

深層学習を用いた2次元ランダム電子系の量子相転移の研究

不純物や格子欠陥により結晶周期性が乱れている固体電子系は、金属相、アンダーソン絶縁体相、量子ホール絶縁体相、量子異常ホール絶縁体相、量子スピンホール相、トポロジカル絶縁体相、ワイル半金属相など様々な物質相を示す。それぞれの相において電子の波動関数は固有の特徴をもつ。しかし、実際に波動関数を眺めてみても、不純物等により波動関数の振幅は大きく揺らぎ、その特徴をつかむことは困難である。この研究ではここ数年著しい進歩を見せた多層畳み込みニューラルネットワークを用いた機械学習、いわゆる深層学習を用いて、結晶周期性が乱れた電子系の波動関数を画像解析した。これにより2次元の金属-絶縁体転移、および量子異常ホール絶縁体-絶縁体転移が深層学習により同定できることを実証した。

不純物や格子欠陥により結晶周期性が乱れている固体、いわゆるランダム電子系は、金属相、絶縁体相、量子ホール相、量子異常ホール相、量子スピンホール相、トポロジカル絶縁体相、ワイル半金属相など様々な物質相を示す。それぞれの相において電子の波動関数は固有の特徴をもち、波動関数の特徴を追うことで量子相転移を調べることが原理的には可能である。例えば、金属的な伝導を示す広がった波動関数は、不純物の強さを強くしていくと局在し、その結果系は絶縁体になる。これはアンダーソン転移として広く知られている。アンダーソン転移の様子は波動関数の広がり具合を観察すればわかるはずである。しかし、実際に波動関数を眺めてみても、不純物等の不規則性により波動関数の振幅は大きく揺らぎ、その特徴をつかむことは困難である。

また、最近注目を集めているトポロジカル絶縁体[1]では、結晶周期性が乱れていないことを仮定し、ブロッホ関数によりトポロジカル数を定義する。結晶周期性が乱れた系でも、トポロジカル絶縁体はある程度安定だと思われているが、結晶周期性がわずかでも乱れると通常の設定はできなくなる。完全な結晶は存在しないので、結晶周期性が乱れたトポロジカル絶縁体の定義[2]と同定[3]は重要な課題である。

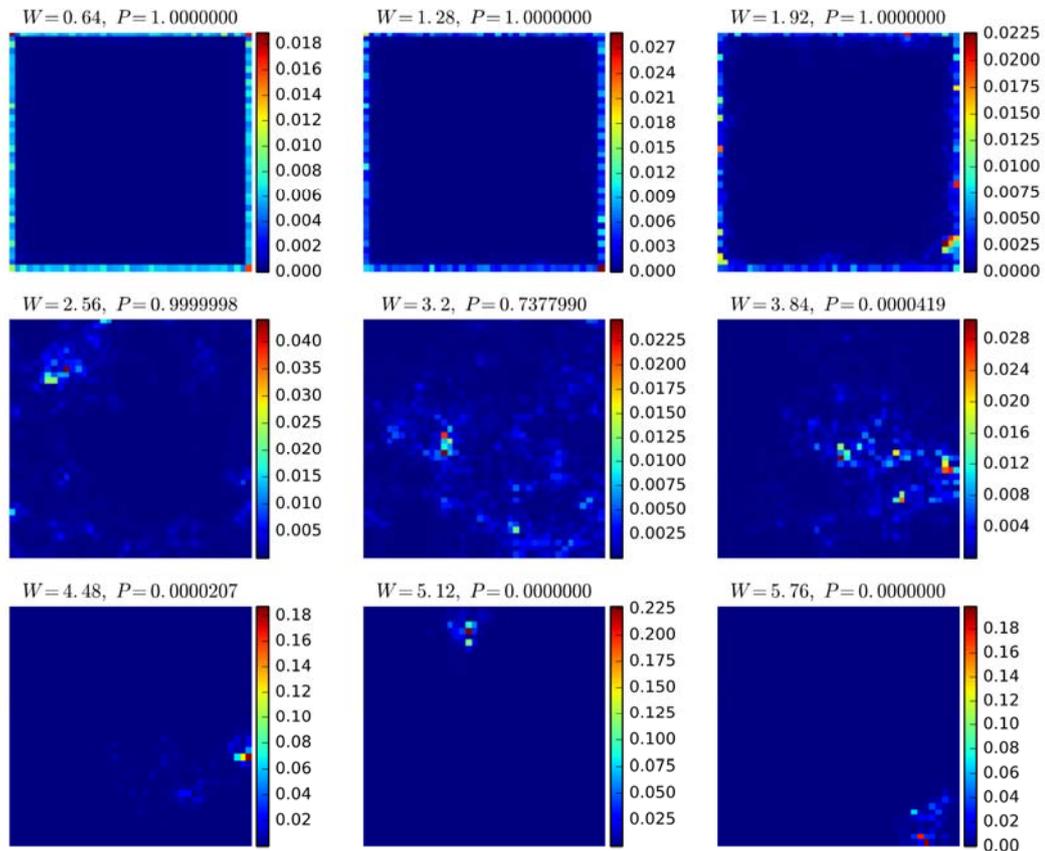


図 1：乱れた 2 次元トポロジカル絶縁体のバンド中心の波動関数。トポロジカル絶縁体では端状態が期待される。 W はランダムネスの度合いで $W=3.2$ 付近でトポロジカル絶縁体は通常の絶縁体に転移すると考えられている。 P は深層学習によりこれらの波動関数がトポロジカル絶縁体特有のものである確率を示す。 $W=3.2$ 前後で確率が大きく変化していることが示された。

NTT データ数理システムの大槻知貴と上智大学理工学部の大槻東巳は、ここ数年著しい進歩を見せた、畳み込みニューラルネットワークを用いた機械学習、いわゆる深層学習による画像認識を用いて、こうしたランダムな電子系の波動関数を画像解析した。彼らははじめに数千の波動関数を用意し、この波動関数の確率密度を画像とみなし、局在相、金属相、トポロジカル絶縁体相における波動関数の特徴を機械学習により抽出した。これにより未知の波動関数がどの量子相に属しているかが判定できるようになり、2 次元の金属-絶縁体転移、およびトポロジカル絶縁体-アンダーソン絶縁体転移(図 1)が同定できることを実証した。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 *Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)* の 2016 年 12 月号に掲載された。

論文では 2 次元電子系の局在・非局在、およびトポロジカル・非トポロジカルの 2 値問題をあつかったが、この方法は 3 次元系にも容易に拡張でき、また 3 相以上を示す系における多値問題を扱うことができる。実際、3 次元トポロジカル絶縁体は、強いトポロジカル絶縁相 (STI)、弱いトポ

ロジカル絶縁相 (WTI), 通常の絶縁相 (OI), 金属相を示すが[3], 本手法によりこれらが容易に判定できる (図 2)。深層学習を用いた固体物理学の研究は始まったばかりである。本研究はランダム電子系への応用を扱ったが, arXiv には古典, 量子スピン系, 多体電子問題などへの深層学習の応用も投稿されている。今後の発展が楽しみである。

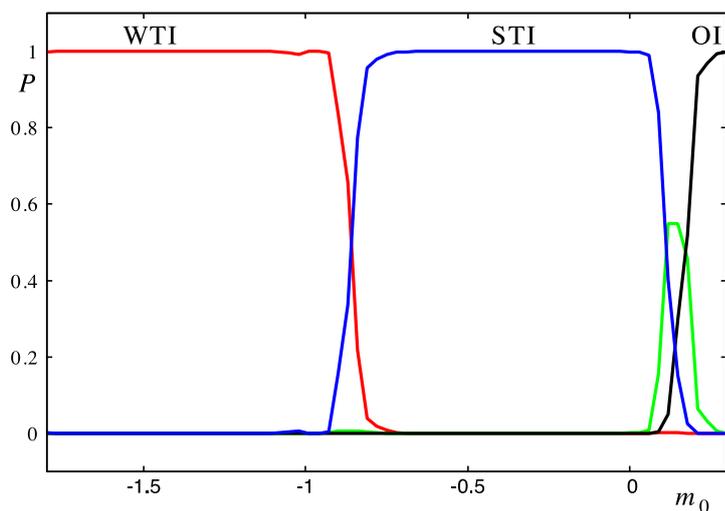


図 2: 結晶周期性をもつ 3 次元トポロジカル絶縁体は, バンドギャップパラメータ m_0 を変化させるとで, WTI ($-2 < m_0 < -1$), STI ($-1 < m_0 < 0$), OI ($0 < m_0$) と変化する。図は結晶周期性がないときの波動関数を機械判定させ, 相が WTI である確率 (赤), STI である確率 (青), OI である確率 (黒), 金属である確率 (緑) を示したものである。異なるトポロジカル相が正しく判定されるとともに, 結晶周期性がないことで相境界がずれる様が見られる。

参考文献

- [1] Y. Ando: J. Phys. Soc. Jpn. 82, 102001 (2013)
- [2] 乱れた系のトポロジカル数の定義については, H. Katsura and T. Koma: J. Math. Phys. **57**, 021903 (2016), arXiv:1611.01928 を参照されたい。
- [3] K. Kobayashi, T. Ohtsuki, K.-I. Imura: Physical Review Letters **110**, 236803 (2013)

原論文

Deep Learning the Quantum Phase Transitions in Random Two-Dimensional Electron Systems

Tomoki Ohtsuki and Tomi Ohtsuki: [J. Phys. Soc. Jpn. 85, 123706 \(2016\)](#)

問合せ先: 大槻東巳 (上智大学理工学部)