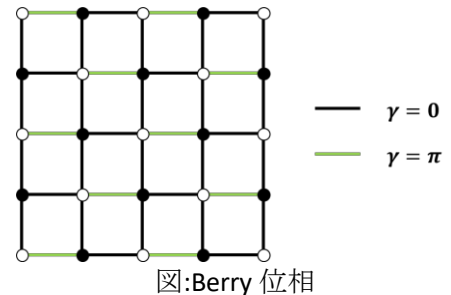


## 物性理論教室

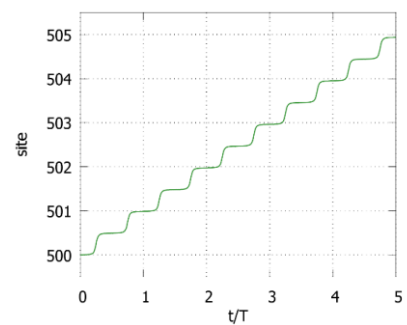
1  $\pi$ -flux 模型における Berry 位相の数値計算

質量ゼロのディラック電子をもつ  $\pi$ -flux 模型における状態密度と Berry 位相を厳密対角化法を用いて数値的に計算した。Berry 位相とは、ハミルトニアンが断熱的に時間変化したときに生じる位相である。 $\pi$ -flux 模型にダイマー型の秩序を導入した場合に、結果として Berry 位相はホッピングが強いところで  $\pi$ 、ホッピングが弱いところでは  $0$  となった。



## 2 指数演算子の高次分解を用いた Thouless pump の数値的研究

Thouless pump とは空間的に周期的な結晶構造中の原子のポテンシャルを時間に対して周期的に変化させることによって電子を輸送するシステムである。本研究では、時間発展演算子に対しての指数演算子の高次分解を応用し波束の運動を追い、ランダムポテンシャルの効果について調べた。その結果ランダムポテンシャルが弱ければ安定にポンプが起こることが確認できた。



## 3 二次元電子系における Berry 位相の量子的研究

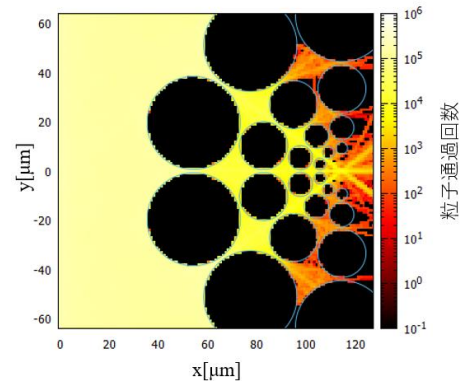
ケクレ型ボンド秩序をもった二次元六角格子のクラスターにおいて、Berry 位相を計算した結果、弱いボンドで  $0$ 、強いボンドで  $\pi$  に量子化することが確認できた。また、Vortex 構造の二次元クラスターおよび、周期境界条件を課したカゴメ格子上的電子系の強束縛模型について、 $Z_3$  の Berry 位相を計算した結果、Vortex 構造ではボンドの強弱に応じて  $0$  または  $2\pi/3$  に量子化し、カゴメ格子ではボンドが強いとき  $2\pi/3$  に量子化することが確認できた。さらに、周期境界条件を課したカゴメ格子のスピン系の異方的 XXZ 模型において  $Z_3$  の Berry 位相を計算した結果、異なる量子相に対応して、 $0$  または  $2\pi/3$  に量子化することが確認できた。

石井 航太

#### 4 弾道フォノンを用いた熱集積効果に対する理論的研究

高安 信行

一般的に、フォノンの輸送は拡散方程式に従う。フォノンは他のフォノンや不純物と衝突する。その結果、拡散的に熱輸送が行われる。しかし、数nm~数十 $\mu\text{m}$ 程度のスケールの系の時、系の特徴的な構造によってフォノンは弾道的に進む。本研究では、弾道的に進むフォノンによって熱が一部に集められるか(集熱効果)について調べた。具体的には、扇状に空孔配置がなされた系に粒子を入射し、境界や空孔表面において反射を起こすシミュレーションを行った。その結果、フォノンの軌跡から粒子が頻繁に通過する点得られ、集熱が生じていることが確認できた。

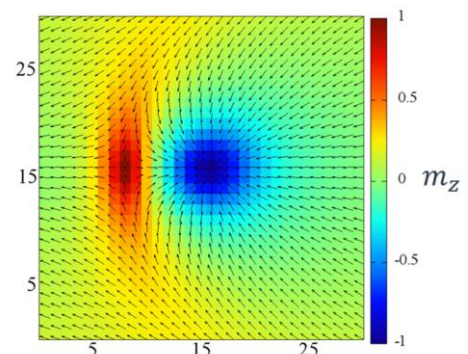


図：弾道フォノンによる集熱効果

#### 5 磁気異方性によって形成される非対称スカーミオンの磁化ダイナミクス

室岡 玲美

カイラル磁性体は Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用によりねじれた磁化構造をもち、静磁場の印加によりスカーミオンと呼ばれる渦状の磁化構造を形成する。最近このスカーミオンに対して磁気異方性効果を考慮することで、非対称な構造をもつスカーミオンが形成されることが報告された。本論文では非対称スカーミオンを Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 方程式を用いて再現した。さらにスカーミオン間の相互作用を計算し、スカーミオンの並び方によって、引力相互作用と斥力相互作用が働くことが分かった。また非対称スカーミオンに電流を印加すると、スピン移行トルクによって回転しながら駆動することが分かった。



図：非対称スカーミオン

#### 6 カイラル磁性体中の磁化状態に対する数値的研究

杉下 将哉

$\text{CrNb}_3\text{S}_6$ のようなカイラル磁性体は、1軸方向に周期的な螺旋構造を持つ。この軸に垂直な方向に外部磁場をかけた系をカイラルソリトン格子という(図1)。本研究ではこのカイラル磁性体の磁化曲線を理論的に計算した。具体的には、スピン交換相互作用とジャロシンスキー守谷相互作用を取り入れたマイクロマグネティクスシミュレーションを行った。得られた計算結果と実験結果を比較することで、カイラルソリトン格子の磁化状態を明らかにした。2次元系のモデルでは薄膜を用いた実験と同様の磁化曲線を描くことができた。3次元系のモデルでは、結晶構造に欠陥があることを想定して計算することで、バルクを用いた実験と同様の磁化曲線が得られた(図2)。

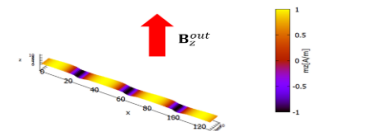


図1:カイラルソリトン格子

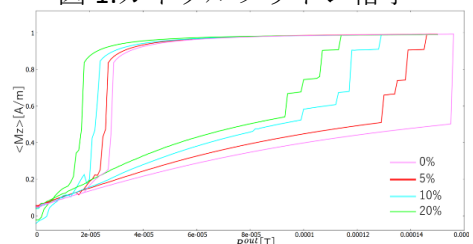
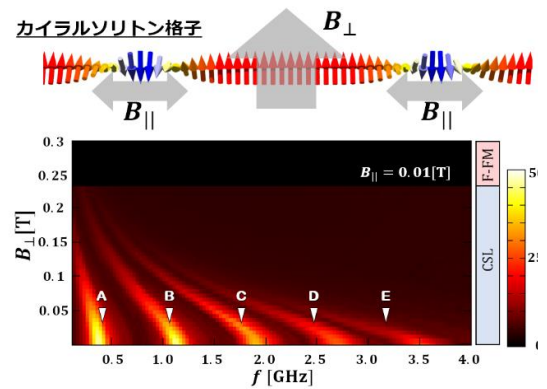


図2:欠損した系の磁化曲線

## 7 カイラル磁性体中の磁化ダイナミクスに対する数値的研究

小野寺 純一

カイラル磁性体中では、Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用によってねじれた磁化構造が実現される。本論文では、カイラル磁性体中の磁化ダイナミクスを、マイクロマグネティクスシミュレーションを用いて数値的解析を行った。また、ダイナミクスから得られるスピン起電力の計算を行った。特に、単軸のカイラル磁性体中に発現するカイラルソリトン格子の、AC 磁場応答に関して調べた。計算の結果、固定端を課した系では、磁気ソリトンが連成振動子のように振る舞い、バルク試料では見られなかった共鳴現象が起きることを明らかにした。また、磁気ソリトンが大きく振動する共鳴状態において、増幅されたスピン起電力が得られることが分かった。



図：固定端のカイラルソリトン格子のダイナミクスから得られるスピン起電力

## 8 階層型ニューラルネットワークを用いた物質設計

青木 秀太

近年、機械学習を用いて物質探索を行う試みが多く提案されている。本研究では与えられた二元化合物がキラル物質になるかどうかを判別するための機械学習モデル構築の研究を行った。まず、実験で得られているキラル物質群のデータベースから化合物の族とキラル物質の相関を調べた。機械学習のモデルとして単層ロジスティック回帰と多層パーセプトロンを用いた。学習の結果、多層パーセプトロンを用いたネットワークで正解率が 70%を超えた。

## 9 階層型ニューラルネットワークによる学習の数値的研究

高橋 健人

本研究ではニューラルネットワークの層状ネットワークでの学習を行った。単純パーセプトロンではパーセプトロンの学習則を用いて学習を行い、線形分離可能な課題の分類を行うことができた。多層パーセプトロンでは誤差逆伝播法を用いて学習を行い、線形分離不可能な課題の分類の境界を求めることができた(右図)。また、中間層を増やしていくことで学習の精度が上がることがわかった。学習率や学習回数、ニューロン数の関係から学習の正答率について調べた。多クラス問題の分類の境界を求めることができた。

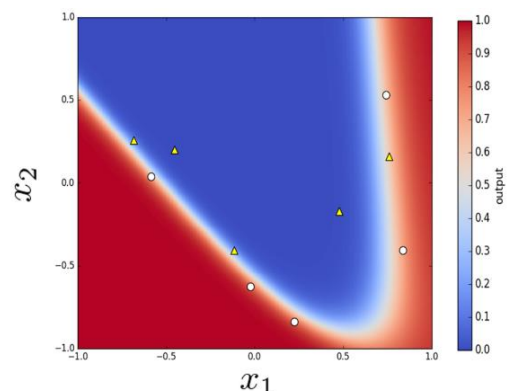


図:線形分離不可能な課題の分類の境界

## 10 相互結合型のネットワークを用いた記憶想起の数値的研究

堀池 倫生

ニューラルネットワークにおける想起について研究を行った。ニューロンのモデルを用いて想起させたいパターンを数値的に記憶させ、ランダムな初期条件から始めて最終的に記憶させたパターンが想起として出力されることを確認した。

## 11 量子アニーリングの数値的研究

名池 一武

基底状態がわかっているモデルで量子アニーリングの有効性を数値的に検証した。アニーリングの速度や精度を変えることで、求めたいハミルトニアン基底状態とのオーバーラップがどのように変化するかを確かめた。これをスピン間の相互作用を変えた複数のモデルで計算した。その結果、オーバーラップが 1 に漸近した場合とそうでない場合が確認できた。また、十分に 1 に近づかない時、どの状態にとられてしまったかを確認できた。