

令和 6 年 6 月 25 日現在

機関番号：12401

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01003

研究課題名（和文）次元圧縮技術が拓く二粒子応答の第一原理計算

研究課題名（英文）First-principles calculations of two-particle response realized by dimensionality reduction

研究代表者

品岡 寛 (Shinaoka, Hiroshi)

埼玉大学・理工学研究科・准教授

研究者番号：40773023

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,400,000円

研究成果の概要（和文）：(1)「スパースモデリング」に基づくグリーン関数の圧縮技術の開発とオープンソースソフトウェアの公開。(2) 准量子計算技術Quantics Tensor Train (QTT)に基づく、場の量子論の次元圧縮技術を開発し、ベテ・サルペータ方程式の解法などをテンソルネットワークで実現。(3)RESPACKとWannier90のインターフェースを開発し、有効相互作用の計算を可能にした。(4) 動的平均場計算ソフトウェアDCoreを用いて、SrRu206のスピンの励起スペクトルを計算し、クロスオーバーに伴う変化を調査した結果、スピンの励起スペクトルは低温構造解明には不十分であることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の最大の成果は、テンソルネットワークという汎用的な次元圧縮技術により、場の量子論計算を高速化する道筋を開いたことにある。これにより、巨大な多次元数値データである二粒子応答関数において、一般的な時空依存性、スピン軌道依存性などの圧縮が可能になり、外場応答の第一原理計算に大きく前進した。研究成果は、社会還元のため、オープンソースソフトウェアの形で順次公開されている。

研究成果の概要（英文）：(1) Developed Green's function compression techniques based on "sparse modeling" and released open-source software. (2) Developed dimensionality reduction techniques for quantum field theory based on the quasi-quantum computation technique, Quantics Tensor Train (QTT), and implemented the solution of the Bethe-Salpeter equation using tensor networks. (3) Developed an interface between RESPACK and Wannier90, enabling the calculation of effective interactions. (4) Using the dynamical mean-field calculation software DCore, calculated the spin excitation spectrum of SrRu206. The investigation of changes due to crossover revealed that the spin excitation spectrum is insufficient for elucidating the low-temperature structure.

研究分野：量子多体理論

キーワード：量子多体理論 量子埋め込み理論 テンソルネットワーク

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

強相関電子系においては、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、高温超伝導や巨大磁気抵抗に代表される非自明な相や特異な外場応答など、実用的に有用な様々な機能物性が発現する。一方、相関効果の取り扱いには技術的困難が伴い、機能物質設計の実現に向けた大きな障壁となっている。**機能性強相関物質の理論主導設計を実現し、産業・社会変革に貢献できるか?**本研究はこの本質的問題に取り組む。

近年、物性基礎研究や機能性物質の設計に、密度汎関数理論 (DFT) に基づく電子構造計算 (バンド計算) が広く行われ、弱相関系で多くの成功を収めている。一方、遷移金属化合物などでは、バンド計算では記述できない、モット絶縁体など相関効果に起因した特異な物性が発現する。この 10 年程の間に、DFT と動的平均場理論 (DMFT) などの強相関モデル計算の手法の融合が進み、強相関物性の定量的評価が可能になりつつある。特に成功している DFT+DMFT 法では、角度分解光電子分光によって調べられるスペクトル関数 (一粒子応答) の定量計算が可能である。

一方、**機能物性を評価する上で、外場への応答を表す感受率 (二粒子応答) が重要な役割を果たす。**例えば、感受率は材料性能そのもの (磁気抵抗・輸送係数など) を表すだけではなく、磁性や超伝導状態への相転移温度の決定にも利用される。しかし、二粒子応答計算ではバーテックス関数などの**高次元数値データ**の取り扱いが必要となる。現実物質では軌道、原子、振動数、波数など複数の自由度を持ち計算コストが非常に高くなるため、これまで非現実的な高温や単純な少数バンドモデルの解析に留まっている (G. Rohringer *et al.* 2018 など)。実験との比較や理論主導の強相関物質の設計に向け、現実物質での二粒子応答計算の早急な実現が望まれている。

2. 研究の目的

本研究の目的は、独自の情報圧縮技術により数値計算上のボトルネックを解消した、二粒子応答の新規第一原理計算手法を開発することである。これにより、強相関化合物の安定秩序状態の自動探索、輸送係数の定量的評価、非従来型超伝導の転移温度予測を初めて可能にし、強相関機能物性の定量的な実験との比較を実現することで、物質設計のブレークスルーを起こす。

3. 研究の方法

二粒子応答計算の最大の障壁は、軌道、原子、振動数、波数など複数の自由度を持つ**高次元データ (二粒子グリーン関数やバーテックス関数) の扱い**にある。計算量と必要なメモリ量は、これら自由度の数に対して急速に増大し、最新の並列計算機でも取り扱える見込みは無い。そのため、革新的な計算理論の開発無しには、この課題の実現は不可能な状況だった。その状況の中、近年、科研費・若手研究(B) (2016-2018) および基盤研究 B (2018-2020 分担) において、品岡 (代表) は、吉見 (分担)、大槻 (分担) 等と協力し、**信号処理技術「スパースモデリング」に基づく、グリーン関数の数値データの次元圧縮技術を開発**した。この独自技術によって二粒子応答計算のコストを近似無しに大幅削減し、数値的な困難を打破する道が拓かれた。本研究では、この独自技術を発展させ、**二粒子応答計算の最大のボトルネックである種々のダイアグラム方程式を、データを圧縮したまま高速に解く計算手法開発**に挑む。

4. 研究成果

以下に主な成果を概観する。

(1) 「スパースモデリング」に基づくグリーン関数の圧縮技術の開発とオープンソースソフトウェア開発

温度グリーン関数の中間表現 (IR) を複数周波数に依存したバーテックス関数に拡張し、ベータ・サルペータ方程式などを高速に解く計算手法を開発した。この手法を用いることで、低周波数から高周波数までの周波数依存性を精密に記述できる [Wallerberger2021]。また、温度グリーン関数の中間表現のオープンソース実装を開発し [Wallerberger2023]、オンラインチュートリアルと共に公開した。この成果は、品岡 (代表)、大槻 (分担)、吉見 (分担)、是常 (分担) らとウィーン工科大学の共同研究の成果である。

(2) 准量子計算技術 Quantics Tensor Train (QTT) に基づく汎用的な次元圧縮技術の開発

本成果は、品岡 (基盤 B) 代表が従事する JST さきがけ「量子情報処理」の課題との共同成果である。IR 基底によるアプローチでは、松原周波数、虚時間依存性のみしか圧縮できず、実時間、実空間・波数空間依存性、さらにはスピン軌道依存性の圧縮は不可能であった。JST さきがけ側の課題から着想を得、准量子計算技術 Quantics Tensor Train (QTT) により、上記の一般的な依存性に対する汎用的な場の量子論計算向けの次元圧縮技術を発見した [Shinaoka2023]。これにより、場の量子論に現れる多くの相関関数の時空依存性をテンソルネットワークにマップするこ

とが可能になり、ベータ・サルペータ方程式の解法などのダイアグラム操作が、テンソルネットワークの操作として実現できることが明らかになった。

この成果は国際的に高い評価を得、新規国際共同研究 (ドイツ、フランス)にも繋がった [Ritter2024]。この論文では、テンソルネットワークに対する能動学習技術 Tensor Cross Interpolation (TCI)と QTT を組み合わせることで、計算コストに対して計算誤差が指数的に収束するような、高速かつ高精度な波数数値積分が可能であることを示している。

QTT、TCIに関するこれらの成果により、場の量子論とテンソルネットワークを繋ぐ新しい橋を作ることに成功し、今後多数の国際共同研究が期待される。

(3) 第一原理計算に向けた要素技術の開発

一方、(1), (2)で開発した次元圧縮技術の第一原理計算への応用に向けて、要素技術の開発を行った。特に、吉見(分担)、是常(分担)は、低エネルギー有効模型の電子相互作用を第一原理的に計算する国産ソフトウェア RESPACK と、低エネルギー軌道 (最局在ワニア関数)を構成するオープンソースソフトウェア Wannier90 を接続するインターフェースを開発した [Kurita2023]。世界標準の Wannier90 で作製した最局在軌道をもとに、有効相互作用が計算できるようになった。RESPACK は日本を中心に開発されているソフトウェアであり、今後の物性研究において日本の立場を向上させる成果である。

(4) 応用計算: 磁性の第一原理計算

また、品岡(代表)、吉見(分担)、大槻(分担)らが開発する動的平均場計算ソフトウェア DCore による応用計算を、品岡(代表)、播木(分担)が Kuneš グループ(当時ウィーン工科大学)と共同で行った [Csontosová2023]。本研究では、絶縁物質 SrRu2O6 のスピン励起スペクトルを動的平均場近似に基づいてベータ・サルペータ方程式を解くことで計算した。特に、フント結合の大きさによって、系が Mott insulator と covalent insulator の間をどのようにクロスオーバーするかを調べた。その結果、クロスオーバーに伴い、スピン励起スペクトルには大きな変化は現れず、系の低温構造を実験的に解明するにはスピン励起スペクトルは不十分であることが分かった。この結果は、本物質に対する今後の実験研究に示唆を与える。

[Csontosová2023] D. Csontosová, J. Chaloupka, H. Shinaoka, A. Hariki, J. Kuneš. *Hidden covalent insulator and spin excitations in SrRu2O*. *Phys. Rev. B* **108**, 195137 (2023).

[Kurita2023] K. Kurita, T. Misawa, K. Yoshimi, K. Ido, T. Koretsune. *Interface tool from Wannier90 to RESPACK: wan2respack*. *Computer Physics Communications* **292**, 108854 (2023).

[Ritter2024] M. K. Ritter, Y. Núñez Fernández, M. Wallerberger, J. von Delft, H. Shinaoka and X. Waintal. *Quantics Tensor Cross Interpolation for High-Resolution, Parsimonious Representations of Multivariate Functions in Physics and Beyond*. *Phys. Rev. Lett.* **132**, 056501 (2024).

[Shinaoka2023] H. Shinaoka, M. Wallerberger, Y. Murakami, K. Nogaki, R. Sakurai, P. Werner, and A. Kauch. *Multiscale Space-Time Ansatz for Correlation Functions of Quantum Systems Based on Quantics Tensor Trains*. *Phys. Rev. X* **13**, 021015 (2023).

[Wallerberger2021] M. Wallerberger, H. Shinaoka, A. Kauch. *Solving the Bethe-Salpeter equation with exponential convergence*. *Phys. Rev. Research* **3**, 033168 (2021).

[Wallerberger2023] M. Wallerberger, S. Badr, S. Hoshino, F. Kakizawa, T. Koretsune, Y. Nagai, K. Nogaki, T. Nomoto, H. Mori, J. Otsuki, S. Ozaki, R. Sakurai, C. Vogel, N. Witt, K. Yoshimi, H. Shinaoka. *Sparse-ir: optimal compression and sparse sampling of many-body propagators*. *SoftwareX* **21**, 101266 (2023).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計35件（うち査読付論文 26件 / うち国際共著 14件 / うちオープンアクセス 11件）

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 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 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., N. F. 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 D. Csontosov, J. Chaloupka, H. Shinaoka, A. Hariki, J. Kunes	4. 巻 108
2. 論文標題 Hidden covalent insulator and spin excitations in SrRu2O	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.108.195137	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 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 Shimizu Makoto, Otsuki Junya, Jeschke Harald O.	4. 巻 108
2. 論文標題 Magnetic fluctuations in Pb ₉ Cu (PO ₄) ₆ O	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 CrGeTe	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 Nomoto Takuya, Minami Susumu, Yanagi Yuki, Suzuki Michi-To, Koretsune Takashi, Arita Ryotaro	4. 巻 109
2. 論文標題 High-throughput calculations of antiferromagnets hosting anomalous transport phenomena	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094435-1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.094435	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, Koretsune Takashi	4. 巻 93
2. 論文標題 X-ray Magnetic Circular Dichroism Arising from the Magnetic Dipole Moment in Antiferromagnets	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 024705-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.93.024705	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 Wang Tianchun, Nomoto Takuya, Koretsune Takashi, Arita Ryotaro	4. 巻 178
2. 論文標題 Importance of self-consistency in first-principles Eliashberg calculation for superconducting transition temperature	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics and Chemistry of Solids	6. 最初と最後の頁 111348 ~ 111348
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpccs.2023.111348	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 Hariki A., Takahashi Y., Kunes J.	4. 巻 109
2. 論文標題 X-ray magnetic circular dichroism in RuO ₂	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094413-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.094413	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 Mondal Debasish, Mahapatra Smruti Rekha, Derrico Abigail M., Rai Rajeev Kumar, Paudel Jay R., Schlueter Christoph, Gloskovskii Andrei, Banerjee Rajdeep, Hariki Atsushi, DeGroot Frank M. F., Sarma D. D., Narayan Awadhesh, Nukala Pavan, Gray Alexander X., Aetukuri Naga Phani B.	4. 巻 14
2. 論文標題 Modulation-doping a correlated electron insulator	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 6210-1~11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-023-41816-3	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 Anzai Hiroaki, Hariki Atsushi, Sato Hitoshi, Arita Masashi, Zhuang Tao, Hiraoka Koichi	4. 巻 108
2. 論文標題 Observation of temperature-dependent Fermi surface evolution at the valence transition of YbInCu ₄	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 075116-1 ~8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.075116	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 Kato Yuta, Huang Meng-Jie, Kasebayashi Keito, Kawakami Takateru, Yamaguchi Tatsuya, Buck Jens, Wang Ru-Pan, Kallne Matthias, Rossnagel Kai, Nagel Peter, Schuppler Stefan, Takahashi Yoshihiro, Otake Takao, Kawaguchi Shogo, Yamada Ikuya, Hariki Atsushi	4. 巻 7
2. 論文標題 Electronic structure of ACu ₃ Co ₄ O ₁₂ (A = Y, La, Bi): Synthesis, characterization, core-level spectroscopies, high-pressure application, and ab initio calculation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 073401-1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.7.073401	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 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 ~ 101266
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 無
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, Chikano Naoya, Gull Emanuel, Li Jia, Nomoto Takuya, Otsuki Junya, Wallerberger Markus, Wang Tianchun, Yoshimi Kazuyoshi	4. 巻 -
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 63
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 無
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 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 34703
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 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 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 23219
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 無
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 35001
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 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 F. Hirokazu, T. Kensei, O. Junya, T. Nayuta, J. Harald O., W. Takanori, Y. Yuko, H. Wataru, K. Noriyuki, T. Atsushi, K. Masashi, H. Masato, N. Takao, Y. Onuki, Y. Koichiro, H. Ayumi, K. Kenta, S. Shik, H. Koji, K. Hiroshi, M. Yuji, Y. Takayoshi	4. 巻 106
2. 論文標題 Anomalously large spin-dependent electron correlation in the nearly half-metallic ferromagnet CoS ₂	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 85114
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 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 Koretsune Takashi	4. 巻 285
2. 論文標題 Construction of maximally-localized Wannier functions using crystal symmetry	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108645 ~ 108645
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2022.108645	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 Oike H., Ebino T., Koretsune T., Kikkawa A., Hirschberger M., Taguchi Y., Tokura Y., Kagawa F.	4. 巻 106
2. 論文標題 Topological Nernst effect emerging from real-space gauge field and thermal fluctuations in a magnetic skyrmion lattice	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214425
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.106.214425	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 Wang Tianchun, Flores-Livas Jose A., Nomoto Takuya, Ma Yanming, Koretsune Takashi, Arita Ryotaro	4. 巻 105
2. 論文標題 Optimal alloying in hydrides: Reaching room-temperature superconductivity in LaH10	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 174516
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.174516	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 該当する

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 ~ 101266
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, 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 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 033168-1-18
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 -

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 Shinaoka Hiroshi, Chikano Naoya, Gull Emanuel, Li Jia, Nomoto Takuya, Otsuki Junya, Wallerberger Markus, Wang Tianchun, Yoshimi Kazuyoshi	4. 巻 なし
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 63-1-27
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 Ito Naohiro, Nomoto Takuya, Kobayashi Koji, Mankovsky Sergiy, Nomura Kentaro, Arita Ryotaro, Ebert Hubert, Koretsune Takashi	4. 巻 105
2. 論文標題 Wannier-based implementation of the coherent potential approximation with applications to Fe-based transition metal alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125136-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.125136	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 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 Padé 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 -

〔学会発表〕 計5件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 2件)

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 品岡寛
2. 発表標題 Multiscale space-time ansatz for response functions of quantum systems
3. 学会等名 Trends in the Theory of Quantum Materials 2022（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 品岡寛
2. 発表標題 Quantics tensor trains and many-body physics
3. 学会等名 物性研究のための量子アルゴリズム最前線（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hiroshi Shinaoka
2. 発表標題 Sparse modeling approach to analytical continuation of imaginary-time data and quantum many-body calculations
3. 学会等名 Tackling the real time challenge in strongly correlated systems: spectral properties from euclidean path integrals（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021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
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	大槻 純也 (Otsuki Junya) (60513877)	岡山大学・異分野基礎科学研究所・准教授 (15301)	
研究分担者	是常 隆 (Koretsune Takashi) (90391953)	東北大学・理学研究科・准教授 (11301)	
研究分担者	播木 敦 (Hariki Atsushi) (90875783)	大阪公立大学・大学院工学研究科・助教 (24405)	

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			
米国	ミシガン大学			
オーストリア	ウィーン工科大学			
ドイツ	ミュンヘン大学			
スイス	フリブール大学			