

大規模シミュレーションを活用した テラヘルツ発振超伝導素子に関する研究

Large Scale Simulation on High Temperature Superconductor Oscillating Terahertz waves

(財) 高度情報科学技術研究機構
飯塚 幹夫、中村 壽、立木 昌

計算科学の推進を目的として、地球シミュレータなどを利用する大規模シミュレーションに関わり幅広い高度なソフトウェア技術の研究を進めている。近年、対象をナノテクノロジー分野など先端科学技術分野にも広げ、特に、大規模シミュレーションが新奇な物理的現象や新しい技術を導くことを実証すべく研究に取り組んでいる。本稿では、こうした経緯を踏まえ、応用範囲が広いものの、未踏分野とも言われる光と電波の性質が融合するテラヘルツ帯域の電磁波を高温超伝導体から発振する方法を大規模シミュレーションにより探る研究について紹介する。

1. テラヘルツ波

テラヘルツ波は光と電磁場の狭間 (0.3~10THz: 図1) にあり、高透過性と微細波長で、その周波数は生体分子、物質等の励起振動数と同じ周波数帯域にあるという潜在的有用性を持つ。また物体を透過し、原子、分子と強く相互作用するため、生体分子、物質等に吸収され、さらに生体分子、物質特性によ

り変調された光放射が起こる。これらテラヘルツ周波数帯域での吸収、放射特性などを利用して、新しい分析法、センサーが生れることが期待されている。さらに、これまで未利用帯であったテラヘルツ帯の搬送波を利用できれば、電波の利用周波数範囲が広がるため、大容量通信の利用拡大を図る基盤技術(図2)としても期待されている。

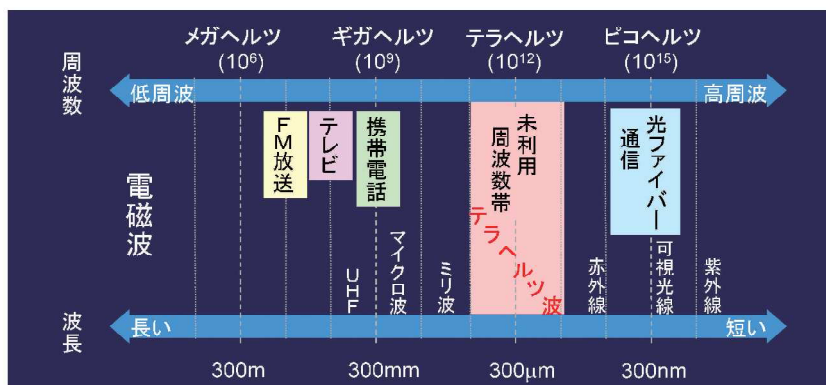


図1 テラヘルツ波の帯域

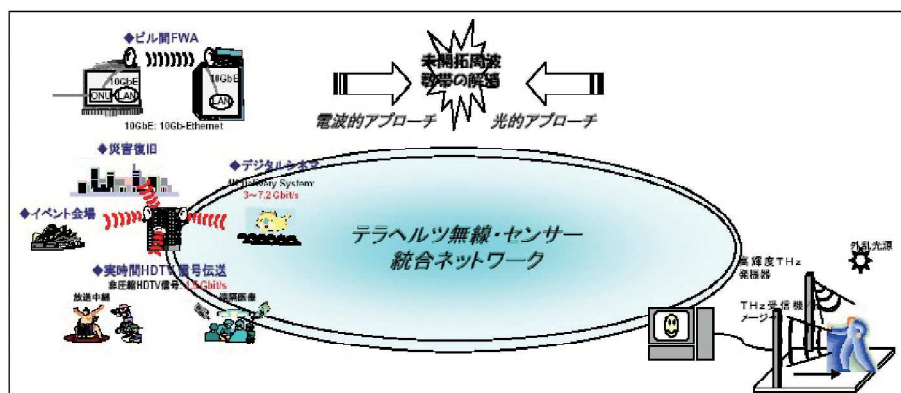


図2 テラヘルツICT分野の短中期的な研究開発戦略
(http://www.soumu.go.jp/joho_tsusin/から引用)

具体的に応用を考えると、生体高分子の低振動数と帯域を同じくする連続波テラヘルツ波は、ナノバイオロジの研究においてまず計測・分析器の光源としての利用が考えられる。例えば、DNAの凝縮、ドラッグデリバリーなどのタンパク質と薬物、ナノ粒子との相互作用等、生体分子の動的な構造変化や機能の解明には、分子のねじれ運動等の低振動数モード、また生体分子間のvan der Waals力等の弱い相互作用に関連した低振動数モード(～6THz)の高精度の分析及び計測が必要とされており、連続波テラヘルツ波を光源として利用すれば、その分光計測・検出機器はナノバイオロジ研究の要求にも応えられる。

また、医療分野等への応用では、連続波テラヘルツ波の周波数可変性、単色性、さらに光子エネルギーがx線に比べ 10^{-6} と極めて低い特性は、生体分子のイオン化による損傷が小さく、透過性が良いことから、生体に対し、低ノイズで、安全なイメージング光源としての利用が考えられる。特に、連続波は、時間積分平均がパルス波の100,000倍と大きく、水のテラヘルツ波の吸収が障害となる生体イメージングでは、周波数を水の吸収周波数を避けるように設定すれば、医学用検査機器の検出能を飛躍的に高める。しかも、異なる振

動数により得られる2つ以上のテラヘルツ波イメージの比較により、異なる生体組織を識別可能にする。さらに、それぞれの生体分子の吸収線に連続周波数を合わせることにより、生体物質を明確に識別することも可能である。これらの特性は、安全な先端医療技術のニーズに応えるものである。

物質研究への応用においては、固体中の様々な低エネルギー素励起・集団励起とキャリアの動的過程がテラヘルツ周波数帯に集中しているため、連続波テラヘルツ波を光源として利用する分光計測・分析機器は、物質現象の解明またその基づいた新材料、新デバイスの開発、さらに物質の物性、表面・界面での化学組成の計測・分析等に大いに役立つものと期待される。一方、半導体、超伝導体、誘電体の複素屈折率、複素誘電率、伝導率は、テラヘルツ帯で周波数依存性が強いいため、これを利用した連続テラヘルツ波の透過、反射性を利用した物性の測定も考えられる。

通信分野への応用として、高出力連続波テラヘルツ波を通信用の搬送波に、またテラヘルツ帯の高速クロック信号等としても利用が考えられ、例えば、毎秒10ギガビット以上という光ファイバー通信並のモバイル通信向けの大容量、超高速無線通信の実現も期待される。

さらに、特異な応用では、テロ対策や環境対策として、テラヘルツ波の高透過性を利用した細菌、プラスチック爆発物や地雷発見等の高性能検出装置の可能性も考えられている。

このようにテラヘルツ波の応用先は多様に考えられるが、その発振技術が未発達なため応用には至らず、これまで未開拓領域と言われてきた。もし有効なテラヘルツ発振技術が開発されれば、以上のような科学技術の多くの分野で新技术を進展させる可能性が高いと考えられている(図3)。このため、米国、欧州でもテラヘルツ発振の研究開発が近年、盛んになってきている。

テラヘルツ波には、パルス波、連続波がある(図4)。テラヘルツ波の発振方式として、これまで有機非線形光学結晶、p型Geレーザ等、パルス波方式が開発されてきたが、周波数スペクトルが幅広く、低い平均出力しか得られない等の実用課題を抱えてきた。また、パルス波方式よりも優れ応用性も高いが発振技術が難しい連続波を得るために、量子カスケードレーザ、後進波管、光混合法等が開発されたが、最も有用な1~4THzでナノワット級の低出力となる欠点があり、新方法による連続波のテラヘルツ波発振技術の開発が課題(図5)であった。

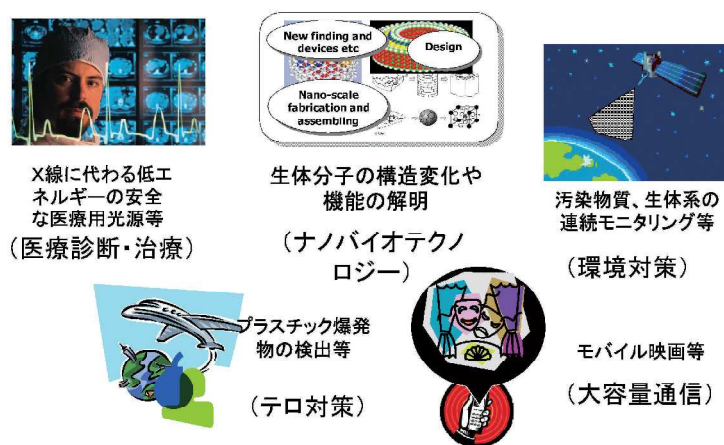


図3 テラヘルツ波の応用分野

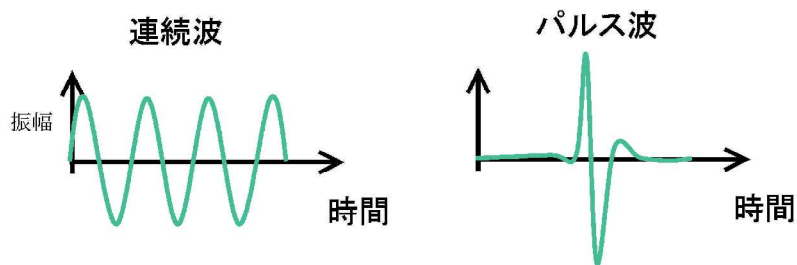


図4 連続波とパルス波

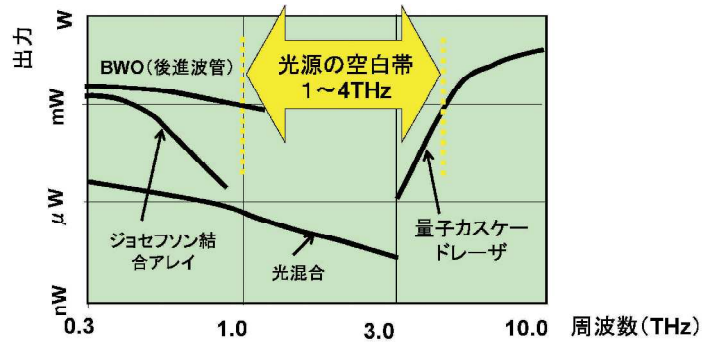


図5 既存連続波テラヘルツ波光源の出力範囲

2. テラヘルツ発振超伝導素子に関する規模シミュレーション

前述の背景のもと、立木らは1994年にナノスケールの高温超伝導体に磁場と直流電流を印加する(図6)ことによりテラヘルツ波を発振できるという理論を発表[1]し、連続波のテラヘルツ波発振技術開発の基盤として、高温超伝導体の新奇機能の応用が現実化し始めた。

立木らの理論はテラヘルツ波を連続波として発振する可能性を示したが、安定かつ高出力で発生する条件を実験のみから得ることは困難であった。その理由は、このテラヘルツ波発振は、電磁場を印加された高温超伝導体

内部において発生するジョセフソンプラズの励起に関わる特異な非線形現象であるため、数多くの影響因子が複雑に絡み合いその最適な発振条件を実験的に求めることが相当に難しいためである(図8)。そこで、シミュレーション解析が試みられたが、図6に示すようにナノスケールの厚みを持つ素子の発振現象を解析するため、空間スケールは 10Å から数百 μm まで、時間スケールでは 10as から数 ns までと幅広いスケールを扱い、時間ステップでは 10^8 回、また空間スケールで、数百万セルを扱う膨大な計算(図7)となり、さらに、最適な発振条件を探索するためには、物性値(3個)、超伝導体の層数(1層は、高温超電

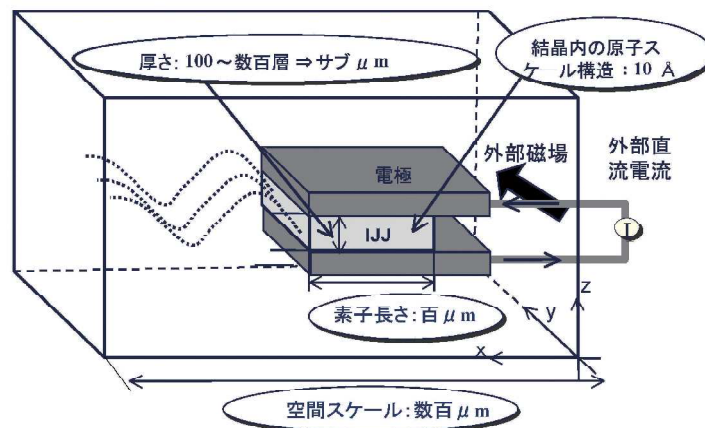


図6 高温超伝導体を用いたテラヘルツ発振の解析モデル

導体を構成する約10 Å強の厚みの超伝導層と絶縁層からなる原子スケールの微細な層である。)、素子長さ、外磁場の強さ、外部電流をパラメータとして振る必要があり、その組み合わせはまた非常に多くなり、当時のスーパーコンピュータでも到底処理できる計算では無かった。そこで2002年の地球シミュレータの完成により、当時と比べ遥かに高い性能と大容量計算能力がもたらされ、ようやく立

木理論の大規模なシミュレーションが可能となった。

シミュレーションの概要を以下に紹介する。図8に示すように、高温超伝導体は、超伝導層と絶縁層を層状に重ね合わせた構造を持つ結晶(Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+x}の場合、超伝導層は3 Å、絶縁層は12 Åの厚みを持つ)で、超伝導層に挟まれた絶縁層はナノスケールのジョセフソン結合となり、結晶全体では自然

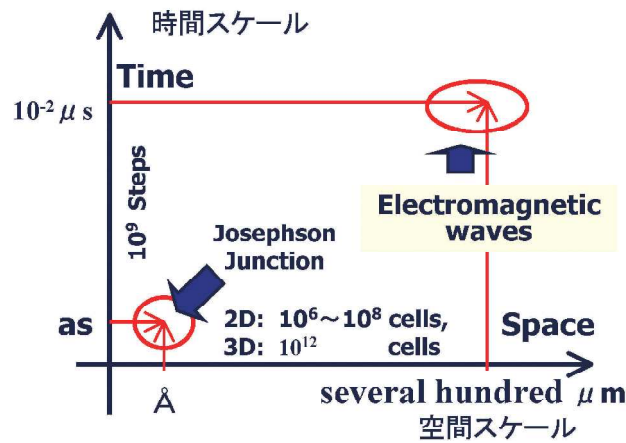


図7 テラヘルツ発振の時空間スケール

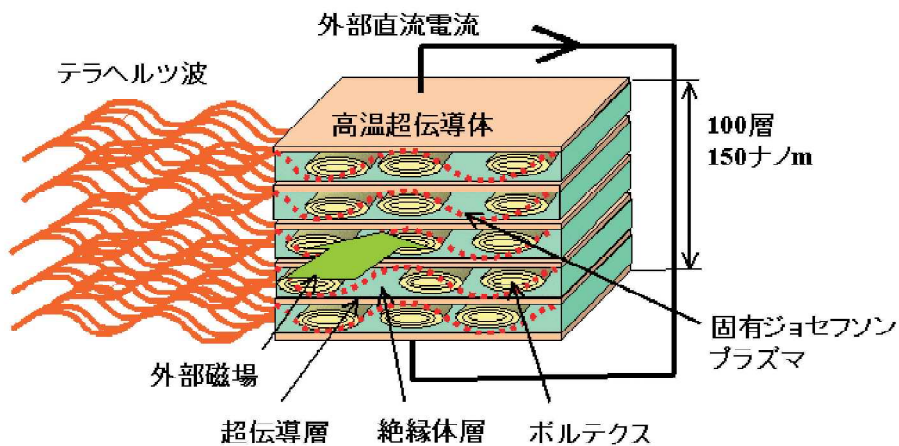


図8 高温超伝導体と固有ジョセフソンプラズマの非線形励起現象

に多連結したジョセフソン結合系である。その高温超伝導体に外部磁場、層方向に直流電流が印加されると、素子内部にジョセフソン電流と電磁波が結合したエネルギーの高い状態（励起状態）の固有ジョセフソンプラズマが生成され、それが素子外部へ放射する一連の非線形現象をシミュレーションした。

本解析ではクーパ対と電磁場との相互作用による発振を以下のように現象論で扱う。超伝導状態のクーパ対は巨視的な波動関数で記述される。高温超伝導体では磁場の侵入長に比べコヒーレンスの長さが短いため、超伝導層内では波動関数の振幅を一定と近似可能（ロンドン極限）なので位相の変化と電磁場のベクトルポテンシャルで現象を記述でき、超伝導層内の超伝導電流はロンドン方程式の形で書ける。層方向の超伝導電流は、層方向がジョセフソン結合となっているので、ジョセフソン電流で記述できる。このように高温超伝導体の超伝導状態を扱い、さらに電場による準粒子電流を加えてMaxwell方程式と連立すると、本現象の支配方程式[2, 3, 4, 5]は以下のようなる。

$$\begin{aligned} (1 - \zeta \Delta^{(2)}) I_{i+1,i}^{z'} &= (\partial_x^2 + \partial_y^2) \varphi_{i+1,i} \\ I_{i+1,i}^{z'} &= J_{i+1,i}^{z'} + \partial_y E_{i+1,i}^{z'} \\ &= \partial_y^2 \varphi_{i+1,i} + \beta \partial_y \varphi_{i+1,i} + \sin \varphi_{i+1,i} \\ &\quad + \alpha s' \Delta^{(1)} (\partial_y \rho' + \beta \rho')_{i+1,i} \\ (1 - \alpha \Delta^{(2)}) \rho'_i &= \frac{1}{s'} \partial_y \varphi_i \end{aligned}$$

本現象は、量子力学的変数として、不変ゲージ位相差（波動関数の位相）、超伝導電流、電磁気学的変数として電場、磁場、電荷で記述できるが、ここでは解析の基本変数である、不変ゲージ位相差と電荷の式をしめした。1と1, 1+1の添字はそれぞれ超伝導層内、超伝導層間であることを示す。方程式のパラ

メータ依存性を物理的に明確にするために、超伝導層に平行方向の磁場の侵入長 λ_c を距離の、高温超伝導体のプラズマ振動数 ω_p を時間の単位として無次元化されている（'付きは無次元量）。 β は絶縁層の層方向の電気伝導度のパラメータである。電荷 $\rho'_{1,1}$ 、 $I^{z'}_{1+1,1}$ は全電流である。また $\Delta^{(1)} Q_{1,1+1} = Q_{1+1} - Q_1$ 、 $\Delta^{(2)} Q_{1,1+1} = Q_{1+1,1+2} - 2Q_{1,1+1} + Q_{1-1,1}$ である。ゲージ不変位相差の方程式は、層方向に結合したサインゴルドン方程式で、極めて非線形性が強い。この(1)(3)式と空間のMaxwellの方程式を連成して用いて、地球シミュレータを活用した大規模なシミュレーションを行った。その結果、以下のように新奇な発振機能のメカニズムが明らかになった。

3. 大規模シミュレーションによる発見

励起されたジョセフソンプラズマは高温超伝導体の内部において素子端面で反射し、定在波となり、そのエネルギーは定在波中に蓄積される。蓄積されたエネルギーがある閾値を超えると、テラヘルツ波の連続波として外部へ放射されることが分かった（図9）。また、発振には、超伝導体中の量子磁束の乱雑性を含む分布が関与していることが分かった（図10）。さらに、放射されるテラヘルツ波の特性に関して、高温超伝導体表面から放射する連続テラヘルツ波の放射強度が、例えば図11（左）に示すように、電気伝導度のパラメータが0.03の場合、電流が0.9~1.2（周波数で約2.2~3.0THz）の広い範囲にわたり1000W/cm²級の出力であること、図11（右）に示すように、外部直流電流を変化させ高温超伝導体に印加される電圧を変化させるだけで発振するテラヘルツ波の周波数スペクトルのピークが連続的に移動し発振周波数を容易に変更できコヒーレントな周波数特性を有する連続波を得られることも明らかになった[4, 5]。

これらシミュレーション結果を参考に、国内では筑波大学グループが実験を行い、また、米国ではアルゴンヌ国立研究所等のグループが実験を開始した。今後、幅広い数多くの影響因子から最適な発振条件を明らかにすることが、連続波テラヘルツ光源を開発するために求められる。このため、地球シミュレータ

を活用した大規模シミュレーション解析が続けられている。

4. 地球シミュレータの効果

テラヘルツ発振に関する従来までの小規模なシミュレーションによる解析は、線形化された解とその非線形項の摂動解、または素子

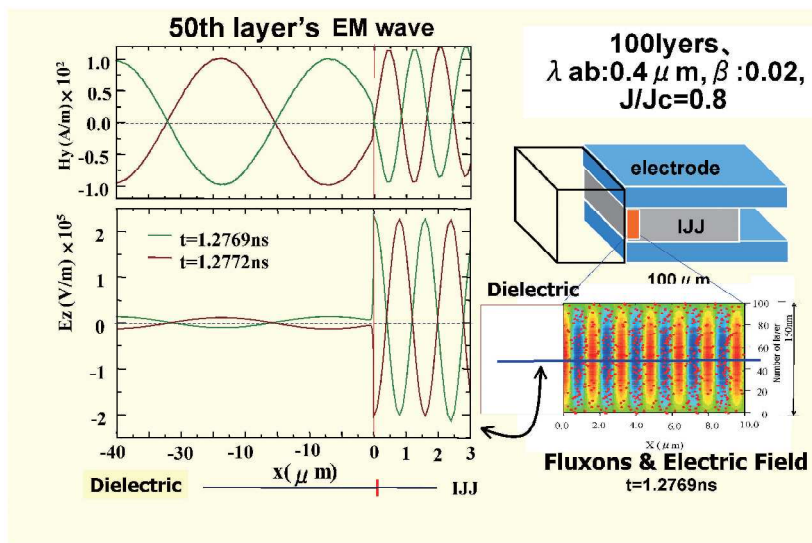


図9 高温超伝導体による連続波テラヘルツ波の放射メカニズム (A)
50層目の定在波としての電場と磁場、電場のスナップショット

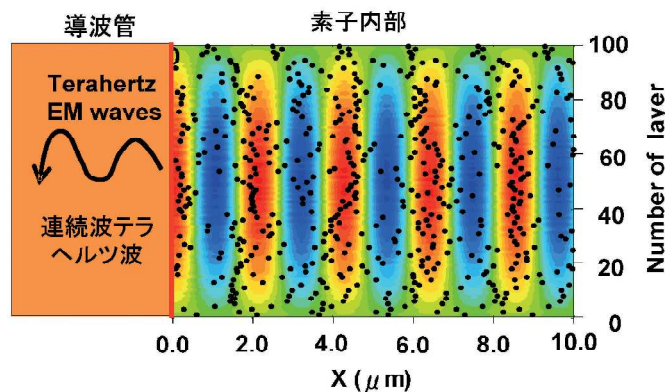


図10 高温超伝導体による連続波テラヘルツ波の放射メカニズム (B)
素子断面の振動電場 (赤は上向き、青は下向きの振幅を示す) と量子磁束 (黒丸)

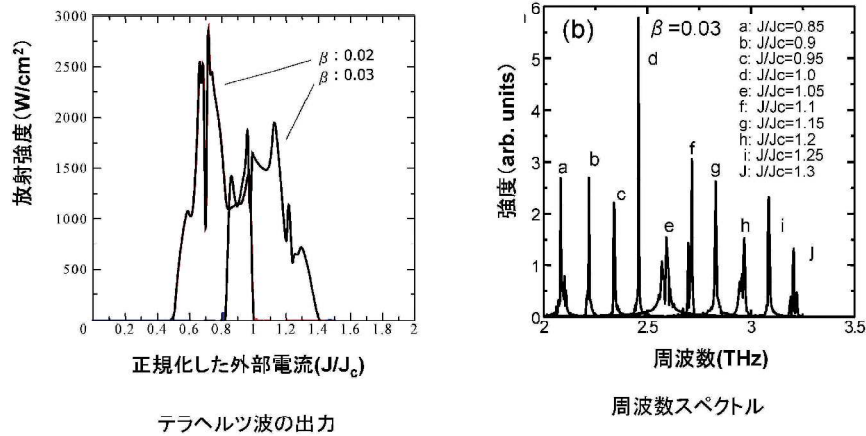
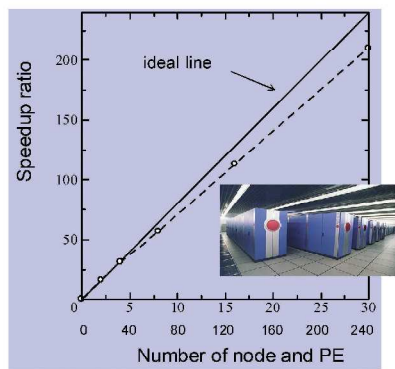


図11 高温超電導体から放射されたテラヘルツ波の特性

の層数が数10層、長さが $10\mu m$ 、時間で0.1ns程度の周期境界条件を使った素子の部分的解析に留まり、新奇現象の把握には至らなかった。これは計算機容量に限界があり、非線形現象を精度良くシミュレーションできなかったためと考えられる。

これに対し、地球シミュレータを利用した本研究では、高温超伝導体素子とテラヘルツ波が発振する周囲空間を含めた体系的なシミュレーションを行い、また素子について

は超伝導層数が数百、長さが従来の10倍、素子が外部と接続する境界を持つモデルとして扱えた。また、非線形現象に強く影響する素子内に現れる磁束量子数を十分に取れ、従来の小規模シミュレーションの百倍以上となった。さらに、量子磁束の運動が準安定状態になるように、シミュレーション時間を時間ステップで数億回となる数nsまで拡大できた。一方、計算精度と大規模な時間、空間メッシュでの計算を効率的に行うために、保



**Earth Simulator
12H/case**

**PC 2GHz
2year/case**

図12 地球シミュレータの高速演算性能

存性が良く計算量も比較的少ない中心差分法を時間、空間離散化に適用することも可能であった。これら大規模シミュレーションを可能に出来たのは、地球シミュレータの有する計算機容量によるものである。加えて、本シミュレーションが、例えばパーソナルコンピュータ（2GHz）で1ケース（約1億ステップ計算）あたり約2年も掛かると想定されるほどの大規模であるにも拘わらず、160プロセッサを用いて1ケース12時間で解析を可能としたのは、地球シミュレータの高速演算性能によるものである。

5. まとめ

開発の期待される連続波テラヘルツ発振素子開発のため、従来の計算機能力では扱えないテラヘルツ発振超伝導素子研究に、地球シミュレータを用いた大規模かつ高速シミュレーションを応用した。その結果、高速演算性が解の到達時間を早め、パラメータの探索空間、さらにシミュレーションの時間空間を拡大することで、新奇現象の存在を明らかにでき、テラヘルツ発振条件を解明することができた。これらから、先端科学技術開発において、地球シミュレータによる大規模、高速シミュレーションが極めて有効かつ戦略的手段であることが明らかになった。

謝辞

本研究は、地球シミュレーターセンター共同利用プロジェクトの平成14～17年度の成果に基づくものである。本研究では、地球シミュ

レーターセンター長の佐藤哲也教授、東京大学情報基盤センターの金田康正教授方に多大なるご指導とご支援を頂いたことに深く感謝の意を表す。

参考文献

- [1] Koyama T., Tachiki M., I-V characteristics of Josephson-coupled layered superconductors with longitudinal plasma excitations, Phys Rev. B 54,(1996), 16183.
- [2] Tachiki.M, Koyoma.T, and Takahashi.S., Electromagnetic phenomena related to a low-frequency plasma in cuprate superconductors, Phys Rev. B 50,(1994), 7065.
- [3] Tachiki M., Koyama T., and Takahashi S., in Coherence in high temperature superconductor, edited by G. Deutscher, and A. Revcolevschi, World Scientific, Singapore, (1996), 371.
- [4] Tachiki.M, Iizuka.M, Minami.K, Tejima.S and Nakamura H., Emission of continuous coherent terahertz waves with tunable frequency by intrinsic Josephson junctions, Phys. Rev. B 71,(2005), 134515.
- [5] Tachiki.M, Iizuka.M, Minami.K, Tejima.S and Nakamura H., Emission of continuous terahertz waves by high Tc superconductor, Physica C.,(2005),426-431.