

CREST「情報計測」(2) 「機械学習アプローチによる量子多体状態探求」

遠山 貴巳 Takami Tohyama

東京理科大学 理学部 応用物理学科



量子力学の下では電子波動関数がミクロな物性を決めているため、波動関数自体を予測できれば物質・材料の物性予測が可能となる。電子の波動関数は場所の関数なので、結晶中の格子点に値をもつ「画像」として波動関数をとらえれば機械学習のアプローチが適用できる。しかし、そのような単純なアプローチが可能なのは電子間に相互作用がない系に限られる。もし電子間に強い相互作用が働くと、各格子点に複素数をもつ画像として表現することは不可能で、スレーター行列式の重ね合わせとして記述しなければならない。そのときの、基底の個数は16格子点の半充填(ハーフフィールド)ハバード模型であっても、 10^8 という膨大な値になるため、量子多体状態の予測に機械学習を使おうとすると、波動関数を表現可能な少数の情報量が必要となる。もしそのような情報量が得られれば、基底状態だけでなく、例えば光励起による非平衡状態の特徴を明らかにすることが可能となる。われわれは計測と情報を結び付ける研究の中で、波動関数の絡み合いの指標となるエンタ

ングルメント・スペクトルと呼ばれる量が、膨大な基底からなる波動関数の情報をただか数百のデータで記述できる最適な「画像」となっていることを突き止めた。

その適用例として一次元ハーフフィールド拡張ハバードモデルの量子相判別を紹介する。密度行列繰り込み群法と呼ばれる数値計算手法によってエンタングルメント・スペクトルを得たのち、ニューラルネットワークを構築することで、模型の二つのパラメータ空間(オンサイトクーロン相互作用 U と次近接相互作用 V)からなる量子相図を再現した[1]。さらに、光励起されたときのような量子相が出現可能か調べるため、光照射後のエンタングルメント・スペクトルを入力することで、量子状態を判別させた。ボンド電荷密度波状態にポンプ光を照射すると、ボンドスピン密度波状態と呼ばれる状態が出現することを予測し、実際、秩序パラメータの

計算により確認した[2]。また、教師なし機械学習を用いた光励起状態の解析にも取り組んでいる。相互情報量を最大化するようにニューラルネットワークを構成する手法により、ポンプ光照射前(時間 $t=0$)を三つの領域に区別した(図参照)。黄色は電荷密度波状態、赤色はスピン密度波状態、それらの間の青色はボンド秩序波状態に対応している。次にポンプ光照射後($t=8.6$)も三つの領域に分けた結果、電荷密度波状態の領域が小さな V まで張り出してきていることがわかった[3]。これは、過去の研究と整合する結果である。現在は、光誘起による超伝導相の予測を進めている。

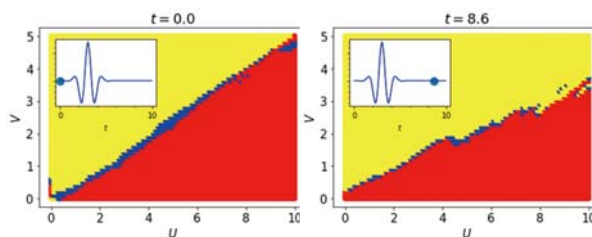


図 教師なし機械学習手法による20サイト一次元拡張ハバードモデルの V - U 相図。(左)ポンプ光照射前($t=0$)、(右)ポンプ光照射後($t=8.6$)。挿入図はポンプ光の波形を示しており、それぞれ●で示した時刻での相図となっている。

参考文献

- [1] K. Shinjo, K. Sasaki, S. Hase, S. Sota, S. Ejima, S. Yunoki, and T. Tohyama, J. Phys. Soc. Jpn. 88, 065001 (2019).
- [2] K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, Phys. Rev. B 101, 195136 (2020).
- [3] T. Nonomura, K. Shinjo, and T. Tohyama, in preparation.

関連 WEB

<https://mlinfo.jp/ja/>