

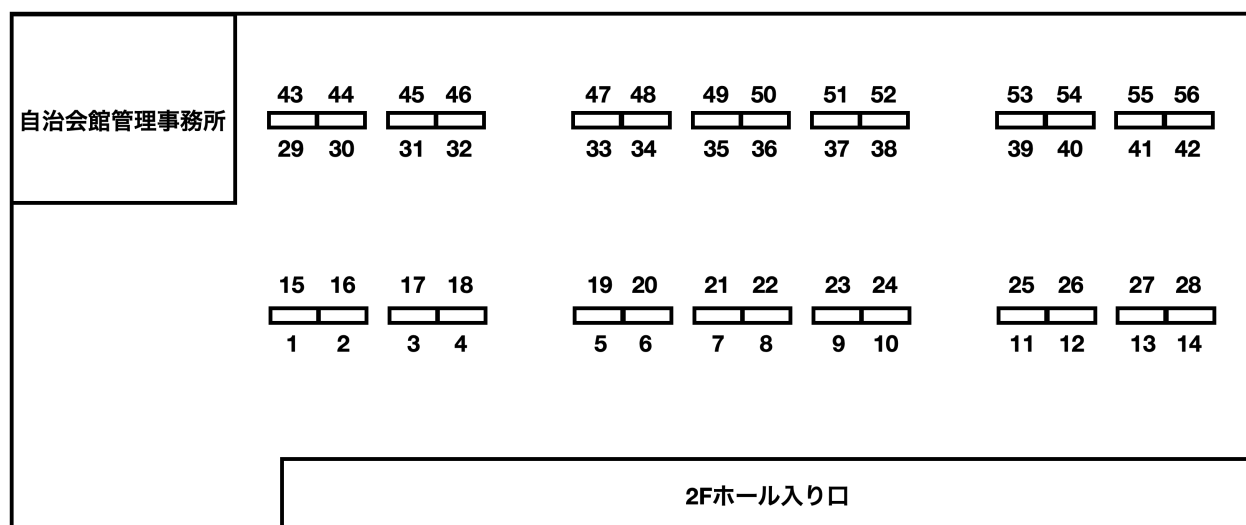
## ポスターセッションについて

開催日時：3月14日（火）17時15分～19時00分

会場：沖縄県市町村自治会館2階ホワイエ

- ・ポスターパネルのサイズはW90cm×H210cm（A0サイズまで対応可能）です。
- ・ポスターパネルの設置は3月14日（火）午前の講義終了時まで完了する予定です。各自のポスターの貼り付け作業については昼休憩以降に可能となります。
- ・ポスターの貼り付けについては会場に備え付けの画鋲を用いる形をお願いします。粘着が残るテープなどを用いたポスターの貼り付けは禁止させていただきます。
- ・ポスターの撤去については15日（水）の午前中までに宜しくをお願いします。
- ・自身のポスター番号と貼り付け場所については以下の会場見取り図などを参考にしてください。
- ・ポスターセッション時にはお互いに十分な距離が取ることが困難になることが予想されますので、感染防止の観点から引き続きマスクの着用を推奨します。

## ポスター会場見取り図とポスター番号



## ポスター発表リスト

番号	発表者名	タイトル
1	樋野 健太郎	テンソルネットワークに基づく原子核波束ダイナミクス理論
2	林慶 一郎	多次元ビッグデータ処理のためのハイブリッド型量子機械学習手法の確立に向けて
3	宮崎 優	遍歴電子と結合した局在スピンの深層学習を用いたダイナミクス計算
4	山崎 遼大	ミュー粒子異常磁気能率への量子電磁気学による摂動 12 次の寄与
5	鄭 従真	UTe <sub>2</sub> におけるトポロジカル結晶超伝導実現の可能性
6	太田 敏博	Attention in a family of Boltzmann machines emerging from modern Hopfield networks
7	水野 航希	磁性 Wallpaper Fermion における (スピン) ホール伝導度の解析
8	山本 和樹	散逸 XXZ モデルにおける非エルミート密度行列繰り込み群による解析
9	渡辺 亮	ランダムスピン系の解析における 1 次元 Branching MERA 状態の有用性検証と最適化手法の高度化
10	世話人一同	次回計算物理スクール運営メンバー募集!
11	有本 勝洋	第一原理計算による磁気相互作用を用いた有限波数を含む磁気構造決定手法の開発
12	兎子尾 理貴	プラズモニック量子非線形ホール効果の理論
13	成川 佳史	高輝度 LHC-ATLAS 実験 TGC 前段回路の量産後試験に向けた SoC デバイスを活用したコンパクトな DAQ システムの実装
14	永井 瞭	機械学習による DFT 汎関数の構築
15	柴田 康平	アルカリ超酸化物の強結合有効モデルとスピン軌道秩序
16	小堀 拓生	表面符号のシンドローム測定に基づくエラーモデル推定
17	増木 亮太	非調和フォノン理論を用いた有限温度における結晶構造の第一原理計算
18	越塚 毅	Snapshot データを用いた確率的最適輸送理論に基づく集団ダイナミクスの平均場モデル推定
19	牛原 啓	多体系に適用可能な量子マスター方程式を用いたエネルギー流の解析
20	吉井 真央	Topological Charge Pumping in a Quasicrystal
21	戸田 悠斗	荷電粒子衝突のための相互作用ポテンシャルの開発と、二体衝突近似計算への適用
22	矢作 裕太	久保公式のベクトル並列化による高速電気伝導度計算
23	田宮 志郎	Decoupling with random Clifford circuits
24	西村 阜	機械学習で探る Froggatt-Nielsen 模型のフレーバー構造
25	長戸 紘也	光渦による超伝導の光学応答と Higgs モード
26	XU Hanxiang	DFT and DMFT study of magnetism of ternary chromium tellurides under pressure
27	勝部 瞭太	エネルギー保存則の存在下における散乱過程を用いた量子操作の精度限界
28	西尾 宗一郎	$\pi$ 共役分子集合体の励起状態に対する波動関数理論の開発
29	佐藤 航平	改良されたモデルに依存しないパイ中間子電荷半径の解析
30	中井 雄介	非エルミート系における非正規性増強現象
31	岡内 孝樹	ボーズ粒子動的平均場理論を用いた励起子描像による LaCoO <sub>3</sub> のスピン転移の理論研究
32	滑川 翔太	線形応答理論に基づく輸送係数計算
33	久保 祐貴	データ同化手法による結晶構造同定
34	宮本 誠也	量子アニーリングを用いた自己学習モンテカルロ法
35	山田 美都理	Numerical study of magnetoelectric properties for skyrmion crystals
36	菅野 聡	レプリカ交換の手法を用いたアルゴリズムと行列模型
37	湯本 純	グラフ理論に基づいた Lattice fermion と Laplacian operator としての Wilson term
38	大石 泰弘	グラフェン吸着リンカー分子の DFT-RISM 計算
39	天野 智仁	双極子モーメントの機械学習モデルによる誘電特性の研究
40	阿南 宇紘	円偏光誘起トポロジカル超伝導の時間発展シミュレーション
41	藪内 雄大	2 成分 Bose-Hubbard 模型における相対論的量子液滴
42	高橋 秀顕	系 - 熱浴モデルに基づく水の分子間振動および分子内振動に対する多次元振動分光のモデルシミュレーション
43	沖上 和希	自動微分によるハミルトニアンの逆設計を用いたスキルミオン結晶の探索
44	大島 久典	保存則を利用したランダム量子回路計算の高速化と測定誘起臨界性
45	小野 清志郎	密度汎関数理論計算と対称性指標理論によるトポロジカル・ノーダル超伝導判定手法
46	栗田 謙亮	反強磁性体における X 線磁気円二色性
47	尾崎 壮駿	ノーダルライン半金属における軌道常磁性 - 反磁性異方性
48	柏村 周平	ベイズ推論による X 線スペクトル解析
49	五十嵐 亮	ニューラル構造場の導入とその結晶構造オートエンコーダーへの応用
50	増井 陸	環境との結合に対する SPT 相の安定性
51	Juan Pablo Bayona Pena	量子開放系の緩和現象における凍結の理論的研究
52	真鍋 秀隆	GPU による 2 次元 MERA の変分最適化の加速
53	山口 達也	四重ペロブスカイト酸化物 ACu <sub>3</sub> Fe <sub>4</sub> O <sub>12</sub> の金属絶縁体転移
54	櫻井 理人	クラスター型量子不純物問題に対するコンパクトな変分量子回路
55	Suyog Garg	Using Machine Learning for detecting Gravitational-Wave signals from compact binaries
56	品岡 寛	学術変革領域研究 B 「量子古典融合アルゴリズムが拓く計算物質科学」の紹介

## ポスター概要

### [1] テンソルネットワークに基づく原子核波束ダイナミクス理論

樋野 健太郎/京都大学大学院

量子化学の目標は電子と原子核のシュレディンガー方程式を解くことである。一般に電子運動を考える時は Born-Oppenheimer 近似で原子核は動いていないものとみなす。そして原子核運動は電子運動により構成されるポテンシャルエネルギー曲面によって駆動される。この研究では、多次元の grid mesh で構成されるポテンシャルエネルギー曲面と多次元の原子核波動関数の両方をテンソルネットワークで表すことで、精確に記述可能な原子核の運動自由度を大幅に増やす理論を構築した。

### [2] 多次元ビッグデータ処理のためのハイブリッド型量子機械学習手法の確立に向けて

林慶 一郎/灘高等学校

古典的な畳み込みニューラルネットワークから着想を得て、MCRZ ゲートを用いて畳み込みを行う量子回路を自動生成するソフトウェアを開発した。MNIST の画像セットにおいて画像が 0 か 1 かを識別するモデルを設計し、QISKIT を用いて機械学習を行なった。精度面の検証を行い、新たな量子画像処理手法の理論の大枠を完成させるに至った。量子データのみならず古典データを汎用的に多次元情報の処理を行う手法としての可能性を示す。

### [3] 遍歴電子と結合した局在スピン系の深層学習を用いたダイナミクス計算

宮崎 優/東京大学物理工学専攻

局在スピンのダイナミクスはランダウ=リフシッツ=ギルバート方程式によって記述されるが、遍歴電子の効果を顕に含めたシミュレーションは計算コストの観点から限定的である。しかし、近年はスキルミオン系などで遍歴電子の効果が重要である可能性が示唆されている。本発表では深層学習を用いた遍歴電子と結合した局在スピン系のシミュレーションについて議論する。

### [4] ミュー粒子異常磁気能率への量子電磁気学による摂動 12 次の寄与

山崎 遼大/埼玉大学理工学研究科

ミュー粒子異常磁気能率は、素粒子標準模型(SM)を超える物理への有力な手がかりとして、大きな関心が寄せられている。本研究では、量子電磁気学(QED)による摂動 12 次の主要な寄与を与える項を選択し、計算を実行し、その値を求めた。結果、主要な寄与は  $0.063 \times 10^{-11}$  程度であることが判明した。これは、SM 統一理論値の QED の不確かさ  $0.104 \times 10^{-11}$  の範囲内の寄与であり、SM 統一理論値には影響を及ぼさない。

#### [5] UTe<sub>2</sub> におけるトポロジカル結晶超伝導実現の可能性

鄭 従真/大阪大学院 基礎工学研究科

重い電子系 UTe<sub>2</sub> は常磁性であるが、スピントリプレット超伝導の発現が期待される。そのため DIII クラスのトポロジカル超伝導の候補物質である。しかし、最近 de Haas-van Alphen 効果の測定によりフェルミ面がシリンダー形状であることが報告され、この場合のトポロジカル不変量は自明である。この場合でも、結晶対称性を用いることで別のトポロジカル数が定義できることがある。そこで我々は UTe<sub>2</sub> が持つ結晶対称性によるトポロジカル不変量を調べ、数値的に表面状態が現れることを調べた。

#### [6] Attention in a family of Boltzmann machines emerging from modern Hopfield networks

太田 敏博/株式会社サイバーエージェント

Hopfield networks and Boltzmann machines (BMs) are fundamental energy-based neural network models. Recent studies on modern Hopfield networks have broadened the class of energy functions and led to a unified perspective on general Hopfield networks including an attention module. We consider the BM counterparts of modern Hopfield networks using the associated energy functions, and study their salient properties from a trainability perspective. In particular, the energy function corresponding to the attention module naturally introduces a novel BM, which we refer to as attentional BM (AttnBM). We verify that AttnBM has a tractable likelihood function and gradient for a special case and is easy to train.

#### [7] 磁性 Wallpaper Fermion における(スピン)ホール伝導度の解析

水野 航希/名古屋大学

本研究では空間群 P4/mbm (No. 127) の対称性を持つ格子模型から wallpaper fermion の有効模型を導出し、これを用いて強磁性磁化が存在する場合の(スピン)ホール伝導度と反強磁性磁化が存在する場合のスピンホール伝導度を解析した。ホール伝導度はディラックコーンの場合の2倍に量子化され、パラメータを変化させるとギャップを閉じることなく符号が変化することを見出した。これは wallpaper fermion が単一のディラックコーンではなく、その2倍の自由度を持っていることに起因する。発表では、スピンホール伝導度の強磁性・反強磁性磁化への依存性も議論する。

#### [8] 散逸 XXZ モデルにおける非エルミート密度行列繰り込み群による解析

山本 和樹/京都大学理学研究科

非エルミート XXZ スピン鎖について、有限サイズスケールリングからその普遍的性質を明らかにする。まず解析的に相関関数とエネルギースペクトルを計算した結果を述べ、非エルミート XXZ スピン鎖が複素朝永 Luttinger パラメータによって特徴付けられる普遍性クラスに属していることを示す。また、非エルミート系に一般化された密度行列繰り込み群を用いて数値計算を行った結果を述べ、上で求めた解析的な結果を再現する数値的証拠を示す。

**[9] ランダムスピンの解析における1次元 Branching MERA 状態の有用性検証と最適化手法の高度化**  
渡辺 亮/大阪大学基礎工学研究科システム創成専攻 電子光領域 量子コンピューター研究室

テンソルネットワーク状態の一種である MERA はそれを構成する各テンソルのユニタリ性より、その量子回路表現が容易に理解できるため、物性分野と量子計算分野の両面から注目されている。本講演では、1次元 Branching MERA を非一様なランダムスピンの基底状態探索に適用した結果、MERA で利用される従来の最適化手続きが容易に局所最適解にトラップされることを発見したのでこれを報告するとともに、当該トラップを回避するための最適化手続きの高度化内容について紹介する。

**[10] 次回計算物理スクール運営メンバー募集！**  
世話人一同

**[11] 第一原理計算による磁気相互作用を用いた有限波数を含む磁気構造決定手法の開発**  
有本 勝洋/東北大学大学院理学研究科物理学専攻 物性理論研究室 是常グループ

物質の磁気構造はその結晶構造や組成に深く結びついており、さまざまな興味深い物理現象を誘起する。このような物質の個性に基づく磁気構造の統一的な理解や予測には、スピン密度汎関数理論(SDFT)に基づく磁性体の第一原理計算が強力な手法となる。その1つに、ある磁気構造の仮定のもとで、磁気モーメントを微小回転させたときのエネルギー変化から交換相互作用定数を評価するLichtensteinの理論が存在する。最近、この理論をWannier軌道基底の強束縛モデルの下で実装する道筋が提案され、化合物を含む多くの物質への適用が可能となった。Lichtensteinの理論では、必ずしも得られた交換相互作用定数が最初に仮定した磁気構造と整合する保証はない。そこで我々は、強磁性構造の仮定の下で複数の単位格子にわたる有限波数の交換相互作用定数の値をLichtensteinの理論により求め、有限波数まで考慮した磁気構造の決定手法を開発した。本発表では、実験的な磁気構造データベース上の磁性体に対し本手法を網羅的に適用した結果と、複数の単位格子にわたる有限波数の磁気構造を探索した結果を報告する。

**[12] プラズモニック量子非線形ホール効果の理論**  
兔子尾 理貴/京都大学

本研究では、電子流体力学の理論を応用し、量子幾何学的な効果と表面プラズモンとの相関について詳しい解析を行った。具体的には、プラズモン共鳴と周期プラズモニック構造に伴う近接場効果によって、量子非線形ホール効果が非常に広い周波数領域に渡って劇的に増強されることを理論的に示した。さらに、我々はより一般的な状況下において、Berry曲率双極子由来の光電流と光吸収エネルギーとの間に普遍的な関係式が成り立つことを明らかにした。以上の結果は量子非線形ホール効果に基づく光電デバイスに関して明確な設計指針を与えてくれる。

**[13] 高輝度 LHC-ATLAS 実験 TGC 前段回路の量産後試験に向けた SoC デバイスを活用したコンパクトな DAQ システムの実装**

成川 佳史/ICEPP 東京大学素粒子物理国際研究センター

2029 年から始まる高輝度 LHC-ATLAS 実験に向けて刷新される、TGC 検出器前段回路の量産された各個体に対して行う品質保証試験システムの設計と実装を行なった。全ての試験を CPU と FPGA が一体となった Zynq SoC デバイスを搭載したハイスpek回路から実行する革新的な設計を行なった。ボード上に駆動させた Ubuntu から、前段回路上の各素子へシームレスにアクセスする汎用的システムを開発し、コンパクトかつ自由度の大きな試験システムを作り上げたのでこれを報告する。

**[14] 機械学習による DFT 汎関数の構築**

永井 瞭/東京大学物性研究所

本ポスター発表では、機械学習を用いた、Kohn-Sham DFT の self-consistent field 計算に適用可能な交換相関汎関数の構築方法を紹介する。この手法では、実際の物質に対して高精度波動関数法を用いてエネルギー及び電子密度を生成し、それを教師データとして用いる。ニューラルネットワーク (NN) を用いて semi-local な形式の汎関数を訓練する。この NN 汎関数は実際の DFT ソフトウェア上で動作可能であり、さまざまな物質に適用した際の精度を述べる。

**[15] アルカリ超酸化物の強結合有効モデルとスピン軌道秩序**

柴田 康平/岡山大学自然科学研究科量子多体物理学研究室

アルカリ超酸化物は酸素分子の p 電子がスピンと軌道の自由度を持つ強相関物質である。特に CsO<sub>2</sub> は約 70K 以下の温度で 1 次元磁性を示すが、その温度での構造転移は実験で確認されておらず、相転移の種類と原因が研究されている。我々は、低次元磁性の現れる原因として軌道秩序が重要と考えている。本講演では、2 軌道ハバードモデルの強結合有効ハミルトニアンを導出し、そのモデルにおける軌道秩序の平均場計算を行った結果を報告する。

**[16] 表面符号のシンドローム測定に基づくエラーモデル推定**

小堀 拓生/東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

量子誤り訂正符号では、様々な復号のアルゴリズムが提案されている。その中でエラーモデルが明らかになっているとエラー訂正の精度が向上することが報告されており、正確なエラーモデルの推定は量子誤り訂正において重要である。今発表ではそのエラーモデル推定をシンドローム測定の結果を用いたモンテカルロ法の手法によって特定のモデルにおいて実現したことをテンソルネットワークを用いた表面符号のシミュレーションによって実証したことについて説明する。

### [17] 非調和フォノン理論を用いた有限温度における結晶構造の第一原理計算

増木 亮太/東大物理工学専攻

結晶構造は物性を決める基本的な要素であり、その計算にはDFTに基づいた構造最適化が用いられる。一方で、結晶構造の温度依存性は構造相転移、熱膨張、焦電効果などの興味深い現象を引き起こし、こうした現象の記述には、通常の構造最適化で無視されている格子振動の効果を取り込むことが必要である。本発表では、非調和フォノン理論を用いて効率的に有限温度の結晶構造を求める計算手法の開発と、BaTiO<sub>3</sub>の逐次構造相転移を中心とした応用について説明する。

### [18] Snapshot データを用いた確率的最適輸送理論に基づく集団ダイナミクスの平均場モデル推定

越塚 毅/東京大学情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻

大規模集団ダイナミクスの解析における大きな困難の一つは、実験コストや計測の制約により、定点観測から粗い時間間隔のスナップショットデータしか得られないことである。この制約のもとで、集団ダイナミクスの平均場SDEモデルを学習し、シュミレーションを可能にした。さらに、系の事前知識を利用するため、事前知識から設計したラグランジアンによる変分原理に従うダイナミクスを学習可能な手法を提案した。実験では、単細胞集団のダイナミクスや群衆シミュレーション、意見ダイナミクスの誘導に応用可能であることを示した。

### [19] 多体系に適用可能な量子マスター方程式を用いたエネルギー流の解析

牛原 啓/東京大学 理学系研究科 物理学専攻 辻研究室

外部と相互作用する量子多体系(開放量子多体系)は、一般に非平衡状態にあり、平衡状態で見られるものとは異なる物性を示すことが期待される。開放量子系の研究では、GKSL方程式と呼ばれる方程式が用いられることが多いが、この方程式を導く際の一部の近似は多体系に適用できないことが指摘されている。本研究では、そのような近似を必要としない量子マスター方程式を用いて、外部系の温度差に駆動されるエネルギー流の解析を行った。

### [20] Topological Charge Pumping in a Quasicrystal

吉井 真央/東京大学大学院

周期性の破れた系である準周期系は周期系とも乱雑系とも異なる挙動を示すため、物性を深く理解するための重要な役割を担っている。本研究では周期系で用いられてきたトポロジカル電荷輸送の模型から、フラクタル性を持つ模型を作成した。本発表では、この模型において、フラクタルなトポロジカル電荷輸送が生じることを紹介する。

### [21] 荷電粒子衝突のための相互作用ポテンシャルの開発と、二体衝突近似計算への適用

戸田 悠斗/総合研究大学院大学

プラズマ - 物質相互作用の研究は、古くから二体衝突近似や分子動力学といったシミュレーション手法を用いて行われてきた。しかしそれらのシミュレーションの多くは、実際にプラズマから入射するのはイオンであるにもかかわらず、入射粒子を中性原子として扱ってきた。本研究ではイオン - 中性原子間相互作用ポテンシャルを開発し、これを二体衝突近似計算に適用することで、入射粒子をイオンとして扱ったプラズマ - 物質相互作用シミュレーションを可能とすることに成功した。

### [22] 久保公式のベクトル並列化による高速電気伝導度計算

矢作 裕太/日本電気株式会社

久保公式は物質の線形応答を量子論的に記述する評価式であり、電気伝導度の第一原理計算において広く用いられている手法である。一方、実際の数値計算においては久保公式は計算コストが比較的高いためハイスループット計算の際の律速要因になることが多く、HPC 技術を活用した高速化が求められている。本公演では久保公式をベクトル並列化することにより、物質の電気伝導度をベクトル計算機上で高速に評価できる手法を提案する。

### [23] Decoupling with random Clifford circuits

田宮 志郎/東京大学大学院工学系研究科

デカップリングは、量子誤り訂正符号、ブラックホールの情報喪失問題などの多様な物理現象を説明可能とする概念である。全結合性を持つ random Clifford circuits (RQC) は回路深さ  $O(\log^3(N))$  でデカップリングを達成することが知られているが、デカップリングに至るダイナミクスの理解は限られている。本研究では、デカップリングを数値的に評価する手法を確立し、最近接結合 RQC において深さ  $O(\log(N))$  でデカップリングに到達することを明らかにした。

### [24] 機械学習で探る Froggatt-Nielsen 模型のフレーバー構造

西村 皐/九州大学

Froggatt-Nielsen 模型は物質粒子の質量階層性とフレーバー混合の特徴を説明する枠組みであるが、実験値に適合するパラメータの総当たりの探索には困難を伴う。我々はこの問題に対して機械学習の応用を考え、Froggatt-Nielsen 模型のパラメータ空間を探索対象とした強化学習に基づくアルゴリズムを構築した。この試みを通じて、クォーク・レプトンの質量およびフレーバー混合を同時に再現するようなパラメータの組を効率的に発見すると共に、レプトンセクターの CP 対称性が有意に破れることを示した。



## [25] 光渦による超伝導の光学応答と Higgs モード

長戸 紘也/大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻藤本水島研究室

超伝導での素励起として Bogoliubov 準粒子と Higgs mode が知られています。Higgs mode はクーパー対の集団励起ですが、その観測は容易ではありません。Higgs mode は空間反転対称性により線形結合が禁止されていることから、準粒子励起に比べて寄与がとても小さくなります。そこで私の研究では空間反転対称性を破るようなレーザーである光渦を使うことで Higgs mode の線形結合を実現し、そのスペクトルを見ることを理論面から目指します。

## [26] DFT and DMFT study of magnetism of ternary chromium tellurides under pressure

XU Hanxiang/RIIS, Okayama University

For a long time, the long-range ferromagnetism had been believed to hardly survive in two-dimensional systems, but recently ferromagnetic monolayers have been prepared by exfoliation of a number of van der Waals crystals, for example  $\text{CrGeTe}_3$  and  $\text{CrSiTe}_3$ .

Furthermore, superconductivity was found in compressed  $\text{CrSiTe}_3$ , and a pressure induced insulator to metal transition is observed in  $\text{CrGeTe}_3$ .

We try to understand some of these observations theoretically.

In this study, we analyze the electronic structures of these ternary chromium tellurides along pressure by using density functional theory (DFT) as a starting point.

Moreover, by using DFT with GGA+U and considering exchange couplings of Cr in the honeycomb lattice we calculate the Curie-Weiss temperature and the charge gap, which can be compared with the experimental phase diagram.

We also employ DFT + dynamical mean-field theory (DMFT), which is a powerful method to investigate strongly correlated electron systems. We search for the insulator-metal transition as function of pressure and we try to understand the ferromagnetic state of  $\text{CrGeTe}_3$ .

In the search for the ferromagnetic insulating state of  $\text{CrGeTe}_3$ , it is necessary to consider the contribution of both Cr 3d and Te 5p orbitals and also their interplay.

## [27] エネルギー保存則の存在下における散乱過程を用いた量子操作の精度限界

勝部 瞭太/東北大学大学院

量子操作の精度を向上させることは量子計算や量子通信といった工学面だけでなく、重力波観測などの基礎物理学においても重要である。しかし保存則がある場合は物理的に実現できるユニタリー操作や量子測定に制約がつくことが Wigner-Araki-Yanase の定理 (WAY 定理) として知られている。今回は小澤正直氏、堀田昌寛氏との共同研究の結果である、エネルギー保存則を満たす散乱過程を用いた量子測定の測定誤差の下限や、散乱過程を用いた SWAP ゲート、2 量子ビット制御ユニタリーゲートの実装精度の上限を紹介する。

参考文献 R. Katsube, M. Ozawa, and M. Hotta, arXiv:2211.13433 (2022).

**[28]  $\pi$  共役分子集合体の励起状態に対する波動関数理論の開発**

西尾 宗一郎/京都大学大学院理学研究科化学専攻

エネルギー変換などの光物性を発現させる  $\pi$  共役分子材料の設計には、励起準位や透熱カップリングをパラメータとした量子ダイナミクス計算によるシミュレーションが有効である。これまでに発表者らは分子集合体の CAS 波動関数に Low-rank 近似を用い、効率良い励起状態計算が可能な波動関数モデル (Vector Product State, VPS 波動関数) を開発した。また VPS 波動関数を用いた CASSCF 法 (VPS-CASSCF 法) および CASPT2 法 (VPS-CASPT2 法) を開発し、加えてこれらの計算で得られる有効ハミルトニアンから簡便に励起状態間の透熱カップリングを計算する手法を開発した。

**[29] 改良されたモデルに依存しないパイ中間子電荷半径の解析**

佐藤 航平/筑波大数理 素粒子理論

格子 QCD における荷電半径の計算法に関する基礎研究について発表する。近年提案されたモデルに依存すること無くパイ中間子荷電半径を直接計算する手法 (Phys. Rev. D **101**, 051502 (R) (2020)) の問題点とその改良方法を議論する。そして、より改良した我々の手法 (arXiv:2212.00207 [hep-lat]) とオリジナルの手法を比較した結果を報告する。

**[30] 非エルミート系における非正規性増強現象**

中井 雄介/京都大学

本ポスター発表では非エルミート表皮効果の 2 つの性質に基づき、非正規性の強さを測る量を 2 つ導入することで、表皮効果が生じているとき開放端境界条件下におけるハミルトニアンの非正規性の強さが増強することを示す。更にこの非正規性増強の性質に着目することで、非エルミート表皮効果の有無に関する転移点を正確に検出できることを具体的な模型を用いることで確かめる。

**[31] ボーズ粒子動的平均場理論を用いた励起子描像による LaCoO<sub>3</sub> のスピン転移の理論研究**

岡内 孝樹/大阪公立大学工学域電気電子系学類

LaCoO<sub>3</sub> では低スピンと中間スピン、高スピンの 3 つのスピン状態が準縮退しており、温度変化に伴ってスピン転移が起こる。単純な熱励起描像ではこの転移を十分に説明できず、その微視的起源は 1960 年代からの未解明問題として現在も盛んに研究されている。ごく最近、3 つのスピン状態を遍歴励起子の集団運動として捉え直す新しい「励起子描像」が提案された。本研究では、この描像を基にして、ボゾン型動的平均場理論を用いた量子多体計算から、LaCoO<sub>3</sub> のスピン転移の微視的機構を解明することを目指す。

**[32] 線形応答理論に基づく輸送係数計算**

滑川 翔太/東北大物理学専攻物性理論研究室

輸送係数を求める手法としてボルツマン方程式に基づく方法と線形応答理論に基づく方法が存在し、後者は前者より広い適用範囲を持つ。線形応答理論では相関関数を解析接続することによって輸送係数を求めることができる。これを解析的に行うにはダイアグラムを評価する必要があるが、安定して数値的な解析接続を行う方法が存在すれば難解なダイアグラムの評価を避けることができる。そこで本研究ではネヴァンリンナ解析接続の手法を用いた安定した解析接続の方法を提案し実証する。

**[33] データ同化手法による結晶構造同定**

久保 祐貴/東京大学大学院理学系研究科物理学専攻常行研究室

複数の未知構造からなる粉末 X 線回折 (XRD) データは、構造決定だけでなく格子定数の決定さえも困難な場合が数多くある。そこで我々は XRD データ同化手法を分子動力学計算と組み合わせ、未知構造の結晶成長を加速することで複数相の構造を同時に決定する手法を開発している。本発表では、この手法を炭素やシリカの結晶多形が混在する XRD データに適用した結果について議論する。

**[34] 量子アニーリングを用いた自己学習モンテカルロ法**

宮本 誠也/東北大大学院 情報科学研究科 応用情報科学専攻

マルコフ連鎖モンテカルロ法は確率分布のサンプリング手法の一種である。これはあらゆる系に汎用的に使用することができる反面、相転移を持つ系において臨界点付近では一般的に効率のよいアルゴリズムは確立されていない問題がある。本研究では、問題設定としてイジングモデルを考え、自己学習モンテカルロ法を使ったグローバルアップデートにおいて量子アニーリングマシンを用いて、サンプリングの効率にどの程度寄与するかについて紹介する。

**[35] Numerical study of magnetoelectric properties for skyrmion crystals**

山田 美都理/ETH Zürich, University of Tokyo

The magnetic skyrmion, a topologically non-trivial and stable spin texture, is known to exhibit intriguing properties such as the topological Hall effect. In this study, we theoretically investigate the magnetoelectric effect on skyrmion crystals in insulating magnets. Computing the electric polarization arising from the magnetostriction mechanism by classical Monte Carlo simulation for a 2D spin model with the Dzyaloshinskii-Moriya interaction and spin anisotropy under a magnetic field, we show the temperature dependences of the spatial distribution of local polarizations and the dielectric constant for a variety of magnetic phases, including the skyrmion crystal. Our study will be extended to other topological spin textures such as 3D magnetic hedgehog crystals.

### [36] レプリカ交換の手法を用いたアルゴリズムと行列模型

菅野 聡/筑波大学素粒子論

レプリカ交換の手法を用いたアルゴリズム(レプリカ交換モンテカルロ法やシュミレーテッドアニーリングなど)は極小解が存在する最小化問題に有用である。しかし、極小解の構造が豊かになると通常アルゴリズムでは計算に時間がかかり、更なる効率化が求められる。本発表では、各レプリカで異なる作用を準備することで、効率的に最小化が実行出来ることを示す。この手法により、行列模型の配位に対応する幾何をより明確に決定できると期待される。

### [37] グラフ理論に基づいた Lattice fermion と Laplacian operator としての Wilson term

湯本 純/秋田大学

格子場の理論においてフェルミオンのダブリング問題という難問が存在し、周期的境界条件を課した  $D$  次元格子場において最大で  $2^D$  個の species が出現することが知られており、Wilson term を加えることによって物理的な species を抽出することができる。本発表では格子理論をグラフ理論の言葉で焼き直すことで出現する species の個数と Wilson term によって分離される物理的な species の数学的意味を与え、今後の展望について考察する。

### [38] グラフェン吸着リンカー分子の DFT-RISM 計算

大石 泰弘/大阪大学基礎工学研究科

多層グラフェン基板に導入した抗原を弾性波により捉える振動子バイオセンサーは、応答速度と感度の点で従来のセンサーを超える可能性を秘めている。抗原を検出するには抗体を基板に固定する必要があるが、抗原の検出感度は抗体と基板を繋ぐリンカー分子 PASE に依存する。本研究では、真空や溶液といった環境依存性を考慮し、PASE の単層グラフェン上の吸着機構を理論計算により解析し、振動子バイオセンサーの感度を向上させる方法を提案した。

### [39] 双極子モーメントの機械学習モデルによる誘電特性の研究

天野 智仁/東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

5G・6G 材料の開発を見据え、ギガ〜テラヘルツ帯での誘電関数を精確に計算する必要性が高まっている。誘電特性の精度良い計算するためには、単純な経験点電荷を使った双極子モーメントの計算では不十分なことが知られている。一方で、第一原理分子動力学法による計算は計算コストが高く、長時間の計算が必要なギガヘルツ・テラヘルツ帯の誘電特性シミュレーションには課題が残る。そこで我々はワニエ関数をベースとした双極子モーメントの予測モデルを作成し、誘電関数の計算を行った。

#### [40] 円偏光誘起トポロジカル超伝導の時間発展シミュレーション

阿南 宇紘/東京大学工学系研究科物理工学専攻

グラフェンを始めとして円偏光を照射した系のトポロジカルな性質の解析に Floquet 理論が多く用いられてきた。近年、銅酸化物高温超伝導体に円偏光を照射した系に Floquet 理論が適用され、高周波領域ではトポロジカル超伝導となることが示された (S. Kitamura et al, 2022)。そこで本研究では実験的に重要な低周波領域での解析を目指して、円偏光照射された銅酸化物高温超伝導体の時間発展シミュレーションを行った。

#### [41] 2 成分 Bose-Hubbard 模型における相対論的量子液滴

藪内 雄大/近畿大学 量子多体物理学研究室

ごく最近の研究で、2 成分 Bose-Hubbard 模型 (BHM) の一次の量子転移点直上で量子液滴を安定化させる提案がなされた。本研究の目的は、2 成分 BHM においてある条件下で現れる相対論的な超流動量子液滴に関する新奇物性を開拓することである。本発表では、まず BHM の分配関数から相転移点近傍での超流動秩序変数の運動方程式の導出をさらい、一様解からの集団励起を例に相対論的、非相対論的性質の違いを議論する。その後相対論的量子液滴の集団励起の計算を示す。

#### [42] 系 - 熱浴モデルに基づく水の分子間振動および分子内振動に対する多次元振動分光のモデルシミュレーション

高橋 秀顕/京都大学

分子間振動モードと分子内振動モードのカップリングを観測可能な新たな分光法として 2 次元赤外 - ラマン分光法が提案されている。しかし、2 次元赤外 - ラマン分光法の理論計算においては古典的な MD シミュレーションやモデル計算しか行われておらず、量子効果を含めた正確なスペクトルの予測や理論的な解析ができていない。本研究では、開放量子系の枠組みに基づき量子的なモデルシミュレーションのための計算手法を構築し、スペクトルの解析を行った。

#### [43] 自動微分によるハミルトニアン逆設計を用いたスキルミオン結晶の探索

沖上 和希/東京大学

渦状のスピン構造をもつ磁気スキルミオン結晶は、非自明な応答現象を示すことから注目を集めている。我々は自動微分を用いて所望の物理量を最大化するようなハミルトニアンを逆設計する手法を用い、磁気フラストレーションに基づいた磁気スキルミオン結晶の新しい発現可能性を探索した。その結果、遠距離相互作用を用いて三角格子における 6 回対称な異方性を最大化することが重要であることを明らかにした。

[44] 保存則を利用したランダム量子回路計算の高速化と測定誘起臨界性

大島 久典/東京大学

射影測定を受けながら発展する純粋状態は測定誘起エンタングルメント相転移と呼ばれる非平衡相転移を示し、その転移点では共形不変性が創発する。本発表では、 $U(1)$  チャージが保存する量子回路での測定誘起臨界性を議論する。この場合、量子系の計算コストを系のサイズ  $L$  と総チャージ  $N$  の二項係数  $(L, N)$  にまで減じられる。そのような数値計算により、非従来型の測定誘起相転移が確認され、その臨界性が朝永-Luttinger 液体理論に従うことが判った。

[45] 密度汎関数理論計算と対称性指標理論によるトポロジカル・ノーダル超伝導判定手法

小野 清志郎/東京大学

超伝導体のトポロジーと超伝導ノード構造を理解することが、ペアリング対称性に関する有用な情報を与える。本研究では、近年発達した対称性指標理論の考えに基づいて、超伝導体のトポロジカルな性質を簡便に判定する手法を概略するとともに、密度汎関数理論計算と組み合わせた物質への応用法を紹介する。

[46] 反強磁性体における X 線磁気円二色性

栗田 謙亮/東北大学

X 線磁気円二色性は磁気モーメントを定量的に見積もることが可能な実験手法であり、強磁性体に対し広く用いられている。本発表では、第一原理計算を用いて、正味の磁化がない反強磁性体  $Mn_3Sn$  等でも X 線磁気円二色性が表れることとその起源について述べる。

[47] ノーダルライン半金属における軌道常磁性—反磁性異方性

尾崎 壮駿/東京大学理学系研究科

ディラック電子やノーダルライン半金属などのトポロジカル関連物質において特徴的な磁気応答が見られることが、理論・実験の両面から明らかになりつつある。本研究では、ノーダルライン上でノード点のエネルギーが変化するノーダルライン半金属の模型を考え、軌道帯磁率を調べた。その結果、磁場がノーダルライン面について面直の場合には軌道常磁性、面内の場合には軌道反磁性が現れることがわかった。ノーダルライン半金属  $ZrSiS$  において類似した振る舞いが報告されており、この物質との関連についても議論する。

[48] **ベイズ推論による X 線スペクトル解析**  
柏村 周平/東京大学理学系研究科物理学専攻

観測されたマルチピークスペクトルを個々のピークに分離する解析（スペクトル分解）は物性科学、宇宙物理、地球惑星科学、生物科学など様々な需要がある。スペクトル分解のナイブな手法としては、ガウス関数のようなピーク関数の線形和を最小二乗法でデータにフィットさせる解析が考えられる。この解析は、1) 局所最適解、2) モデル選択の恣意性、3) ノイズモデルの妥当性、という 3 つの問題を含む。本発表では、ベイズ推論と交換モンテカルロ法によりこれらの問題に対処した例を示す。

[49] **ニューラル構造場の導入とその結晶構造オートエンコーダーへの応用**  
五十嵐 亮/オムロンサイニックス株式会社

結晶構造のニューラルネットワークによる表現は、結晶構造推定を含む様々な機械学習応用のために重要である。そのため、我々は、ニューラル構造場 (NeSF; Neural Structure Field) を、結晶構造のニューラルネットワーク表現のための方法として提案する。NeSF は物理におけるベクトル場の考え方とコンピュータービジョン/コンピューターグラフィックスのニューラル陰関数表現から着想を得たもので、結晶構造を原子の集合としてではなく連続場として表現する。NeSF はこれまでの離散的な空間表現と異なり、空間解像度と計算の複雑性の間のトレードオフに悩まされず、原理的にどんな結晶構造でも表現できる。我々は、NeSF のオートエンコーダ（自己符号化器）を実装し、ペロブスカイト、銅酸化物超伝導体などの幅広い結晶構造についても、うまく再構成できることを報告する。

[50] **環境との結合に対する SPT 相の安定性**  
増井 陸/京大基研

1 次元量子系においてスピン 1 の Heisenberg 模型や AKLT 模型が属する Haldane 相は対称性に保護されたトポロジカル相 (Symmetry-Protected Topological phase, SPT 相) の典型的な例であり、系の内部対称性に起因する非局所的な秩序変数によって自明相と識別することが出来る。本発表では Haldane 相に属する系を環境と結合させた場合の SPT 相の安定性を数値計算結果と共に議論する。

[51] **量子開放系の緩和現象における凍結の理論的研究**  
Juan Pablo Bayona Pena/京都大学大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻

本研究では、マルコフ熱浴に結合した、相互作用している 2 つのフェルミオンからなる簡単な系で、ダイナミクスを解析する。系のダイナミクスは、第一原理から導かれ、リンドブラッド形の量子マスター方程式に従う。その結果、フェルミオンの平均粒子数の時間発展について、強結合かつ高温領域で、ハミルトニアンのパラメータ変化にロバストな 2 段階緩和を示す。

## [52] GPU による 2 次元 MERA の変分最適化の加速

真鍋 秀隆/京都大学情報学研究科

絶対零度近傍において磁場や圧力などのパラメータを変化させたとき量子ゆらぎにより物質の秩序状態が切り替わることがあり、この現象を量子相転移という。量子相転移を調べるための計算手法の一つとしてテンソルネットワーク法を用いた変分最適化があり、特に MERA (Multi-scale entanglement renormalization ansatz) は臨界点付近の量子多体系の基底状態をよく表現すると期待されている。

2 次元格子上に定義された MERA の評価は計算量的に非常に重い、GPU を用いることでその計算を加速することができる。本研究では、GPU によるテンソル積演算と自動微分・多様体最適化を組み合わせて高速に 2 次元 MERA の最適化を実行する。その際、テンソルネットワークの縮約順やスライシングによる問題のサブタスクへの分割の最適化なども組み合わせることで、テンソルネットワークの縮約計算の更なる自動化・高速化を図る。

## [53] 四重ペロブスカイト酸化物 $\text{ACu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$ の金属絶縁体転移

山口 達也/大阪公立大学工学研究科

四重ペロブスカイト酸化物  $\text{ACu}_3\text{Fe}_4\text{O}_{12}$  は A イオンの価数・半径に依存して、2 種類の異なる金属絶縁体転移を起こす。始めに、A イオンを Ca と La で置換した場合の絶縁化機構の違いについて、局所密度近似 (LDA) に電子相関効果を取り込んだ計算手法である LDA+U 法、及び LDA+動的平均場理論を用いたバンド計算の結果から明らかにする。その後、A サイトを 3 価ランタノイドで置換した場合に実現する磁気秩序について議論する。

## [54] クラスタ型量子不純物問題に対するコンパクトな変分量子回路

櫻井 理人/埼玉大学

動的平均場理論は、固体中の電子相関効果を非摂動的に扱う手法である。この手法の計算上のボトルネックは、量子不純物問題を数値的に解く部分にある。近年 この量子不純物問題を多項式時間で解く方法として、近未来の量子計算機向けのアルゴリズムである変分量子固有値法に基づく手法が注目を集めている。このアプローチの課題の 1 つは、変分パラメータが多軌道系で急速に増大する点である。本研究では、量子不純物問題のバスサイト間の構造に着目することで変分パラメータの削減を行う新しい量子回路を提案する。提案した量子回路を用いて、2 軌道のクラスタ型量子不純物問題の基底状態を精度良く計算できることを確かめた。またスペクトルモーメント法を用いた 1 粒子励起スペクトルの計算結果も紹介する予定である。

## [55] Using Machine Learning for detecting Gravitational-Wave signals from compact binaries

Suyog Garg/The University of Tokyo

Machine Learning has been increasingly explored as a Gravitational-Wave detection method. We present some preliminary results on using Convolutional Neural Networks for GW signals from NSBH and Eccentric Compact Binaries.



[56] 学術変革領域研究 B「量子古典融合アルゴリズムが拓く計算物質科学」の紹介  
品岡 寛/埼玉大学