

テラヘルツ発振超伝導素子に関する 大規模シミュレーション

利用責任者 立木 昌

東北大学名誉教授、(財)高度情報科学技術研究機構

○飯塚幹夫、南一生、手島正吾、中村壽

(財)高度情報科学技術研究機構 (RIST)

テラヘルツ発振超伝導素子に関する大規模
シミュレーション研究会

内容

1. 研究の背景・目的
2. 今年度の計画と成果
3. まとめ

背景・目的

背景

- テラヘルツ波応用は未開拓領域

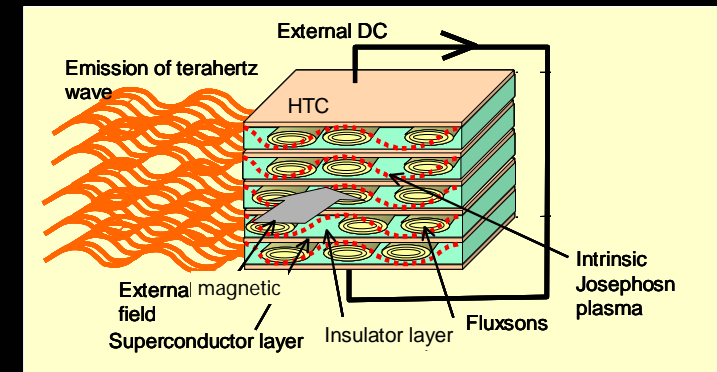
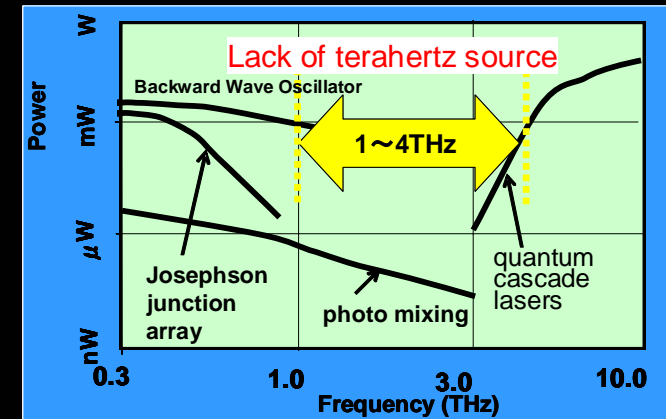
- 課題

- 1~4THzテラヘルツ波: 生体分子、物質分析に有効
- パルス波のテラヘルツ波では不十分、
→ 連続波テラヘルツ波が有効、しかし
- 高出力連続波テラヘルツ波光源が無い

→新しい連続波のテラヘルツ波光源の開発

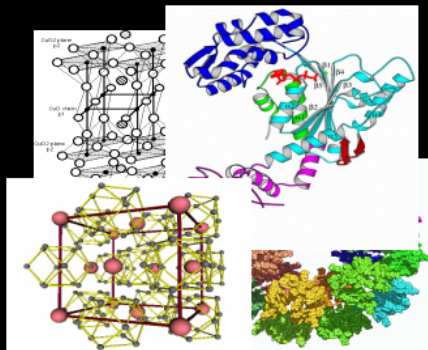
- ナノ高温超伝導体の特性を利用した新テラヘルツ発振理論・方法の論文(立木、1994)

- 連続波のテラヘルツ波を、安定かつ高出力で発生する条件を、**実験のみで見つけることは困難**.
- 理論のシミュレーションは、膨大な計算量が必要。当時は計算機能力では困難であった
- 2002年、**ESが利用開始**: ようやく大規模シミュレーションが可能となった



目的: 大規模シミュレーションによる新連続波テラヘルツ光源開発

連続波テラヘルツ波の有用性



テラヘルツ帯域で物体を透過し、原子、分子と強く相互作用

テラヘルツ (0.3~10THz) 電磁波 有用な特性

- ① 高透過性、微細波長
- ② 生体分子、物質等の励起振動数帯にある

③ 利用電波周波数領域を拡大

新しい分析法、センサー、制御技術を生む (単色性、平均強度から連続波テラヘルツ波が有効)



X線に代わる低エネルギーの安全な医療用光源 (医療診断・治療)



プラスチック爆発物の検出等 (テロ対策)



汚染物質、生体系の連続モニタリング (環境対策)



モバイル映画 (大容量通信)

(連続波のテラヘルツ波のみが利用可能)

支配方程式

変数 量子力学的変数: 不変ゲージ位相差 (波動関数の位相)、超伝導電流
電磁気学的変数: 電場、磁場、電荷

方程式 不変ゲージ位相差の式

$$(1 - \zeta \Delta^{(2)}) \{ (\partial_{t'}^2 \psi_{l+1,l} + \beta \partial_{t'} \psi_{l+1,l} + \sin \psi_{l+1,l}) + \alpha s' [\partial_{t'} (\rho'_{l+1} - \rho'_l) + \beta (\rho'_{l+1} - \rho'_l)] \} = \partial_{x'}^2 \psi_{l+1,l} + \partial_{y'}^2 \psi_{l+1,l},$$

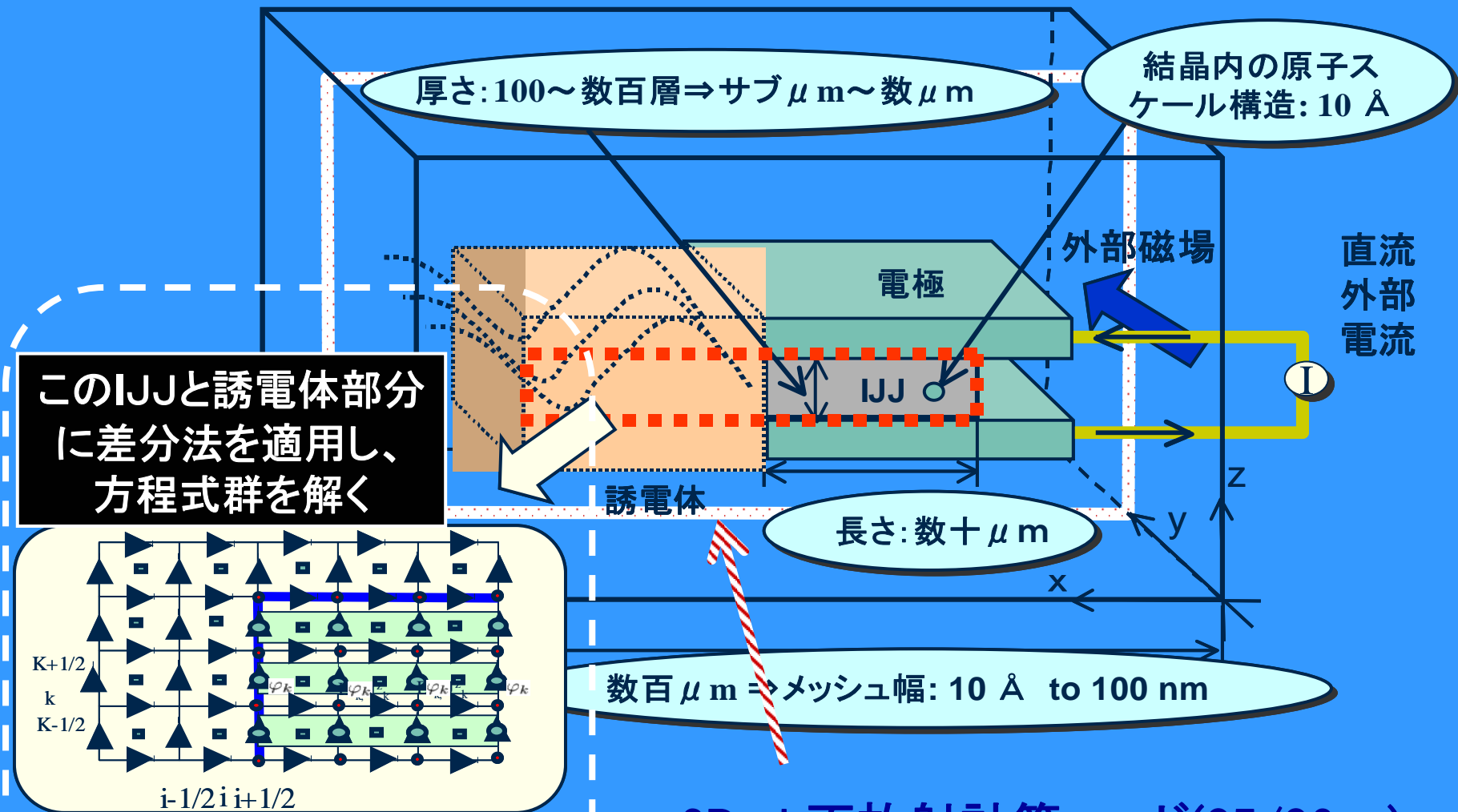
Coupled sin-Goldon 方程式: 非線形方程式

電荷の式

$$s' (1 - \alpha \Delta^{(2)}) \rho'_l = \partial_{t'} (\psi_{l+1,l} - \psi_{l,l-1}).$$

その他、電場、磁場、超伝導電流の式

解析モデル



基礎研究2Dコード
(03/04/05/06)

2D ab面放射計算コード(05/06・・・)

3Dコード(04/06・・・): 計算量膨大
→y軸方向磁束の曲がり解析に集中

今年度の計画

□ 発振メカニズムの詳細説明

- 不規則分布fluxonsから規則的電磁場が発生するメカニズム(既存の仮説(規則分布fluxonsのみが、規則的電磁場を発生可能)を否定、新しいメカニズムの発見)
- 周波数が可変となるメカニズム(Cavity励起であるにもかかわらず、周波数は連続的に可変:その理由を説明し、より広い範囲で連続周波数可変を実現する方法を得る)

□ 発振条件の詳細説明

- 実験に具体的指針を与えるデータの整備
 - 外部磁場 B_0 、Inductive 係数 ξ 、層数 N_c 等の影響

□ 設計・開発用3Dコードの開発:

- 3次元解析コードのチューニング
- よりリアルな形状で解析、3次元形状・システム全体の影響を研究

今年度の成果概要

前年まで	今年度
<ul style="list-style-type: none"> □ 発振メカニズム解明 <ul style="list-style-type: none"> ● 全体のメカニズム概要 ● 従来の仮説と異なる現象を発見 <ul style="list-style-type: none"> ● 不規則分布 fluxons の振動が規則的電磁場を励起 ● 内部励起電磁波は定在波的 	<ul style="list-style-type: none"> □ 発振メカニズムの詳細解明 <ul style="list-style-type: none"> ● 不規則分布 fluxons から規則的電磁場が発生するメカニズム ● 周波数が可変となるメカニズム <div style="text-align: right; border: 1px solid black; border-radius: 15px; padding: 2px 10px; display: inline-block;">成果1</div>
<ul style="list-style-type: none"> □ 発振条件 <ul style="list-style-type: none"> ● 電圧状態で発振(従来仮説: フロー状態で発振) 	<ul style="list-style-type: none"> □ 発振条件の詳細化 <ul style="list-style-type: none"> ● 実験に具体的指針を与えるデータ整備: パラメータ(外部磁場、Inductive 係数、層数...) が発振に寄与する因子の影響度把握 <div style="text-align: right; border: 1px solid black; border-radius: 15px; padding: 2px 10px; display: inline-block;">成果2</div>
<ul style="list-style-type: none"> □ <u>bc</u>面より放射される連続波テラヘルツ波の特性を予測した <ul style="list-style-type: none"> ● 単色性、周波数チューナブル、高放射強度 	<ul style="list-style-type: none"> □ <u>ab</u>面より放射する新たな連続テラヘルツ波発生方法の考案 <ul style="list-style-type: none"> ● <u>ab</u>面より放射するテラヘルツ波の特性を予測: 単色性、<u>bc</u>面放射方式より高出力 <div style="text-align: right; border: 1px solid black; border-radius: 15px; padding: 2px 10px; display: inline-block;">成果3</div>
<p>実験: 2004年暮れに発振の兆候</p>	<p>発振の確証を得るために発振実験が継続(筑波大...)</p>

成果1: 発振メカニズム解明

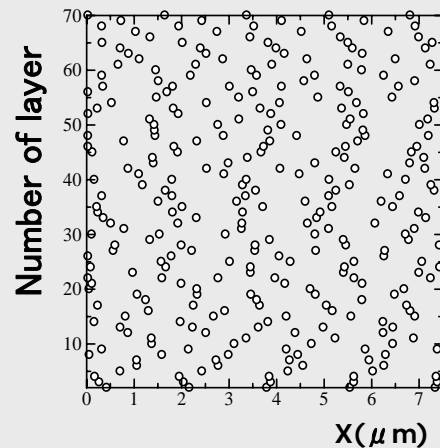
□ 不規則分布fluxons から規則的電磁場が発生するメカニズム

前年まで: 従来仮説と異なる現象を発見

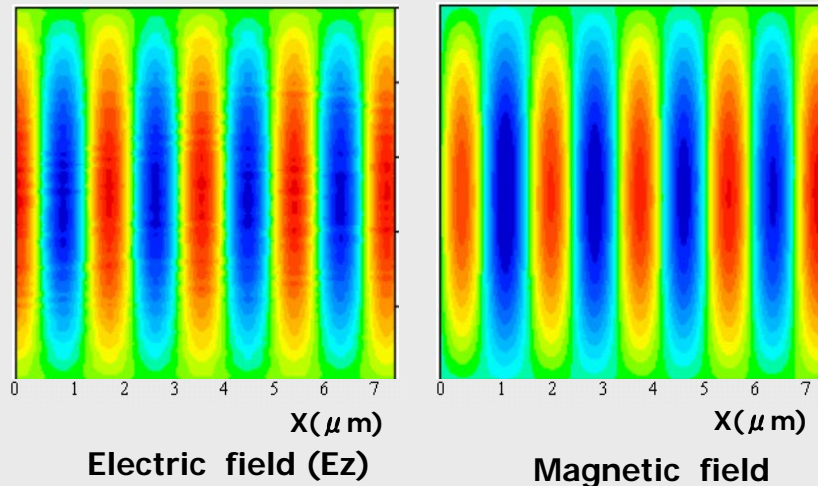
→ 不規則分布 fluxons の振動が規則的電磁場を励起

従来仮説: 規則分布fluxonsのみが、規則的電磁場を発生可能

Cluster of disordered fluxons



Coherent electromagnetic field for c axis



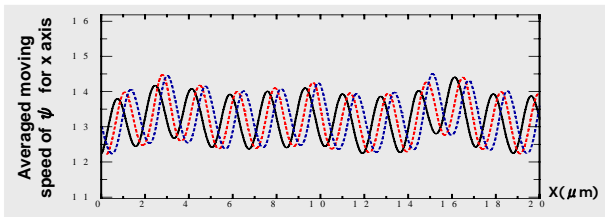
なぜ、不規則分布のfluxonsから規則的電磁場が生成されるのか？

→ 物理的に解明すべき点

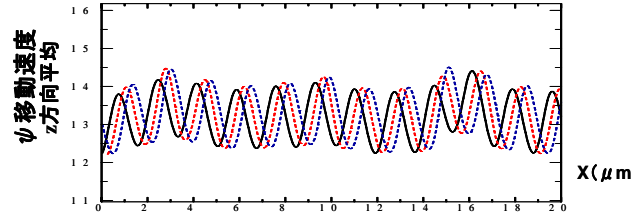
成果1: 発振メカニズム解明

シミュレーションから明らかになったこと

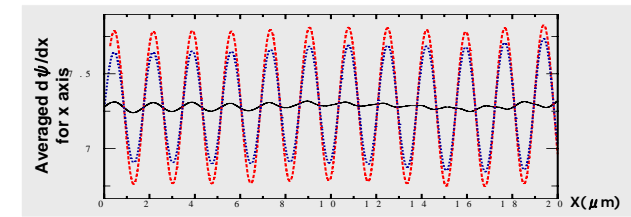
量子力学変数 ψ に関する層毎の量は不規則的、c軸方向平均場は(準)規則的→
小さいスケール(fluxons)レベルでは不規則的、大きいスケールで規則的



交流Josephson電流: $\sin \psi$



ψ のx方向移動速度

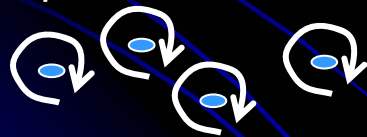


$d\psi/dx$



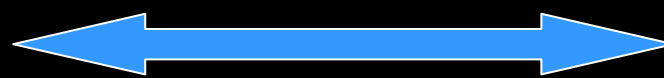
規則的なものと、不規則的なものを共存させる力は何か

fluxonは量子磁束(渦糸): 渦糸のまわりに、交流 Josephson電流(加振源) → 反発し合う



不規則的分布になろうとする

非線形相互作用



電磁場、電流場:
規則的分布になろうとする

不規則的分布を作る力と規則的分布を作る力のバランスによる準安定状態

- 不規則分布fluxons から規則的電磁場を生成
- さらに研究を進める

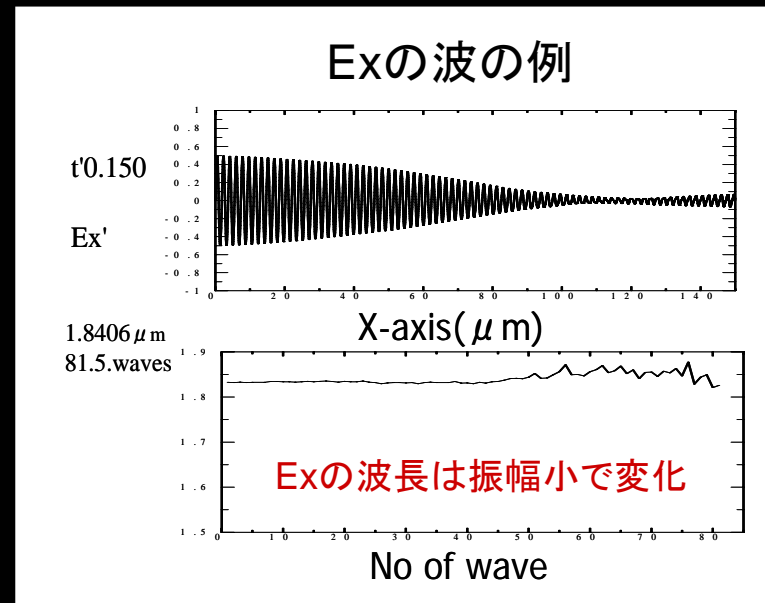
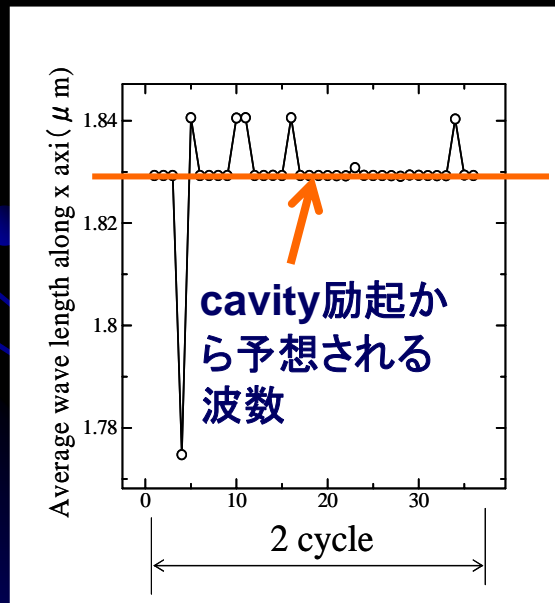
成果1 発振メカニズム解明(続)

□ 周波数が可変となるメカニズム

Cavity 励起 → 励起は離散的なはず しかし → 広い電圧範囲で連続的に励起：
その理由を解明し、より広い範囲で連続周波数可変を実現する方法を得ることが有用

シミュレーションで分かったこと: 1サイクル中に波数が変化

⇒ 平均波長が見かけ上連続的に変化可能(詳細には、局所的に波長が変化(素子内で、波はうねり、振幅が小さいところで波長が大きく変化))



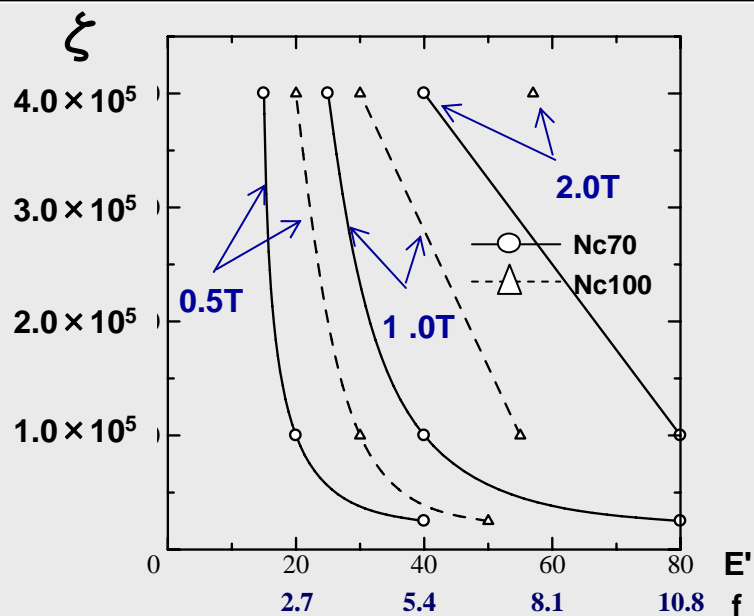
今後、この原理に基づき、より広い範囲で連続周波数可変を実現する方法を研究

成果2 発振条件の詳細化

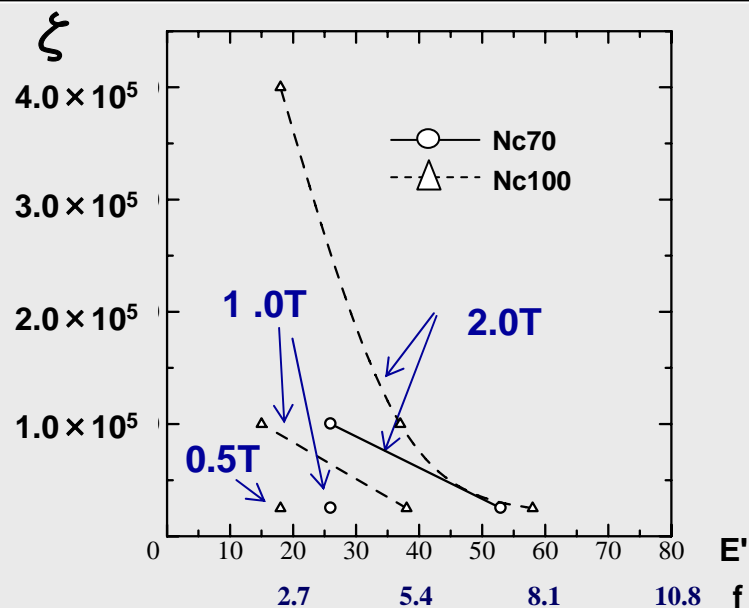
□ 発振に寄与する因子の影響度把握

シミュレーションで分かったこと:

パラメータ(外部磁場 $B_{o\gamma}$ 、Inductive 係数 ξ 、層数 N_c)の影響による発振条件変化



Nodeless wave for c axis case
(bc,ab面放射素子設計用)



2 nodes wave for c axis case
(ab面放射素子設計用)

C軸方向ノードレス励起条件図(L_x は、 $10 \mu\text{m}$ 以上であれば、励起は主に電圧依存)

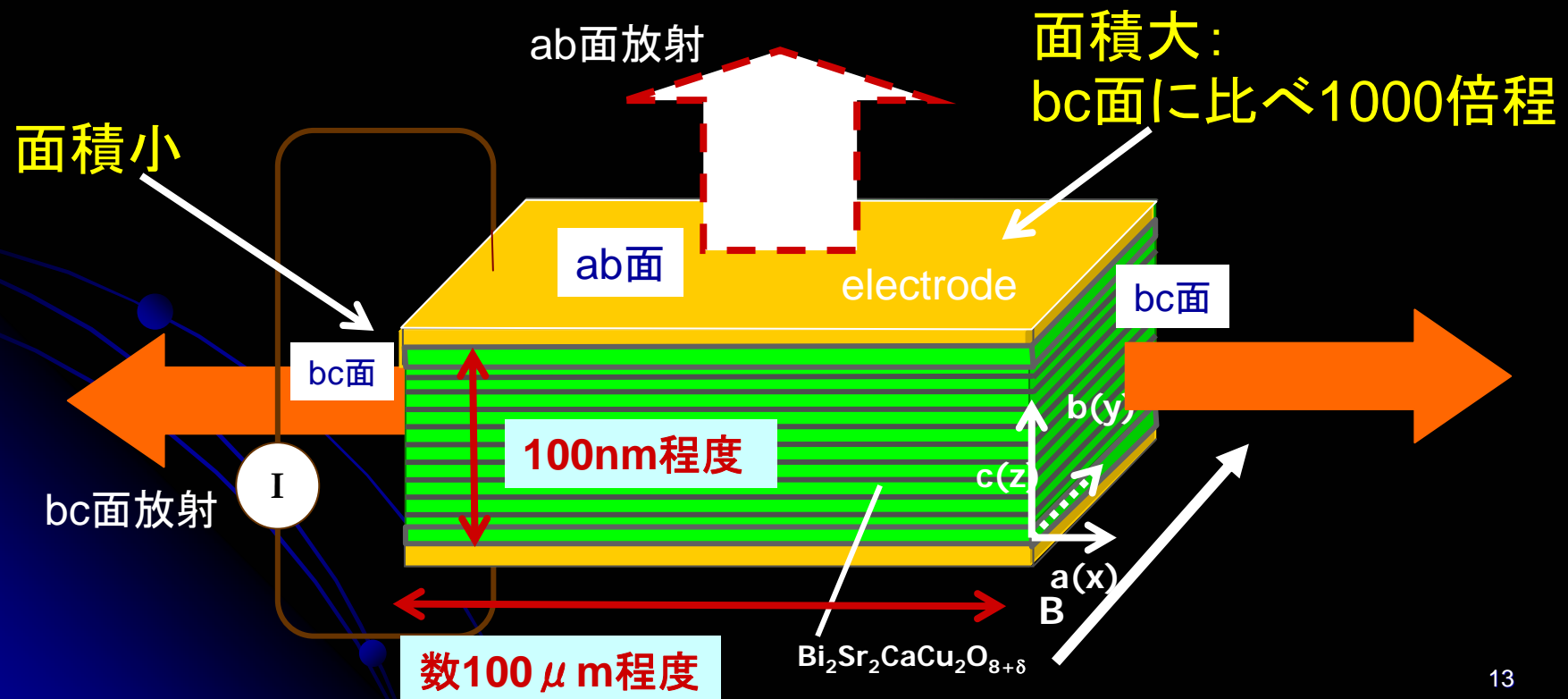
$\lambda_c 150 \mu\text{m}$, $\beta 0.02$, $B_{o\gamma} = 0.5, 1, 2\text{T}$, frequency f (THz), Normalized volatge $E' = \frac{2\pi c D E}{\Phi_o \omega_p}$

- 外部磁場を上げると発振電圧は上昇
- Inductive 係数 ξ を小さくしていくと、 1.0×10^5 以下で、発振電圧は急上昇する
- 層数を上げると発振電圧は上昇……

成果3

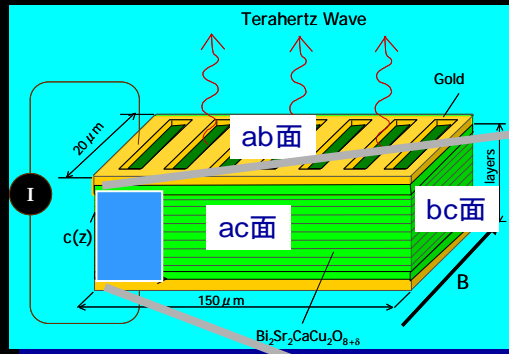
□_新たな連続波テラヘルツ波発生方法の考案(ab面より放射)

- 前年まで:bc面より放射する連続波テラヘルツ波発生方法を研究
→面積が小さいため放射強度に限界
- 今年: 面積の大きいab面からの放射する方法を研究(ANLとの共同研究)

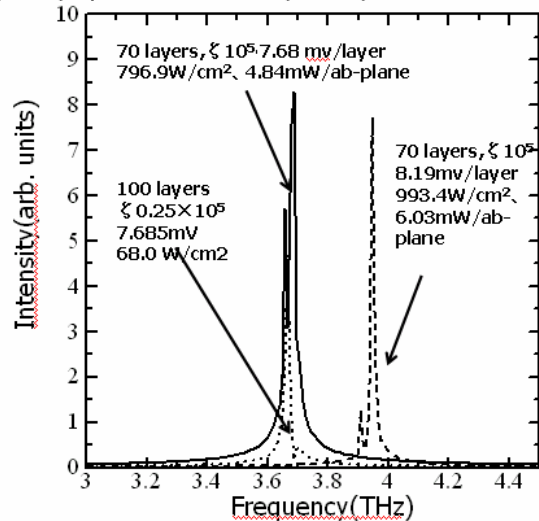


シミュレーションで分かったこと

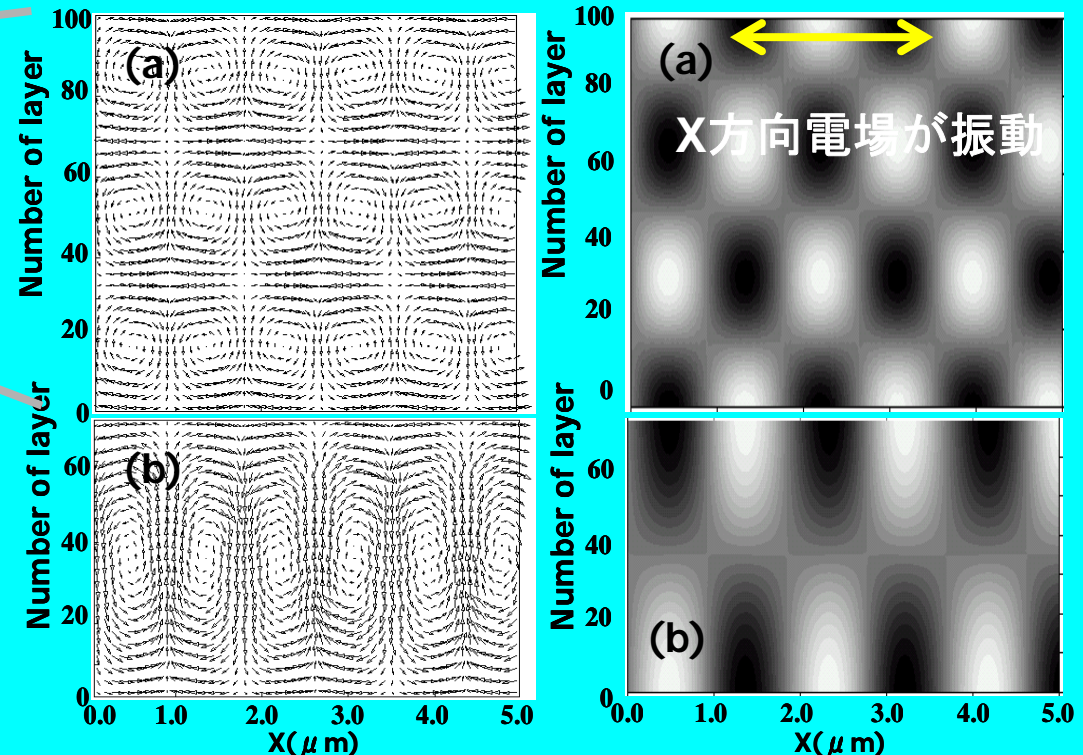
- 素子内ac面内電流ループの発見
 - x方向電場がab面内表面で振動⇒ ab面よりの放射の可能性
 - 特性推定: 単色性: 良、放射強度: 強 (bc面に比べ面積が1000倍程)
 - ✓ ただし制限あり: グレーチングにより同位相の波をスクリーンする必要あり⇒ 非周波数可変
 - ✓ モデルの高度化必要(作業中)
- 現在、ExはEzに比べ相対的小さいので近似計算⇒ 正確に計算する必要あり



Frequency spectra of Ex analyzed by FFT in ab-surface



Vector plot of current and contour plot of Ex in the ac-plane



$\lambda \approx 150 \mu\text{m}$, $\beta 0.02$, $\alpha 0.1$, $B\gamma 1T$, $J' 0.75$, $t=1500.015(2.37189\text{ns})$

(a) $\xi 0.25 \times 10^5$, $E_z' 36.88(7.685\text{mV/layer: } 3.71\text{THz})$, $E_x' -0.237 \sim 0.237(0.0493\text{mV})$

(b) $\xi 10^5$, $E_z' 36.9(7.68\text{mV/layer: } 3.71\text{THz})$, $E_x' -0.634 \sim 0.634(0.132\text{mV})$

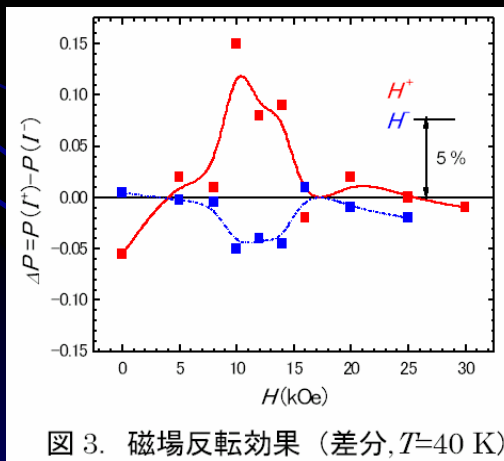
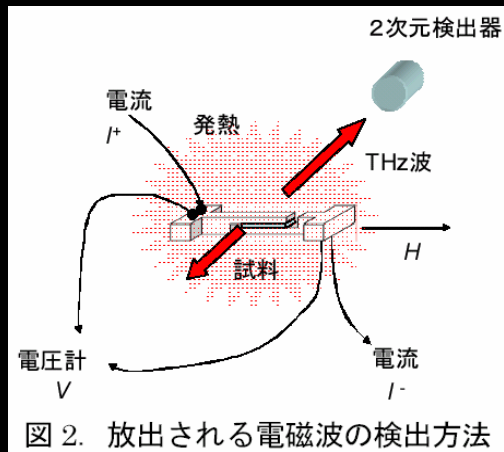
今後、この方式にける放射条件、テラヘルツ波の特性の詳細説明を進める

成果4

□ 実験への貢献: 実験指針へのデータ、情報の提供

● 筑波大、門脇グループの発振実験

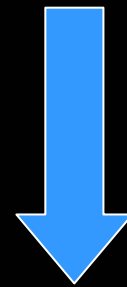
- 日本物理学会2005年秋季大会(同志社大京田辺キャンパス)、9/19~22



ac面よりの放射量測定

➢ 磁場反転時:

1T付近に3~6%の差(フロー方向が大)
数10W/cm²



● シミュレーションによる磁場反転の結果

- 1T、2.5THzで30%程の差(フロー方向が大)
- 数百~1000W/cm²程度

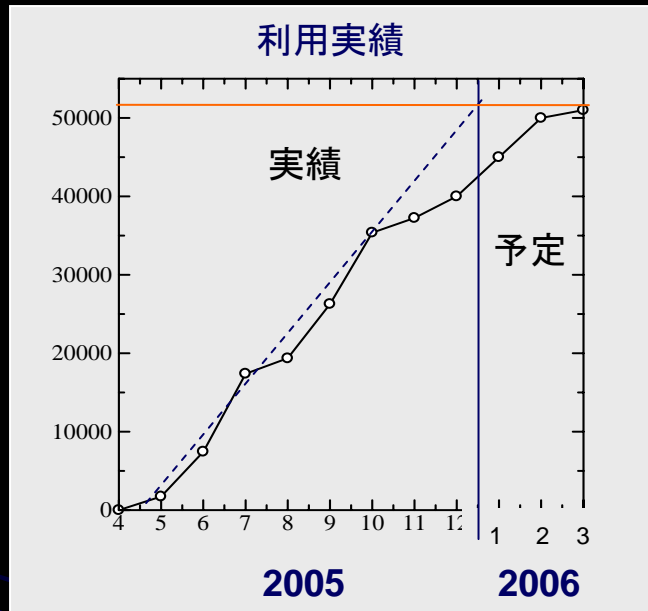
実験継続中

● ANL: bc、ab面両面より発振実験

● 実験家からは、シミュレーションへの期待大

利用実績

□ 現在計算資源不足のため、計算内容を抑制



今年度計算資源使用内分

発振メカニズム解明: 約20% 10000NH
 発振条件解明: 約60% 30000NH
 ab面放射: 約20% 10000NH

- 次年度は、上記3件を継続して実施: 次年度資源量増必要
- 発振条件解明: 現在の計算点数では少ない、さらに多くのパラメータ値で計算必要

外部磁場 B_0

: 0.5T, 1.0T, 2.0T

⇒ 0.2T, 1.5T, 3.0

Inductive 係数 κ

: 0.25, 1.0, 4.0 × 10⁵

⇒ 2.0, 3.0 × 10⁵

層数 N_c

: 70、100層

⇒ 20、50、150、200層

今年度

次年度

まとめ

- **メカニズム説明: 論文作成中**
 - 不規則 分布fluxonsからの規則的電磁場発生、周波数が可変となるメカニズム
- **発振条件の解明: 発振に寄与する因子の影響度の把握**
- **ab面より連続波テラヘルツ波を放射する新方法の考案**
- ✓ **3Dコードは計算量膨大、かつ発振条件データ、ab面からの放射計算に今年度は重点 ⇒ 3D計算: 次年度、小さいモデルで磁束の侵入方向曲がりに集中 (b軸方向 (素子幅)をどこまでとれるかの指針)**
- **実験への貢献: 指針へのデータ、情報の提供**

- **対外発表**

(1) Phys. Rev. B 71, 134515 2005、(2) Physica C C 426-431 (2005) 8-13, (3) 第20回NEC・HPC研究会 2005/7/12 NEC/田町, (4) A. A. Abrikosov博士講演会 2005/10/13 筑波大, (5) 2005年物理学会秋季大会 2005/9 同志社大 京田辺キャンパス, (6) Joint JSPS and FSF Conference on Vortex Matter in Nano structures Superconductores Crete, Greece, September 3 - 9, 2005 , (7) JST International Workshop on Superconductivity Awaji Yumebutai Hall, Hyogo Prefecture, Japan December 20 - 22 2005. (8) HPCnano2005(IEE/ACM international workshop on high performance computing for nanoscience and technology), SC2005 workshop 2005/11/16, Seattle, Washington USA.