

# 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. 研究フロー、支配方程式(モデル)
3. 今年度の計画
4. 今年度のシミュレーション
5. 今年度の成果
6. まとめ

# 背景

## テラヘルツ波領域は未開拓の新研究開発領域！

メガヘルツ  
( $10^6$ )

ギガヘルツ  
( $10^9$ )

テラヘルツ  
( $10^{12}$ )

ピコヘルツ  
( $10^{15}$ )

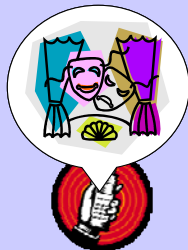
周波数 ←

### テラヘルツ(0.3~10THz)電磁波: 有用な特性

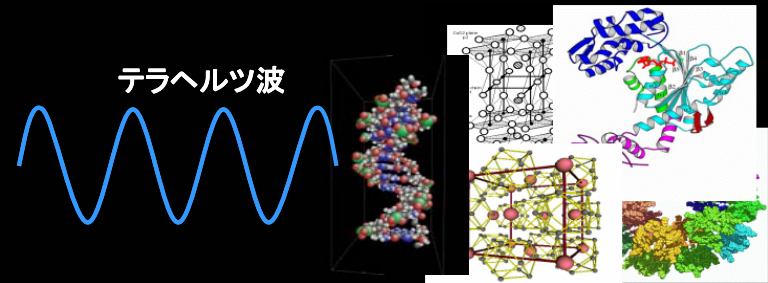
- ①高透過性、微細波長
- ②生体分子、物質等の励起振動数帯にある
- ③利用電波周波数領域を拡大

### 情報化社会の基盤技術

モバイル映画  
(大容量通信)



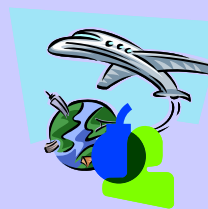
●テラヘルツ帯域で物体を透過し、  
原子、分子と強く相互作用



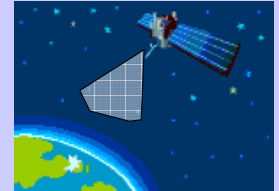
●新しい分析法、センサー、制御技術  
を生む(単色性、平均強度から連続  
波テラヘルツ波が有効)



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)

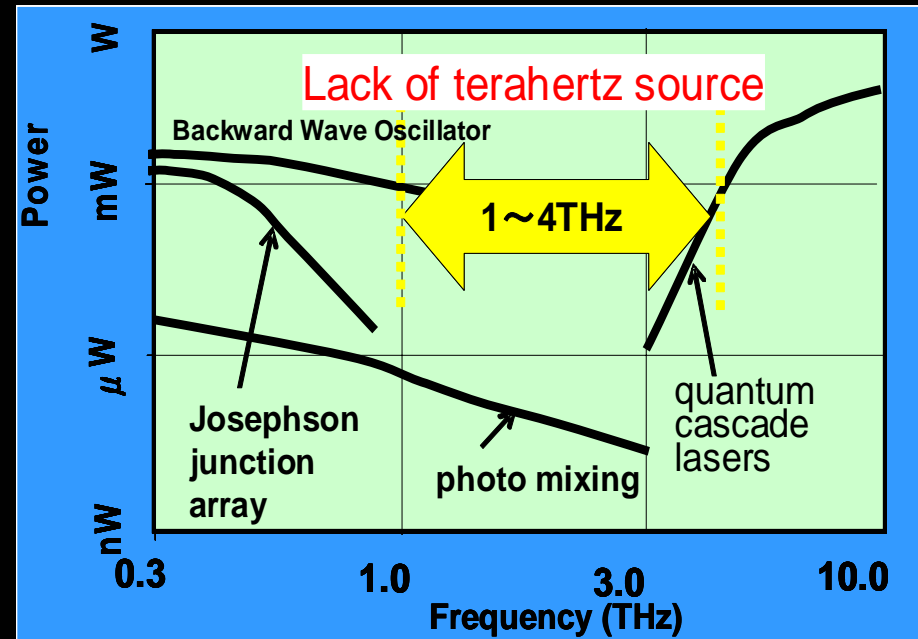
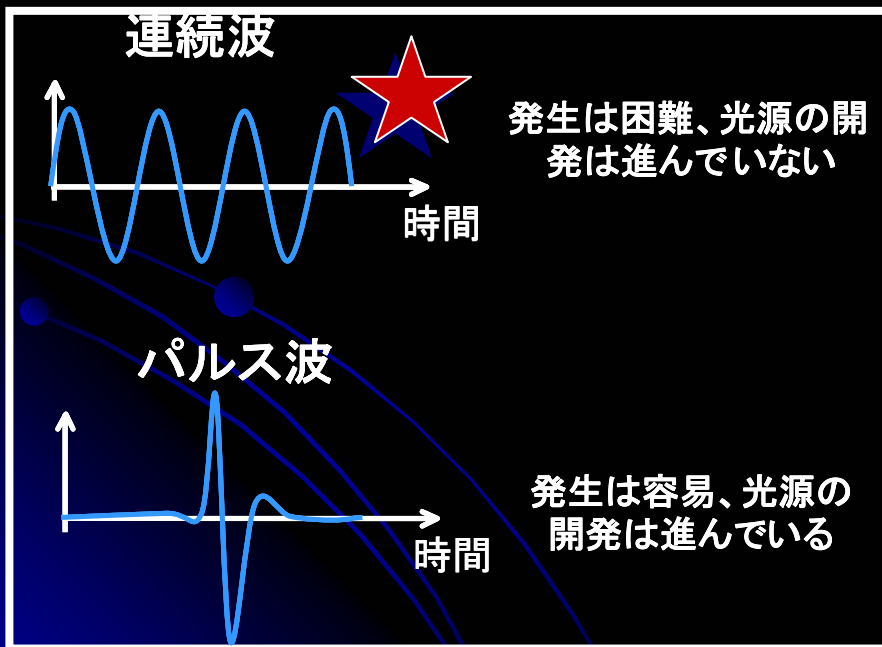


汚染物質、生体系の  
連続モニタリング  
(環境対策)

# 背景

## テラヘルツ波技術の課題⇒新光源開発

- 開発の焦点: 従来開発のパルス波方式ではなく、連続波テラヘルツ波方式 (単色で通信に、また雑音の無い分析光に利用可能で、また周波数が可変)
- 従来の連続波光源  
量子カスケードレーザ、光子混合、後進波管等  
⇒周波数が固定か、**有用な1~4THzで低出力**

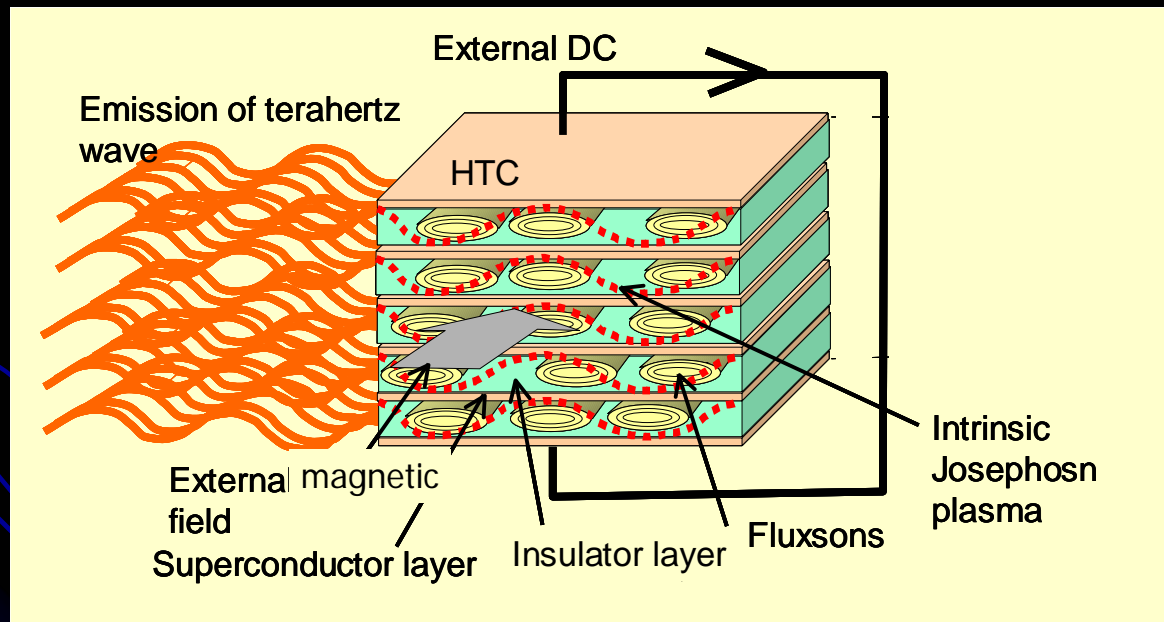


広帯域で単色、周波数可変、mW級の高出力な新光源の開発が課題  
特に、1~4THz帯域

# 目的

## 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)

- 連続波テラヘルツ波を安定かつ高出力で発生する条件: **実験のみで発見は困難**.
- 理論のシミュレーション: 膨大な計算量が必要、当時の計算機能力では困難
- 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



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<sup>5</sup>

# 研究フロー

## (基礎) テラヘルツ波発振

2003,04:

### □発振条件解明-1

(端面放射方式を対象)

◆概略探索により1つの発振条件を発見⇒放射テラヘルツ波の特性解明(PRB/2005)

### □発振メカニズムの解明

◆Cavity励起、定在波、不規則分布フラクソンの振動

2005,06

### □発振条件解明-2

(最適発振条件解明)

◆(a)端面発振方式

◆(b)上面発振方式

◆(c)周波数可変幅の拡大

## (応用)

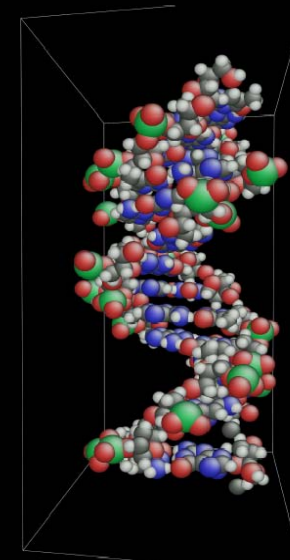
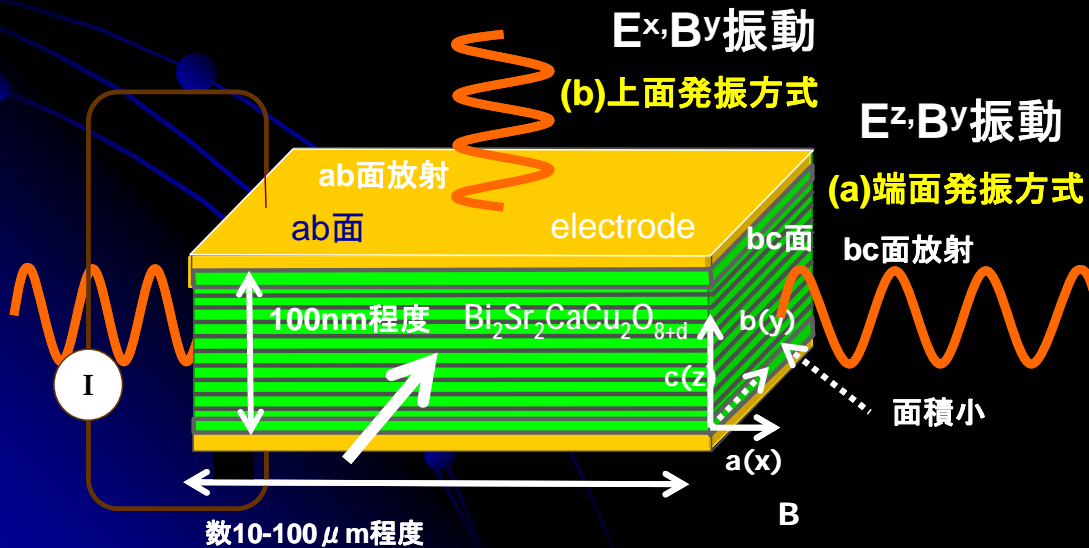
2006,07,08

### □ テラヘルツ波応用への貢献

- 分析:テラヘルツ波と物質、生命分子の相互作用解明
- 大容量通信のための発振帯域拡大

### □ 実用素子開発への寄与

- 導波管(素子外部への効率的取り出し法)



# 支配方程式

## 変数

(1) 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

(2) 電磁気学的変数: 電場、磁場、電荷

## 方程式

(1) 不変ゲージ位相差の式 **Coupled sin-Goldon** 方程式: 非線形方程式

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

(2) 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

# 今年度の計画

## ■ 発振条件の解明

- ①**最適発振条件の解明A**(素子端面発振方式:実験先導のための最優先課題) 実験家に具体的指針を与える発振条件のデータ整備。H17年度から開始したが、計算資源制限から途上にある。18年度に継続し実施し、終了させる。
- ②**最適発振条件の解明 B**(素子上面発振方式:素子機能拡大のため)H18,19年度中に実施。
- ③**周波数可変幅を拡大する条件の解明**(素子機能拡大のため) H18,19年度中に実施。

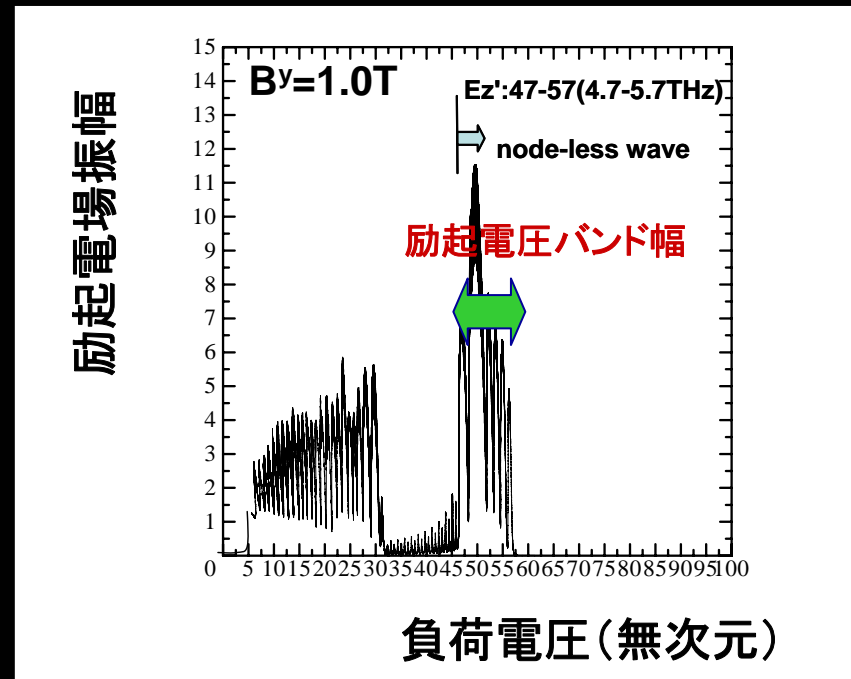
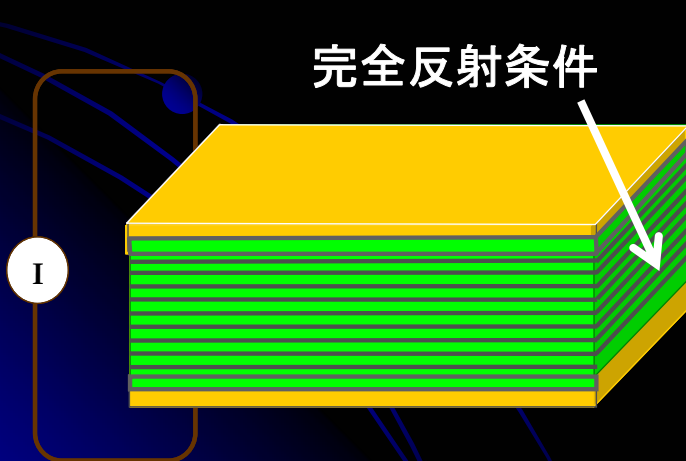
## ■ テラヘルツ波応用シミュレーション

- ①**テラヘルツ波と物質、生命分子の相互作用解明** テラヘルツ波と物質、生命分子の共鳴現象解明のための大規模シミュレーション技術を開発。(a) **モデルの準備**と大規模モデルの整備H18年度に、MORIS(タイトバインディング分子動力学法)を発展させ、相互作用モデルを準備、H19年度に大規模モデルの整備予定。(b) 生命分子との相互作用解析H20年度にテラヘルツ波と蛋白質分子の相互作用解析を実施予定。
- ② **大容量通信のための発振帯域拡大**:0.3-10THzの広範囲で単一方式により高出力、周波数可変条件を解明するため超伝導物質の種類を変えた解析を実施。H18年度に予備解析、H19-20年度に詳細解析を実施予定。

# 今年度のシミュレーション

## ◆ 最適発振条件解明のために

- パラメータ(磁場の侵入長)  $\lambda_c$ ,  $\lambda_{ab}$ 、外部磁場、層数、素子の長さ)サーベイにより、発振に寄与する因子の影響度を把握
- 解析条件
  - 内部励起条件の解明に集中するため、内部のみを解く
    - 端面完全反射条件: 真空中におかれた状態の近似計算
    - 物性値は温度により変化するが、十分な冷却の下で温度一定の熱平衡状態にあるとして、物性値は各計算ケースで一定値を与える。
- 計算内容: 外部電流値を変化させ、負荷電圧と励起電場の振幅の関係をパラメータサーベイ(注目点は、励起電圧バンド幅)。



# 今年度の成果

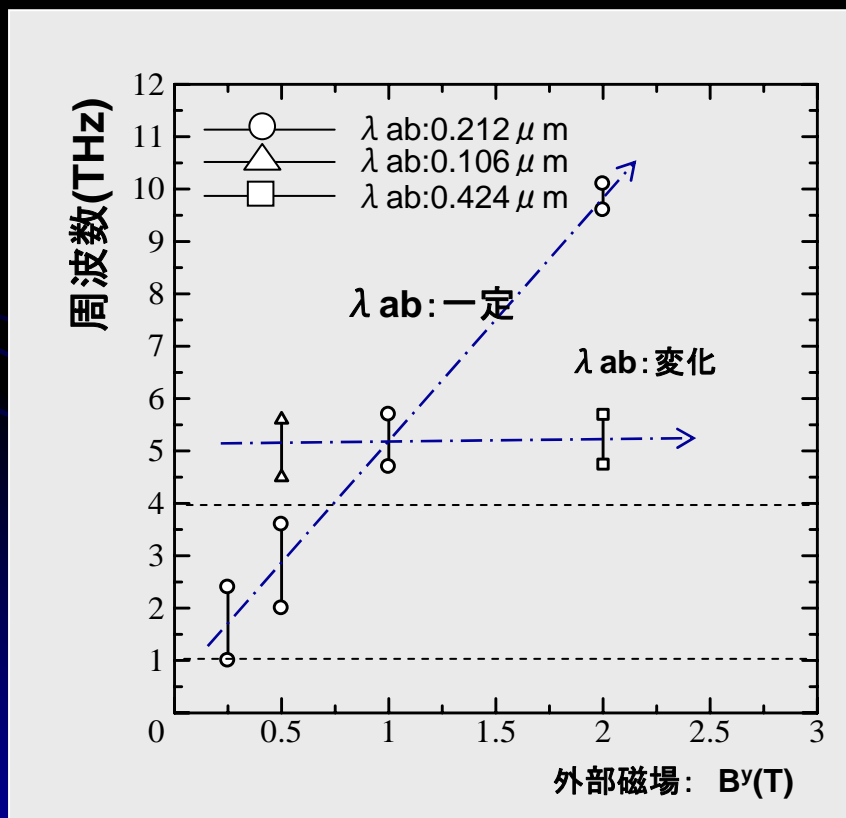
- <成果> 発振条件解明に予想以上の計算資源が必要になったため発振条件解明に集中した。
- 最適発振条件の解明
  - ①素子端面発振方式: 最適発振条件を支配する主な制御パラメータをつきとめた。
    - 高出力(ノードレス波(c軸)、できるだけ多層)、1~4THz(最も有用)、周波数可変な発振の条件を解明
    - 例えば、周波数の可変幅は、磁束量子間の相互作用の強さを示すオーバーラップパラメータ(磁束量子の電流核の半径/磁束量子間の距離)で決まり、このパラメータ値を減じれば周波数の可変幅は拡大することを明らかにした。これは、周波数可変幅が広く、応用範囲が広い発振素子の設計条件を与える……
  - ②素子上面発振方式: 素子上面に平行な振動電場が放射するため、振動電場と超伝導電流との関係の詳細方程式を新たに開発した。そのモデルをコードに組み込みテストランを実施中。
- テラヘルツ波応用シミュレーション
  - ①テラヘルツ波と物質、生命分子の相互作用解明: モデルの準備 時間依存分子動力学、第一原理分子動力学法モデルへの電磁界モデルの導入を検討中。
  - ②大容量通信のための発振帯域拡大: 今年度の発振条件の研究結果から、本研究で対象としている物質Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>Ca Cu<sub>2</sub>O<sub>8</sub>+を使い、By/λ ab、オーバーラップパラメータを制御することにより、大容量通信に必要な0.3-10THzの広範囲で高出力、周波数可変な発振素子を開発できる可能性があることを明らかにした。ただし、1THz以下ではジョセフソンプラズマ励起の不安定性も生起するため、他の超伝導物質で1THz以下での安定化条件を調べる。(次年度以降)

# 成果1: 最適発振条件の解明: 素子端面発振方式

## 最適発振条件とは

- 高出力(ノードレス波(c軸)、できるだけ多層)、1~4THz(最も有用)、周波数可変な発振の条件

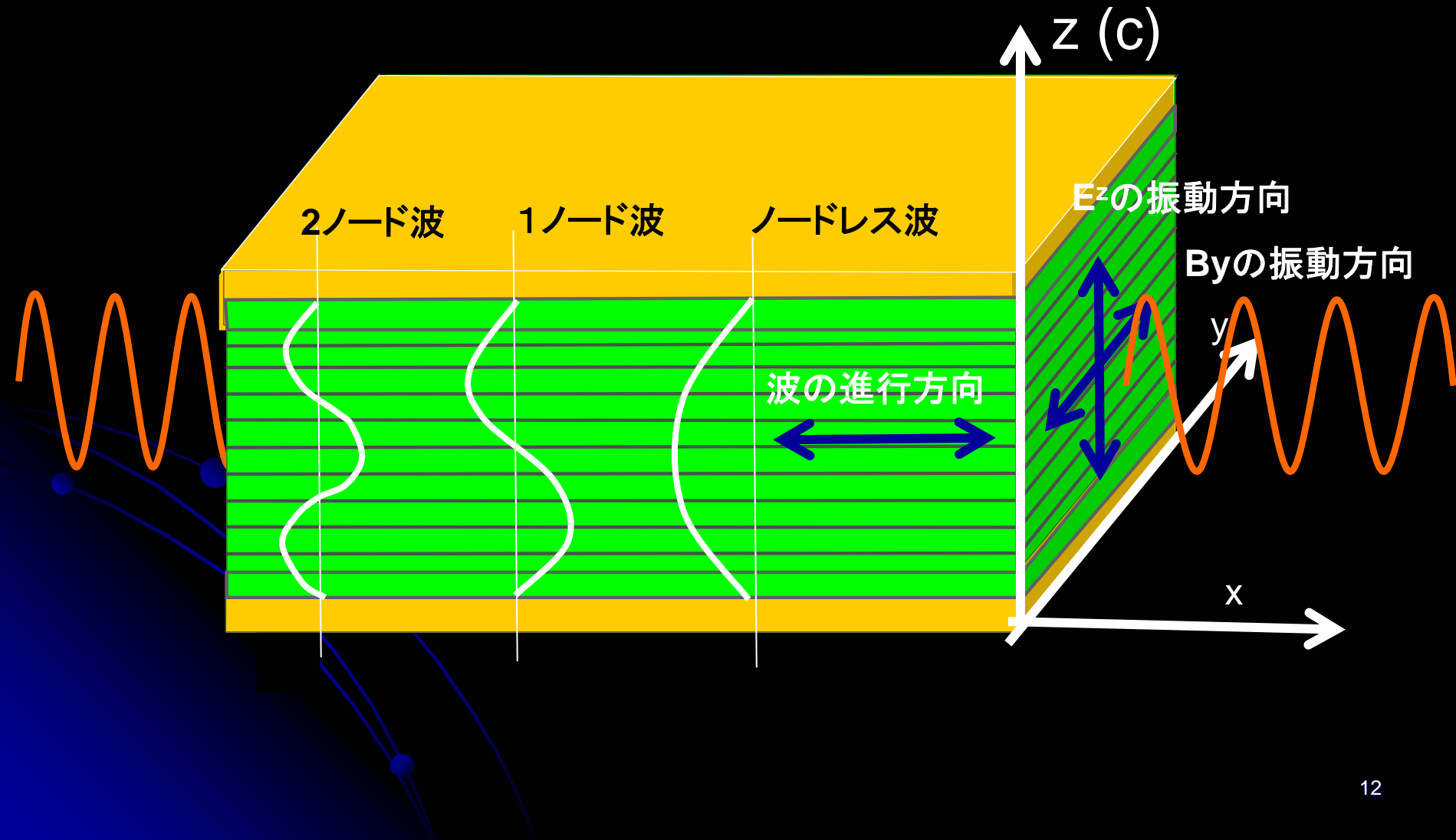
## □ 高出力発振条件(ノードレス波の発振条件)



$\lambda_c: 150 \mu\text{m}$ , 層数: 70 固定

$\lambda_{ab}$ : London penetration depth (for c-axis)

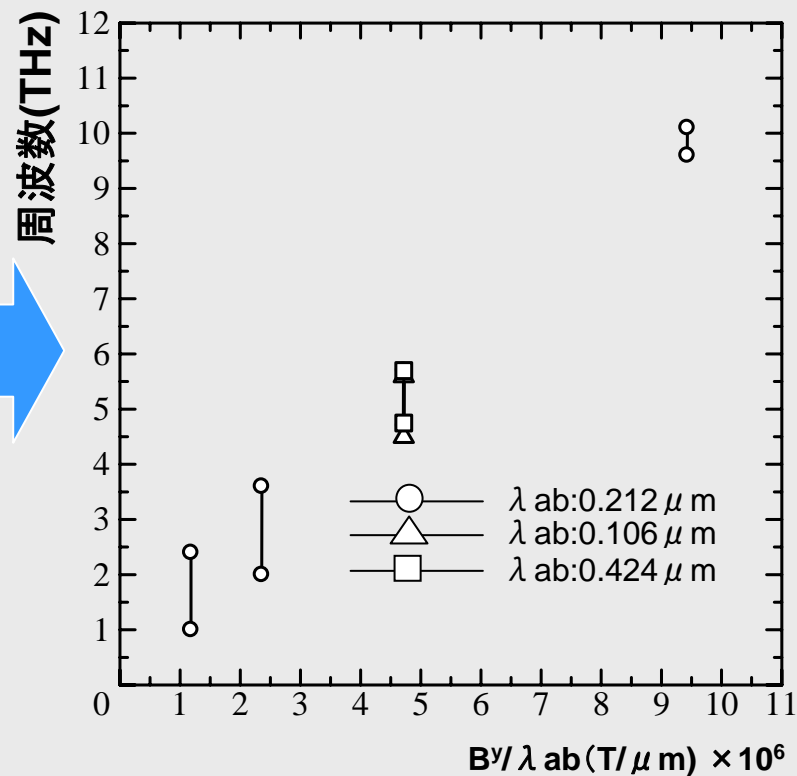
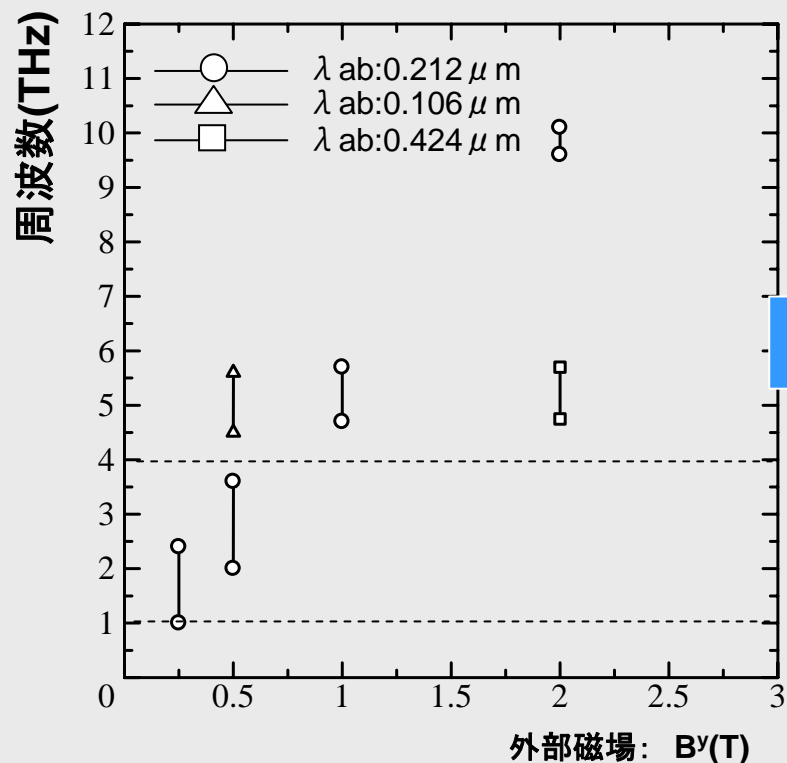
# ノードレス波



# 成果1: 最適発振条件の解明: 素子端面発振方式

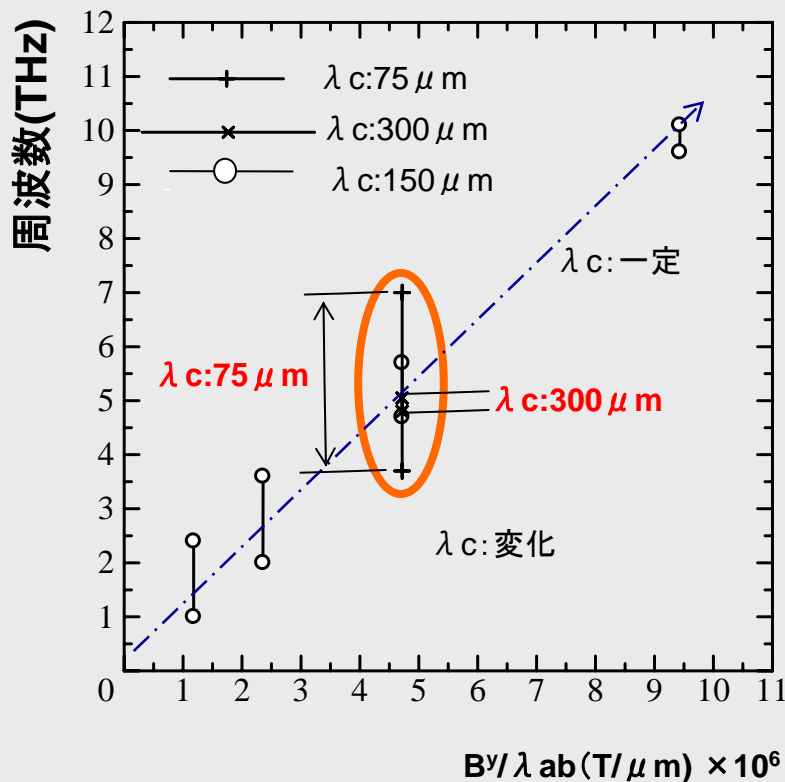
□高出力発振条件(ノードレス波の発振条件)

ノードレス波の励起周波数は $B_y/\lambda_{ab}$ で整理すると1つの線上にのる:  
⇒  $B_y/\lambda_{ab}$ により、高出力テラヘルツ波の発振周波数を制御可能



# 成果1: 最適発振条件の解明: 素子端面発振方式

## □周波数可変幅を拡大する条件



- $\lambda_c$ を300,150,75  $\mu m$ と変化  
⇒周波数可変幅が拡大  
 $\Delta f = 0.25, 1.0, 3.4$  THz

( $B^y / \lambda_{ab}$ を固定、周波数可変幅の中心周波数は同じ 5.2THz)

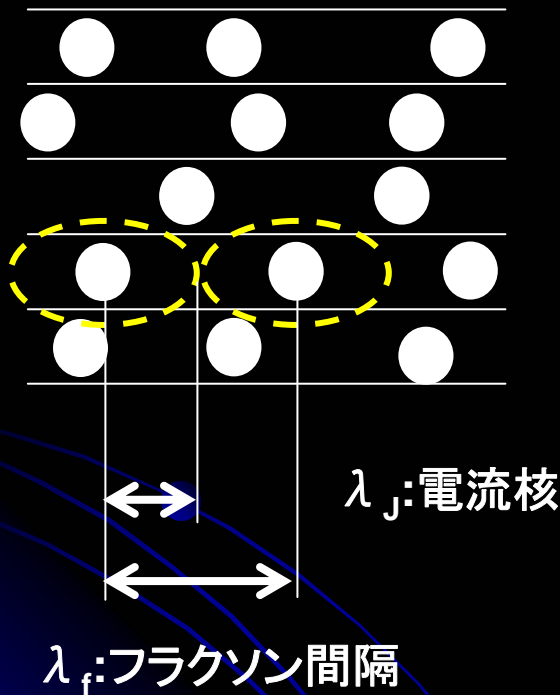
どう整理されるのか!

$\lambda_{ab}: 0.212 \mu m$ , 層数70

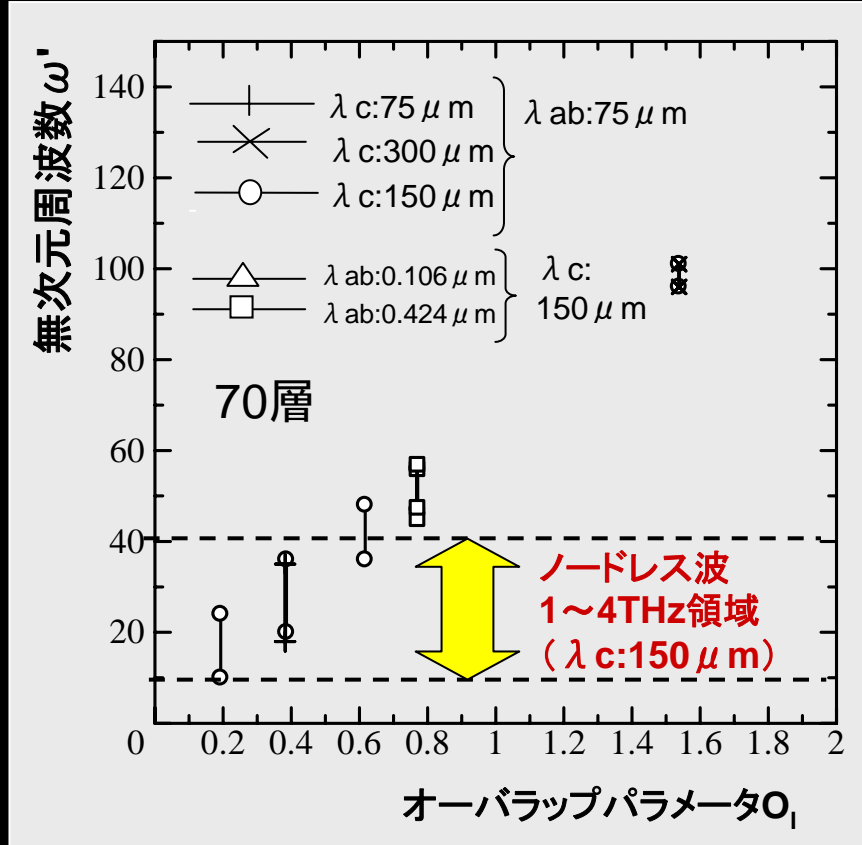
# 成果1: 最適発振条件の解明: 素子端面発振方式

## □周波数可変幅を拡大する条件

$O_1 = \lambda_j / \lambda_f = (D^2 \lambda_c / \phi_o) B_y / \lambda_{ab}$   
 フラクソンの相互作用の強さの指標



$\omega'$ :  $\omega / \omega_p$  (角周波数/プラズマ周波数)

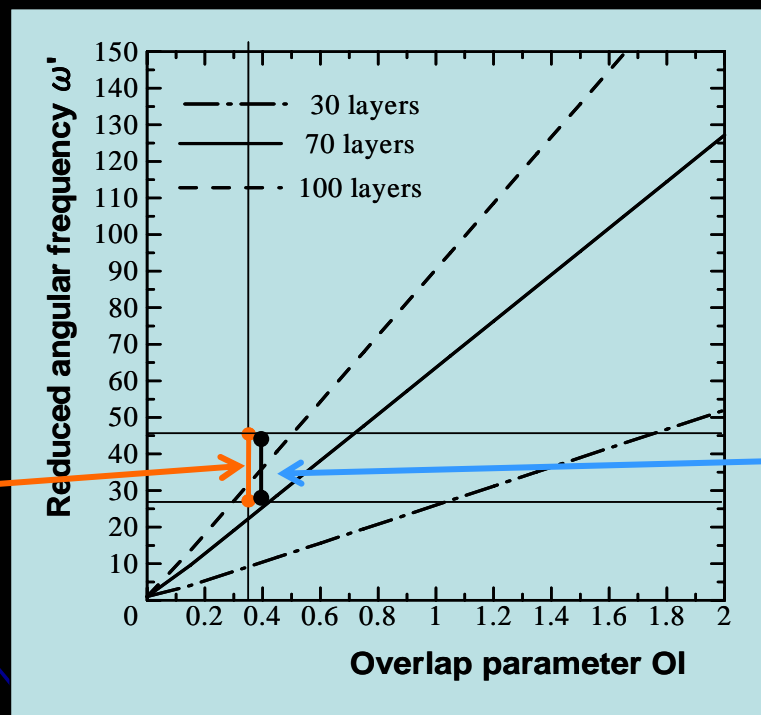


- $O_1$ で整理すると1つの線上にのる:
- 無次元ノードレス波(高出力)の発振周波数(無次元発振電圧)と周波数可変幅は、 $O_1$ で制御可能(層数固定)
- $O_1$ が小さい領域で、応用上重要な1~4THzが発振

# 成果1: 最適発振条件の解明: 素子端面発振方式

## □ 層数の影響

- 層数効果: 層数が増加すると、ノードレス波発振周波数は増加
- 本研究成果 (PRB 71, 134515 (2005)) の結果とも整合



100層での励起周波数幅  
( $\lambda_c 200 \mu m$ , 1.0T)  
本研究論文PRB 71,  
134515(2005)

100層での励起周波数  
幅( $\lambda_{ab} 0.212 \mu m$ ,  
 $\lambda_c 150 \mu m$ , 0.5T)

# 成果1: 最適発振条件の解明: 素子端面発振方式

まとめ: 発振条件は $O_1$  層数により記述可能

さらに、摂動法で求めた分散関係式を $O_1$ 、層数で整理してみると

- 応用上有用な1-4THzを発振する $O_1$ が小さい領域では、摂動解は不適切  
⇒ 応用上重要な発振領域に関しては大規模シミュレーションが必須
- $O_1$ が大きくなると、非線形解は摂動解に漸近、周波数可変性は減

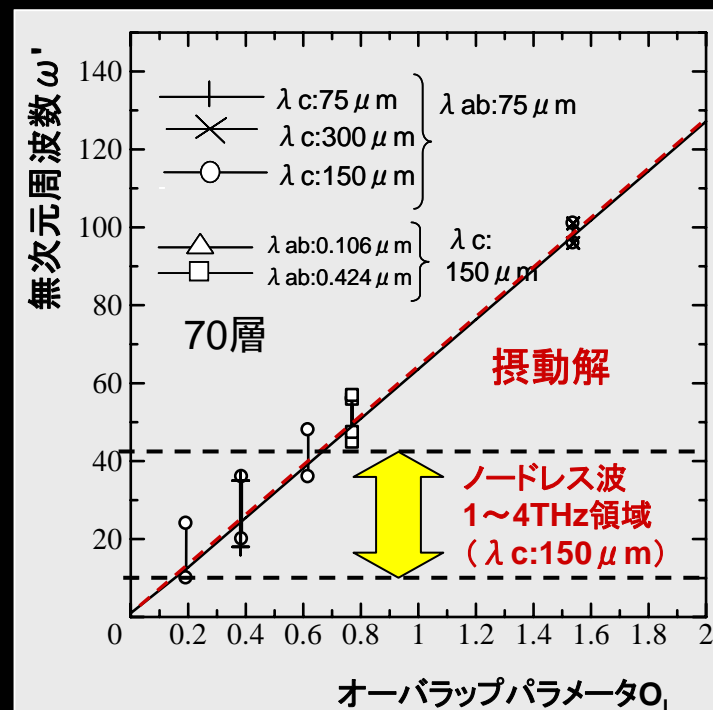
摂動法で求めた分散関係式

$$\omega' = \sqrt{1 + \frac{By'}{1 + 2\frac{\lambda_{ab}^2}{sD} \left(1 - \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right)\right)}}$$

$O_1$ ,  $By'/\lambda_{ab}$ で整理

$$\omega' = \sqrt{1 + \left\{1 - \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right)\right\}^{-1} \left(\frac{2\pi}{D}\right)^2 \frac{sD}{2} O_1^2}$$

$$f = \sqrt{\left(\frac{\omega_p}{2\pi}\right)^2 + \left(1 - \cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right)\right)^{-1} \left(\frac{cD\sqrt{sD} By'}{\sqrt{2\epsilon_c}\Phi_0 \lambda_{ab}}\right)^2}$$



# 成果2: 最適発振条件の解明(B): 素子上面発振方式

## □ 現在の方程式

- 素子端面に平行な電場 $E_z$ 、磁場 $B_y$ の振動に対しては厳密な式
- しかし、素子上面に平行な電場 $E_x$ の振動に対しては近似式

## □ 素子上面発振方式:

- 素子上面に平行な振動電場が放射する
  - ⇒ 振動電場と超伝導電流との関係の詳細方程式を新たに開発 (次項参照)
  - ⇒ そのモデルをコードに組み込みテストランを実施中

# 新支配方程式(計算量は現状の数倍、下線:現状の研究の範囲)

最新版テストラン中

Step1:  $B^{y'(n+\frac{1}{2})}$  ←  $\underline{\underline{\partial_{t'} \mathbf{B}' = -\nabla \times \mathbf{E}'}}$  (136) 時間離散化 at  $n$

Step2:  $\mathbf{E}'^{(n+1)}$  ←  $\underline{\underline{\epsilon \partial_{t'} \mathbf{E}' + \mathbf{J} \mathbf{o} = \nabla \times \mathbf{B}'}}$  (137) 時間離散化 at  $n + \frac{1}{2}$

Step3:  $B_{l+1,l}^{y'(n+\frac{1}{2})}$  ←  $\{ D' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'}^2 + \beta_p \partial_{t'}) - \zeta \Delta^{(2)} + 1 \} B_{l+1,l}^{y'}$   
 $= \underline{\underline{\partial_{x'} \{ \varphi_{l+1,l} + D' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'} + \beta_p) E_{l+1,l}^{z'} \}}}$  (138) 時間離散化 at  $n - \frac{1}{2}$

Step4:  $\mathbf{E}^{x'(n+1)}_1$  ←  $\{ \alpha s' D' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'}^2 + \beta_p \partial_{t'}) - [\alpha s' D' \epsilon'_{ab} (\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2) + \alpha \Delta^{(2)}] + 1 \} E_l^{x'}$   
 $= D' \left( 1 - \frac{\alpha}{\zeta} \right) \partial_{t'} P_l^{x'}$  (139) 時間離散化 at  $n$

Step5:  $\mathbf{E}^{z'(n+1)}_{1+1,l}$  ←  $\{ \alpha s' D' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'}^2 + \beta_p \partial_{t'}) - [\alpha s' D' \epsilon'_{ab} (\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2) + \alpha \Delta^{(2)}] + 1 \} E_{l+1,l}^{z'}$   
 $= \left( 1 - \alpha s' D' \epsilon'_{ab} \cos(\varphi_{l+1,l}) \right) \underline{\underline{\partial_{t'} \varphi_{l+1,l}}}$  (140) 時間離散化 at  $n$

Step6:  $\rho_l^{(n+1)}$  ←  $\{ \zeta s' D' \epsilon'_{ab} \partial_{t'}^2 + [\alpha s' D' \epsilon'_{ab} (\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2) + \alpha \Delta^{(2)}] + 1 \} \rho_l'$   
 $= \frac{1}{s'} \Delta_l^{(1)} \partial_{t'} \varphi + \epsilon_{ab} \partial_{t'} \left\{ \hat{\beta}_p (\partial_{x'} E^{x'} + \partial_{y'} E^{y'}) + \hat{\beta}/s' \Delta_l^{(1)} E^{z'} + \zeta D' \Delta_l^{(1)} \sin \varphi \right\}$  (141) 時間離散化 at  $n$

Step7:  $P_l^{x'(n+\frac{3}{2})}$  ←  $(\zeta s' D' \epsilon_{ab} \partial_{t'}^2 \beta_p \partial_{t'} - \zeta \Delta^{(2)} + 1) P_l^{x'}$   
 $= -\partial_{x'} \left\{ \zeta \Delta_l^{(1)} \varphi + (s' D' \zeta \epsilon'_{ab} \partial_{t'} + \hat{\beta}_p) \alpha s' \rho_l' \right\}$  (142) 時間離散化 at  $n + \frac{3}{2}$

Step8:  $\varphi_{l+1,l}^{(n+\frac{3}{2})}$  ←  $\underline{\underline{(1 - \zeta \Delta^{(2)}) I_{l+1,l}^{z'} = (\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2) \varphi_{l+1,l} + \zeta s' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'} + \beta_p) (\partial_{x'} E^{x'} + \partial_{y'} E^{y'})}}$  (143) 時間離散化 at  $n + \frac{3}{2}$

現状の式は、素子上面に平行な電場Ex振動に対しては近似式

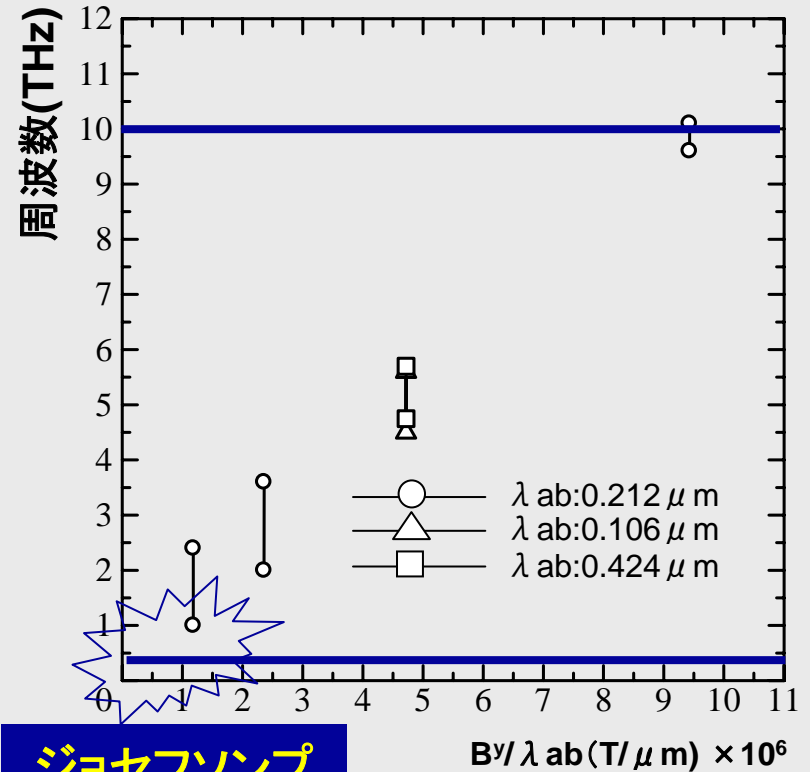
# 成果3: テラヘルツ波応用シミュレーション

## □ テラヘルツ波と物質、生命分子の相互作用解明

- **モデルの準備** 古典分子動力学、強結合分子動力学法、第一原理(DFT)分子動力学法モデルへの電磁界モデルの導入を検討中。
  - 計算量、モデルの精度のバランスから強結合分子動力学法を採用へ

## □ 大容量通信のための発振帯域拡大

- 今年度の発振条件の研究結果から、本研究で対象としている物質  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  を使い、 $B\lambda/\lambda_{ab}$ 、オーバーラップパラメータ、層数を制御することにより、大容量通信に必要な0.3-10THzの広範囲で高出力、周波数可変な発振素子を開発できる可能性があることを明らかにした。
- ただし、1THz以下ではジョセフソンプラズマ励起の不安定性も生起するため、他の超伝導物質で1THz以下の安定化条件を調べる。(次年度以降)

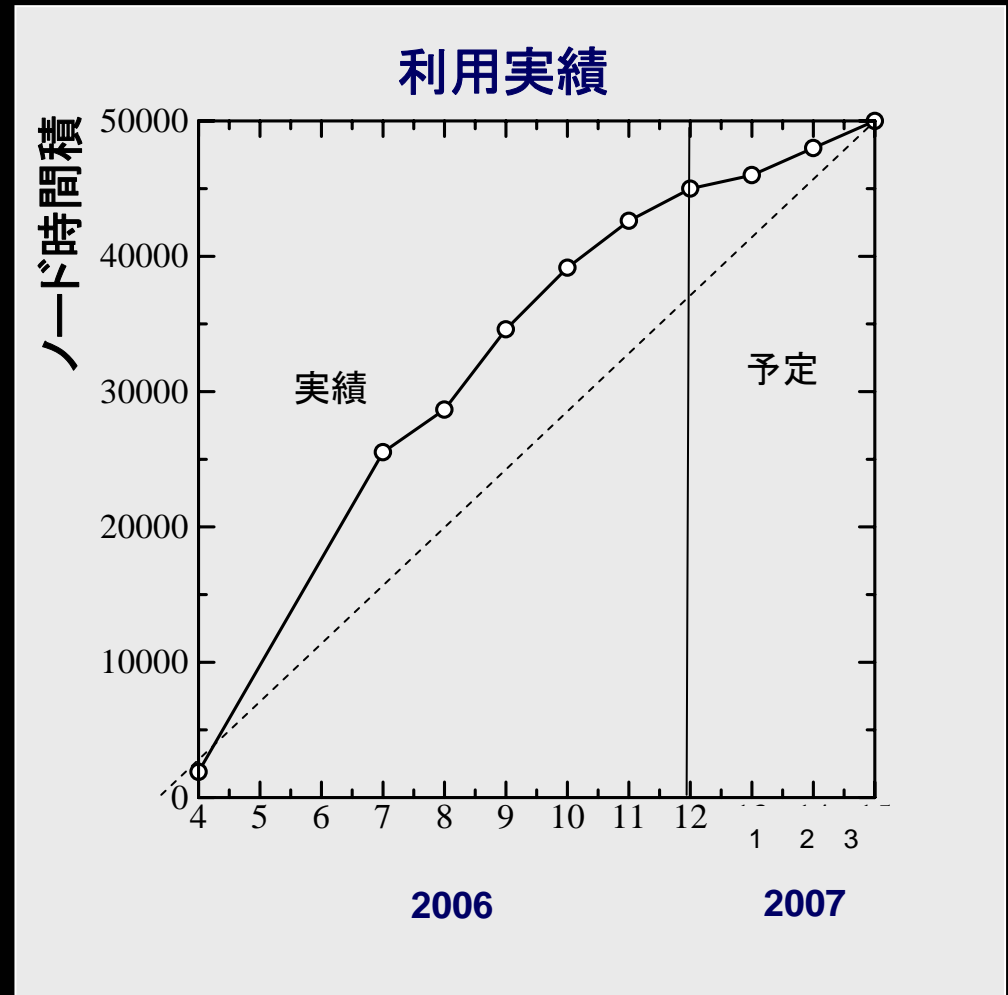


ジョセフソン  
プラズマ励起の  
不安定性

# 利用実績

□ 計算資源不足のため、詳細発振条件の解明に集中投入

- 次年度は、...
- 今年度以上の計算資源予定



# まとめ

(1) 最適発振条件(1~4THz、高出力、周波数可変)を解明

(2) 本研究成果はテラヘルツ発振素子開発に指針を与える

- 本研究論文(PRB 71, 134515, 2005)に沿って、発振を確認した実験(韓国)(日経ナノビジネス,NO52,p45-47(2006))
- 発振理論とデバイス設計概念が検証された

(3) 今後

- 実用的素子開発への貢献
  - 導波管設計(テラヘルツ波を素子から効率よく取り出す方法)
- テラヘルツ波応用への貢献
  - 分光分析:テラヘルツ波と物質、生命分子の相互作用解明(電磁波)
  - 大容量通信のための発振帯域拡大:1THz以下での安定化条件解明

対外発表:

- 原著論文(査読あり):飯塚 幹夫、手島正吾、南一生、宮内敦、中村賢、牧野浩二、立木昌、中村寿、地球シミュレータを活用した新奇材料特性シミュレーション、応用数理(2006/9)、(現在作成中の論文を、米国物理学会誌に投稿予定。)
- 原著論文(査読なし、び雑誌等寄稿):学会等発表 SC2006 で展示。日経ナノビジネス,NO52,p45-47(2006)。
- 講演: ANL国立研究所専門家会議(2006/8)