

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 飯塚 幹夫

○飯塚幹夫*1、中村賢*1、手島正吾*1、立木昌*2、中村壽*1

*1(財)高度情報科学技術研究機構(RIST)

*2 東北大学名誉教授

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・課題・目的
2. 研究計画と実績
3. 研究成果
4. まとめ

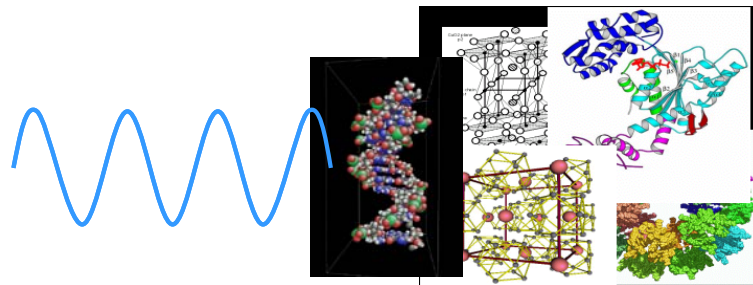
背景:テラヘルツ波技術で世界を先導する必要

光と電磁波の間の周波数帯にある : 両者の特性を持つ

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

- 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)

Terahertz sensing

Medicine

Monitoring the environment.

Security

新検出・診断技術

Terahertz carrier waves

High-capacity communication

大容量通信の基盤技術

Terahertz high-tech devices

New finding and devices etc

Design

Nano-scale fabrication and assembling

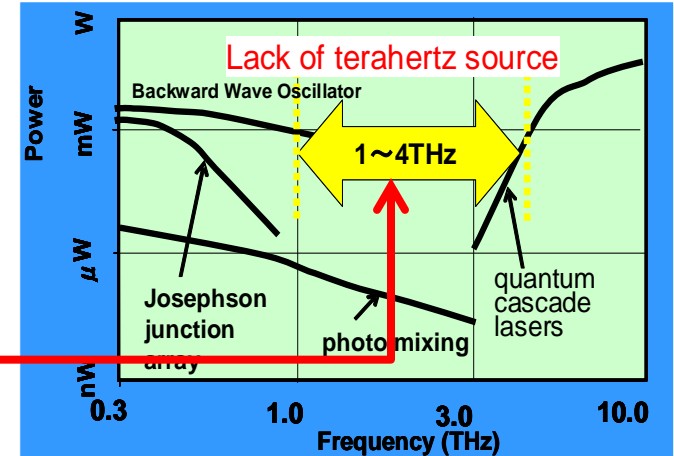
テラヘルツ新機能デバイス

新先端科技術分野を拓く重要技術

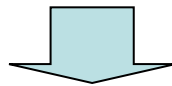
テラヘルツ波技術発展のための課題

■ 新光源開発

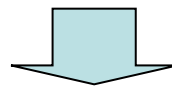
- 開発の焦点の連続波テラヘルツ波方式に良い光源が無い
- 広帯域で単色、周波数可変、mW級の高出力な新光源の開発が課題
- 特に、1~4THz帯域



これまで、高温超電導体を使う連続波テラヘルツ波の発振原理、その最適発振条件、さらに周波数制御法等を明らかにしてきた(素子内部の現象の2次元性が強いので2次元モデルで実施)



その結果、新しい連続波発振素子として、高温超電導体素子が有望であること、その素子の基本設計条件が分かった

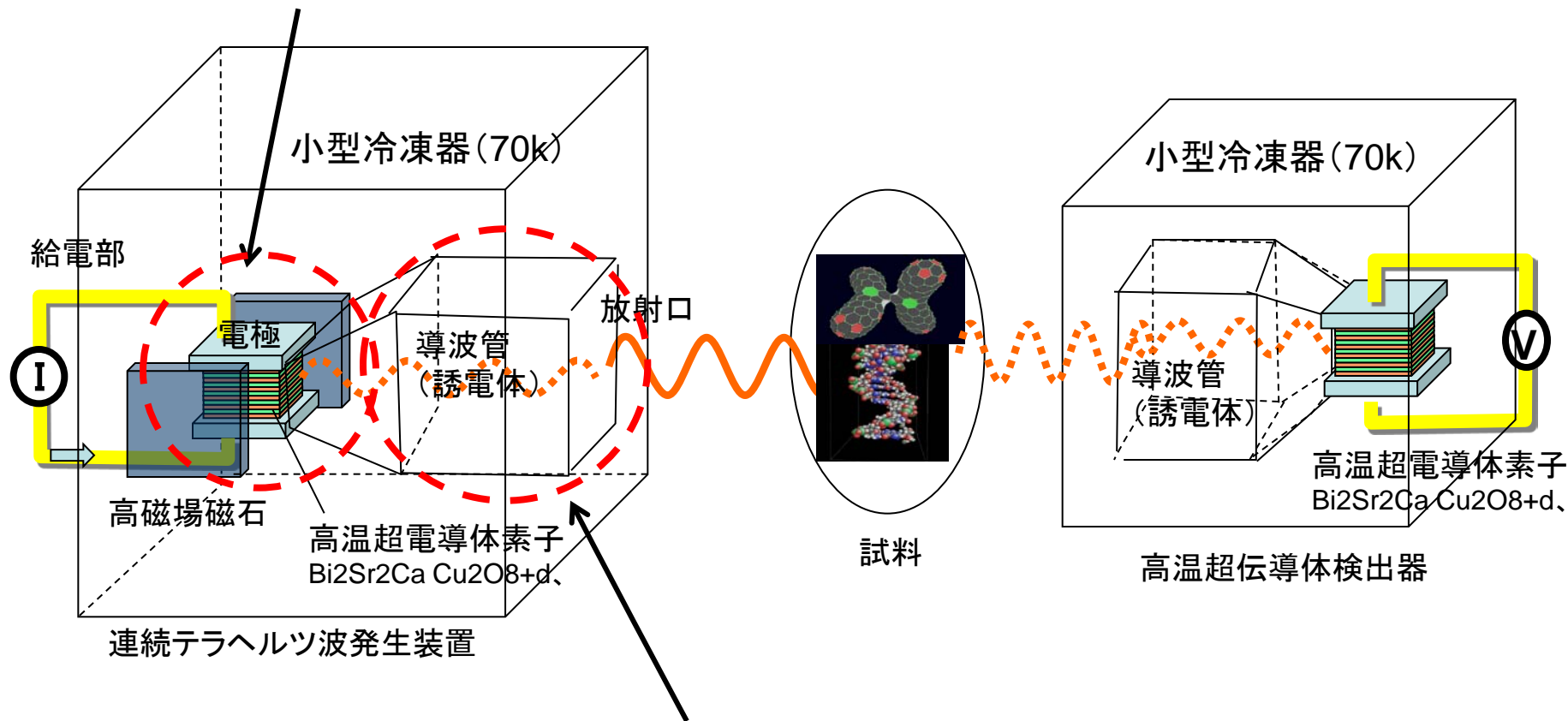


次は、その素子実用化のための利用システムの開発が必要

利用システムのイメージとその技術課題

(A)素子内部発生ジョセフソンフラスマの外部への効率的放射法

反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法の設計
⇒素子、電極、給電部と導波管等の形状、寸法、媒質の設計



(B)素子端面から放射されたテラヘルツ波の試料等への効率的導波法

テラヘルツ波が広がらないように集光性が良く、かつ反射や減衰が生じない導波路の設計
⇒導波路の構造、形状、媒質の設計

シミュレーション手法の課題

- 素子外部への接続構造や導波路は3次元であり、テラヘルツ波は異なる媒質の3次元構造物と複雑に相互作用しながら放射や伝播を行なう
 - ⇒ これまで、素子内部(2次元的现象)に着目し、2次元モデルで解析を実施
 - ⇒ 一方、素子実用化に向けた利用システム開発には、3次元モデルシミュレーションが必要
- 3次元解析の必要性から計算量が増加 ⇒ 高速化が必要
- 内部・外部の接続解析のため、並列カップリング手法の拡張が必要
 - ⇒ 2次元並列カップリング手法の3次元化、高速化が必要
- 異なる物理空間(高温超伝導体と外部空間)の接続を安定に解くモデルが必要

本研究の目的

3次元シミュレーションモデルを構築し、大規模シミュレーションにより、連続テラヘルツ波の現実的利用システムを設計し、その実用化に資する

研究計画(全体)

(A)素子内部発生ジョセフソンプラズマの外部への効率的放射法(H21,22,23)

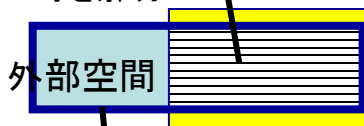
- 超伝導体モデルの高度化: 完全な多次元超伝導素子モデル(次項参)が必要なため
 - ⇒ 素子端面からのテラヘルツ波放射の正確で詳細な解析が必要
 - しかし、これまで素子内部は準1次元近似モデルであり外部との接続が不十分
 - ⇒ モデルの高度化を行ない、2Dで高度化モデルを検証し、3Dに拡張
- 2Dのシミュレーションモデルの構築 ⇒ 素子から導波管にわたる広い空間を解析
- 3Dのシミュレーションモデルの構築 ⇒ 素子近傍部分の3D効果解析(Bの後期と連携)

(B)素子端面から放射されたテラヘルツ波の試料等への効率的導波法

- 前期: 素子表面をテラヘルツ波源境界条件とし外部空間のみで3D解析、導波路設計(H21,22)
- 後期: 3Dの高温超伝導素子モデルを使い、素子近傍外部空間の3Dで解析、導波路設計(H23)

準1次元近似モデル (素子内部)

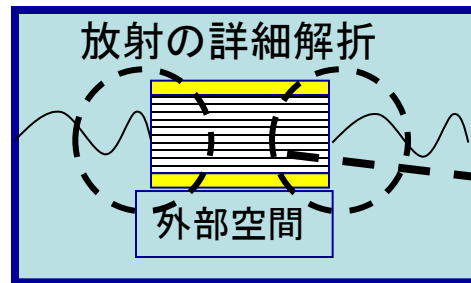
JP励起に詳細解析により
・最適発振条件
・周波数制御法
等を解明



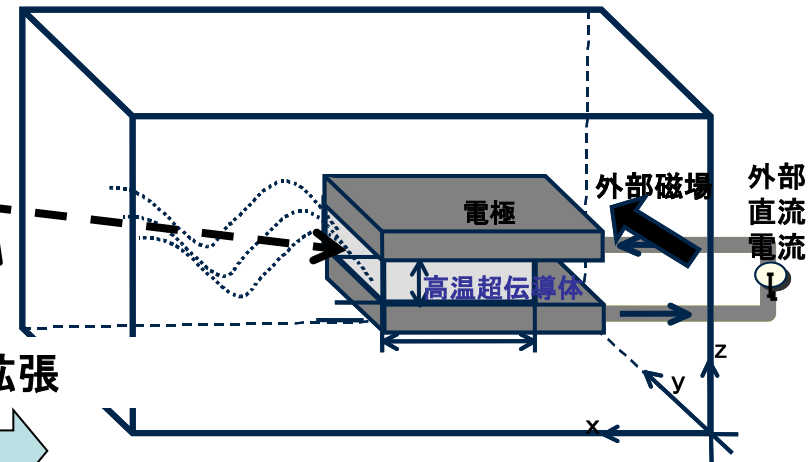
・発振原理確認
・生成されるテラヘルツ波の特性予測

これまでのモデル

研究項目(A)用モデル



研究項目(A)(B)用モデル



本研究のモデル(大規模3次元シミュレーションモデル)

研究計画

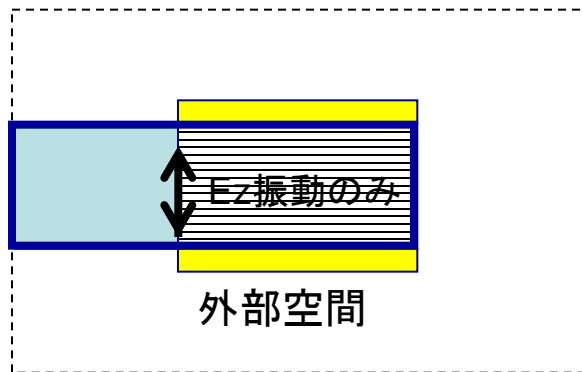
高温超伝導体モデルの高度化

■ これまでのモデル:

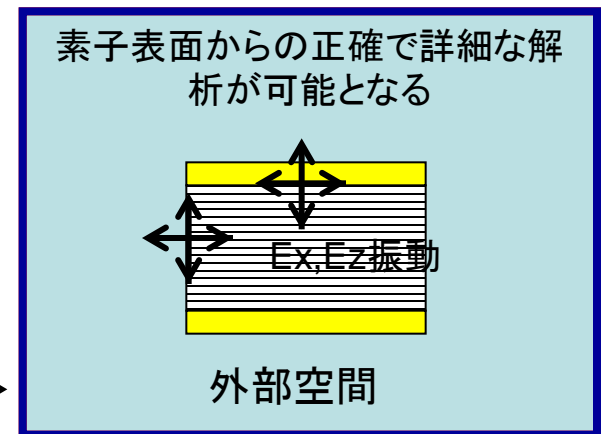
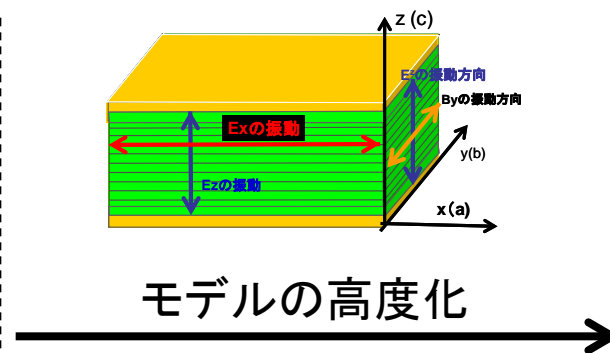
- 発振の主要項である層方向電磁場 E_z (層方向運動量の時間変動)に関わるモデルに着目した**準1次元近似モデル** (Josephson plasma励起の本質に関わる部分に着目、他の理論研究でも同様なモデル化)
- 課題: 正確で詳細な放射解析を行うためには、層内方向の電場 E_x 、 E_y (層内の運動量の時間変動)のモデルを追加した完全な多次元モデルが必要

■ モデルの高度化

- x, y 方向の超伝導の運動量 $P_{x,y}$ 、電場 $E_{x,y}$ を付加したモデル構築



準1次元モデルによる部分空間解析



3次元完全モデルによる全空間解析

研究計画と実績(今年度)

黒線:計画、赤線:実績、緑:今後の予定

	H21	H22	H23
(A)素子内部発生ジョセフソンプラズマの外部への効率的放射法	高温超伝導体モデルの高度化、シミュレーションモデルの構築(2D)	→	
	高温超伝導体モデルの高度化、シミュレーションモデルの構築(3D)	→	→
(B)素子端面から放射されたテラヘルツ波の試料等への効率的導波法	3Dシミュレーションモデル(外部空間のみ)の準備、3D解析、導波路設計	→	→
	3Dシミュレーションモデル(高温超電導体含む)の準備、3D解析、素子導波路設計		→
	3Dシミュレーションモデル(外部空間のみ)の準備、3D解析、導波路設計	→	→
	3Dシミュレーションモデル(高温超電導体含む)の準備、素子近傍3D解析、導波路設計		→

高温超伝導体モデルの高度化、シミュレーションモデルの構築(2D)

反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法の設計(2D)

高温超伝導体モデルの高度化、シミュレーションモデルの構築(3D)

反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法の設計(3D)

高温超伝導体モデルの高度化、シミュレーションモデルの構築(2D)

反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法の設計(2D)

高温超伝導体モデルの高度化、シミュレーションモデルの構築(3D)

反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法の設計(3D)

3Dシミュレーションモデル(外部空間のみ)の準備、3D解析、導波路設計

3Dシミュレーションモデル(高温超電導体含む)の準備、3D解析、素子導波路設計

3Dシミュレーションモデル(外部空間のみ)の準備、3D解析、導波路設計

3Dシミュレーションモデル(高温超電導体含む)の準備、素子近傍3D解析、導波路設計

研究成果1

素子内部発生ジョセフソンフラスマの外部への効率的放射法

超伝導体モデルの高度化: 外部との接続を正確かつ詳細に解析を行うためのモデルを構築

Maxwell 方程式	Step1: $B^{y'(n+\frac{1}{2})}$	←	$\underline{\underline{\partial_{t'} \mathbf{B}' = -\nabla \times \mathbf{E}'}} \quad (136)$	時間離散化 at n
	Step2: $\mathbf{E}'^{(n+1)}$	←	$\underline{\underline{\epsilon \partial_{t'} \mathbf{E}' + \mathbf{J} \mathbf{o} = \nabla \times \mathbf{B}'}} \quad (137)$	時間離散化 at $n + \frac{1}{2}$
磁場の 方程式	Step3: $B_{l+1,l}^{y'(n+\frac{1}{2})}$	←	$\begin{aligned} & \{ D' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'}^2 + \beta_p \partial_{t'}) - \zeta \Delta^{(2)} + 1 \} \underline{\underline{B_{l+1,l}^{y'}}} \\ & = \underline{\underline{\partial_{x'} \{ \varphi_{l+1,l} + D' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'} + \beta_p) E_{l+1,l}^{z'} \}}} \end{aligned} \quad (138)$	時間離散化 at $n - \frac{1}{2}$
x方向電場 の方程式	Step4: $\mathbf{E}^{x'(n+1)}_l$	←	$\begin{aligned} & \{ \alpha s' D' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'}^2 + \beta_p \partial_{t'}) \\ & - [\alpha s' D' \epsilon'_{ab} (\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2) + \alpha \Delta^{(2)}] + 1 \} \underline{\underline{E_l^{x'}}} \\ & = D' \left(1 - \frac{\alpha}{\zeta} \right) \underline{\underline{\partial_{t'} P_l^{x'}}} \end{aligned} \quad (139)$	時間離散化 at n
層方向電場 の方程式	Step5: $\mathbf{E}^{z'(n+1)}_{l+1,l}$	←	$\begin{aligned} & \{ \alpha s' D' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'}^2 + \beta \partial_{t'}) \\ & - [\alpha s' D' \epsilon'_{ab} (\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2) + \alpha \Delta^{(2)}] + 1 \} \underline{\underline{E_{l+1,l}^{z'}}} \\ & = \left(1 - \alpha s' D' \epsilon'_{ab} \cos(\varphi_{l+1,l}) \right) \underline{\underline{\partial_{t'} \varphi_{l+1,l}}} \end{aligned} \quad (140)$	時間離散化 at n
超伝導電荷 の方程式	Step6: $\rho_l^{(n+1)}$	←	$\begin{aligned} & \{ \zeta s' D' \epsilon'_{ab} \partial_{t'}^2 + [\alpha s' D' \epsilon'_{ab} (\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2) + \alpha \Delta^{(2)}] + 1 \} \underline{\underline{\rho_l'}} \\ & = \underline{\underline{\frac{1}{s'} \Delta_l^{(1)} \partial_{t'} \varphi + \epsilon_{ab} \partial_{t'} \{ \hat{\beta}_p (\partial_{x'} E^{x'} + \partial_{y'} E^{y'}) + \hat{\beta}/s' \Delta_l^{(1)} E^{z'} \\ & \quad + \zeta D' \Delta_l^{(1)} \sin \varphi \}}} \end{aligned} \quad (141)$	時間離散化 at n
x方向運動量 の方程式	Step7: $P_l^{x'(n+\frac{3}{2})}$	←	$\begin{aligned} & (\zeta s' D' \epsilon_{ab} \partial_{t'}^2 \beta_p \partial_{t'} - \zeta \Delta^{(2)} + 1) \underline{\underline{P_l^{x'}}} \\ & = -\underline{\underline{\partial_{x'} \{ \zeta \Delta_l^{(1)} \varphi + (s' D' \zeta \epsilon'_{ab} \partial_{t'} + \hat{\beta}_p) \alpha s' \rho_l' \}}} \end{aligned} \quad (142)$	時間離散化 at $n + \frac{3}{2}$
層方向運動量 の方程式	Step8: $\varphi_{l+1,l}^{(n+\frac{3}{2})}$	←	$\begin{aligned} & \underline{\underline{(1 - \zeta \Delta^{(2)}) I_{l+1,l}^{z'}}} = \underline{\underline{(\partial_{x'}^2 + \partial_{y'}^2) \varphi_{l+1,l}}} \\ & + \zeta s' (\epsilon'_{ab} \partial_{t'} + \beta_p) (\partial_{x'} E^{x'} + \partial_{y'} E^{y'}) \end{aligned} \quad (143)$	時間離散化 at $n + \frac{3}{2}$

青い点線が準1次元近似モデル

不変ゲージ位相差の式

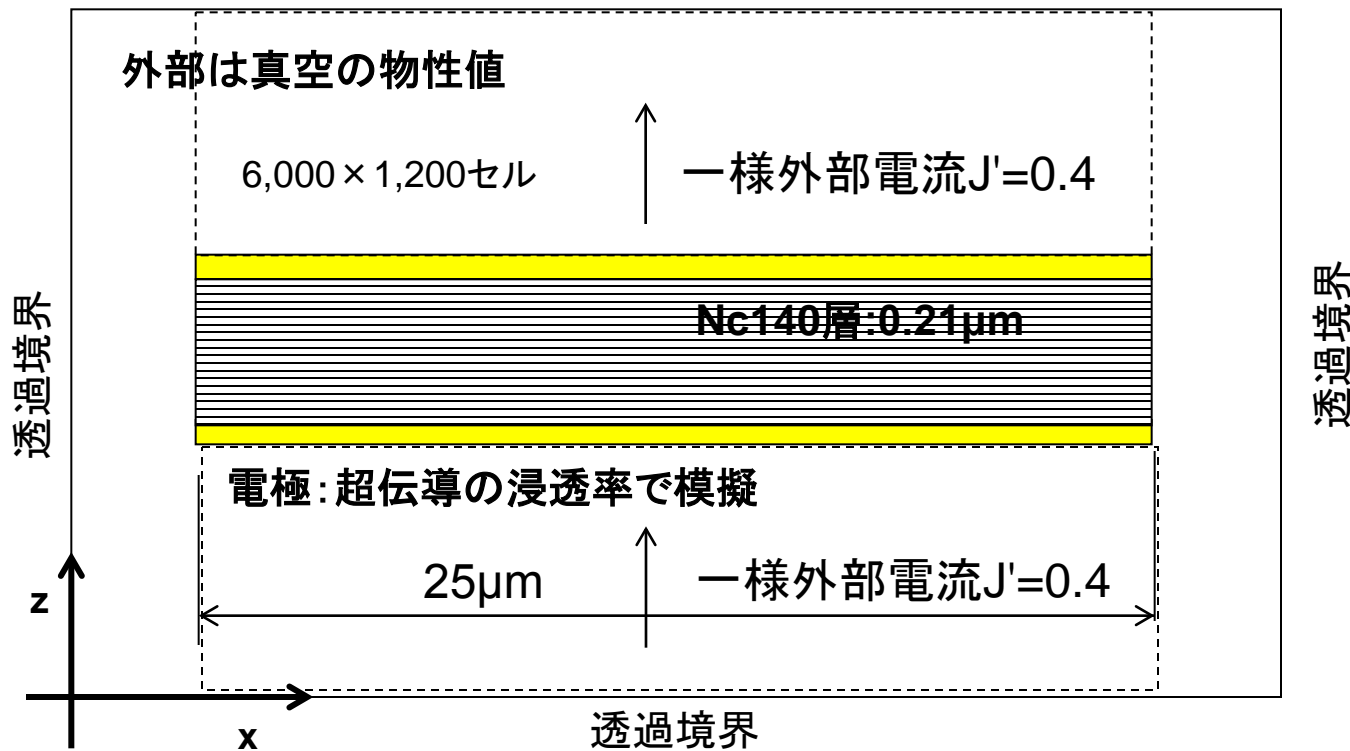
研究成果2

素子内部発生ジョセフソンプラズマの外部への効率的放射法

反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法設計用シミュレーションモデルを構築(2D)

単純化した解析モデルでシミュレーションモデルの検証

透過境界

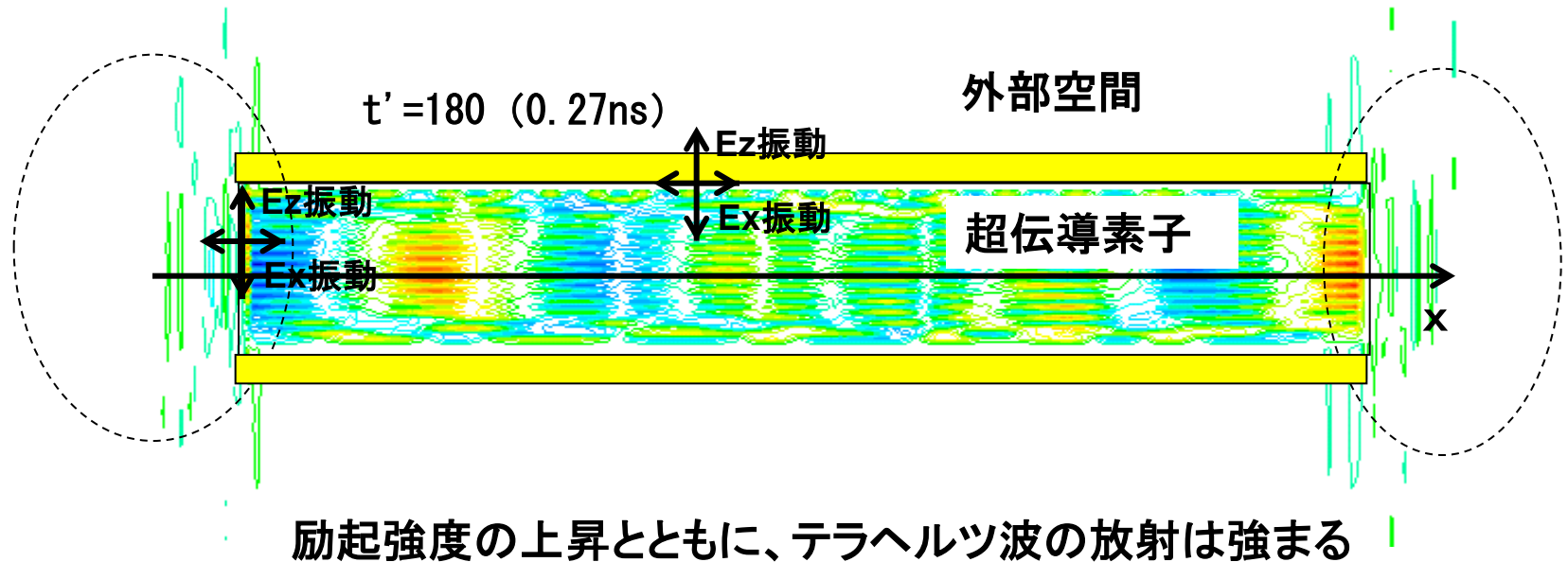
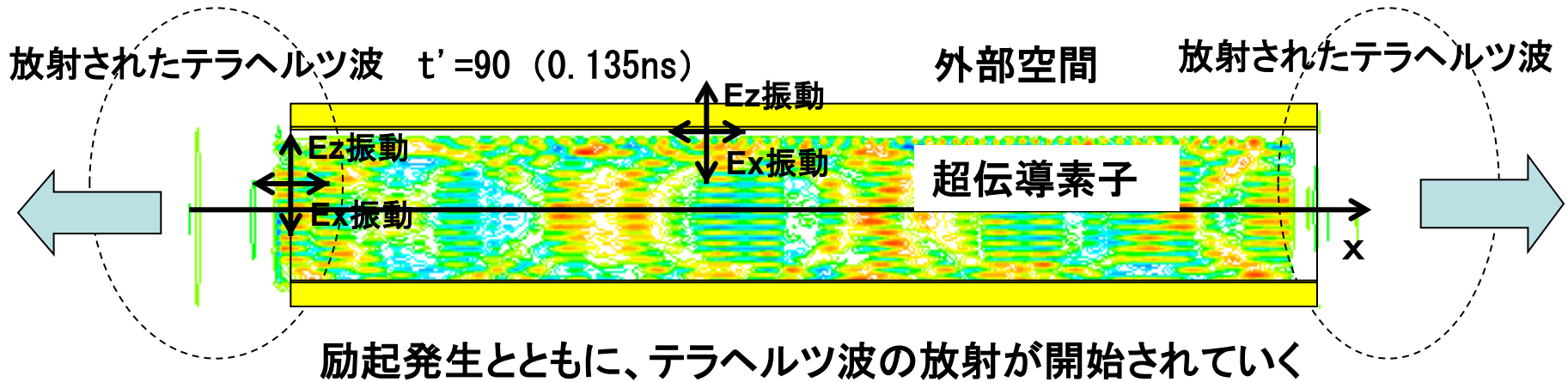


解析条件: 層数 $N_c=140$, 電気伝導度 $\beta=0.02$, 層内・層方向の磁場の侵入長 $\lambda_c/\lambda_{ab}=150/0.212\mu\text{m}$,
電極の誘電率は真空の物性値として単純化
外部電流をステップ的に与え、時間発展させて励起させる

研究成果2

反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法設計用シミュレーションモデルを構築(2D)

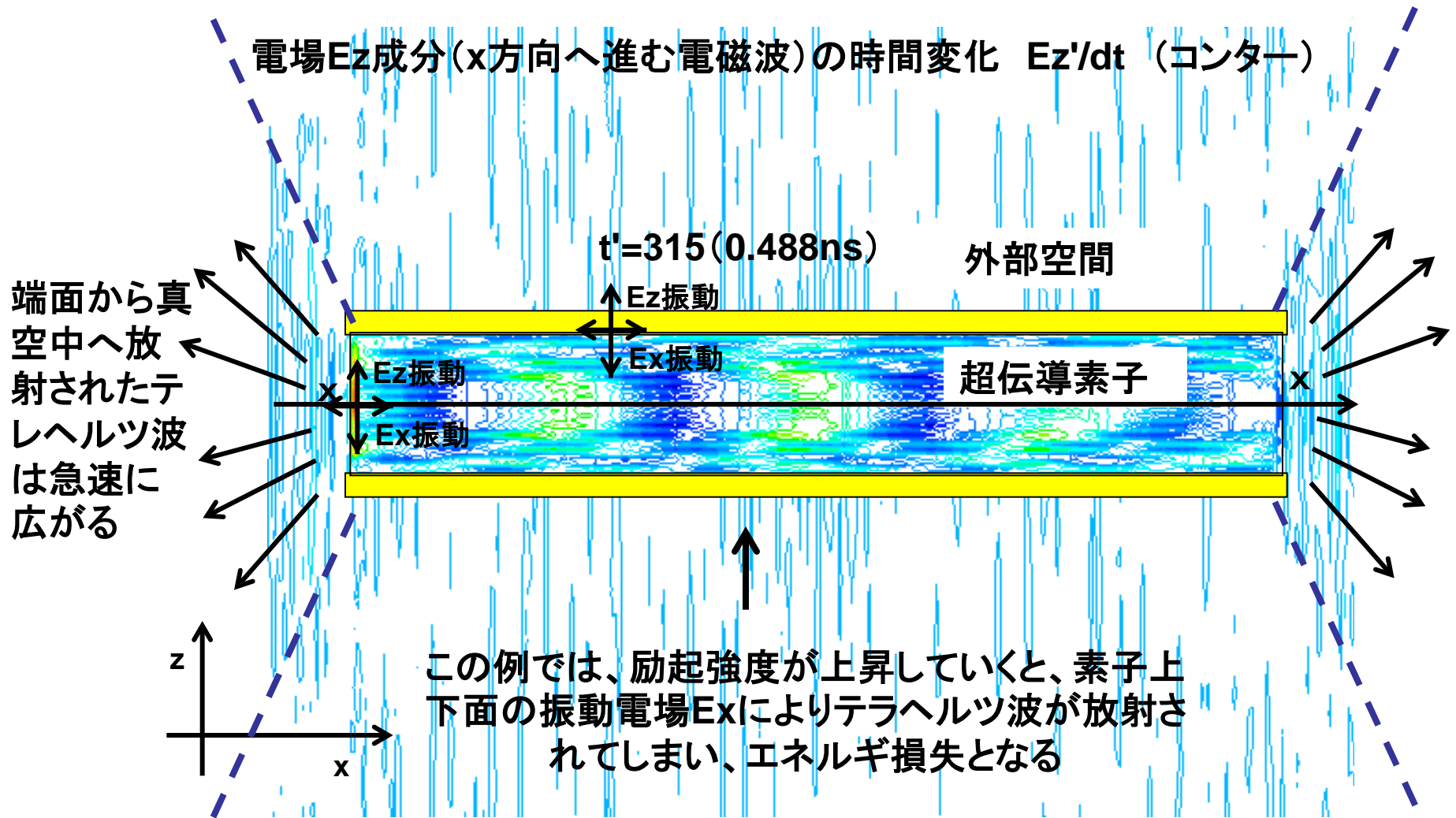
電場 E_z 成分(x方向へ進む電磁波)の時間変化 E_z'/dt (コンター)



研究成果2

反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法設計用シミュレーションモデルを構築(2D)

電場Ez成分(x方向へ進む電磁波)の時間変化 Ez'/dt (コンター)



このように、素子端面から外部空間へのテラヘルツ波放射の詳細な解析が可能となった。その結果、テラヘルツ波の反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法に関する設計のためのシミュレーションが可能となった。

まとめ

(A) 素子内部発生ジョセフソンプラズマの外部への効率的放射法に関して

- 高温超伝導体モデルを高度化し、2Dシミュレーションモデルを構築
- これにより、素子端面からのテラヘルツ波放射の詳細な解析が可能となり、テラヘルツ波の反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法の設計が可能となった

(B) 素子端面から放射されたテラヘルツ波の試料等への効率的導波法に関し

- 3Dシミュレーションモデル(外部空間のみ)の準備ができた段階

(C) 次年度以降、大規模シミュレーションにより

- 反射、減衰を生じない素子と外部空間との接続法の設計(2D)
- 高温超伝導体モデルの高度化、シミュレーションモデルの構築、接続法の設計(3D)
- 3Dシミュレーションモデル(外部空間のみ)による3D導波路設計

等を行い、連続テラヘルツ波の現実的利用システムを設計し、その実用化に資していく

対外発表：

- 学会等発表：Super Computing 2009 (2009年11月)
- 講演：(i) 第70回 応用物理学会 学術講演会 (秋期) 富山大学 2009年9月 . (ii) 第57回 応用物理学関係連合講演会 (春の学会) : 予定