータ予測を行うことが主流でした。今回得られた成果を嚆矢として、少数データから隠れた物理量を抽出する機械学習観測手法の確立を目指していきます。
5. 本研究は、NIMS エネルギー・環境材料研究拠点 界面計算科学グループの山地洋平主任研究員と京都大学大学院人間・環境学研究科 吉田鉄平 教授、早稲田大学理工学術院 藤森淳 客員教授、豊田理化学研究所/早稲田大学理工学術院 今田正俊 フェロー/研究院教授からなる研究チームによって行われました。また、本研究は JST さきがけ、JSPS 科学研究費助成事業、文部科学省「富岳」成果創出プログラムおよびポスト「京」重点課題の支援を受けています。
6. 本研究成果は、米国物理学会 *Physical Review Research* 誌オンライン版に 2021 年 11 月 8 日付で公開されました。

研究の背景

1986年の発見以来、銅酸化物高温超伝導体⁽¹⁾がなぜ液体窒素温度を超える高い超伝導転移温度(最大135K)を示すのかという謎が、固体中の多数の電子の振る舞いを観測する実験手法、その振る舞いを理解するための理論手法の発展を牽引し、物質科学の進歩に大きな影響を与えてきました。

そもそも超伝導が発現するためには、2個の電子になんらかの引力が働いてクーパー対と呼ばれる電子対を形成する必要があると考えられています。多くの金属では引力は弱く、熱ゆらぎによって容易にクーパー対が破壊されるため、低温でのみ超伝導が現れます。カマリン・オンネスが1911年に観測した水銀の超伝導転移温度は、4.2Kという液体ヘリウムによる冷却が必要となる低温でした。

引力が働くとその痕跡が観測量に現れることが期待されます。実際、従来型の低温超伝導体では、その痕跡がトンネル効果を用いた電子観測によって1960年代に見つかり、BCS機構⁽²⁾と呼ばれる低温超伝導発現のメカニズムの解明に大きく貢献しました。

高温超伝導では高い転移温度に見合う強い引力が働いていると考えられ、引力の強さに見合ったより強い痕跡が観測量に現れることが期待されます。しかし銅酸化物高温超伝導では、高い転移温度に見合う強い引力の痕跡が長年観測されず、強い引力を捉える研究手段の開発が望まれてきました。

研究内容と成果

今回、共同研究チームは、光電子分光⁽³⁾実験のデータから、人工ニューラルネットワーク(ANN)⁽⁴⁾を用いることで、『自己エネルギー⁽⁵⁾』と呼ばれる物理量の抽出を行いました。

自己エネルギーには、電子が他の電子や固体中のイオンから受ける相互作用(電子間散乱等)によって影響を受けた履歴を示す「正常成分」と、超伝導電子対を組んだり、電子対を解消したりしてきた履歴を記述する「異常成分」と呼ばれる2つの成分があります。異常成分を取り出すことができれば、超伝導を引き起こした引力の性質とメカニズムに迫ることができます。

一方、光電子分光実験を始めとするほとんどの実験では、特定の運動量とエネルギーを持つ電子がどれくらい頻度で固体中に存在するかという1成分の情報のみが得られます。そこから2成分の自己エネルギーを取り出すには、少ない既知の情報から、より多くの情報を推定する劣決定問題⁽⁶⁾を解く必要があります。低温超伝導体の場合には、BCS理論⁽²⁾、およびそれを発展させた南部理論ならびにミグダルーエリアシュベルグ理論⁽⁷⁾を用いることで、情報の不足を補うことができました。一方で、銅酸化物高温超伝導体については、そのような手法が通用せず、長年の難問となっていました。

困難を回避するために、直感的で理解しやすい「自己エネルギー・モデル」がしばしば導入されてきましたが、モデルの埒外の現象が起こっている可能性を排除できませんでした。

研究チームは、より普遍的に確立している複数の物理法則⁽⁸⁾を取り入れ、足りない情報を補いました。さらに未知の高温超伝導体の自己エネルギーをあらゆる関数を表現できるANNで記述して、機械学習を行うことでこれまでの困難を克服しました。複数の物理法則を満たすようにANNを制御しながら、高温超伝導体の実験データを再現するようにANNの学習を行い、最適な解を探索しました。人間が直感的に取り入れることが難しい条件下で解の探索を自動的に行えることが機械学習の強みです。さらに機械学習の妥当性の検証を行い、結果として、2成分の自己エネルギー(正常及び異常成分)を1つの分光データから同時に抽出することが可能になりました。ANNを用いることで、より精密に実験データを再現することが可能になっただけでなく、未知の現象に迫ることが可能になりました。

上記2成分を同時に抽出することで、今回新たに、これら正常成分(に含まれる強い電子間の散乱)と異常成分(に含まれる電子対を作る強い引力)による寄与が見かけ上互いに打ち消し合うために、高い超伝導転移温度を導く強い引力の痕跡が検知できないでいたことが明らかになりました。得られた異常成分の構造は超伝導解明の直接の手掛かりになります。

本研究はJST さきがけ(JPMJPR15NF)、日本学術振興会科学研究費助成事業基盤研究(S)「強相関物質設計と機能開拓—非平衡系・非周期系への挑戦—」、文部科学省「富岳」⁽⁹⁾成果創出加速プログラム「量子物質の創発と機能のための基礎科学—「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学」

(JPMXP1020200104) およびポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題C「超伝導・新機能デバイス材料」の一環として実施されたものです。また、本研究はスーパーコンピュータ「富岳」の計算資源による支援を受けています(課題番号: hp180170, hp190145, hp200132, hp210163)。

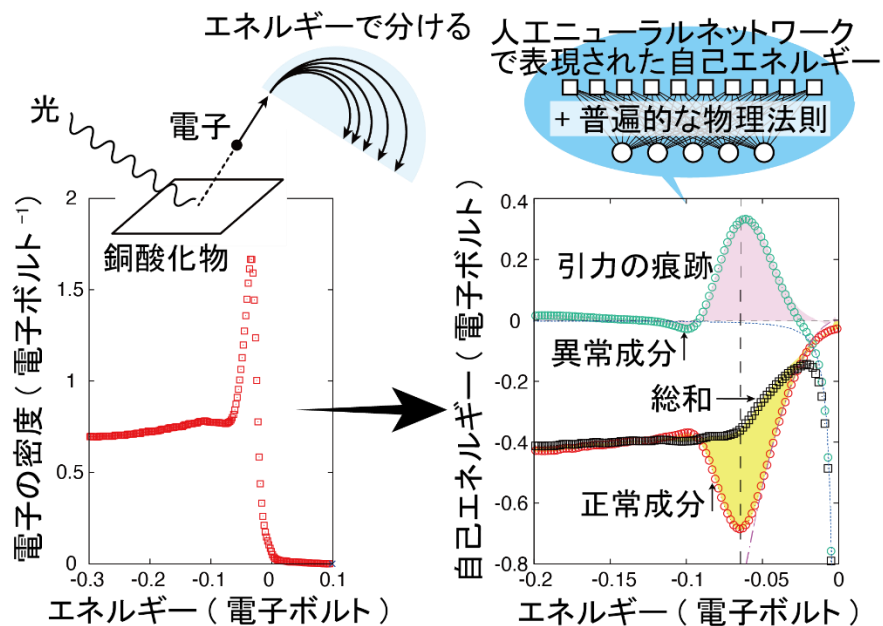


図1. 銅酸化物についての1つの光電子分光データ(左図)から、足りない情報を普遍的な物理法則で補って人工ニューラルネットワークを最適化し、自己エネルギーの2つの成分(右図)を決定。

今後の展開

今回開発した実験データの解析手法を様々な物質に適用し、より高い超伝導転移温度を示す物質を設計するための指針が得られるようになると考えられます。また、これまでANNが活用されてきた機械学習においては、多数のデータによって訓練を行い、未知のデータを予測することや、望んだ性質の物質候補の絞り込みが主流でした。今回得られた成果を嚆矢として、今後、少数データから隠れた物理量を抽出し、機構や新たな概念を発見するなど基礎科学の根本問題のための機械学習観測手法が発展していくと期待されます。

掲載論文

題目：Hidden self-energies as origin of cuprate superconductivity revealed by machine learning

著者：Youhei Yamaji, Teppei Yoshida, Atsushi Fujimori, and Masatoshi Imada

雑誌：Physical Review Research

掲載日時：2021年11月8日

用語解説

- (1) 銅酸化物高温超伝導体: 1986年のベドノルツとミュラーの発見に端を発し研究されてきた超伝導物質群。現在、大気圧下で最も高い温度で超伝導状態になることが知られています。高価で希少な液体ヘリウムではなく液体窒素による冷却で超伝導状態を得ることができるため、基礎研究と応用研究の両面から注目を集めてきました。銅と酸素原子を含む2次元層と様々な元素を組み合わせることで超伝導転移温度を始めとする性質が制御でき、電力損失の少ない導線として開発が進んでいます。
- (2) BCS機構およびBCS理論: 1911年にカマリン・オンネスが発見した水銀の超伝導に始まる、液体ヘリウムによる冷却が必要な低温超伝導体における超伝導の発現機構とそれを説明した理論。1957年にバーディーン、クーパー、シュリーファーの3氏によって提唱され、結晶固体の量子化された振動によって電子が対を組み超伝導状態となることを示しました。
- (3) 光電子分光: 物質に光を当てると電子が飛び出してくるアインシュタインの光電効果を利用して、固体中の電子を、運動量やエネルギーごとに分けて観測する実験手法。

- (4) 人工ニューラルネットワーク: 元々は脳が学習を行う機能を研究するために提案された関数。高度な人工ニューラルネットワークはどんな複雑な関数をも表現できるため、現在では機械学習でよく用いられています。
- (5) 自己エネルギー: 多数の量子力学的な粒子の運動を記述する際に用いられる関数。一つの粒子が、他の粒子から受けた相互作用の履歴を記録したもので、超伝導ではない状態でも存在する正常成分と、超伝導状態にだけ存在する異常成分があり、その総和が実験データに反映されます。
- (6) 劣決定問題: 少ない情報から多くの情報を推定する問題。最もよく知られている劣決定問題の例は、未知の変数の数より、方程式の数が少ない連立方程式です。
- (7) 南部理論、ミグダル-エリアシュベルク理論: BCS 理論をより深め、超伝導を引き起こす引力や自己エネルギーを始め、低温超伝導における観測量の精密予測を可能とした理論。対象物質の情報を入力データとして、エリアシュベルグ方程式と呼ばれる理論方程式を解くことで、様々な超伝導物質の性質を予測できます。南部博士が提唱した自発的対称性の破れが素粒子の質量を作り出すという画期的なアイデアは、この理論の成立過程で育まれたと言われていています。
- (8) ここで用いられた普遍的な物理法則: 本研究では、因果律によって定まる自己エネルギーの構造と、引力の強さに上限があることなどを用いています。
- (9) スーパーコンピュータ「富岳」: スーパーコンピュータ「京」の後継機として理化学研究所に設置された計算機。令和2年6月から令和3年6月にかけてスパコンランキング4部門で1位を3期連続で獲得するなど、世界トップの性能を持つ。令和3年3月9日に本格運用開始。