令和元年度

卒業論文

アフィン変換数値積分法を用いた
超伝導体内の量子化磁束線の可視化

田中宏樹
(学籍番号：16232053)

九州工業大学　情報工学部
電子情報工学科

指導教員：小田部　荘司　教授

令和 2 年 2 月 20 日

目次

図目次

第1章 序論

1.1 はじめに

超伝導現象は、超伝導体という物質の電気抵抗が温度の低下とともに消滅する現象であり、1911 年にオランダの物理学者 H. K. Onnes によってはじめて水銀で発見された。その後多くの物質について超伝導現象が確認されている。超伝導体はその電気抵抗が消滅するという性質から様々な工学的な応用に期待されてきた。しかし、その性質はわずかな磁界や温度によって失われてしまう。その転移温度を臨界温度T_c、転移磁界を臨界磁界B_cと呼ぶ。

超伝導現象については、現在までにその発現機構や性質に関する研究が進められており、1933 年にドイツの物理学者 W. Meißner と R. Ochsenfeld によって完全反磁性(Meißner-Ochsenfeld 効果)が発見され、さらに 1957 年に J. Bardeen、 L. N. Cooper、 J. R. Schrieffer らによって BCS 理論が提唱され、超伝導現象の発現機構における基本的な理解が与えられた。 このとき BCS 理論では、超伝導体のT_cは 30 K を超えない(これは BCS 理論の壁と呼ばれる)と予想されていた。しかし、1986 年にドイツの物理学者 J. G. Bednorz とスイスの物理学者 K. A. Müller らによってT_cが 35 K となる La-Ba-Cu-O 系の超伝導体が発見された。この発見以降、世界各国でT_cの高い超伝導体の探索が行われ、1987 年に窒素の沸点（77 K)より高いT_cをもつ超伝導体が発見された。このことで入手が困難なヘリウムではなく窒素を冷媒として用いることができるようになったため、冷却コストの低減により様々な機器への応用が期待されている。しかしこれらの高温超伝導体にも実用化に向けて様々な課題が残されているため現在でも研究が続けられている。

1.2 Time Dependent Ginzburg-Landau 方程式

ここでは、超伝導体の数値解析に用いる時間依存 Ginzburg-Landau 方程式(Time Dependent Ginzburg-Landau 方程式)について説明する。

1.2.1 GL 方程式

Ginzburg-Landau(G-L)理論は、1950 年に V. L. Ginzburg と L. D. Landau によって提唱された超伝導現象を説明する現象論である。G-L 理論は磁界と超伝導が共存する場合の相転移を取り扱ったもので、特に第 2 種超伝導体の磁気特性を良く記述することが知られ

ている。以下では、G-L 理論を成り立たせる仮定とそれによって求められる方程式を説明する。

G-L 理論では、まず超伝導状態の秩序の程度を表す量として複素数であるオーダパラメータ$\Psi = |\Psi|\exp(\mathrm{i}\varphi)$を定義する。そして$\Psi$は、

$$|\Psi|^2 \propto n_\mathrm{s} \tag{1.1}$$

の関係を満たすと仮定する。ここで、n_sは超伝導電子密度である。超伝導状態の自由エネルギーE_sはn_sに依存しているから(1.1)式より、$|\Psi|^2$の関数である。よって、E_sは$|\Psi|^2$のべき展開で表すことが出来る。

$$E_\mathrm{s} = E_\mathrm{n} + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4 \tag{1.2}$$

ここで、E_nは常伝導状態の自由エネルギー、αおよびβはそれぞれべき展開した際の 1 次と 2 次の係数であり、$T < T_\mathrm{c}$では$\alpha < 0, \beta > 0$である。2 次の項までの展開であるのは$|\Psi|^2$が転移点近傍($T \cong T_\mathrm{c}$)において十分に小さいためである。

次に、磁界の存在がΨの空間的変化に寄与することを考慮し、(1.2)式に磁界のエネルギー密度と運動エネルギー密度を加算する。

$$E_\mathrm{s} = E_\mathrm{n} + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0}(\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A})^2 + \frac{1}{2m^*}|(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla} + e^*\boldsymbol{A})\Psi|^2 \tag{1.3}$$

ここで、μ_0は真空中の透磁率、$\boldsymbol{A}$はベクトルポテンシャル、m^*は超伝導電子の質量、$\hbar$はプランク定数を2πで除算したもの、e^*は超伝導電子の電荷量、i は虚数単位である。

Ψと$\boldsymbol{A}$は(1.3)式のE_sを最小とするように決定される。よってΨの共役複素数Ψ^*と$\boldsymbol{A}$について変分法を適用する。

$$\frac{\delta E_\mathrm{s}}{\delta \Psi^*} = \frac{\partial E_\mathrm{s}}{\partial \Psi^*} - \left[\boldsymbol{\nabla} \cdot \frac{\partial E_\mathrm{s}}{\partial \boldsymbol{\nabla}\Psi^*}\right] = 0 \tag{1.4}$$

$$\frac{\delta E_\mathrm{s}}{\delta \boldsymbol{A}} = \frac{\partial E_\mathrm{s}}{\partial \boldsymbol{A}} - \left[\boldsymbol{\nabla} \cdot \frac{\partial E_\mathrm{s}}{\partial \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{A}}\right] = 0 \tag{1.5}$$

(1.4)式と(1.5)式をそれぞれ解くと、以下の 2 式が得られる。

$$\frac{1}{2m^*}(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla} + e^*\boldsymbol{A})^2\Psi + \alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi = 0 \tag{1.6}$$

$$\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A} = \frac{\mathrm{i}\hbar e^*}{2m^*}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*) - \frac{{e^*}^2}{m^*}|\Psi|^2\boldsymbol{A} \tag{1.7}$$

ここで、ゲージ変換には Coulomb ゲージ$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A} = 0$を用いた。また、条件として超伝導体表面を横切って電流が流れないことを仮定した。この(1.6)、(1.7)式を G-L 方程式と呼ぶ。

1.2.2 TDGL 方程式

G-L 方程式は時間依存性を持たないため、時定数を導入して時間依存性を持った方程式に発展させる。これを Time-Dependent G-L(TDGL)方程式と呼ぶ。

Ψと$\boldsymbol{A}$の時定数をそれぞれγ,νとおくと、(1.4)式および(1.5)式は以下のように時間発展する形に書き換えられる。

$$\frac{\delta E_\mathrm{s}}{\delta \Psi^*} = \frac{\partial E_\mathrm{s}}{\partial \Psi^*} - \left[\boldsymbol{\nabla} \cdot \frac{\partial E_\mathrm{s}}{\partial \boldsymbol{\nabla} \Psi^*}\right] = -\gamma \frac{\partial \Psi}{\partial t} \tag{1.8}$$

$$\frac{\delta E_\mathrm{s}}{\delta \boldsymbol{A}} = \frac{\partial E_\mathrm{s}}{\partial \boldsymbol{A}} - \left[\boldsymbol{\nabla} \cdot \frac{\partial E_\mathrm{s}}{\partial \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{A}}\right] = -\nu \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{1.9}$$

これに以下のゲージ変換を与える。

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} \to \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \mathrm{i} e^* V \Psi \tag{1.10}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \to \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} V \tag{1.11}$$

ここで、Vはスカラーポテンシャルである。(1.10)式および(1.11)式をそれぞれ(1.8)式、(1.9)式に代入して解くと、

$$\gamma\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \mathrm{i} e^* V \Psi\right) + \frac{1}{2m^*}(-\mathrm{i}\hbar \boldsymbol{\nabla} + e^* \boldsymbol{A})^2 \Psi + \alpha \Psi + \beta |\Psi|^2 \Psi = 0 \tag{1.12}$$

$$\nu\left(\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla V}\right) + \frac{1}{\mu_0} \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A} + \frac{\mathrm{i}\hbar e^*}{2m^*}(\Psi^* \boldsymbol{\nabla} \Psi - \Psi \boldsymbol{\nabla} \Psi^*) - \frac{{e^*}^2}{m^*}|\Psi|^2 \boldsymbol{A} = 0 \tag{1.13}$$

が得られる。この(1.12)式、(1.13)式を解くことによって超伝導体の数値解析を行う。

1.2.3 TDGL 方程式の簡易化

(1.12)式、(1.13)式をそのままコンピュータ上で解くことは困難であるため、細線近似と規格化という 2 つの簡易化を行う。

細線近似では、$\boldsymbol{A}$が外部磁界$\boldsymbol{B}$にのみ依存すると仮定する。本研究の数値解析では、$\boldsymbol{B}$は時間に対して一定に与えるから$\boldsymbol{A}$も時間に対して一定となる。よって(1.13)式左辺第 1 項の時間偏微分が 0 となる。

次に(1.12)式、(1.13)式に対して規格化を行う。熱力学的臨界磁界をH_cとして、超伝導体のコヒーレンス長ξと磁界侵入長λを以下のように表す。

$$\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*|\alpha|}} \tag{1.14}$$

$$\lambda = \frac{e^* \mu_0 H_\mathrm{c}}{\sqrt{m^*|\alpha|}} \tag{1.15}$$

また、以下の変換を定義する。

$$\xi \boldsymbol{\nabla} \to \boldsymbol{\nabla} \tag{1.16}$$

$$\frac{|\alpha|}{\gamma} t \to t \tag{1.17}$$

$$\frac{e^*\gamma}{|\alpha|}V \to V \tag{1.18}$$

$$\frac{\lambda}{\sqrt{2}\mu_0 H_\mathrm{c}}\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} \tag{1.19}$$

$$\left(\frac{\beta}{|\alpha|}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi \to \Psi \tag{1.20}$$

(1.16)-(1.20)式の式変換を(1.14)式、(1.15)式に与えることによって規格化を行う。

まず(1.12)式の規格化を行う。(1.12)式の左辺第 1 項は、

$$\begin{aligned}
\gamma\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\mathrm{i}e^*V\Psi\right) &\to \gamma\left[\frac{\partial}{\partial\left(\frac{\gamma}{|\alpha|}t\right)}\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi+\mathrm{i}e^*\left(\frac{|\alpha|}{e^*\gamma}V\right)\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi\right] \\
&= \gamma\left[\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{\partial\Psi}{\partial\left(\frac{\gamma}{|\alpha|}t\right)}+\mathrm{i}\frac{|\alpha|}{\gamma}\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}V\Psi\right] \\
&= \gamma\left[\frac{1}{\gamma}|\alpha|\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{1}{\gamma}|\alpha|\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{i}V\Psi\right] \\
&= |\alpha|\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\mathrm{i}V\Psi\right]
\end{aligned} \tag{1.21}$$

となる。(1.12)式の左辺第 2 項は、

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2m^*}(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla}+e^*\boldsymbol{A})^2\Psi \\
&\to \frac{1}{2m^*}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{\nabla}}{\xi}-e^*\frac{\sqrt{2}\mu_0 H_\mathrm{c}}{\lambda}\boldsymbol{A}\right)^2\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi \\
&= \left(-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{\sqrt{2m^*}\xi}\boldsymbol{\nabla}-e^*\frac{\sqrt{2}\mu_0 H_\mathrm{c}}{\sqrt{2m^*}\lambda}\boldsymbol{A}\right)^2\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi \\
&= \left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\sqrt{2m^*|\alpha|}}{\sqrt{2m^*}\hbar}\boldsymbol{\nabla}-e^*\frac{\sqrt{2}\mu_0 H_\mathrm{c}\sqrt{m^*|\alpha|}}{\sqrt{2m^*}e^*\mu_0 H_\mathrm{c}}\boldsymbol{A}\right)^2\Psi \\
&= |\alpha|\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}(-\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}-\boldsymbol{A})^2\Psi
\end{aligned} \tag{1.22}$$

となる。(1.12)式の左辺第 3 項は、

$$\alpha\Psi \to \alpha\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi \tag{1.23}$$

となる。(1.12)式の左辺第 4 項は、

$$\begin{aligned}\beta|\Psi|^2\Psi &\to \beta\left|\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi\right|^2\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi \\ &= |\alpha|\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}|\Psi|^2\Psi\end{aligned} \tag{1.24}$$

(1.21)-(1.24)式をまとめる。(1.23)式右辺のαは負であるから、

$$\alpha\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \mathrm{i}V\Psi + (-\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla} - \boldsymbol{A})^2\Psi - \Psi + |\Psi|^2\Psi\right] = 0 \tag{1.25}$$

となる。さらに、(1.25)式の両辺を$\alpha(|\alpha|/\beta)^{1/2}$で除算すると、

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \mathrm{i}V\Psi + (-\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla} - \boldsymbol{A})^2\Psi - \Psi + |\Psi|^2\Psi = 0 \tag{1.26}$$

となる。(1.26)式は超伝導領域のオーダパラメータΨを記述する。続いて(1.13)式の規格化を行う。(1.13)式の左辺第 1 項は、

$$\begin{aligned}\nu\boldsymbol{\nabla}V &\to \nu\frac{1}{\xi}\boldsymbol{\nabla}\frac{|\alpha|}{e^*\gamma}V \\ &= \frac{|\alpha|}{\xi e^*\gamma}\nu\boldsymbol{\nabla}V \\ &= \frac{\sqrt{2m^*|\alpha|}}{\hbar}\cdot\frac{|\alpha|}{e^*\gamma}\nu\boldsymbol{\nabla}V\end{aligned} \tag{1.27}$$

となる。(1.13)式の左辺第 2 項は、

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} &\to \frac{1}{\mu_0}\cdot\frac{1}{\xi}\boldsymbol{\nabla}\times\frac{1}{\xi}\boldsymbol{\nabla}\times\frac{\sqrt{2}\mu_0 H_\mathrm{c}}{\lambda}\boldsymbol{A} \\ &= \frac{\sqrt{2}H_\mathrm{c}}{\xi^2\lambda}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} \\ &= \frac{2m^*|\alpha|}{\hbar^2}\cdot\frac{\sqrt{m^*|\alpha|}}{e^*\mu_0 H_\mathrm{c}}\cdot\sqrt{2}H_\mathrm{c}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} \\ &= \frac{2\sqrt{2}m^*|\alpha|\sqrt{m^*|\alpha|}}{\hbar^2 e^*\mu_0}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}\end{aligned} \tag{1.28}$$

となる。(1.13)式の左辺第 3 項は、

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{i}\hbar \mathrm{e}^*}{2m^*}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*)\\
&\rightarrow\frac{\mathrm{i}\hbar \mathrm{e}^*}{2m^*}\left\{\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi^*\frac{1}{\xi}\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi-\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi\frac{1}{\xi}\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi^*\right\}\\
&=\frac{\mathrm{i}\hbar \mathrm{e}^*}{2m^*}\cdot\frac{|\alpha|}{\beta}\cdot\frac{1}{\xi}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*)\\
&=\frac{\mathrm{i}\hbar \mathrm{e}^*}{2m^*}\cdot\frac{|\alpha|}{\beta}\cdot\frac{\sqrt{2m^*|\alpha|}}{\hbar}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*)\\
&=\frac{\mathrm{i}e^*|\alpha|\sqrt{2m^*|\alpha|}}{2m^*\beta}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*)
\end{aligned}
\tag{1.29}
$$

となる。(1.13)式の左辺第 4 項は、

$$
\begin{aligned}
\frac{e^{*2}}{m^*}|\Psi|^2\boldsymbol{A}\rightarrow\frac{e^{*2}}{m^*}&\left|\left(\frac{|\alpha|}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}}\Psi\right|^2\frac{\sqrt{2}\mu_0 H_\mathrm{c}}{\lambda}\boldsymbol{A}\\
&=\frac{e^{*2}}{m^*}\cdot\frac{|\alpha|}{\beta}\cdot\frac{\sqrt{2}\mu_0 H_\mathrm{c}}{\lambda}|\Psi|^2\boldsymbol{A}\\
&=\frac{e^{*2}}{m^*}\cdot\frac{|\alpha|}{\beta}\cdot\sqrt{2}\mu_0 H_\mathrm{c}\cdot\frac{\sqrt{m^*|\alpha|}}{e^*\mu_0 H_\mathrm{c}}|\Psi|^2\boldsymbol{A}\\
&=\frac{e^*|\alpha|\sqrt{2m^*|\alpha|}}{m^*\beta}|\Psi|^2\boldsymbol{A}
\end{aligned}
\tag{1.30}
$$

となる。(1.27)-(1.30)式をまとめると、

$$
\begin{aligned}
&\frac{2\sqrt{2}m^*|\alpha|\sqrt{m^*|\alpha|}}{\hbar^2 e^*\mu_0}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}\\
&=\frac{e^*|\alpha|\sqrt{2m^*|\alpha|}}{m^*\beta}\left\{|\Psi|^2\boldsymbol{A}-\frac{\mathrm{i}}{2}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*)\right\}-\frac{\sqrt{2m^*|\alpha|}}{\hbar}\cdot\frac{|\alpha|}{e^*\gamma}\nu\boldsymbol{\nabla}V
\end{aligned}
\tag{1.31}
$$

となる。(1.31)式の両辺を$|\alpha|\sqrt{2m^*|\alpha|}$で除算すると、

$$
\frac{2m^*}{\hbar^2 e^*\mu_0}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}=\frac{e^*}{m^*\beta}\left\{|\Psi|^2\boldsymbol{A}-\frac{\mathrm{i}}{2}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*)\right\}-\frac{1}{\hbar e^*\gamma}\nu\boldsymbol{\nabla}V
\tag{1.32}
$$

が得られる。さらに、(1.32)式を簡単化するために以下の関係を用いる。

$$
\boldsymbol{J}=\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}
\tag{1.33}
$$

$$
\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}=0
\tag{1.34}
$$

ここで、$\boldsymbol{J}$は超伝導体に流れる電流であり、(1.34)式は電流の発散を表す式である。(1.32)式の両辺で$\boldsymbol{\nabla}$との内積を取ると、(1.33)式、(1.34)式から、

$$
\begin{aligned}
&0=\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\frac{e^*}{m^*\beta}\left\{|\Psi|^2\boldsymbol{A}-\frac{\mathrm{i}}{2}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*)\right\}-\frac{1}{\hbar e^*\gamma}\nu\boldsymbol{\nabla}V\right]\\
&\leftrightarrow\ \frac{\mathrm{i}}{2}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}^2\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}^2\Psi^*)-\boldsymbol{\nabla}\cdot(|\Psi|^2\boldsymbol{A})=-\frac{m^*\beta}{\hbar {e^*}^2\gamma}\nu\boldsymbol{\nabla}^2V \qquad (1.35)\\
&\leftrightarrow\ \sigma\boldsymbol{\nabla}^2V=\frac{\mathrm{i}}{2}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}^2\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}^2\Psi^*)-\boldsymbol{\nabla}\cdot(|\Psi|^2\boldsymbol{A})
\end{aligned}
$$

が得られる。ここで、

$$
-\frac{m^*\beta}{\hbar {e^*}^2\gamma}\nu\rightarrow\sigma \qquad (1.36)
$$

とする。(1.35)式はスカラーポテンシャル Vを記述する。本研究の数値解析では、(1.29)式および(1.35)式を解くことによって超伝導体の解析を行う。

1.3　アフィン変換数値積分法(Affine Integrator(AFI))

アフィン変換数値積分法(以下 AFI 法と記述する)とは、最近提案された陽的数値積分法である。拡散方程式のような放物型偏微分方程式や、ゲージ場存在下の Schrödinger 方程式や Time-dependent　Ginzburg-Landau(TDGL) 方程式の数値積分のために考案された。

数値的安定性に関して、AFI 法はラプラシアン項に関して無条件で安定であり、方程式を構成する項全体に関して高い数値的安定性を有する。エネルギー保存に関して、AFI 法は線形保存系(Schrödinger 方程式や TDGL 方程式)において全エネルギーが厳密に保存される性質を持つ。

AFI 法は空間に関して離散化するための格子をチェッカーボード状に分解することから導かれるアフィン変換対で構成される。数学的にシンプルな手順であり、数値的安定性やエネルギー保存に関する理論解析が容易である。[1]

1.3.1　AFI 法のイメージ

図 1-1 の左側に空間に関する離散化のためのチェッカーボード格子を示す。基礎方程式はこのチェッカーボード格子によって、まずは空間に関して離散化される。右側にチェッカーボード格子に基づいて構成された高次元常微分方程式の概形を示す。

黒丸格子点の集合を Q 集合、白丸格子点の集合を P 集合と呼ぶことにする。Q 集合および P 集合上で標本化された従属変数の時間発展は図 1-1 の右側に示された方程式のブロック行列が支配する。

図 1-2 に常微分方程式を時間に関して離散化するようすを示す。このように、AFI 法は

Q 集合上で定義された従属変数の時間発展と P 集合上で定義された従属変数の時間発展を交互に繰り返していくものである。

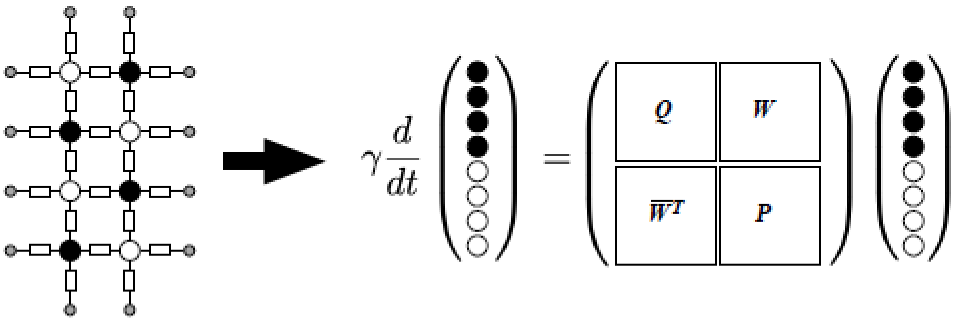

図 1-1　空間に関する離散化のイメージ

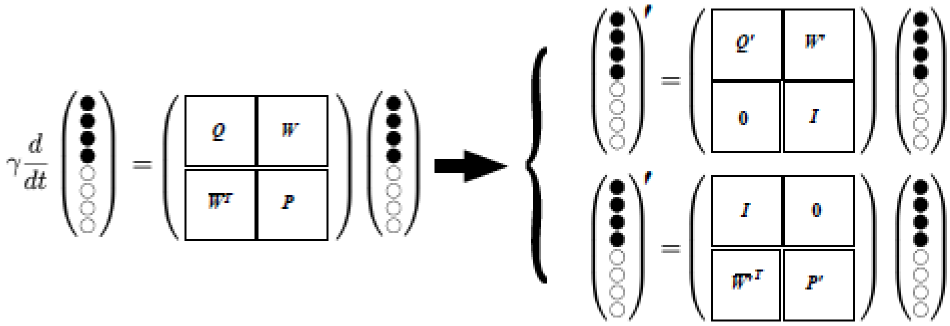

図 1-2　時間に関する離散化のイメージ

1.3.2　1 次元空間において AFI 法の数値積分スキームと時間発展方程式の導出

1 次元空間での AFI 法の数値積分スキームを導出する。

まずは空間に関する離散化を行う。本研究で用いるオーダパラメータの基礎方程式は(1.37)式で表される。

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\boldsymbol{\nabla} - \mathrm{i}\boldsymbol{A})^2 \psi - \alpha \psi - \beta |\psi|^2 \psi \tag{1.37}$$

1 次元空間では(1.38)式が(1.37)式で適用されており、ベクトルポテンシャルは固定されているとする。

$$\boldsymbol{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}, \boldsymbol{A} = A_x \tag{1.38}$$

ベクトルポテンシャルはリンク変数$w_{i,j}$によって次のように実装される。

$$w_{ij} = \exp(\mathrm{i}\theta_{ij}), \qquad \theta_{ij} = -hA_x \left(\frac{x_i + x_j}{2}\right), \qquad i,j = 1,2,3,4 \tag{1.39}$$

ここでx_i、x_jはそれぞれ格子点i、jのx座標で、hは格子点間隔である。格子点iと格子点jが接続していない場合は$w_{i,j}=0$と約束する。簡単のため、周期的境界条件を採用する。空間に関する離散化のために導入した格子およびリンク変数の状況を図 1-3 に示す。

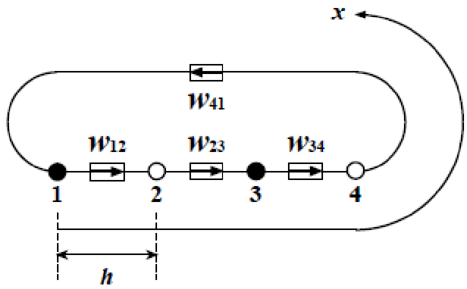

図 1-3　1 次元空間での周期的境界条件下の
座標とリンク変数のインデックスの定義

(1.37)式を空間に関して離散化する。$\psi_i(t)=\psi(x_i,t),\alpha_i=\alpha(x_i),\beta_i=\beta(x_i)$とおくと(1.40)式で表される連立微分方程式が得られる。

$$\begin{cases} \gamma\dfrac{d\psi_1}{dt}=\dfrac{1}{h^2}(w_{12}\psi_2+\bar{w}_{41}\psi_4-2\psi_1)-\alpha_1\psi_1-\beta_1|\psi_1|^2\psi_1 \\ \gamma\dfrac{d\psi_3}{dt}=\dfrac{1}{h^2}(w_{34}\psi_4+\bar{w}_{23}\psi_2-2\psi_3)-\alpha_3\psi_3-\beta_3|\psi_3|^2\psi_3 \\ \gamma\dfrac{d\psi_2}{dt}=\dfrac{1}{h^2}(w_{23}\psi_3+\bar{w}_{12}\psi_1-2\psi_2)-\alpha_2\psi_2-\beta_2|\psi_2|^2\psi_2 \\ \gamma\dfrac{d\psi_4}{dt}=\dfrac{1}{h^2}(w_{41}\psi_4+\bar{w}_{34}\psi_3-2\psi_4)-\alpha_4\psi_4-\beta_4|\psi_4|^2\psi_4 \end{cases} \tag{1.40}$$

ここで、$\bar{w}_{ij}$はw_{ij}の複素共役を表す。

奇数の格子点の組(図 1-3 の黒丸に対応)と偶数の格子点の組(図 1-3 の白丸に対応)の順に並べているが、図 1-1 の右側のイメージに従って表記している。この連立微分方程式は以下の(1.41)式で表せる。

$$\gamma\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_3\\ \psi_2\\ \psi_4\end{pmatrix}=\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix}-2-U_1h^2 & 0 & w_{12} & w_{14}\\ 0 & -2-U_3h^2 & w_{32} & w_{34}\\ \bar{w}_{12} & \bar{w}_{32} & -2-U_2h^2 & 0\\ \bar{w}_{14} & \bar{w}_{34} & 0 & -2-U_4h^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_3\\ \psi_2\\ \psi_4\end{pmatrix} \tag{1.41}$$

.

$$U_i=\alpha_i+\beta_i\left|\tilde{\psi}_i\right|^2, i=1,2,3,4 \tag{1.42}$$

$\tilde{\psi}_i$はψ_iの推定値である。理由は後述する。

ここで、

$$\boldsymbol{q}=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_3\end{pmatrix},\boldsymbol{p}=\begin{pmatrix}\psi_2\\ \psi_4\end{pmatrix} \tag{1.43}$$

とする。次に、

$$\sigma_i = 2 + U_i h^2, i = 1,2,3,4 \tag{1.44}$$

として、

$$D(-\sigma_Q) = \begin{pmatrix} -\sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_3 \end{pmatrix}, D(-\sigma_P) = \begin{pmatrix} -\sigma_2 & 0 \\ 0 & -\sigma_4 \end{pmatrix}, W = \begin{pmatrix} w_{12} & w_{14} \\ w_{32} & w_{34} \end{pmatrix} \tag{1.45}$$

とすると、(1.41)式は(1.46)式で表せる。

$$\gamma \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} D(-\sigma_Q) & W \\ \overline{W}^T & D(-\sigma_P) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} \tag{1.46}$$

時間推進演算子 $\hat{A}$を用いて(1.46)式を表すと、(1.47)式で表される。また、 $\hat{A}$は(1.48)で定義される。

$$\gamma \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} \tag{1.47}$$

$$\hat{A} = \frac{1}{\mathrm{h}^2} \sum_{i \in \{1,2,3,4\}} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j = \{1,2,3,4\}} w_{ij} \psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \psi_i} \tag{1.48}$$

$Q = \{1,3\}, P = \{2,4\}$として時間推進演算子$\hat{A}$を次のように分解する。

$$\hat{A} = \hat{A}_Q + \hat{A}_\mathrm{P} \tag{1.49}$$

ただし

$$\hat{A}_Q = \frac{1}{\mathrm{h}^2} \sum_{i \in Q} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \psi_i} \tag{1.50}$$

$$\hat{A}_P = \frac{1}{\mathrm{h}^2} \sum_{i \in P} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j \in Q} w_{ij} \psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \psi_i} \tag{1.51}$$

である。また、$w_{ij} = \overline{w}_{ji}$であることに注意する。

次に、(1.47)式を時間に関して離散化することを考える。

時間刻み幅をτ、$(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{q}(\mathrm{t}), \boldsymbol{p}(\mathrm{t}))$、$(\boldsymbol{q}', \boldsymbol{p}') = (\boldsymbol{q}(\mathrm{t} + \tau), \boldsymbol{p}(\mathrm{t} + \tau))$として時間発展方程式の(1.52)式が得られる。

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{q}' \\ \boldsymbol{p}' \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}\right) \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \left(\hat{A}_Q + \hat{A}_\mathrm{P}\right)\right) \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} \tag{1.52}$$

指数関数演算子は Lie-Trotter-Suzuki 分解によって(1.53)式のように近似できる。[4] Lie-Trotter-Suzuki 分解とは、$\exp x(A + B)$の形のものを(1.54)式のように積に分解する方法の 1 つである。また、$O\left(\frac{\tau^2}{n}\right)$は誤差オーダー部分である。

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\left(\hat{A}_Q+\hat{A}_{\mathrm{P}}\right)\right)=\begin{cases}\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)+O(\tau^2)\\ \exp\left(\frac{\tau}{2\gamma}\hat{A}_Q\right)\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)\exp\left(\frac{\tau}{2\gamma}\hat{A}_Q\right)+O(\tau^3)\\ \cdots\end{cases} \tag{1.53}$$

$$\exp x(A+B)=\left(\exp\frac{x}{n}A\exp\frac{x}{n}B\right)^n+O\left(\frac{\tau^2}{n}\right) \tag{1.54}$$

従って、指数関数演算子$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)$と$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)$の行列表現が得られたら数値積分スキーム(AFI)を構成できる。

実験として、ここで演算子$\hat{A}_Q$を$\psi_i(i\in Q)$に1回作用させてみる。

$$\hat{A}_Q\psi_i=\frac{1}{h^2}\left(-\sigma_i\psi_i+\sum_{j\in P}w_{ij}\psi_j\right), i\in Q \tag{1.55}$$

次に、2回作用させてみる。

$$\hat{A}_Q^2\psi_i=\left(\frac{-\sigma_i}{h^2}\right)^2\left(\psi_i-\frac{1}{\sigma_i}\sum_{j\in P}w_{ij}\psi_j\right), i\in Q \tag{1.56}$$

従って、m回(mは1以上の自然数)作用させると

$$\hat{A}_Q^m\psi_i=\left(\frac{-\sigma_i}{h^2}\right)^m\left(\psi_i-\frac{1}{\sigma_i}\sum_{j\in P}w_{ij}\psi_j\right), i\in Q \tag{1.56}$$

となる。よって、マクローリン展開をして

$$\begin{aligned}\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)\psi_i&=\psi_i+\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m!}\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)^m\psi_i\\ &=\psi_i+\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m!}\left(\frac{-\sigma_i\tau}{h^2\gamma}\right)^m\left(\psi_i-\frac{1}{\sigma_i}\sum_{j\in P}w_{ij}\psi_j\right)\\ &=\psi_i+\left(\psi_i-\frac{1}{\sigma_i}\sum_{j\in P}w_{ij}\psi_j\right)\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m!}\left(\frac{-\sigma_i\tau}{h^2\gamma}\right)^m-\left(\psi_i-\frac{1}{\sigma_i}\sum_{j\in P}w_{ij}\psi_j\right)\\ &=\exp\left(\frac{-\sigma_i\tau}{h^2\gamma}\right)\psi_i+\frac{1-\exp\left(\frac{-\sigma_i\tau}{h^2\gamma}\right)}{\sigma_i}\sum_{j\in P}w_{ij}\psi_j\\ &=a_i\psi_i+b_i\sum_{j\in P}w_{ij}\psi_j, i\in Q\end{aligned} \tag{1.57}$$

となる。ここで、

$$a_i = \exp\left(\frac{-\sigma_i \tau}{h^2 \gamma}\right), b_i = \frac{1 - a_i}{\sigma_i} \tag{1.58}$$

とおいた。(1.57)式は 1 次元空間における時間発展方程式である。また、

$$\hat{A}_Q \psi_i = 0, i \in P \tag{1.59}$$

であるので、

$$\hat{A}_Q^m \psi_i = 0, i \in P \tag{1.60}$$

であることがわかる。演算子$\hat{A}_P$でも同様な計算を行い、(1.61)式と(1.62)式が得られる。

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(a_Q) & D(b_Q)W \\ 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} \tag{1.61}$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ D(b_P)\overline{W}^T & D(a_P) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} \tag{1.62}$$

ここで、Iは単位行列で

$$D(a_Q) = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_3 \end{pmatrix}, D(b_Q) = \begin{pmatrix} b_1 & 0 \\ 0 & b_3 \end{pmatrix}, D(a_P) = \begin{pmatrix} a_2 & 0 \\ 0 & a_4 \end{pmatrix}, D(b_P) = \begin{pmatrix} b_2 & 0 \\ 0 & b_4 \end{pmatrix} \tag{1.63}$$

とおいた。

(1.61)式と(1.62)式はそれぞれ指数関数演算子$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)$と$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)$の行列表現を表しており、数値積分スキーム(AFI)が得られた。

次に、(1.42)式の非線形項$\beta_i\left|\tilde{\psi}_i\right|^2$で、$\psi_i$ではなく推定値 $\tilde{\psi}_i$が用いられる理由を説明する。推定値は(1.64)式から(1.67)式で計算される。

$$\tilde{\psi}_1 = \frac{1}{2}(w_{12}\psi_2 + \overline{w}_{41}\psi_4) \tag{1.64}$$

$$\tilde{\psi}_3 = \frac{1}{2}(w_{34}\psi_4 + \overline{w}_{23}\psi_2) \tag{1.65}$$

$$\tilde{\psi}_2 = \frac{1}{2}(w_{23}\psi_3 + \overline{w}_{12}\psi_1) \tag{1.66}$$

$$\tilde{\psi}_4 = \frac{1}{2}(w_{41}\psi_1 + \overline{w}_{34}\psi_3) \tag{1.67}$$

注意することとして、$\psi_i(i \in Q)$の値は$\psi_i(i \in P)$で推定され、$\psi_i(i \in P)$の値は$\psi_i(i \in Q)$で推定されることである。このことにより、指数関数演算子の行列表現が容易になる。

具体的に言うと、指数関数演算子$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)$の行列表現を得るために、(1.56)式において$\hat{A}_Q$をベクトル$\boldsymbol{q}$の要素に何回も作用させた。その際、$\sigma_i(i \in Q)$はベクトル$\boldsymbol{q}$の要素に依存せず、ベクトル$\boldsymbol{p}$の要素に依存することが重要である。つまり、時間推進演算子$\hat{A}_Q$にとって$\sigma_i(i \in Q)$は定数となる。このことが行列表現の導出を可能としている。

1.3.3　2 次元空間において AFI 法の時間発展方程式の導出

2 次元空間での AFI 法の数値積分スキームを導出する。

基礎方程式は 1 次元空間で用いたものと同じで(1.37)式を用いる。ただし、

$$\boldsymbol{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}\right), \boldsymbol{A} = \left(A_x, A_y\right) \tag{1.68}$$

である。

ここで、格子点やリンク変数を指定するためにダブルインデックスを用いる。そうすることで格子点やリンク変数を空間的な位置に対応させることができる。図 1-4 にダブルインデックスの定義を示す。また、リンク変数はx成分の$w^x_{i,j}$と、y成分の$w^y_{i,j}$に分けて定義される。境界条件はx方向y方向ともに周期的境界条件とする。

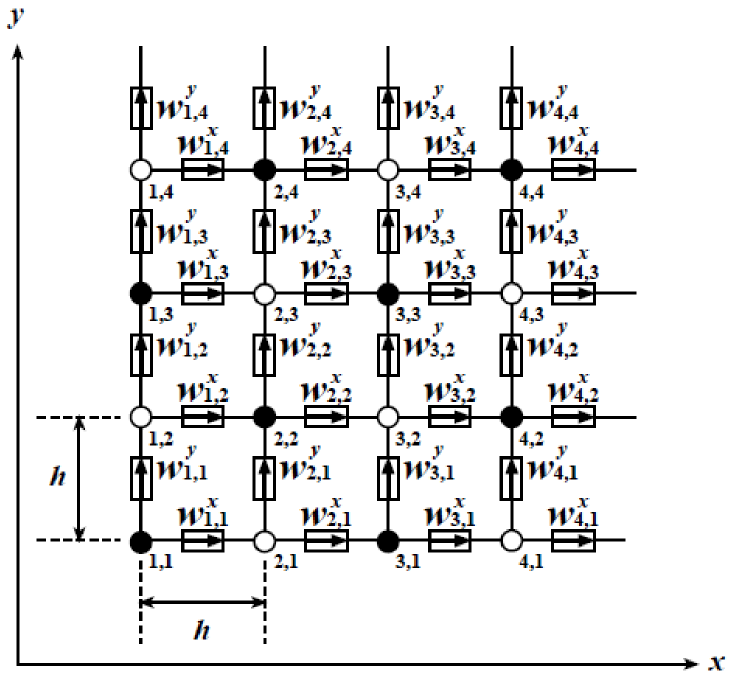

図 1-4　2 次元空間での周期的境界条件下の
座標とリンク変数のダブルインデックスでの定義

まず空間に関して離散化すると(1.69)式が得られる。

$$\gamma \frac{d\psi_{i,j}}{dt} = \frac{1}{h^2}\left(w^x_{i,j}\psi_{i+1,j} + \overline{w}^x_{i-1,j}\psi_{i-1,j} + w^y_{i,j}\psi_{i,j+1} + \overline{w}^y_{i,j-1}\psi_{i,j-1} - 4\psi_{i,j}\right) \\ -\alpha_{i,j}\psi_{i,j} - \beta_{i,j}\left|\psi_{i,j}\right|^2\psi_{i,j} \tag{1.69}$$

ここでは、

$$U_{i,j} = \alpha_{ij} + \beta_{i,j}\left|\tilde{\psi}_{i,j}\right|^2 \tag{1.70}$$

$$\tilde{\psi}_{i,j} = \frac{1}{4}\left(w^x_{i,j}\psi_{i+1,j} + \overline{w}^x_{i-1,j}\psi_{i-1,j} + w^y_{i,j}\psi_{i,j+1} + \overline{w}^y_{i,j-1}\psi_{i,j-1}\right) \tag{1.71}$$

とおく。また、

$$\sigma_{i,j} = 4 + U_{i,j}h^2 \tag{1.72}$$

とおく。

ここまで格子点とリンク変数をダブルインデックスで定義したが、図 1-4 において格子点を(1,1)、(1,2)、…、(4,3)、(4,4)と定義しているところをシングルインデックス 1、2、…、15、16 と定義したものを考えると、1 次元空間で導出した数値積分スキームの(1.61)式と(1.62)式、時間発展方程式の(1.57)式がそのまま使える。数値積分スキームは図 1-4 の黒丸に対して(1.61)式、白丸に対して(1.62)式が対応する。

具体例として格子点(1,1)での時間発展方程式を(1.73)式に示す。なお、$\psi_{1,1}$が時間発展した後のものを$\psi'_{1,1}$とする。(1.57)式を適用するが、使用されている格子点とリンク変数に関してはダブルインデックスで定義した表記を使用している。ほかの格子点についても同様に(1.57)式を用いて導出可能である。

$$\psi'_{1,1} = a_{1,1}\psi_{1,1} + b_{1,1}\left(w^x_{1,1}\psi_{2,1} + \overline{w}^x_{4,1}\psi_{4,1} + w^y_{1,1}\psi_{1,2} + \overline{w}^y_{1,4}\psi_{1,4}\right) \tag{1.73}$$

$$a_{1,1} = \exp\left(-\sigma_{1,1}\tau/h^2\right) \tag{1.74}$$

$$b_{1,1} = \left(1 - a_{1,1}\right)/\sigma_{1,1} \tag{1.75}$$

$$\sigma_{1,1} = 4 + \left(\alpha_{1,1} + \beta_{1,1}\left|\tilde{\psi}_{1,1}\right|^2\right)h^2 \tag{1.76}$$

$$\tilde{\psi}_{1,1} = \frac{1}{4}(w^x_{1,1}\psi_{2,1} + \overline{w}^x_{4,1}\psi_{4,1} + w^y_{1,1}\psi_{1,2} + \overline{w}^y_{1,4}\psi_{1,4}) \tag{1.77}$$

これを一般化すると、2 次元空間における AFI 法での時間発展方程式の(1.78)式を得られる。

$$\psi'_{i,j} = a_{i,j}\psi_{i,j} + b_{i,j}\left(w^x_{i,j}\psi_{i+1,j} + \overline{w}^x_{i-1,j}\psi_{i-1,j} + w^y_{i,j}\psi_{i,j+1} + \overline{w}^y_{i,j-1}\psi_{i,j-1}\right) \tag{1.78}$$

$$a_{i,j} = \exp\left(-\sigma_{i,j}\tau/h^2\right) \tag{1.79}$$

$$b_{i,j} = \left(1 - a_{i,j}\right)/\sigma_{i,j} \tag{1.80}$$

$$\sigma_{i,j} = 4 + \left(\alpha_{i,j} + \beta_{i,j}\left|\tilde{\psi}_{i,j}\right|^2\right)h^2 \tag{1.81}$$

$$\tilde{\psi}_{i,j} = \frac{1}{4}\left(w^x_{i,j}\psi_{i+1,j} + \overline{w}^x_{i-1,j}\psi_{i-1,j} + w^y_{i,j}\psi_{i,j+1} + \overline{w}^y_{i,j-1}\psi_{i,j-1}\right) \tag{1.82}$$

1.4　研究目的

G-L 理論は第 2 種超伝導体の磁気特性を良く記述している。G-L 理論を成り立たせる仮定によって求められる G-L 方程式に時間発展性を加えた TDGL 方程式は第 2 種超伝導体内の磁束線の動きを調査するのに用いられる。TDGL 方程式に限らず、常微分方程式を数値解析する際によく用いられるのがオイラー法である。オイラー法は常微分方程式の数値解法の 1 つで、微分の定義に基づいて数値解析するので数学的に簡単であり、プログラムを記述する上でも簡単である。しかし、数値解析する上では誤差が蓄積されるため精度が悪いことが知られている。

対して AFI 法は、オイラー法と同じく数学的に簡単であり、プログラムを記述する上でも簡単であることに加えて、方程式を構成する項全体に対して高い数値的安定性を有している。したがって、TDGL 方程式の数値解析を行う上で AFI 法を用いると高い安定性のもと数値解析を行うことができる。

本研究では、量子化磁束線可視化シミュレーションプログラムを作成する上で通常用いられるオイラー法で実装するところを AFI 法で実装し、超伝導体内の磁束線を可視化すること、および観察することを目的とする。

第2章 実装方法と計算条件

2.1　実装方法

実装するにあたって、統合開発環境でありプログラミング言語でもある Processing で実装を行う。Processing は、アーティストよるコンテンツ制作作業のために、詳細な設定を行う関数を排除しており、非プログラマーでも容易にプログラムを実装できる。

シミュレーション領域は 2 次元平面であり、平面上に超伝導領域が存在するとしてプログラムを実装する

2.2　初期条件

空間離散化格子を以下の図に示す。図 3-1 において、黒丸はオーダパラメータで、四角がリンク変数である。また、陰を付けている部分が超伝導領域で、その周囲が境界領域である。なお、図 3-1 に振ってある番号はx軸方向、y軸方向それぞれのインデックス番号である。また、x座標、y座標はインデックス番号に格子間隔hをかけたものとなる。オーダパラメータの格子点座標、リンク変数のx成分$w_{i,j}^{x}$とy成分の$w_{i,j}^{y}$の定義は図 1-4 のようにし、図 3-1 に適用する。また、シミュレーション領域内においては黒丸と白丸の対応も適用する。

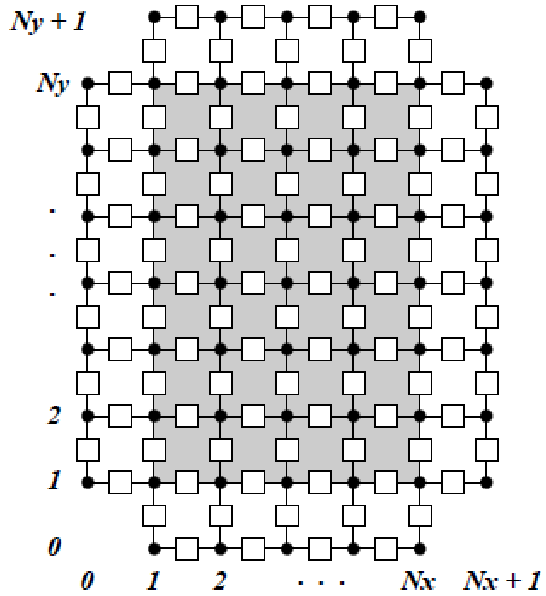

図 2-1　シミュレーション領域の
オーダパラメータとリンク変数の配置の概念図

本稿では、シミュレーション領域はx軸方向を$N_x = 100$で、y軸方向を$N_x = 100$で分割する

ことにする。

オーダパラメータの初期条件は式(3.1)、ゲージ場の初期条件は式(3.2)とする。x、yはそれぞれx座標、y座標を示す。

$$\psi(x,y,0)=\cos(\pi m x/L)\cos(\pi n y/L) \tag{3.1}$$

$$\left(A_x,A_y\right)=(0,B_z x) \tag{3.2}$$

ここで、B_zは 2 次元平面に垂直に印加された一様磁場である。また、式(3.1)のm、nは 1 以上の自然数であり、今回は$m=2$、$n=3$で実装することにする。

2.3　シミュレーション領域内での更新式

2.3.1　オーダパラメータの更新式

オーダパラメータの従属変数$\psi_{i,j}$は式(3)に従って時間τ後の値${\psi'}_{i,j}$に更新される。

$${\psi'}_{i,j}=a_{i,j}\psi_{i,j}+b_{i,j}\left(w^x_{i,j}\psi_{i+1,j}+\overline{w}^x_{i-1,j}\psi_{i-1,j}+w^y_{i,j}\psi_{i,j+1}+\overline{w}^y_{i,j-1}\psi_{i,j-1}\right) \tag{3.3}$$

ただし

$$w^x_{i,j}=\exp\left(-\mathrm{i}hA_x\left(\boldsymbol{r}_{i,j}+\boldsymbol{r}_{i+1,j}\right)/2\right) \tag{3.4}$$

$$w^y_{i,j}=\exp\left(-\mathrm{i}hA_y\left(\boldsymbol{r}_{i,j}+\boldsymbol{r}_{i,j+1}\right)/2\right) \tag{3.5}$$

$$a_{i,j}=\exp\left(-\sigma_{i,j}\tau/h^2\right) \tag{3.6}$$

$$b_{i,j}=\left(1-a_{i,j}\right)/\sigma_{i,j} \tag{3.7}$$

$$\sigma_{i,j}=4+\left(\alpha_{i,j}+\beta_{i,j}\left|\tilde{\psi}_{i,j}\right|^2\right)h^2 \tag{3.8}$$

$$\tilde{\psi}_{i,j}=\frac{1}{4}\left(w^x_{i,j}\psi_{i+1,j}+\overline{w}^x_{i-1,j}\psi_{i-1,j}+w^y_{i,j}\psi_{i,j+1}+\overline{w}^y_{i,j-1}\psi_{i,j-1}\right) \tag{3.9}$$

である。シミュレーション領域のオーダパラメータの更新範囲は$i=1,2,\dots,N_x$、$j=1,2,\dots,N_y$である。ここで$\boldsymbol{r}_{i,j}$は格子点(i,j)の位置ベクトル、hはシミュレーション領域内の格子間隔、τは更新時間間隔である。式(3.4)と式(3.5)はそれぞれx軸方向、y軸方向のリンク変数である。リンク変数の存在範囲は、$w^x_{i,j}$が$i=0,1,2,\dots,N_x$、$j=0,1,2,\dots,N_y+1$、$w^y_{i,j}$が$i=0,1,2,\dots,N_x+1$、$j=0,1,2,\dots,N_y$である。また、式(3.8)のパラメータ$\alpha_{i,j}$と$\beta_{i,j}$はそれぞれ$\alpha_{i,j}=-10$、$\beta_{i,j}=10$で実装する。

2.3.2　リンク変数の更新式

ゲージ場の時間変化を表す式を、リンク変数を用いて(3.10)式と(3.11)式に示す。

$$\tau_A\frac{dw^x_{i,j}}{dt}=-\mathrm{iIm}\left[\bar{\psi}_{i,j}w^x_{i\ ,j}\psi_{i+1,j}\right]w^x_{i\ ,j}-\frac{1}{h^2}\left(\overline{C^z}_{i,j-1}C^z_{i,j}-1\right)w^x_{i\ ,j} \tag{3.10}$$

$$\tau_A\frac{dw^y_{i,j}}{dt}=-\mathrm{iIm}\left[\bar{\psi}_{i,j}w^y_{i\ ,j}\psi_{i+1,j}\right]w^y_{i\ ,j}-\frac{1}{h^2}\left(\overline{C^z}_{i,j}C^z_{i-1,j}-1\right)w^y_{i\ ,j} \tag{3.11}$$

ただし、

$$C_{i,j}^{z} = w_{i\ ,j}^{x} w_{i+1\ ,j}^{y} \overline{w^{x}}_{i,j+1} \overline{w^{y}}_{i,j} \tag{3,12}$$

である。ここで、x軸方向のリンク変数の偏角$\theta_{i,j}^{x}$とy軸方向のリンク変数の偏角$\theta_{i,j}^{y}$を用いて

$$w_{i\ ,j}^{x} = \exp\left(\mathrm{i}\theta_{i,j}^{x}\right), w_{i+1\ ,j}^{y} = \exp\left(\mathrm{i}\theta_{i,j}^{y}\right) \tag{3.13}$$

$$\omega_{i,j}^{x} = \frac{d}{dt}\theta_{i,j}^{x}, \omega_{i,j}^{y} = \frac{d}{dt}\theta_{i,j}^{y} \tag{3.14}$$

を用意する。すると次の関係式(3.15)式と(3.16)式が得られる。

$$\omega_{i,j}^{x} = -\frac{1}{\tau_A}\mathrm{Im}\left[\bar{\psi}_{i,j} w_{i\ ,j}^{x} \psi_{i+1,j} + \frac{1}{h^2}\overline{C^{z}}_{i,j-1} C_{i,j}^{z}\right] \tag{3.15}$$

$$\omega_{i,j}^{y} = -\frac{1}{\tau_A}\mathrm{Im}\left[\bar{\psi}_{i,j} w_{i\ ,j}^{y} \psi_{i,j+1} + \frac{1}{h^2}\overline{C^{z}}_{i,j} C_{i-1,j}^{z}\right] \tag{3.16}$$

これらの関係式より、(3.17)式と(3.18)式で表されるようなリンク変数の偏角に関するオイラー法が導き出せる。τはオーダパラメータと同じ更新時間間隔である。

$$\theta_{i,j}^{x}(t+\tau) = \theta_{i,j}^{x}(t) + \tau\omega_{i,j}^{x}(t) \tag{3.17}$$

$$\theta_{i,j}^{y}(t+\tau) = \theta_{i,j}^{x}(t) + \tau\omega_{i,j}^{x}(t) \tag{3.18}$$

リンク変数はリンク変数の偏角を更新し、その値を用いて更新時間後のリンク変数を求める形となる。また、プログラムで実装する際、安定性を考えて$\tau_A = 10$として実装する。ただし、$i = 1,2,\dots,N_x$、$j = 1,2,\dots,N_y$である。

2.4　境界条件

2.4.1　オーダパラメータの境界条件

オーダパラメータの境界条件は以下の式(3.19)から式(3.22)で示す。

$$\psi_{0,j} = w_{0\ ,j}^{x} \psi_{1,j} \tag{3.19}$$

$$\psi_{N_x+1,j} = \overline{w^{x}}_{N_x,j} \psi_{N_x,j} \tag{3.20}$$

$$\psi_{i,0} = w_{i\ ,0}^{y} \psi_{i,1} \tag{3.21}$$

$$\psi_{i,N_y+1} = \overline{w^{y}}_{i,N_y} \psi_{i,N_y} \tag{3.22}$$

ただし、$i = 1,2,\dots,N_x$、$j = 1,2,\dots,N_y$である。

2.4.2　リンク変数の境界条件

超伝導体のy軸方向に電流J_yを印加した場合の更新式を示す。

東西境界においてのリンク変数は以下の(3.23)式から(3.26)式に示す。

$$w_{0\ ,j}^{x} = w_{1,j}^{x} \tag{3.23}$$

$$w^x_{N_x\ ,j} = w^x_{N_x-1\ ,j} \tag{3.24}$$

$$w^y_{0\ ,j} = w^x_{0\ ,j} w^y_{1\ ,j} \overline{w^x}_{0,j+1} \exp\left[\mathrm{i}h^2\left(B_z + \mu_0 \frac{L_x}{2} J_y\right)\right] \tag{3.25}$$

$$w^y_{N_x+1\ ,j} = \overline{w^x}_{N_x,j} w^x_{N_x\ ,j+1} w^y_{N_x,j} \exp\left[-\mathrm{i}h^2\left(B_z - \mu_0 \frac{L_x}{2} J_y\right)\right] \tag{3.26}$$

ただし、(3.23)式と(3.24)式では$j = 1,2,\dots,N_y$、(3.25)式と(3.26)式では$j = 1,2,\dots,N_y - 1$である。また、(3.25)式と(3.26)式はアンペールの法則より容易に求まり、μ_0は真空透磁率、L_xはシミュレーション領域のx軸方向の大きさである。

南北境界におけるリンク変数の更新は以下の(3.27)式から(3.30)式に示す。

$$w^x_{i,0} = w^x_{i,1} \tag{3.27}$$

$$w^x_{i,N_y+1} = w^x_{i,N_y} \tag{3.28}$$

$$w^y_{i,0} = w^y_{i,1} \tag{3.29}$$

$$w^y_{i,N_y} = w^y_{i,N_y-1} \tag{3.30}$$

ただし、(3.23)式と(3.24)式では$i = 1,2,\dots,N_x - 1$、(3.25)式と(3.26)式では$i = 1,2,\dots,N_x$である。

2.5　シミュレーション領域での更新順序

オーダパラメータは境界条件、図 1-4 における黒丸更新(0.5 更新時間分)、白丸更新(更新時間分)、黒丸更新(0.5 更新時間分)の順で計算し、オーダパラメータの位相を色相で、オーダパラメータの絶対値の 2 乗の値を明度で表し、描画を行う。

リンク変数の更新は、境界条件を計算した後に超伝導領域内のリンク変数を計算する。

全体の更新順序は、リンク変数の境界条件処理、超伝導領域内のリンク変数の更新、オーダパラメータの境界条件処理、超伝導領域内のオーダパラメータの更新を 1 つのループとして更新を繰り返す。

第3章　実行結果および考察

3.1　実行結果

まず、電流を印加しなかった場合($J_y = 0$)の結果を示す。第 2 章での計算条件を元に Processing を用いてプログラムを実装した結果、以下の図 3-1 が得られた。ただし、オーダパラメータの位相を色相で、オーダパラメータの絶対値の 2 乗を明度で示している。また、Processing で描画する際、下がy軸正の向き、右がx軸正の向きになって描画されるので上がy軸正の向き、右がx軸正の向きになるように描画し直している。これより先の描画図は特に指定が無い限り図 3-1 と同様に描画しているものである。黒丸になっているところが量子化磁束線を示している。量子化磁束線が三角格子を組むように現れている。

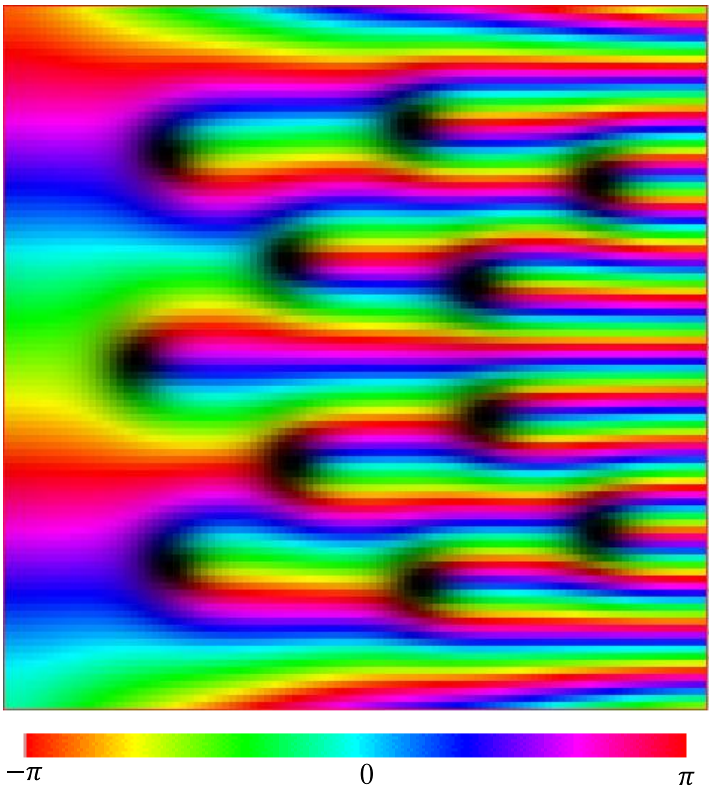

図 3-1　作成したプログラムの実行結果($J_y = 0$の場合)

次に、y 軸方向への電流$J_y = 1$を印加したときの結果を示す。その結果図 3-2 が得られた。左右両方から磁束線が侵入し、内部の磁束線とぶつかると消滅するような動きが右半分の領域で観察された。

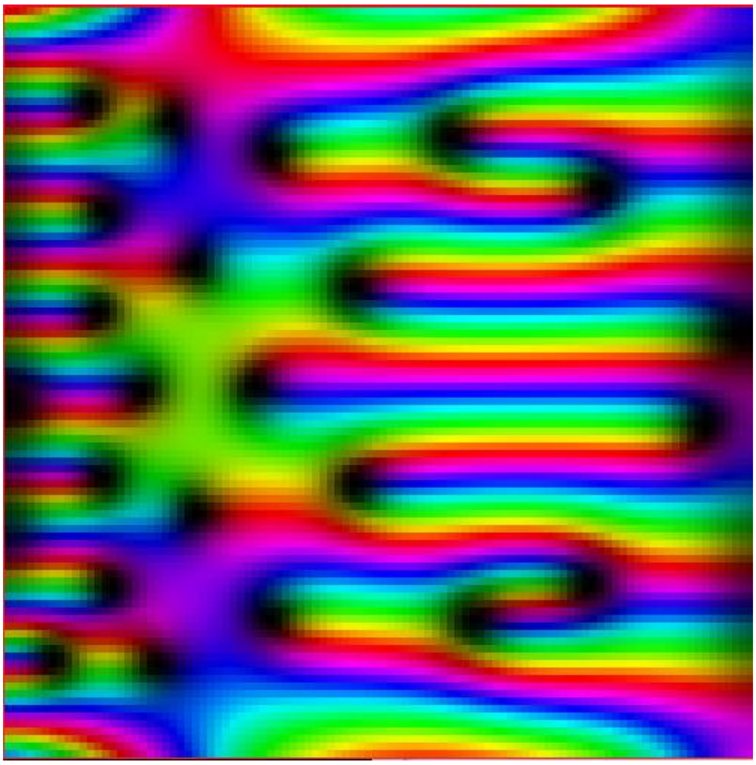

図 3-2　作成したプログラムの実行結果($J_y = 1$の場合)

3.2　考察および今後の課題

$J_y = 0$でシミュレーションを実行して長時間放置すると図 3-3 のようになり、量子化磁束線が移動をやめてその場にとどまるようになった。これは、超伝導体内に電流が流れておらず、磁場のみが加えられているのでローレンツ力がはたらかず、磁束線がその場にとどまっているものだと考えられる。

次に、$J_y = 1$でシミュレーションを実行して左からだけでなく、右から磁束線が侵入することを考える。電流をy軸正の向きに、磁場をz軸正の向き、つまり奥から手前側に印加した場合、磁束線はローレンツ力によりx軸正の向きへと一方通行で移動すると考えるのが自然である。これは、印加した磁場と電流の大きさの比率が関係しており、印加した磁場が電流と比較して大きい場合右側から磁束線が侵入する。[1]

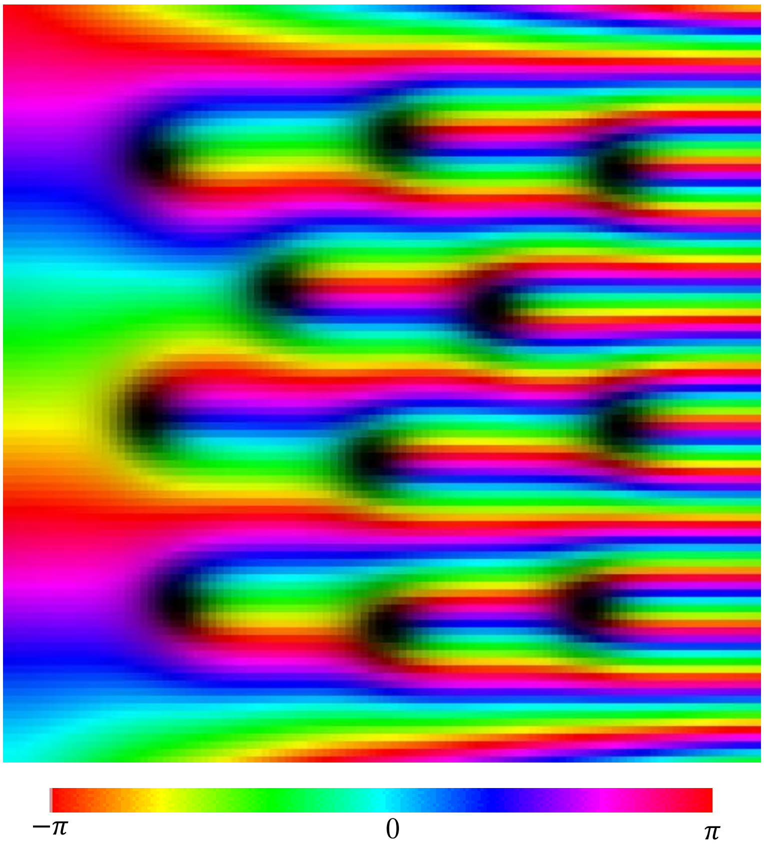

図 3-3 $J_y = 0$で長時間プログラムを実行した結果

今後の課題としては、3 次元に拡張した場合のプログラムの作成や、リンク変数の更新にオイラー法を用いて計算を行ったのでオーダパラメータだけでなくリンク変数の更新に AFI 法を適用して計算するものを作成することが挙げられる。また、それを 3 次元に拡張して数値的安定性の高さから先行研究[3]で行われたことを精度良く調査することが期待される。

第4章 結言

本研究では、超伝導体内での量子化磁束線の可視化を行った。ただし、通常用いられるオイラー法ではなく AFI 法により TDGL 方程式を用いた計算を行い量子化磁束線の可視化を行った。

オイラー法で実装するときと同様に、AFI 法は数学的にもシンプルで、プログラムによる計算が容易であることが本研究で理解できた。また、今後の課題として、先行研究[3]では、3 次元空間においてオイラー法でシミュレーションプログラムを作成していた。そして縦磁界下での磁束線の動きについて調査を行っていた。このことから 3 次元空間でも AFI 法によってオーダパラメータとゲージ場の時間変化を計算し、精度良く磁束線の動きを調査することが今後の課題となる。

謝辞

日頃の研究指導に私の指導教員である情報工学研究院物理情報工学研究系の小田部荘司教授に、超伝導の基礎知識に関しての指導に松下照夫名誉教授に、プログラム実装の指導に有明工業高等専門学校創造工学科の松野哲也教授にお世話になりました。

小田部先生からは研究テーマ決めから、研究する上での助言をしていただきました。他にもバングラデシュやインドネシアの大学生との学術的な交流や文化的な交流の機会を下さったり、研究以外にも貴重な機会にたくさん招いていただき大変感謝しています。

松下先生からは、この研究の土台となる超伝導の知識を熱心に教えてくださいました。心より感謝申し上げます。

松野先生からは、2 月半ばまでも熱心にプログラムや AFI 法の指導をしていただきました。また、松野先生が参加された研究発表会に呼んでいただき、本稿完成の一助となりました。本当にありがとうございました。

また、小田部研究室メンバーの方々には公私ともに助言をいただいたり、直接研究に関係しない日常のコミュニケーションなどが、自分の心の大きな支えとなりました。この場を借りて深くお礼申し上げます。

本研究は JSPS 科研費 19H00771 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] 松野哲也　有明工業高等専門学校創造工学科：私信による(2019 年)
[2] Cases Reas, Ben Fry 著、船田　巧　訳、Processing をはじめよう 第 2 版 (Make: PROJECTS)： 2016 年 9 月 7 日
[3]増田　嘉道　九州工業大学大学院情報工学府　先端情報工学専攻 電子情報工学分野 平成 27 年度修士学位論文　時間依存 Ginzburg-Landau 方程式を用いた縦磁界下の超伝導体内の磁束線に関する研究：　2016 年 2 月 9 日
[4]中田　真秀　論文紹介:Lie-Trotter-鈴木分解について
https://www.slideshare.net/NakataMaho/lietrottersuzuki-159710114
(参照 2020 年 2 月 15 日)