

令和 6 年度

卒業論文

AFI 数値積分法を用いた 2 次元の超伝導体内の
量子化磁束線の可逆運動の研究

温 謙

(学籍番号：226E0306)

九州工業大学 情報工学部

情報創成専攻

指導教員：小田部 莊司 教授

令和 6 年 2 月 7 日

目次

AFI 数値積分法を用いた 2 次元の超伝導体内の.....	0
量子化磁束線の可逆運動の研究.....	0
情報創成専攻.....	0
第 1 章 序論.....	3
1.1 はじめに.....	3
1.2 第一種超伝導体と第二種超伝導体.....	3
1.3 (Time-Dependent) Ginzburg-Landau 方程式.....	4
1.3.1 Ginzburg-Landau(GL) 方程式.....	4
1.3.2 Time-Dependent G-L (TDGL) 方程式.....	9
1.3.3 TDGL 方程式の簡易化.....	10
1.4 アフィン数値積分法(Affine Integrator; AFI).....	15
1.4.1 AFI のイメージ.....	15
1.4.2 1 次元空間において AFI 法の時間発展方程式の導出.....	16
1.4.3 2 次元空間において AFI 法の時間発展方程式の導出.....	21
1.5 可逆現象.....	23
1.6 粒子群最適化(Particle swarm optimization; PSO).....	26
1.7 研究の目的.....	27
第 2 章 実装方法.....	28
2.1 実装方法.....	28
2.2 2 次元超伝導体.....	28
2.3 規格化.....	28
2.3.1 空間に関する規格化.....	29
2.3.2 磁場の規格化.....	29
2.3.3 オーダーパラメーターと侵入長に関する規格化.....	29
2.3.4 可逆運動の非線型微分方程式の規格化.....	30
2.4 計算条件.....	31
2.4.1 臨界状態からの可逆運動.....	31
2.4.2 ゼロ磁場からの可逆運動.....	31
第 3 章 実装結果および考察.....	32
3.1 臨界状態からの可逆運動のシミュレーション.....	32
3.2 ゼロ磁場からの可逆運動のシミュレーション.....	34
3.2.1 ピンが 200 個の場合.....	34
3.2.2 ピンが 100 個の場合.....	36
第 4 章 結論.....	38

研究業績.....	39
参考文献.....	40

第 1 章 序論

1.1 はじめに

超伝導とは、ある物質を非常に低い温度まで冷却すると電気抵抗がゼロになる現象である。1911 年、オランダの Leiden 大学の物理学者である Heike Kamerlingh Onnes によって水銀が 4.2K の低温で電気抵抗がゼロになる現象が発見された。この物質のこの状態を超伝導状態と呼ばれ、今後、超伝導物理学の研究が始まった。

1933 年、Meissner と Ochsenfeld が超伝導体の磁気特性を研究していた時、超伝導体に外部磁界を加えても超伝導内部の磁束密度はゼロのまま変化しないという特性が発見された。この特性をマイスナー効果(完全反磁性)という。1935 年には F. London と H. London 兄弟によって、超伝導の 2 つの基本的な特性である電気ゼロ抵抗とマイスナー効果をよく説明したロンドン理論が提案された。

1950 年には V.L. Ginzburg と L.D. Landau によって新しい現象論的理論の説明も提案された。これが Ginzberg-Landau 理論である。G-L 理論に導入されたパラメーターによって、超伝導体は第 1 種超伝導体 (I) と第 2 種超伝導体 (II) に分類され、第 2 種超伝導体の電磁特性についても説明された。1957 年には Bardeen、Cooper、Schriffer らの超伝導の微視的理論 (略して BCS 理論) により超伝導発現機構が説明された。この理論は、物性物理学や物理学全体の発展に大きな影響を与えるだけでなく、超伝導研究を新たな段階へと導かれる。ついに 1986 年、ドイツの科学者 Johannes Georg Bednorz と Karl Alex Mueller が La-Ba-Cu-O 高温酸化物超伝導体を作成し、その臨界温度 T_c は 35K に達した、当時の多くの研究者は超伝導転移温度が 30K を超えることはできないという限界を超えた。この大きな発見は、超伝導の新しい研究分野である高温酸化物超伝導体を切り開くと同時に、世界中の研究者による高温酸化物超伝導材料の研究の急増をもたらした。

1.2 第一種超伝導体と第二種超伝導体

超伝導体は電気抵抗ゼロ、マイスナー効果の 2 つの性質を持っている。通常はマイスナー効果によって超伝導内部の磁束密度はゼロに保たれているが、外部磁場 H_e を高くしていき、臨界磁場 H_c を超えると、マイスナー効果が失われ常伝導状態となる。超伝導体は超伝導状態から常伝導状態へと遷移する状態の違いによって第一種超伝導体、第二種超伝導体の 2 種類に分類できる。

第一種超伝導体も第二種超伝導体も H_e が低い領域ではマイスナー効果を示す。第一種超伝導体は H_c 以上の H_e をかけるとマイスナー効果を完全に失い、常伝導状態へと遷移する。対して第二種超伝導体は下部臨界磁界 H_{c1} 以上の H_e をかけたとき、超伝導体が破壊され磁束

が一部侵入する。しかし、超伝導状態は完全には破壊されず、超伝導状態と常伝導状態が混在した状態となる。超伝導状態と常伝導状態が混在している、 H_e が H_{c1} 以上で上部臨界磁場 H_{c2} 未満における状態を混合状態と呼ぶ。 H_e を高くすると常伝導状態の範囲が増え、入り込む磁束線の数が増える。 H_e が H_{c2} 以上となると超伝導状態は完全に破壊され、常伝導状態に遷移する。このように、第一種超伝導体と第二種超伝導体は混合状態の有無で分類されている。

1.3 (Time-Dependent) Ginzburg-Landau 方程式

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

1.3.1 Ginzburg-Landau(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^[1]。G-L 理論は磁界が存在するときの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。^[2]

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ーパラメーター $\Psi = |\Psi|\exp(i\varphi)$ を定義する。そして Ψ は、次の関係を満たすと仮定する。

$$|\Psi|^2 \propto n_s \quad (1.1)$$

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。

$$E_s = E_n + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4 \quad (1.2)$$

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 次の展開係数であり、 $T < T_c$ 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($T \cong T_c$)において十分に小さいからである。

次に、磁界の存在が Ψ の空間的变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。

$$E_s = E_n + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0}(\nabla \times \mathbf{A})^2 + \frac{1}{2m^*}|(-i\hbar\nabla + e^*\mathbf{A})\Psi|^2 \quad (1.3)$$

ここで、 μ_0 は真空中の透磁率、 \mathbf{A} はベクトルポテンシャル、 m^* は超伝導電子の質量、 \hbar はディラック定数、 e^* は超伝導電子の電荷量、 i は虚数単位である。

Ψ と \mathbf{A} は(1.3)式の E_s が最小なるように決定される。よって Ψ の共役複素数 Ψ^* と \mathbf{A} について

変分法を適用する。

$$\frac{\delta E_s}{\delta \Psi^*} = \frac{\partial E_s}{\partial \Psi^*} - \left[\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \Psi^*} \right] = 0 \quad (1.4)$$

$$\frac{\delta E_s}{\delta \mathbf{A}} = \frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{A}} - \left[\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \mathbf{A}} \right] = 0 \quad (1.5)$$

まず、(1.4)式について解く。 E_s を Ψ^* で偏微分すると以下のようなになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_s}{\partial \Psi^*} &= \frac{\partial}{\partial \Psi^*} \left[E_n + \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m^*} |(-i\hbar \nabla + e^* \mathbf{A})\Psi|^2 \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial \Psi^*} \left[E_n + \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m^*} \{ \hbar^2 \nabla \Psi \cdot \nabla \Psi^* + e^{*2} \mathbf{A}^2 \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \mathbf{A} \right. \\ &\quad \left. \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \} \right] \\ &= 0 + \alpha \Psi + \beta \Psi |\Psi|^2 + 0 \\ &\quad + \frac{1}{2m^*} \{ 0 + e^{*2} \mathbf{A}^2 \Psi + i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot (0 - \nabla \Psi) \} \\ &= \alpha \Psi + \beta \Psi |\Psi|^2 + \frac{1}{2m^*} (e^{*2} \mathbf{A}^2 \Psi - i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi) \end{aligned} \quad (1.6)$$

続いて、 E_s を $\nabla \Psi^*$ で偏微分すると以下のようなになる。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \Psi^*} &= \nabla \cdot \frac{\partial}{\partial \nabla \Psi^*} \left[E_n + \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m^*} \{ \hbar^2 \nabla \Psi \cdot \nabla \Psi^* + e^{*2} \mathbf{A}^2 \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \mathbf{A} \right. \\ &\quad \left. \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \} \right] \\ &= 0 + 0 + 0 + 0 + \frac{1}{2m^*} \{ \hbar^2 \nabla \Psi + 0 + i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot (\Psi - 0) \} \\ &= \nabla \cdot \frac{1}{2m^*} (\hbar^2 \nabla \Psi + 0 + i\hbar e^* \mathbf{A} \Psi) \\ &= \frac{1}{2m^*} (\hbar^2 \nabla^2 \Psi + i\hbar e^* \nabla (\mathbf{A} \cdot \Psi)) \end{aligned} \quad (1.7)$$

ここで、 $\nabla(\mathbf{A} \cdot \Psi)$ に対して積の微分公式を用いると以下のようなになる。

$$\nabla \cdot \frac{\partial F_s}{\partial \nabla \Psi^*} = \frac{1}{2m^*} (\hbar^2 \nabla^2 \Psi + i\hbar e^* (\nabla \cdot \mathbf{A}) \Psi + i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi) \quad (1.8)$$

クーロンゲージ $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ より以下のようになる。

$$\nabla \cdot \frac{\partial F_s}{\partial \nabla \Psi^*} = \frac{1}{2m^*} (\hbar^2 \nabla^2 \Psi + i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi) \quad (1.9)$$

(1.6)式と(1.9)式から(1.4)式は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \alpha \Psi + \beta \Psi |\Psi|^2 + \frac{1}{2m^*} (e^{*2} \mathbf{A}^2 \Psi - i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi) \\ - \frac{1}{2m^*} (\hbar^2 \nabla^2 \Psi + i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi) = 0 \end{aligned} \quad (1.10)$$

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

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

因数分解すると最終的に次のようになる。

$$\alpha \Psi + \beta \Psi |\Psi|^2 + \frac{1}{2m^*} (-i\hbar \nabla + e^* \mathbf{A})^2 \Psi = 0 \quad (1.11)$$

次に、(1.5)式について解く。 E_s を \mathbf{A} で偏微分する部分を考える。 \mathbf{A} はベクトルであるので、スカラー E_s を \mathbf{A} で偏微分したものを次のように要素ごとに表現できる。

$$\frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{A}} = \frac{\partial E_s}{\partial A_x} \mathbf{i}_x + \frac{\partial E_s}{\partial A_y} \mathbf{i}_y + \frac{\partial E_s}{\partial A_z} \mathbf{i}_z \quad (1.12)$$

A_x, A_y, A_z はそれぞれ \mathbf{A} の x, y, z 成分である。ここで(1.12)式の x 成分に注目すると以下のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_s}{\partial A_x} &= \frac{\partial}{\partial A_x} \left[E_n + \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m^*} \left\{ \begin{array}{l} +\hbar^2 \nabla \Psi \cdot \nabla \Psi^* \\ +e^{*2} \mathbf{A}^2 \Psi \Psi^* \\ +i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \end{array} \right\} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial A_x} \left[0 + 0 + 0 + \frac{1}{2\mu_0} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m^*} \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ +e^{*2} \mathbf{A}^2 \Psi \Psi^* \\ +i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \end{array} \right\} \right] \\ &= \frac{1}{2\mu_0} \frac{\partial}{\partial A_x} (\nabla \times \mathbf{A})^2 + \frac{1}{2m^*} \frac{\partial}{\partial A_x} \left\{ \begin{array}{l} e^{*2} \mathbf{A}^2 \Psi \Psi^* \\ +i\hbar e^* \mathbf{A} \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (1.13)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\mu_0} \frac{\partial}{\partial A_x} \left\{ \begin{aligned} &+ \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right)^2 \\ &+ \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right)^2 \\ &+ \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right)^2 \end{aligned} \right\} \\
&+ \frac{1}{2m^*} \frac{\partial}{\partial A_x} \left\{ \begin{aligned} &+ e^{*2} (A_x^2 + A_y^2 + A_z^2) \Psi \Psi^* \\ &+ i\hbar e^* \begin{pmatrix} +A_x \cdot \mathbf{i}_x \\ +A_y \cdot \mathbf{i}_y \\ +A_z \cdot \mathbf{i}_z \end{pmatrix} \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \end{aligned} \right\} \\
&= \frac{1}{2\mu_0} (0 + 0 + 0) + \frac{1}{2m^*} \left\{ \begin{aligned} &+ e^{*2} (2A_x + 0 + 0) \Psi \Psi^* \\ &+ i\hbar e^* \begin{pmatrix} +1 \cdot \mathbf{i}_x \\ +0 \cdot \mathbf{i}_y \\ +0 \cdot \mathbf{i}_z \end{pmatrix} \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \end{aligned} \right\} \\
&= \frac{1}{2m^*} \{ 2e^{*2} A_x \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \mathbf{i}_x \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \}
\end{aligned}$$

y成分、z成分も(1.13)式と同様に変形できる。

$$\frac{\partial E_s}{\partial A_y} = \frac{1}{2m^*} \{ 2e^{*2} A_y \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \mathbf{i}_y \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \} \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial E_s}{\partial A_z} = \frac{1}{2m^*} \{ 2e^{*2} A_z \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \mathbf{i}_z \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \} \quad (1.15)$$

(1.13)式、(1.14)式、(1.15)式から得られる $\frac{\partial E_s}{\partial A_x}$, $\frac{\partial E_s}{\partial A_y}$, $\frac{\partial E_s}{\partial A_z}$ をすべて(1.12)式に代入すると以下

のようになる。

$$\frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{A}} = \frac{1}{2m^*} \left[\begin{aligned} &+ \{ 2e^{*2} A_x \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \mathbf{i}_x \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \} \mathbf{i}_x \\ &+ \{ 2e^{*2} A_y \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \mathbf{i}_y \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \} \mathbf{i}_y \\ &+ \{ 2e^{*2} A_z \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \mathbf{i}_z \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \} \mathbf{i}_z \end{aligned} \right] \quad (1.16)$$

成分をまとめると次のようになる。

$$\frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{A}} = \frac{1}{2m^*} \{ 2e^{*2} \mathbf{A} \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \} \quad (1.17)$$

続いて、 E_s を $\nabla \mathbf{A}$ で偏微分したのも要素ごとに表現できる。

$$\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \mathbf{A}} = \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_x} \mathbf{i}_x + \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_y} \mathbf{i}_y + \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_z} \mathbf{i}_z \quad (1.18)$$

ここで、(1.18)式のx成分に注目すると以下のように変形できる。

$$\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_x} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \frac{\partial A_x}{\partial x}} + \frac{\partial}{\partial y} \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \frac{\partial A_x}{\partial y}} + \frac{\partial}{\partial z} \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \frac{\partial A_x}{\partial z}} \quad (1.19)$$

ここで、 E_s のうち微分された A_x を含むのは、ローテーションを持つ項すなわち(1.3)式でいうところの右辺第4項だけであるので、それ以外の項は0となり、(1.19)式は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \frac{\partial F_s}{\partial \nabla A_x} &= \frac{1}{2\mu_0} \frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \frac{\partial A_x}{\partial x}} \left\{ \begin{array}{l} + \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right)^2 \\ + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right)^2 \\ + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right)^2 \end{array} \right\} \\ &+ \frac{1}{2\mu_0} \frac{\partial}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \frac{\partial A_x}{\partial y}} \left\{ \begin{array}{l} + \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right)^2 \\ + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right)^2 \\ + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right)^2 \end{array} \right\} \\ &+ \frac{1}{2\mu_0} \frac{\partial}{\partial z} \cdot \frac{\partial}{\partial \frac{\partial A_x}{\partial z}} \left\{ \begin{array}{l} + \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right)^2 \\ + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right)^2 \\ + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right)^2 \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (1.20)$$

$\frac{\partial A_x}{\partial x}, \frac{\partial A_x}{\partial y}, \frac{\partial A_x}{\partial z}$ による偏微分を行うと次のようになる。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_x} &= \frac{1}{2\mu_0} \frac{\partial}{\partial x} \cdot \begin{pmatrix} +0 \\ +0 \\ +0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2\mu_0} \frac{\partial}{\partial y} \cdot \left\{ \begin{array}{l} +0 \\ +0 \\ +2 \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) (-1) \end{array} \right\} \\ &+ \frac{1}{2\mu_0} \frac{\partial}{\partial z} \cdot \left\{ \begin{array}{l} +0 \\ + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) (+1) \\ +0 \end{array} \right\} \\ &= -\frac{1}{\mu_0} \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right\} \\ &= -\frac{1}{\mu_0} \left\{ \frac{\partial}{\partial y} (\text{rot } \mathbf{A}|_z) - \frac{\partial}{\partial z} (\text{rot } \mathbf{A}|_y) \right\} \end{aligned} \quad (1.21)$$

$$= -\frac{\text{rot}(\text{rot} \mathbf{A})|_x}{\mu_0}$$

y成分、z成分も(1.21)式と同様に变形できる。

$$\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_y} = -\frac{\text{rot}(\text{rot} \mathbf{A})|_y}{\mu_0} \quad (1.22)$$

$$\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_z} = -\frac{\text{rot}(\text{rot} \mathbf{A})|_z}{\mu_0} \quad (1.23)$$

(1.21)式、(1.22)式、(1.23)式から得られる $\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_x}$, $\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_y}$, $\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla A_z}$ をすべて(1.18)式に代入すると以下のようにになる。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \mathbf{A}} &= -\frac{\text{rot}(\text{rot} \mathbf{A})|_x}{\mu_0} \mathbf{i}_x - \frac{\text{rot}(\text{rot} \mathbf{A})|_y}{\mu_0} \mathbf{i}_y - \frac{\text{rot}(\text{rot} \mathbf{A})|_z}{\mu_0} \mathbf{i}_z \\ &= -\frac{\text{rot}(\text{rot} \mathbf{A})}{\mu_0} \end{aligned} \quad (1.24)$$

(1.17)式と(1.24)式から(1.5)式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m^*} \{2e^{*2} \mathbf{A} \Psi \Psi^* + i\hbar e^* \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)\} + \frac{\text{rot}(\text{rot} \mathbf{A})}{\mu_0} &= 0 \\ \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{i\hbar e^*}{2m^*} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^*} |\Psi|^2 \mathbf{A} \end{aligned} \quad (1.25)$$

よって(1.4)式と(1.5)式は、次の2式になる。

$$\frac{1}{2m^*} (-i\hbar \nabla + e^* \mathbf{A})^2 \Psi + \alpha \Psi + \beta |\Psi|^2 \Psi = 0 \quad (1.11) \text{再掲}$$

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{i\hbar e^*}{2m^*} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^*} |\Psi|^2 \mathbf{A} \quad (1.25) \text{再掲}$$

これら(1.11)式と(1.25)式を、G-L方程式と呼ぶ。

1.3.2 Time-Dependent G-L (TDGL) 方程式

Time-Dependent G-L(TDGL)方程式は、G-L方程式に時間依存性を付与したものである。

(1.4)及び(1.5)式に対して時間発展する場合を考えると、以下の2式となる。

$$\frac{\delta E_s}{\delta \Psi^*} = \frac{\partial E_s}{\partial \Psi^*} - \left[\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \Psi^*} \right] = -\gamma \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1.26)$$

$$\frac{\delta E_s}{\delta \mathbf{A}} = \frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{A}} - \left[\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \mathbf{A}} \right] = -\mathbf{v} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.27)$$

ここで、 γ と \mathbf{v} はそれぞれ Ψ と \mathbf{A} の時定数である。さらにゲージ変換を与えると次のように

なる。

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rightarrow \left(\hbar \frac{\partial}{\partial t} + ie^* V \right) \Psi \quad (1.28)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla V \quad (1.29)$$

ここで、 V はスカラーポテンシャルである。(1.28)、(1.29)式を(1.26)、(1.27)式それぞれに代入すると最終的に次のようになる。

$$\gamma \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} + ie^* V \Psi \right) + \frac{1}{2m^*} (-i\hbar \nabla + e^* \mathbf{A})^2 \Psi + \alpha \Psi + \beta |\Psi|^2 \Psi = 0 \quad (1.30)$$

$$\nu \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla V \right) + \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} + \frac{i\hbar e^*}{2m^*} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^*} |\Psi|^2 \mathbf{A} = 0 \quad (1.31)$$

1.3.3 TDGL 方程式の簡易化

本研究ではTDGL方程式を数値解析するが、(1.30)、(1.31)式をそのまま解くのは困難であるため、細線近似と規格化による2つの簡易化を行う。

本研究の数値解析では、 \mathbf{A} は時間に対して一定に与えるから(1.31)式の左辺第1項の時間偏微分が0となる。次に(1.31)、(1.32)に対して規格化を行う。超伝導体のコヒーレンス長 ξ と磁界侵入長 λ は熱力学的臨界磁界を H_c として以下の2式のように表す。

$$\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*|\alpha|}} \quad (1.32)$$

$$\lambda = \frac{e^* \mu_0 H_c}{\sqrt{m^*|\alpha|}} \quad (1.33)$$

そして、以下の式に記す規格化を行う。

$$\xi \nabla \rightarrow \nabla \quad (1.34)$$

$$\frac{|\alpha|}{\gamma} t \rightarrow t \quad (1.35)$$

$$\frac{e^* \gamma}{|\alpha|} V \rightarrow V \quad (1.36)$$

$$\frac{\lambda}{\sqrt{2}\mu_0 H_c} \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} \quad (1.37)$$

$$\left(\frac{\beta}{|\alpha|}\right)^{\frac{1}{2}} \Psi \rightarrow \Psi \quad (1.38)$$

(1.30)式の規格化を行う。(1.30)式の左辺第1項は、次のようになる。

$$\begin{aligned} & \gamma \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} + ie^* V \Psi \right) \\ \rightarrow & \gamma \left[\frac{\partial}{\partial \left(\frac{\gamma}{|\alpha|} t \right)} \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi + ie^* \left(\frac{|\alpha|}{e^* \gamma} V \right) \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi \right] \\ & \gamma \left[\left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial \left(\frac{\gamma}{|\alpha|} t \right)} + i \frac{|\alpha|}{\gamma} \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} V \Psi \right] \\ = & \gamma \left[\frac{1}{\gamma} |\alpha| \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{1}{\gamma} |\alpha| \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} i V \Psi \right] \\ = & |\alpha| \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial t} + i V \Psi \right] \end{aligned} \quad (1.39)$$

(1.30)式の左辺第2項は、次のようになる。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m^*} (-i\hbar \nabla + e^* \mathbf{A})^2 \Psi \\ \rightarrow & \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar \frac{1}{\xi} \nabla - e^* \frac{\sqrt{2}\mu_0 H_c}{\lambda} \mathbf{A} \right)^2 \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi \\ = & \left(-i\hbar \frac{1}{\sqrt{2m^* \xi}} \nabla - e^* \frac{\sqrt{2}\mu_0 H_c}{\sqrt{2m^* \lambda}} \mathbf{A} \right)^2 \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi \\ = & \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \left(-i\hbar \frac{\sqrt{2m^* |\alpha|}}{\sqrt{2m^* \hbar}} \nabla - e^* \frac{\sqrt{2}\mu_0 H_c \sqrt{m^* |\alpha|}}{\sqrt{2m^* e^* \mu_0 H_c}} \mathbf{A} \right)^2 \Psi \\ = & |\alpha| \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} (-i\nabla - \mathbf{A})^2 \Psi \end{aligned} \quad (1.40)$$

(1.30)式の左辺第3項は、次のようになる。

$$\alpha\Psi \rightarrow \alpha \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi \quad (1.41)$$

(1.30)式の左辺第4項は、次のようになる。

$$\beta|\Psi|^2\Psi \rightarrow \beta \left| \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi \right|^2 \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi \quad (1.42)$$

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

(1.39)式から(1.42)式をまとめると、(1.30)式は最終的に次のようになる。

$$\alpha \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial\Psi}{\partial t} + iV\Psi + (-i\nabla - \mathbf{A})^2\Psi - \Psi + |\Psi|^2\Psi \right] = 0 \quad (1.43)$$

さらに、(1.43)式の両辺を $\alpha(|\alpha|/\beta)^{1/2}$ で除算すると、次のようになる。

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} + iV\Psi + (-i\nabla - \mathbf{A})^2\Psi - \Psi + |\Psi|^2\Psi = 0 \quad (1.44)$$

(1.31)式も同様に簡易化する。(1.31)式左辺第一項は、 \mathbf{A} が一定として次のようになる。

$$\begin{aligned} v\nabla V &\rightarrow v \frac{1}{\xi} \nabla \frac{|\alpha|}{e^*\gamma} V \\ &= \frac{|\alpha|}{\xi e^*\gamma} v\nabla V \end{aligned} \quad (1.45)$$

$$= \frac{\sqrt{2m^*|\alpha|}}{\hbar} \cdot \frac{|\alpha|}{e^*\gamma} v\nabla V$$

(1.31)式左辺第2項は次のようになる。

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \rightarrow \frac{1}{\mu_0} \cdot \frac{1}{\xi} \nabla \times \frac{1}{\xi} \nabla \times \frac{\sqrt{2}\mu_0 H_c}{\lambda} \mathbf{A} \quad (1.46)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\sqrt{2}H_c}{\xi^2\lambda} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \\
&= \frac{2m^*|\alpha|}{\hbar^2} \cdot \frac{\sqrt{m^*|\alpha|}}{e^*\mu_0 H_c} \cdot \sqrt{2}H_c \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \\
&= \frac{(2m^*|\alpha|)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^2 e^* \mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}
\end{aligned}$$

(1.31)式左辺第3項は次のようになる。

$$\begin{aligned}
&\frac{i\hbar e^*}{2m^*} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \\
&\rightarrow \frac{i\hbar e^*}{2m^*} \left\{ \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi^* \frac{1}{\xi} \nabla \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi - \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi \frac{1}{\xi} \nabla \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi^* \right\} \\
&= \frac{i\hbar e^*}{2m^*} \cdot \frac{|\alpha|}{\beta} \cdot \frac{1}{\xi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \\
&= \frac{i\hbar e^*}{2m^*} \cdot \frac{|\alpha|}{\beta} \cdot \frac{\sqrt{2m^*|\alpha|}}{\hbar} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \\
&= \frac{ie^*|\alpha|\sqrt{2m^*|\alpha|}}{2m^*\beta} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)
\end{aligned} \tag{1.47}$$

(1.31)式左辺第4項は次のようになる。

$$\frac{e^{*2}}{m^*} |\Psi|^2 \mathbf{A} \rightarrow \frac{e^{*2}}{m^*} \left| \left(\frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi \right|^2 \frac{\sqrt{2}\mu_0 H_c}{\lambda} \mathbf{A} \tag{1.48}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e^{*2}}{m^*} \cdot \frac{|\alpha|}{\beta} \cdot \frac{\sqrt{2}\mu_0 H_c}{\lambda} |\Psi|^2 \mathbf{A} \\
&= \frac{e^{*2}}{m^*} \cdot \frac{|\alpha|}{\beta} \cdot \sqrt{2}\mu_0 H_c \cdot \frac{\sqrt{m^*|\alpha|}}{e^* \mu_0 H_c} |\Psi|^2 \mathbf{A} \\
&= \frac{e^* |\alpha| \sqrt{2m^*|\alpha|}}{m^* \beta} |\Psi|^2 \mathbf{A}
\end{aligned}$$

(1.45)式から(1.48)式をまとめると、(1.31)式は最終的に次のようになる。

$$\frac{\sqrt{2m^*|\alpha|}}{\hbar} \cdot \frac{|\alpha|}{e^* \gamma} \nu \nabla \nabla V + \frac{(2m^*|\alpha|)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^2 e^* \mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \tag{1.49}$$

$$+ \frac{ie^* |\alpha| \sqrt{2m^*|\alpha|}}{2m^* \beta} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e^* |\alpha| \sqrt{2m^*|\alpha|}}{m^* \beta} |\Psi|^2 \mathbf{A} = 0$$

さらに、(1.49)式の両辺を $|\alpha| \sqrt{2m^*|\alpha|}$ で除算すると、次のようになる。

$$\frac{1}{\hbar e^* \gamma} \nu \nabla \nabla V + \frac{2m^*}{\hbar^2 e^* \mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \tag{1.50}$$

$$+ - \frac{e^*}{m^* \beta} \left\{ |\Psi|^2 \mathbf{A} - \frac{i}{2} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \right\} = 0$$

さらに、(1.50)式を簡単化するために以下の関係を用いる。

$$\mathbf{J} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \tag{1.51}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \tag{1.52}$$

ここで、 \mathbf{J} は超伝導体に流れる電流であり、(1.52)式は電流の発散を表す式である。(1.31)式の両辺で ∇ との内積を取ると、(1.51)式、(1.52)式から、次のような式が得られる。

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\hbar e^* \gamma} \nu \nabla \nabla V - \frac{e^*}{m^* \beta} \left\{ |\Psi|^2 \mathbf{A} - \frac{i}{2} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \right\} \right] = 0 \tag{1.53}$$

$$\leftrightarrow -\frac{m^*\beta}{\hbar e^2 \gamma} v \nabla^2 V = \frac{i}{2} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) - \nabla \cdot (|\Psi|^2 \mathbf{A})$$

$$\leftrightarrow \sigma \nabla^2 V = \frac{i}{2} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) - \nabla \cdot (|\Psi|^2 \mathbf{A})$$

ここで、

$$-\frac{m^*\beta}{\hbar e^2 \gamma} v \rightarrow \sigma \quad (1.54)$$

とする。(1.53)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、(1.44)式および(1.53)式を解くことによって超伝導体の解析を行う。

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + iV\Psi + (-i\nabla - \mathbf{A})^2 \Psi - \Psi + |\Psi|^2 \Psi = 0 \quad (1.44)$$

1.4 アフィン数値積分法(Affine Integrator; AFI)

アフィン変換数値積分法(AFI)^{[3][4][5]}とは、近年提案された陽の数値積分法である。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 はラプラシアン項に関して無条件安定であり、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は、AFI 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 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。数学的に単純なスキームであり、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。また必要とされる記憶領域は最小であり、付加的なワーキングメモリは必要とされないことも AFI の特徴である。

1.4.1 AFI 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プロ

ック行列が支配する。^[6]

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 スキームは 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。

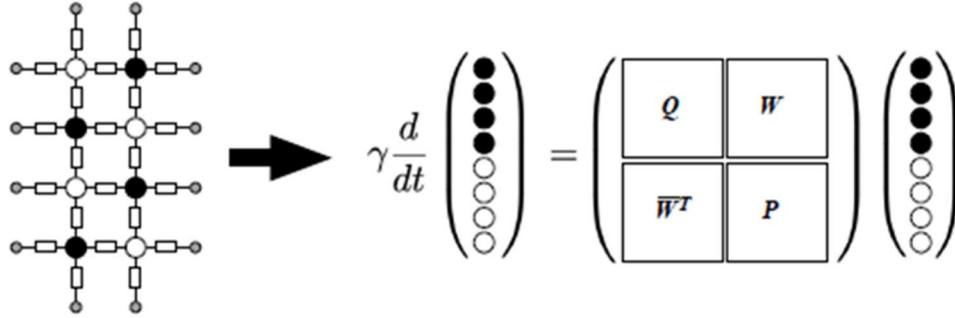


図 1-1 空間に関する離散化のイメージ

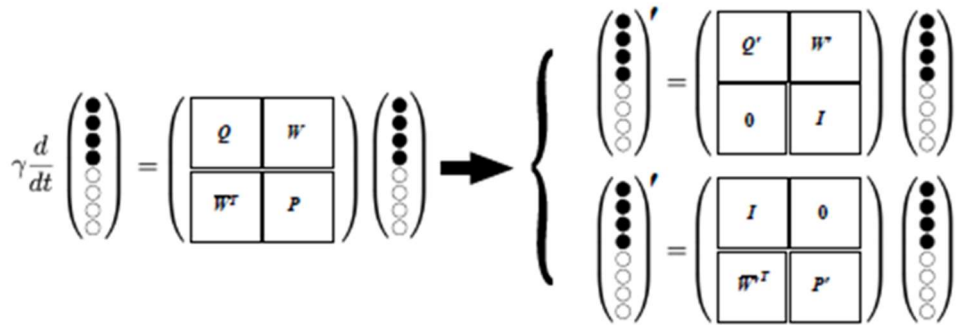


図 1-2 時間に関する離散化のイメージ

1.4.2 1次元空間において AFI 法の時間発展方程式の導出

1次元空間での AFI 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。本研究で用いる基礎方程式は TDGL 方程式である (1.55) 式とする。

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - i\mathbf{A})^2 \psi - \alpha \psi - \beta |\psi|^2 \psi \quad (1.55)$$

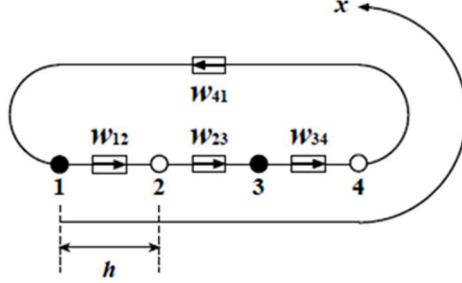
1次元空間では(1.56)式が(1.55)式で適用されており、ベクトルポテンシャルは固定されていると考える。

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \mathbf{A} = A_x \quad (1.56)$$

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。

$$w_{ij} = \exp(i\theta_{ij}), \quad \theta_{ij} = -hA_x \left(\frac{x_i + x_j}{2} \right), \quad i, j = 1, 2, 3, 4. \quad (1.57)$$

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。



1次元空間での周期的境界条件下の

図 1-3

格子点とリンク変数のインデックスの定義

(1.55)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(1.58)式で表される連立微分方程式が得られる。

$$\begin{cases} \gamma \frac{d\psi_1}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{12}\psi_2 + \bar{w}_{41}\psi_4 - 2\psi_1) - \alpha_1\psi_1 - \beta_1|\psi_1|^2\psi_1 \\ \gamma \frac{d\psi_3}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{34}\psi_4 + \bar{w}_{23}\psi_2 - 2\psi_3) - \alpha_3\psi_3 - \beta_3|\psi_3|^2\psi_3 \\ \gamma \frac{d\psi_2}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{23}\psi_3 + \bar{w}_{12}\psi_1 - 2\psi_2) - \alpha_2\psi_2 - \beta_2|\psi_2|^2\psi_2 \\ \gamma \frac{d\psi_4}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{41}\psi_1 + \bar{w}_{34}\psi_3 - 2\psi_4) - \alpha_4\psi_4 - \beta_4|\psi_4|^2\psi_4 \end{cases} \quad (1.58)$$

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(1.59)式で表せる。

$$\begin{aligned} & \gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 - U_1 h^2 & 0 & w_{12} & w_{14} \\ 0 & -2 - U_3 h^2 & w_{32} & w_{34} \\ \bar{w}_{12} & \bar{w}_{32} & -2 - U_2 h^2 & 0 \\ \bar{w}_{14} & \bar{w}_{34} & 0 & -2 - U_4 h^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.59)$$

ここで、

$$U_i = \alpha_i + \beta_i |\tilde{\psi}_i|^2, i = 1, 2, 3, 4. \quad (1.60)$$

とおく。 $\tilde{\psi}_i$ は ψ_i の推定値である。理由は後述する。

また、

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_3 \end{pmatrix}, \mathbf{p} = \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (1.61)$$

$$\sigma_i = 2 + U_i h^2, i = 1, 2, 3, 4. \quad (1.62)$$

とおく。また、

$$\begin{aligned} D(-\sigma_Q) &= \begin{pmatrix} -\sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_3 \end{pmatrix}, D(-\sigma_P) = \begin{pmatrix} -\sigma_2 & 0 \\ 0 & -\sigma_4 \end{pmatrix}, W \\ &= \begin{pmatrix} w_{12} & w_{14} \\ w_{32} & w_{34} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.63)$$

とすると、(1.59)式は(1.64)式で表せる。

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} D(-\sigma_Q) & W \\ \bar{W}^T & D(-\sigma_P) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.64)$$

時間推進演算子 \hat{A} を用いると(1.64)式は(1.65)式で表される。また、 \hat{A} は(1.66)で定義される。

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.65)$$

$$\hat{A} = \frac{1}{h^2} \sum_{i \in \{1, 2, 3, 4\}} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j \in \{1, 2, 3, 4\}} w_{ij} \psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \psi_i} \quad (1.66)$$

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

$$\hat{A} = \hat{A}_Q + \hat{A}_P \quad (1.67)$$

ただし、

$$\hat{A}_Q = \frac{1}{h^2} \sum_{i \in Q} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \psi_i} \quad (1.68)$$

$$\hat{A}_P = \frac{1}{h^2} \sum_{i \in P} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j \in Q} w_{ij} \psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \psi_i} \quad (1.69)$$

である。また、 $w_{ij} = \bar{w}_{ji}$ である。

次に、(1.65)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 、 $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ 、 $(\mathbf{q}', \mathbf{p}') = (\mathbf{q}(t + \tau), \mathbf{p}(t + \tau))$ として時間発展方程式の(1.70)式が得られる。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q}' \\ \mathbf{p}' \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} (\hat{A}_Q + \hat{A}_P)\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.70)$$

指数関数演算子は Lie-Trotter-Suzuki(LTS)分解によって(1.71)式のように近似できる。

LTS 分解とは、 $\exp x(A+B)$ の形のものを(1.72)式のように積に分解する方法の1つである。LTS 分解でどのように分解できるかは後述する。また、 O は誤差オーダー部分である。

$$\begin{aligned} & \exp\left(\frac{\tau}{\gamma}(\hat{A}_Q + \hat{A}_P)\right) \\ &= \begin{cases} \exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right) + O(\tau^2) \\ \exp\left(\frac{\tau}{2\gamma}\hat{A}_Q\right)\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)\exp\left(\frac{\tau}{2\gamma}\hat{A}_Q\right) + O(\tau^3) \\ \dots \end{cases} \end{aligned} \quad (1.71)$$

$$\exp x(A+B) = \left(\exp \frac{x}{n} A \exp \frac{x}{n} B\right)^n + O\left(\frac{\tau^2}{n}\right) \quad (1.72)$$

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

まず、ここで演算子 \hat{A}_Q を $\psi_i (i \in Q)$ に1回作用させる。

$$\hat{A}_Q \psi_i = \frac{1}{h^2} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j \right), \quad i \in Q \quad (1.73)$$

次に、演算子 \hat{A}_Q を $\psi_i (i \in Q)$ に2回作用させる。

$$\hat{A}_Q^2 \psi_i = \left(\frac{-\sigma_i}{h^2}\right)^2 \left(\psi_i - \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j \right), \quad i \in Q \quad (1.74)$$

従って、演算子 \hat{A}_Q を $\psi_i (i \in Q)$ に m 回(m は正の整数)作用させると

$$\hat{A}_Q^m \psi_i = \left(\frac{-\sigma_i}{h^2}\right)^m \left(\psi_i - \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j \right), \quad i \in Q, m \geq 1 \quad (1.75)$$

となる。

ゆえに、マクローリン展開をすると

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_Q\right) \psi_i &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_Q\right)^m \psi_i = \psi_i + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{\tau}{\gamma}\right)^m \hat{A}_Q^m \psi_i \\
&= \psi_i + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{\tau}{\gamma}\right)^m \left(\frac{-\sigma_i}{h^2}\right)^m \left(\psi_i - \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j\right) \\
&= \psi_i + \left(\psi_i - \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j\right) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{-\sigma_i \tau}{h^2 \gamma}\right)^m \\
&= \psi_i + \left(\psi_i - \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j\right) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{-\sigma_i \tau}{h^2 \gamma}\right)^m \\
&\quad - \left(\psi_i - \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j\right) \tag{1.76} \\
&= \psi_i \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{-\sigma_i \tau}{h^2 \gamma}\right)^m + \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j \left(1 - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{-\sigma_i \tau}{h^2 \gamma}\right)^m\right) \\
&= \exp\left(-\frac{\sigma_i \tau}{h^2 \gamma}\right) \psi_i + \frac{1 - \exp\left(-\frac{\sigma_i \tau}{h^2 \gamma}\right)}{\sigma_i} \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j \\
&= a_i \psi_i + b_i \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j, i \in Q
\end{aligned}$$

が得られる。ただし、

$$a_i = \exp\left(\frac{-\sigma_i \tau}{h^2 \gamma}\right), b_i = \frac{1 - a_i}{\sigma_i} \tag{1.77}$$

とおいた。(1.76)式は1次元空間における時間発展方程式である。また、

$$\hat{A}_Q \psi_i = 0, \quad i \in P \tag{1.78}$$

であるので、

$$\hat{A}_Q^m \psi_i = 0, \quad i \in P \tag{1.79}$$

であることがわかる。演算子 \hat{A}_P でも同様な計算を行うことで次のようになる。

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}_Q\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(a_Q) & D(b_Q)W \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \tag{1.80}$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)\begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ D(b_P)\bar{W}^T & D(a_P) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.81)$$

ここで、 I は単位行列であり、

$$\begin{aligned} D(a_Q) &= \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_3 \end{pmatrix}, D(b_Q) = \begin{pmatrix} b_1 & 0 \\ 0 & b_3 \end{pmatrix}, \\ D(a_P) &= \begin{pmatrix} a_2 & 0 \\ 0 & a_4 \end{pmatrix}, D(b_P) = \begin{pmatrix} b_2 & 0 \\ 0 & b_4 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.82)$$

とおいた。

(1.80)式と(1.81)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)が得られたことになる。

次に、(1.60)式の非線形項 $\beta_i|\tilde{\psi}_i|^2$ で、 ψ_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(1.83)式から(1.86)式で計算される。

$$\tilde{\psi}_1 = \frac{1}{2}(w_{12}\psi_2 + \bar{w}_{41}\psi_4) \quad (1.83)$$

$$\tilde{\psi}_3 = \frac{1}{2}(w_{34}\psi_4 + \bar{w}_{23}\psi_2) \quad (1.84)$$

$$\tilde{\psi}_2 = \frac{1}{2}(w_{23}\psi_3 + \bar{w}_{12}\psi_1) \quad (1.85)$$

$$\tilde{\psi}_4 = \frac{1}{2}(w_{41}\psi_1 + \bar{w}_{34}\psi_3) \quad (1.86)$$

注意する点として、 $\psi_i(i \in Q)$ 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構成が容易になる。

例を挙げると、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、(1.75)式において \hat{A}_Q をベクトル \mathbf{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 \mathbf{q} の要素に依存せず、ベクトル \mathbf{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。

1.4.3 2次元空間においてAFI法の時間発展方程式の導出

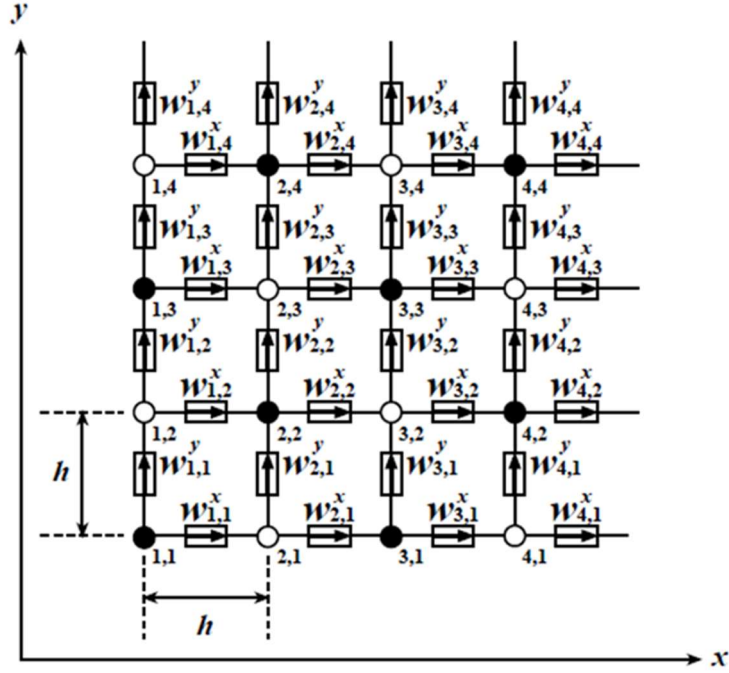
2次元空間でのAFI法の数値積分スキームを導出する。

基礎方程式は1次元空間で用いたものと同様に(1.55)式を用いる。ただし、

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}\right), \mathbf{A} = (A_x, A_y) \quad (1.87)$$

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。そうすることでダブルインデックスを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_{ij}^x と、y成分の w_{ij}^y 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。



2次元空間での周期的境界条件下の

図1-4

格子点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(1.88)式が得られる。

$$\gamma \frac{d\psi_{i,j}}{dt} \tag{1.88}$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left(w_{i,j}^x \psi_{i+1,j} + \bar{w}_{i-1,j}^x \psi_{i-1,j} + w_{i,j}^y \psi_{i,j+1} + \bar{w}_{i,j-1}^y \psi_{i,j-1} - 4\psi_{i,j} \right) - \alpha_{i,j} \psi_{i,j} - \beta_{i,j} |\psi_{i,j}|^2 \psi_{i,j}$$

ただし、

$$U_{i,j} = \alpha_{i,j} + \beta_{i,j} |\tilde{\psi}_{i,j}|^2 \tag{1.89}$$

$$\tilde{\psi}_{i,j} = \frac{1}{4} \left(w_{i,j}^x \psi_{i+1,j} + \bar{w}_{i-1,j}^x \psi_{i-1,j} + w_{i,j}^y \psi_{i,j+1} + \bar{w}_{i,j-1}^y \psi_{i,j-1} \right) \tag{1.90}$$

とおく。また、

$$\sigma_{i,j} = 4 + U_{i,j}h^2 \quad (1.91)$$

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)と定義している点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(1.80)式と(1.81)式、時間発展方程式の(1.76)式がそのまま用いることができる。数値積分スキームは図 1-4 の黒丸に対して(1.80)式、白丸に対して(1.81)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(1.92)式に示す。なお、従属変数 $\psi_{1,1}$ が時間発展した後のものを $\psi'_{1,1}$ とする。(1.76)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(1.76)式を用いて導出可能である。

$$\psi'_{1,1} = a_{1,1}\psi_{1,1} + b_{1,1}(w_{1,1}^x\psi_{2,1} + \bar{w}_{4,1}^x\psi_{4,1} + w_{1,1}^y\psi_{1,2} + \bar{w}_{1,4}^y\psi_{1,4}) \quad (1.92)$$

$$a_{1,1} = \exp(-\sigma_{1,1}\tau/h^2) \quad (1.93)$$

$$b_{1,1} = (1 - a_{1,1})/\sigma_{1,1} \quad (1.94)$$

$$\sigma_{1,1} = 4 + (\alpha_{1,1} + \beta_{1,1}|\tilde{\psi}_{1,1}|^2)h^2 \quad (1.95)$$

$$\tilde{\psi}_{1,1} = \frac{1}{4}(w_{1,1}^x\psi_{2,1} + \bar{w}_{4,1}^x\psi_{4,1} + w_{1,1}^y\psi_{1,2} + \bar{w}_{1,4}^y\psi_{1,4}) \quad (1.96)$$

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(1.97)式を得ることができる。

$$\psi'_{i,j} = a_{i,j}\psi_{i,j} \quad (1.97)$$

$$+ b_{i,j}(w_{i,j}^x\psi_{i+1,j} + \bar{w}_{i-1,j}^x\psi_{i-1,j} + w_{i,j}^y\psi_{i,j+1} + \bar{w}_{i,j-1}^y\psi_{i,j-1}) \quad (1.98)$$

$$a_{i,j} = \exp(-\sigma_{i,j}\tau/h^2) \quad (1.98)$$

$$b_{i,j} = (1 - a_{i,j})/\sigma_{i,j} \quad (1.99)$$

$$\sigma_{i,j} = 4 + (\alpha_{i,j} + \beta_{i,j}|\tilde{\psi}_{i,j}|^2)h^2 \quad (1.100)$$

$$\tilde{\psi}_{i,j} = \frac{1}{4}(w_{i,j}^x\psi_{i+1,j} + \bar{w}_{i-1,j}^x\psi_{i-1,j} + w_{i,j}^y\psi_{i,j+1} + \bar{w}_{i,j-1}^y\psi_{i,j-1}) \quad (1.101)$$

1.5 可逆現象

ここでは、超伝導体内の磁束線の可逆運動について説明する。^[7]

超伝導体内の不可逆現象はピン・ポテンシャル付近での磁束線の運動、その運動がピン・ポテンシャル内に限られ、臨界状態モデルによる記述に合わなくなることが予想される。

ここで、ある領域の磁束線がピン・ポテンシャル内の平衡状態にあるとする。単位体積当たりの磁束線が受ける力は以下ようになる。

$$F = -\alpha_L u \quad (1.102)$$

ここで、 u は平衡位置からずらす変位量、Labusch パラメーター α_L は磁束線が感じたピン・ポテンシャル。磁束線の変位方向を x 軸方向として、磁束密度 b の連続の式を時間に関して積分する。

$$\frac{du}{dx} = -\frac{b}{B} \quad (1.103)$$

ここで、 B は磁束密度の平衡値である。この変化により生じる Lorentz 力の変化分は以下のようになる。

$$F_L = -\frac{B}{\mu_0} \cdot \frac{db}{dx} \quad (1.104)$$

Lorentz 力とピン力との釣り合いにより(1.102)~(1.105)式から u を消去する。

$$F + F_L = 0 \quad (1.105)$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} = -\frac{\mu_0 \alpha_L}{B^2} b \quad (1.106)$$

したがって、超伝導体が $x \geq 0$ を占める場合には、磁束密度は以下のようになる。

$$b(x) = b(0) \exp\left(-\frac{x}{\lambda_0'}\right) \quad (1.107)$$

ここで、 λ_0' は Campbell の交流磁場の侵入深さと呼ばれる量である。

$$\lambda_0' = \frac{B}{(\mu_0 \alpha_L)^{1/2}} \quad (1.108)$$

臨界状態から増磁に転じた後の磁束分布の変化を図 1-5(a)に示す。一方、臨界状態モデルでは図 1-5(b)に示す。

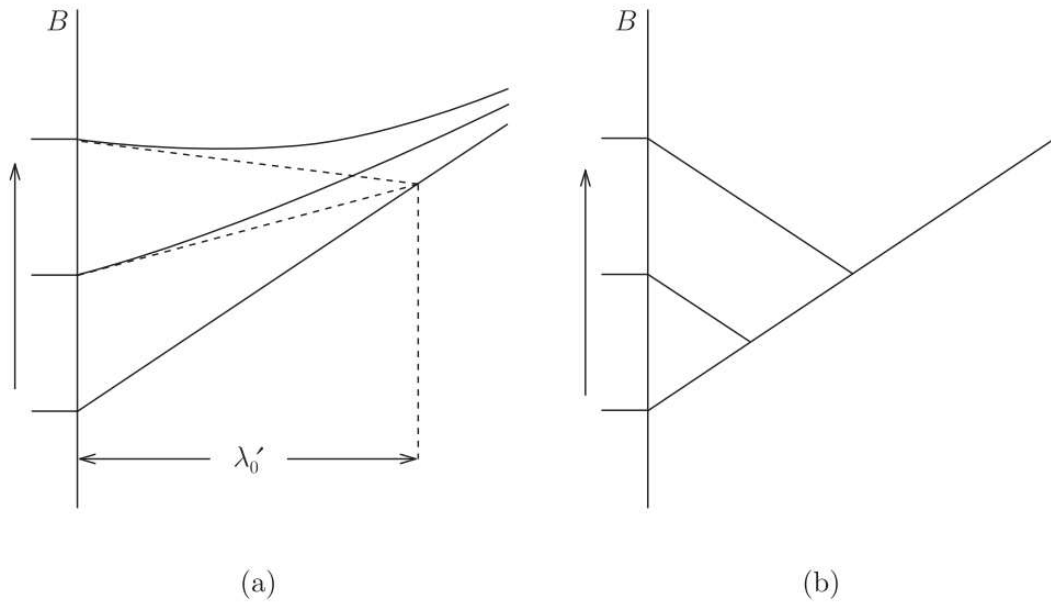


図 1-5 減磁過程の臨界状態から増磁に転じたときの超伝導体内の磁束分布の変化

初期状態からの変位量 u が小さい範囲ではピン力密度は以下ようになる。

$$F = -\alpha_L u + J_c B \quad (1.109)$$

したがって、Lorentz 力密度を得られる。

$$F_L = -\frac{B}{\mu_0} \cdot \frac{db}{dx} - J_c B \quad (1.110)$$

この二つの力の釣り合いの式から再び(1.107)式の解が得られる。ここで、ピン力密度-変位特性を以下のように表すことができる。

$$F = J_c B \left[1 - 2 \exp\left(-\frac{u}{2d_i}\right) \right] \quad (1.111)$$

ここで、 $B \cong \mu_0 H_e$ とする。 d_i は相互作用距離と呼ばれる量である。なお、

$$J_c B = \alpha_L d_i \quad (1.112)$$

と書けることから、(1.108)式より、相互作用距離 d_i を得られる。

$$d_i = \frac{\mu_0 J_c \lambda_0'^2}{B} \quad (1.113)$$

(1.103)式を用いて力の釣り合いの式から u を消去すると非線型微分方程式が得られる(図 1-6 参照)。

$$\frac{d^2 b}{dx^2} - \frac{b}{\lambda_0'^2} \left(1 + \frac{1}{2\mu_0 J_c} \cdot \frac{db}{dx} \right) = 0 \quad (1.114)$$

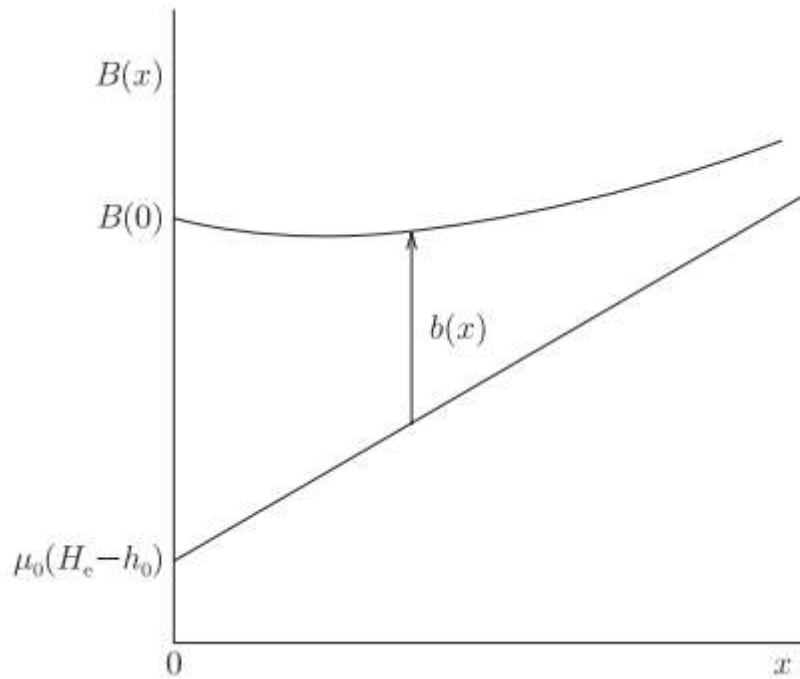


図 1-6 臨界状態(表面磁場 $H_e - h_0$)からの増磁による超伝導体内の磁束分布の変化

1.6 粒子群最適化(Particle swarm optimization; PSO)

ここでは、粒子群最適化について説明する。^[8]

粒子群最適化法は 1995 年に J. Kennedy と R. Eberhart により開発された、母集団型の確率的なメタヒューリスティクスの最適化手法である。PSO は鳥や魚などの群れを成して移動する生物の行動を模倣したアルゴリズムである。これらの群れを成す生物を粒子(Particle)としてモデル化し、粒子は最適化問題における解候補を表す。粒子群を多次元解空間に配置し、各粒子が他粒子との相互作用により探索を行うことで問題に対する近似解を求めることができる。

粒子群における i 番目の粒子(粒子 i)は、速度ベクトル v_i 、位置ベクトル x_i 、自身の探索過程における最良の位置ベクトル(Personal best solution; pbest) pb_i を持つ。また、粒子は粒子群の探索過程における最良の位置ベクトル(Global best solution; gbest) gb を共有する。 D は最適化問題の次元数を表す。

$$v_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD}) \quad (1.115)$$

$$x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD}) \quad (1.116)$$

$$pb_i = (pb_{i1}, pb_{i2}, \dots, pb_{iD}) \quad (1.117)$$

$$gb = (gb_1, gb_2, \dots, gb_D) \quad (1.118)$$

t ステップ目の粒子における j 次元目の速度と位置の更新式を表すことができる。

$$v_{ij}^{t+1} = wv_{ij}^t + c_1r_1(pb_{ij}^t - x_{ij}^t) + c_2r_2(gb_j^t - x_{ij}^t) \quad (1.119)$$

$$x_{ij}^{t+1} = x_{ij}^t + v_{ij}^{t+1} \quad (1.120)$$

ここで、 w は慣性速度定数、 c_1 、 c_2 はpbest、gbestそれぞれに対する加速度係数（Cognitive coefficient; c_1 、Social coefficient; c_2 ）、 r_1 、 r_2 は[0,1]の一様乱数を表す。粒子は図 1-7 および更新式に示すように自身の速度とpbest、gbestの影響を受けて探索を行い、最終的に全ての粒子がgbestに到達すると粒子は停止するため、探索が終了する。

また、粒子モデルを図 1-7 に示す。

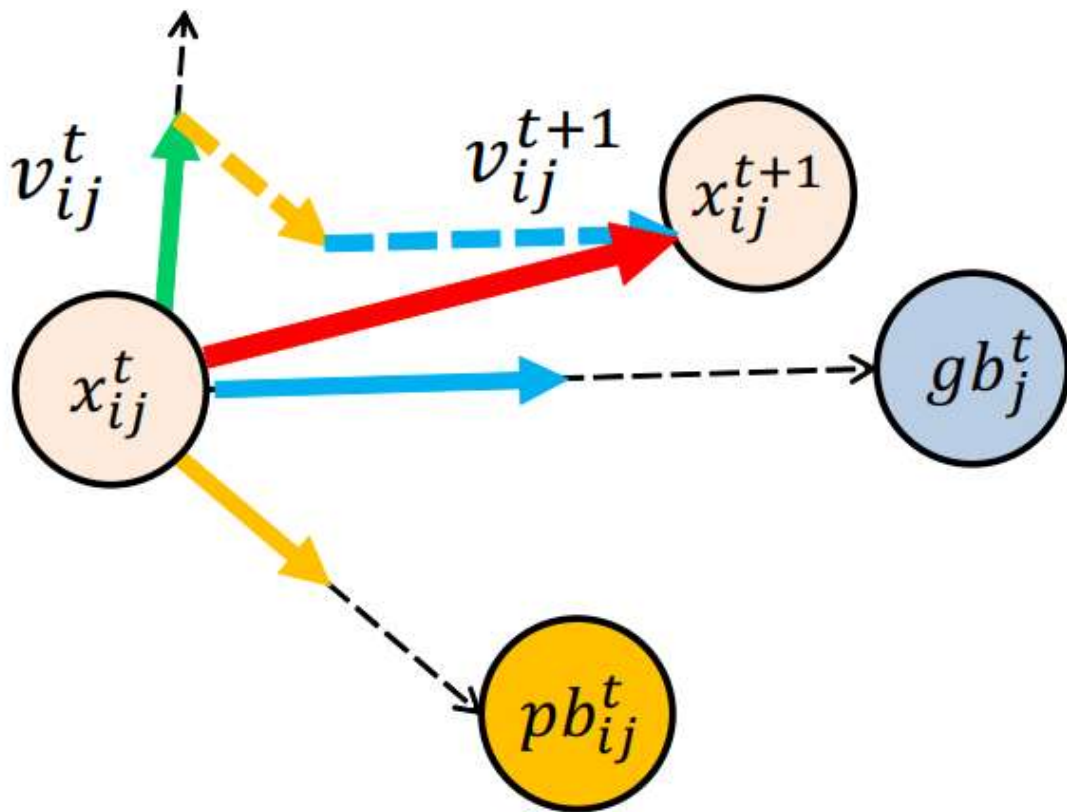


図 1-7

PSO の粒子モデル

1.7 研究の目的

理論上では、超伝導体の可逆運動は予測されたが、現実には量子化磁束線の可逆運動の観測が困難である。本研究では、AFI(Affine Integrator)数値積分法を用いて、時間依存Ginzburg-Landau(TDGL)方程式を解き、量子化された磁束線を可視化し、数値計算を行い、理論的な磁束可逆運動を二次元で再現することを目的として行う。

第2章 実装方法

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、アーティストに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。

本研究では、2次元超伝導体をシミュレーションし、超伝導体内の量子化磁束線を可視化する。

2.2 2次元超伝導体

ここでは、定義域は矩形の $x \in [0, L_x] \times y \in [0, L_y]$ であるとする。従属変数 $\psi(x, y, t)$ が従う基礎方程式は次のようになる。また、周期的境界条件を採用する。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi \quad (2.1)$$

ただし、格子点間隔を h 、格子点の数を N 、定義域の長さを L とする。定義域の長さ L と関係は以下のようになる。

$$L_x = N_x h \quad (2.2)$$

$$L_y = N_y h \quad (2.3)$$

ここで、周期的境界条件として、以下のようにする。

x 方向(左端と右端)は次のようになる。

$$\psi(0, y, t) = \psi(L_y, y, t), \quad y \in [0, L_y] \quad (2.4)$$

$$\psi(L_y + h, y, t) = \psi(1, y, t), \quad y \in [0, L_y] \quad (2.5)$$

y 方向(上端と下端)は次のようになる。

$$\psi(x, 0, t) = \psi(x, L_x, t), \quad x \in [0, L_x] \quad (2.6)$$

$$\psi(x, L_x + h, t) = \psi(x, 1, t), \quad x \in [0, L_x] \quad (2.7)$$

初期条件は次のようにする。

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}(0) &= \psi(ih, jh, 0) = \sin(k_x ih) \sin(k_y jh), \\ k_x &= \frac{2\pi m}{L_x}, k_y = \frac{2\pi n}{L_y}, \quad m, n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (2.8)$$

2.3 規格化

ここでは TDGL 方程式の規格化について説明する。^[9]

2.3.1 空間に関する規格化

ここでは TDGL 方程式から導く。

$$\gamma \left(\hbar \frac{\partial}{\partial t} + ig\varphi \right) \psi = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\nabla - i \frac{g}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \psi - \alpha\psi - \beta|\psi|^2\psi \quad (2.9)$$

$$\mu_0\sigma \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla\varphi \right) = \mu_0 \frac{\hbar g}{m^*} \text{Im} \left[\bar{\psi} \left(\nabla - i \frac{g}{\hbar} \mathbf{A} \right) \psi \right] - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.10)$$

ここで $e > 0$ を素電荷として $g = -e^* = -2e$ とおく。また電子の質量を m として $m^* = 2m$ とおく。

まず、1次元から導く。第2種超伝導体の α の値を α_0 とおく。(2.9)式から

$$\frac{\gamma}{|\alpha_0|} \left(\hbar \frac{\partial}{\partial t} + ig\varphi \right) \psi = \left(\hat{\nabla} - i \frac{g}{\hbar} \xi_0 \mathbf{A} \right)^2 \psi - \frac{\alpha}{|\alpha_0|} \psi - \frac{\beta}{|\alpha_0|} |\psi|^2 \psi \quad (2.11)$$

を得られる。ただし

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha_0|}}, (X, Y, Z) = \frac{1}{\xi_0} (x, y, z), \left(\frac{\partial}{\partial X}, \frac{\partial}{\partial Y}, \frac{\partial}{\partial Z} \right) = \hat{\nabla} = \xi_0 \nabla \quad (2.12)$$

ここでは ξ_0 を「基準コヒーレンス長」とする。

2.3.2 磁場の規格化

マクスウェルの方程式による

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.13)$$

両辺に以下の式を掛ける。

$$\xi_0 \times \frac{g}{\hbar} \xi_0 \quad (2.14)$$

規格化（無次元）磁場 b は以下のようになる。

$$b = \frac{g}{\hbar} \xi_0^2 B \quad (2.15)$$

2.3.3 オーダーパラメーターと侵入長に関する規格化

ベクトルポテンシャルに関する方程式(2.10)の両辺に以下の式

$$\frac{g}{\hbar} \xi_0^3 \quad (2.16)$$

を掛けることによって以下の式に得られる。

$$\mu_0 \sigma \frac{|\alpha_0| \xi_0^2}{|\gamma| \hbar} \left(\frac{\partial a}{\partial T} + \hat{\nabla} \Phi \right) = \mu_0 \frac{g^2}{m^* \xi_0} \text{Im}[\bar{\Psi}(\nabla - ia)\Psi] - \hat{\nabla} \times \hat{\nabla} \times a \quad (2.17)$$

ただし、ここで規格化オーダーパラメーター ψ を ξ_0 でスケール変換して、 Ψ を無次元化する。

$$\Psi = \xi_0^{3/2} \psi \quad (2.18)$$

(2.17)式の右辺において、 $\text{Im}[\cdot]$ が無次元量で式全体も無次元なのでその係数も無次元量である。したがって

$$\tilde{\lambda} = \frac{\sqrt{m^* \xi_0 \tilde{\beta}}}{\sqrt{\mu_0 g^2 |\tilde{\alpha}|}} = \frac{\sqrt{m^* \beta}}{\sqrt{\mu_0 g^2 |\alpha| \xi_0^2}} = \frac{\lambda}{\xi_0} \quad (2.19)$$

ここで侵入長 λ [m]は式(2.10)に基づき次式で定義される。

$$\lambda = \frac{\sqrt{m^* \xi_0^3 \tilde{\beta}}}{\sqrt{\mu_0 g^2 |\tilde{\alpha}|}} = \sqrt{\frac{m^* \beta}{\mu_0 g^2 |\alpha|}} \quad (2.20)$$

また、

$$\tilde{\beta} = \frac{\beta}{|\alpha_0| \xi_0^3} \quad (2.21)$$

2.3.4 可逆運動の非線型微分方程式の規格化

可逆運動の非線型微分方程式による

$$\frac{d^2 b}{dx^2} - \frac{b}{\lambda_0'^2} \left(1 + \frac{1}{2\mu_0 J_c} \cdot \frac{db}{dx} \right) = 0 \quad (2.22)$$

ここでは、磁場密度 b 、 x 方向の変位量、超伝導体の幅 $2d$ を規格化する。

$$b_n = \frac{b}{\mu_0 J_c d} \quad (2.23)$$

$$x_n = \frac{x}{\lambda_0'} \quad (2.24)$$

$$d_n = \frac{d}{\lambda_0'} \quad (2.25)$$

規格化された可逆運動の非線型微分方程式は以下のようなになる。

$$\frac{d^2 b_n}{dx_n^2} = b_n \left(1 + \frac{d_n}{2} \cdot \frac{db_n}{dx_n} \right) = 0 \quad (2.26)$$

2.4 計算条件

2.4.1 臨界状態からの可逆運動

可逆現象をより顕著に観察し、且つ臨界状態モデルと比較するために、外部磁場 B_z を変えて、超伝導体を臨界状態から正弦波交流磁場に加える(図 2-1 参照)。

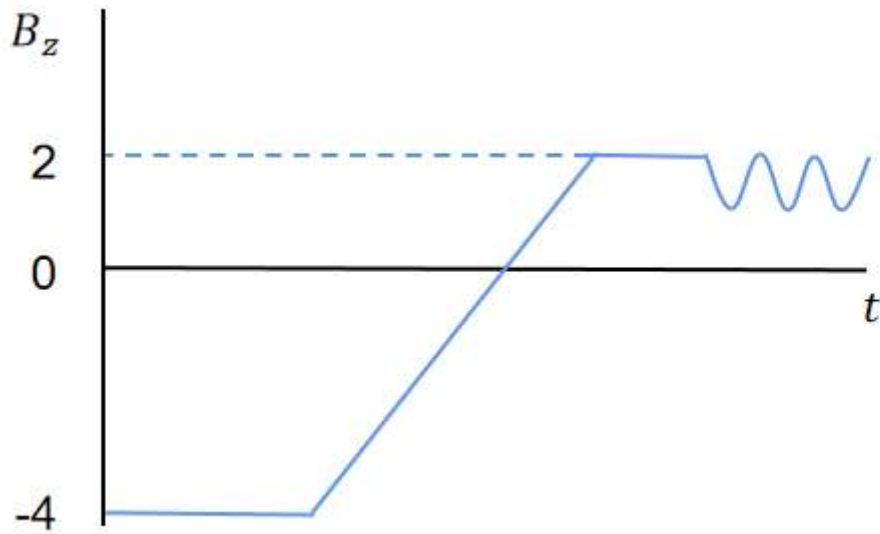


図 2-1 外部磁場の経時変化

2.4.2 ゼロ磁場からの可逆運動

超伝導体は臨界状態以外には、顕著な可逆運動は確かめるため。外部磁場 B_z を変えて、超伝導体をゼロ磁場から正弦波交流磁場に加える(図 2-2 参照)。

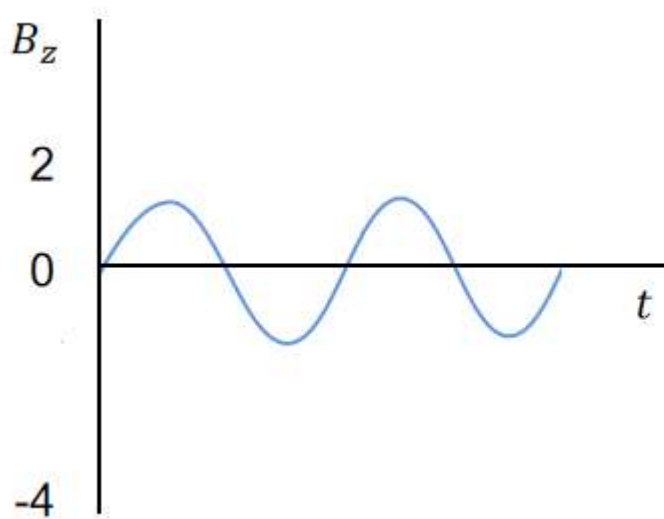


図 2-1 外部磁場の経時変化

第 3 章 実装結果および考察

3.1 臨界状態からの可逆運動のシミュレーション

まず、超伝導体に 200 個ピンを入れる、規格化した直流磁場 $B_z = -4$ を加える。臨界状態になるため、待機時間 $t = 10000$ ステップを待つ。続いて、正比例に直流磁場 $B_z = 2$ まで増磁する。 $B_z = 2$ のところに、待機時間 $t = 10000$ ステップを待つ。最後は、超伝導体に $B_z = 1.5 + 0.5 \sin \omega t$ の規格化した磁界を加えて、 ωt が $\pi/2$ 、 $5\pi/8$ 、 $6\pi/8$ 、 $7\pi/8$ 、 π のとき、 y 軸方向の B_x を全部加算して、 B_{\max} に規格化する。磁束密度は侵入深さによって徐々に減少する。 ωt の増大によって減磁する。図 3-1 参照。

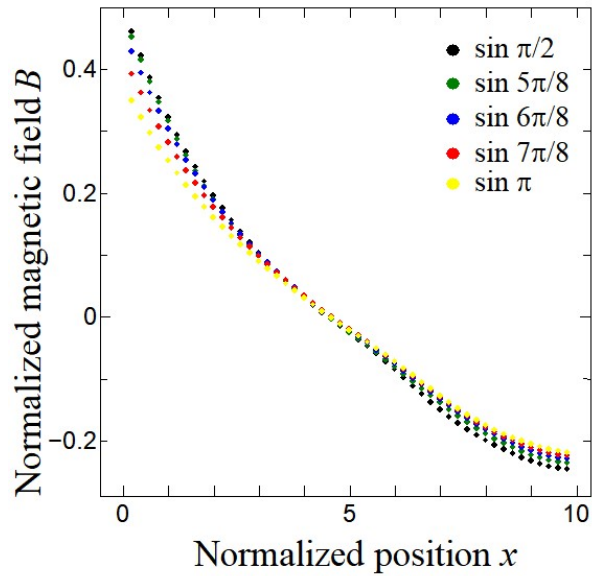


図 3-1 超伝導体内の磁束密度と侵入深さの関係
 超伝導体に $B_z = 1.5 + 0.5 \sin \omega t$ の規格化した磁界を加えて、 ωt が $\pi/2, 5\pi/8, 6\pi/8, 7\pi/8, \pi$ のとき、と ωt が π のピーク値からの磁束密度の差を示す。図 3-2 参照。

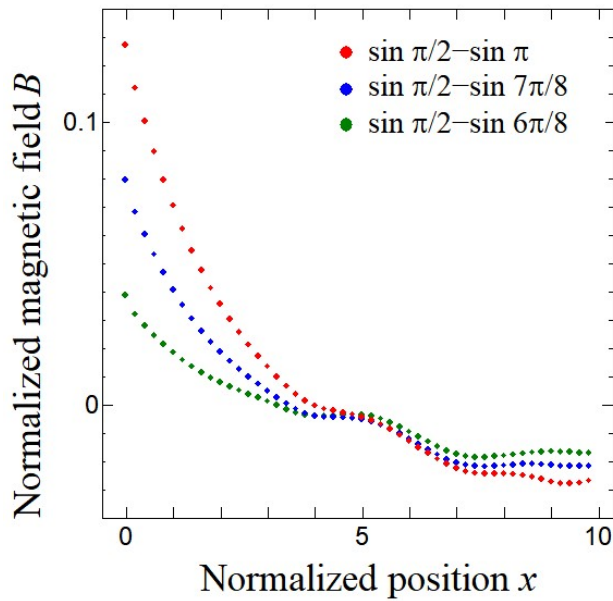


図 3-2 ピーク値からの磁束密度の差
 図 3-3 は、 ωt が $6\pi/8, 7\pi/8, \pi$ の時の式(1.114)の理論式と数値計算による磁束密度の差の分布を比較して示す。理論計算は直線で表す。その結果、磁束線が顕著な可逆運動するという理論予測に近い。

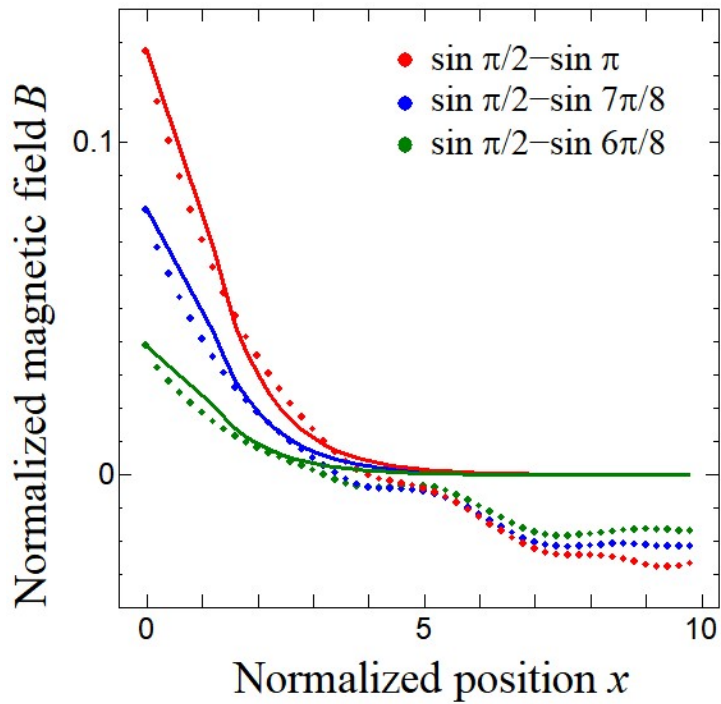


図 3-3

理論計算とシミュレーション

3.2 ゼロ磁場からの可逆運動のシミュレーション

3.2.1 ピンが 200 個の場合

超伝導体に 200 個ピンを入れる、周期 $T = 5000$ ステップの規格化した正弦波交流磁界 $B_z = 2 \sin \omega t$ を加えて、 ωt が $\pi/8$ 、 $2\pi/8$ 、 $3\pi/8$ 、 $4\pi/8$ のとき、 y 軸方向の B_x を全部加算して、 B_{\max} に規格化する。磁束密度は侵入深さによって徐々に減少する。 ωt の増大によって増磁する。ゼロ磁場からの可逆運動なので、0 からの磁束密度の差は磁束密度と同じ。図 3-4 参照。

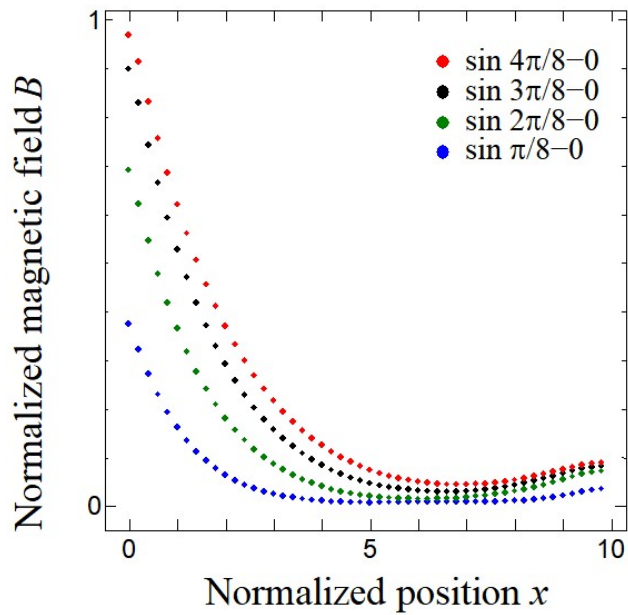


図 3-4 超伝導体内の磁束密度と侵入深さの関係

図 3-5 は、 ωt が $\pi/8$ 、 $2\pi/8$ 、 $3\pi/8$ 、 $4\pi/8$ の時の式(1.114)の理論式と数値計算による磁束密度の差の分布を比較して示す。理論計算は直線で表す。その結果、 ωt が $3\pi/8$ から、理論計算と一致していない。可逆運動がゼロ磁界でより顕著になっている。直流磁界が印加されると、可逆運動よりも不可逆運動が強調されている。また、 $x > 5$ のときは0ではなく、少し磁場が入れた原因は磁束クリープと考えている。

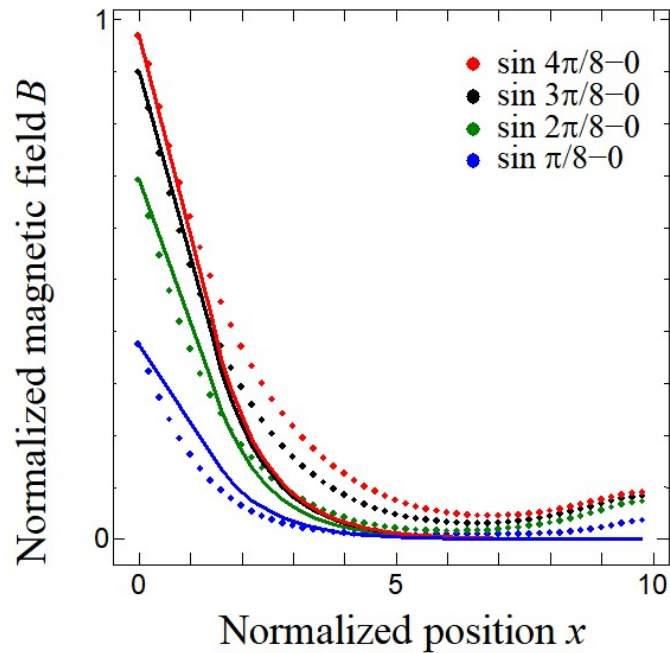


図 3-5 理論計算とシミュレーション

3.2.2 ピンが 100 個の場合

超伝導体に 100 個ピンを入れる、周期 $T = 5000$ ステップの規格化した正弦波交流磁界 $B_z = 2 \sin \omega t$ を加えて、 ωt が $\pi/8$ 、 $2\pi/8$ 、 $3\pi/8$ 、 $4\pi/8$ のとき、 y 軸方向の B_x を全部加算して、 B_{\max} に規格化する。磁束密度は侵入深さによって徐々に減少する。 ωt の増大によって増磁する。ゼロ磁場からの可逆運動なので、0 からの磁束密度の差は磁束密度と同じ。図 3-6 参照。

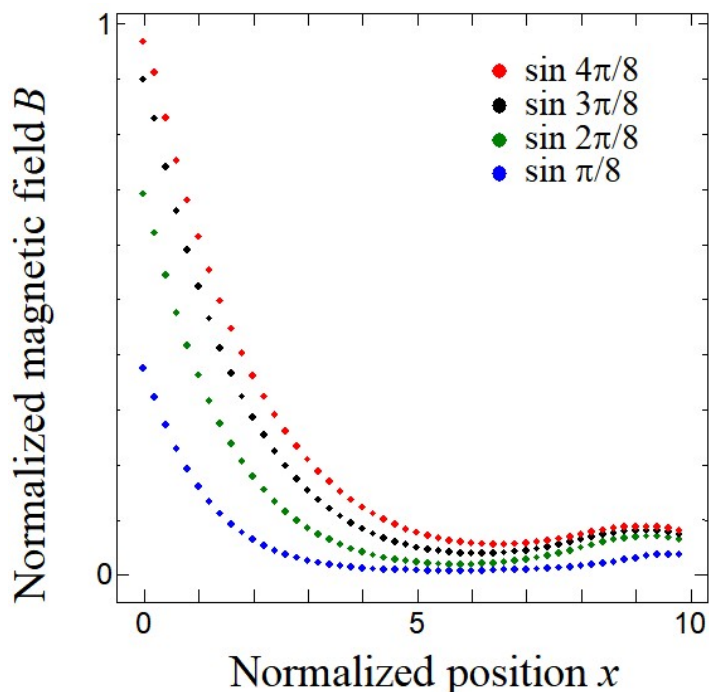


図 3-6 超伝導体内の磁束密度と侵入深さの関係

図 3-7 は、 ωt が $\pi/8$ 、 $2\pi/8$ 、 $3\pi/8$ 、 $4\pi/8$ の時、ピンの数による超伝導体内の磁束密度と侵入深さの関係。ピンを 100 個入るの場合は直線、ピンを 200 個入るの場合は点。その結果、 ωt が $3\pi/8$ から、同じ侵入深さで、ピンを 100 個入るの場合の磁束密度が高い。ピンの数は多いほど可逆運動の磁束クリップの影響が小さくなる。

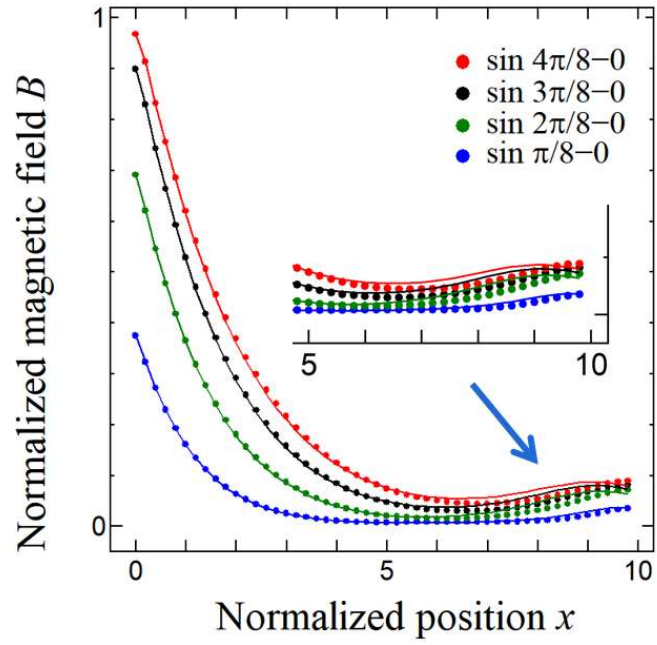


図 3-7

ピンの数による磁束密度と侵入深さの関係

第4章 結論

本研究では、TDGL 方程式をとくことで、AFI を用いて量子化磁束線を二次元で可視化した。磁束線の可逆運動と理論計算による予測の一致性を確かめた。

臨界状態からの可逆運動のシミュレーションを行った。臨界状態になるまでは、結構時間がかかるので、直流磁界 $B_z = -4$ から $B_z = 2$ までの範囲で、非常に長い待機時間 t が設定された。臨界状態になるから、交流磁界を加えて、磁束密度と理論計算に比較した。その結果、磁束密度は折り曲げる点がなく、ゆっくり減少することて、顕著な可逆運動するという理論予測に近い。

ゼロ磁場からの可逆運動のシミュレーションを行った。超伝導体に交流磁界を加えることで、臨界状態ではないときの可逆運動を理論計算に比較した。その結果、不可逆的の臨界状態モデルに違い、可逆運動が特に顕著ですが、直流磁界が印加されると、不可逆運動がより際立っている。

最後に、異なるピン留め密度をシミュレーションし、可逆運動に対する影響を検討しました。同様に、直流磁場がゼロの状態、交流磁場が印加した。100本のピンがある超伝導体において、磁束クリープは200本のピンがある超伝導体よりも多いことが確認されました。

研究業績

学会発表

1. 温 謙, 上田 天馬, 小田部 莊司, 松野 哲也「AFI 数値積分法を用いた 2 次元の超電導体内の量子化磁束線の可逆運動の研究」第 105 回 低温工学・超電導学会研究発表会, 東京都江戸川区 タワーホール船堀, 令和 5 年 6 月
2. 温 謙, 上田 天馬, 小田部 莊司, 松野 哲也「AFI 数値積分法を用いた 2 次元の超伝導体内の量子化磁束線の可逆運動の解析」第 71 回 応用物理学会春季学術講演会, 東京都市大学, オンライン, 令和 6 年 3 月

謝辞

最初に、九州工業大学大学院情報工学研究院電子情報工学研究系エレクトロニクス分野、小田部荘司教授に深くお礼を申し上げます。超伝導体の基礎や解析の方向性、学会などについては多くのアドバイスがいただきました。コロナの影響で最初の半年は日本に留学できませんでしたが、ネットワークを通じて、研究活動だけでなく、先生のおかげでコロナ禍の中で充実した2年間を過ごし、普段の生活の中での振る舞いなど様々な経験をさせていただき、深く感謝しています。

また、松下照男名誉教授にもお礼を申し上げます。超伝導の基礎など数多くのサポートで研究を支えて頂きました。深く感謝致します。

有明工業高等専門学校の松野哲也先生に心より感謝申し上げます。ご指導をいただきました。

最後に、同研究室の有田拳さんは私のチューターとして、生活と研究の両方で大きな助けをくれました。深く感謝致します。

参考文献

- [1] V. L. Ginzburg, L. D. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 20 (1950) 1064
- [2] 濱田雄成 時間依存 Ginzburg-Landau 方程式を用いた様々な条件下における超伝導体の量子化磁束線の運動解析 九州工業大学情報工学部学士学位論文(2018) A-19
- [3] T. Matsuno, E.S.Otabe, and Y. Mawatari, "Explicit Integrators Based on a Bipartite Lattice and a Pair of Affine Transformations to Solve Quantum Equations with Gauge Fields", J. Phys. Soc. Jpn. 89, 054006(2020).
- [4] 松野哲也 著 量子化磁束動力学シミュレーション研究グループ 夏のセミナー 2020 資料 Ver.3
http://annex.jsap.or.jp/fluxoid/img/eqs_summer_v3.pdf
(参照 2021 年 2 月 15 日)
- [5] 松野哲也 小田部荘司 馬渡康徳 超伝導体における電磁減少のシミュレーションのための陽的数値積分法 日本物理学会 2020 年秋季大会
- [6] 田中宏樹 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 九州工業大学情報工学部学士学位論文(2020)
- [7] 松下照男: 「磁束ピンニングと電磁現象」 産業図書 (1995)
- [8] J. Kennedy and R. Eberhart : "Particle swarm optimization", Proc. of IEEE Int. Conf. Neural Networks, Vol.4, pp.1942-1948 (1995-10)
- [9] 松野哲也 方程式の規格化 (無次元化) ver.11(2023 年 5 月)