超伝導のシミュレーション：ミクロからマクロへ

Numerical Simulation on Superconductivity: From microscopic to macroscopic theories

大阪府大工¹, 大阪府大高専² ◯加藤勝¹, 佐藤修²Osaka Pref. Univ.¹, Osaka Pref. Univ. Col. Tech.², ◯Masaru Kato¹, Osamu Sato²

E-mail: kato@ms.osakafu-u.ac.jp

超伝導状態は、どのような現象を記述するかで、いろいろなレベルの理論を用いるシミュレーション方法が可能である。これらには電子状態を記述する微視的な理論 Bogoliubov-de Gennes(BdG)方程式や Gor'kov 方程式を用いる方法から、巨視的波動関数を現象論的に記述する Ginzburg-Landau 方程式を用いる方法、超伝導体中の量子磁束(渦糸)を記述する分子動力学法(MD)、超伝導体中への量子磁束の侵入を巨視的に記述する方法までである。この講演ではこれらのシミュレーション方法について幾つかの方法とそれらを用いて得られた結果について報告する。

微視的な超伝導理論である BdG 方程式は準粒子の電子成分 u とホール成分 v に対して

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \mu + V_{\text{imp}}(\mathbf{r}) \right\} u(\mathbf{r}) + \Delta v(\mathbf{r}) = E u(\mathbf{r})$$

$$\left\{ \frac{-1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \mu - V_{\text{imp}}(\mathbf{r}) \right\} v(\mathbf{r}) + \Delta^* u(\mathbf{r}) = E v(\mathbf{r})$$

と与えられる。 V_{imp} は不純物ポテンシャルである。これを用いてナノ構造超伝導体の超伝導転移温度のサイズ依存性と不純物による効果を調べている。結果は、図 1 (a) のようになり、サイズが小さくなるほど転移温度が上昇し、さらに条件により不純物があるため転移温度が上昇するという一見矛盾するような結果を得た。これは図 1 (b) に示した超伝導秩序変数の分布が示すように準粒子が局在化し、超伝導状態がより小さな領域に閉じ込められるためであると説明できる。

渦糸の運動を求める MD では、ピン留め力と渦糸間の反発力、揺らぎの力をそれぞれ $\mathbf{f}_{pi}^{imp}$, $\mathbf{f}_{vi}$, $\mathbf{f}_{fi}$ として以下の方程式を数値的に解く。

$$\eta \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{f}_{pi}^{imp} + \mathbf{f}_{vi} + \mathbf{f}_{fi}$$

これを用いて、ナノ構造超伝導体中の渦糸格子の融解現象を調べている。図 2 には渦糸の運動の様子 (a) と渦糸の位置の標準偏差の温度の依存性 (b) を示した。これから融解温度を求めている。

図 1: ナノ構造超伝導体の転移温度のサイズ依存性(a)と超伝導秩序変数分布(b)

図 2: ナノ構造超伝導体の渦糸運動(a)と渦糸の位置の標準偏差の温度依存性(b)