

Julia言語を用いた非従来型超伝導計算システムの開発とベンチマーク
Development and Benchmarking of a Computational Simulation System for Unconventional Superconductivity Coded in Julia

鳥取大院工¹, 鳥取大AMES², 阪大院理³

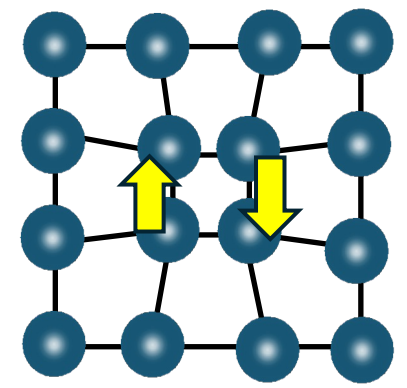
○田中 尚岳¹, 牛尾 賢生¹, 中岡 大輝¹, 星 佑人¹, 榊原 寛史^{1,2}, 梶 昌孝³

*Fac. of Eng., Tottori Univ.*¹, *AMES, Fac. of Eng., Tottori Univ.*², *Dept. of Phys., Osaka Univ.*³

○Naotaka Tanaka¹, Kensei Ushio¹, Daiki Nakaoka¹, Yuto Hoshi¹, Hirofumi Sakakibara^{1,2}, Masataka Kakoi³

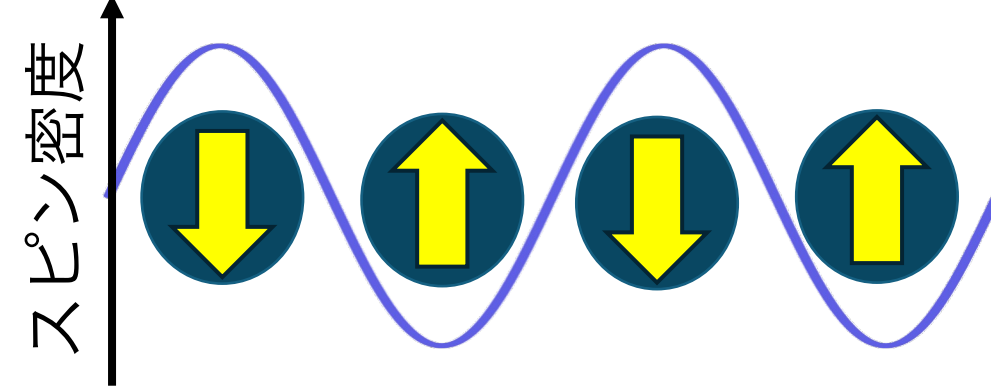
E-mail: m24j3029c@edu.tottori-u.ac.jp

背景



従来型超伝導 (BCS理論)

- ・金属間化合物 (ex. MgB₂)
- ・ $T_c=40\text{K}$

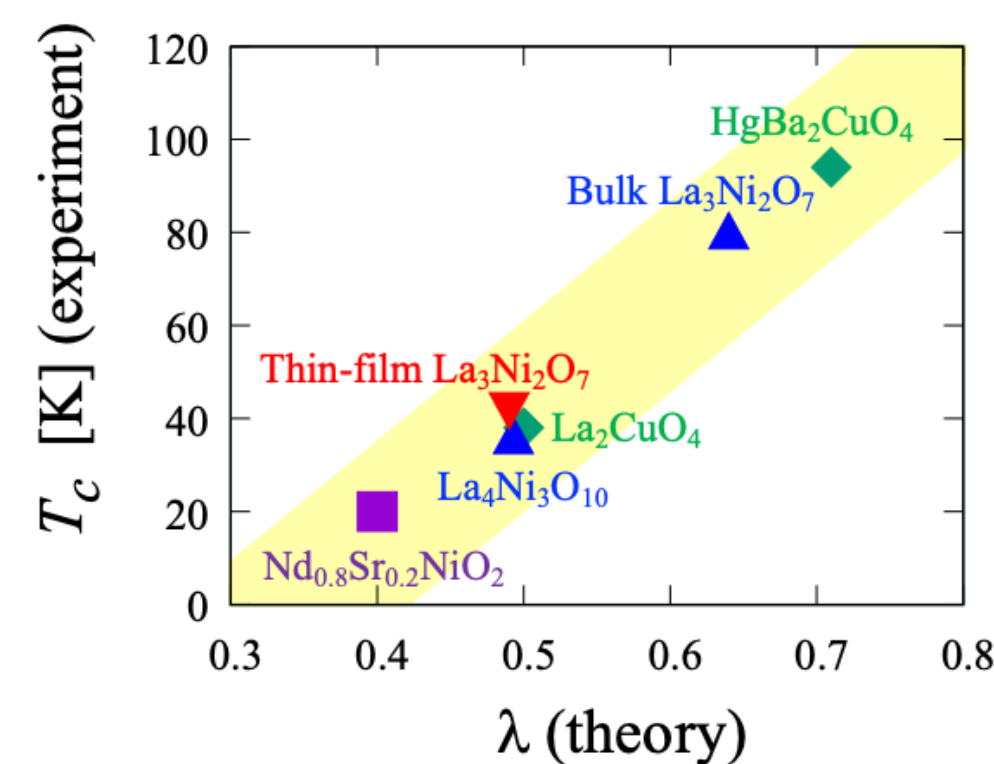


非従来型超伝導 (スピン揺らぎ)

- ・遷移金属酸化物 (ex. HgBa₂Ca₂Cu₃O₈)
- ・ $T_c=135\text{K}$

非従来型超伝導体（強相関電子系）は、BCS理論で記述できない
電子間相互作用の解明が必要だが、第一原理計算のみでは強相関系の記述に限界あり

電子相関効果に特化した多体計算手法 (FLEX) の導入が不可欠



実験測定で得られる超伝導転移温度 T_c と
理論計算から得られる λ に相関関係が見られる^[1]

新しい超伝導材料の発見のためには、
より計算コストが低い計算コードの開発が望ましい

既存 Fortran, C など → 新 Julia

拡張性があり、開発行為がスムーズになる

計算手法

ゆらぎ交換近似 (FLEX) 計算^[2]

温度 (松原) グリーン関数

$$G = \frac{1}{G_0^{-1} - \Sigma}$$



$$G_o(\mathbf{k}, i\varepsilon_l) = \frac{1}{i\varepsilon_l - \xi(\mathbf{k})}$$

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{k_B T}{N} \sum_{\mathbf{k}', \varepsilon_{n'}} V_\Sigma(\mathbf{k} - \mathbf{k}', i\varepsilon_n - i\varepsilon_{n'}) G_\sigma(\mathbf{k}', i\varepsilon_{n'})$$

$$\text{スピン感受率: } \chi_s(\mathbf{q}, i\omega_m) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)}{1 - S\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)}$$

$$\text{電荷感受率: } \chi_c(\mathbf{q}, i\omega_m) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)}{1 + C\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m)}$$

$$\text{既約感受率: } \chi_0(\mathbf{q}, i\omega_m) = -\frac{k_B T}{N} \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon_n} G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m) G(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$$

$$S_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \begin{cases} U, l_1 = l_2 = l_3 = l_4 \\ U', l_1 = l_3 \neq l_2 = l_4 \\ J, l_1 = l_2 \neq l_3 = l_4 \\ J', l_1 = l_4 \neq l_2 = l_3 \end{cases}, C_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \begin{cases} U, l_1 = l_2 = l_3 = l_4 \\ -U' + 2J, l_1 = l_3 \neq l_2 = l_4 \\ 2U' - J, l_1 = l_2 \neq l_3 = l_4 \\ J', l_1 = l_4 \neq l_2 = l_3 \end{cases}$$

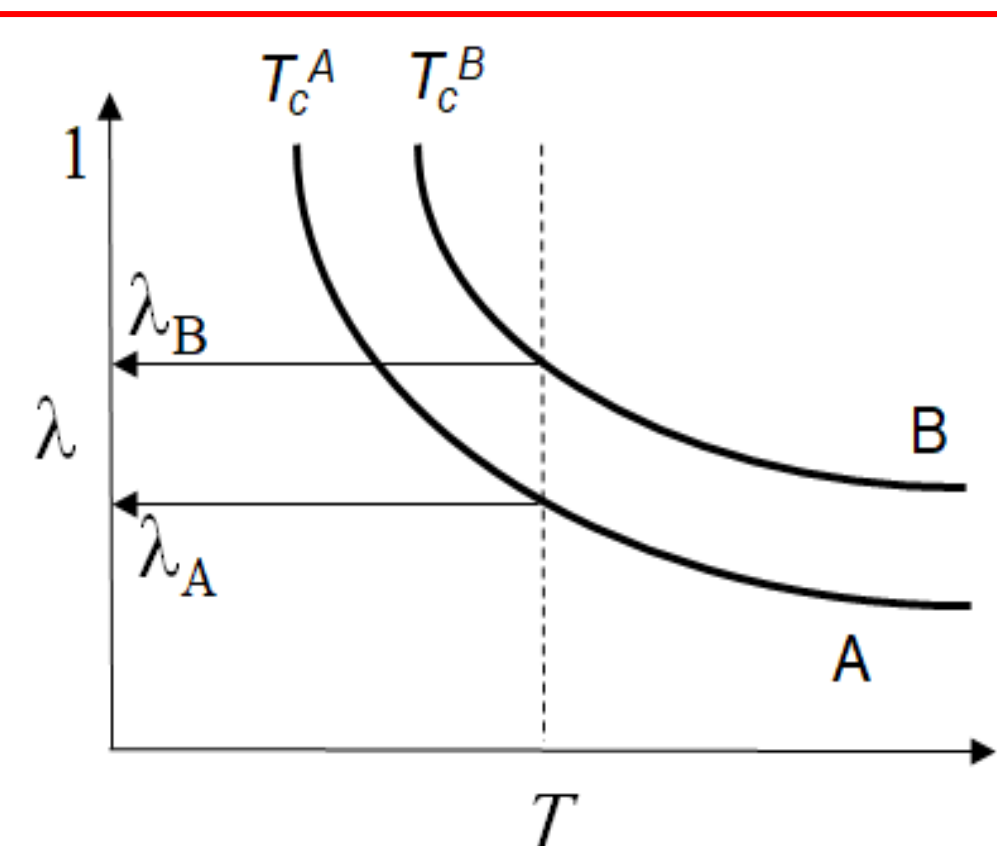
$$V_\Sigma = \frac{3}{2} \hat{S} \hat{\chi}_s(\mathbf{q}) \hat{S} + \frac{1}{2} \hat{C} \hat{\chi}_c(\mathbf{q}) \hat{C} - \frac{1}{4} (\hat{S} + \hat{C}) \hat{\chi}_0(\mathbf{q}) (\hat{S} + \hat{C}) + \frac{3}{2} \hat{S} - \frac{1}{2} \hat{C}$$

$$V_\Delta = \frac{3}{2} \hat{S} \hat{\chi}_s(\mathbf{q}) \hat{S} - \frac{1}{2} \hat{C} \hat{\chi}_c(\mathbf{q}) \hat{C} + \frac{1}{2} (\hat{S} + \hat{C})$$

線形化エリアシュベルグ方程式^[3]

$$\lambda(T) \Delta(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = -\frac{k_B T}{N} \sum_{\mathbf{k}', \varepsilon_{n'}} V_\Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}', i\varepsilon_n - i\varepsilon_{n'}) G(-\mathbf{k}', -i\varepsilon_{n'}) \Delta(\mathbf{k}', i\varepsilon_{n'}) G(\mathbf{k}', i\varepsilon_{n'})$$

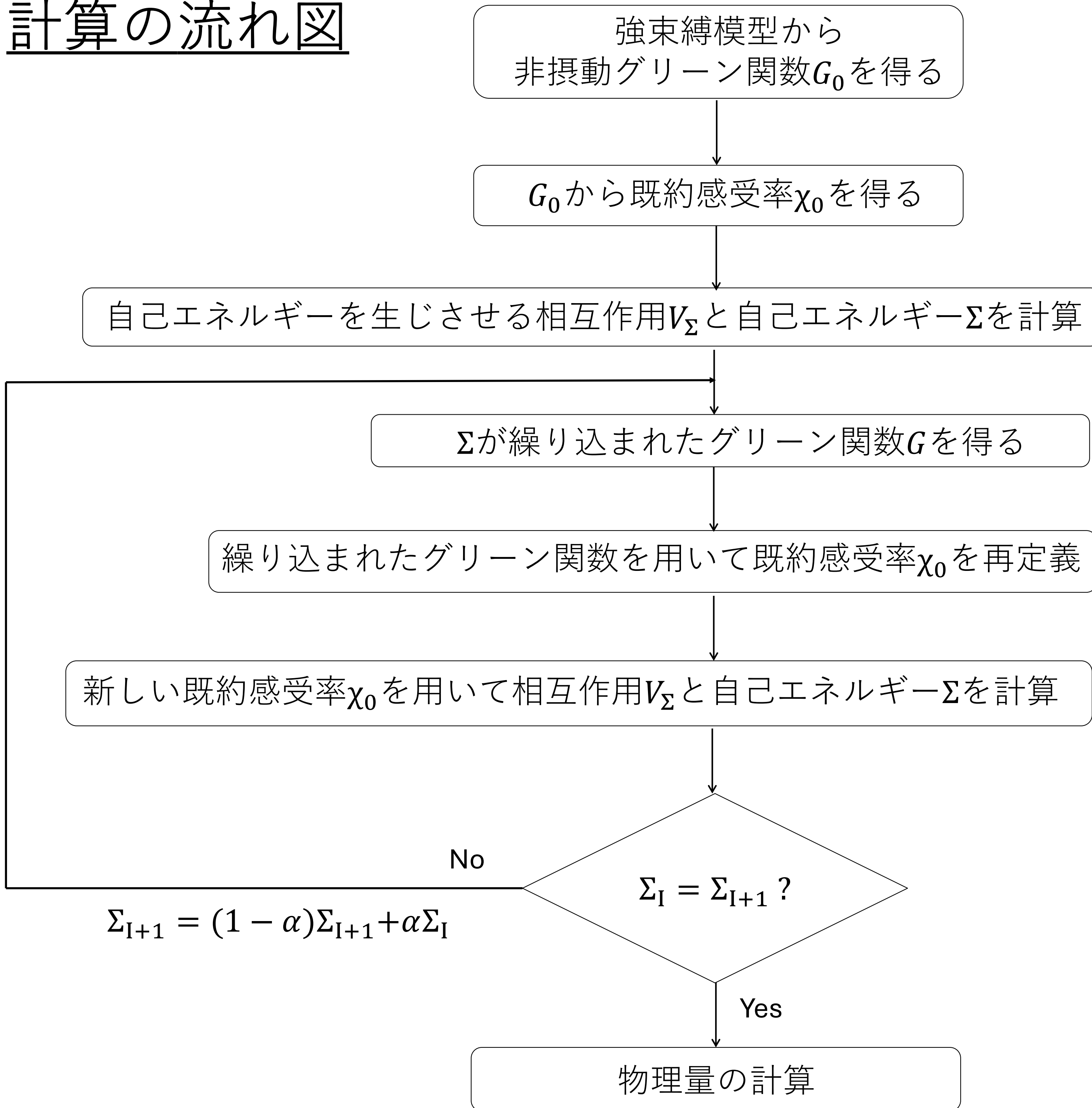
固有値 $\lambda(T) = 1$ のとき $T = T_c$
固有関数 Δ : 異常自己エネルギー (ギャップ関数)



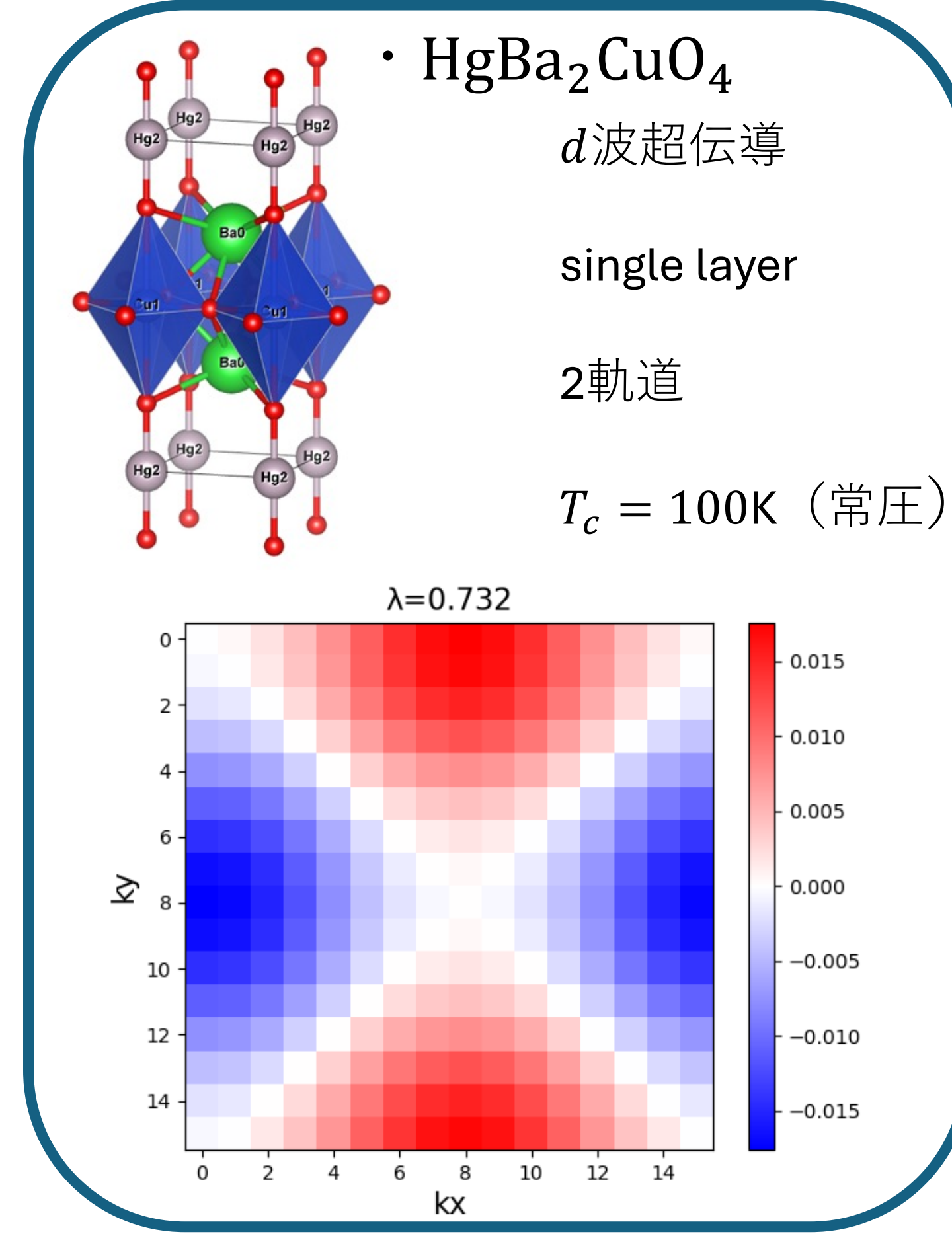
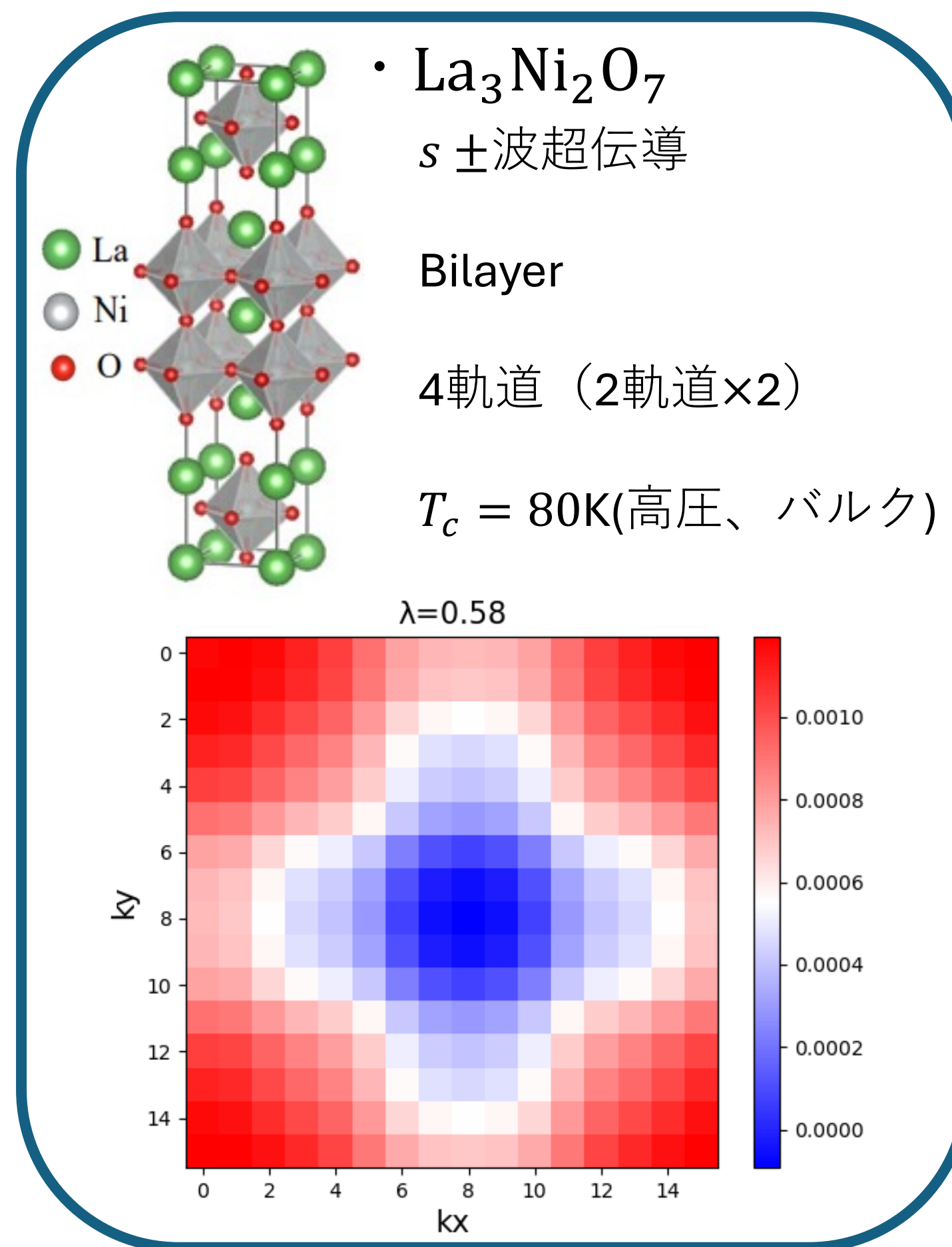
引用文献

- [1] K. Ushio *et al.*, arXiv:2506.20497
- [2] N.E. Bickers, D. J. Scalapino, S. R. White, Phys. Rev. Lett. **62**, 961 (1989).
- [3] H. Sakakibara *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 064501 (2012).
- [4] H. Shinaoka, J. Otsuki, M. Ohzeki, and K. Yoshimi, Phys. Rev. B **96**, 035147 (2017).
- [5] M. Wallerberger *et al.*, SoftwareX **21**, 101266 (2023).
- [6] J. Li, M. Wallerberger, N. Chikano, C.-N. Yeh, E. Gull, and H. Shinaoka, Phys. Rev. B **101**, 035144 (2020).
- [7] M. Kitatani, N. Tsuji, and H. Aoki, Phys. Rev. B **92**, 085104 (2015).

計算の流れ図



ベンチマーク結果

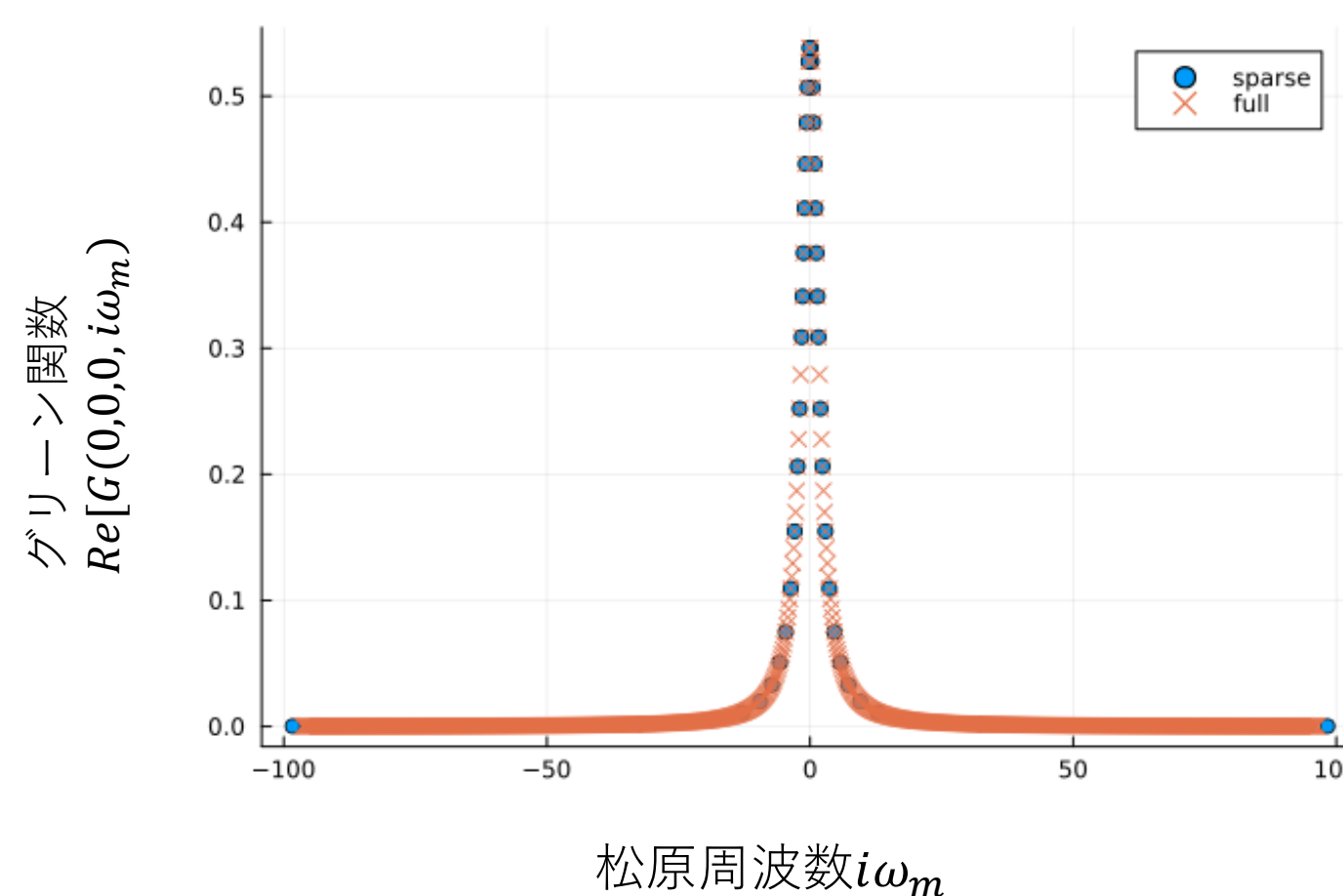


	La ₃ Ni ₂ O ₇		HgBa ₂ CuO ₄	
	Julia	Fortran	Julia	Fortran
time[sec]	2243	4182	1096	1359
loop	54	108	54	90
$U\chi_0$	0.94	0.94	0.98	0.98
λ	0.58	0.57	0.73	0.74

展望

Sparse-ir^{[4][5][6]} の実装

中間表現 (IR) 基底のもとにスパースサンプリング法を用いて計算を行う。



$$G(i\omega) \xrightarrow{\text{fit}} G_l \xrightarrow{\text{evaluate}} G(\tau)$$
$$G_l \xrightarrow{\text{evaluate}} G(i\omega) \xrightarrow{\text{fit}} G_l$$

Sparse-ir を使用することで、精度を保ったまま松原周波数の基底を削減

計算コストを大幅に軽減