

# 重点課題1: 相関の強い量子系の新量子相 探求とダイナミックスの解明 - 高温超伝導のしくみの究明



参考論文  
銅酸化物超伝導体 → PRB 90, 115137 (2014)  
鉄系超伝導体 → Nat. Commun. 5, 5738 (2014)

H P C I 戦略プログラム 分野 **2**

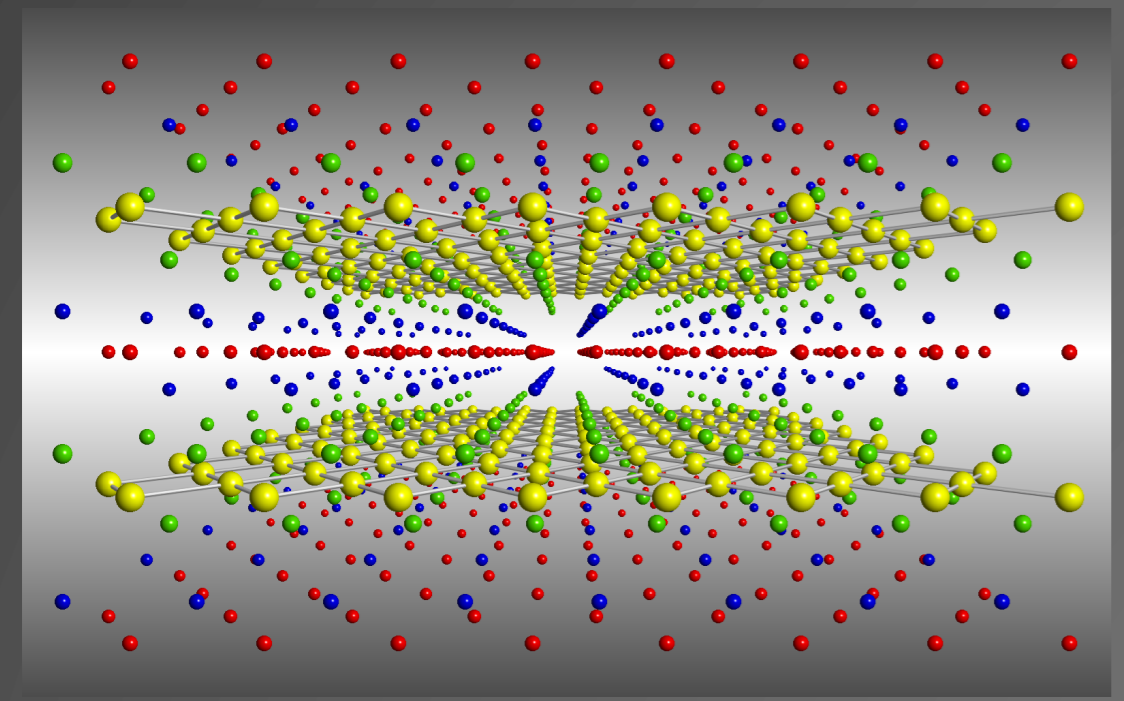
## 計算物理学のグランドチャレンジ

### - 基本法則(第一原理)のみから物性が予測できるか?

- 固体中の多数の電子の自由度をそのまま取り扱うのは「京」を用いても不可能
- 自由度を低減する理論手法の開発(第一原理ダウンフォールディング法)

For a review, M. Imada and T. Miyake, JPSJ 79,112001(2010)

#### ✓ 現実物質の格子構造



#### ✓ 理論模型

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{i,j} \sum_{\nu,\mu} t_{ij\nu\mu} a_{i\nu\sigma}^{\dagger} a_{j\mu\sigma} \rightarrow \text{Hopping term}$$

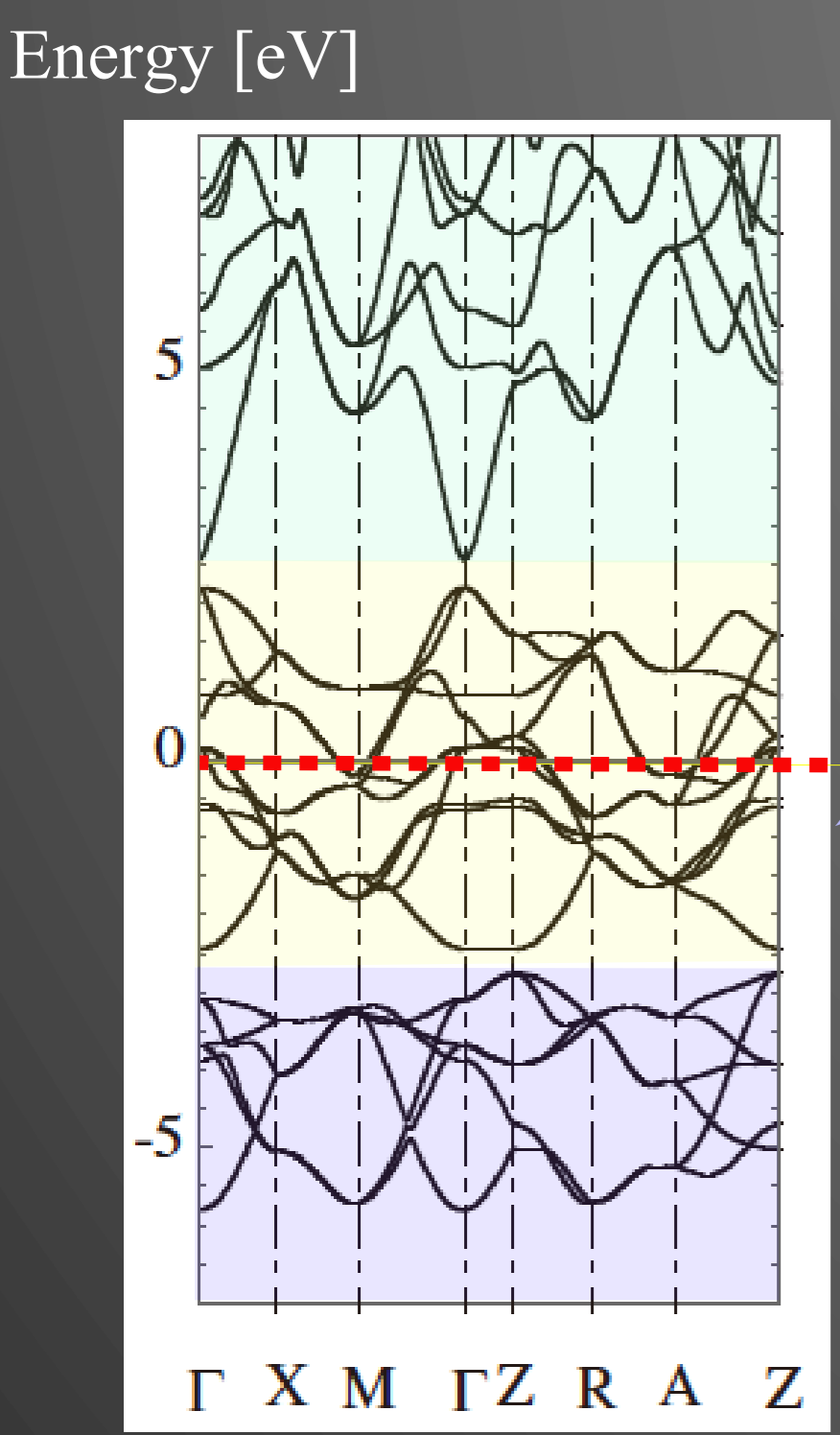
$$+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\rho} \sum_i \sum_{\nu,\mu} \left\{ U_{ii\nu\nu} a_{i\nu\sigma}^{\dagger} a_{i\nu\sigma} a_{i\mu\rho}^{\dagger} a_{i\mu\rho} \rightarrow \text{Coulomb term} \right.$$

$$\left. + J_{ii\nu\nu} (a_{i\nu\sigma}^{\dagger} a_{i\mu\rho}^{\dagger} a_{i\nu\rho} a_{i\mu\sigma} + a_{i\nu\sigma}^{\dagger} a_{i\nu\rho}^{\dagger} a_{i\mu\rho} a_{i\mu\sigma}) \right\} \rightarrow \text{Exchange term}$$

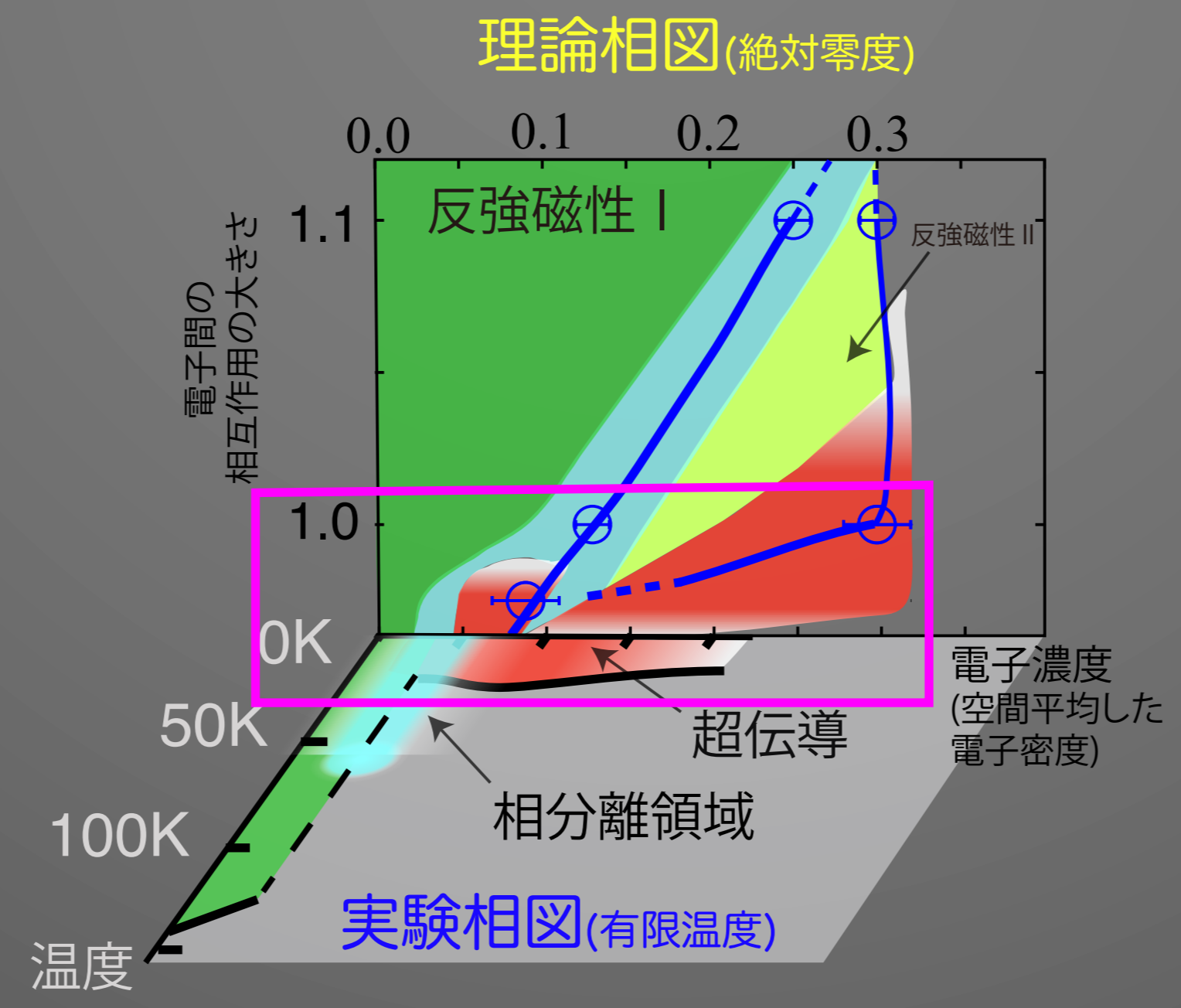
✓ 理論模型の解析: 多数の変分パラメーターを導入した多変数変分モンテカルロ法を使用  
→ 計算の実行には「京」を用いた大規模計算が必要不可欠  
+ 実験では理想的な制御の難しいパラメータを変えた網羅探索で機構解明が可能に

## 鉄系と銅酸化物高温超伝導体の超伝導機構解明

### ✓ 鉄系高温超伝導体の有効模型導出

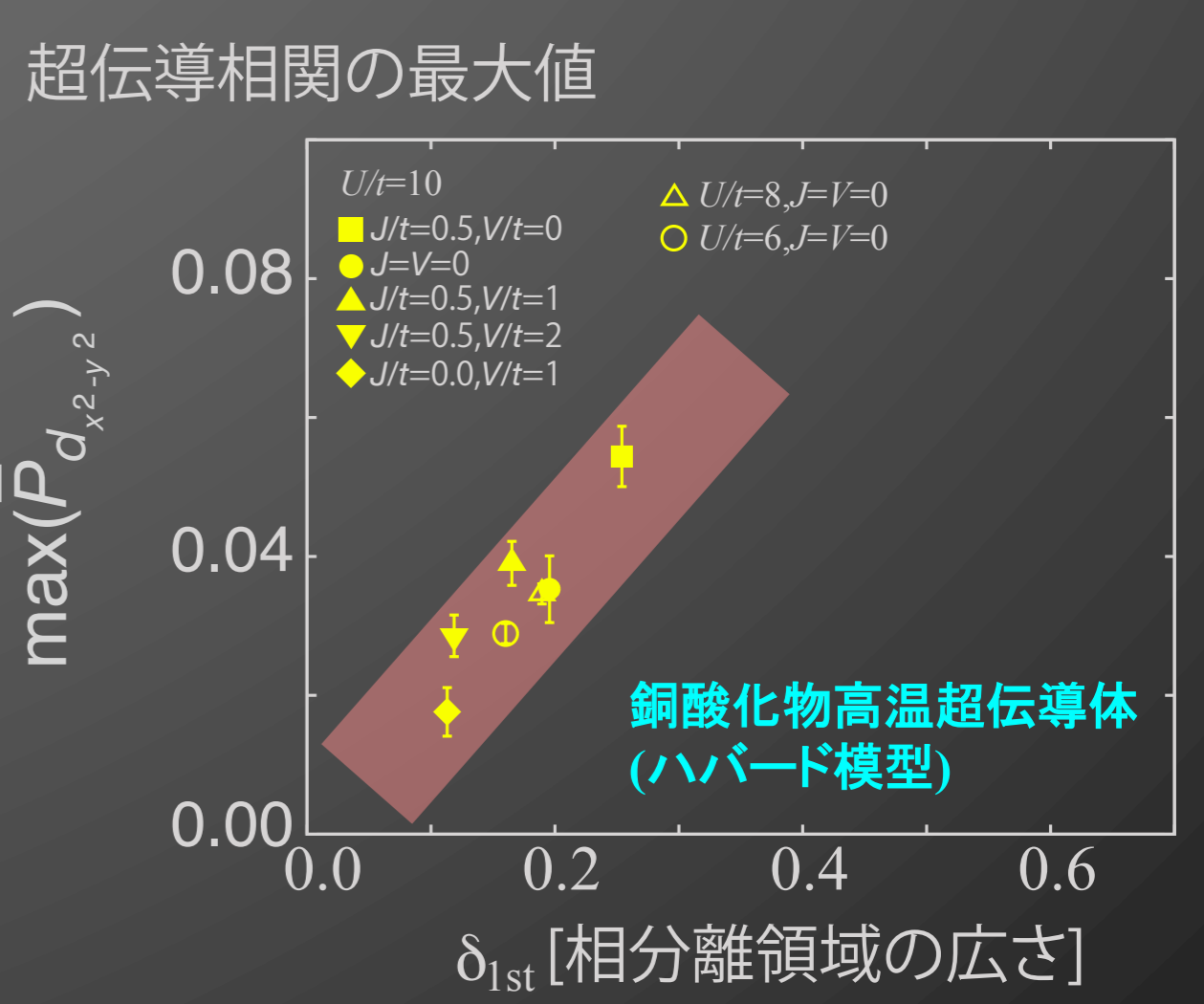
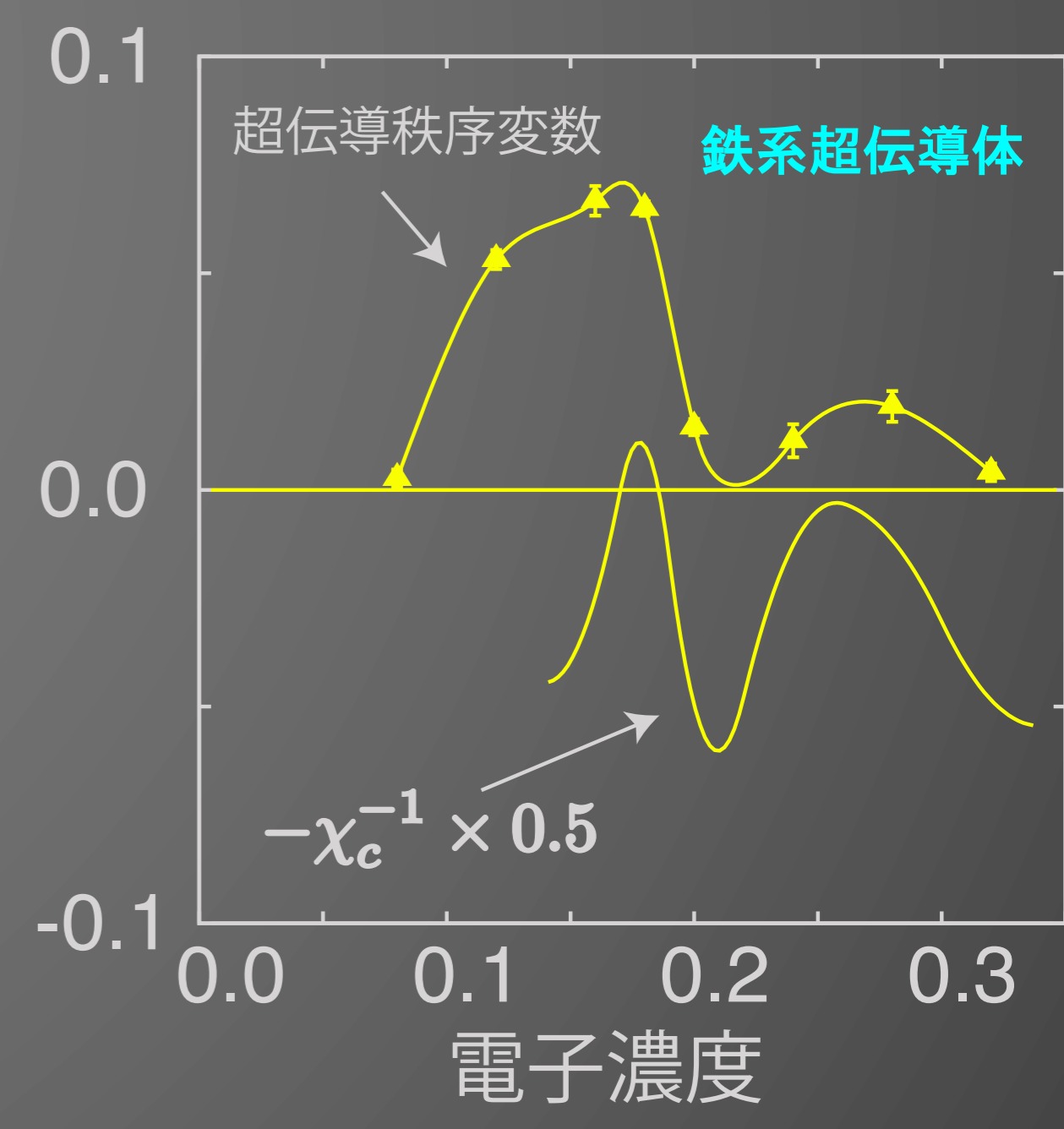


### ✓ 鉄系超伝導体の理論相図&実験相図



✓ 世界で初めて第一原理のみから超伝導状態を含む実験結果の再現  
→ 超伝導のしくみも明らかに

### ✓ 超伝導機構のしくみ



「京」で初めて超伝導のしくみが解明できたわけ  
1. 第一原理で現実に即した複雑さをそのまま計算  
2. メカニズムを抽出するための網羅探索

✓ 電荷感受率の増大と超伝導が一對一に対応

## 展望

今回の研究で解明した新しい超伝導機構を利用した超伝導転移温度の制御へ → 超伝導体の界面・薄膜が有望な候補

