

令和 6 年 6 月 18 日現在

機関番号：15301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01041

研究課題名(和文)物質設計を見据えた強相関理論の構築

研究課題名(英文)Development of theories for strongly correlated materials design

研究代表者

大槻 純也(Otsuki, Junya)

岡山大学・異分野基礎科学研究所・准教授

研究者番号：60513877

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,500,000円

研究成果の概要(和文)：遷移金属や希土類元素などを含む強相関化合物では、保磁力の高い永久磁石や高温超伝導など、実用的に有用な様々な機能物性が発現する。計算によりそれらの性質を再現・予測することができれば、物質開発が効率的になると期待されるが、電子間の強い相互作用(量子多体効果)を扱うことの難しさから、実用的なレベルには至っていない。本研究では、強相関化合物で観測される相転移のひとつである「多極子秩序」に注目した。密度汎関数理論による第一原理計算と動的平均場法による量子多体計算を組み合わせることで、実際の化合物における多極子秩序を再現することに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

多極子秩序は、希土類化合物において多く見出されている秩序状態であるが、そのエネルギースケールの小ささと多体効果の扱いの難しさから、第一原理計算により導出することが困難であった。本研究により、動的平均場法を用いて多極子秩序の第一原理計算が可能であることが示された。このことは、希土類化合物における様々な秩序状態を第一原理計算により扱える可能性を示している。この計算法をより洗練させることで、有用な機能を持つ物質を計算によって見つけ出す物質開発への応用も期待される。特に、希土類元素は有用な磁性材料であることから、磁性物質の開発への応用も期待される。

研究成果の概要(英文)：Strongly correlated electron materials containing transition metals and/or rare earth elements exhibit various functional properties that are useful in practical applications, such as permanent magnets with high coercivity and high-temperature superconductivity. Although it is expected that the development of materials will become more efficient if these properties can be reproduced and predicted by calculations, they have not yet reached a practical level due to the difficulty in dealing with strong interactions between electrons (quantum many-body effect). In this study, we focus on "multipole ordering," which is one of the phase transitions observed in strongly correlated materials. By combining first-principles calculations based on density functional theory and quantum many-body calculations based on the dynamical mean-field method, we succeeded in reproducing multipole ordering in actual compounds.

研究分野：物性理論

キーワード：強相関電子系 計算物質科学 磁性 多極子秩序 第一原理計算 動的平均場理論

1. 研究開始当初の背景

遷移金属や希土類元素などを含む強相関化合物では、多数の電子がクーロン斥力によって強く相互作用しあうことで、保磁力の高い永久磁石や高温超伝導など、実用的に有用な様々な機能物性が発現する。通常、新しい化合物は発見的な方法により開発されるが、有用な機能物性を示す化合物を設計し自在に作り出すことは物性物理学における究極の目標である。

未知の物質の機能を知るには、コンピュータを有効活用する計算物質科学が重要なアプローチとなる。特に最近では、データ科学や機械学習を応用する研究も著しく発展している。例えば、機械学習による「予測」の能力を利用して、無数の元素の組み合わせから有力候補を絞るマテリアルズインフォマティクスは一定の成果を挙げ始めている。また、有力候補の探索だけでなく、望みの機能物性を発現する化合物を理論的に作り出す「物質設計」も視野に入ってきている。

機械学習を利用した物質設計では、学習に使うデータの量が結果の成否を大きく左右する。化合物の実測値だけではデータ量が十分でないため、しばしば第一原理計算によってデータ量の不足を補い、機械学習による推測を行う。このアプローチは、第一原理計算の結果が信頼できることが大前提である。しかしながら、強相関化合物では、電子間相互作用による「量子多体効果」が顕著なため、通常密度汎関数理論 (DFT) を用いた第一原理計算では、物性を十分に記述できない。また、近年発展している、強相関モデル計算と DFT 計算を融合した化合物計算は、磁性や超伝導などの記述に成功しているものの、大規模計算を要し、網羅的な計算には堪えない。データ科学的アプローチの生命線である大規模データ生成にも応用可能な、精度と実用性を兼ね備えた強相関化合物の第一原理計算法の実現が課題となっていた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、強相関化合物における磁性や超伝導などの機能物性を第一原理的に記述する実用的な理論を構築し、強相関物質設計の実現に向けた基礎を作ることである。それにより、これまで「非」強相関化合物が中心であった物質設計などのデータ科学的アプローチの対象を、強相関化合物を含む広範な物質群へと広げ、強相関に起因する有用な機能物性を実現する物質開発の新たな道を開拓することを目指す。

3. 研究の方法

DFT 計算によって得られる電子構造を出発点とし、動的平均場理論 (DMFT) により量子多体効果を取り入れる「DFT+DMFT」法は、強相関化合物の電子状態計算において成功を収めている。この枠組みで磁性や超伝導などの相転移を議論するためには、感受率などの二体相関関数の計算が必要となる。我々のこれまでの研究で、二体相関関数の計算過程において大規模計算を要していた方程式を見直すことで、感受率を簡単に得る公式 (SCL 公式) を導出した。この公式により多軌道系のスピン・軌道感受率における計算量的困難が解決され、質と量を両立した磁気秩序・軌道秩序の転移温度の計算が可能となる。DFT+DMFT 法を実際の化合物に応用し、相転移や各種物理量を検証していく。

4. 研究成果

(1) 4f 電子を含む希土類化合物は、4f 電子の軌道角運動量 $L=3$ と強いスピン・軌道結合に起因した多極子の自由度を持ち、低温で様々な相転移を示す。実際に観測される多極子秩序は、転移温度が 1~10 ケルビン程度と小さく、また、多体効果が重要であるため、第一原理計算によって導出することは難しい。本研究では、多極子秩序の研究でもっともよく調べられている 4f 電子系化合物 CeB_6 を対象として、DFT+DMFT 法を適用し多極子感受率および多極子相互作用の計算を実行した。第一原理計算による電子構造と 4f 電子の軌道自由度を正確に考慮し、相互作用には回転対称性のあるスレーター型の相互作用を用いることで、結晶の対称性を満たすように注意して多体効果を扱った。これにより、対称性から許される全ての多極子感受率および多極子相互作用を得た。

その結果、実際の CeB_6 で観測されている反強四極子秩序を再現することに成功した。我々が考案したスピン・軌道感受率の簡易計算公式 (SCL 公式) を用いることで、従来方法では計算の難しい低温 (100K 以下) の計算も実行し、実験と同程度の転移温度 (数ケルビン) を得ることができた [1]。また、この最終的な結果を得る過程において、DFT 計算と DMFT 計算による相互作用の重複を取り除く double counting correction を扱う処方箋を確立した。この成果は、今後、DFT+DMFT 法を様々な f 電子系化合物に応用していく際に重要な指針となるものである。

(2) DFT+DMFT 法を含む量子多体計算では、多くの場合、松原グリーン関数が用いられる。松原グリーン関数では、統計力学における熱平均を表現するために虚時間形式が使用されている。この形式では、物理量の計算において虚時間をフーリエ変換した虚振動数 (松原振動数) に関する和を計算する必要があり、そのため、低温における数値計算が困難になるという問題がある。我々は、虚時間と通常の実時間の間を結ぶ中間表現 (IR) と呼ばれる直交基底を考案した。この

基底を用いることで松原グリーン関数の持つ情報を保ったままコンパクトに表現することができる。さらに、スパースサンプリングというテクニックを使うことで、コンパクトな表現を用いて量子多体問題に表れる方程式を解くこともできる。これは、従来の方法では困難であった低温における量子多体計算を可能とするものである。この直交基底の生成や各種演算に必要なプログラムをまとめたライブラリ sparse-ir を公開した [2]。これにより、IR 基底を利用した計算を誰でも簡単に行うことができるようになった。

(3) クラスタ多極子感受率の定量計算

結晶の単位胞に磁性原子が 2 つ以上存在する場合には、それらをひとまとめにしたクラスタ多極子によって秩序状態を記述するのが便利である。第一原理計算に基づきクラスタ多極子の秩序状態を調べるために、DFT+DMFT 法で複数の原子が絡んだスピン・軌道感受率の定式化を行った。具体的には、まず、DFT+DMFT 法によりスピン・軌道・サイトのインデックスを 4 つ持つ感受率を計算する。これとは別に、MultiPie と呼ばれるソフトウェアを用いて結晶構造の情報からクラスタ多極子を含む多極子の完全基底を生成する。この完全基底を用いて DFT+DMFT 法で計算された感受率を基底変換することで、クラスタ多極子の感受率を得る。

クラスタ多極子感受率の応用として、CeCoSi という化合物に注目した。この化合物は非共型の空間群に属し、単位胞に 2 つの Ce 原子を持つ。これまでの実験研究から強的な四極子秩序が起こることがわかっているが、4f 電子の結晶場基底状態は四極子の自由度を持っておらず、この秩序の起源はわかっていない。この化合物に上記の方法を適用し、クラスタ多極子感受率を計算した。その結果、磁性の揺らぎが最も大きく、四極子の揺らぎは秩序が起こる程には大きくはならない結果が得られた。この結果は f 電子の遍歴性や結晶歪みの影響も考慮に入れたさらなる検討が必要であることを示唆している。

(4) アルカリ超酸素 AO_2 ($A=Cs, Rb, K$) は、酸素分子の π 軌道を占有する電子がスピンと軌道の自由度を持つ強相関電子系である。特に、 CsO_2 において、短距離相関の強い磁氣的振る舞いが観測されている。一方で、 KO_2 や RbO_2 ではそのような振る舞いは観測されていない。これらの化合物を特徴づける微視的なパラメータは何か、なぜ CsO_2 においてのみ特異な磁氣的性質が表れているかが謎であった。我々は、第一原理計算に基づき AO_2 におけるスピンと軌道の自由度を記述する有効模型を導出した。その結果、これらの化合物における電子状態を特徴づけるのは 2 次元的な幾何学的フラストレーションであると結論した。 CsO_2 においてフラストレーションが最も大きく、 RbO_2 や KO_2 ではフラストレーションが小さい。

平均場近似を用いて有効模型における相転移を調べ、この結果に基づき CsO_2 におけるスピン・軌道の秩序状態を提案した。軌道秩序によって、スピン相関における 2 次元的な幾何学的フラストレーションの効果が顕著になるという特徴がある。これは CsO_2 における特異な磁氣的性質の起源であると考えられる。この成果は Physical Review B 誌に掲載され、Editors' suggestion に選出された [3]。

<参考文献>

- [1] J. Otsuki, K. Yoshimi, H. Shinaoka, H. O. Jeschke, arXiv: 2209.10429 (Phys. Rev. B 誌に掲載決定済み).
- [2] M. Wallerberger et al., SoftwareX **21**, 101266 (2023).
- [3] K. Shibata, M. Naka, H. O. Jeschke, J. Otsuki, Phys. Rev. B **109**, 235115 (2024).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計46件（うち査読付論文 46件 / うち国際共著 13件 / うちオープンアクセス 16件）

1. 著者名 Shimizu Makoto, Otsuki Junya, Jeschke Harald O.	4. 巻 108
2. 論文標題 Magnetic fluctuations in Pb9Cu(P04)60	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L201105-1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.L201105	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Xu Han-Xiang, Shimizu Makoto, Guterding Daniel, Otsuki Junya, Jeschke Harald O.	4. 巻 108
2. 論文標題 Pressure evolution of electronic structure and magnetism in the layered van der Waals ferromagnet CrGeTe3	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125142-1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.125142	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Yoshimi Kazuyoshi, Misawa Takahiro, Tsumuraya Takao, Seo Hitoshi	4. 巻 131
2. 論文標題 Comprehensive ab initio investigation of the phase diagram of quasi-one-dimensional molecular solids	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 36401~36401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.131.036401	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kurita Kensuke, Misawa Takahiro, Yoshimi Kazuyoshi, Ido Kota, Koretsune Takashi	4. 巻 292
2. 論文標題 Interface tool from Wannier90 to RESPACK: wan2respack	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108854~108854
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2023.108854	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Dissanayake Sachith E., Matsuda Masaaki, Yoshimi Kazuyoshi, Kasamatsu Shusuke, Ye Feng, Chi Songxue, Steinhardt William, Fabbris Gilberto, Haravifard Sara, Cheng Jinguang, Yan Jiaqiang, Gouchi Jun, Uwatoko Yoshiya	4. 巻 5
2. 論文標題 Helical magnetic state in the vicinity of the pressure-induced superconducting phase in MnP	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43026 ~ 43026
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.5.043026	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Kasamatsu Shusuke, Motoyama Yuichi, Yoshimi Kazuyoshi, Aoyama Tatsumi	4. 巻 3
2. 論文標題 Configuration sampling in multi-component multi-sublattice systems enabled by ab Initio Configuration Sampling Toolkit (abICS)	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 2284218 ~ 2284218
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2023.2284128	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Aoyama Tatsumi, Yoshimi Kazuyoshi, Ido Kota, Motoyama Yuichi, Kawamura Taiki, Misawa Takahiro, Kato Takeo, Kobayashi Akito	4. 巻 298
2. 論文標題 H-wave A Python package for the Hartree-Fock approximation and the random phase approximation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 109087 ~ 109087
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2024.109087	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kakizawa Fumiya, Misawa Takahiro, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 109
2. 論文標題 Monte Carlo study on low-temperature phase diagrams of the J1 - J2 classical XY kagome antiferromagnet	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014439-1 ~ 15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.014439	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ritter Marc K., Nunez Fernandez Yuriel, Wallerberger Markus, von Delft Jan, Shinaoka Hiroshi, Waintal Xavier	4. 巻 132
2. 論文標題 Quantics Tensor Cross Interpolation for High-Resolution Parsimonious Representations of Multivariate Functions	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 056501-1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.132.056501	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Iwazaki Ryuta, Shinaoka Hiroshi, Hoshino Shintaro	4. 巻 108
2. 論文標題 Material-based analysis of spin-orbital Mott insulators	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L241108-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.L241108	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Csontosova Diana, Chaloupka Jiri, Shinaoka Hiroshi, Hariki Atsushi, Kunes Jan	4. 巻 108
2. 論文標題 Hidden covalent insulator and spin excitations in SrRu2O6	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195137-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevb.108.195137	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shinaoka Hiroshi, Wallerberger Markus, Murakami Yuta, Nogaki Kosuke, Sakurai Rihito, Werner Philipp, Kauch Anna	4. 巻 13
2. 論文標題 Multiscale Space-Time Ansatz for Correlation Functions of Quantum Systems Based on Quantics Tensor Trains	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 021015-1~27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevX.13.021015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Okamura Y., Shoriki K., Nomura Y., Fujishiro Y., Kitaori A., Kanazawa N., Arita R., Tokura Y., Takahashi Y.	4. 巻 8
2. 論文標題 Observation of anomalous Hall resonance of massive Dirac fermions in topological kagome-lattice magnet	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 npj Quantum Materials	6. 最初と最後の頁 57-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41535-023-00589-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Simeth W., Wang Z., Ghioldi E. A., Fobes D. M., Podlesnyak A., Sung N. H., Bauer E. D., Lass J., Flury S., Vonka J., Mazzone D. G., Niedermayer C., Nomura Yusuke, Arita Ryotaro, Batista C. D., Ronning F., Janoschek M.	4. 巻 14
2. 論文標題 A microscopic Kondo lattice model for the heavy fermion antiferromagnet CeIn3	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 8239-1~10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-023-43947-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yue Changming, Nomura Yusuke, Prassides Kosmas, Werner Philipp	4. 巻 108
2. 論文標題 Instability of the Pa3- fulleride Cs3C60 at ambient pressure and superconducting state of the fcc phase	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L220508-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.L220508	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nomura Yusuke	4. 巻 36
2. 論文標題 Boltzmann machines and quantum many-body problems	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 073001-1~14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ad0916	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wallerberger Markus, Badr Samuel, Hoshino Shintaro, Huber Sebastian, Kakizawa Fumiya, Koretsune Takashi, Nagai Yuki, Nogaki Kosuke, Nomoto Takuya, Mori Hitoshi, Otsuki Junya, Ozaki Soshun, Plaikner Thomas, Sakurai Rihito, Vogel Constanze, Witt Niklas, Yoshimi Kazuyoshi, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 21
2. 論文標題 sparse-ir: Optimal compression and sparse sampling of many-body propagators	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 SoftwareX	6. 最初と最後の頁 101266-1 ~ 11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.softx.2022.101266	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kitatani Motoharu, Nomura Yusuke, Hirayama Motoaki, Arita Ryotaro	4. 巻 11
2. 論文標題 Ab initio materials design of superconductivity in d9 nickelates	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 APL Materials	6. 最初と最後の頁 030701-1 ~ 7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0097618	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nagai Yuki, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 92
2. 論文標題 Sparse Modeling Approach for Quasiclassical Theory of Superconductivity	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 034703-1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.92.034703	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nogaki Kosuke, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 92
2. 論文標題 Bosonic Nevanlinna Analytic Continuation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 035001-1 ~ 2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.92.035001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ohki Daigo, Yoshimi Kazuyoshi, Kobayashi Akito, Misawa Takahiro	4. 巻 107
2. 論文標題 Gap opening mechanism for correlated Dirac electrons in organic compounds - (BEDT - TTF)2I3 and - (BEDT - TSeF)2I3	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L041108-1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.L041108	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Sakurai Rihito, Mizukami Wataru, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 4
2. 論文標題 Hybrid quantum-classical algorithm for computing imaginary-time correlation functions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 023219-1~14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.023219	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shinaoka Hiroshi, Chikano Naoya, Gull Emanuel, Li Jia, Nomoto Takuya, Otsuki Junya, Wallerberger Markus, Wang Tianchun, Yoshimi Kazuyoshi	4. 巻 63
2. 論文標題 Efficient ab initio many-body calculations based on sparse modeling of Matsubara Green's function	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SciPost Physics Lecture Notes	6. 最初と最後の頁 1~27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.21468/SciPostPhysLectNotes.63	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 H. Fujiwara, K. Terashima, J. Otsuki, N. Takemori, H. O. Jeschke, T. Wakita, Y. Yano, W. Hosoda, N. Kataoka, A. Teruya, M. Kakihana, M. Hedo, T. Nakama, Y. Onuki, K. Yaji, A. Harasawa, K. Kuroda, S. Shin, K. Horiba, H. Kumigashira, Y. Muraoka, T. Yokoya	4. 巻 106
2. 論文標題 Anomalously large spin-dependent electron correlation in the nearly half-metallic ferromagnet CoS	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 085114-1~13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.106.085114	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nomura Yusuke	4. 巻 91
2. 論文標題 Investigating Network Parameters in Neural-Network Quantum States	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 054709-1 ~ 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.054709	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nomura Yusuke, Sakai Shiro, Arita Ryotaro	4. 巻 128
2. 論文標題 Fermi Surface Expansion above Critical Temperature in a Hund Ferromagnet	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 206401-1 ~ 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.128.206401	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yue Changming, Nomura Yusuke, Werner Philipp	4. 巻 129
2. 論文標題 Doping Asymmetry and Layer-Selective Metal-Insulator Transition in Trilayer K ₃ xCo ₂ O ₈	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 066403-1 ~ 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.129.066403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ohki Daigo, Yoshimi Kazuyoshi, Kobayashi Akito	4. 巻 105
2. 論文標題 Interaction-induced quantum spin Hall insulator in the organic Dirac electron system - (BEDT-TSeF) ₂ I ₃	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205123-1 ~ 17
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.205123	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Motoyama Yuichi, Tamura Ryo, Yoshimi Kazuyoshi, Terayama Kei, Ueno Tsuyoshi, Tsuda Koji	4. 巻 278
2. 論文標題 Bayesian optimization package: PHYSBO	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108405-1~8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2022.108405	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Motoyama Yuichi, Yoshimi Kazuyoshi, Otsuki Junya	4. 巻 105
2. 論文標題 Robust analytic continuation combining the advantages of the sparse modeling approach and the Pade approximation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035139-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.035139	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nomura Yusuke, Arita Ryotaro	4. 巻 85
2. 論文標題 Superconductivity in infinite-layer nickelates	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Reports on Progress in Physics	6. 最初と最後の頁 052501-1-20
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6633/ac5a60	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Huebsch Marie-Therese, Nomura Yusuke, Sakai Shiro, Arita Ryotaro	4. 巻 34
2. 論文標題 Magnetic structures and electronic properties of cubic-pyrochlore ruthenates from first principles	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 194003-1~13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ac513c	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hirayama Motoaki, Nomura Yusuke, Arita Ryotaro	4. 巻 10
2. 論文標題 Ab Initio Downfolding Based on the GW Approximation for Infinite-Layer Nickelates	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Frontiers in Physics	6. 最初と最後の頁 824144-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fphy.2022.824144	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shinaoka Hiroshi, Otsuki Junya, Kawamura Mitsuaki, Takemori Nayuta, Yoshimi Kazuyoshi	4. 巻 10
2. 論文標題 DCore: Integrated DMFT software for correlated electrons	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SciPost Physics	6. 最初と最後の頁 117-1 ~ 31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.21468/SciPostPhys.10.5.117	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 品岡寛, 近野直也, 野本拓也, 大槻純也, 吉見一慶	4. 巻 56
2. 論文標題 温度グリーン関数の情報圧縮に基づく高速量子多体計算法	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 301 ~ 314
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshimi Kazuyoshi, Tsumuraya Takao, Misawa Takahiro	4. 巻 3
2. 論文標題 Ab initio derivation and exact diagonalization analysis of low-energy effective Hamiltonians for t - X [Pd(dmit) $_2$]	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 043224-1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.043224	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Charlebois Maxime, Moree Jean-Baptiste, Nakamura Kazuma, Nomura Yusuke, Tadano Terumasa, Yoshimoto Yoshihide, Yamaji Youhei, Hasegawa Takumi, Matsuhira Kazuyuki, Imada Masatoshi	4. 巻 104
2. 論文標題 Ab initio derivation of low-energy Hamiltonians for systems with strong spin-orbit interaction: Application to Ca51r3012	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 075153-1-19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.075153	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nomura Yusuke, Imada Masatoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 Dirac-Type Nodal Spin Liquid Revealed by Refined Quantum Many-Body Solver Using Neural-Network Wave Function, Correlation Ratio, and Level Spectroscopy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 031034-1-19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevX.11.031034	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nomura Yusuke, Yoshioka Nobuyuki, Nori Franco	4. 巻 127
2. 論文標題 Purifying Deep Boltzmann Machines for Thermal Quantum States	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 060601-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.127.060601	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsugatani Akishi, Ono Seishiro, Nomura Yusuke, Watanabe Haruki	4. 巻 264
2. 論文標題 qeirreps: An open-source program for Quantum ESPRESSO to compute irreducible representations of Bloch wavefunctions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 107948-1-29
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2021.107948	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nomura Yusuke	4. 巻 33
2. 論文標題 Helping restricted Boltzmann machines with quantum-state representation by restoring symmetry	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 174003-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/abe268	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakamura Kazuma, Yoshimoto Yoshihide, Nomura Yusuke, Tadano Terumasa, Kawamura Mitsuaki, Kosugi Taichi, Yoshimi Kazuyoshi, Misawa Takahiro, Motoyama Yuichi	4. 巻 261
2. 論文標題 RESPACK: An ab initio tool for derivation of effective low-energy model of material	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 107781-1-20
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2020.107781	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 野村悠祐	4. 巻 104
2. 論文標題 量子多体問題への機械学習	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 電子情報通信学会誌	6. 最初と最後の頁 1150-1157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Chikano Naoya, Hoshino Shintaro, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 104
2. 論文標題 Multipolar ordering in the three-orbital Hubbard model	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235125-1 ~ 11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.235125	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wallerberger Markus、Shinaoka Hiroshi、Kauch Anna	4. 巻 3
2. 論文標題 Solving the Bethe-Salpeter equation with exponential convergence	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 033168-1 ~ 18
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.033168	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Shinaoka Hiroshi、Nagai Yuki	4. 巻 103
2. 論文標題 Sparse modeling of large-scale quantum impurity models with low symmetries	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 045120-1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.045120	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計58件 (うち招待講演 29件 / うち国際学会 20件)

1. 発表者名 柴田康平, 中惇, H.O.Jeschke, 大槻純也
2. 発表標題 アルカリ超酸化物CsO ₂ における軌道秩序とフラストレート磁性状態
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 清水真, 大槻純也, H. O. Jeschke
2. 発表標題 Pb ₉ Cu(P ₀₄) ₆₀ (いわゆるLK-99) の電子構造および磁気構造
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 多極子を用いた電子状態および応答の記述と物質設計にむけて
3. 学会等名 第17回 物性科学領域横断研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 J. Otsuki
2. 発表標題 Multipolar susceptibilities within dynamical mean-field theory and its applications
3. 学会等名 Computational approaches to quantum many-body systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 J. Otsuki
2. 発表標題 Multipolar susceptibilities and interactions within dynamical mean-field theory and its applications
3. 学会等名 Trends in Theory of Quantum Materials 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 清水真, D. Guterding, 大槻純也, H. O. Jeschke
2. 発表標題 -(BEDT-TTF) ₂ Xの電子構造および超伝導に関する理論研究
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 柴田康平, 中惇, H. O. Jeschke, 大槻純也
2. 発表標題 アルカリ超酸化物CsO ₂ のスピン・軌道有効モデルと基底状態相図
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 B01計画研究の概要
3. 学会等名 「アシンメトリ量子」キックオフミーティング
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉見一慶、本山裕一、青山龍美、川島直輝
2. 発表標題 データ駆動科学を活用した物質設計に向けたソフトウェア開発事例の紹介
3. 学会等名 金属学会 2023秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 K. Yoshimi
2. 発表標題 Development of a scheme for the computational simulation of materials science toward the effective data generation and use
3. 学会等名 MRM2023 IUMRS-ICA 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 ニッケル酸化物超伝導体の電子構造と物質デザイン
3. 学会等名 金研研究会「強相関物質における創発物性研究の現状と将来展望」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 The Nickel Age of Superconductivity: Comparison with Cuprates and Theoretical Design of Cuprate-analog Nickelates
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Quantum many-body problems and artificial neural network
3. 学会等名 CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Artificial neural networks for analyzing quantum many-body correlations
3. 学会等名 Conference of Condensed Matter Physics (CCMP) 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 人工ニューラルネットワークを用いた強相関電子系の解析
3. 学会等名 研究会「強相関電子系のフロンティア」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Doping Asymmetry and Layer-Selective Metal-Insulator Transition in Trilayer K3C60
3. 学会等名 The Asia-Pacific Workshop on Strongly Correlated Systems 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Quantum many-body solvers using artificial neural networks
3. 学会等名 Computational Approaches to Quantum Many-Body Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 量子多体問題と人工ニューラルネットワーク
3. 学会等名 ipi - ダイキン シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Theoretical design of cuprate-analog d9 nickelates
3. 学会等名 CEMS symposium on Emergent Quantum Materials 2024 (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 人工ニューラルネットワークを用いた量子多体問題の解析
3. 学会等名 計算物理 春の学校 2024 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 動的平均場法による多極子感受率と多極子相互作用の導出
3. 学会等名 理論セミナー (東大物性研)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 量子多体物理と人工ニューラルネットワーク
3. 学会等名 第2回量子ソフトウェアワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 機械学習/人工ニューラルネットワーク手法を用いた量子多体系の研究
3. 学会等名 第2回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 J. Otsuki
2. 発表標題 Multipolar susceptibilities within dynamical mean-field theory and its application to CeB6
3. 学会等名 Simon's collaboration lecture (Online) (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大槻純也, 吉見一慶, 品岡寛, H.O. Jeschke
2. 発表標題 動的平均場理論による多極子揺らぎと多極子相互作用の導出: CeB6への応用
3. 学会等名 日本物理学会 2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 動的平均場法による強相関電子系の多極子秩序と超伝導
3. 学会等名 セミナー(東京都立大)(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Symmetry-adapted Wannier functions
3. 学会等名 Wannier 2022 Summer School (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 ニッケル酸化物超伝導体の電子・磁気物理と物質デザイン
3. 学会等名 日本材料科学会 学術講演大会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Artificial neural networks for exploring quantum many-body physics
3. 学会等名 Variational learning for quantum matter (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Theoretical design of cuprate-analog nickelates and magnetic exchange coupling
3. 学会等名 LT29 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 第一原理有効模型を使ったニッケル酸化物超伝導体の物質デザインとCeIn3の磁気相互作用解析
3. 学会等名 第1回「アシンメトリ量子研究会」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 機械学習手法を用いた量子多体系の研究
3. 学会等名 領域横断研究会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Neural-network studies reveal quantum spin liquid in two-dimensional J1-J2 Heisenberg model
3. 学会等名 ISSEC2022（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 銅酸化物の類似物質としてのd9ニッケル酸化物の理論デザイン
3. 学会等名 第32回日本MRS年次大会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大槻純也, 吉見一慶, 中西(大野)義典, M. Sekania, L. Chioncel, 水牧仁一郎
2. 発表標題 圧縮センシングによるコンプトン散乱データからのフェルミ面再構成と実験計画
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清水真, D. Guterding, 大槻純也, H. O. Jeschke
2. 発表標題 FLEX calculations for $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{X}$ charge transfer salts
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤原弘和, 寺嶋健成, 大槻純也, 竹森那由多, H. O. Jeschke, 脇田高德, 矢野佑幸, 細田渉, 片岡範行, 照屋淳志, 垣花将司, 辺土正人, 仲間隆男, 大貫惇睦, 矢治光一郎, 原沢あゆみ, 黒田健太, 幸埴, 堀場弘司, 組頭広志, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 ハーフメタル候補物質 CoS_2 における巨大スピン依存電子相関
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本山裕一, 吉見一慶, 大槻純也
2. 発表標題 スパースモデリングを活用した多軌道系への解析接続手法の検証
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉見一慶, 圓谷貴夫, 三澤貴宏, 妹尾仁嗣
2. 発表標題 TM分子系における系統的第一原理有効模型に基づいた電子状態の解析
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Artificial neural networks for quantum many-body problems
3. 学会等名 APS march meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 量子多体問題に対する人工ニューラルネットワーク手法
3. 学会等名 計算科学と実験科学が導く量子物質研究の最先端
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 圧縮センシングを用いたコンプトン散乱運動量密度3次元再構成
3. 学会等名 第71回SPring-8先端利用技術ワークショップ/第3回データ駆動科学によるデータ解析高度化 (SPring-8, オンライン開催) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 強相関電子系におけるスパースモデリング
3. 学会等名 物性コロキウム（東北大学）（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 強相関電子系におけるスパースモデリングと圧縮センシング
3. 学会等名 第9回 情報計測オンラインセミナー（オンライン開催）（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大槻純也, 吉見一慶, 中西（大野）義典, M. Sekania, L. Chioncel, 水牧仁一郎
2. 発表標題 コンプトン散乱データからのフェルミ面再構成：圧縮センシングの応用
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会（オンライン開催）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 本山裕一, 吉見一慶, 大槻純也, 品岡寛
2. 発表標題 グリーン関数の解析接続ソフトウェア SpM version2
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会（オンライン開催）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉見一慶, 三澤貴宏, 圓谷貴夫
2. 発表標題 TM分子系における系統的第一原理有効模型の導出
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田村亮, 本山裕一, 吉見一慶, 寺山慧, 植野剛, 津田宏治
2. 発表標題 ベイズ最適化パッケージPHYSBOとその応用例
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 塩崎康平, 吉見一慶, 荒畑恵美子
2. 発表標題 オートエンコーダを用いた二次元イジング模型における相推定器の精度検証
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 深層ボルツマンマシンを用いた有限温度計算(I): 熱平衡状態の解析的純粋化
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 フラレン超伝導体薄膜における超伝導のドーピング非対称性
3. 学会等名 京都大学基礎物理学研究所研究会 「非自明な電子状態が生み出す超伝導現象の最前線:新たな挑戦と展望」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 人工ニューラルネットワークを用いた量子多体ソルバー
3. 学会等名 「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題 合同研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Artificial Neural Networks for Analyzing Quantum Many-Body Problems
3. 学会等名 KMS 2021 Winter Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Artificial neural networks for representing quantum many-body states
3. 学会等名 Quantum Techniques in Machine Learning (QTML) 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Materials design of cuprate-analog nickelates and magnetic exchange coupling
3. 学会等名 2nd International Meeting on Thin Film Interfaces, Surfaces and Composite Crystals (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Purifying deep Boltzmann machines for thermal quantum states
3. 学会等名 APW-RIKEN-Tsinghua-Kavli workshop “Highlights on condensed matter physics” 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Purifying Deep Boltzmann Machines for Thermal Quantum States
3. 学会等名 XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Nomura
2. 発表標題 Materials design of layered d9 nickelates and magnetic exchange coupling
3. 学会等名 Quantum Liquid Crystals 2021 (QLC2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 大槻純也	4. 発行年 2023年
2. 出版社 森北出版	5. 総ページ数 224
3. 書名 Pythonによる計算物理	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	吉見 一慶 (Yoshimi Kazuyoshi) (10586910)	東京大学・物性研究所・特任研究員 (12601)	
研究分担者	野村 悠祐 (Nomura Yusuke) (20793756)	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・准教授 (32612)	
研究分担者	品岡 寛 (Shinaoka Hiroshi) (40773023)	埼玉大学・理工学研究科・准教授 (12401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------