

高温超伝導の計算科学的解明への研究

東大院工 三澤 貴宏、今田正俊
misawa@solis.t.u-tokyo.ac.jp

強相関電子系に対する非経験的な計算手法は近年急速に発展している。その中でも、有望な計算手法の一つが、我々が開発を行っている第一原理ダウンフォールディング法[1]である。この手法は、第一原理バンド計算をもとにした低エネルギー有効模型導出とその有効模型の高精度解析[2,3,4]を組み合わせたハイブリッド手法である。今までの研究で、我々はこの手法を、鉄系超伝導体を含む幅広い強相関物質群への適用を行い、この手法が定量的に現実物質の物性を解明できることを示してきた(レビューとして[1])。

本発表では、この第一原理ダウンフォールディング法を鉄系超伝導体に対して適用した結果について発表する。鉄系超伝導体のいくつかの異なる物質(LaFePO, LaFeAsO, BaFe₂As₂, FeTe)に対して第一原理計算をもとに低エネルギー有効模型導出を行い、その有効模型を解析することで鉄系超伝導体の磁気秩序モーメントを定量的に再現するのみならず、磁性の多様性を生み出しているのは物質間の電子相関の大きさの違いであることを明らかにした[3,4]。鉄系超伝導体の有効模型解析には一万以上の変分パラメータを最適化する多変数変分モンテカルロ法[2]を用いている。この手法は、多数の変分パラメータを導入することで、従来の変分モンテカルロ法に比べ波動関数の自由度を大幅に拡張した手法であり、この多自由度のために現実物質に対する複雑な有効模型に対しても高精度な解析が可能となっている。また、強相関電子系に対する基本的な模型であるハバード模型に対するベンチマーク計算から厳密な数値計算結果に匹敵する精度がだせることを示している[2,5]。精度の代償としては計算コストの増大があるが、これは「京」に代表されるスーパーコンピューターを用いた大規模並列計算を用いて克服することに成功している。

さらに、この第一原理ダウンフォールディング法を用いて鉄系超伝導体LaFeAsOの超伝導状態の解析を行った結果についても発表する[6]。解析の結果、実験と定性的に整合する電子ドーピングの領域で超伝導が発現することを見出した。実験結果を定量的に再現したうえで、実験では理想的な制御が難しい電子間の相互作用を系統的に変えた計算を行い、超伝導秩序パラメータの大きさと、反強磁性の1次相転移近傍で増大する一様な電荷密度揺らぎの増大が1対1に対応することを明らかにした。これは、一様な電荷揺らぎの増大を生む強相関効果が超伝導の発現をもたらしていることを示している。また、高温超伝導を記述する最も基本的な模型の一つであるハバード模型においても超伝導の安定性と一様な電荷揺らぎの間に同様の1対1対応を発見した結果についても報告する[5]。全く異なる二つの模型に対して共通の超伝導機構が得られたことは、この機構が強相関電子系における普遍的な超伝導発現機構であることを示している。

文献

- [1] M. Imada and T. Miyake, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 112001 (2010).
- [2] D. Tahara and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 114701 (2008).
- [3] T. Misawa, K. Nakamura, and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 023704 (2011).
- [4] T. Misawa, K. Nakamura, and M. Imada, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 177007 (2012).
- [5] T. Misawa and M. Imada, *Phys. Rev. B* **90**, 115137 (2014).
- [6] T. Misawa and M. Imada, *Nat. Commun.* **5**, 5738 (2014)..