

令和 5 年 5 月 22 日現在

機関番号：32612

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2022

課題番号：20K14423

研究課題名（和文）機械学習と物性理論の分野融合的アプローチによる強相関第一原理計算

研究課題名（英文）First-principles calculations for strongly-correlated materials with an interdisciplinary approach based on machine learning and physics

研究代表者

野村 悠祐 (Nomura, Yusuke)

慶應義塾大学・理工学部（矢上）・准教授

研究者番号：20793756

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究は、機械学習などの情報科学的手法と第一原理計算・量子多体論などの計算科学的手法を組み合わせた分野融合型のアプローチに基づいた強相関電子系に対する新たな数値手法を確立することを目指した。具体的には、1. 数値手法の開発、2. 開発した手法の精度検証、3. 強相関電子系への適用、を主眼として研究を行った。

1と2の成果として、人工ニューラルネットワーク手法と純粋化という物理の概念を組み合わせることで、有限温度における量子揺らぎと熱揺らぎを取り込む深層学習モデルの確立に成功した。また、3の成果として、強磁性を発現する強相関金属の電子状態の研究を行い、非自明な量子相関を示す異常金属相を発見した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

強相関電子系は、様々な機能物性が発現するが、それらの現象は量子性と多体性の兼ね合いにより発現しているために、その数値的解析は物理の挑戦的課題として知られている。本研究では、その挑戦的課題に対し、人工ニューラルネットワーク・機械学習を用いるという新機軸を導入し、その手法をさらに発展させることで、非自明な量子相関を計算するスキームを大きく進展させた。非自明な量子相関を正確かつ定量的に計算できるようになると、強相関電子系の物性予測に繋がる。今回の研究はそのような理論主導の物質設計につながる礎を気付いたという点で意義深いものである。

研究成果の概要（英文）：This study aimed to establish a new numerical method for strongly correlated electron systems based on a novel approach combining machine learning schemes with first principles and quantum many-body calculations. Specifically, we focused on 1) development of numerical methods, 2) verification of the accuracy of the developed methods, and 3) application to strongly correlated electron systems.

As for 1 and 2, we successfully established a deep learning model incorporating quantum and thermal fluctuations at finite temperatures by combining the artificial neural network method with the physics concept of "purification." As an achievement of 3, we studied the electronic states of strongly correlated ferromagnetic metals and discovered an unusual quantum correlation in a paramagnetic phase.

研究分野：物性理論

キーワード：強相関電子系 量子相関 機械学習 人工ニューラルネットワーク

## 1. 研究開始当初の背景

電子間のクーロン相互作用が重要な役割を果たす強相関物質では、高温超伝導、外場に対する巨大な応答（例：巨大磁気抵抗）、多彩な磁性・軌道秩序など、実用的に有用な様々な機能物性が発現する。しかしながら、強相関現象は、量子性と多体性の兼ね合いにより一つの電子とは異なる物理法則が発現する創発現象であり、その理解・予測は非常に難しい。特に、現実の系における様々な自由度・複雑な相互作用を精度よく解析するための強相関数値手法が現状貧弱であり、定量的な計算の実現は非常に限られている。

このような困難の中、近年、機械学習の技術を物理の分野に応用する流れが始まっている。柔軟な表現能力を持つ人工ニューラルネットワークを用いることで、物理的直観が働きづらいような状況においても、非自明な量子相関を学習することができる可能性がある。

## 2. 研究の目的

上述の学術的背景を踏まえ、本研究課題では、機械学習の技術を用いた強相関数値手法を開発し、強相関物性の定量的理解に向けた礎を築くことを目的とした。また、この機械学習手法と量子多体論・第一原理計算を組み合わせる分野融合型のアプローチに基づいて、強相関物質に対する高精度な定量的計算を実現するためのスキームの確立を目指した。具体的には、1. 強相関数値手法開発、2. 開発した手法の精度検証、3. 現実の系への適用、が研究の主眼となる。

## 3. 研究の方法

1. 強相関数値手法開発、2. 開発した手法の精度検証、の2点を達成するため、量子力学的粒子の粒子配置を入力とし、出力を量子多体波動関数とする人工ニューラルネットワークを構築する。これにより、膨大な数の配置パターンの量子力学的重ね合わせとして表される量子もつれを学習する。膨大なデータセットからその本質的パターンを抽出することに長けている機械学習を用いることにより、非自明な量子もつれを抽出できる可能性がある。これまで、人工ニューラルネットワーク手法は絶対零度における計算に対する開発が行われてきた。本研究では、それを拡張し、熱揺らぎと量子揺らぎの両方によって、非自明な量子相関が生まれる有限温度計算を実現する。

また、現実の系への適用については、電荷・スピン自由度に加えて、軌道自由度が入ることによって非自明な物理が期待される多軌道系への適用を行う。特に、多軌道系においては、フント結合の効果による強相関強磁性金属が実現すると考えられる。強磁性金属が示す量子相関について調査する。

## 4. 研究成果

### (1) 量子揺らぎと熱揺らぎを埋め込む深層学習モデル手法の開発と精度検証

本課題では、強相関物質に対する有限温度計算を実行するための新たな人工ニューラルネッ

トワーク手法の開発に成功した。これまでの人工ニューラルネットワーク手法の開発は、絶対零度で最も安定な量子状態である基底状態の計算を念頭に行われてきた。有限温度計算では、絶対零度でも存在する量子揺らぎに加え、熱揺らぎも加わることによって非自明な量子相関が生まれるために、計算科学的に挑戦的課題であった。また、有限温度で行われる実際の実験と比較するためにも、重要な手法拡張となる。

有限温度計算の拡張に向けては、混合状態を扱わなければいけないため、その取り扱いが困難な点であった。その状況において、純粋化という概念を導入すれば良いというアイデアがブレークスルーとなった。量子多体系の有限温度における混合状態は、アンシラ自由度（補助自由度）を含む拡張した系の純粋状態にマップすることができる（純粋化）。マップされた純粋状態を、深層学習モデルの一種である深層ボルツマンマシンを用いて表現する。温度発展は深層ボルツマンマシンのパラメータ更新によって取り込む。

手法の精度検証として、新たな手法を1次元スピン鎖上の横磁場イジング模型と2次元正方格子上の  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルグ模型に適用した。その結果、比熱などの有限温度の物理量を精度良く計算できることがわかった。この深層学習モデルによる手法は、厳密な計算手法と違い、計算コストが系のサイズに対して指数的に増大しない。そのため、厳密な計算ができない大きな系において有限温度の物理量を正確に計算するための道が拓かれた。この成果は *Phys. Rev. Lett.* 誌に掲載され、対外的なインパクトをもたらしている [*Phys. Rev. Lett.* **127**, 060601 (2021)]。

## (2) 多軌道系における強結合領域の強磁性金属におけるフェルミ面の異常の発見

本課題では、現実の系における非自明な量子相関の研究も行った。多軌道系特有のフント結合によって実現する強結合領域の強磁性金属のフェルミ面を数値計算により調べた。フェルミ面は金属を特徴づける最も重要な物理概念であり、バンドがフェルミ準位を横切る波数によって構成される曲面である。

通常の強磁性金属においては、強磁性が発現する温度（キュリー温度）以上では、スピン分極のないフェルミ面になることが期待される。この予想に反して、強結合領域にいる強磁性体においては、キュリー温度以上においても、スピン分極がないのにも関わらずスピン分極が存在するかのようなフェルミ面を示し得ることが明らかになった。

この異常金属現象は、実空間で働くフント結合が有効的に波数空間内でも発現することによって引き起こされることがわかった。この発見により、“Hund’s metal” と呼ばれるフント結合由来の一連の強相関現象の新たな側面が明らかになった。この成果も *Phys. Rev. Lett.* 誌に掲載された [*Phys. Rev. Lett.* **128**, 206401 (2022)]。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計18件（うち査読付論文 18件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 6件）

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 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 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, 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 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 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 Ca5Ir3O12	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 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 Huebsch M-T, Nomura Y, Sakai S, Arita R	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 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 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 Nomura Yusuke	4. 巻 89
2. 論文標題 Machine Learning Quantum States Extensions to Fermion-Boson Coupled Systems and Excited-State Calculations	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 054706-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.054706	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, Nomura Yusuke, Gull Emanuel	4. 巻 252
2. 論文標題 Efficient implementation of the continuous-time interaction-expansion quantum Monte Carlo method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 106826-1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2019.06.016	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 Tsuji Naoto, Nomura Yusuke	4. 巻 2
2. 論文標題 Higgs-mode resonance in third harmonic generation in NbN superconductors: Multiband electron-phonon coupling, impurity scattering, and polarization-angle dependence	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 043029-1-16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.043029	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 Wang Tianchun, Nomoto Takuya, Nomura Yusuke, Shinaoka Hiroshi, Otsuki Junya, Koretsune Takashi, Arita Ryotaro	4. 巻 102
2. 論文標題 Efficient ab initio Migdal-Eliashberg calculation considering the retardation effect in phonon-mediated superconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134503-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.134503	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, Nomoto Takuya, Hirayama Motoaki, Arita Ryotaro	4. 巻 2
2. 論文標題 Magnetic exchange coupling in cuprate-analog d9 nickelates	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 043144-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.043144	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 Hirschberger Max, Nomura Yusuke, Mitamura Hiroyuki, Miyake Atsushi, Koretsune Takashi, Kaneko Yoshio, Spitz Leonie, Taguchi Yasujiro, Matsuo Akira, Kindo Koichi, Arita Ryotaro, Tokunaga Masashi, Tokura Yoshinori	4. 巻 103
2. 論文標題 Geometrical Hall effect and momentum-space Berry curvature from spin-reversed band pairs	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L041111-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.L041111	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 野村悠祐、平山元昭、北谷基治、只野央将、有田亮太郎	4. 巻 55
2. 論文標題 ニッケル酸化物新超伝導体の発見：現状と展望	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 491~503
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 野村悠祐	4. 巻 56
2. 論文標題 機械学習手法を用いて量子多体系に挑む 手法拡張を含む最近の進展	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 117~130
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 -

〔学会発表〕 計20件 (うち招待講演 12件 / うち国際学会 10件)

1. 発表者名 Yusuke 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

1. 発表者名 Yusuke 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 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
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yusuke 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 Yusuke 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 Yusuke 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 Yusuke 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 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 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 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 Yusuke 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 Yusuke Nomura
2. 発表標題 Application of machine learning beyond benchmarks reveals Dirac-type nodal spin liquid in the J1-J2 Heisenberg model
3. 学会等名 Machine Learning for Quantum Simulation (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 ボルツマンマシンを用いた量子多体波動関数表現：深層ボルツマンマシンによる厳密な表現と制限ボルツマンマシンによる数値的近似表現
3. 学会等名 Deep learning and Physics 2020 (招待講演)
4. 発表年 2020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 —手法拡張を含む最近の進展
3. 学会等名 CMTセミナー (招待講演)
4. 発表年 2020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NdNiO <sub>2</sub> における強相関電子系形成と新物質デザイン
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会2020 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yusuke Nomura
2. 発表標題 Machine learning quantum states    Extension of methods and application to frustrated spin systems
3. 学会等名 International Conference on Fugaku project Emergence and Functionality of Quantum Matter 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 ニッケル酸化物新超伝導体における強相関電子系形成と物質デザイン
3. 学会等名 京都大学基礎物理学研究所 研究会 「高温超伝導・非従来型超伝導研究の最前線：多様性と普遍性」 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 機械学習を用いた2次元J1-J2ハイゼンベルグ模型の研究
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2020」 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 野村悠祐
2. 発表標題 機械学習を用いた量子多体波動関数表現：物理の難問であるフラストレーションのある量子スピン系への適用
3. 学会等名 第11回材料系ワークショップ ～マテリアルDXを加速する「富岳」を活用した成果の創出に向けて～
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yusuke Nomura
2. 発表標題 Magnetic exchange coupling in theoretically-designed cuprate-analog d9 nickelates
3. 学会等名 APS March meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

野村研究室HP <a href="https://www.nomura-lab.appi.keio.ac.jp">https://www.nomura-lab.appi.keio.ac.jp</a> Yusuke Nomura's Website <a href="https://sites.google.com/view/yusuke-nomuras-webpage-jp">https://sites.google.com/view/yusuke-nomuras-webpage-jp</a> Google Scholar <a href="https://scholar.google.co.jp/citations?user=ZPMcgB8AAAAJ&amp;hl=ja&amp;oi=ao">https://scholar.google.co.jp/citations?user=ZPMcgB8AAAAJ&amp;hl=ja&amp;oi=ao</a>
---

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