

受付 ID	16a6
分野	物質科学

モンテカルロ法による強相関電子系の研究

Study of strongly-correlated electron systems by the Monte Carlo method

小泉 裕康

筑波大学 計算科学研究センター

1. 研究目的

銅酸化物高温超伝導体を含む強相関物質では、電子のスピン自由度が生き残っており、それが種々の物性に重要な影響を与える。そして、従来の金属超伝導とは異なる機構の超伝導が発現していると考えられている。これまでの研究で、我々は、スピン自由度を利用した新しい電気伝導機構、“スピン渦誘起ループ電流による電流生成機構”を定式化した。そして、銅酸化物超伝導体の擬ギャップ相及び、超伝導相では、スピン渦誘起ループ電流が存在していることを予言している。このスピン渦誘起ループ電流は、遍歴電子がスピンをねじりながら運動しスピン渦を生じる時に生成される。スピン渦誘起ループ電流は従来の電気伝導理論では考慮されていなかった全く新しい電流要素であり、トポロジカルな量子数“巻き数 (winding number)”によって規定する robust な電流を生じる。巨視的な電流はスピン渦誘起ループ電流が作るネットワークにより生成され、超伝導転移温度はこのネットワークの安定化温度に一致すると考えられる。このスピン渦誘起ループ電流が物性に与える影響を、モンテカルロシミュレーションを行うことにより明らかにする。特に、擬ギャップ相とはどのような相なのかを説明し、さらに、擬ギャップ相から超伝導相への転移温度を求める。また、各々のスピン渦誘起ループ電流は右回り、左回りの自由度があり、その自由度を利用した量子ビットを作ることができる。この量子ビットを使った量子コンピューターの実現に向けた、シミュレーションも行う。

2. 研究成果の内容

ラシュバ型のスピン軌道相互作用をモンテカルロシミュレーションに取り入れることにより、ホールドーピング量 $x=0.17$ 付近にピークを持つ超伝導転移温度を得ることができた。また、スピン渦誘起ループ電流は量子ビットとして有望であることが2量子ビット系のシミュレーションで明らかになった。スピン渦誘起ループ電流による超伝導は、波動関数の座標に関する一価性より生じる $U(1)$ インスタントンによるものとの見方ができることがわかった。

3. 学際共同利用として実施した意義

スーパーコンピュータの利用により、モンテカルロシミュレーションの高速化が可能となった。

4. 今後の展望

スピン渦誘起ループ電流の検出に関するシミュレーション、4量子ビット系に対するシミュレーションなどを行っていく。

5. 成果発表

(1) 学術論文

1. H. Koizumi, “Origin of the U(1) field mass in superconductors”, J. Phys.: Conf. Series **833**, (2017) 12016

2. H. Wakaura, H. Koizumi, “Possible use of spin-vortex-induced loop currents as qubits: a numerical simulation for two-qubit system”, Physica C: Superconductivity and its applications, **521-522**, (2016) 55-66

(2) 学会発表

1. Hiroyasu Koizumi, “Persistent current from spin-twisting itinerant motion of electrons”, 1st international workshop SUPERHYDRIDES: Toward room temperature superconductivity, hydrides and more (May 9-10, Rome, Italy)

2. Hiroyasu Koizumi, “Emergent singularities of wave functions and appearance of persistent motion in dynamical Jahn-Teller problems and superconductivity”, XXIII international symposium on the Jahn-Teller effect (Aug 27-Sep 1, Tartu, Estonia)

3. Hiroyasu Koizumi, “Origin of the U(1) field mass in superconductors”, New trends of development fundamental and applications: problems, achievements and prospects (Nov. 10-11, Tashkent, Uzbekistan).

(3) その他

1. Hiroyasu Koizumi, “Possible explanation of the superconducting phase transition as a topological phase transition”, Leiden String Seminar (June 14, Leiden, the Netherlands)

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS	○	1000
HA-PACS/TCA		
COMA	○	750
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		