

物性研究所短期研究会

量子多体計算と第一原理計算の新展開

【会 場】 オンライン開催 (Webex Meetings、Slack)

【日 程】 2020 年 7 月 9 日 (木)、10 日 (金)

【世話人】 品岡寛 (埼玉大・代表)、大久保毅 (東大)、大槻純也 (岡大)、川島直輝 (物性研)、藤堂眞治 (東大)、三澤貴宏 (早大)、森田悟史 (物性研)

【U R L】 <https://fqcs2020.issp.u-tokyo.ac.jp/>

量子多体系の高精度計算に向けて、これまでに、動的平均場近似法、変分モンテカルロ法、テンソルネットワーク法といった様々な手法が開発され、一定の成功を収めてきた。また、第一原理計算との融合により、強相関物質の定量的物性予測を目指す試みも盛んになっている。さらに、近年、残された課題を解決するために、機械学習、量子コンピュータを使った新たなアプローチや、量子化学的手法との融合が興りつつある。計算物性物理で行われている、このような多彩なアプローチを背景に、異なる手法の研究者が一同に集い、情報を交換し、多角的な議論を行う機会が必要とされている。物性研究所は、スーパーコンピュータの共同利用を始めとして、計算物性物理学の重要拠点としての役割を果たしてきた。その拠点において、計算物性物理、量子多体計算、第一原理計算、量子化学、量子コンピューティングの専門家を集めた短期研究会を開催することは、今後のさらなる計算物性物理分野の発展において大きな意義があると考え、開催の提案に至った。

口頭講演(招待講演)は、若手世話人が中心となって候補者を推薦し依頼を行った。特に、研究会のテーマに沿って、量子多体系に関する第一原理計算、モデル計算の研究者に加え、量子コンピューティング、機械学習、情報理論の若手研究者を招待し、分野間の情報交換を狙った。最終的なプログラムは、口頭講演 20 件(内招待講演 11 件)、ポスター講演 15 件からなった。参加登録者は 180 名を数え、両日とも 150 名を超える出席者、リアルタイムでの同時参加者は最大 120 名程度であった。オンラインでの研究会は各自の興味・日程に合わせて柔軟に参加できるため、通常の物性研短期研究会に比べ多くの方にご参加いただけたと思う。

研究会の開催が決定した 2019 年度末から、新型コロナウイルスの国内での感染が広まり、当初の計画であるオフラインでの開催が危ぶまれる事態になった。世話人の間で、

延期、オンライン開催などの選択肢に関して議論が交わされ、研究会の新しい形を模索する意味でも、物性研短期研究会史上初めて、オンラインでの開催を行うことになった。Zoom の使用がセキュリティ上制約されている機関からの参加者が見込まれたため、口頭発表は Cisco 社の Webex Meetings を使用し、質疑応答やポスター発表は Slack のワークスペースを活用することになった。

口頭発表については事前にリハーサルを開催し、マイク等のテストや Webex での画面共有方法の確認などを講演者にいただいた。入念な準備により、当日は大きなトラブルなく進行することができた。Slack 上では講演者から自主的に講演スライドが投稿されるなど、講演終了後も積極的な情報交換が行われていた点は、オンライン開催の利点であった。

ポスター発表は、一人一分のポスタープレビューを Webex で行った後、Slack ワークスペース上に作成した個別のチャンネル上で質疑応答を行うという形式で開催した。YouTube への動画投稿や、Webex もしくは Zoom を用いたオンライン説明会を各自の責任で認めることにしたが、多くの発表者が後者の形式を採用しリアルタイムで活発に議論を交わしていた。Slack 上でも今後の共同研究の芽生えとなるような深い議論が行なわれていた。

研究会における情報交流の場になる懇親会は、オンライン会議システム Remo を使い開催した。Remo では、Zoom と違い、幾つかのテーブル間で参加者が自由に行き来でき、音声等がテーブル内で共有できるため、通常の懇親会の雰囲気や少しでも再現できたように思う。一方、Remo では、通信が Zoom に比べ不安定で、再ログインを要するケースが見られた。今後、Zoom のブレイクアウトルーム間で参加者が自由に移動できるようになれば、Zoom での懇親会開催も可能かもしれない。

会議の後、参加者からオンライン会議の利点・欠点に関してフィードバックを収集した。まだオンライン会議が一

最後に、本研究会を開催するにあたって、外来研究等委員を始めとする多くの方々にご助力いただきました。深く感謝申し上げます。

16:50 クロージング 藤堂 眞治

加藤 岳生（東大）	「二次元電子系におけるウィグナー結晶の変分モンテカルロ計算」
Wei-Lin Tu（東大）	「Exotic quantum phases of hard-core bosonic systems」
近藤 千尋（東大）	「Replica Exchange Wang-Landau 法によるエンタングルメント・エントロピーの計算手法の改良」
中野 颯（東大）	「非平衡環境下における非可積分量子多体系の熱平衡化現象」
松本 宗久（高エネ研）	「LDA+DMFT におけるデータ統合の視点」
岡田 健（東大）	「多変数変分モンテカルロ法によるツイスト二層グラフェンの研究」
稲吉 健（東工大）	「二軌道 Penrose-Hubbard モデルにおける励起子凝縮」
近野 直也（埼玉大）	「3 軌道ハバード模型における多極子秩序の理論的研究」
柿澤 文哉（埼玉大）	「カゴメ格子上の J1-J2 古典反強磁性ハイゼンベルグ模型の有限温度相図」
井戸 康太（東大）	「物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps」
荻野 卓啓（東大）	「スピンラダー系における Neel-VBS 連続相転移の数値的検証」
乾 幸地（東大）	「2 チャンネル近藤格子模型が磁場中で示すチャンネル選択型非フェルミ液体状態と重い電子的挙動」
本山 裕一（東大）	「二次元量子格子系テンソルネットワークソルバーパッケージ TeNeS」
品岡 寛（埼玉大）	「温度グリーン関数の圧縮基底ライブラリ irbasis の紹介と実践」
大久保 毅（東大）	「密度行列のテンソルネットワーク表現による有限温度キタエフ模型の解析」

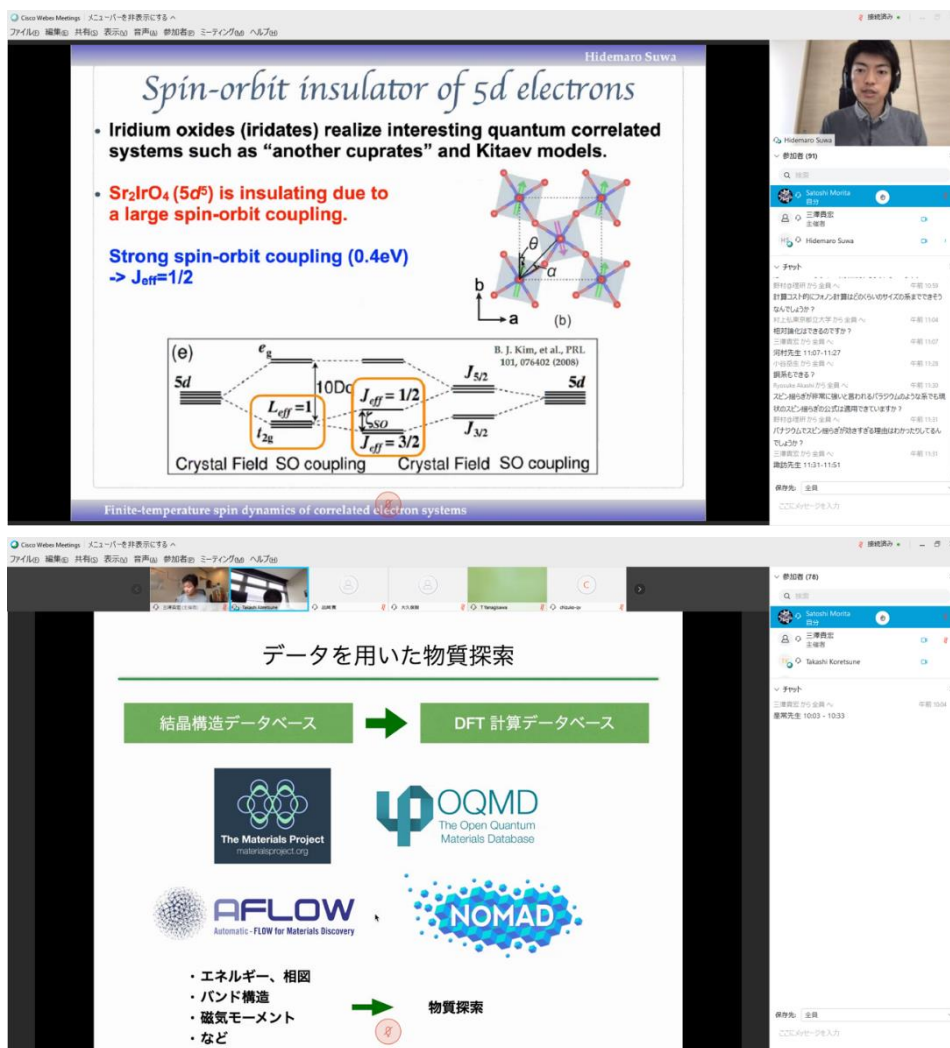


図 1: Webex Meetings での口頭発表



図 2: Slack ワークスペース



図 3: オンライン会議上での集合写真（一部）

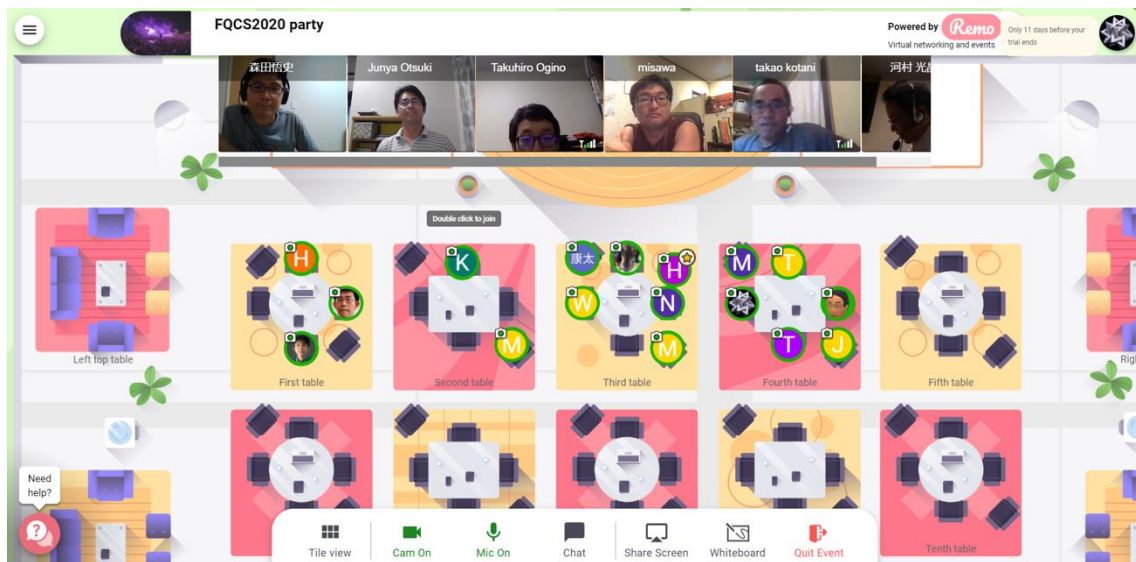


図 4: Remo を用いた懇親会