

## 銅酸化物超伝導体超伝導転移温度のモンテカルロ計算

### Monte Carlo calculation for superconducting transition temperature of cuprate superconductors

小泉裕康

筑波大学計算科学研究センター

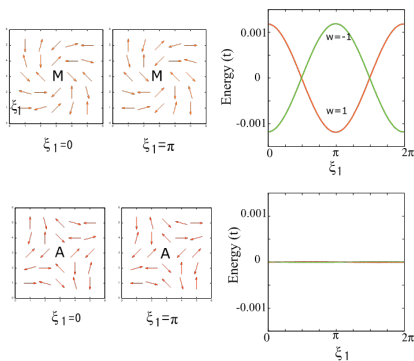
#### 1. 研究目的

銅酸化物高温超伝導体の超伝導転移温度の転移温度をモンテカルロシミュレーションにより計算する。

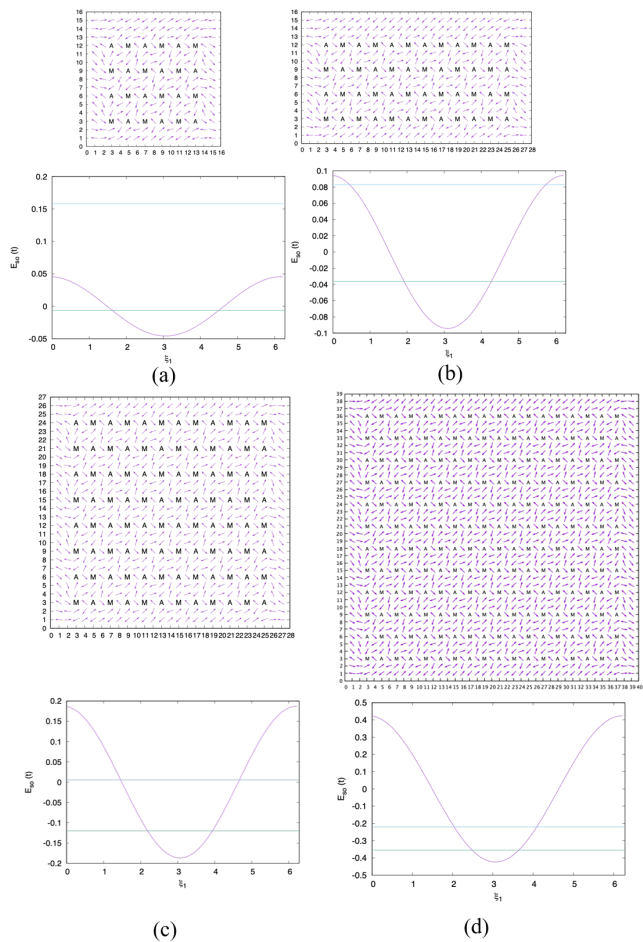
#### 2. 研究成果の内容

銅酸化物超伝導体の超伝導転移温度は BCS 型の超伝導体のように電子対形成によるエネルギーギャップの形成温度に対応していないことが実験により明らかになっている。また、電気伝導においても通常の金属が示す電気伝導と異なる電気伝導が起こっていると考えられている。われわれは、スピン渦誘起ループ電流による電気伝導とその安定化による超伝導状態の出現というシナリオにより最適ドーピングでの超伝導転移温度が得られることをこれまでの研究で示してきたが、最適ドーピング以外での超伝導転移温度は正しく得られていなかった。本研究では、ループ電流の安定性の他、スピン渦の安定性についても考慮したモンテカルロシミュレーションを行い、最適ドーピング以外での超伝導転移温度を計算することを目的に研究を始めた。

最初、ラシュバ型のスピン軌道相互作用を入れ、スピンの揺らぎを古典的に取り入れた計算を行っていたが、この方法では超伝導転移温度の正しい温度依存性が得られないことが次第に明らかになってきた。そこで、スピン渦の励起について量子力学的な取り扱いを行うことを試行錯誤し、その結果、スピン渦誘起ループ電流とラシュバ型のスピン軌道相互作用が存在する時、新規な集団スピンモードが現れることがわかった。この集団モードを含んだモンテカルロシミュレーションは行うことはできなかったが、この集団モードについては、結果を得たので、以下それについて簡単に説明する。



上図に示すようにエネルギーはスピン渦の方向(M または A)とループ電流の方向( $w=1$  または、 $w=-1$ )で変わるが、詳しくみるとさらに、左下のスピンの方向  $\xi_1$  にも依存する。この  $\xi_1$  は系全体のスピンの方向をずらすことに相当する集団運動に相当し、下図のように系を大きくするとポテンシャルは深くなる。また、クラッキングモデルでこの運動に相当する質量を計算して、量子化された励起エネルギーを求めると、系の大きさによらず、ほぼ一定になることが見出された。



### 3. 学際共同利用が果たした役割と意義

銅酸化物に存在する可能性がある、新規な集団スピンモードを見出した。大きな系での計算は研究室の計算機では不可能な計算量であり、スーパーコンピューターが必要であった。今回発見したスピン集団モードが、超伝導転移温度に決定的な影響を与えている可能性がある。

### 4. 今後の展望

新規な集団スピンモードを取り入れることにより、モンテカルロシミュレーションを行うと、正しいドーピング量依存性を持った超伝導転移温度が得られるかもしれない。

### 5. 成果発表

#### 学会発表

1. Appearance of spontaneous current feeding state by Rashba spin-orbit interaction, H. Koizumi, D. Manabe, 7th European conference on molecular magnetism, 2019 9/15-19, Firenze, Italy.
2. 銅酸化物超伝導の超伝導転移温度に対する新規なスピン励起の影響, 小泉裕康、石岡大樹, 日本物理学会第 75 回年次大会, 2020 3/16-19, インターネット
3. 銅酸化物高温超伝導体における Rashba 相互作用から生じる新奇な集団スピン励起モード, 真鍋大地、小泉裕康、日本物理学会 2019 年秋季大会、2019 9/10-13, 岐阜
4. 銅酸化物における自発的外部電流供給状態と超伝導, 真鍋大地、小泉裕康、日本物理学会 2019 年秋季大会、2019 9/10-13, 岐阜
5. Appearance of a novel collective spin excitation in cuprate superconductors due to Rashba spin-orbit interaction and spin-twisting itinerant motion of electrons, H. Koizumi and D. Manabe, Spectroscopies in Novel Superconductors 2019, 2019 6/16-21, Tokyo

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
Cygnus			
Oakforest-PACS	○	30000	0
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			