

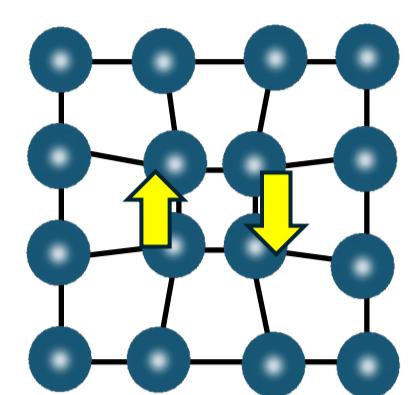
# Julia言語を用いた非従来型超伝導計算システムの開発とベンチマーク

## Development and Benchmarking of a Computational Simulation System for Unconventional Superconductivity Coded in Julia

鳥取大院工<sup>1</sup>, 鳥取大AMES<sup>2</sup>, 阪大院理<sup>3</sup>○田中 尚岳<sup>1</sup>, 牛尾 賢生<sup>1</sup>, 中岡 大輝<sup>1</sup>, 星 佑人<sup>1</sup>, 楠原 寛史<sup>1,2</sup>, 植 昌孝<sup>3</sup>Fac. of Eng., Tottori Univ. <sup>1</sup>, AMES, Fac. of Eng., Tottori Univ. <sup>2</sup>, Dept. of Phys., Osaka Univ. <sup>3</sup>○Naotaka Tanaka<sup>1</sup>, Kensei Ushio<sup>1</sup>, Daiki Nakaoka<sup>1</sup>, Yuto Hoshi<sup>1</sup>, Hirofumi Sakakibara<sup>1,2</sup>, Masataka Kakoi<sup>3</sup>

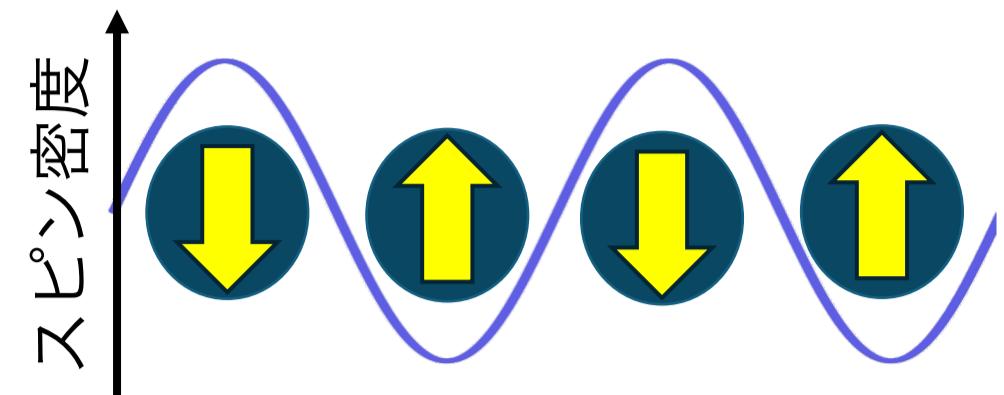
E-mail: m24j3029c@edu.tottori-u.ac.jp

## 背景



従来型超伝導(BCS理論)

- ・金属間化合物 (ex. MgB<sub>2</sub>)
- ・ $T_c = 40\text{K}$

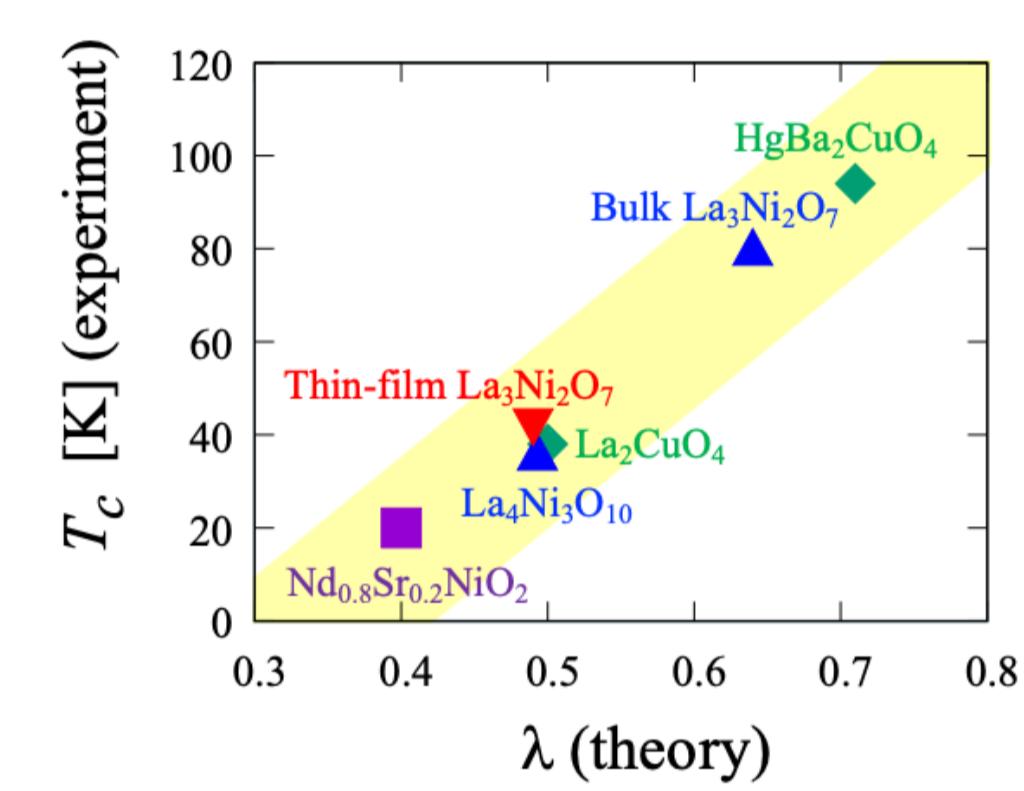


非従来型超伝導(スピン揺らぎ)

- ・遷移金属酸化物 (ex. HgBa<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>8</sub>)
- ・ $T_c = 135\text{K}$

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 $\lambda$ に相関関係が見られる<sup>[1]</sup>

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 → 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<sup>[2]</sup>

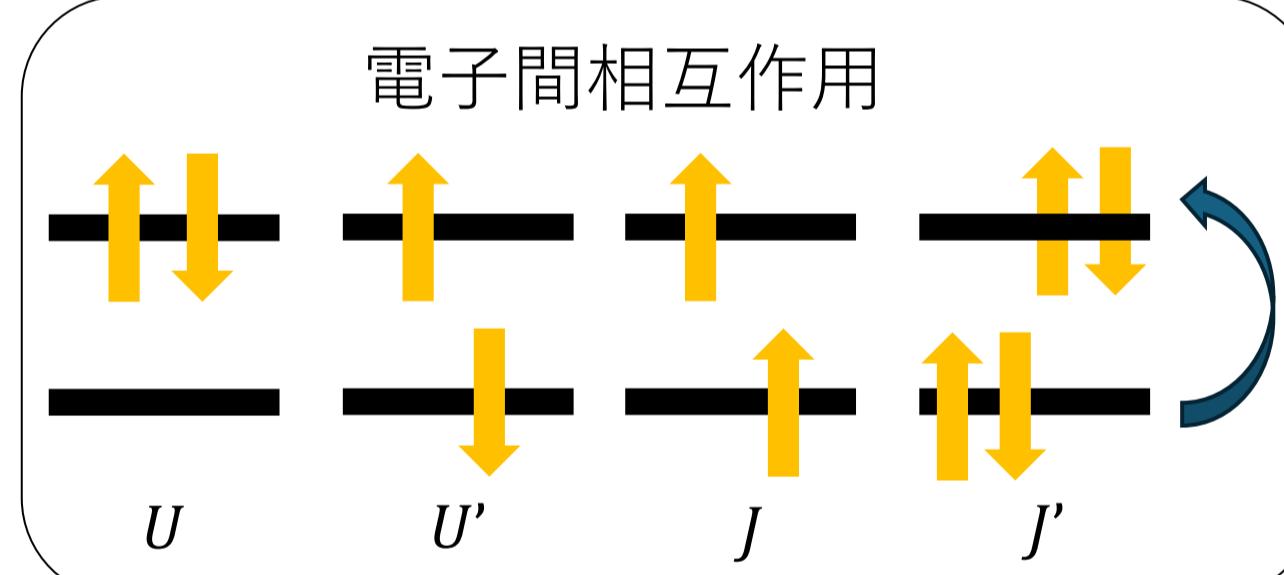
温度(松原)グリーン関数

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



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

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



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

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

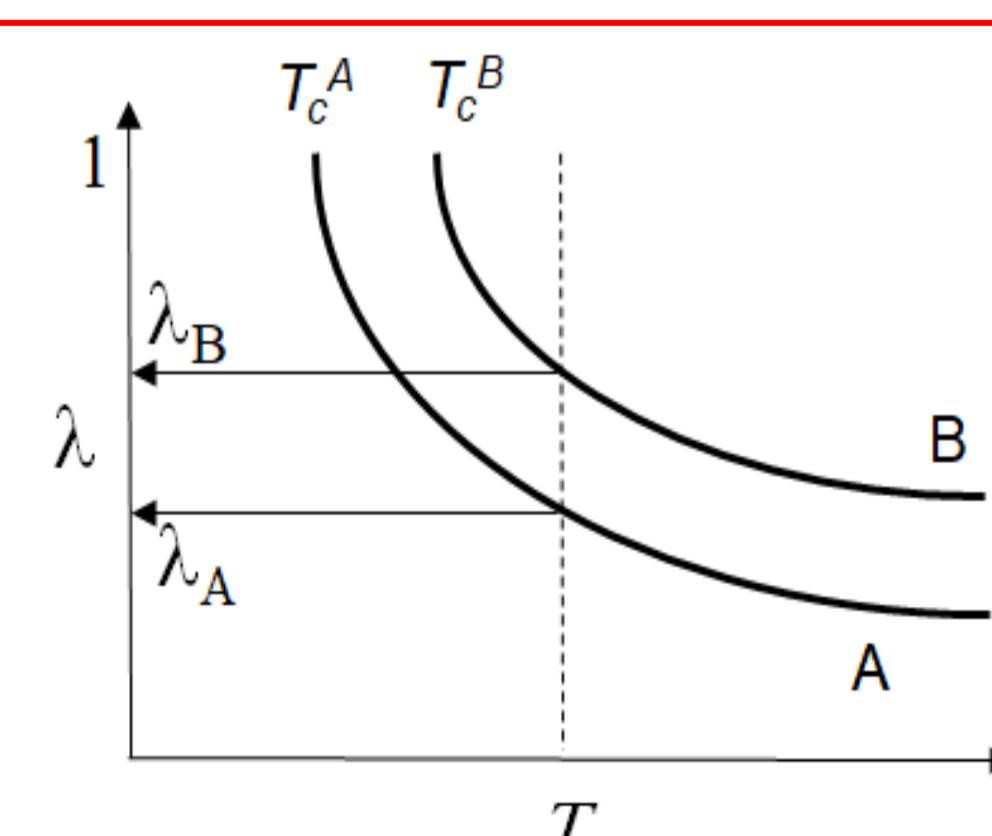
$$S_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \begin{cases} U, l_1 = l_2 = l_3 = l_4 \\ U', l_1 = l_3 \neq l_2 = l_4 \\ J, l_1 = l_2 \neq l_3 = l_4 \\ J', l_1 = l_4 \neq l_2 = l_3 \end{cases}, C_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \begin{cases} U, l_1 = l_2 = l_3 = l_4 \\ -U' + 2J, l_1 = l_3 \neq l_2 = l_4 \\ 2U' - J, l_1 = l_2 \neq l_3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

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

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

線形化エリヤシュベルグ方程式<sup>[3]</sup>

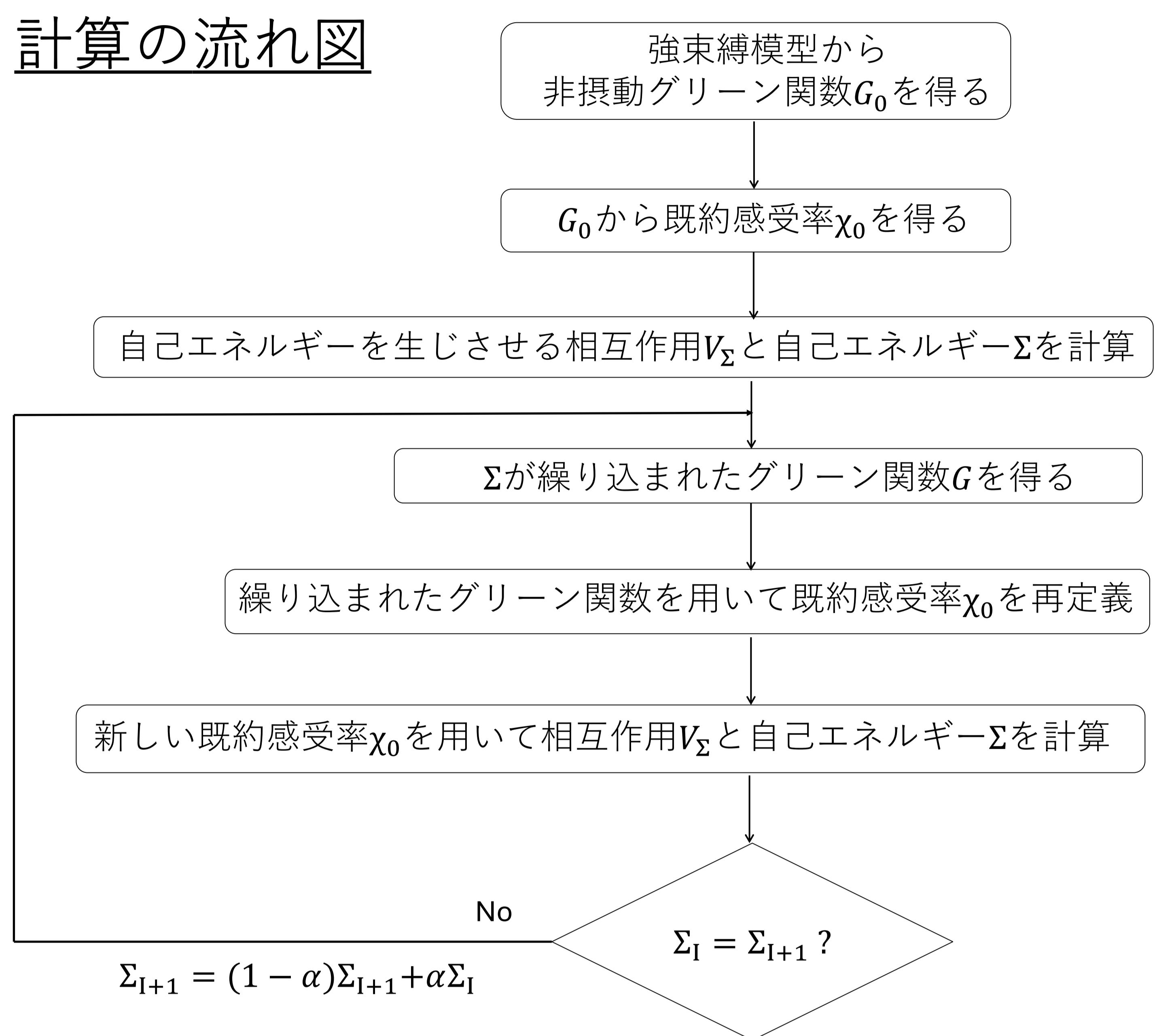
$$\lambda(T) \Delta(\mathbf{k}, i\epsilon_n) = -\frac{k_B T}{N} \sum_{\mathbf{k}', \epsilon_{n'}} V_\Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}', i\epsilon_n - i\epsilon_{n'}) G(-\mathbf{k}', -i\epsilon_{n'}) \Delta(\mathbf{k}', i\epsilon_{n'}) G(\mathbf{k}', i\epsilon_{n'})$$

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

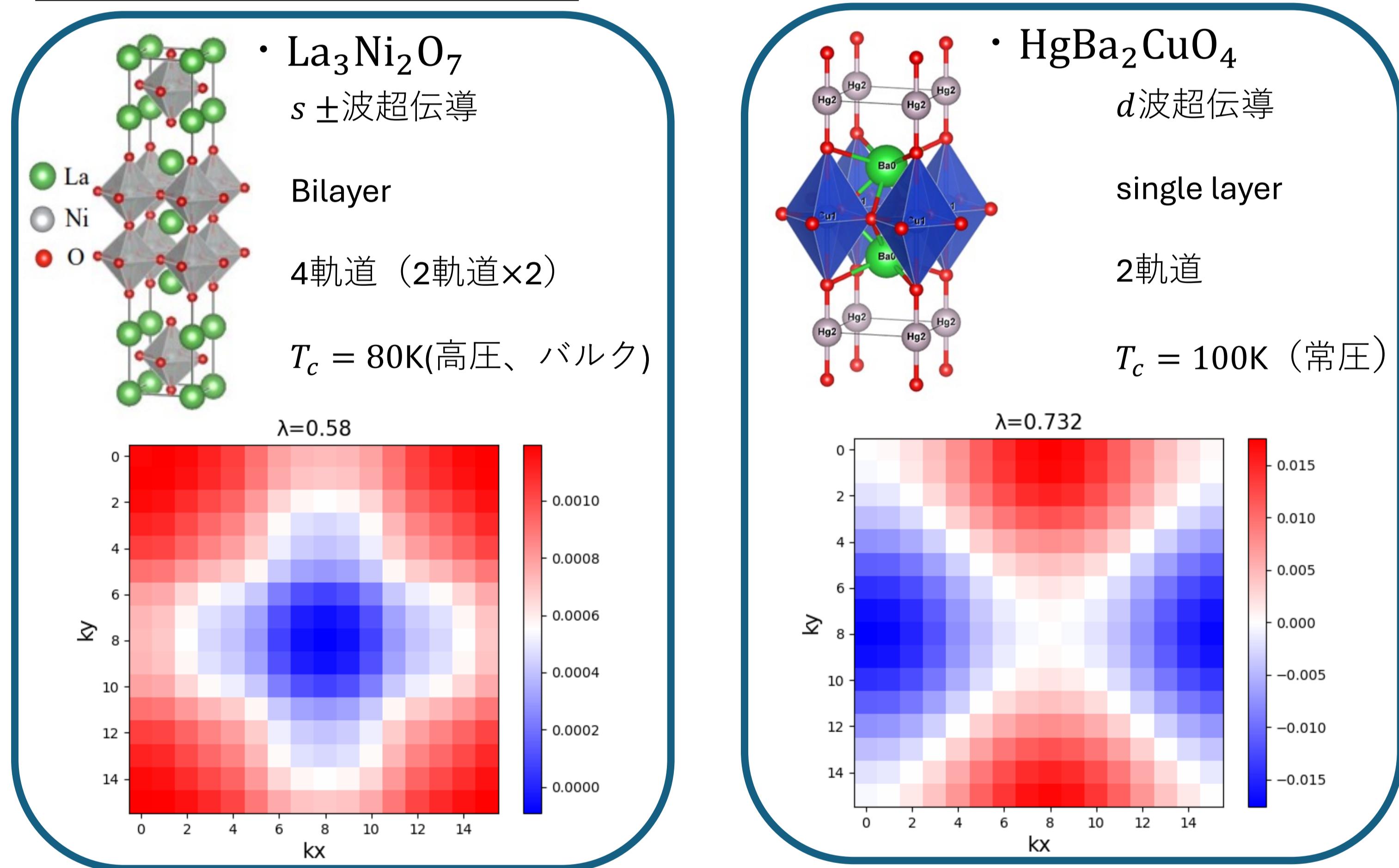
## 引用文献

- [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

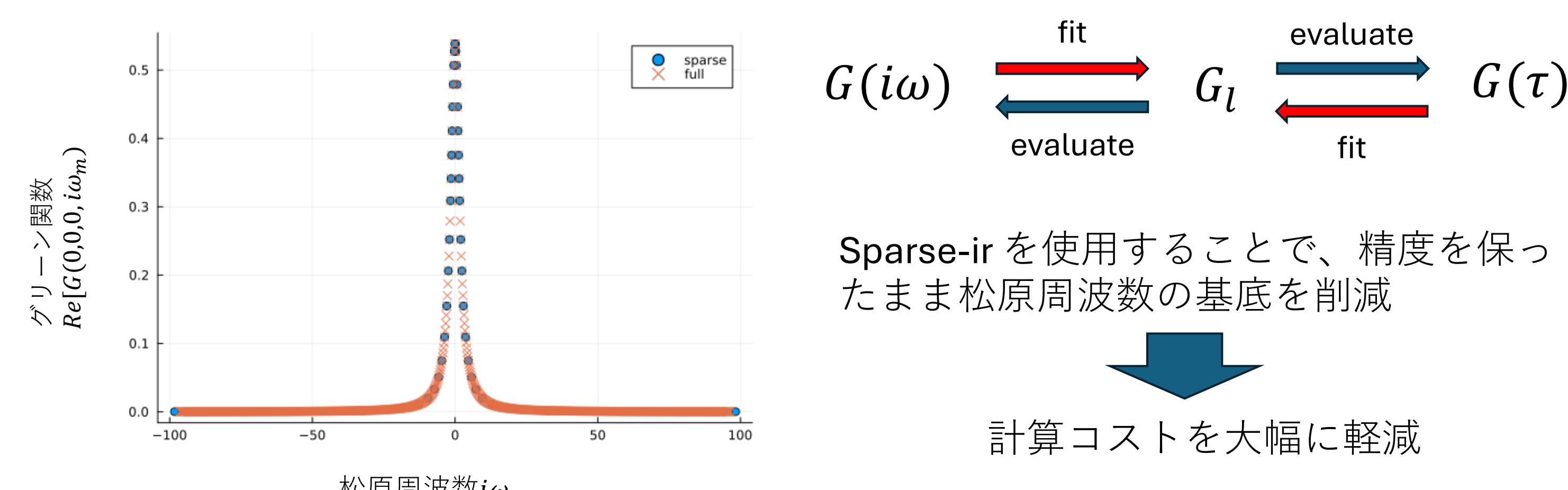


	La <sub>3</sub> Ni <sub>2</sub> O <sub>7</sub>		HgBa <sub>2</sub> CuO <sub>4</sub>	
	Julia	Fortran	Julia	Fortran
time[sec]	2243	4182	1096	1359
loop	54	108	54	90
$U\chi_0$	0.94	0.94	0.98	0.98
$\lambda$	0.58	0.57	0.73	0.74

## 展望

Sparse-ir<sup>[4][5][6]</sup>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。



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