

高速並列コンピューターによる 高温超伝導体の研究

電子技術総合研究所

柳沢 孝

小池 聡

山地邦彦

- I. 多体量子系の理論
- II. 多体量子系の計算機シミュレーション
- III. 高温超伝導体の研究
- IV. まとめ

I. 多体量子論の世界

フェルミオン

$$n_{\mathbf{k}}=0,1$$

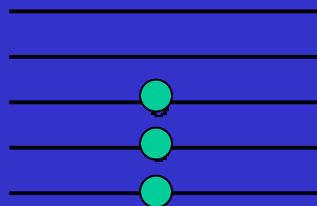
ボソン

$$n_{\mathbf{k}}=0,1,2,\dots$$

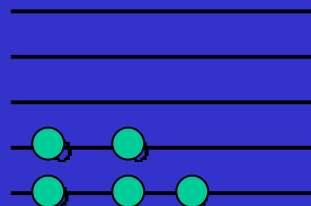
子と量子の相互

生成消滅する量

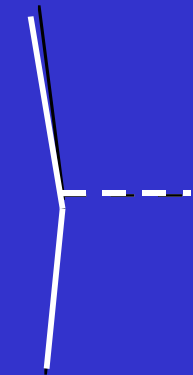
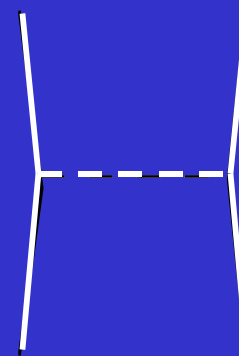
相互作用ハミルトニアン H'



フェルミオン



ボソン



湯川型

量子多体問題

量子と量子が相互作用すると
全ハミルトニアンの固有状態
どのような状態

全ハミルトニアン $H=H_0+$

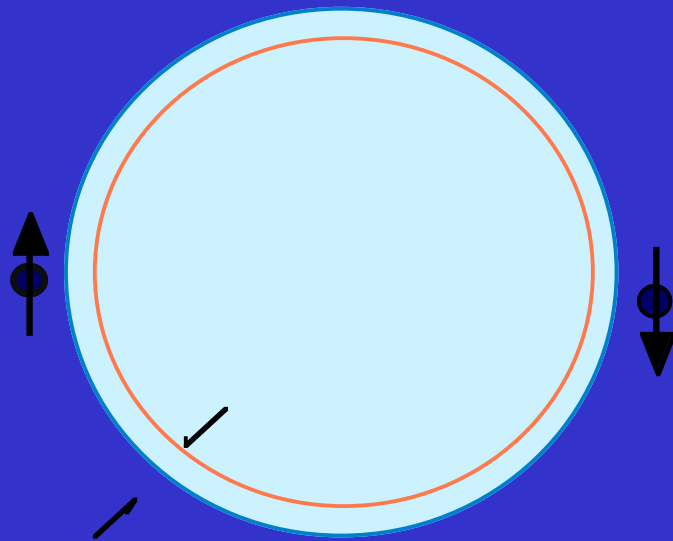
正確に解けるものはほとんどな

強い相互作用のために、自由粒子系と
全く変わったものになることもある。

超伝導とは

引力相互作用によるフェルミ面の不安定性によってひきおこされる

k と $-k$ の電子がペアをつくり、ゲージ（位相）不変性が破れた状態



BCS波動関数

$$\Psi = \prod (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \underline{\mathbf{k}}) |0\rangle$$

$\underline{\mathbf{k}}$ クーパーペア

II. 多体量子系と計算機シミュレーション

強く相互作用す
量子系の研究

計算物理学

モンテカルロ法

基本原理に基づく計
コントロール
できる近似

解析的理論

紙と鉛筆
Green関数

量子モンテカルロ法

フェルミ粒子系の
モンテカルロ法

負符号問題を
どう扱うか

量子変分モンテカルロ法
波動関数を近似

弱結合から強結合まで可能

サンプリング法を修正
Constrained Path Monte Carlo 法
な

モンテカルロ対角化
サンプルした状態でHを対角化

厳密な方

変分モンテカルロ法

波動関数

$$\Psi = P_V P_G \Pi(u_k + v_k \underline{k}) |0\rangle$$

P_G : 同一格子上的電子相関

P_V : 最近接格子間の相関

期待値をモンテカルロ法により計算する

スレーター行列式の計
モンテカルロ計

計算精度 サンプル数N
 $\sim 1/N^{1/2}$

高統計が必

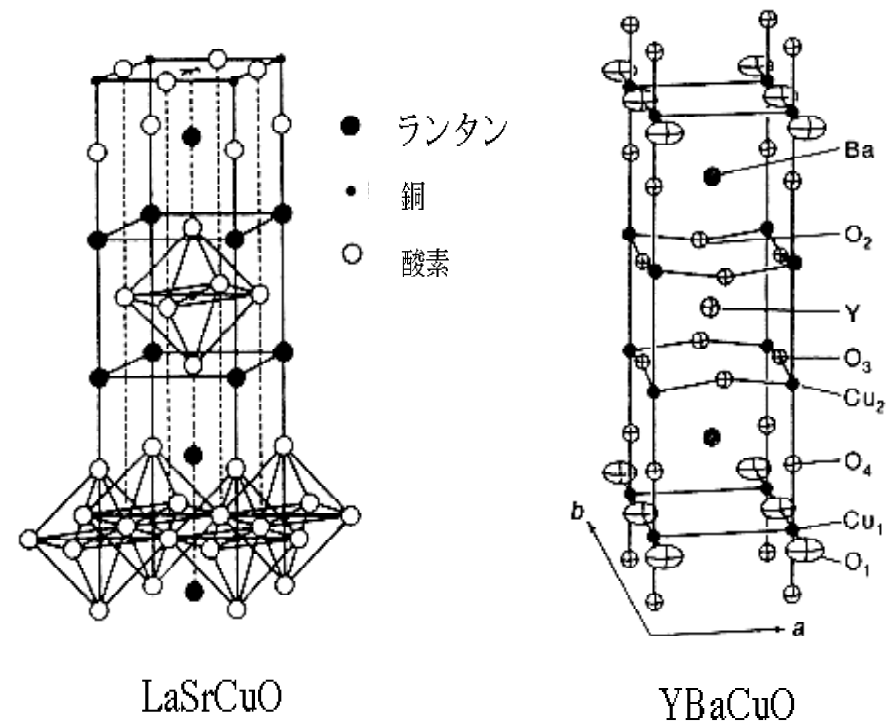
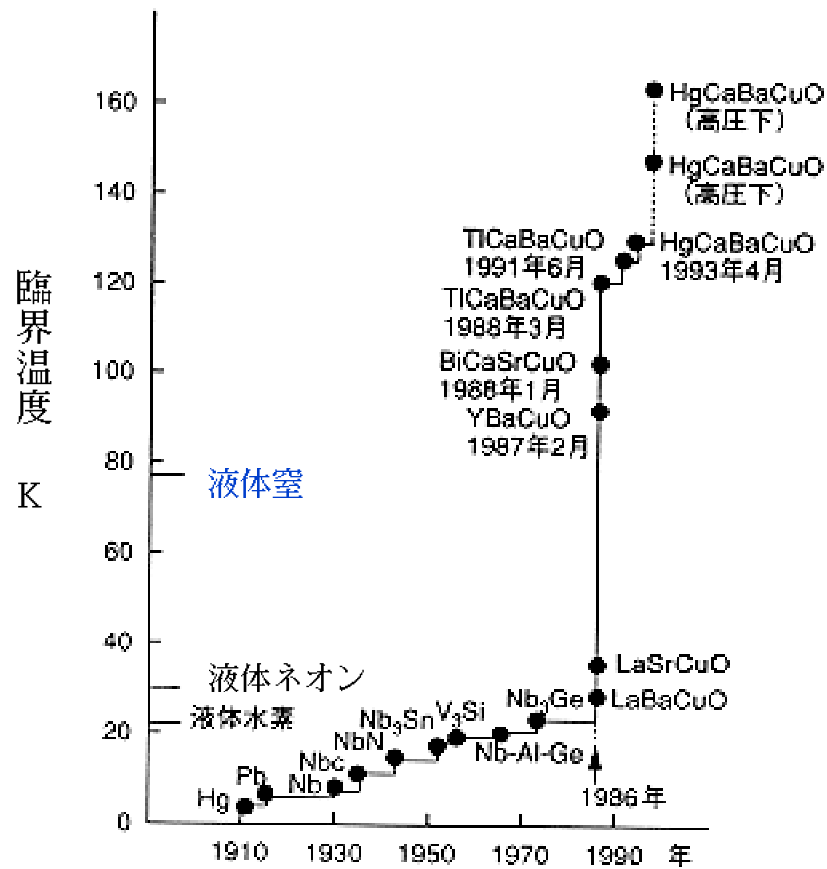


並列化による加
Linux機24台並列
(JSTの予算)

III. 高温超伝導体の研究

超伝導臨界温度の変遷

高温超伝導体の結晶構造



高温超伝導体の特徴

(電子ドーブ系)

| | LaSrCuO | YBaCuO | BiSrCaCuO | NdCeCuO |
|--------|---------|--------|-----------|------------|
| ペアの対称性 | d波 | d波 | d波 | d or ext-s |
| 擬ギャップ | | ● | ● | |
| 非整合ピーク | ● | ● | | |
| 共鳴ピーク | | ● | ● | |
| ストライプ | ● | ○ | ○ | |

モンテカルロ法による高温超伝導体の研究

高温超伝導体の相図の解明

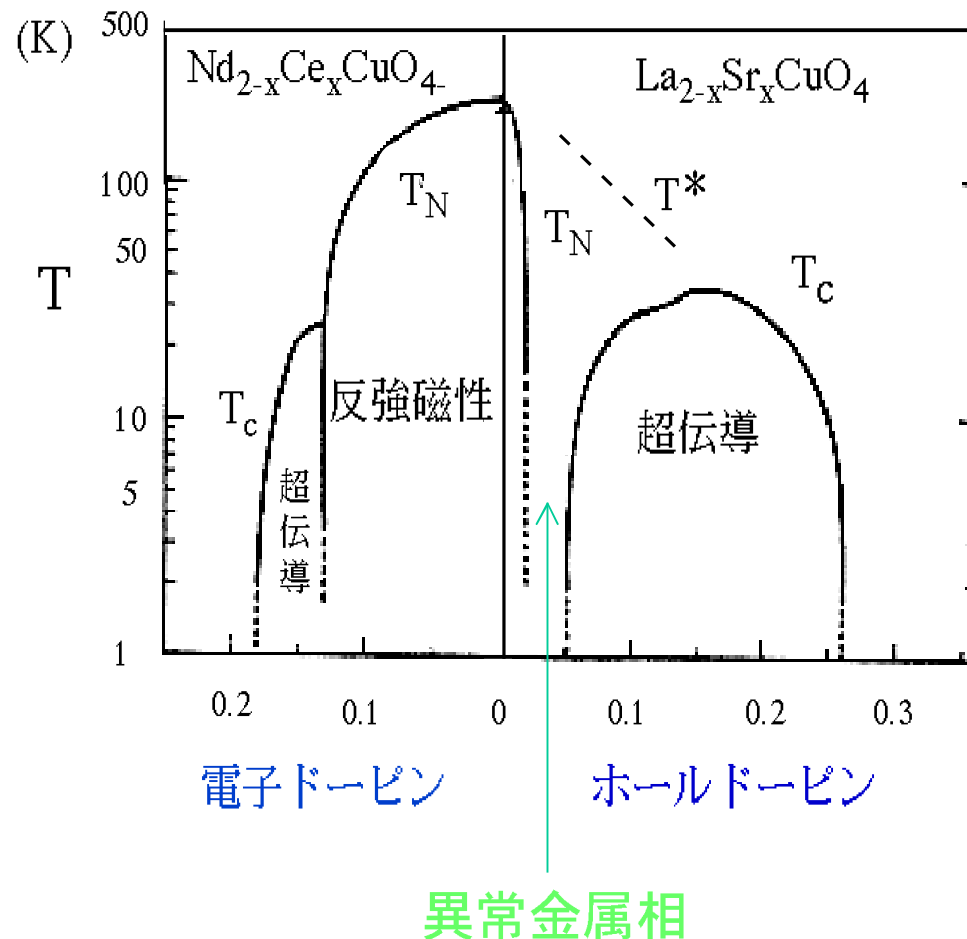
- 超伝導ー反強磁性の競合
- 超伝導凝縮エネルギーの計算

実験値との比較

- ストライプ相の安定性

1/8問題

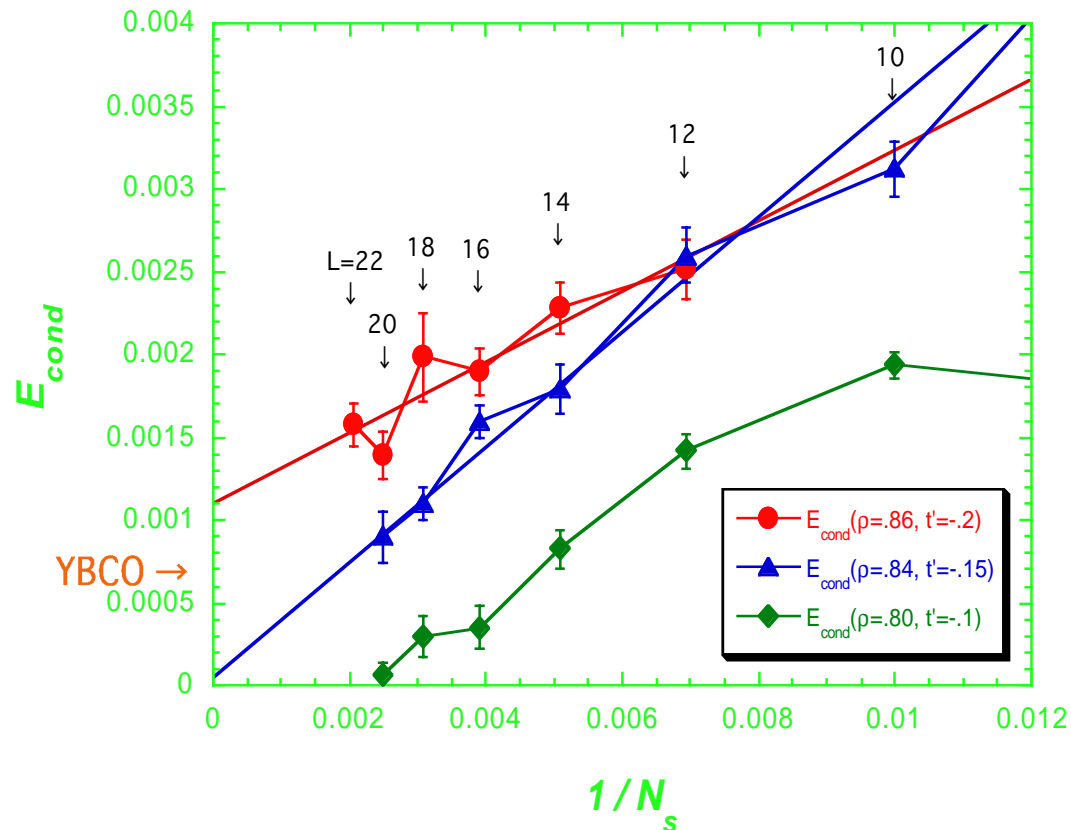
異常金属相



超伝導凝縮エネルギー

二次元ハバードモデル

Bulk Limit of SC E_{cond} of 2D Hubbard Model ($U=8$)



バルク極限の計算

$$\begin{aligned} E_{\text{cond}} &= 0.00117t \\ &= 0.59 \text{ meV/site} \\ &(\rho=0.86, t'=-0.2, U=8) \end{aligned}$$

実験値

0.26 meV/site
(臨界磁場)
0.17~0.26 (比熱)

非常によく一致する

t-Jモデルでは約50倍!

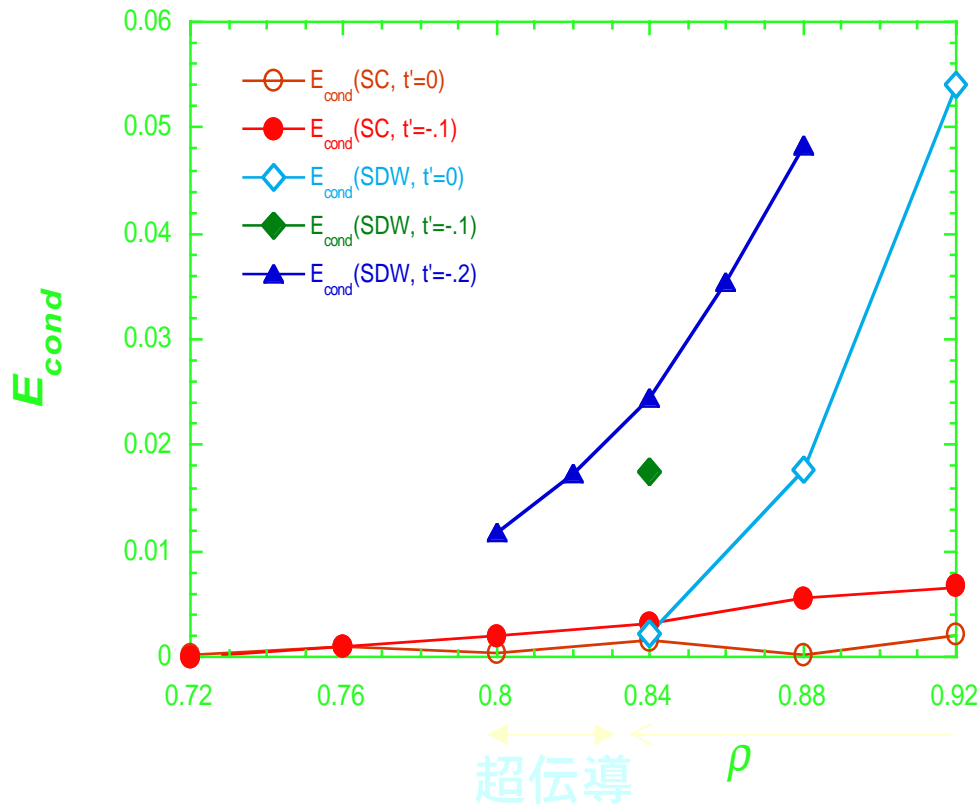
反強磁性密度波相との競合

超伝導と反強磁性のエネルギー

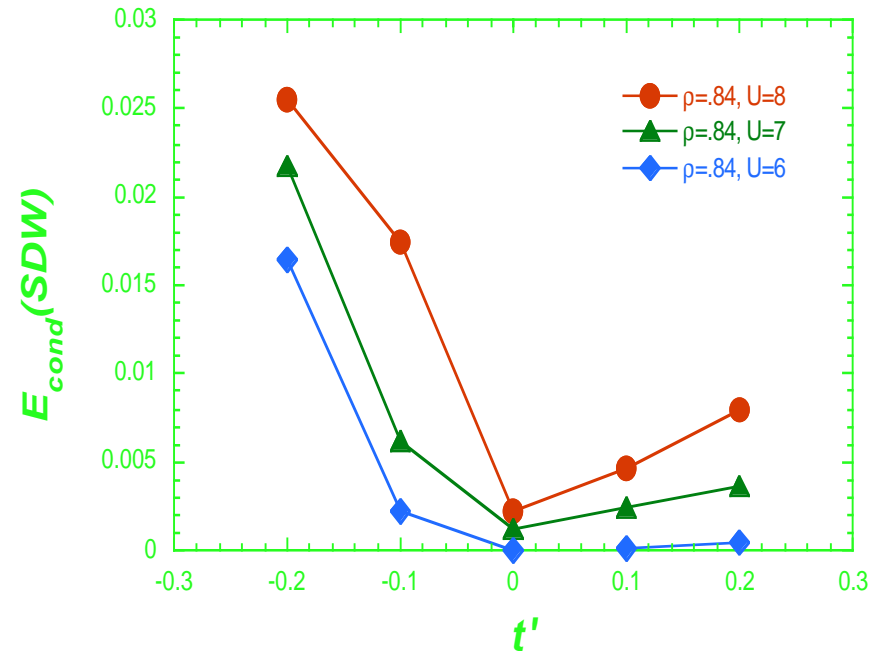
超伝導相の広さを決める要因

- 次近接トランスファー
- 最近接サイト間の相関
- クーロン相互作用の値

$E_{\text{cond}}(\text{SC, SDW})$ vs ρ $U=8$ 10×10

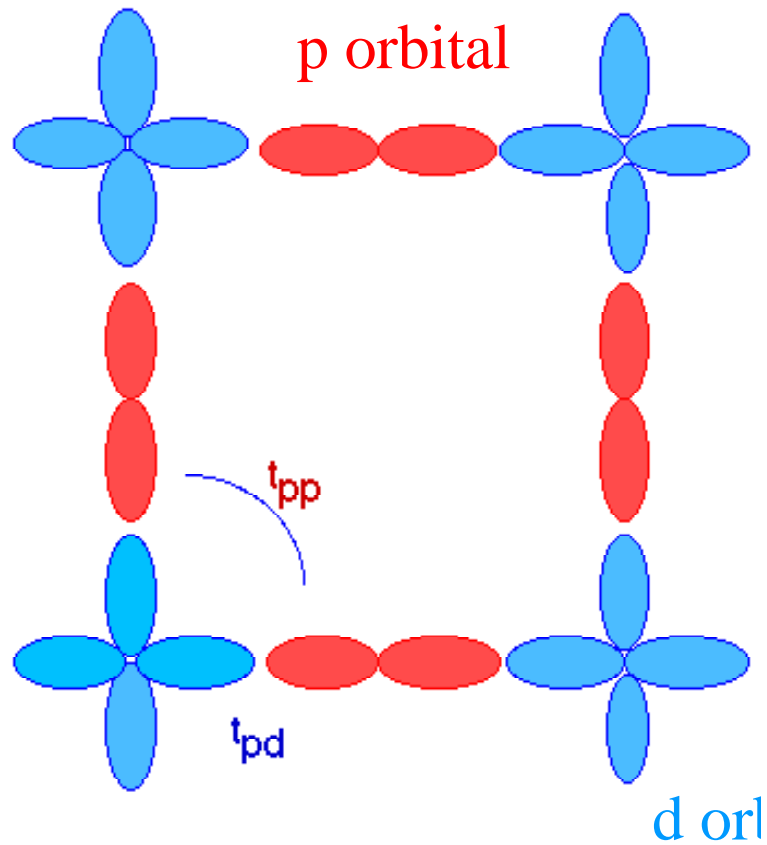


t' -dependence of $E_{\text{cond}}(\text{SDW}, \rho=.84, 10 \times 10)$



高温超伝導体の相図 d-pモデル

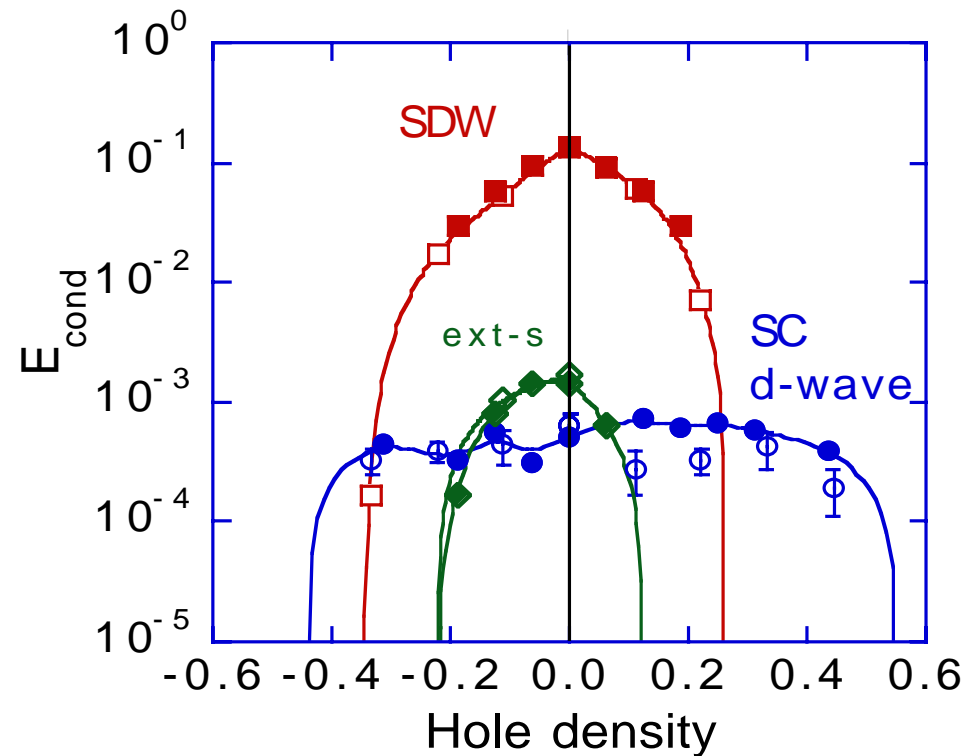
二次元d-pモデル



超伝導凝縮エネルギー

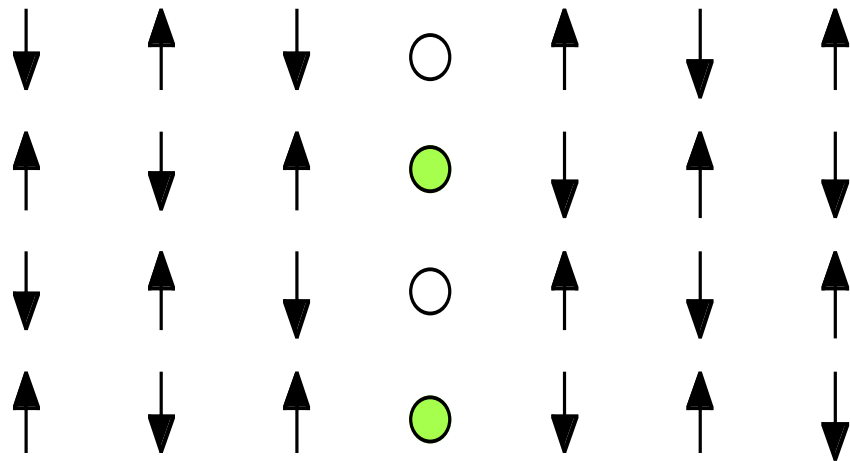
$$E_{\text{cond}} = 0.00038t_{pd} \sim 0.56 \text{ meV}$$

実験値 $\sim 0.26 \text{ meV}$



高温超伝導体におけるストライプ

ストライプのあるスピン密度波

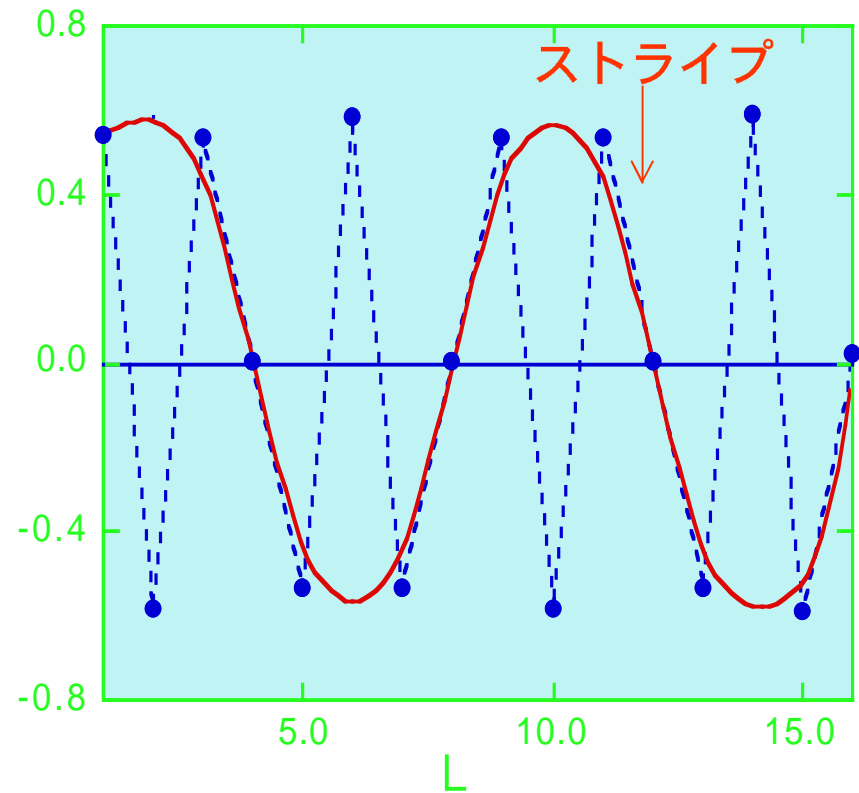


antipha

$$\text{---} = (-1)^L S_z(L)$$

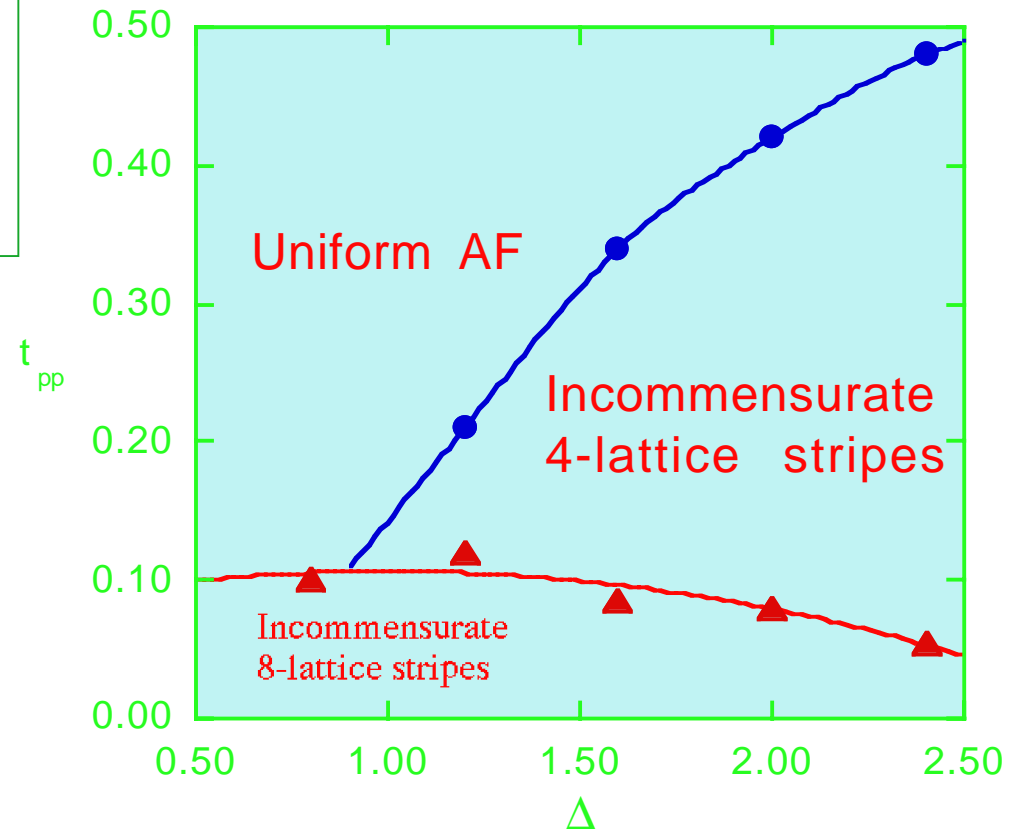
d-pモデルにおけるストライプ

1/8 doping



ストライプの存在する領域

- 一様な反強磁性密度波相との競合
- ストライプ間隔の異なるストライプ相間の競合



まとめ

並列コンピューターによる高温超伝導体の研究

- 量子変分モンテカルロ法の並列化による加速化、高精度化

バルク極限の計算

- 高温超伝導体の超伝導凝縮エネルギーが実験値と一致

二次元ハバードモデル

二次元d-pモデル

相図を近似的に再現

- 展望 より最適化された波動関数

相関因子 モンテカルロ対角化

d-pモデルにおけるバルク極限