

令和 6 年 6 月 11 日現在

機関番号：82401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2023

課題番号：17K14148

研究課題名（和文）強相関量子シミュレータの開発と応用

研究課題名（英文）Development and applications of strongly correlated quantum simulator

研究代表者

曾田 繁利 (Sota, Shigetoshi)

国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究センター・技師

研究者番号：60466414

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では、大規模並列密度行列繰り込み群法の開発を行なった。密度行列繰り込み群法は、一次元的な構造を持つ系に対して非常に有効な計算手法であることが知られている。この密度行列繰り込み群法の多次元系への応用は、高精度な結果を得るために必要とされる計算コストが非常に巨大となるため困難が生じる。しかしながら、近年の計算機科学の発展は、密度行列繰り込み群法の二次元系への応用を十分可能なものとしている。そこで、最新の巨大な計算資源の下での実行を想定し、二次元の強相関量子系のダイナミクスを明らかにするための新たな密度行列繰り込み群法による手法を開発した。さらに、開発した手法を用いた応用研究を行なった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

密度行列繰り込み群法の二次元強相関量子系への応用は、量子モンテカルロ法では困難な幾何学的フラストレーションを含む系に対しても適用可能である上、数値的厳密な取り扱いで取り扱い可能な系のサイズを超えた適用が可能である。さらに、二次元強相関量子系のダイナミクスに対しても、最新の大型計算機を利用することにより十分な精度での計算が可能である。したがって、大規模並列化された密度行列繰り込み群法と最新の大規模計算機を用いることにより、最新の研究成果を創出することが可能であることから、本研究の密度行列繰り込み群法による強相関量子シミュレータの開発には、今後の強相関量子系の理論研究手法として大きな意義がある。

研究成果の概要（英文）：In this research project, I developed a massively parallel density matrix renormalization group method. The density matrix renormalization group method is known as a very efficient computational method for one-dimensional strongly correlated systems. The application of the density matrix renormalization group method to higher dimensional systems is difficult because the computational cost required to obtain highly accurate results becomes very large. However, recent developments in computer science have made it possible to apply the density matrix renormalization group method to two-dimensional strongly correlated systems. Therefore, I developed a new density matrix renormalization group method to clarify the dynamics of two-dimensional strongly correlated quantum systems, assuming that the method is used with the latest huge computing resources. In addition, applied research was conducted using the developed method.

研究分野：物性物理

キーワード：強相関量子系 手法開発 密度行列繰り込み群法 大規模計算 量子計算 機械学習

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 強相関量子系のダイナミクスは、系の内部自由度により独自の集団的量子効果を示す。そのため、基礎物理学的な興味のみならず、次世代の科学技術を担う様々な応用も期待される。強相関量子系の理論的研究においては、系の持つ内部自由度を精密に取り扱う必要があるため、数値的手法による研究が重要であると考えられている。ただし、強相関量子系の内部自由度は系のサイズに対して指数関数的に増大するため、数値的厳密な取り扱いでは系のサイズに対して強い制限が生じる。特に、普遍的な物理現象を捉えるためには、サイズ効果によらない結果が必要であるため、より大きな系に対する計算が求められる。このような、強相関量子系を取り扱う数値的厳密な手法による系のサイズに対する制限を超えた手法のひとつとして、密度行列繰り込み群法が挙げられる。

(2) 密度行列繰り込み群法は、特に一次元的な構造を持つ系に対して非常に強力な手法であり、数値的厳密な取り扱いと比較して非常に小さな計算コストで巨大な系の精密計算が可能である。密度行列繰り込み群法は、強相関量子系のダイナミクスを取り扱う手法として動的密度行列繰り込み群法、時間依存密度行列繰り込み群法として拡張されており、一次元強相関量子系を取り扱う手法として広く一般的に用いられている。その一方、密度行列繰り込み群法の多次元系への応用は、その精密計算に必要な計算コストが非常に巨大になるため困難となる。この事情は、エンタングルメント・エントロピーの面積則として理解される。ただし、近年の計算機科学の発展は、この密度行列繰り込み群法の二次元系への応用を十分可能なものとしている。密度行列繰り込み群法の二次元系への応用は、量子モンテカルロ法では不符号問題が発生する幾何学的フラストレーションのある系に対しても適用可能であるため、量子スピン液体に対する研究をはじめとした新奇量子相に対する研究への応用など、今後もその活躍が期待される

2. 研究の目的

(1) 本研究の目的は、まず大規模並列化された密度行列繰り込み群法のプログラムを開発することである。特に、最新の大型計算機を用いた場合には、二次元の強相関量子系のダイナミクスの取り扱いも十分可能になると考えられることから、多次元の系にも適用可能な動的密度行列繰り込み群法、および時間依存密度行列繰り込み群法を開発し、最新の大型計算機で効率的に実行可能な密度行列繰り込み群法の大規模並列アルゴリズムの研究開発を行う。

(2) 開発した大規模並列密度行列繰り込み群法を用いた大型計算機での応用研究を行う。特に、幾何学的なフラストレーションを持つ量子モンテカルロ法では難しい問題、また新たに開発した手法を用いた強相関量子系のダイナミクスを取り扱う。

3. 研究の方法

(1) これまでに課題実施者が開発した多次元の強相関量子系に対応した大規模並列密度行列繰り込み群法を出発点とし、そのダイナミクスへの拡張として動的密度行列繰り込み群法、時間依存密度行列繰り込み群法を実装する。作成した大規模並列密度行列繰り込み群法のプログラムは、大学、研究所等の計算機センターに設置された大型計算機を用いて計算結果、および実行性能の検証を行い、その結果から必要な改良を行う。

(2) 開発した大規模並列密度行列繰り込み群法を用いて、SPring-8 や J-PARC、SACL A 等の大型実験施設での実験等の解析をはじめとした応用研究を各所に設置された大規模計算機を用いて行う。また、応用研究からの計算の実行に対する要求やフィードバックをもとに、手法の拡張や改良を行う。

4. 研究成果

(1) 本研究では、強相関系の量子ダイナミクスを明らかにすることを目的に、密度行列繰り込み群法を応用した強相関量子シミュレータの開発を行う。そのため、特に多次元の強相関量子系に対応した密度行列繰り込み群法の研究開発を行う。本目的のため、強相関量子系の実時間シミュレーション手法として知られる時間依存密度行列繰り込み群法の多次元系への拡張を行なった。まず、強相関量子系の時間発展の計算手法として直交多項式展開法を応用し、鈴木-トロッター分解による誤差を含まない多次元系へ応用可能な時間依存密度行列繰り込み群法の手法を開発した。さらに、時間依存密度行列繰り込み群法を多次元の強相関量子系にそのまま適用する場合、巨大な計算コストが要求されることから、その対策として、それぞれの時刻の状態を表現するために最適化された異なるヒルベルト空間の表現で与える新たな時間依存密度行列繰り込み群法の手法を開発した。ここで開発された手法は、大規模計算機による検証を行った結果、動的密度行列繰り込み群法で用いられるマルチターゲットの手法を応用し、異なる時刻の状態をひとつの最適化されたヒルベルト空間の表現で与える場合と比較して、半分程度の制限された基底の

数でよりより高精度な結果を得ることが確認された。特に密度行列繰り込み群法の計算コストはこの制限された基底の数 m に対し、 $O(m^3)$ で与えられることから、本課題で開発された手法は非常に効率的であると考えられる。

(2)本研究課題で開発した多次元系に対応可能な時間依存密度行列繰り込み群法について、強相関量子系の実時間ダイナミクスに対し、各時刻での量子状態の判定を効率的に行うことを目的に、新たに機械学習分野で発展したニューラル・ネットワークによる手法による解析手法を開発した。本手法は、密度行列繰り込み群法の計算過程で得られる縮約密度行列の固有値に対応するエンタングルメント・スペクトルから多体量子状態の量子相を判定する。本手法の検証として、すでに知られている半充填のハバード模型の基底状態について学習したニューラル・ネットワークで確認したところ、すでに知られている相境界を正しく判定することが可能であることが確認された。さらに、本手法を量子ダイナミクスの研究に応用するため、レーザーパルスにより励起された時間発展する非平衡状態の判定に適用し、別に計算した相関関数との比較を行ったところ光誘起相転移の判定が可能であることが確認された。さらに、本手法を用いることにより、これまでに知られていない量子相を発見した。したがって、本手法は強相関量子系の量子ダイナミクス研究に対し非常に有用であると考えられる。

(3)本研究課題で開発した大規模並列時間依存密度行列繰り込み群法について、物性物理分野を超えた応用が可能になるよう、プログラムの拡張を行った。特に、量子コンピュータのシミュレータとして本時間依存密度行列繰り込み群法によるプログラムを応用することを念頭においた拡張を行なった。特に、量子アニーリングについては、系の量子もつれが多くの場合それほど大きくないことから、比較的大規模な系においても効率的に時間依存密度行列繰り込み群法を用いてシミュレーションを行うことが可能である。これまで開発してきた時間依存密度行列繰り込み群法では、多次元系への応用が可能であり、全結合を含めた様々なスピン間の相互作用を入れた計算が可能である。さらに、量子アニーリングの実時間シミュレーションに加え、基底状態を計算する密度行列繰り込み群法を拡張し、アニーリング方式の量子コンピュータで対象となるイジング模型の基底状態計算に対し、古典コンピュータによる高精度、かつ大規模な系の計算に対し、与えられた条件での基底状態を計算する新たなアルゴリズムを開発した。開発した密度行列繰り込み群法による計算では、量子アニーリング方式の量子コンピュータである D-Wave を超える量子ビット数の系の基底状態が PC 等で十分可能であることが確かめられた。さらに、大規模並列計算では、利用する計算資源の規模に応じてより巨大な系の計算を実行することが可能である。

(4)本研究課題で開発した大規模並列密度行列繰り込み群法プログラムの利用における利便性の向上のためのプログラムの整備を行なった。本研究で開発した大規模並列密度行列繰り込み群法プログラムは、本手法の基本である基底状態計算のみではなく、動的密度行列繰り込み群法による励起ダイナミクスの計算、および本研究課題で開発した時間依存密度行列繰り込み群法による実時間シミュレーションが含まれる。これら各手法による計算を統一的なフォーマットで簡便に実行できるよう整備を行なった。さらに、各プログラムを統合し計算の中心となる部分を共通化とすることで今後の整備と改良を容易にしたことも本整備による利点のひとつとして挙げられる。本整備の結果、基底状態を計算する通常の密度行列繰り込み群法と励起ダイナミクスを計算する動的密度行列繰り込み群法、また量子多体系の実時間シミュレーションを可能にする時間依存密度行列繰り込み群法は、統一された入力により一次元系のみならず多次元系の計算に対しても容易に実行可能となった。したがって、今後、様々な量子多体系の研究に対してその利便性が高められ、より広範な応用も期待されるところである。

(5)本研究課題により開発した大規模並列密度行列繰り込み群法のプログラムのスーパーコンピュータ「富岳」利用に向けた高度化開発を行なった。特に、「富岳」をはじめとした巨大な計算資源を利用することで初めて可能となる手法として、多次元の量子多体系に対応した無限系動的密度行列繰り込み群法を新たに開発した。本手法の開発では、動的密度行列繰り込み群法で計算が必要となる励起状態の計算に対して本課題実施者が開発した直交多項式展開法を用いることで効率的かつ高精度な計算の実行を可能とした。本手法は、密度行列繰り込み群法の多次元系への適用手法として一般的な一次元系に長距離相互作用を導入することで多次元の格子形状を再現する手法とは異なり、多次元の格子系の任意の数の格子点を一次元系に帰着できるようにまとめる。そのため、密度行列繰り込み群法の取り扱いとしては、まとめた格子点の分の自由度を持つ「大きな自由度を持つ格子点」の一次原型として取り扱われる。取り扱う格子形状に合わせ て長距離相互作用を導入する一般的な多次元系に対する密度行列繰り込み群法に対して、本手法は「大きな自由度を持つ格子点」を取り扱う分、密度行列繰り込み群法の1ステップあたりの計算コストは大きくなる。ただし、格子点の自由度に対して並列化を行うことは比較的容易であるため、本手法は大規模計算に適していると考えられる。本手法については、これまでに

実績のある密度行列繰り込み群法に対する大規模並列化手法を用いたプログラム開発を行い、本手法の利用環境として昨年度までに開発した大規模並列密度行列繰り込み群法のプログラム群の一つとして導入し、他の手法と同様に統一的なフォーマットで利用可能とした。

(6)本研究課題で開発した大規模並列密度行列繰り込み群法のプログラムの大規模計算機における実行の利便性向上のための高度化開発を行なった。特に、強相関量子系の実時間シミュレーションでは時間刻み毎に密度行列繰り込み群法による基底の最適化を繰り返し実行することで、目的の時刻までの実時間シミュレーションを実行する。そのため、密度行列繰り込み群法の繰り返し数が非常に大きくなり、大規模計算機利用において決められた制限時間内に目的の計算が終わらない場合がある。また、このような長時間の大規模計算においてはハードウェア故障に遭遇する可能性も大きくなり、目的のシミュレーションの実行に困難が生じる。このような場合に対応するため、本研究では密度行列繰り込み群法のアルゴリズムに対応した効率的なバックアップとリスタートを可能にすることを目的に、これまでに開発した大規模並列密度行列繰り込み群法に対してこのような機能を実装した。密度行列繰り込み群法では、通常、その計算に必要なハミルトニアンや計算する物理量等の演算子を目的の計算に対応した基底で記述し、これらをメモリ上に保持している。しかしながら、これらの演算子をそのまま取り扱う場合、これらは非常に巨大なデータ量となる。さらに、このようなデータの保存は、基底が密度行列繰り込み群法により最適化されるたびに必要になるため、全体の計算時間から見てもこのデータの保存に要する時間が大きな割合を占めることとなる。そこで、本研究では、保存するデータとして基底変換を行う変換行列のみをストレージ上に保存し、リスタートの際にはこの変換行列から必要な演算子を新たに生成することで、密度行列繰り込み群法の効率的なデータのバックアップとリスタートを実現した。

(7)本研究課題で開発した大規模並列密度行列繰り込み群法プログラムによる計算を様々な量子格子模型に簡便に対応させるため、プログラムの拡張を行なった。様々な系に簡便に対応できることは、本分野における応用研究での応用範囲を拡大に対し非常に有効であると考えられる。これまで、フェルミオンの統計性より現れる演算子の交換関係を効率的に取り扱うため、量子格子模型毎に場合分けした上で計算に必要な演算子の作成を行ってきた。特に、密度行列繰り込み群法では、この演算子を密度行列繰り込み群法において特異値分解に対応する基底変換と情報圧縮のため、数値的厳密な取り扱いと比較してその効率的な扱いは容易ではない。さらに、一次元系に向けた密度行列繰り込み群法を多次元系への拡張では、その困難がより顕著となる。本研究では、密度行列繰り込み群法のアルゴリズム上現れるシステムブロック、環境ブロックについて、その基底をアップスピン、ダウンスピンの電子数毎にブロック対角化し、その各ブロックに対応した電子数のみを記憶することで、様々な量子格子模型に対応することが可能になるよう、プログラムの改良を行なった。その結果、量子格子模型に依らず統一されたプログラムにより様々な量子格子模型に対応することが可能になったため、今後の応用における利便性、およびプログラムのメンテナンス性を向上させることに成功した。

(8)本研究で開発した大規模並列密度行列繰り込み群法のプログラムによる応用研究を行なった。物性物理分野での応用として、強相関量子系の基底状態計算の応用例としては、幾何学的なフラストレーション効果により量子モンテカルロ法では取り扱いが困難な系を中心に、三角格子ハバード模型や Kagome-strip 鎖、 RuCl_3 に対応した八ニカム格子上的 Kitaev-Heisenberg 模型に対する研究が挙げられる。また強相関量子系のダイナミクス研究へ応用例としては、銅酸化物高温等伝導体を念頭に $t-t'-J$ 模型の励起ダイナミクスに対するドーピング依存性、梯子格子拡張 Hubbard 模型に対する量子ダイナミクス研究が挙げられる。また、機械学習分野で発展した手法と連携した応用例として、よく知られた Hubbard 鎖の基底状態の量子相のエンタングルメント・スペクトルから学習したニューラルネットワークを応用した量子ダイナミクスの研究を行なった。また、多次元系へ応用可能な時間依存密度行列繰り込み群法の応用研究として組合せ最適化問題に対して有効であると考えられる量子アニーリングに対する応用研究を行なった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 12件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Shinjo Kazuya, Sota Shigetoshi, Tohyama Takami	4. 巻 4
2. 論文標題 Glassy dynamics of the one-dimensional Mott insulator excited by a strong terahertz pulse	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 L032019-1, 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.L032019	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 Morita Katsuhiro, Sota Shigetoshi, Tohyama Takami	4. 巻 4
2. 論文標題 Resonating dimer-monomer liquid state in a magnetization plateau of a spin-1/2 kagome-strip Heisenberg chain	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Physics	6. 最初と最後の頁 161 (1-7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42005-021-00665-6	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 Shinjo Kazuya, Tamaki Yoshiki, Sota Shigetoshi, Tohyama Takami	4. 巻 104
2. 論文標題 Density-matrix renormalization group study of optical conductivity of the Mott insulator for two-dimensional clusters	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205123 (1-9)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.205123	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 Morita Katsuhiro, Sota Shigetoshi, Tohyama Takami	4. 巻 104
2. 論文標題 Magnetic phase diagrams of the spin-1/2 Heisenberg model on a kagome-strip chain: Emergence of a Haldane phase	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 224417 (1-8)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.224417	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 Tohyama Takami, Shinjo Kazuya, Sota Shigetoshi, Tsutsui Kenji	4. 巻 2207
2. 論文標題 Numerical simulations of spectroscopic properties in two-dimensional Mott insulator	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012028 (1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2207/1/012028	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 Shinjo Kazuya, Sota Shigetoshi, Yunoki Seiji, Tohyama Takami	4. 巻 101
2. 論文標題 Characterization of photoexcited states in the half-filled one-dimensional extended Hubbard model assisted by machine learning	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195136-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.195136	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 Kim Beom Hyun, Sota Shigetoshi, Shirakawa Tomonori, Yunoki Seiji, Son Young-Woo	4. 巻 102
2. 論文標題 Proximate Kitaev system for an intermediate magnetic phase in in-plane magnetic fields	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 140402-1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.140402	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 Tohyama Takami, Sota Shigetoshi, Yunoki Seiji	4. 巻 89
2. 論文標題 Spin Dynamics in the t-t -J Model: Dynamical Density-Matrix Renormalization Group Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 124709-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.124709	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 Shinjo Kazuya, Sota Shigetoshi, Tohyama Takami	4. 巻 103
2. 論文標題 Effect of phase string on single-hole dynamics in the two-leg Hubbard ladder	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035141-1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.035141	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 Shinjo Kazuya, Sasaki Kakeru, Hase Satoru, Sota Shigetoshi, Ejima Satoshi, Yunoki Seiji, Tohyama Takami	4. 巻 88
2. 論文標題 Machine Learning Phase Diagram in the Half-filled One-dimensional Extended Hubbard Model	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 065001 ~ 065001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.065001	査読の有無 無
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 Kishimoto Masanori, Morita Katsuhiko, Matsubayashi Yukihiro, Sota Shigetoshi, Yunoki Seiji, Tohyama Takami	4. 巻 98
2. 論文標題 Ground state phase diagram of the Kitaev-Heisenberg model on a honeycomb-triangular lattice	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 054411-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.054411	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 Morita Katsuhiko, Sugimoto Takanori, Sota Shigetoshi, Tohyama Takami	4. 巻 97
2. 論文標題 Magnetization plateaus in the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a kagome-strip chain	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014412-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.97.014412	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 Shirakawa Tomonori、Tohyama Takami、Kokalj Jure、Sota Sigetoshi、Yunoki Seiji	4. 巻 96
2. 論文標題 Ground-state phase diagram of the triangular lattice Hubbard model by the density-matrix renormalization group method	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205130-1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.205130	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36件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 筒井健二, 新城一矢, 曾田繁利, 遠山貴巳
2. 発表標題 光励起されたモット絶縁体の2マグノン励起スペクトル
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 新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴巳
2. 発表標題 一次元拡張ハバード模型におけるサブサイクルパルスを用いた空間反転・時間反転対称性の制御
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 遠山貴巳, 新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司
2. 発表標題 ダイマー相関が強いモット絶縁体の光誘起吸収スペクトル
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴巳
2. 発表標題 ハバード模型におけるスピン流テクスチャの研究
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 新城一矢, 曾田繁利, 遠山貴巳
2. 発表標題 擬一次元モット絶縁体におけるポンプ・プローブスペクトルの励起周波数依存性
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森田克洋, 曾田繁利, 遠山貴巳
2. 発表標題 kagome strip鎖における磁化プラトーを示す量子スピン液体状態
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 新城一矢, 曾田繁利, 遠山貴巳
2. 発表標題 サブサイクルパルスで励起された一次元モット絶縁体の時間依存密度行列繰り込み群法による研究
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 曾田繁利, 柚木清司
2. 発表標題 密度行列繰り込み群法によるランダムなIsing模型の計算手法とD-Waveとの比較
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 新城一矢, 曾田繁利, 遠山貴己
2. 発表標題 時間依存密度行列繰り込み群法による梯子格子拡張ハバード模型の光学応答の研究
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 新城一矢, 玉城善貴, 曾田繁利, 遠山貴己
2. 発表標題 二次元拡張ハバード模型の光学伝導度の時間依存密度行列繰り込み群法による研究
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 曾田繁利
2. 発表標題 大規模並列密度行列繰り込み群法の開発と量子ダイナミクスへの応用
3. 学会等名 物性研究所パソコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 曾田繁利, 柚木清司
2. 発表標題 量子コンピュータによる直交多項式展開法
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 遠山貴巳, 曾田繁利, 柚木清司
2. 発表標題 動的密度行列繰り込み群法による $t-t'-J$ 模型のスピン励起の研究
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山口辰威, 岩野薫, 大村周, 高橋聡, 新城一矢, 遠山貴巳, 曾田繁利, 岡本博
2. 発表標題 多体ワニエ関数を用いた電荷モデルの熱力学極限における光学伝導度の推定
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大村周, 高橋聡, 山口辰威, 岩野薫, 新城一矢, 遠山貴巳, 曾田繁利, 岡本博
2. 発表標題 電荷モデル: スピン - 電荷分離と電荷揺らぎが両立する1次元拡張ハバードモデルの有効モデル
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 新城一矢, 曾田繁利, 遠山貴巳
2. 発表標題 時間依存密度行列繰り込み群法による1次元および梯子格子拡張ハバード模型の光学伝導度の研究
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 白川知功, 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴巳
2. 発表標題 三角格子ハイゼンベルグ模型の動的スピン構造因子
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Sota, T. Shirakawa, S. Yunoki, T. Tohyama
2. 発表標題 Dynamical DMRG Study of Spin Excitation Dynamics on the Triangular Lattice Antiferromagnetic Heisenberg model
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Sota, T. Shirakawa, S. Yunoki, T. Tohyama
2. 発表標題 Dynamical DMRG study of spin excitation dynamics in triangular lattice spin-1/2 antiferromagnet
3. 学会等名 APS March Meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 曾田繁利, 白川知功, 柚木清司, 遠山貴己
2. 発表標題 三角格子量子スピン系Ba ₃ CoSb ₂ O ₉ の非弾性中性子散乱の解析
3. 学会等名 H30年度ポスト「京」重点課題(7)第3回CDMSI研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 曾田繁利, 新城一矢, 遠山貴己, 柚木清司
2. 発表標題 機械学習による一次元拡張ハバード模型における基底状態の相図
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 曾田繁利, 新城一矢, 遠山貴己, 柚木清司
2. 発表標題 多次元強相関量子系のための時間依存密度行列繰り込み群法の改良と応用
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐々木広太, 杉本貴則, 曾田繁利, 遠山貴己
2. 発表標題 フラストレート梯子スピン系の磁化プラトー相における磁気励起II
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森田克洋, 藤原理賀, 満田節生, 松尾晶, 金道浩一, 曾田繁利, 遠山貴巳
2. 発表標題 正方カゴメ格子反強磁性体Cu ₆ AlBiO ₄ (SO ₄) ₅ ・KClの磁気解析
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Sota, T. Shirakawa, T. Tohyama, S. Yunoki
2. 発表標題 Dynamical DMRG study of excitation dynamics of triangular lattice antiferromagnetic Heisenberg models
3. 学会等名 TNSAA 2018-2019 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 曾田繁利, 新城一矢, 柚木清司, 遠山貴己
2. 発表標題 多次元強相関量子系のための時間依存密度行列繰り込み群法の改良と応用
3. 学会等名 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(CDMSI)」第4回シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Sota, T. Tohyama, S. Yunoki
2. 発表標題 Development of massively parallel density matrix renormalization group method algorithm for two-dimensional strongly correlated systems and its applications
3. 学会等名 The 1st R-CCS International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴己
2. 発表標題 三角格子反強磁性Heisenberg模型における量子スピン液体状態とスピン励起ダイナミクス
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴己
2. 発表標題 機械学習を援用した1次元拡張ハバード模型における光励起状態の研究
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 曾田繁利, 今村穰, 中嶋隆人, 柚木清司
2. 発表標題 無限系に適用可能な第一原理密度行列繰り込み群法の開発と応用
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 佐々木広太, 杉本貴則, 曾田繁利, 遠山貴己
2. 発表標題 フラストレート梯子スピン系の有限磁化における磁気励起
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 森田克洋, 杉本貴則, 曾田繁利, 遠山貴己
2. 発表標題 kagome strip鎖の磁化プラトー
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 S. Sota, T. Shirakawa, S. Yunoki, and T. Tohyama
2. 発表標題 Development of time dependent DMRG method for higher dimensional systems and its application to quantum annealing
3. 学会等名 APS march meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 遠山貴己, 曾田繁利
2. 発表標題 t-t'-J模型の磁気励起と電荷ストライプ: 動的密度行列繰り込み群法による計算
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐々木広太, 杉本貴則, 曾田繁利, 遠山貴己
2. 発表標題 フラストレート梯子スピンの磁化プラトー相における磁気励起
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 曾田繁利, 白川知功, 柚木清司, 遠山貴己
2. 発表標題 動的密度行列繰り込み群法による三角格子反強磁性ハイゼンベルク模型の励起ダイナミクスの解析
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔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
---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------