

# 超伝導放射線検出シミュレーションと 新奇ナノ超伝導発現機構

: 超伝導の階層的高精度シミュレーション

町田 昌彦

日本原子力研究開発機構

システム計算科学センター・シミュレーション技術開発室

共同研究者(5部門から)

シミュレーション 技術開発	原 研 : 山田進・叶野琢磨 電通大 : 今村俊幸
原子ガス 理論	筑波大学: 松本秀樹 慶応大: 大橋洋士
ナノ超伝導 理論	東北大学: 小山富男 大阪府立大: 加藤勝

# ☑ 1、研究の背景（一般）

研究対象： 微細加工超伝導体 (> ナノ $10^{-9}$ m)

量子力学が時に巨視的サイズ、また、時に微視的スケールで現れる人類が目にする最も劇的な物理現象の宝庫

超高感度放射線デバイス

超高速演算デバイス

量子計算デバイス

成功例

Transition Edge Sensor  
(TES)

Single Photon  
Counting Detector  
(SPCD)

超伝導現象の特質とは？

量子多体系である。

強い非線形系である。

シミュレーション研究によるブレークスルー

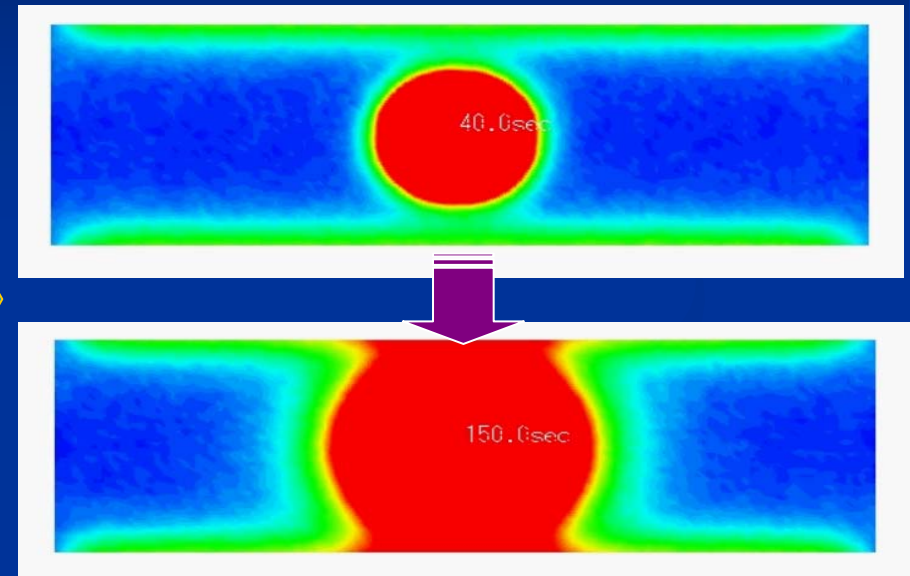
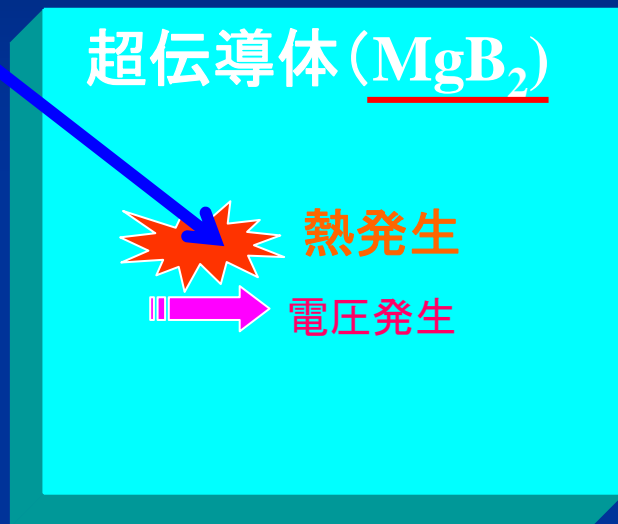
## ☑ 2、研究の(具体的)目標

### ① 超高感度放射線デバイス

地球シミュレータ上での  
高精度シミュレーション

原子力分野でのニーズ

中性子



核反応 :  $B^{10} + n \rightarrow \alpha (1.47\text{MeV}) + Li$

J-PARCでの高速検出器としての期待

時空間分解能等を予測し  
シミュレーションによる開発先導

**今年度の目標①: 遂に観測に成功した結果の具体的説明**

超伝導転移エッジで見つかったシグナルをシミュレーションで再現する。

# ☑ 2、研究の(具体的)目標

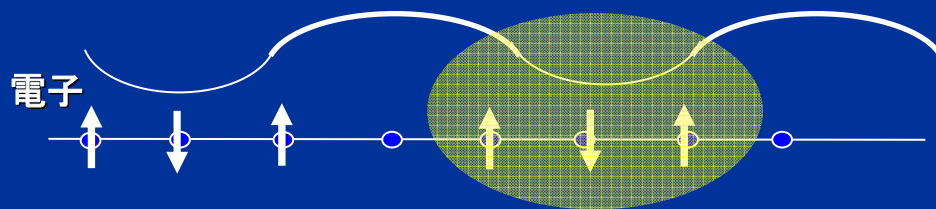
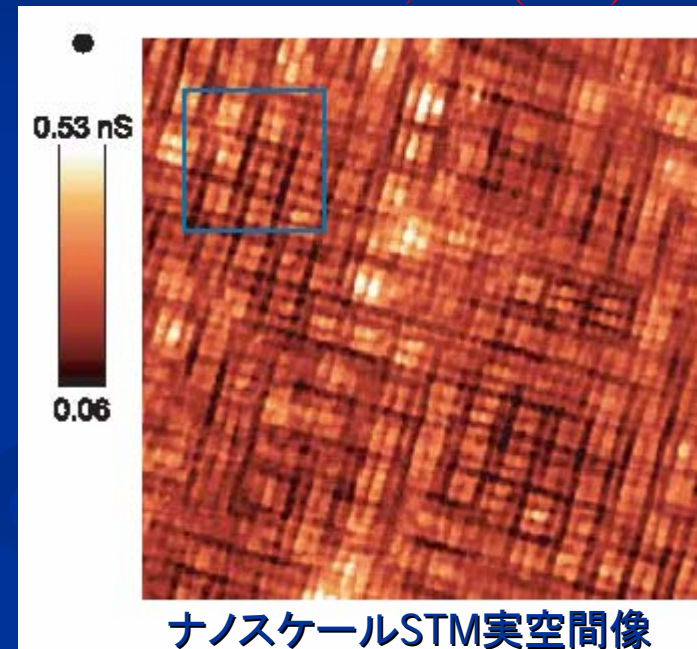
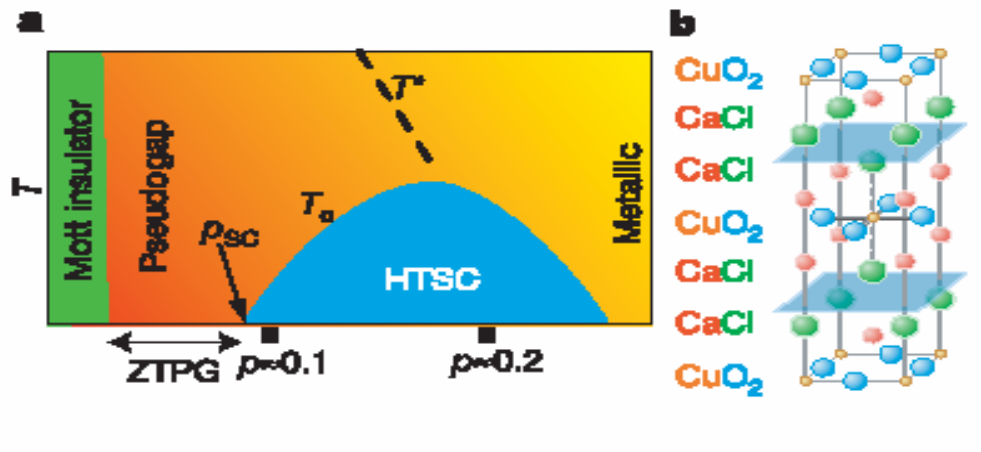
## ②新奇超伝導状態の研究



地球シミュレータで見る  
数值的に厳密な基底状態

ナノスケールの閉じ込めと強く相互作用する電子系

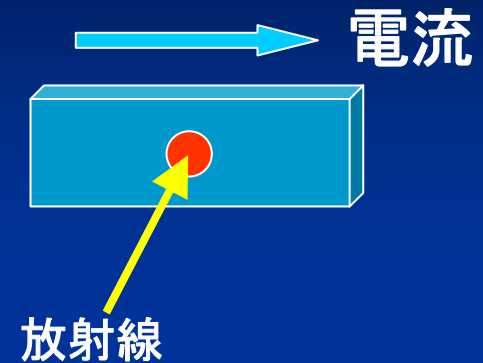
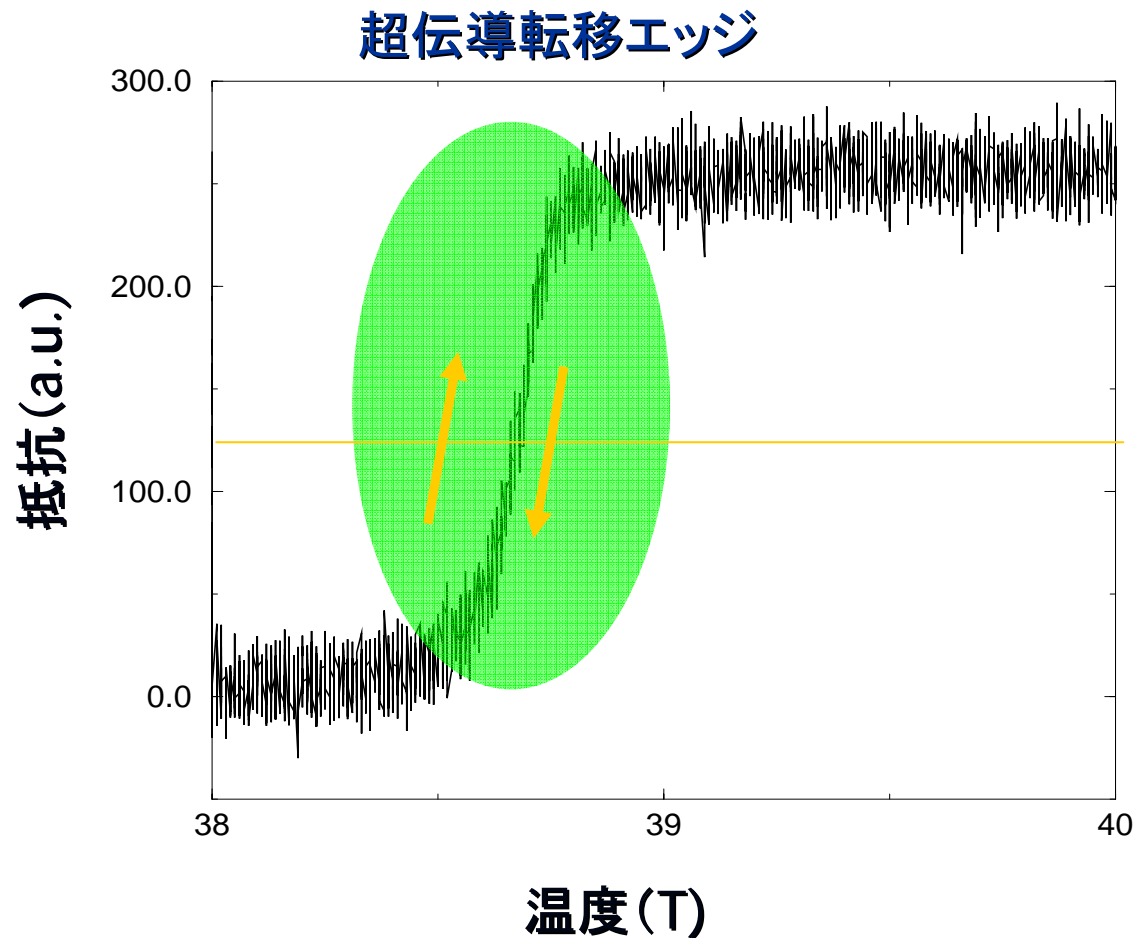
T.Hanaguri et al.  
Nature 430, 1001(2004)



今年度の目標②: 閉じ込められたナノ系電子状態の直接計算

超高速行列演算手法の開発 & 新奇量子状態(電荷非一様状態)の発見

# 目標①：転移エッジでの中性子捕獲後のシミュレーション



検出器開発者の疑問

- ・検出器内の超伝導非平衡ダイナミクスは？
- ・超伝導非平衡ダイナミクスに伴う電磁応答は？

放射線照射後にどのような超伝導ダイナミクスが起こっているかは分からない

# 目標①を実現する理論モデル

半第一原理的計算の枠組みの開発

M.Machida et al.

Phys.Rev.Lett. (1993)

Phys.Rev.Lett. (1995)

時間依存のギンツブルク・ランダウ方程式



$\Delta$ : 超伝導電子密度

$$D^{-1} \left[ \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{2e\varphi}{\hbar} \right] \Delta + \xi^{-2} (|\Delta|^2 - 1) \Delta + \left[ \frac{\nabla}{i} - \frac{2e}{\hbar c} \mathbf{A} \right]^2 \Delta = 0,$$

+ 複素ノイズ

マックスウエル方程式



$\mathbf{A}$ : ベクトル・ポテンシャル(電磁場)

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad \mathbf{j} = \sigma \left[ -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right] + \text{Re} \left[ \Delta^* \left[ \frac{\nabla}{i} - \frac{2e}{\hbar c} \mathbf{A} \right] \Delta \right] \frac{\hbar c^2}{8\pi e \lambda^2} + \text{電磁ノイズ}$$

熱伝導方程式 (エネルギー保存則)



$T$ : 温度,  $W$ : 熱のインプット

$$C_v \frac{dT}{dt} + \frac{dF}{dt} + \text{div}(j_n^Q + J_s^Q) + W = 0$$

$T(\mathbf{r}, t), W(\mathbf{r}, t)$

# 目標①を実現する数値シミュレーション

## インプット (MgB<sub>2</sub>)

超伝導相関長	40 Å	熱浴 $\alpha(T-T_{env})$
超伝導臨界温度	40K	
GLパラメータ	4~8	
比熱	C <sub>v</sub>	
核反応(開放エネルギー)		



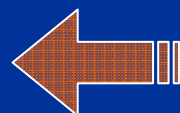
超伝導電子密度 & 温度: 格子点上で定義

ベクトルポテンシャル: リンク上で定義

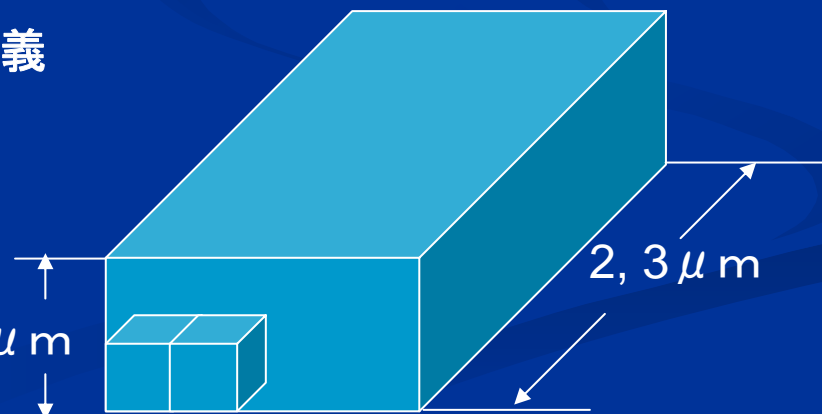
目標サイズ: 2000 × 2000 × 900

最小グリッド

10~20 Å

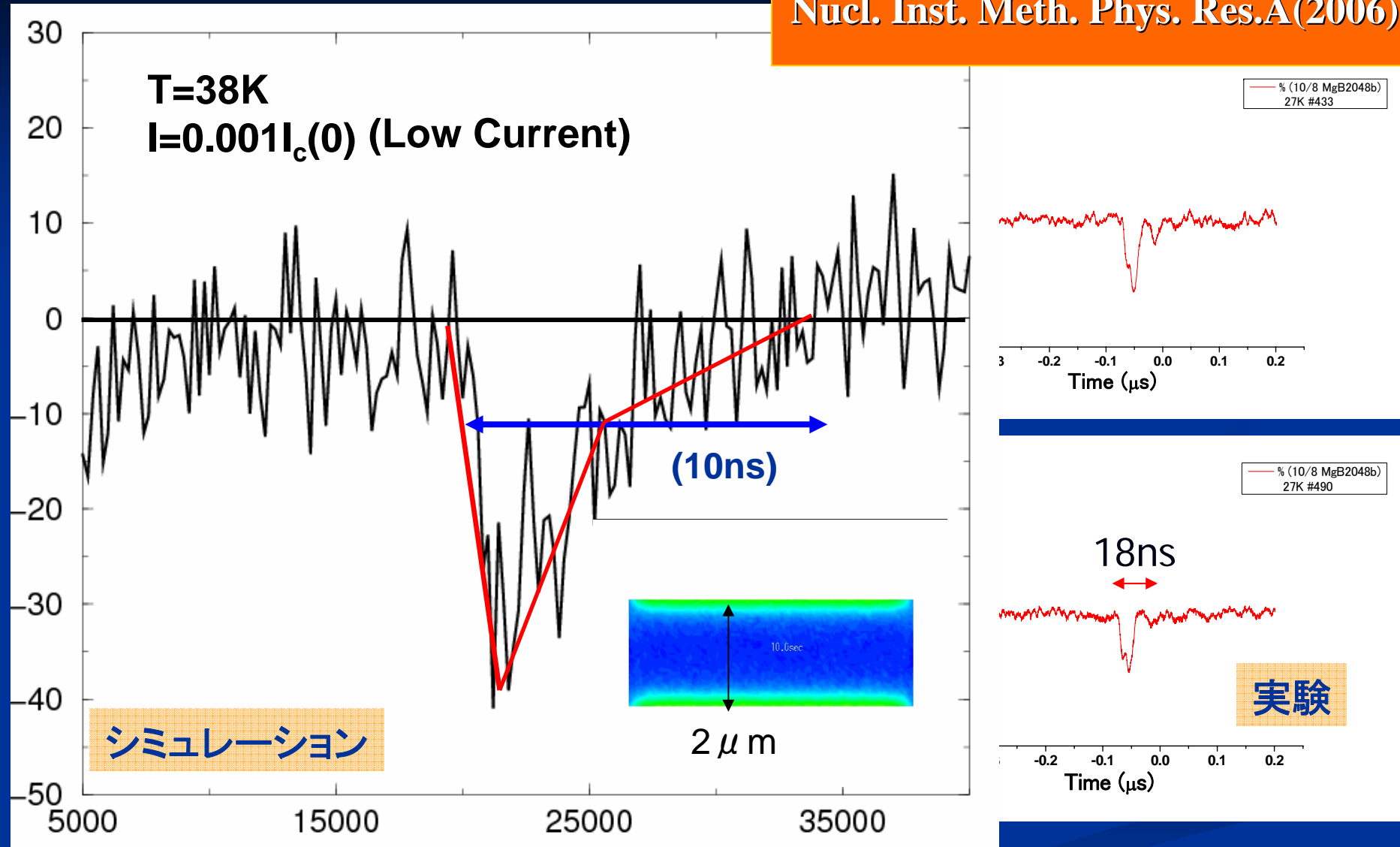


0.5 μm



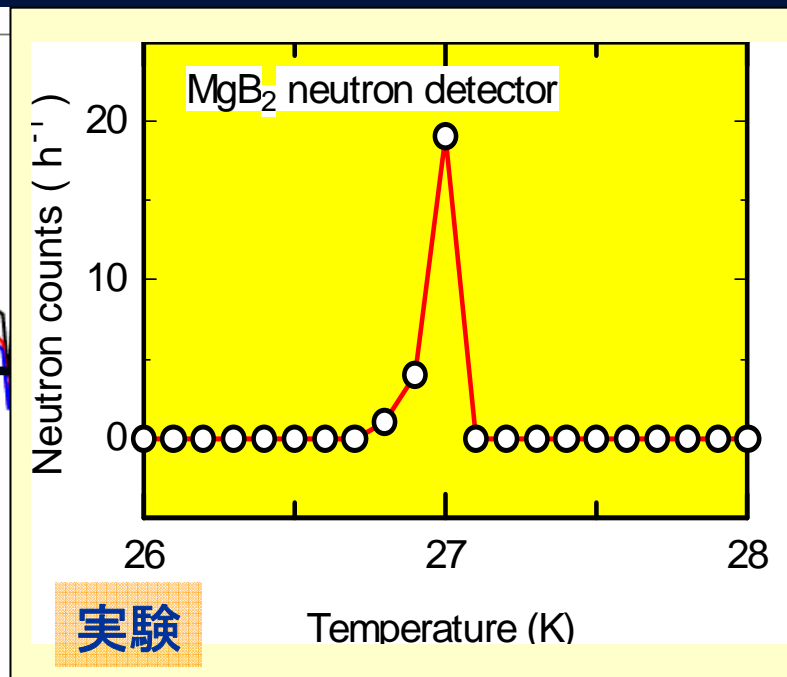
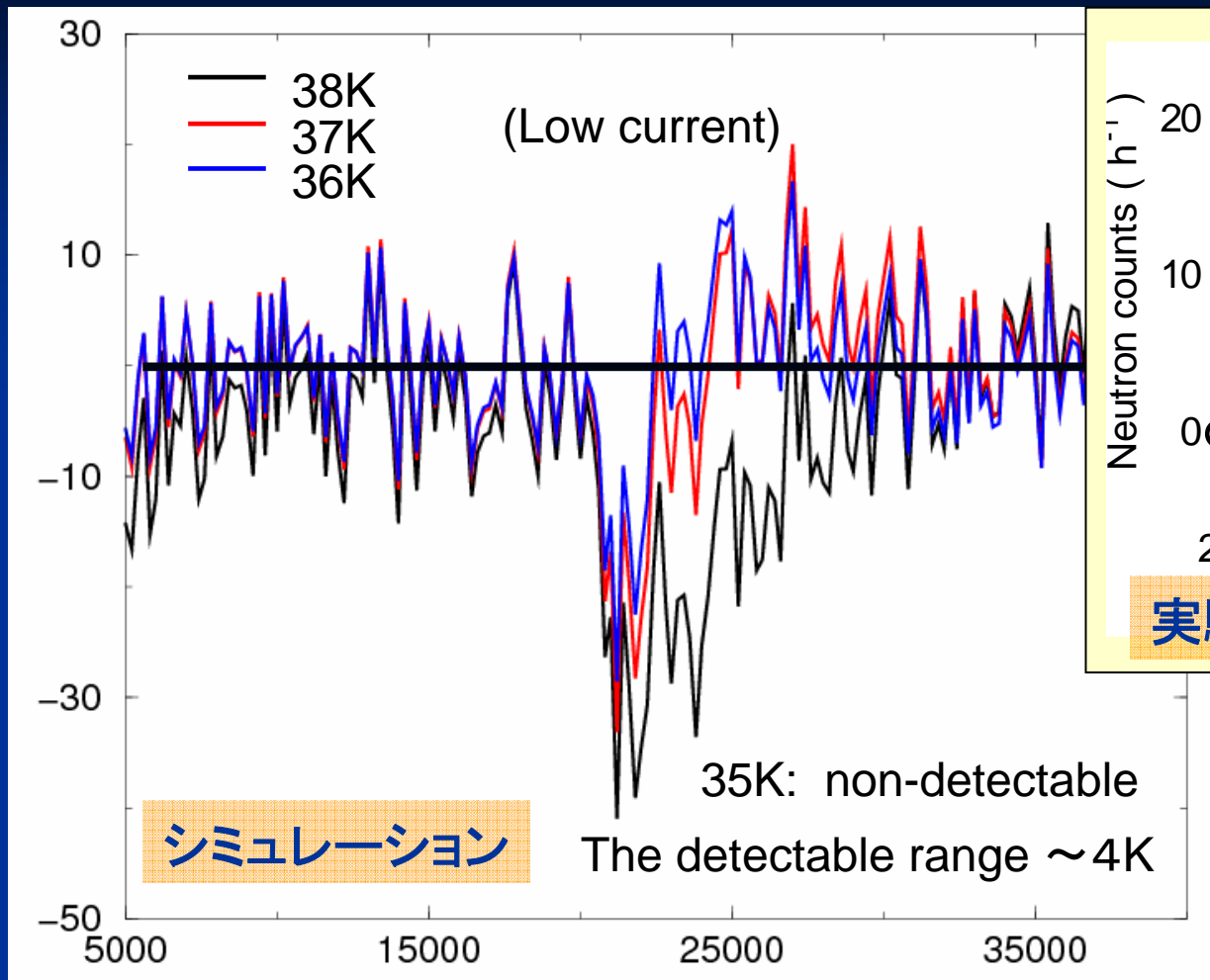
# 目標①のシミュレーション結果 (I)

M.Machida et al.  
Nucl. Inst. Meth. Phys. Res.A(2006)



信号の応答時間が実験とシミュレーションでほぼ一致

# 目標①のシミュレーション結果 (II)

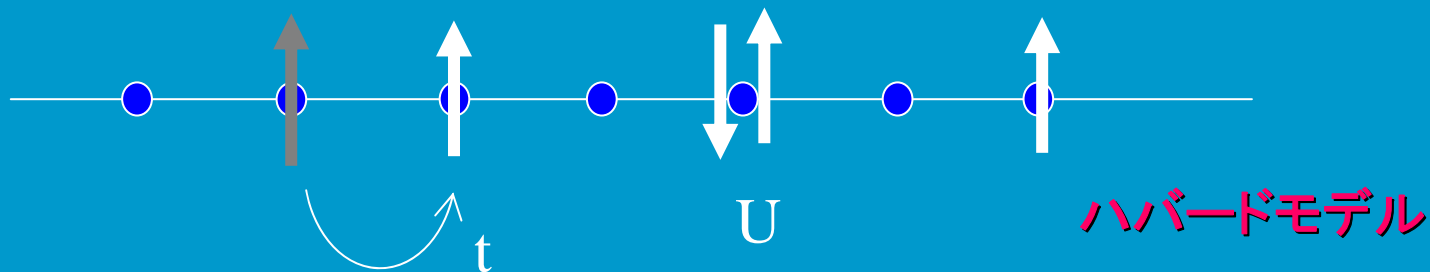


Experiment: ~3K  
Simulation : ~4K

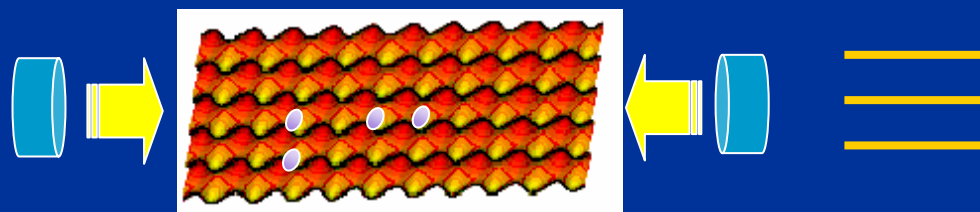
検出温度範囲が実験とシミュレーションでほぼ一致

# 目標②を実現するシミュレーション

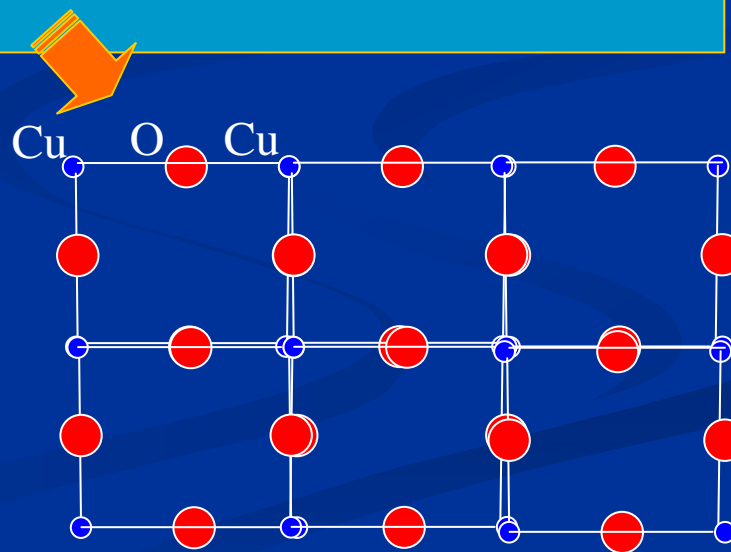
## 厳密対角化による電子状態の直接計算



$$H_{Hubbard} = -t \sum_{i,j,\sigma} [a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} + H.C.] + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$$



周期的ポテンシャル(原子ガス光学格子)



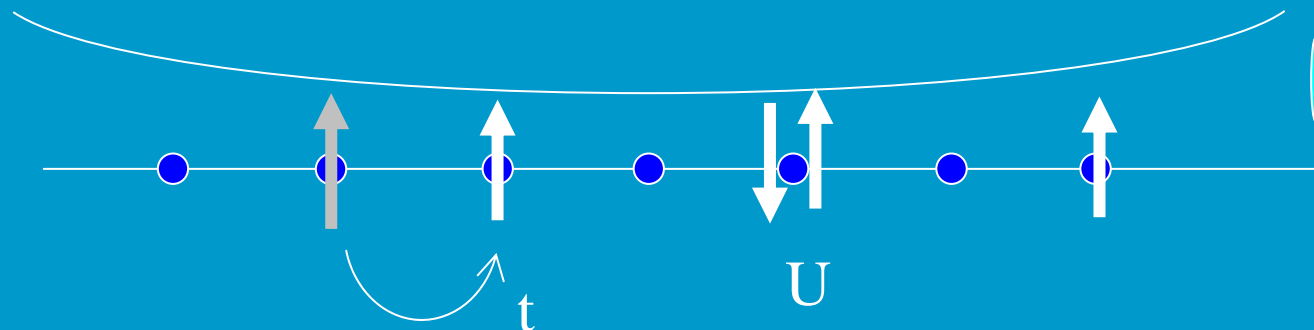
高温超伝導体

# 目標②を実現するシミュレーション

ナノスケールでの  
高温超伝導発現



光学格子中の  
フェルミ原子ガス



$$|0100101\rangle_{\uparrow} |0000100\rangle_{\downarrow} = A$$



$$\begin{pmatrix} \langle A|A\rangle & \langle A|B\rangle \\ \dots \end{pmatrix}$$

24 サイト (7 ↑ 7 ↓ 1次元の問題)  
25 サイト (5 × 5 : 2次元問題)



千数百億次元の行列の対角化問題  
(世界最大次元)

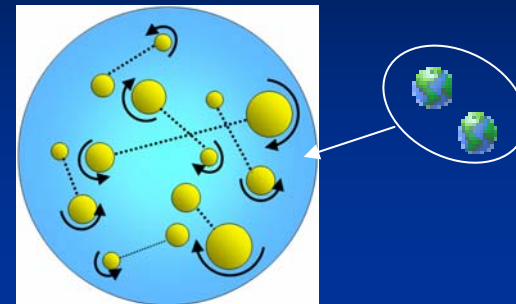


地球シミュレータを用いて初めて可能

# 目標②のシミュレーション結果(～今年度)



2粒子を付け加えた  
ときのエネルギー:  $E_b$

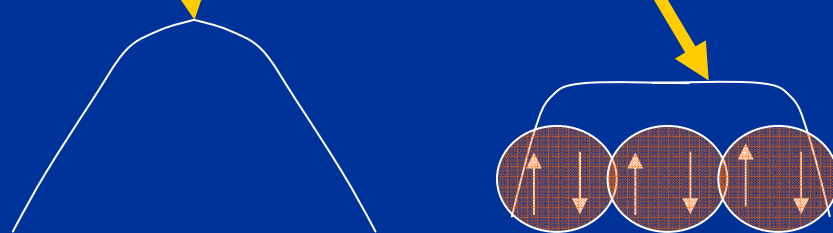


$E_b < 0$ : 超流動不安定性

遠隔ペアリング

換算  $T_c >$  室温

M.Machida, S.Yamada et al.  
Phys.Rev.Lett. (2004)  
Phys.Rev.Lett. (2005)



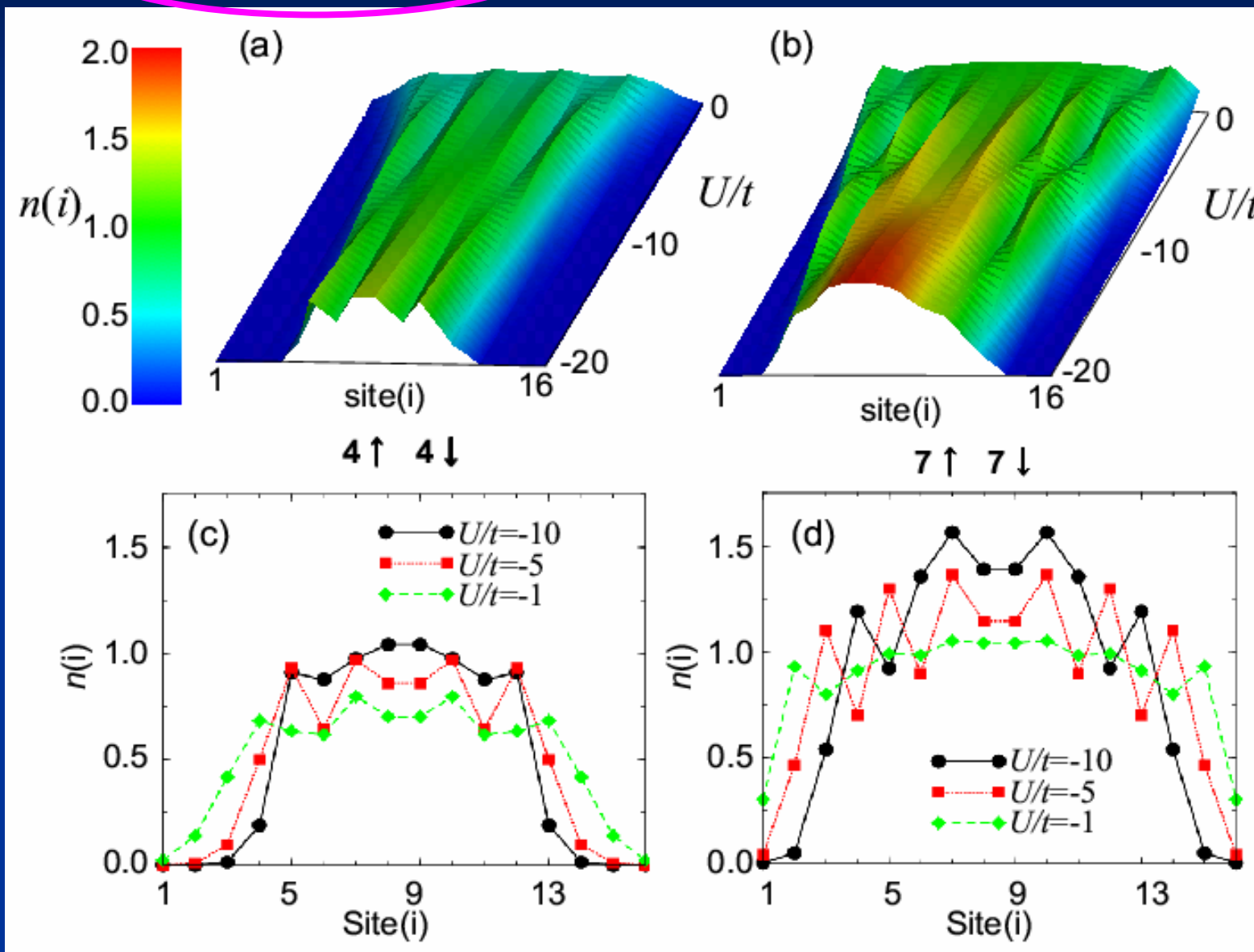
粒子密度分布プロファイルとスピン重項の形成

# 目標②のシミュレーション結果(今年度)

$U/t < 0$  (引力系)

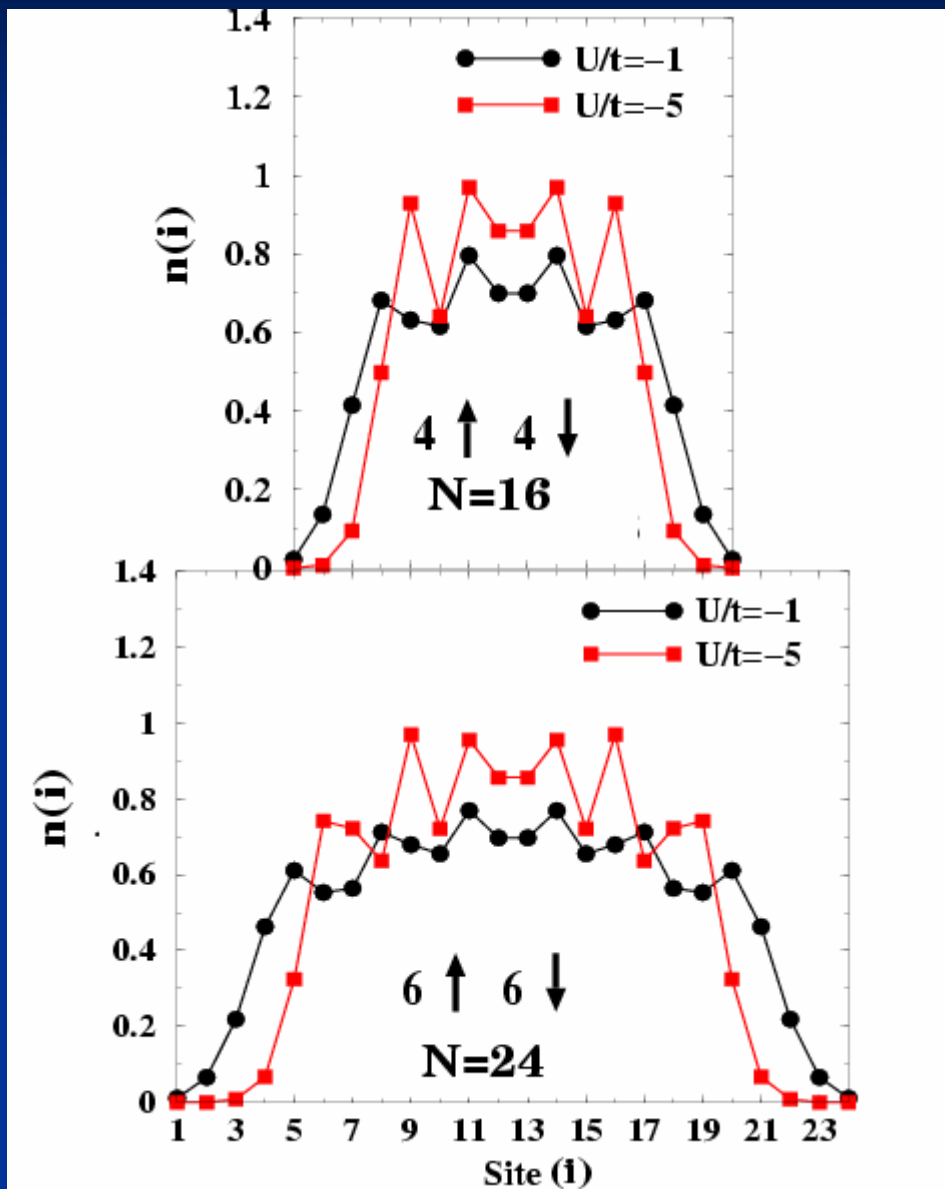


原子スケールの非一様性

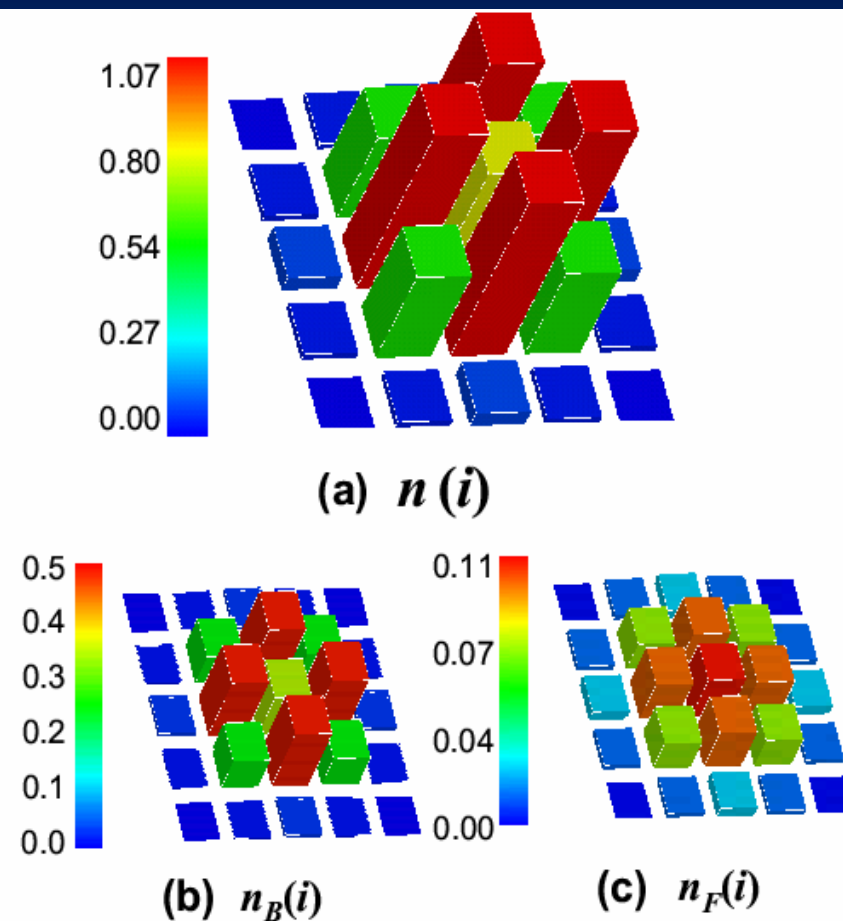


# 目標②のシミュレーション結果 (今年度)

## サイズ依存性 (厳密対角化)



## 2次元 (5×5) (厳密対角化)



M.Machida, S.Yamada et al.  
Phys.Rev. A(2006)

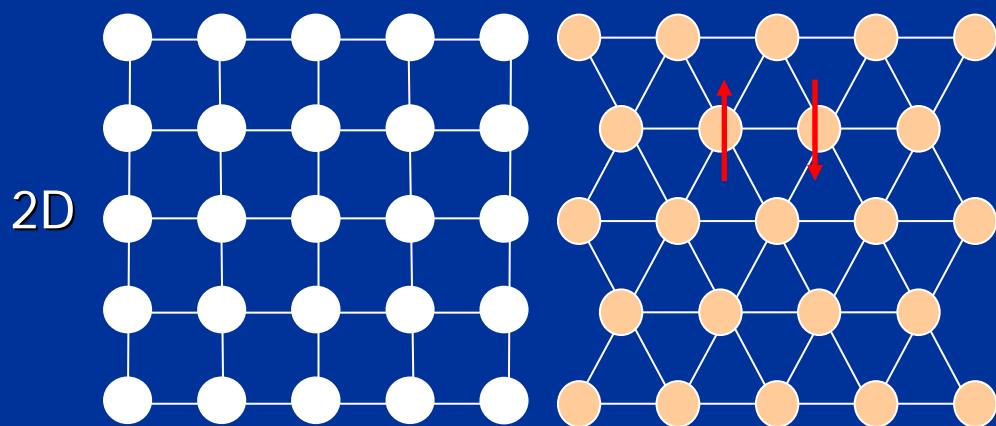
# 目標②を実現するシミュレーション技術の開発

新規大規模対角化アルゴリズムを適用  
(前処理付き共役勾配法)

Supercomputing 2005,2006  
Gordon-Bell Prize Finalist

ベストパフォーマンス  2次元ハバードモデル

1D 



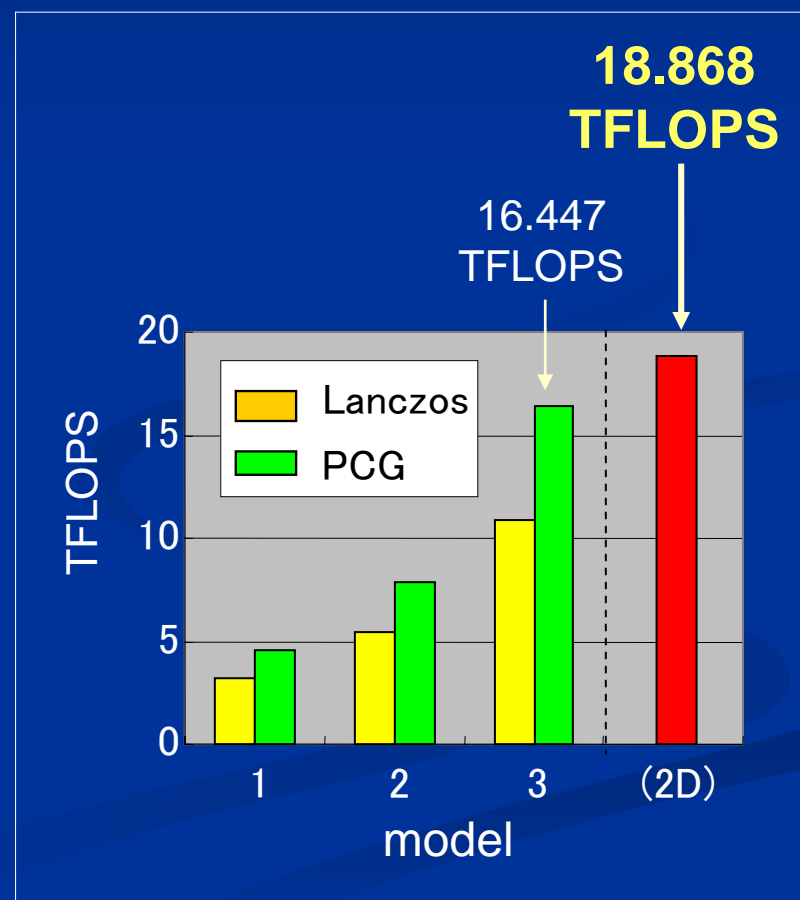
No. of Floating Operation is Up

1D Model    2D Square    2D Triangular

16.447  
TFLOPS  
50.2% peak

**18.868**  
**TFLOPS**  
**57.6% peak**

**24.494**  
**TFLOPS**  
**61.6% peak**



# 成果のまとめと将来展望

## 超伝導放射線検出器のシミュレーション

超伝導転移エッジでのシミュレーションによる実験結果の再現



**超伝導放射線検出器シミュレーション・プラットフォームとしての確立を目指す**  
多放射線検出過程(X線、 $\gamma$ 線検出)への拡張

## 新奇超伝導状態のシミュレーション

超大規模行列の対角化並列計算手法の開発と新奇量子状態の発見



**超大規模量子計算シミュレーション・プラットフォーム確立を目指す**  
超伝導及び原子物理分野へのインパクト