

深層学習で解析・生成した  
ランダム量子系の波動関数  
～AIを用いた半導体中の  
電気伝導の解析～

大槻東巳  
上智大学工学部

@RIST セミナー  
2022/7/22

T. Ohtsuki and T. Mano,  
J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 022001 (2020).

S. Daimon, et al.  
Nature Communications, **13**, 3160 (2022)

# 専門は物性理論, ランダム量子系, トポロジカル系の物理

- 1984年 - 東京大学理学部物理学学科卒業
- 1989年 - 同大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了(D2のときケルン大学に1年滞在), 理学博士
- 1988年 - 日本学術振興会特別研究員, DC→PD
- 1990年 - ドイツ連邦物理工学研究所PD→大阪大学教養部助手
- 1992年 - 東邦大学理学部講師
- 1995年 - 上智大学理工学部物理学学科助教授
- 2001年 - 上智大学理工学部物理学学科教授→機能創造理工学科に再編

2016年にAlphaGoに刺激をうけて物性物理に深層学習を適用し論文。

2016年の論文：6000ダウンロード（素人でもできることを示したことで論文賞），2020年APS outstanding referee（機械学習の論文が増えたことにも起因）

機械学習は全くの素人でしたが，ライブラリの充実に助けられました。

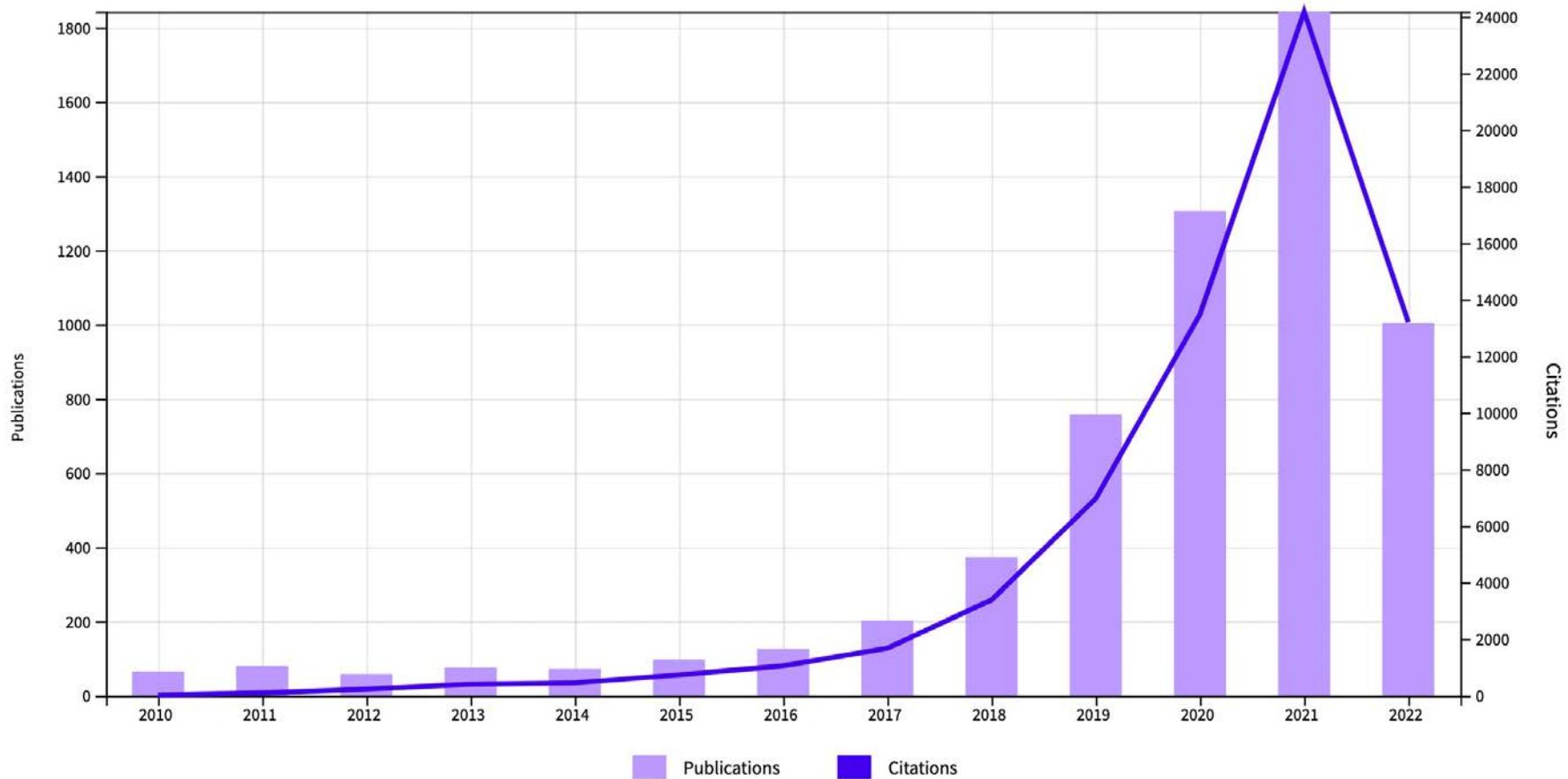
miniconda, python 3.7-3.9, keras/tensorflow 2.6-2.8で機械学習。google colabも使用。

バージョンがよく変わり mismatches が悩みの種。google colabはその問題がないが入出力が遅いという欠点も。

# 物性物理学への機械学習の応用

- 2016年後半からブーム。たとえば以下のレビューも出ている。
  - Mehta et al., Phys. Rep. **810**, 1 (2019).
  - Carleo et al., Rev. Mod. Phys. **91**, 045002 (2019).
  - Ohtsuki and Mano, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 022001 (2020).
- そのほか、今年になっても数編解説論文が出ている。
- 実際の応用：
  - 強磁性・常磁性相, 金属相・絶縁体相の分類
    - 主成分解析 (PCA), サポートベクトルマシン (SVM)
    - 深層学習, 再帰型ニューラルネットワーク (long short term memory network)
  - 制限ボルツマンマシン (RBM) で基底状態を表現
  - 量子モンテカルロ法, 密度汎関数法と組み合わせる

タイトルに machine learning, deep learning or neural network, を含んだ物性物理の論文数と引用数。 June, 2022.



2022年度～2026年度 科学研究費補助金 学術変革領域研究(A)

# 「学習物理学」の創成

— 機械学習と物理学の融合新領域による基礎物理学の変革 —

## 領域代表者

橋本 幸士（京都大学大学院理学研究科教授、量子重力物理学）

## 計画研究班代表者

田中 章詞（理化学研究所上級研究員、機械学習）

富谷 昭夫（大阪国際工科専門職大学助教、計算物理学）

福嶋 健二（東京大学大学院理学系研究科教授、原子核物理学）

樺島 祥介（東京大学大学院理学系研究科教授、統計物理学）

野尻 美保子（高エネルギー加速器研究機構教授、素粒子物理学）

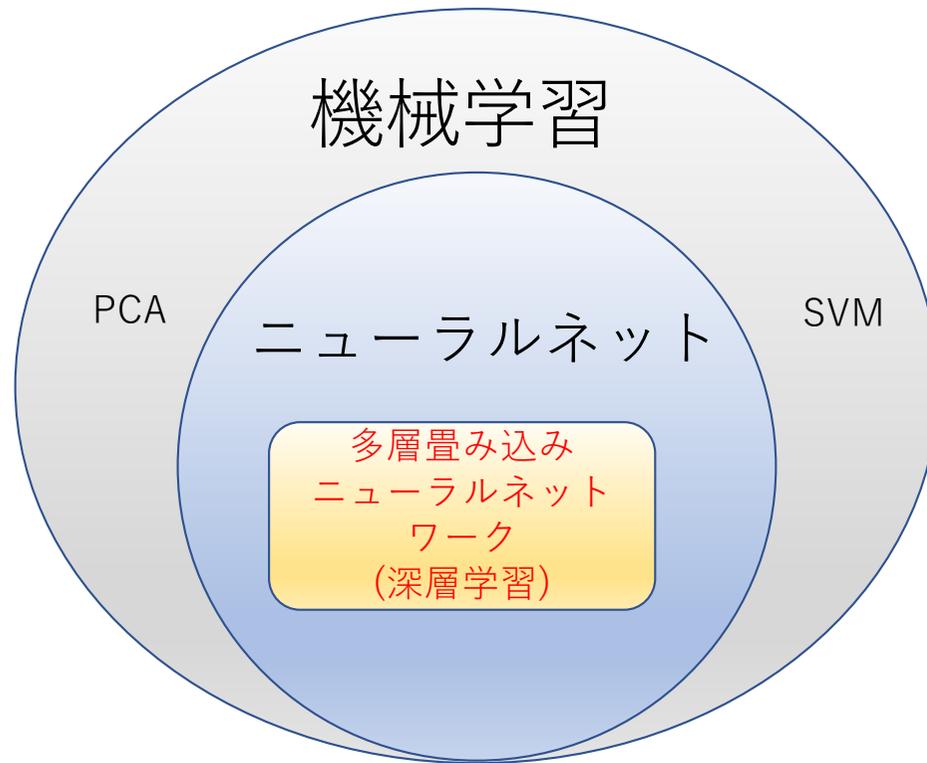
大槻 東巳（上智大学理工学部教授、物性物理学）

公募で物性の課題を積極的に取る予定です。ご応募ください。

# 今日の話：ランダム系の波動関数

- 波動関数：量子物性を説明するツール
  - ランダム媒質中の光・音波の伝導にも応用できる
- 前半：ランダム系波動関数の分類
- 後半：ランダム系のコンダクタンスから波動関数の生成（逆問題）

# 画像認識を用いた波動関数の分類



T. Ohtsuki and T. Mano, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 022001 (2020).



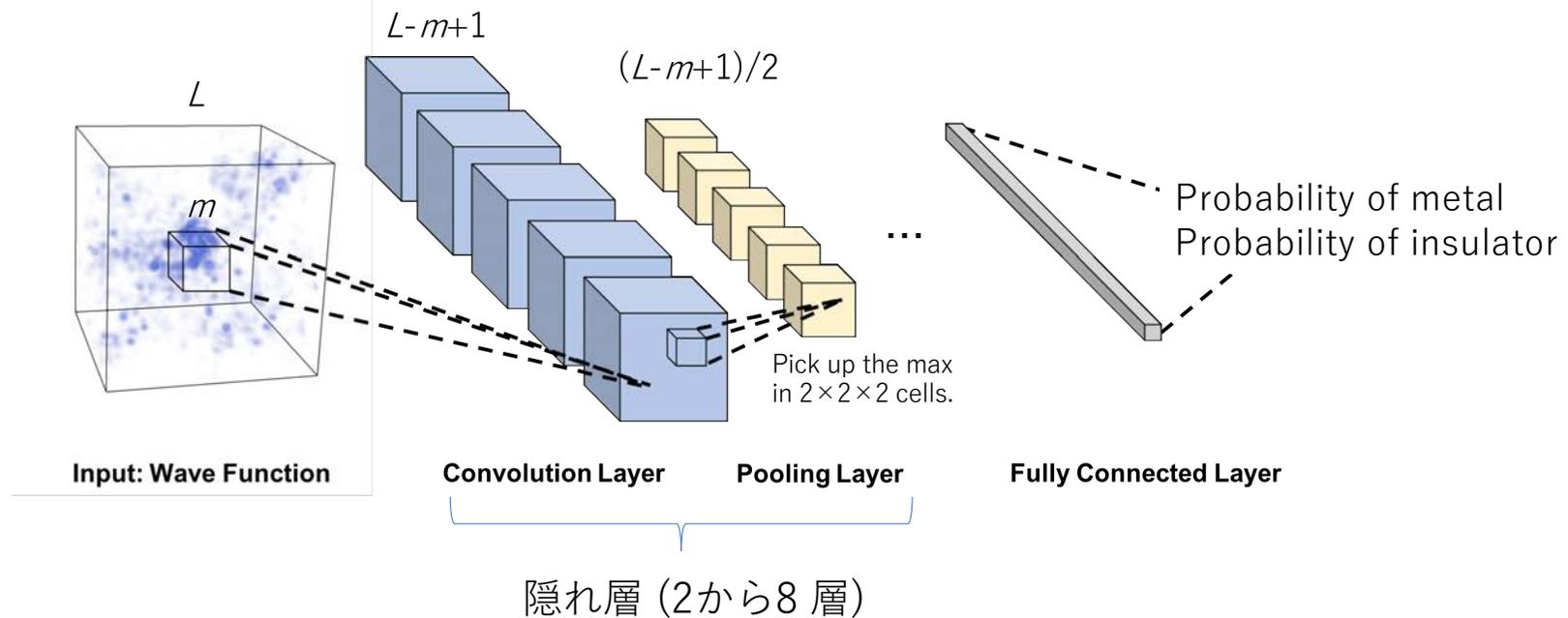


# convolutional neural network (CNN)による画像認識

Probability of cat = 99%  
Probability of dog = 1%

$m \times m \times m$  の重みを  $N$  セット用意,  $W_{i,k} (i = 1, 2, \dots, m^3, k = 1, \dots, N)$

$$u_{j,k}^{(1)} = \sum_{i \in j \text{ th cell}} W_{i,k}^{(1)} u_i^{(0)} + b_k^{(1)} \quad u_i = |\psi(r_i)|^2$$



# Supervised training(教師あり学習)

- 訓練

- ある相（例えば金属相）で数千の固有関数を用意，また別の相（例えば絶縁体相）で数千の固有関数を用意して，CNNに「これは金属，これは絶縁体だと教える」
- 交差エントロピー  $-\sum_j p_j' \log p_j = -\sum' \log p_j$  を最小化。
  - 実際には90% のデータを訓練に使い，10% を練習問題に使う

- 実践

- 色々なパラメータでハミルトニアンを対角化して固有関数を求め，その固有関数はどの相のものであるかを，確率で出力。これによりパラメータ空間での相図が求められる

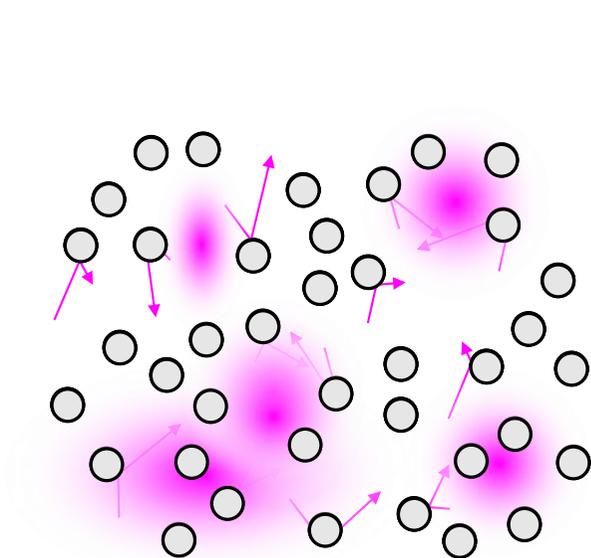
## ランダムポテンシャルがあるときの物質

- 金属, 半金属 (ワイル半金属が流行), 絶縁体 (トポロジカル, 非トポロジカルなど) 多彩な相を示す。それぞれの系で波動関数は独特の振る舞い → フェルミ・エネルギーでの  $|\psi(\mathbf{x})|^2$  を画像とみなし, 深層学習による画像認識で分類
- 3次元のランダム電子系の相図を3次元画像解析
  - 人間の目で見るのは苦手な3次元波動関数を3次元画像解析で調べる
  - 深めの多層畳み込みニューラルネットワーク
  - 単純な系で学習させた結果を使って (汎化を期待し) 複雑な系を解析
    - 金属・絶縁体転移 (Anderson転移), 量子パーコレーション転移
    - ドープされた半導体

単純なランダム系のモデル (Andersonモデル)

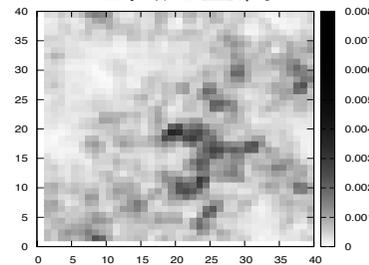
- 3D 立方格子, 最近接のみトランスファー ( $V_{j',j}=1$ )

$$H = \sum_j \varepsilon_j |j\rangle\langle j| + \sum_{j',j} V_{j',j} |j'\rangle\langle j|, \quad -\frac{W}{2} < \varepsilon_j < \frac{W}{2}$$

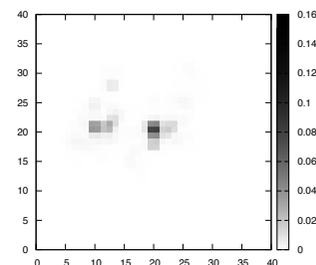


$|\Psi(x,y)|^2$

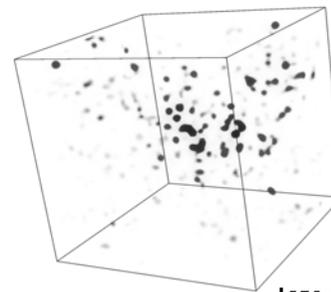
2次元金属



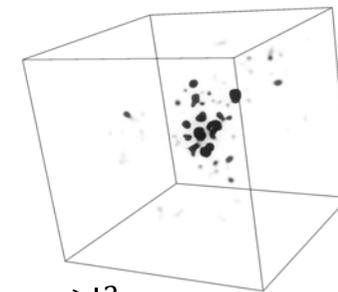
2次元絶縁体



3次元金属



3次元絶縁体

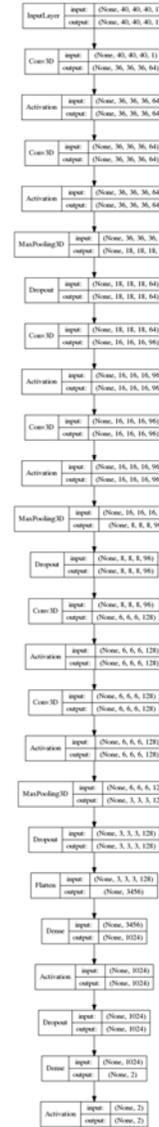
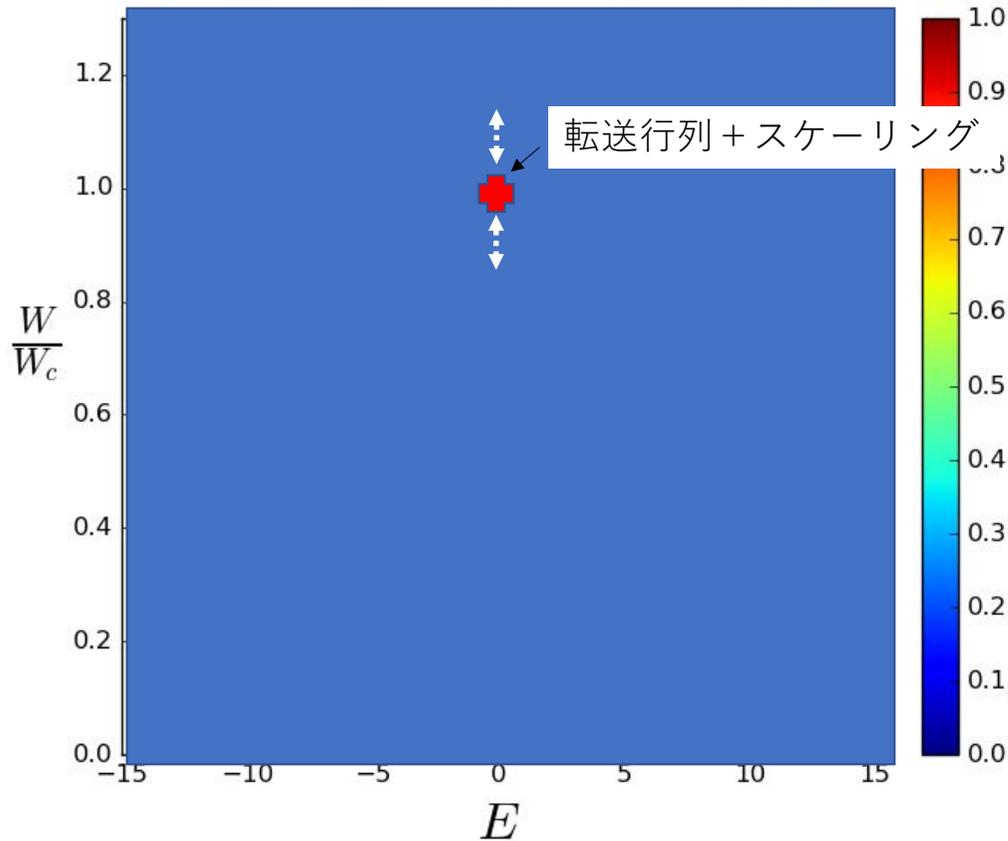


$|\Psi(x,y,z)|^2$

Anderson局在  
Anderson金属・絶縁体転移

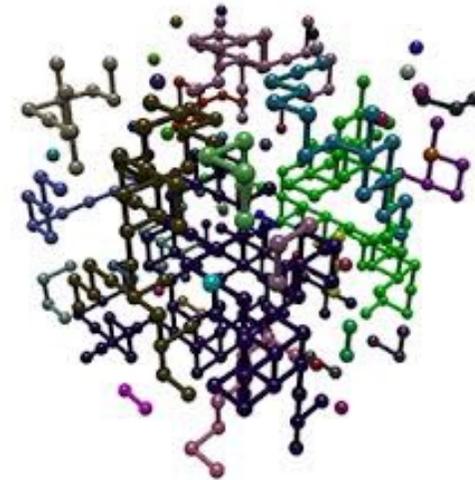
# Deep (9 weight layer) CNN

## 3D アンダーソン転移



## この結果を量子パーコレーションに適用

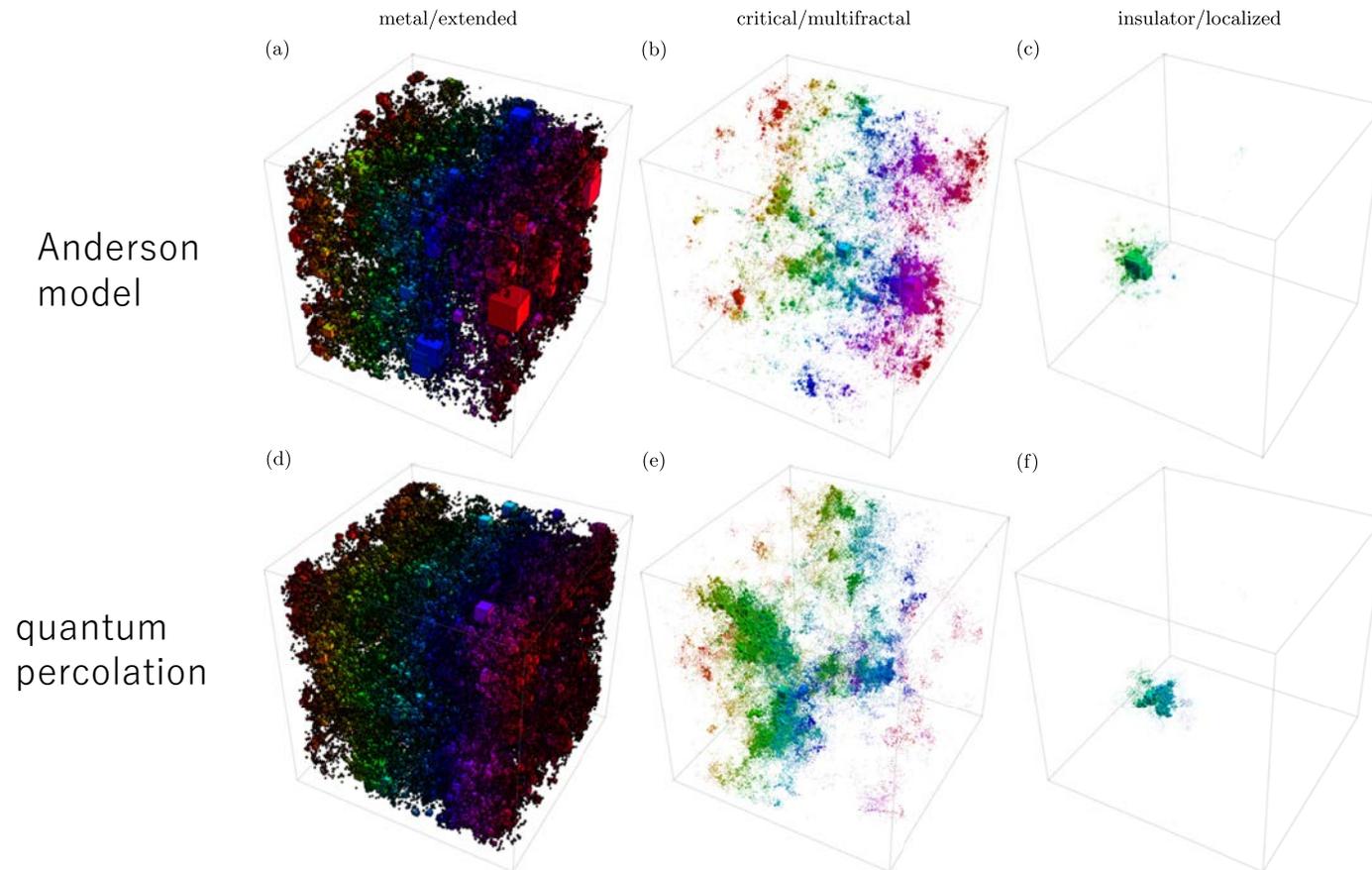
- 古典パーコレーション：ボンドやサイトが確率  $p$  でつながっていたり占有されている。
- ボンド型の量子パーコレーション。
  - $H = \sum V_{j',j} |j'\rangle\langle j|$ ,  $V_{j',j}=0$  or  $1$  with probability  $1-p$  or  $p$ .
- サイト型では確率  $p$  でサイトが占有され，上下，左右が占有されていれば繋げる。
- $d > 1$  の場合，  $p > p_c$  で端から端までつながったクラスターが現れる  
 $p_c$  パーコレーション閾値



## 古典・量子パーコレーションと金属-絶縁体転移

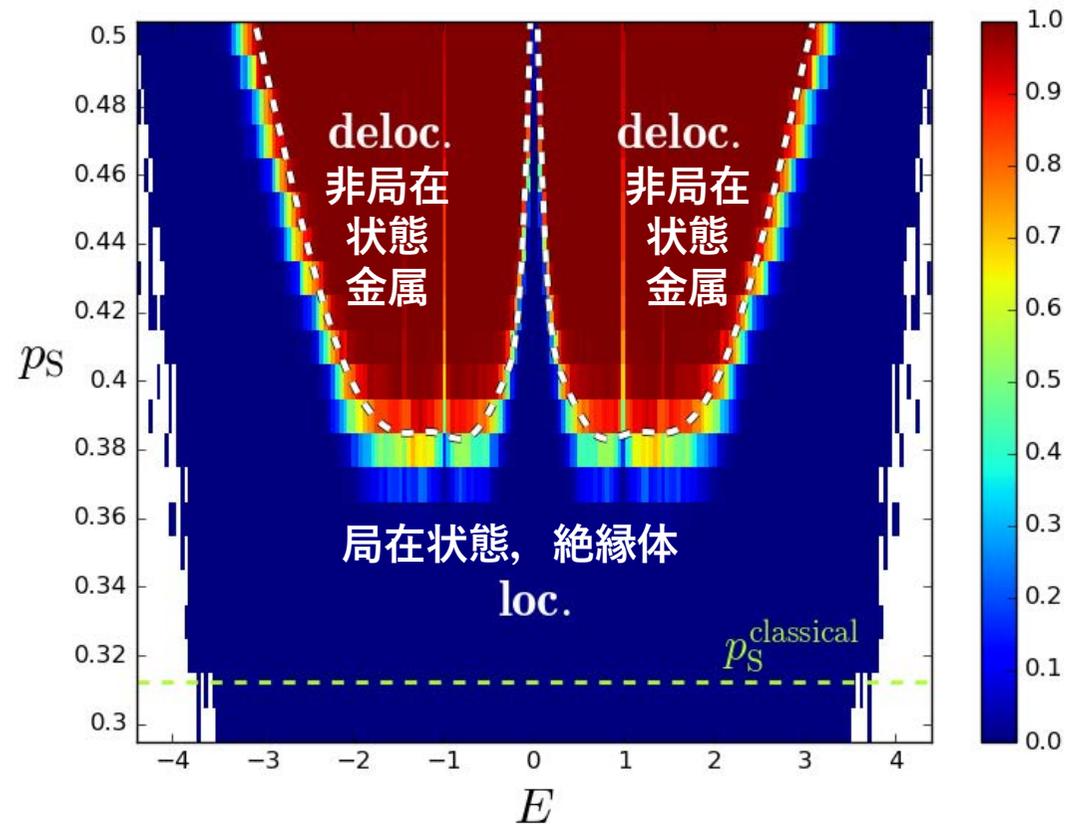
- $p < p_c$ , クラスタはどれも有限  $\rightarrow$  系の端から端まで電流を流せないなので絶縁体
- $p > p_c$ , 系の端から端までつながっているクラスタが出現し電気が流れる  $\rightarrow$  金属
  - 繋がってるクラスタの大きさ  $M \propto (p - p_c)^\beta$
  - 電気伝導度  $\sigma \propto (p - p_c)^s$ ,
- 電子は波なのでクラスタ上で干渉して、定在波を作る可能性がある (Anderson局在)。  $p > p_c$  でも電気は流れず  $p_q > p_c$  を満たす  $p > p_q$  でようやく電気が流れる
  - $p_q$  量子パーコレーション閾値.
- パーコレーション問題では格子がランダムなので
  - 転送行列が使えない
  - 状態密度がスパイキー

Anderson モデル (AM) と 量子パーコレーション  
の波動関数は似ている → AMで鍛えたCNNを再利用



Ujfalusi and Varga, PRB '14

Andersonモデルで鍛えたCNNを3D量子パーコレーションの波動関数に適用して相を判定させる



Site percolation; T. Mano and TO: J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 113704 (2017)(white dashed line,Ujfalusi)

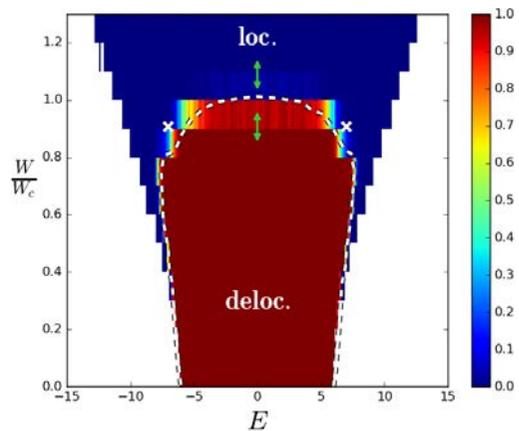
## その他のモデルへの応用

- ポテンシャルエネルギーの分布を変える

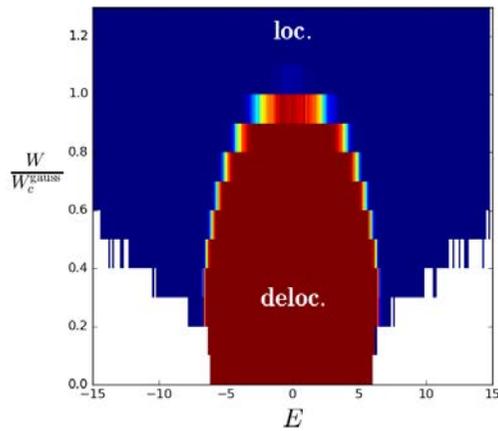
$$P(V_{\mathbf{x}}) = \frac{1}{W} \Theta\left(\frac{W}{2} - |V_{\mathbf{x}}|\right) \quad P(V_{\mathbf{x}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi W^2}} \exp\left(-\frac{V_{\mathbf{x}}^2}{2W^2}\right) \quad P(V_{\mathbf{x}}) = \frac{W}{\pi(V_{\mathbf{x}}^2 + W^2)}$$

- 磁場を入れてみる
  - 格子点間の移動に位相を入れる

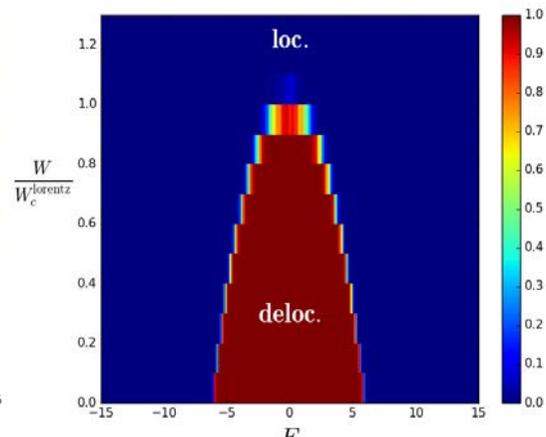
$$\sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} t_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} c_{\mathbf{x}}^\dagger c_{\mathbf{x}'} \quad t_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} = \exp(i\theta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'})$$



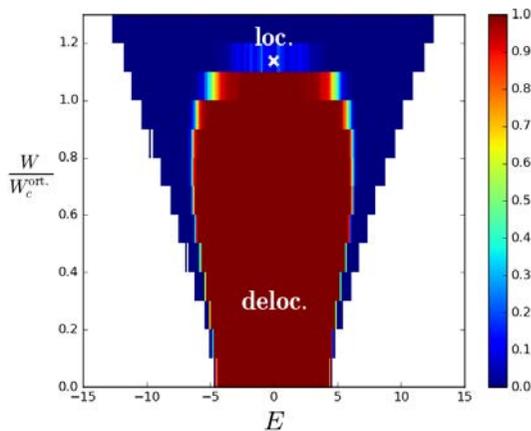
元のモデル



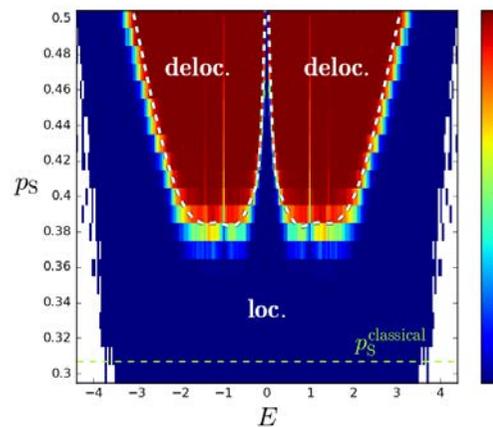
ポテンシャルがガウス分布



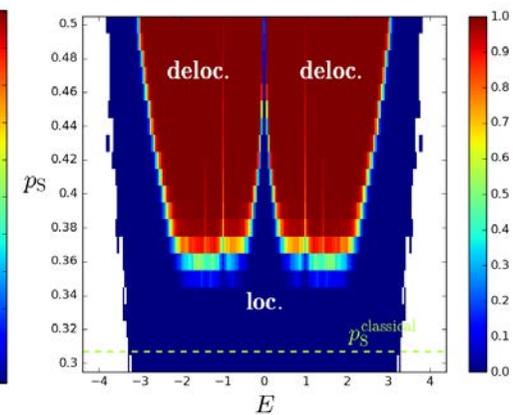
ポテンシャルがコーシー分布



元のモデルに磁場



格子がランダム



格子がランダム + 磁場

波動関数の認識はできた。それ以外の使い道は？  
ノイズから有益な情報を読み取れないか？  
→コンダクタンスの揺らぎを解釈して物質の内部  
を推測。伝導度からハミルトニアンを予測という  
逆問題

東大物工， 齊藤グループとの共同研究

Deciphering quantum fingerprints in electric conductance

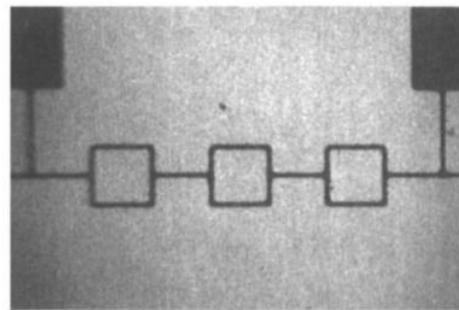
S. Daimon, K. Tsunekawa, S. Kawakami, T. Kikkawa, R. Ramos, K. Oyanagi, T. Ohtsuki,  
and E. Saitoh, Nature Communications, **13**, 3160 (2022).

# ナノサイズの系における磁気抵抗

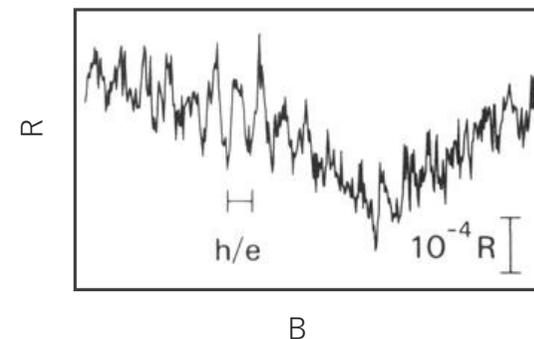
## Aharonov-Bohm 効果

量子干渉 → AB oscillation

AB ring



AB oscillation

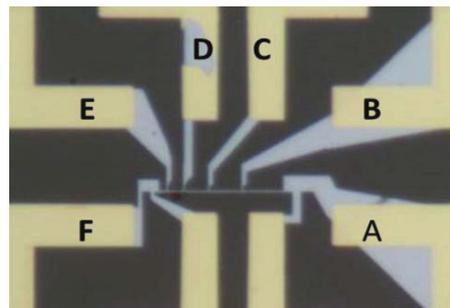


C. P. Umbach et al., Phys. Rev. Lett. **56**, 386 (1986).

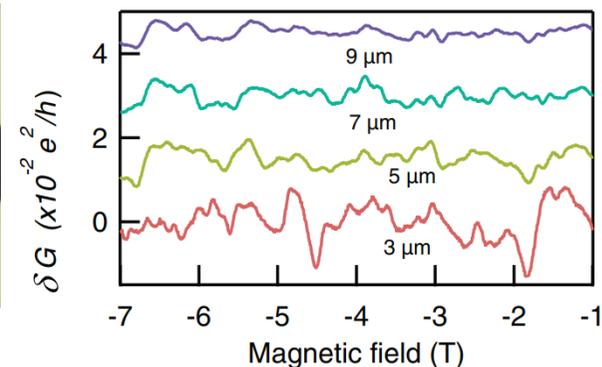
複雑な磁気抵抗, ノイズ like。  
普遍的コンダクタンス揺らぎ

しかしサンプル固有で, 再現性がある  
→磁気指紋, 量子指紋と呼ばれている  
揺らぎの大きさは普遍的,  $O(e^2/h)$

量子細線



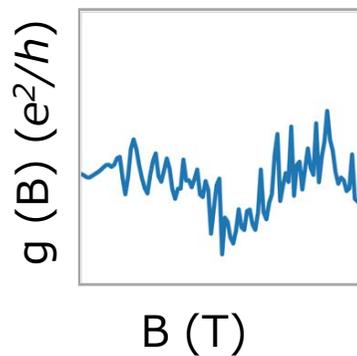
磁気指紋



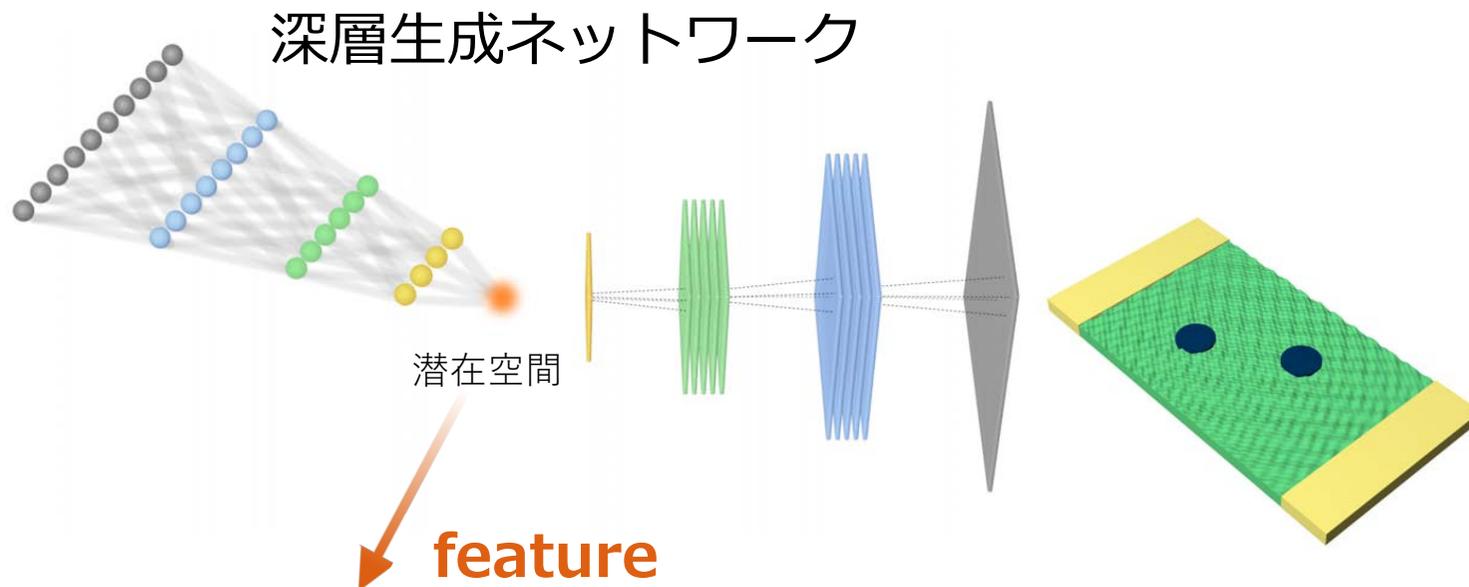
S. Matsuo et al., Phys. Rev. B **88**, 155438 (2013).

# $g(B)$ からもっと情報を得られないか

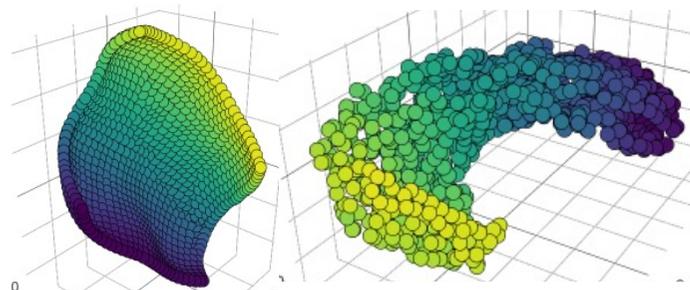
磁気抵抗



深層生成ネットワーク

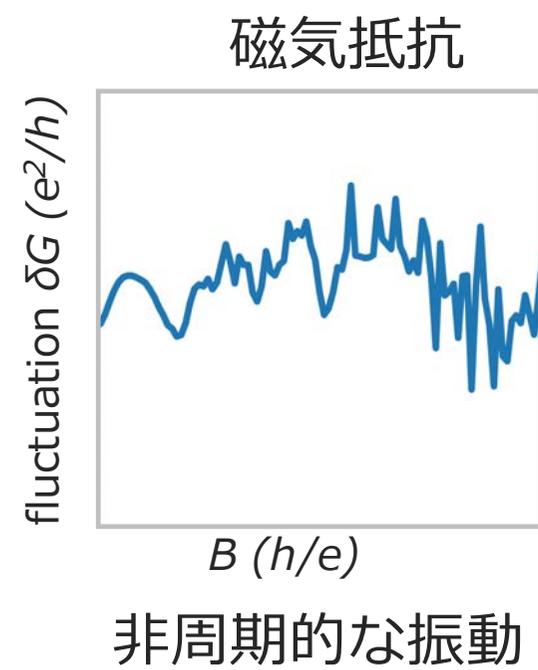
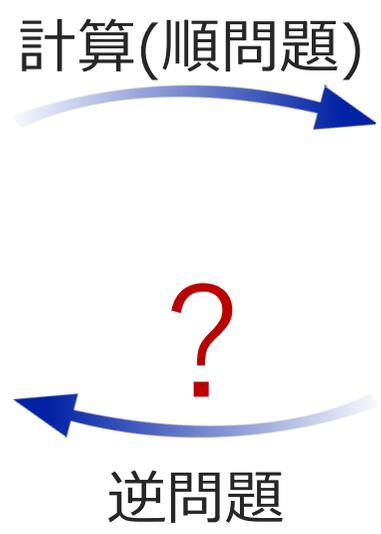
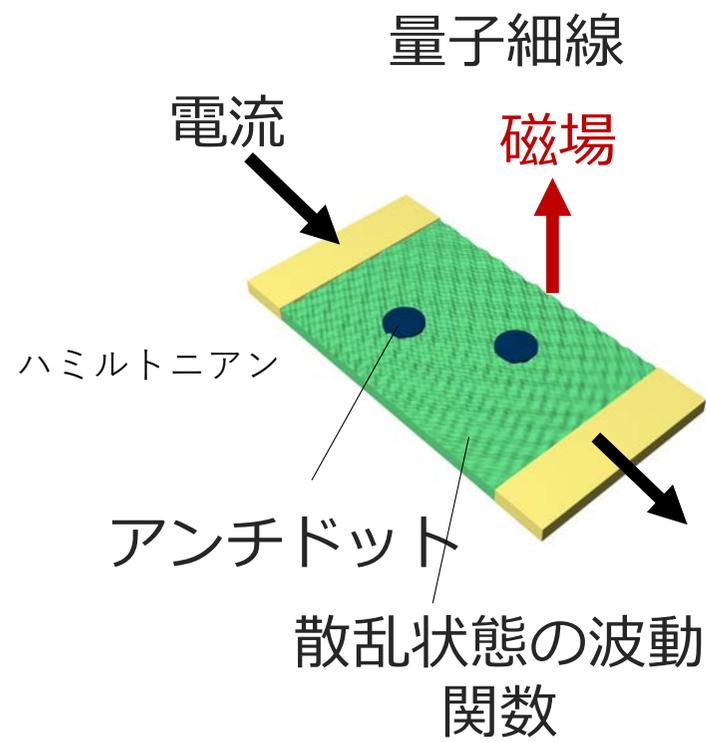
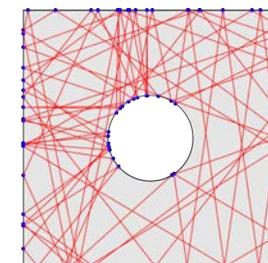


feature

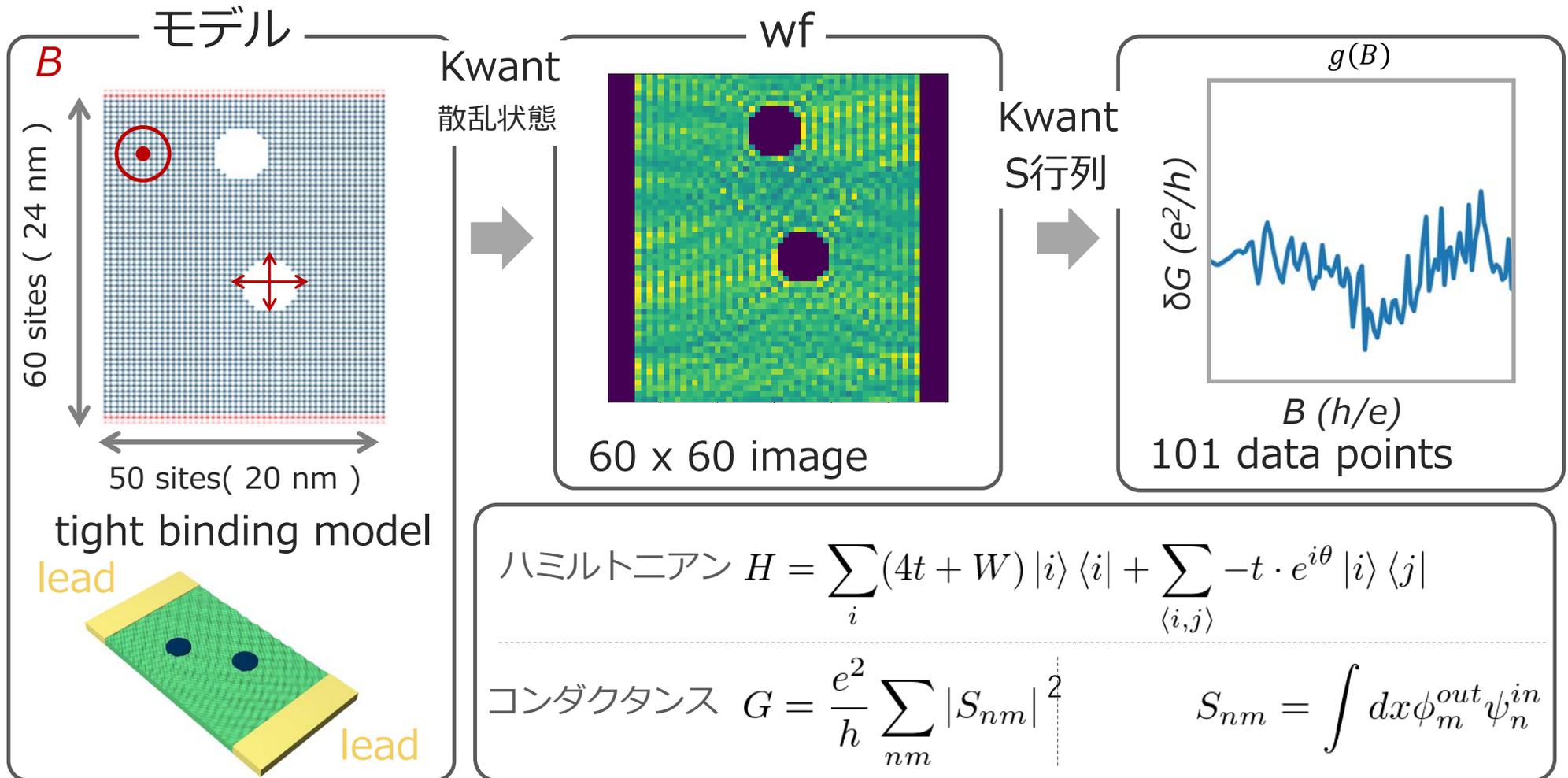


波動関数を生成  
ポテンシャルの位置を推測

正方形の中に円 (antidot) → Sinai ビリヤード, カオス系  
その量子力学版はUCFを示すことが知られている。

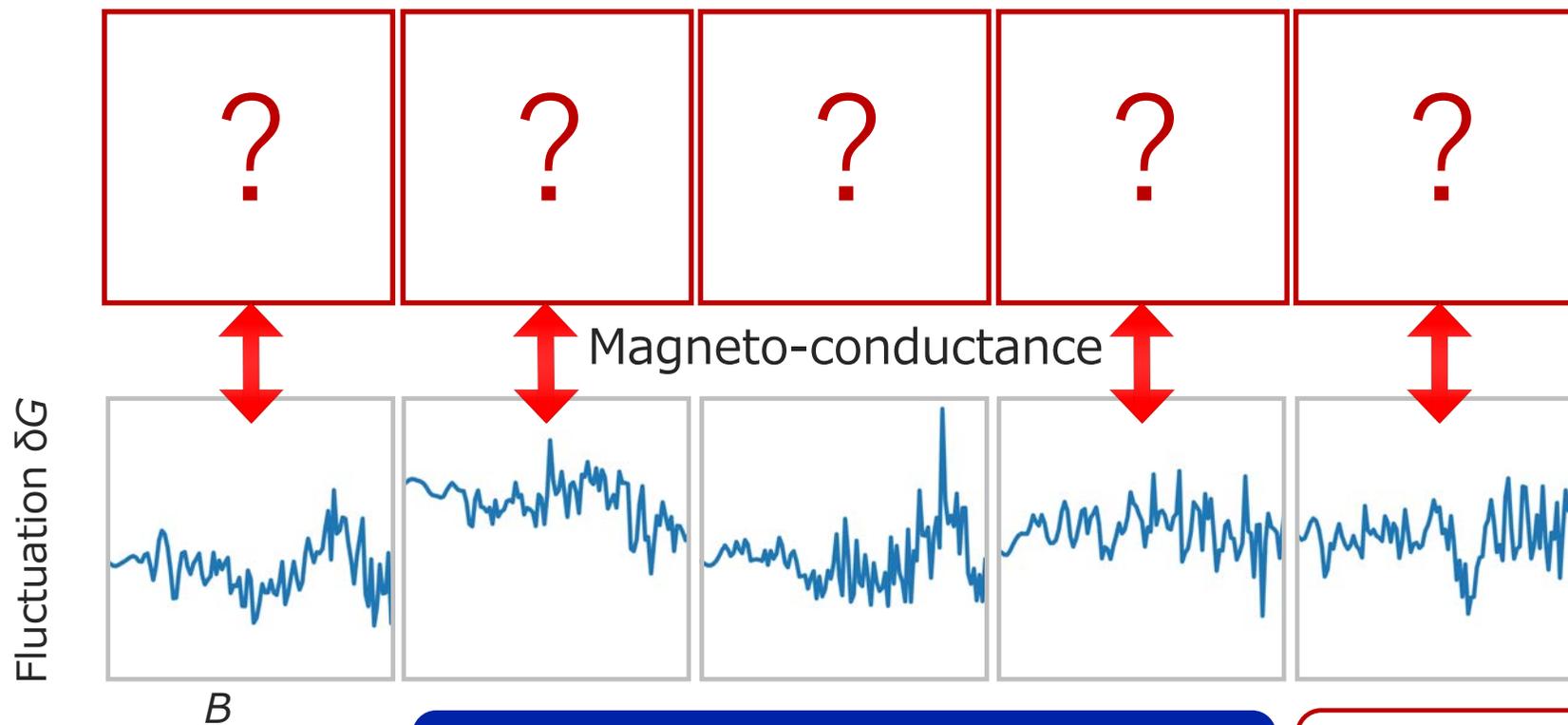


# Python ライブラリ “kwant” で $g(B)$ を計算



# 磁気指紋(量子指紋)

アサンプション W の配置

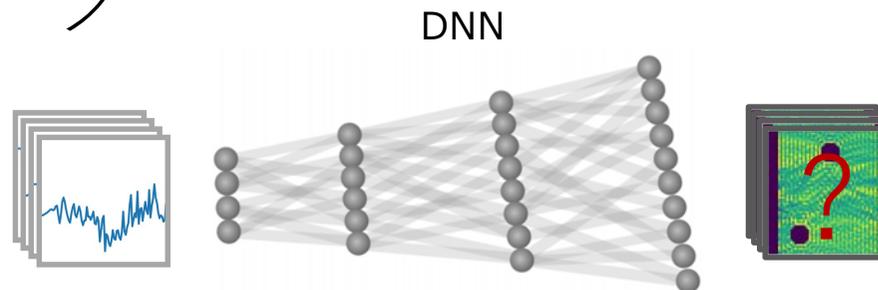


**Looks like noise**

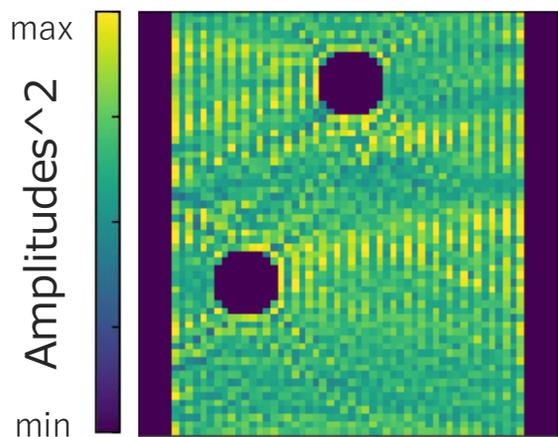
波動関数を構築  
できるか？

# 通常の生成ネットワーク

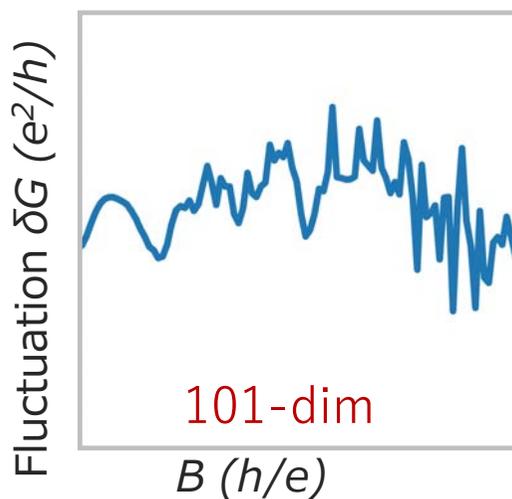
Traditional DNN



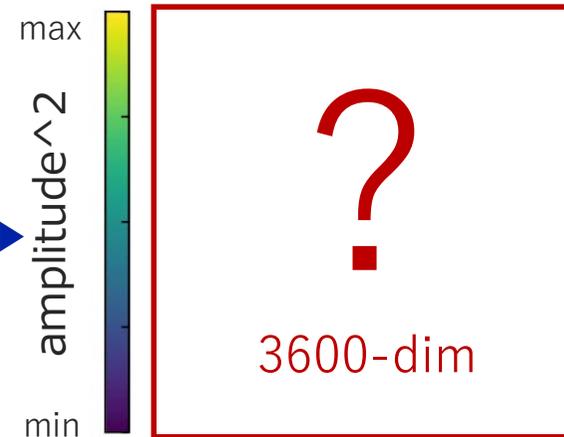
Waves of electrons  
Positions of dots



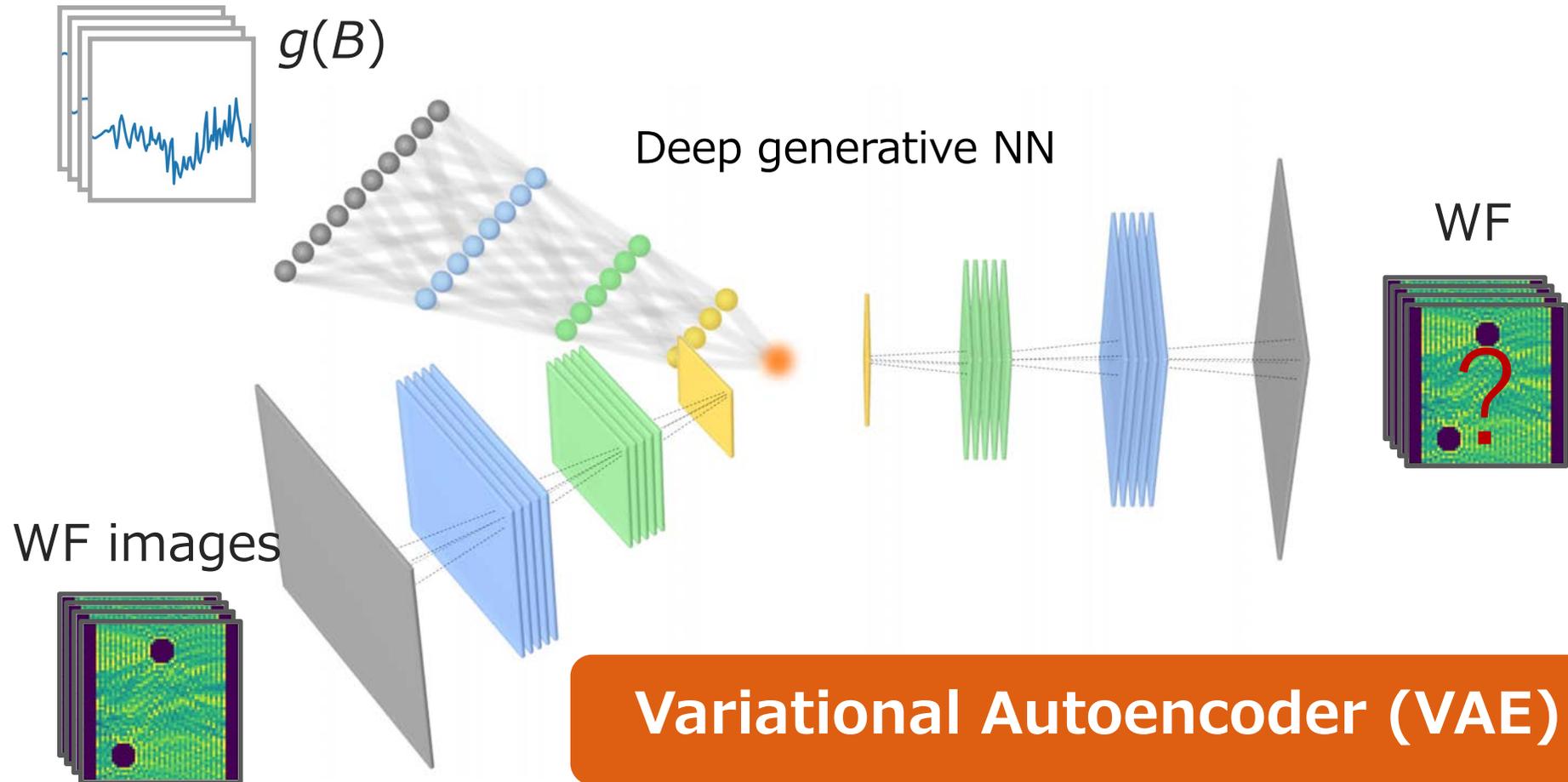
Magneto-conductance



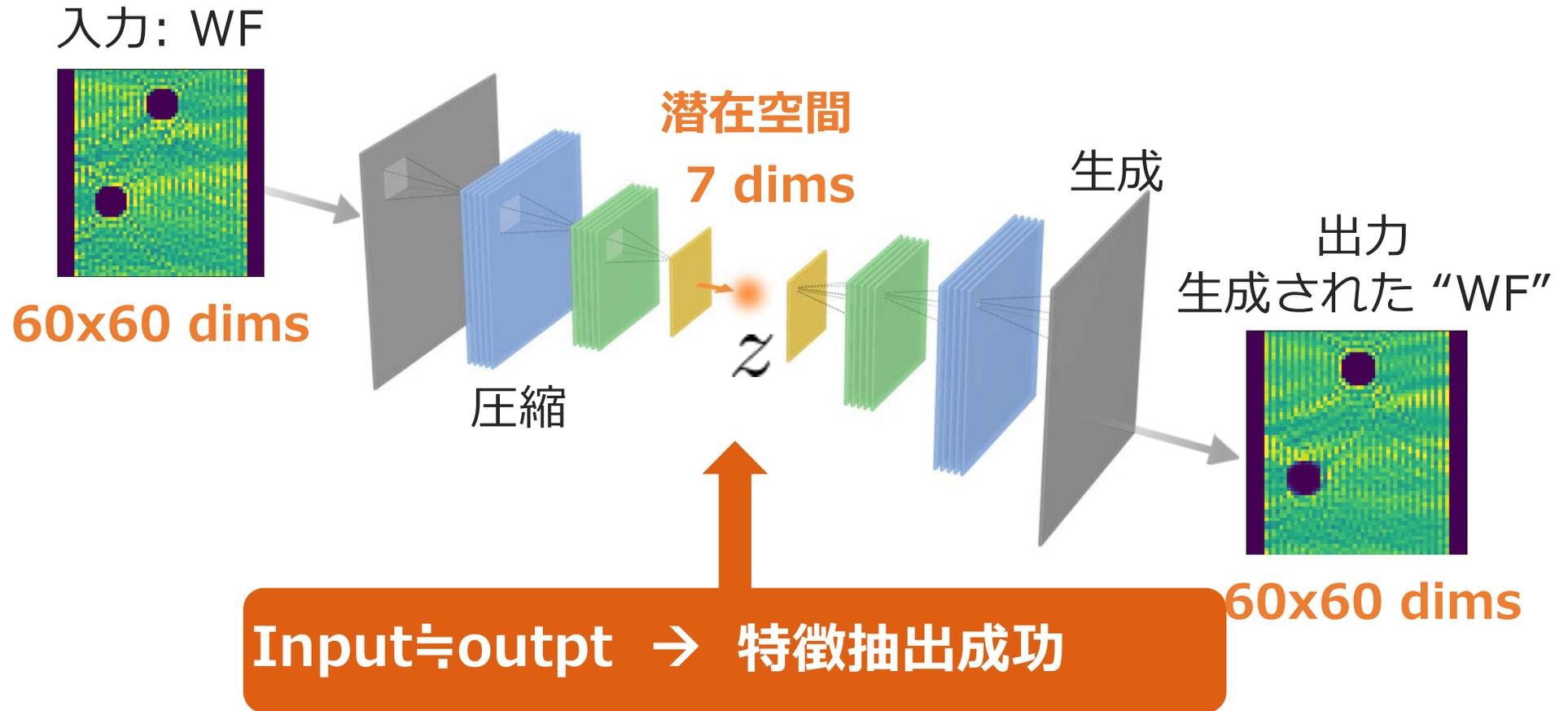
Generated image ~~X~~



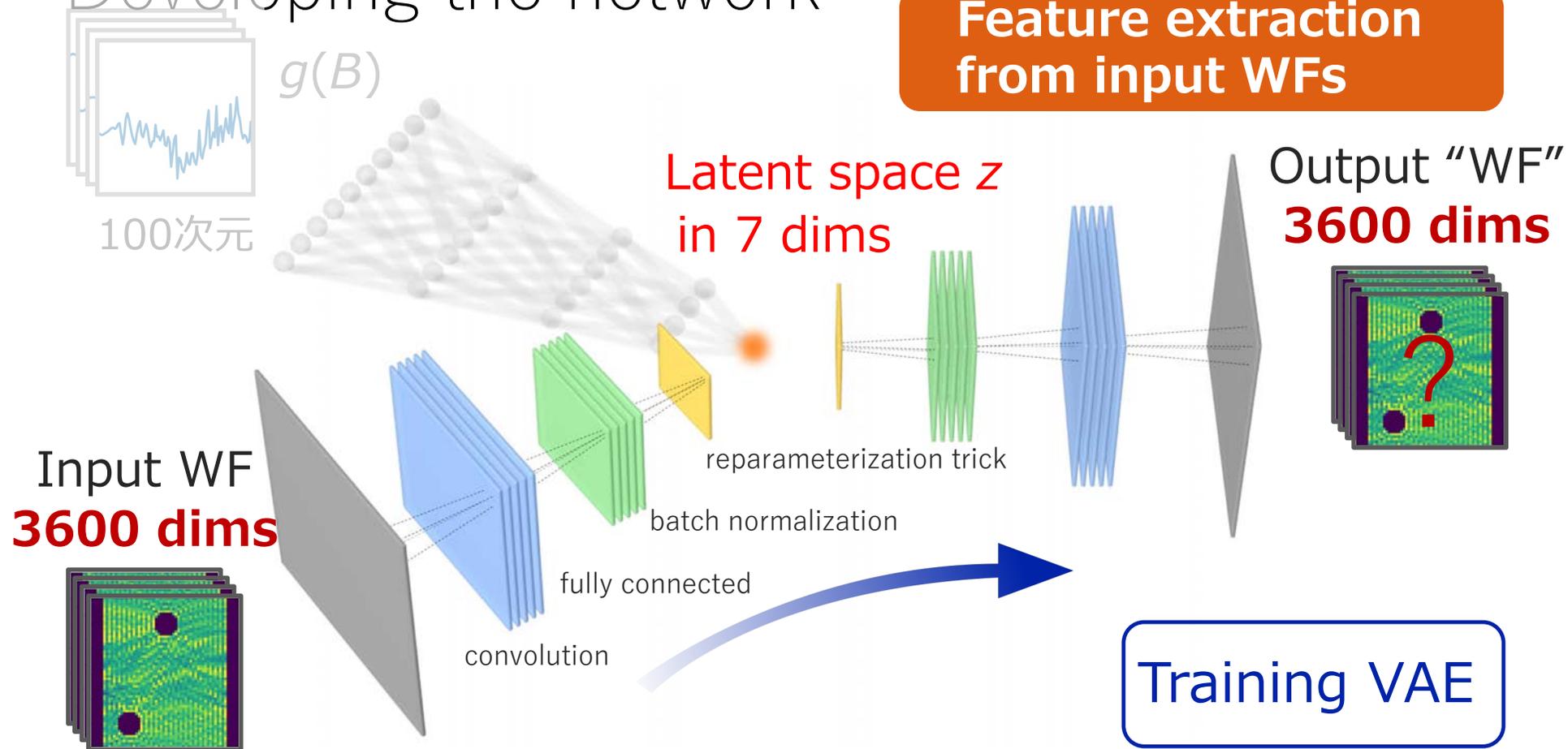
そこで以下のY字型NNを考える



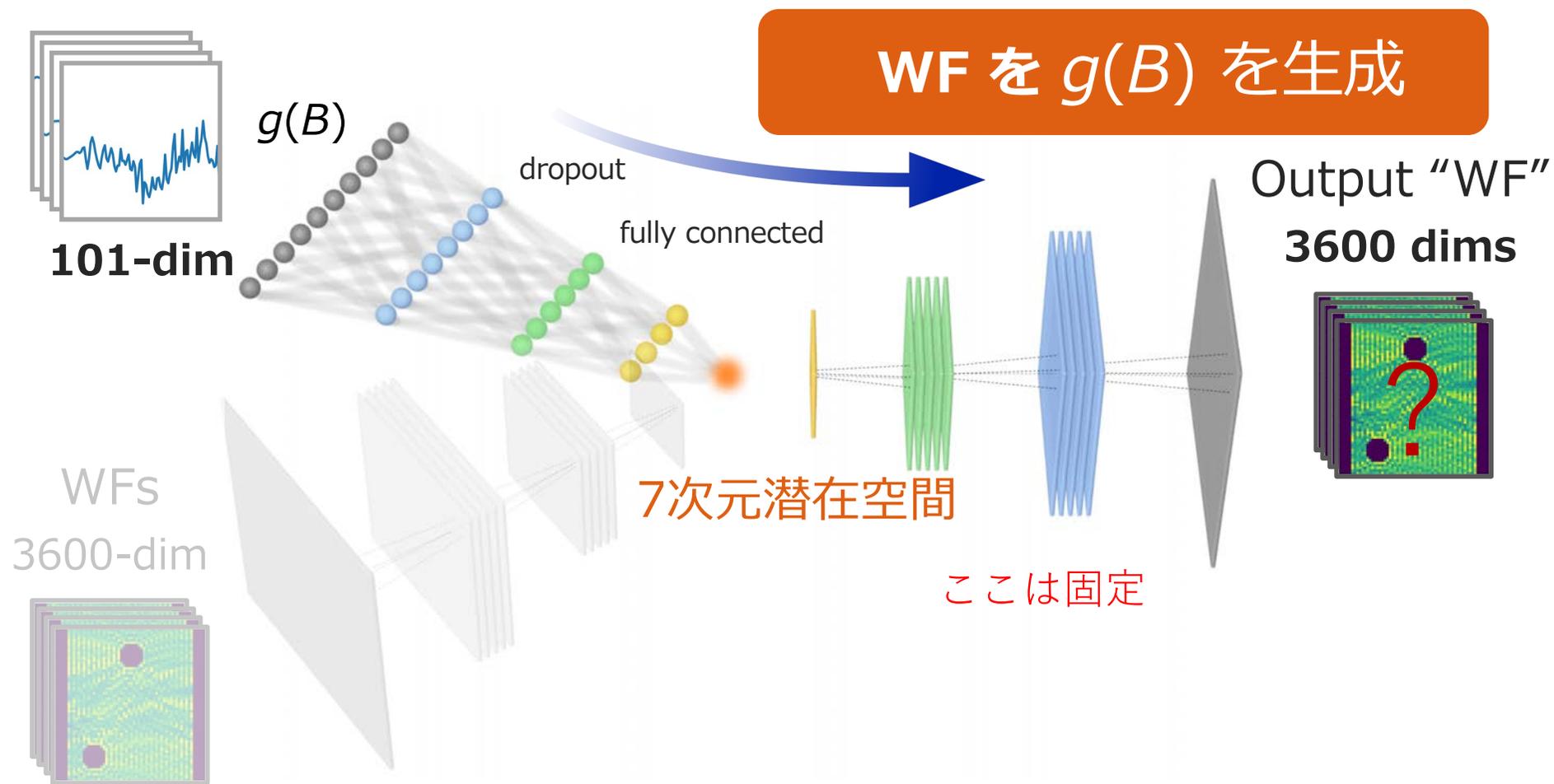
# Variational Autoencoder (VAE)



# Developing the network

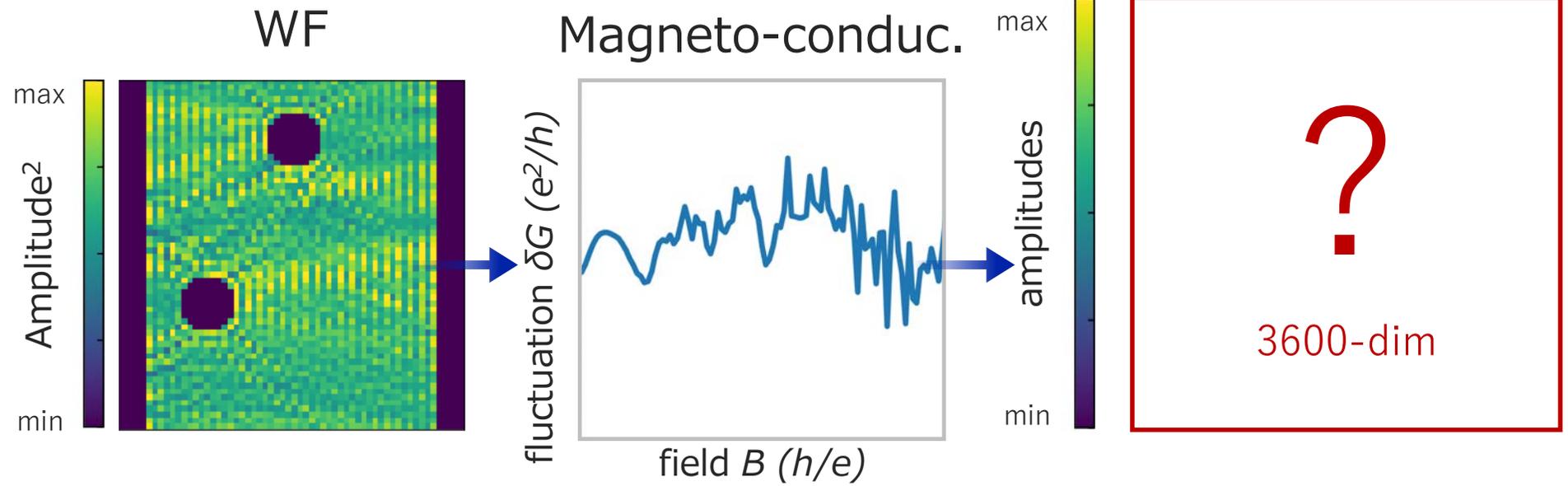
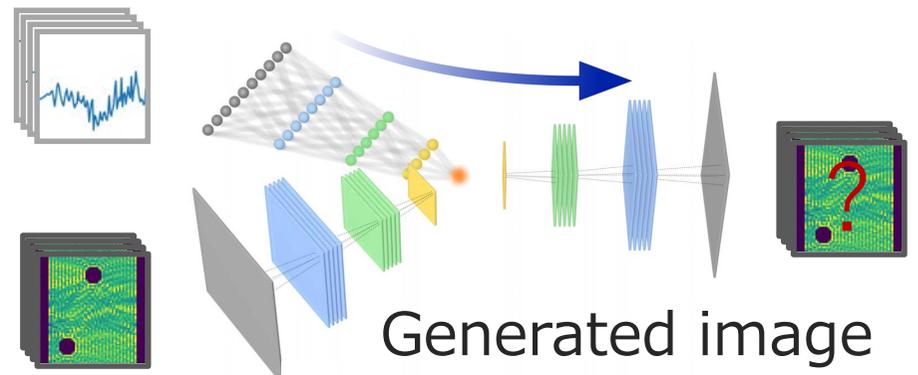


# Developing network 2

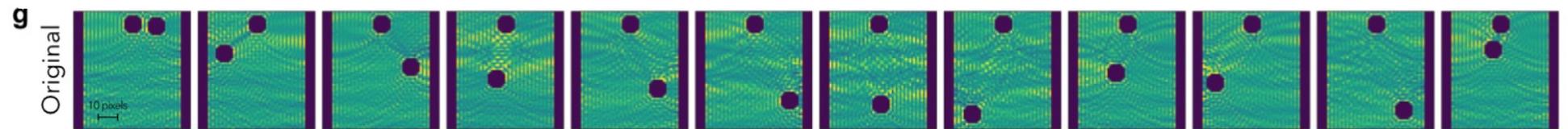


# NNにより磁気コンダクタンスから散乱状態を予測

VAE neural network

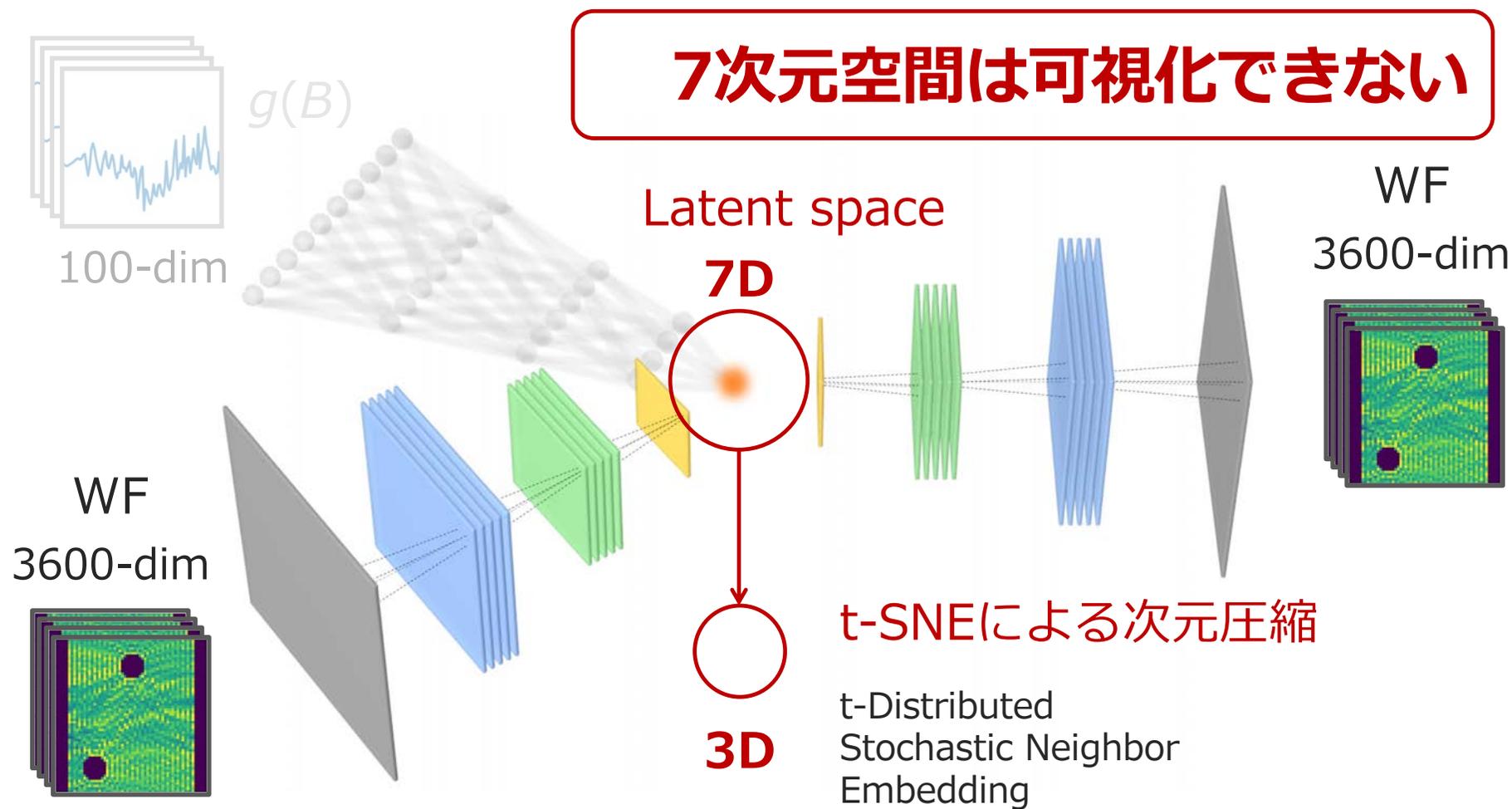


†



S. Daimon et al., Nature Comm. **13**, 3160 (2022).

# 潜在空間をもう少し理解



# t-SNE

- t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding:

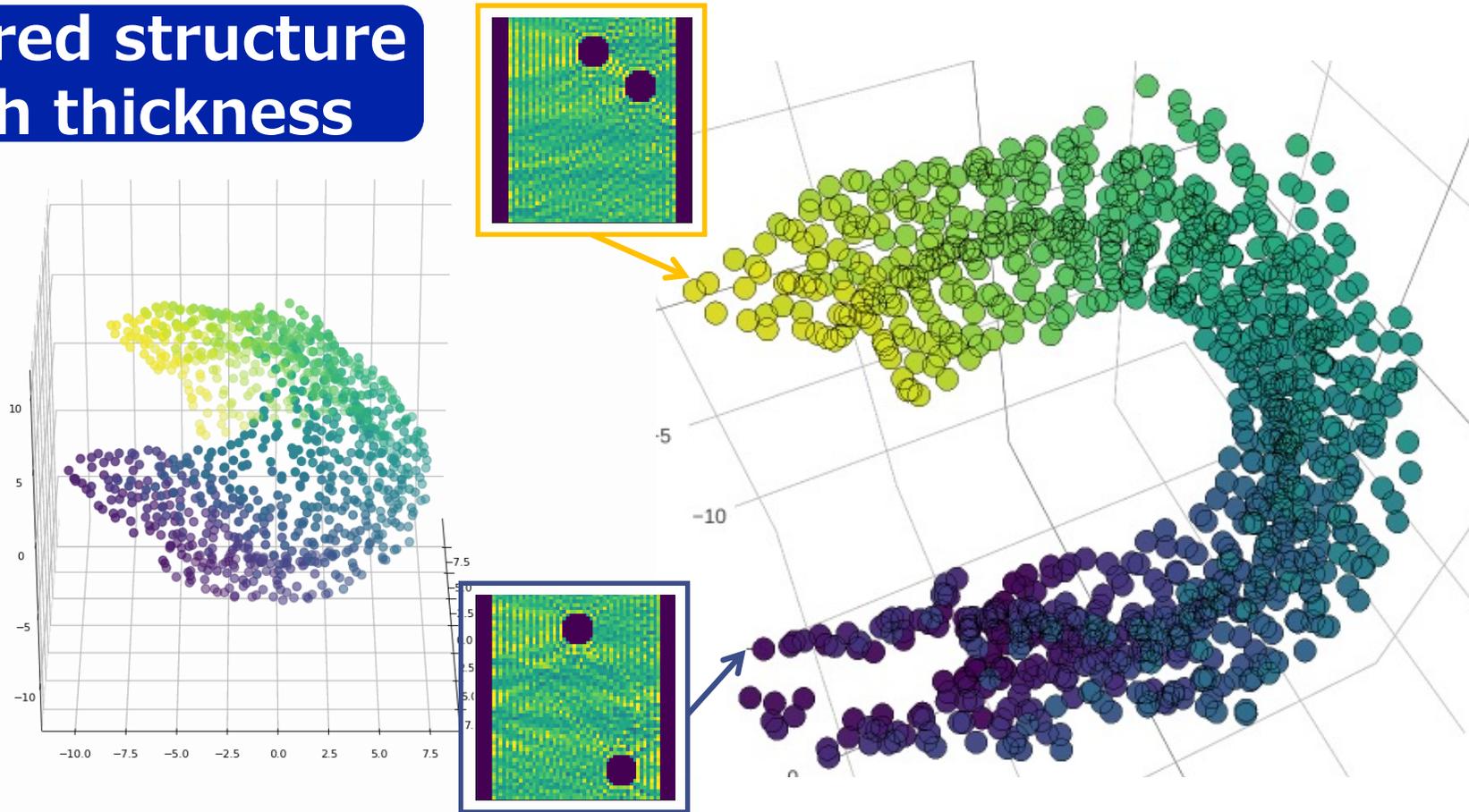
高次元データ ( $d > 3$ ) を次元圧縮で  $d = 3$  or  $2$  に落とす.

- $x_j^{(i)}$  ( $i = 1, 2, \dots, N, j = 1, 2, \dots, d = 7$ ) オリジナルデータ。
- $z_j^{(i)}$  ( $i = 1, 2, \dots, N, j = 1, 2, 3$ ) 次元圧縮されたデータ。

$x_j^{(i)}$  から  $z_j^{(i)}$  へのマップ:  $x^{(i)}$  と  $x^{(i')}$  の間の距離が  $z^{(i)}$  と  $z^{(i')}$  の距離と同じようにする.

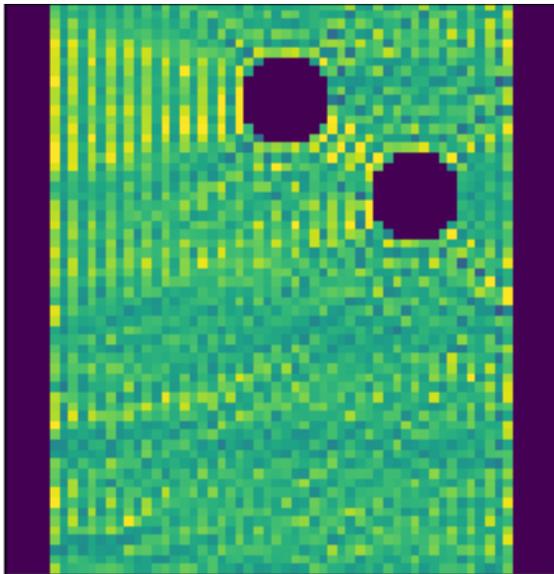
# Visualization of 3-dim space

**Layered structure  
with thickness**



# Visualization of 3-dim space (2)

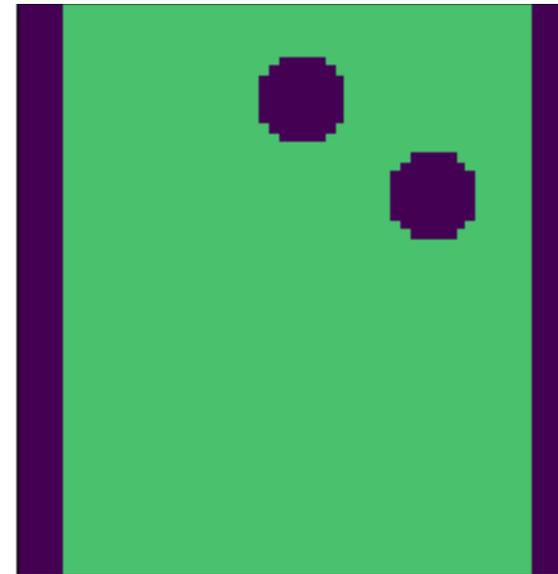
WF interference



quantum

---

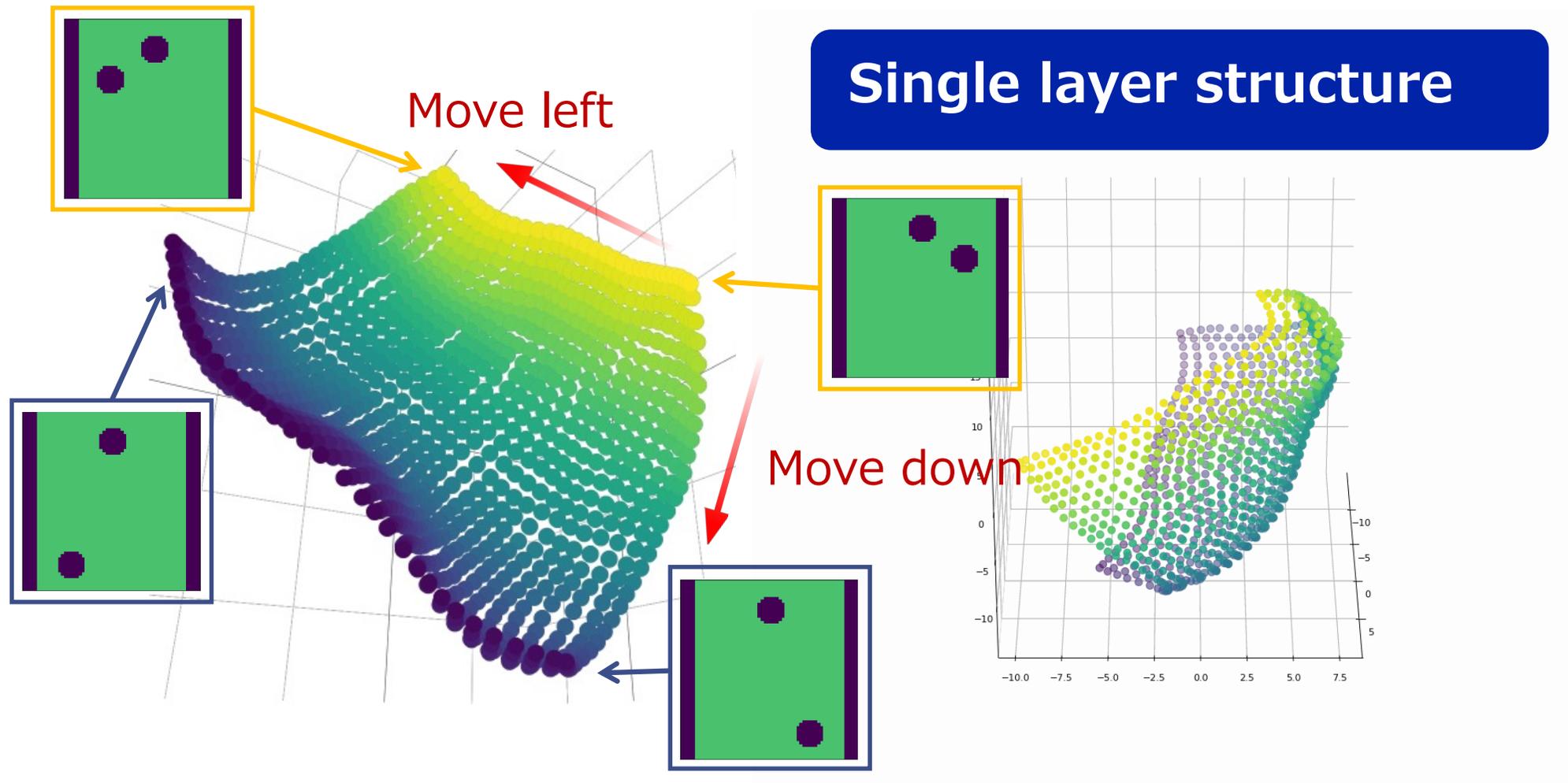
Only antidots



classical

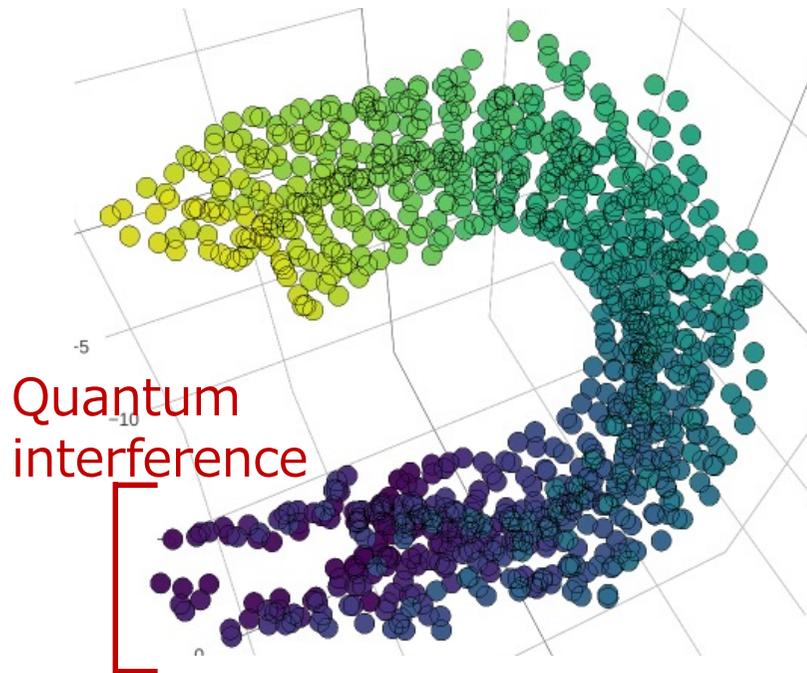
---

# Visualization of 3-dim space (3)



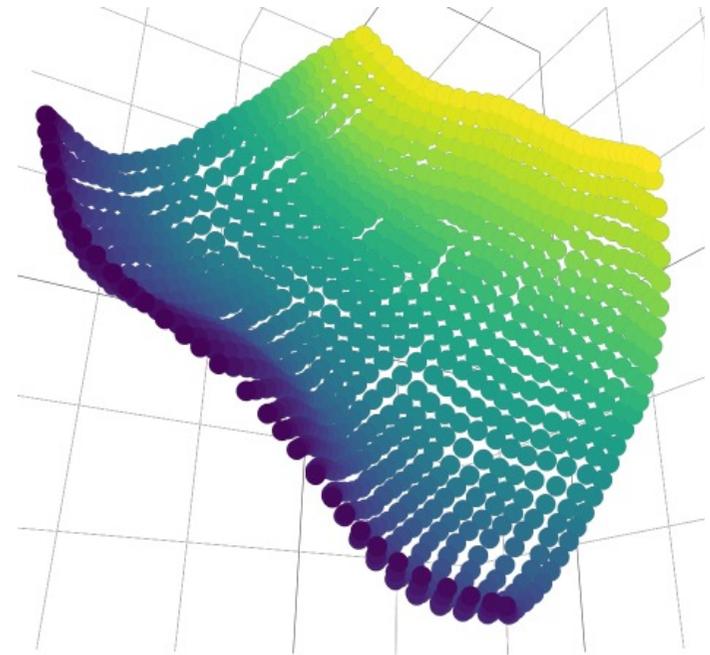
# Visualization of 3-dim space (4)

**Training with WF**

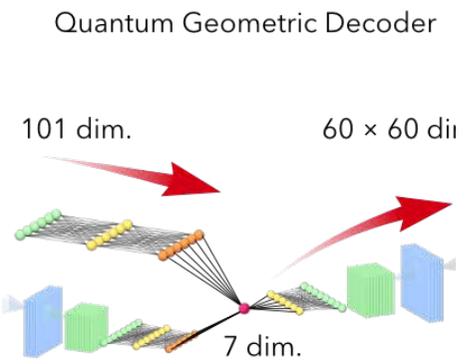
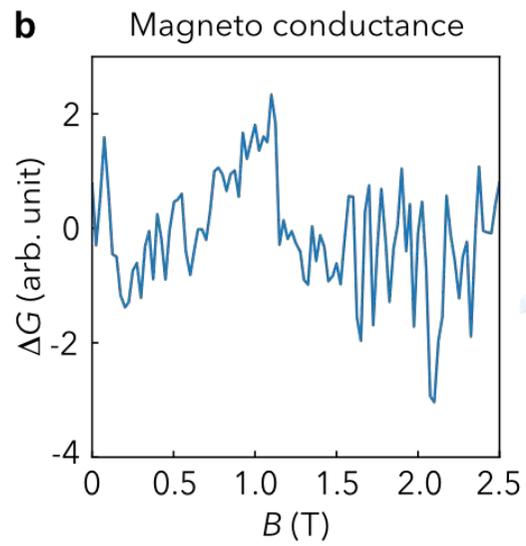
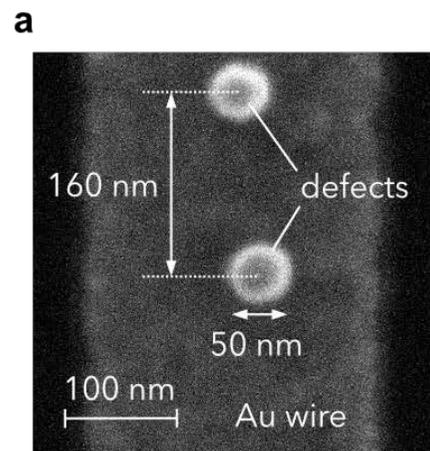


**Layer with thickness**

**Training without WF**



**Single layer**



@ 30mK

## まとめ

- 機械学習を使った手法→最近身近に
- 物性物理にも盛んに応用
- 波動関数の分類→ランダム量子系の相図
  - フーリエ変換した波動関数の分類も有効
  - 特にトポロジカルな系に有効
- ノイズのような扱いを受けていた磁気コンダクタンス→物質内部のポテンシャルの形状。顕微鏡が使えない内部の情報を得る手段に期待