

磁束量子ダイナミクスシミュレーション (名古屋大・吉田研における取り組み)

名古屋大学エコトピア科学研究所 一野 祐亮

研究グループメンバー

- ・ 教授 吉田隆
- ・ M1 足立健人
(卒業生 伊藤慎太郎、松田圭介)

アウトライン

- **超伝導体中電磁現象シミュレーション**
 - ・ Time-Dependent Ginzburg-Landau (TDGL)方程式
 - ・ 計算コード、ユーザーインターフェースの開発

- **2次元TDGLシミュレーション**
 - ・ シミュレーションモデル
 - ・ 磁場、電流印加時の磁束量子ダイナミクス

- **3次元TDGLシミュレーション**
 - ・ 横磁場下におけるピン形状の影響
 - ・ 縦磁場下における磁束量子ダイナミクス

- **今後の展望**

超伝導体中電磁現象のシミュレーション

Ginzburg-Landau (GL)方程式

- ・ Landauの相転移論に基づき現象論的に超伝導状態を記述。
- ・ オーダーパラメータはクーパー対（超伝導電子対）の波動関数。

Time-Dependent Ginzburg-Landau (TDGL)方程式 ※無次元化

$$\frac{\partial \Delta(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\eta} \left[(i\nabla + \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 \Delta(\mathbf{r}, t) + (1-T) (\alpha(\mathbf{r}) + \beta(\mathbf{r}) |\Delta|^2) \Delta(\mathbf{r}, t) \right] \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -(1-T) \text{Re} \left[\Delta^*(\mathbf{r}, t) (i\nabla + \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) \Delta(\mathbf{r}, t) \right] - \kappa^2 \nabla^2 \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

$$\kappa = \frac{\lambda_0}{\xi_0}, \quad \eta = \frac{c^2}{4\pi} \frac{1}{\kappa^2 \sigma D} \propto \frac{1}{\mu^2}$$

κ : GLパラメータ
 σ : 常伝導状態の伝導率
 D : 常伝導状態の電子拡散率
 μ : キャリア移動度

無次元化に用いた定数

$$\Delta(\mathbf{r}, t) : |\psi_\infty|, \quad x, y : \xi_0, \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) : H_{c20} \xi_0, \quad t : \frac{4\pi\sigma\xi_0\kappa^2}{c^2}, \quad T : T_c \quad (3)$$

超伝導体とピンニングセンター

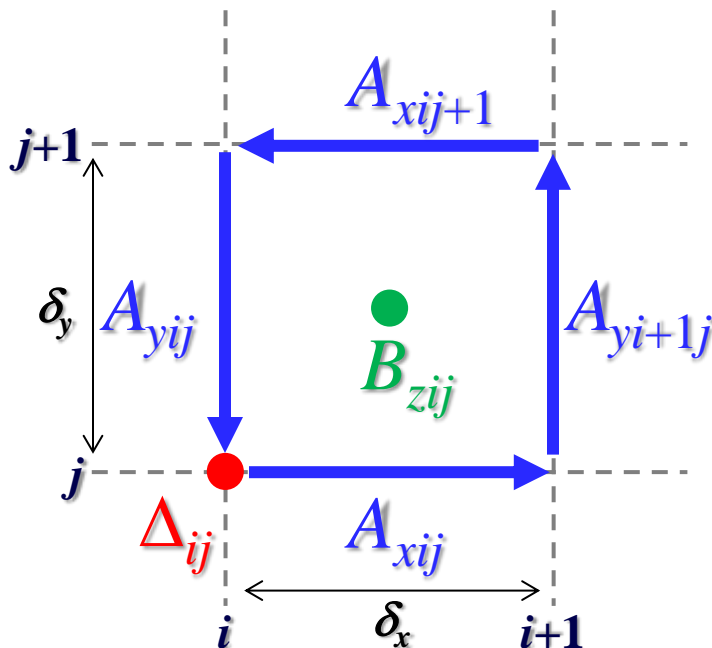
$$\alpha(\mathbf{r}) = \begin{cases} -1 & \text{: 超伝導} \\ \left(\frac{\xi}{\xi_0}\right)^2 = 1 & \text{: 常伝導[1]} \end{cases} \quad \beta(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{: 超伝導} \\ 0 & \text{: 常伝導[1]} \end{cases} \quad (4)$$

TDGL方程式の離散化

▶ 時間、空間微分 → 差分法

$$\frac{\partial \Delta(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\Delta_{ijk}^{(l+1)} - \Delta_{ijk}^{(l)}}{\delta_t}, \quad \frac{\partial \Delta(\mathbf{r}, t)}{\partial x} = \frac{\Delta_{i+1,jk}^{(l)} - \Delta_{ijk}^{(l)}}{\delta_x}, \quad \frac{\partial^2 \Delta(\mathbf{r}, t)}{\partial x^2} = \frac{\Delta_{i+1,jk}^{(l)} - 2\Delta_{ijk}^{(l)} + \Delta_{i-1,jk}^{(l)}}{\delta_x^2}$$

▶ ベクトルポテンシャル → リンク変数 Ref. R. Kato, PRB 47 (1993) 8016



- ・ 格子ゲージ理論（クォークを結ぶグルーオン等）。
- ・ TDGLではベクトルポテンシャルに適用。
- ・ 高磁場での計算収束が早い。
- ・ ベクトルポテンシャルが発散しない。

リンク変数： $U_{xij} = \exp(-i\delta_x A_{xij})$ (5)

$$B_{zij} = (\text{rot } \mathbf{A})_z = \frac{1}{\delta_x \delta_y} (\delta_x A_{xij} + \delta_y A_{yi+1j} - \delta_x A_{xij+1} - \delta_y A_{yij})$$

$L_{zij} = \exp(-i\delta_x \delta_y B_{zij})$ と定義すると、
 $L_{zij} = U_{xij} U_{yi+1j} U_{xij+1}^* U_{yij}^*$ (6)

※ U^* は複素共役

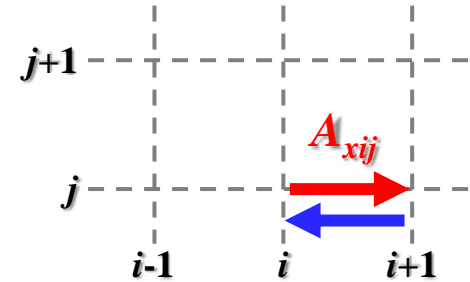
→ 磁場もリンク変数の積で表現できる。

Fig. 計算グリッド（二次元）。 Δ は格子点、 A は格子間、 B は格子の中央に対応する。

リンク変数を用いた離散化

$$\left(\frac{\partial}{i\partial x} - A_x\right)^2 \Delta = \left(\frac{\partial}{i\partial x} - A_x\right) \left(\frac{\partial}{i\partial x} - A_x\right) \Delta \quad (7)$$

まずここを離散化



前進差分： $\left(\frac{\partial}{i\partial x} - A_x\right) \Delta_{ij} = \frac{\Delta_{i+1j} - \Delta_{ij}}{i\delta_x} + \frac{-i\delta_x A_{xij}}{i\delta_x} \Delta_{ij} \approx \frac{1}{i\delta_x} (\Delta_{i+1j} - U_{xij}^* \Delta_{ij}) \quad (8)$

※ $U_{xi-1j}^* \sim 1 + i\delta_x A_{xi-1j}$

(8)式を(7)式に代入し、後進差分

$$\frac{1}{i\delta_x} \left(\frac{\partial}{i\partial x} - A_x\right) (\Delta_{i+1j} - U_{xij}^* \Delta_{ij}) = \frac{1}{i\delta_x} \frac{\partial}{i\partial x} (\Delta_{i+1j} - U_{xij}^* \Delta_{ij}) - \frac{1}{i\delta_x} A_x (\Delta_{i+1j} - U_{xij}^* \Delta_{ij}) \quad (9)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{i\delta_x} \frac{\partial}{i\partial x} (\Delta_{i+1j} - U_{xij}^* \Delta_{ij}) &= \left(\frac{1}{i\delta_x}\right)^2 (\Delta_{i+1j} - \Delta_{ij} - U_{xij}^* \Delta_{ij} + U_{xi-1j}^* \Delta_{i-1j}) \\ \frac{1}{i\delta_x} (-A_x) (\Delta_{i+1j} - U_{xij}^* \Delta_{ij}) &= \left(\frac{1}{i\delta_x}\right)^2 (-i\delta_x A_{xij} \Delta_{i+1j} + i\delta_x A_{xij} U_{xij}^* \Delta_{ij}) \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

以上から、

$$\left(\frac{\partial}{i\partial x} - A_x\right)^2 \Delta = -\frac{1}{\delta_x^2} (U_{xij} \Delta_{i+1j} - 2\Delta_{ij} + U_{xi-1j}^* \Delta_{i-1j}) \quad \text{※ } U_{xij} \sim 1 - i\delta_x A_{xij} \quad (11)$$

y, z, も同様。

リンク変数を用いた離散化(2次元)

$$\frac{\partial U_{xij}}{\partial t} = -i\delta_x U_{xij} \frac{\partial A_{xij}}{\partial t} \quad (12)$$

B は A の前進差分で求めたため、 $\text{rot } B$ には後進差分を適用。

$$(\nabla^2 \times A)_x = (\text{rot } B)_x = \frac{B_{zij} - B_{zij-1}}{\delta_y} = \frac{i\delta_x \delta_y B_{zij} - i\delta_x \delta_y B_{zij-1}}{i\delta_x \delta_y^2} \quad \text{※}B \text{は} z \text{成分のみ} \quad (13)$$

$$L_{zij}^* L_{zij-1}^* = \exp(-i\delta_x \delta_y B_{zij} + i\delta_x \delta_y B_{zij-1}) \approx 1 - i\delta_x \delta_y B_{zij} + i\delta_x \delta_y B_{zij-1} \quad (14)$$

$$\left. \begin{aligned} (13) \text{式と}(14) \text{式より、} \quad (\nabla^2 \times A)_x &\approx -\frac{L_{zij}^* L_{zij-1}^* - 1}{i\delta_x \delta_y^2} \\ \text{同様にして、} \quad (\nabla^2 \times A)_y &\approx -\frac{L_{zij}^* L_{i-1j}^* - 1}{i\delta_x^2 \delta_y} \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

以上より、離散化した2D-TDGL方程式は、

$$\Delta_{ij}^{(l+1)} = \frac{\delta_t}{\eta} \left[\frac{U_{xij}^{(l)} \Delta_{i+1j}^{(l)} - 2\Delta_{ij}^{(l)} + U_{xi-1j}^{*(l)} \Delta_{i-1j}^{(l)}}{\delta_x^2} + \frac{U_{yij}^{(l)} \Delta_{ij+1}^{(l)} - 2\Delta_{ij}^{(l)} + U_{yij-1}^{*(l)} \Delta_{ij-1}^{(l)}}{\delta_y^2} - (1-T) \left(\alpha_{ij} + |\Delta_{ij}^{(l)}|^2 \beta_{ij} \right) \Delta_{ij}^{(l)} \right] + \Delta_{ij}^{(l)} \quad (16)$$

$$U_{xij}^{(l+1)} = -\delta_t U_{xij}^{(l)} \left[i(1-T) \text{Im} \left(\Delta_{ij}^{*(l)} U_{xij}^{(l)} \Delta_{i+1j}^{(l)} \right) + \kappa^2 \frac{L_{zij}^{(l)} L_{zij-1}^{*(l)} - 1}{\delta_y^2} \right] + U_{xij}^{(l)} \quad (17)$$

$$U_{yij}^{(l+1)} = -\delta_t U_{yij}^{(l)} \left[i(1-T) \text{Im} \left(\Delta_{ij}^{*(l)} U_{yij}^{(l)} \Delta_{ij+1}^{(l)} \right) + \kappa^2 \frac{L_{zij}^{*(l)} L_{zi-1j}^{(l)} - 1}{\delta_x^2} \right] + U_{yij}^{(l)} \quad (18)$$

リンク変数を用いた離散化(3次元)

同様に、離散化した3D-TDGL方程式は、

$$\Delta_{ijk}^{(l+1)} = \frac{\delta_t}{\eta} \left[\frac{U_{xijk}^{(l)} \Delta_{i+1jk}^{(l)} - 2\Delta_{ijk}^{(l)} + U_{xi-1jk}^{*(l)} \Delta_{i-1jk}^{(l)}}{\delta_x^2} + \frac{U_{yijk}^{(l)} \Delta_{ij+1k}^{(l)} - 2\Delta_{ijk}^{(l)} + U_{yij-1k}^{*(l)} \Delta_{ij-1k}^{(l)}}{\delta_y^2} \right. \\ \left. + \frac{U_{zijk}^{(l)} \Delta_{ijk+1}^{(l)} - 2\Delta_{ijk}^{(l)} + U_{zijk-1}^{*(l)} \Delta_{ijk-1}^{(l)}}{\delta_z^2} - (1-T) \left(\alpha_{ijk} + |\Delta_{ijk}^{(l)}|^2 \beta_{ijk} \right) \Delta_{ijk}^{(l)} \right] + \Delta_{ijk}^{(l)} \quad (19)$$

$$U_{xijk}^{(l+1)} = -\delta_t U_{xijk}^{(l)} \left[i(1-T) \text{Im} \left(\Delta_{ijk}^{*(l)} U_{xijk}^{(l)} \Delta_{i+1jk}^{(l)} \right) + \kappa^2 \left(\frac{L_{zijk}^{(l)} L_{zij-1k}^{*(l)} - 1}{\delta_y^2} + \frac{L_{yijk}^{*(l)} L_{yijk-1}^{(l)} - 1}{\delta_z^2} \right) \right] + U_{xijk}^{(l)} \quad (20)$$

$$U_{yijk}^{(l+1)} = -\delta_t U_{yijk}^{(l)} \left[i(1-T) \text{Im} \left(\Delta_{ijk}^{*(l)} U_{yijk}^{(l)} \Delta_{ij+1k}^{(l)} \right) + \kappa^2 \left(\frac{L_{xijk}^{(l)} L_{xijk-1}^{*(l)} - 1}{\delta_z^2} + \frac{L_{zijk}^{*(l)} L_{zi-1jk}^{(l)} - 1}{\delta_x^2} \right) \right] + U_{yijk}^{(l)} \quad (21)$$

$$U_{zijk}^{(l+1)} = -\delta_t U_{zijk}^{(l)} \left[i(1-T) \text{Im} \left(\Delta_{ijk}^{*(l)} U_{zijk}^{(l)} \Delta_{ijk+1}^{(l)} \right) + \kappa^2 \left(\frac{L_{yijk}^{(l)} L_{yi-1jk}^{*(l)} - 1}{\delta_x^2} + \frac{L_{xijk}^{*(l)} L_{xij-1k}^{(l)} - 1}{\delta_y^2} \right) \right] + U_{zijk}^{(l)} \quad (22)$$

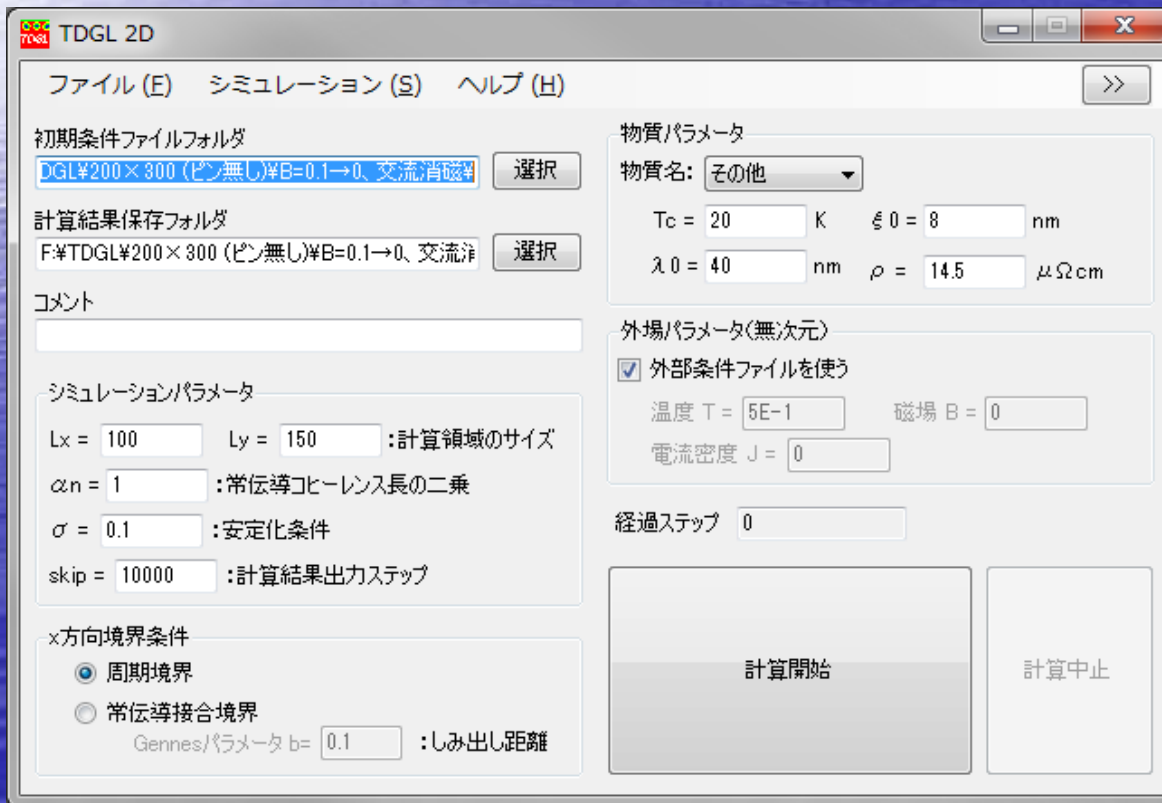
α_{ijk} と β_{ijk} 行列成分を変えることで、超伝導領域と非超伝導領域を設定可能。
境界条件は、 Δ , L_x , L_y , L_z の境界値に適当な値を設定する。

計算コード、ユーザーインターフェースの開発

➤ 離散化したTDGL方程式を基に、計算コードを開発。

- ・言語：C++ (計算が速い。他のシミュレーションでも使用されている。)
- ・開発環境：Microsoft Visual C++ 2010 express

➤ ユーザーインターフェースの開発



TDGL 2D

ファイル (E) シミュレーション (S) ヘルプ (H)

初期条件ファイルフォルダ
 選択

計算結果保存フォルダ
 選択

コメント

シミュレーションパラメータ

Lx = Ly = : 計算領域のサイズ

$\alpha_n =$: 常伝導コヒーレンス長の二乗

$\sigma =$: 安定化条件

skip = : 計算結果出力ステップ

x方向境界条件

周期境界

常伝導接合境界

Gennessパラメータ b = : しみ出し距離

物質パラメータ

物質名:

Tc = K $\xi_0 =$ nm

$\lambda_0 =$ nm $\rho =$ $\mu\Omega\text{cm}$

外場パラメータ(無次元)

外部条件ファイルを使う

温度 T = 磁場 B =

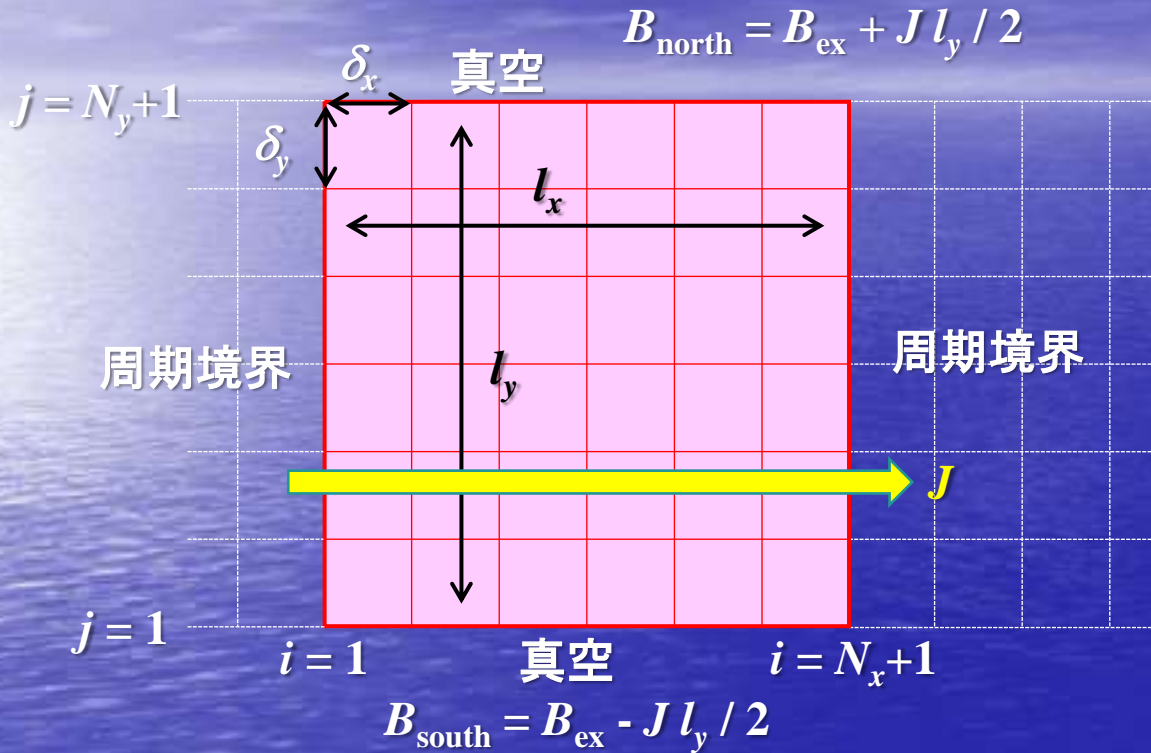
電流密度 J =

経過ステップ

計算開始 計算中止

- ・ 2D-TDGL計算可能。
- ・ 4スレッド並列計算。
- ・ $|\Delta|^2, B_z, A_x, A_y, E_x, E_y,$
GL自由エネルギー行列出力。
- ・ 周期境界と金属接合境界が
計算可能。
- ・ 初期条件行列(Δ, A_x, A_y, β)
生成機能。
- ・ 外場 (T, B, J) 設定可能。
- ・ 外場は時間変化も可能。
- ・ 3D-TDGLは開発中。

2次元TDGLシミュレーションモデル



- ・ 磁場はz方向のみ。電流はx方向のみ。
- ・ 外部磁場 B_{ex} は計算領域の南北に印加されている。
- ・ 電流密度 J は、自己磁場を外部磁場に足すことで外部磁場の傾きを作ることによって流す。(自己磁場 $J l_y / 2$)

シミュレーション条件

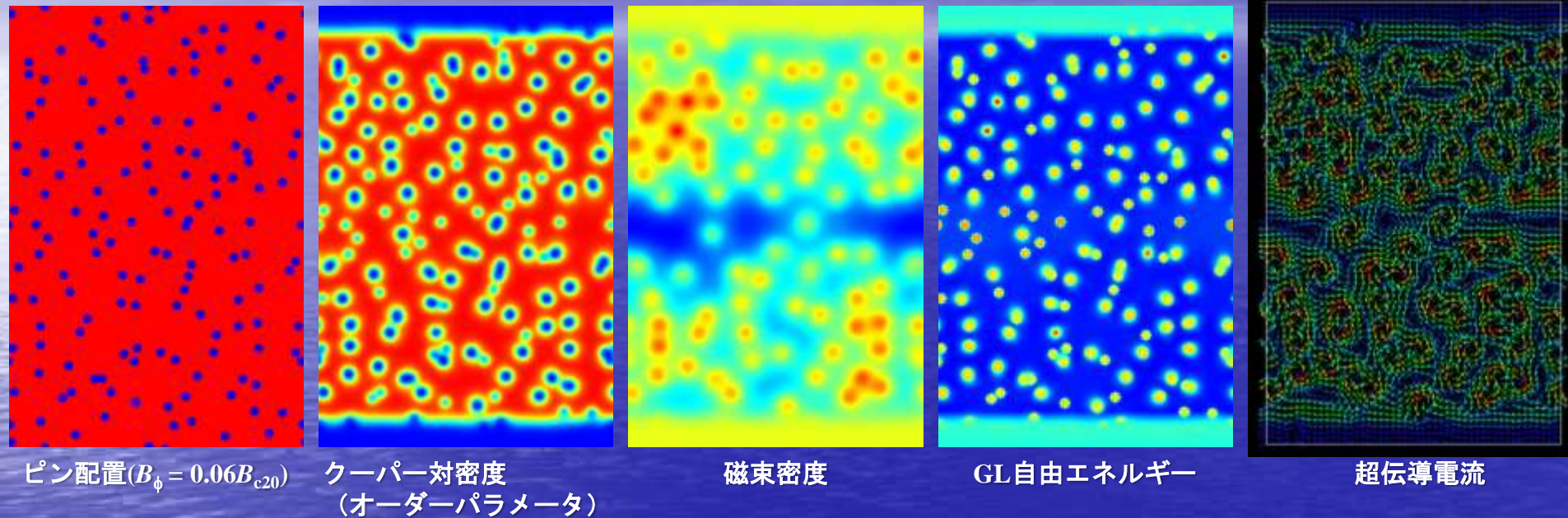
- ・ $N_x \times N_y = 200 \times 300$ のサイズで計算。
- ・ $\delta_x = \delta_y = 0.5 \xi_0$ 。計算領域は $100 \xi_0 \times 150 \xi_0$ 。
- ・ ランダムピン配置。
- ・ $T = 0.5 T_c$, $B = 0.05 B_{c20}$, $J = 0 \rightarrow 0.08 J_{d0}$ 。



2D-TDGL
シミュレーション

2D-TDGLシミュレーション

ランダムピン, $T = 0.5T_c$, $B = 0.05B_{c20}$, $J = 0$

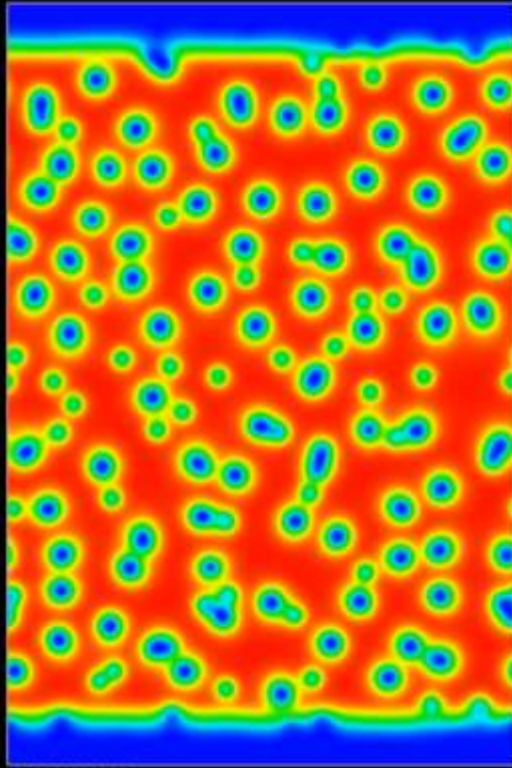


2D-TDGLシミュレーションコード

- 様々な温度、磁場、電流条件下で計算可能。
- それぞれの条件をスイープしながらの計算可能。
- クーパー対密度、磁束密度、GL自由エネルギー、ベクトルポテンシャル、内部電場、超伝導電流、常伝導電流など計算可能。
- ピンニングセンターを意図した位置に配置可能。

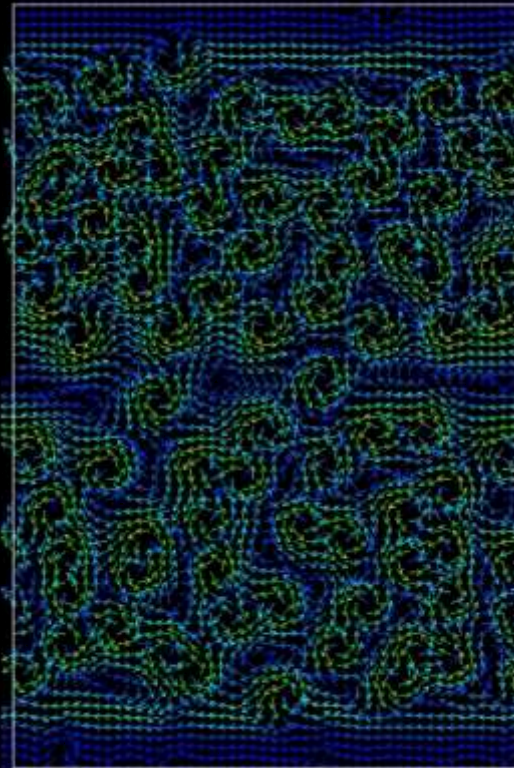
電流スイープ ($J = 0 \rightarrow 0.08J_{d0}$)

クーパー対密度



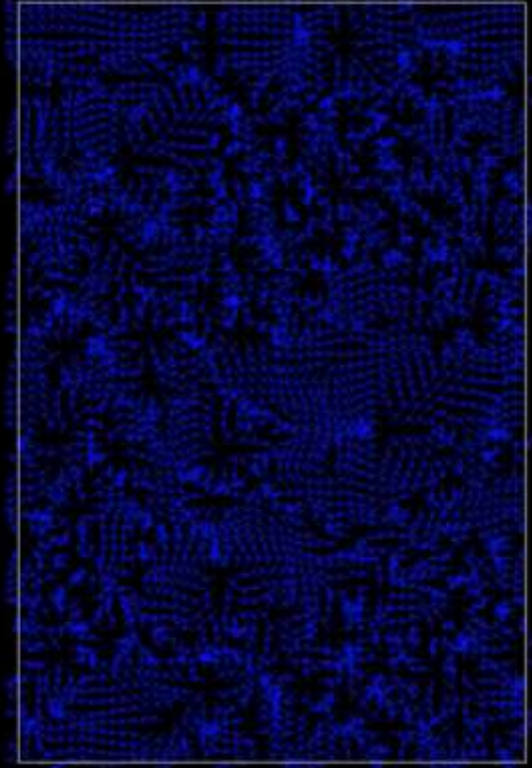
D2_0000010000.csv

超伝導電流密度



Js_0000010000.dat

常伝導電流密度

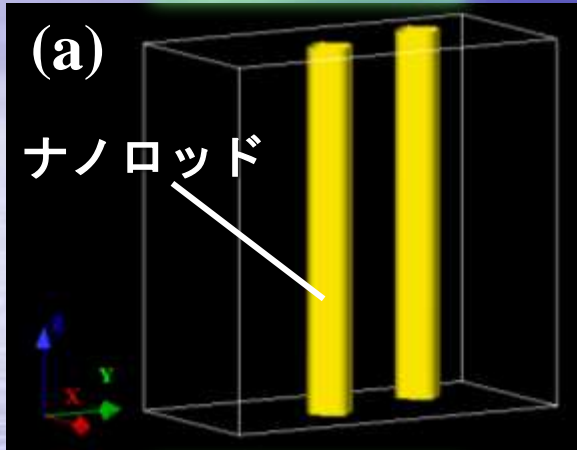


Jn_0000010000.dat

- 電流印加によって磁束量子にローレンツ力が働き、運動し始める。
- 磁束量子の周りでは超伝導電流が渦を巻いている。
- 超伝導電流低下と共に常伝導電流が増加する。
- 電流が大きくなると上下から磁束のチャンネルが発達してくる。

3D-TDGL・横磁場下におけるピン形状の影響

~モデルA~



~モデルB~

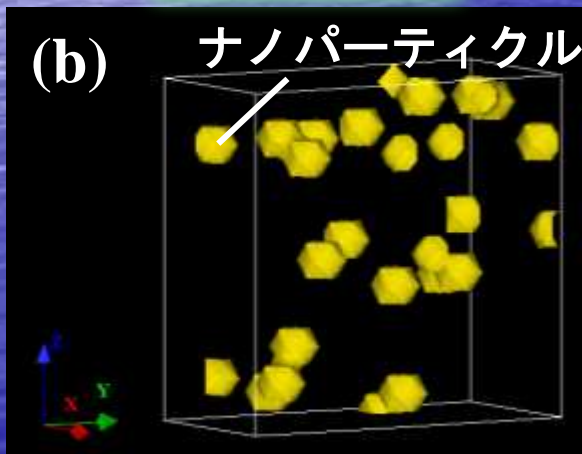


Table モデルA及びモデルBの人工ピン概要

	モデルA	モデルB
人工ピンの種類	ナノロッド	ナノパーティクル
導入数	2本	21個
人工ピン直径	$2.5 \xi_0$	$2.5 \xi_0$
添加量 [vol. %]	5.57	5.45

- ・人工ピン直径
→ **磁束線の直径と同等**
- ・人工ピン体積割合
→ **統一**

同一添加量及びランダム分布の両者の磁束線運動を比較

Fig. (a)モデルA内のナノロッドの分布
(b)モデルB内のナノパーティクルの分布

$\theta = 90^\circ$ における磁束線運動の比較

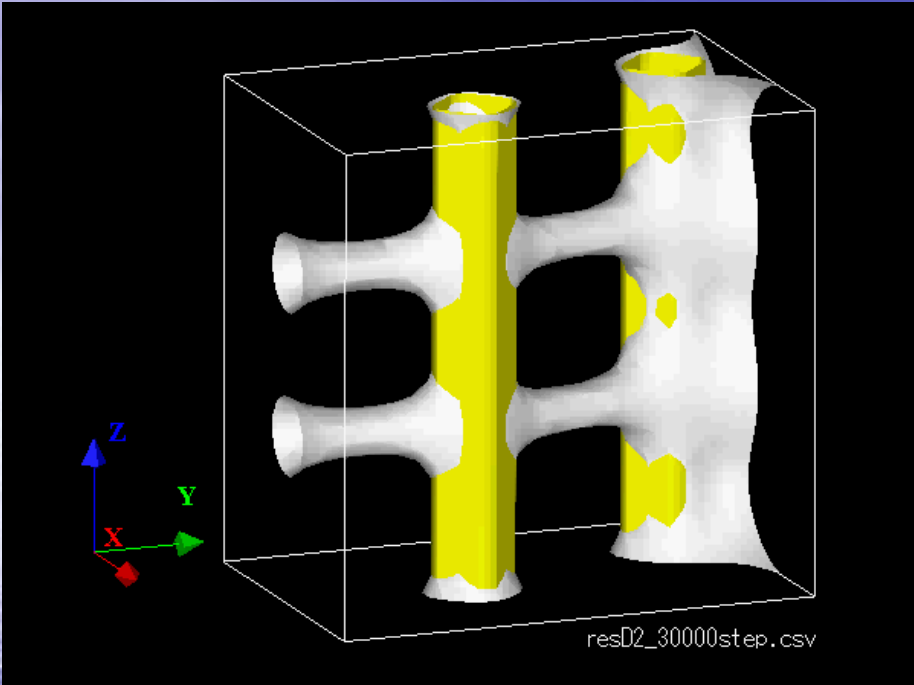


Fig. モデルAの $\theta = 90^\circ$ における磁束線運動

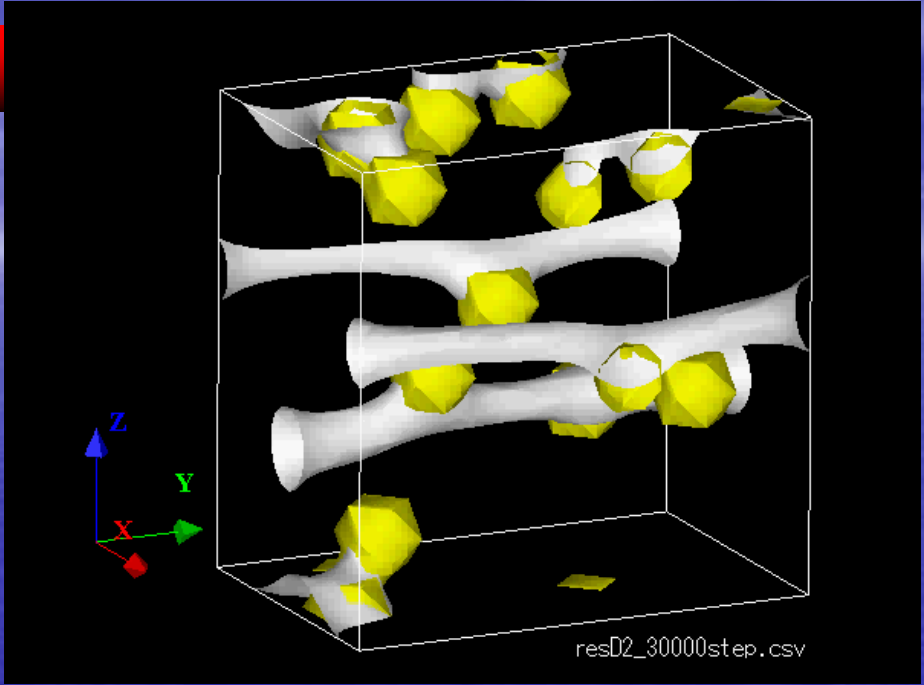


Fig. モデルBの $\theta = 90^\circ$ における磁束線運動

モデルA
 → **低電流値**において磁束線運動が開始
モデルB
 → **ピン止め力**によって磁束線**運動抑制**

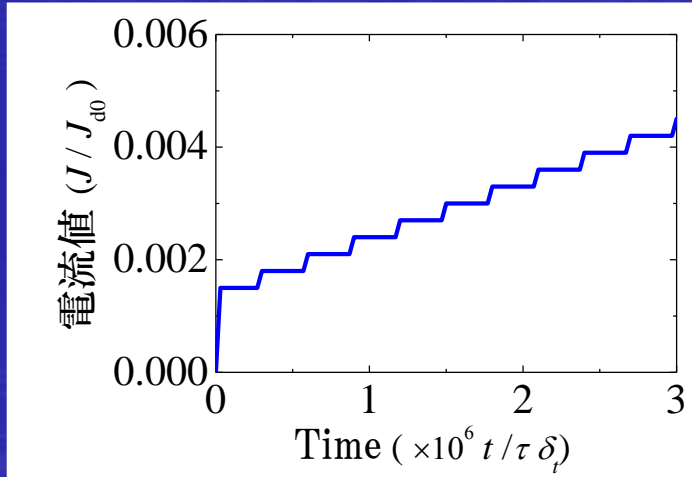


Fig. 印加電流の時間変化

$\theta = 45^\circ$ における磁束線運動の比較

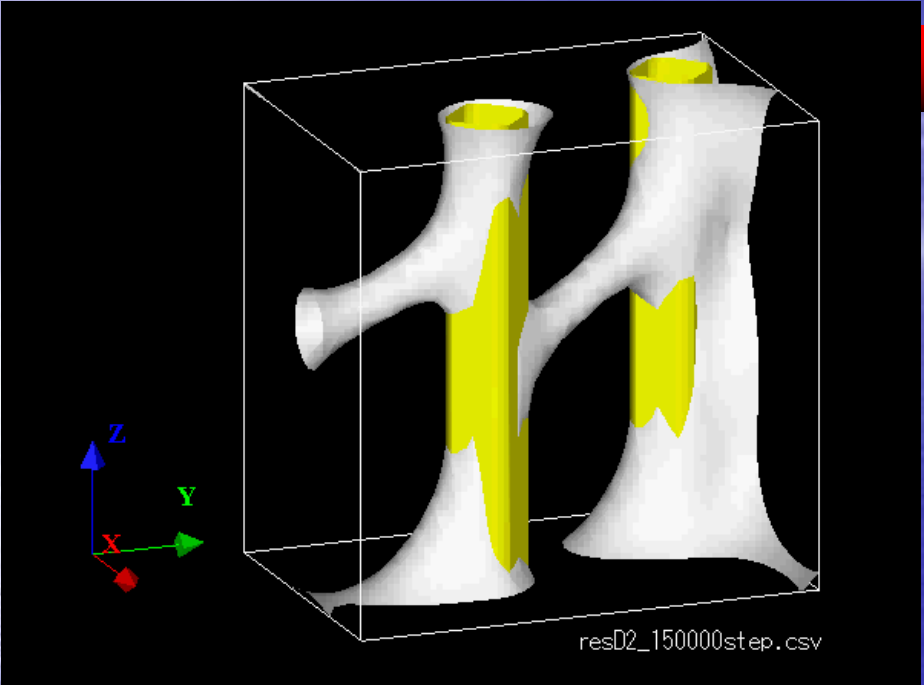


Fig. モデルAの $\theta = 45^\circ$ における磁束線運動

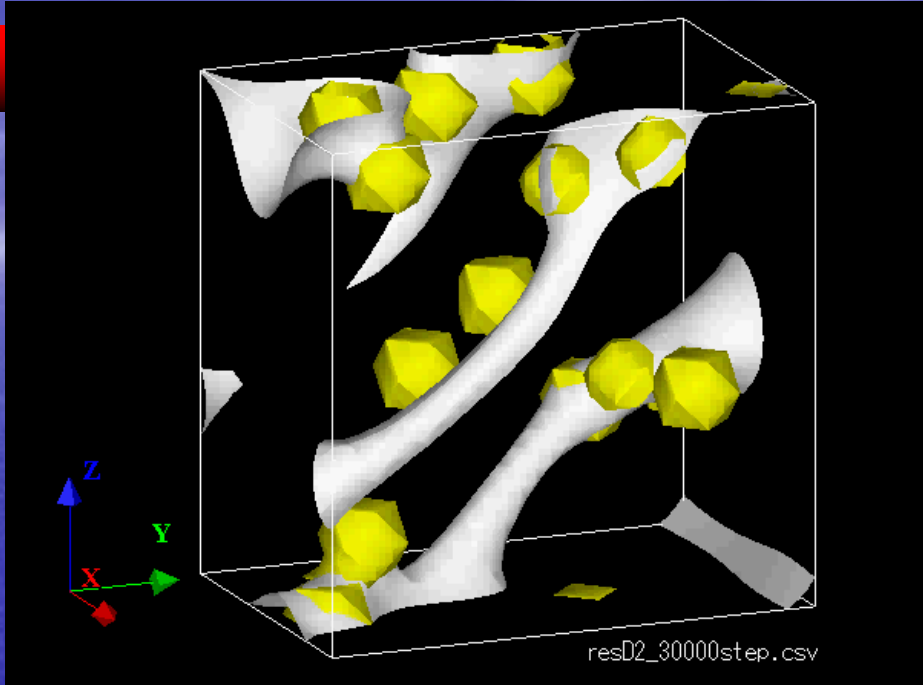


Fig. モデルBの $\theta = 45^\circ$ における磁束線運動

モデルA
 → シングルキック部分が**優先的に運動**
モデルB
 → **パーティクル間の磁束線部分から運動**

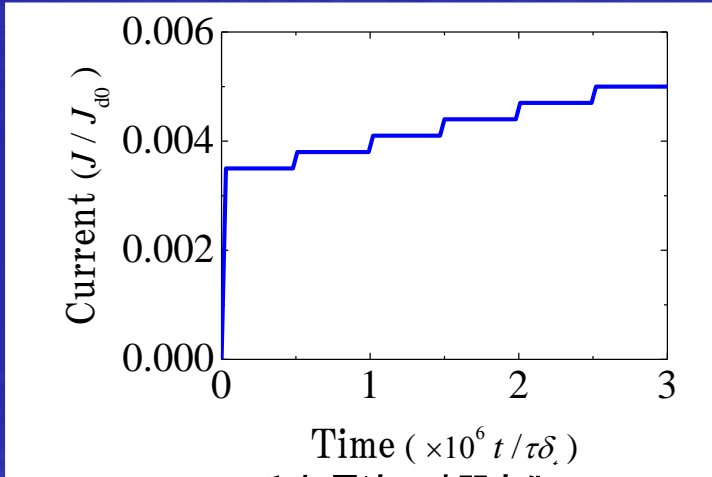


Fig. 印加電流の時間変化

J_c 磁場印加角度依存性の比較

Table モデルAとモデルBの J_c^{\min}

モデルA	モデルB
$J_c^{\min} = 0.0018J_{d0}$	$J_c^{\min} = 0.0038J_{d0}$

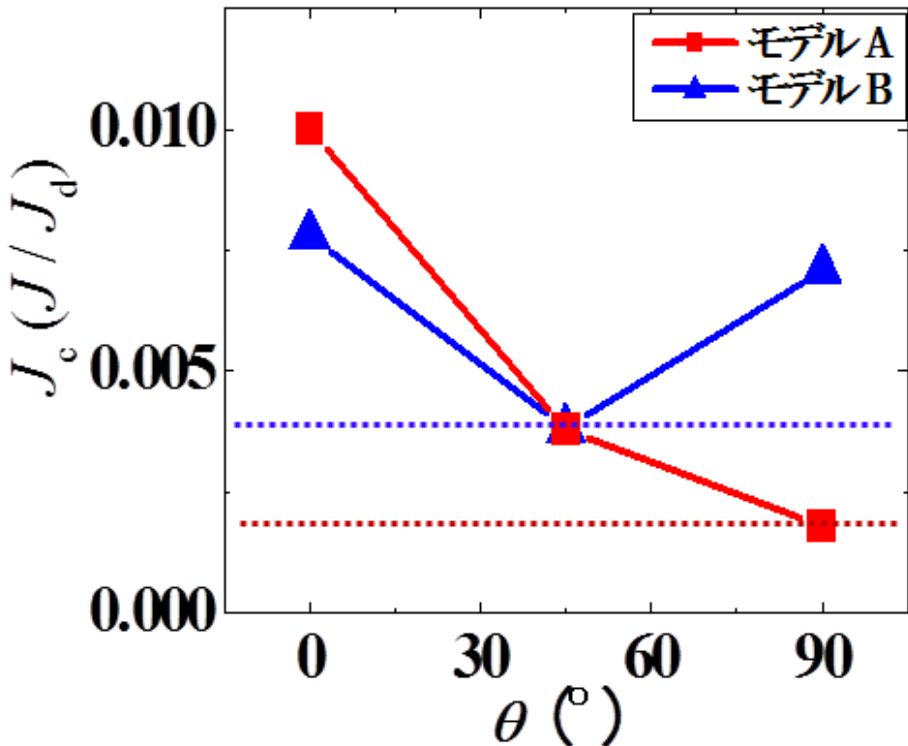


Fig. モデルA及びBにおける J_c の磁場印加角度依存性

~ナノパーティクル~

→ $\theta = 45^\circ$ おいて **最小の J_c**

~ナノロッド~

→ $\theta = 0^\circ$ 以外において **J_c 低下**

各モデルにおいて J_c 低下が顕著な角度における
磁束線形状及び運動を比較

各磁場印加角度における磁束線形状

モデルA

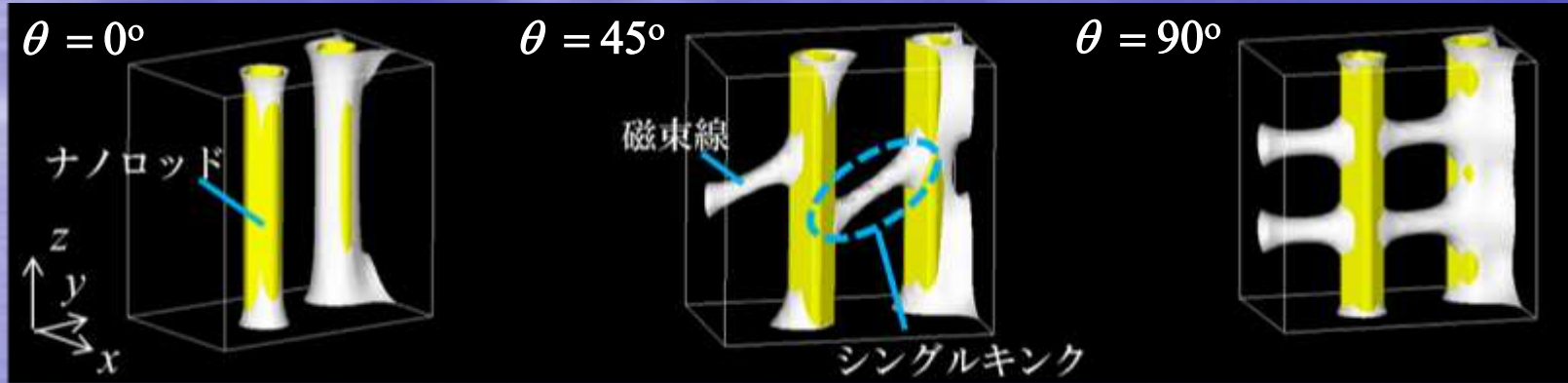


Fig. モデルAの $\theta = 0^\circ$, 45° 及び 90° における磁束線分布

ナノロッドをまたぐ様に磁束線が分布 = キック構造を形成

モデルB

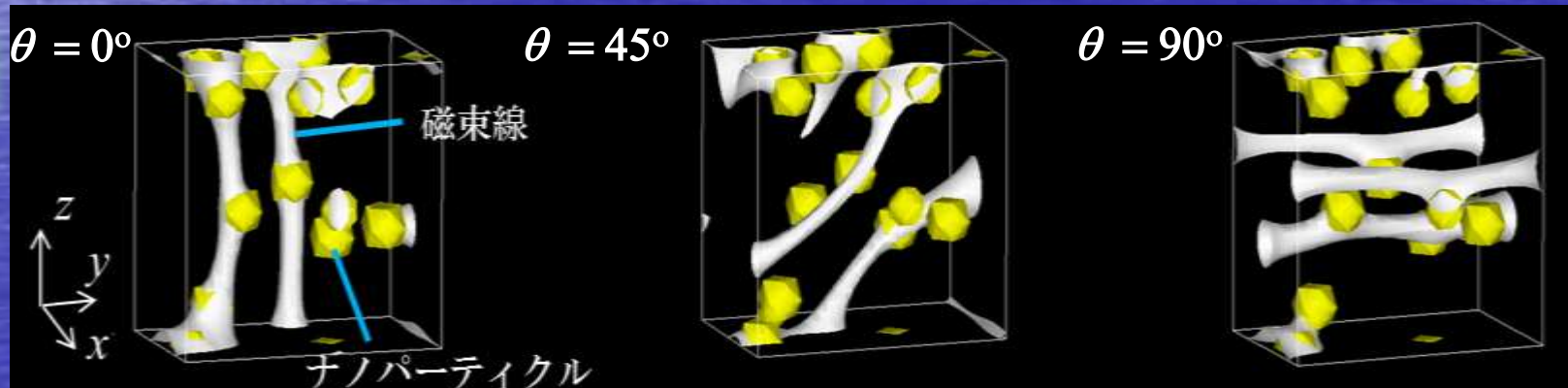


Fig. モデルBの $\theta = 0^\circ$, 45° 及び 90° における磁束線分布

ナノパーティクルによる磁束線の曲がり観察
 →それぞれの磁場印加角度において磁束線がピン止め

今後の展望

➤ 計算の高速化、大規模化

- マルチスレッド化。
- GPUを用いた並列計算。
- 大規模化で端部の影響が小さくなる。
- 実際の試料サイズモデルにおけるTDGL計算。

➤ 縦磁場下におけるピン止め点の影響

- 実験では、多層膜が J_c ピーク発現に有効。
多層膜ピンニングをモデル化し、シミュレーション。
磁束量子ダイナミクスを明らかにする。
- 縦磁場効果に対する最適なピンニングセンターの探索。
- 他の縦磁場効果の検証。（常磁性効果、表面電場分布など）
- 大規模化によって端部の影響を小さくする。

謝辞

TDGL方程式の展開等について鹿児島大学
また、縦磁場効果については九州工業大学
ました。

加藤龍蔵先生にご指導頂きました。
松下照男先生からご助言いただき