

## 磁束量子の運動の計算機シミュレーション

名大 工、名大 理<sup>A</sup>加藤 龍蔵、榎本 美久<sup>A</sup>、勝見 健一、前川 禎通

## § 1. 序論

超伝導体には、第1種超伝導体と第2種超伝導体の2種類の超伝導体が存在する。近年盛んに研究されている酸化物高温超伝導体は、第2種超伝導体である。超伝導体には、2つの異なる特徴的な長さが存在する。一つは、磁場の侵入深さ $\lambda$ であり、もう一つは、秩序変数のコヒーレンスの長さ $\xi$ である。ただし、秩序変数は、超伝導電子対の巨視的波動関数であり、秩序変数の絶対値の自乗は、超伝導電子対の密度に比例する。第2種超伝導体では、この二つの長さの比 $\kappa=\lambda/\xi$ の値が、 $1/\sqrt{2}$ より大きい。このため、第2種超伝導体では、常伝導相と超伝導相の界面エネルギーは、負の値を持つ。従って、超伝導相と常伝導相が同時に存在する場合、界面エネルギーの分だけ系のエネルギーが下がる。そのため、ある温度・磁場領域では、常伝導相と超伝導相が共存する。この状態を混合状態という。混合状態の常伝導領域には、量子化された磁束（磁束量子）が存在し、秩序変数は空間変化している。また、磁束量子は、不純物によりピン止めされる。そのため、混合状態を取り扱う問題は、非常に複雑になり、これまで、純粋な系での臨界点近傍の領域を除いた任意の温度・磁場領域での混合状態の理論的な研究は行われなかった。1986年の酸化物高温超伝導体の発見以来、従来の第2種超伝導体とは異なる興味ある結果が、様々な混合状態の実験から多数報告されている。例えば、熱活性型の抵抗の出現、非可逆磁化過程、非線形I-V特性、磁束の融解、超伝導転移幅の磁場による広がり等がある。これらの実験結果を理論的に解明するためには、まず、第2種超伝導体の任意の温度・磁場領域での混合状態を研究する必要がある。また、酸化物高温超伝導体では、臨界温度が高いことにより、磁束量子が動きやすくなると考えられる。このため、磁束量子の運動（ダイナミクス）が、これらの現象を解明する重要な手がかりとなる。さらに、酸化物高温超伝導体では、多数の不純物が存在しているため、磁束量子間の相互作用はもちろん、磁束量子と不純物によるピン止め中心との相互作用が、磁束量子の運動に強く影響する。従って、不純物が存在する場合の磁束量子のダイナミクスを明らかにする必要がある。

第2種超伝導体での混合状態の研究は、秩序変数が空間変化しているために、従来の固体電子論的なアプローチでは取扱いにくい。しかし、ギンツブルグとランダウによって提案された現象論的な理論（GL理論）によるアプローチは、この秩序変数の空間変化を取り扱うことができる。GL理論は、パーディーン、クーパー、シュリーファーによる微視的な理論（BCS理論）より以前に2次相転移との類推から提案されたものであるが、後に、限定された温度・磁場領域において、微視的理論から導出されることが示された。また、GL理論での秩序変数

が、BCS理論での波動関数と一致することが示された。GL理論では、自由エネルギーが、この複素数である秩序変数とベクトル・ポテンシャルの汎関数になっている。この自由エネルギーをある境界条件のもとに最小にするという要請から、秩序変数および電流密度に対する2つの微分方程式（GL方程式）が導かれる。ただし、電流密度は、ベクトル・ポテンシャルから決められる。このGL方程式を解くことによって空間的に変化している超伝導状態を知ることができる。これまでに、GL方程式を線形化して近似的に解くことによって、上部臨界磁場の値やそのときの超伝導状態が求められている。また、大きな $\kappa$ の極限での孤立した磁束量子の構造も近似的に求められている。しかし、この微分方程式を一般的に解くことは不可能であるばかりでなく、数値的に解くことも非常に困難である。

一方、磁束のダイナミクスは、GL方程式を時間に関して拡張した、時間に依存するギンツブルグ・ランダウ（TDGL）方程式に基づいて研究することが可能である。TDGL方程式も、GL方程式と同様に微視的理論から厳密に導出されている。しかし、これまで、磁束の状態およびダイナミクスの問題に、この方程式に基づく解析は適用されなかった。本研究では、TDGL方程式が、秩序変数とベクトル・ポテンシャルの時間発展の方程式であることに着目し、初めてTDGL方程式を任意の状態に対して数値的に解くことを試みた。この数値計算は、最近、スーパー・コンピュータの性能が著しく向上したことにより可能となった。さらに、時間発展させて得られる平衡状態は、GL方程式の解と一致することから、数値的にTDGL方程式を解くことによって、磁束のダイナミクスばかりではなく、任意の温度・磁場領域での磁束の平衡状態を研究することもできる。

研究目的は、任意の温度・磁場領域で、TDGL方程式を数値的に解析することによって、第2種超伝導体での磁束の状態とそのダイナミクスを解明することである。本研究では、これらの問題の中で、次のような場合を調べた。一つは、第2種超伝導体の急冷による超伝導状態の生成過程。もう一つは、一つの不純物による磁束量子のピン止め過程である。

## § 2. シミュレーション方法および結果

これらの過程を数値計算するために、まず、様々な物理量を無次元化する。外部電流が存在しない場合を考慮しているため、スカラー・ポテンシャルをTDGL方程式から消去するようなゲージ変換を行う。数値計算に用いる系は、 $x$   $y$  平面におかれた磁場中の二次元の第2種超伝導体である。外部磁場は超伝導体に対して垂直な $z$ 軸方向に加える。GLパラメータ $\kappa=\lambda/\xi=2$ の場合を取り扱う。また、超伝導体は周囲を絶縁体に囲まれている場合を考える。従って、境界に垂直な電流の成分はゼロである。本研究では、物理量の空間変化が、 $z$ 座標にはよらず、 $x$ と $y$ 座標だけに依存する場合を考える。

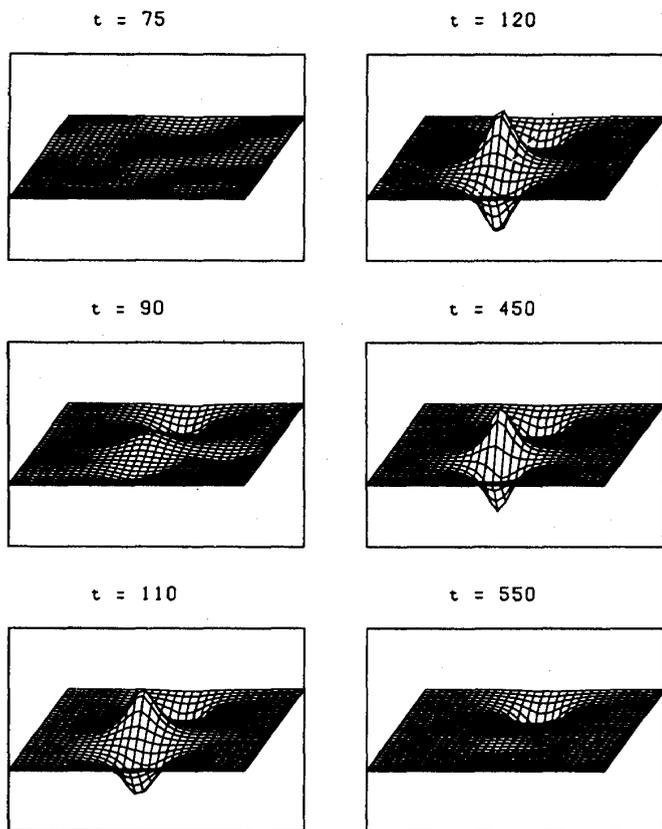


図1：外部磁場がない場合の超伝導状態の生成過程。磁束密度の空間変化の立体図。

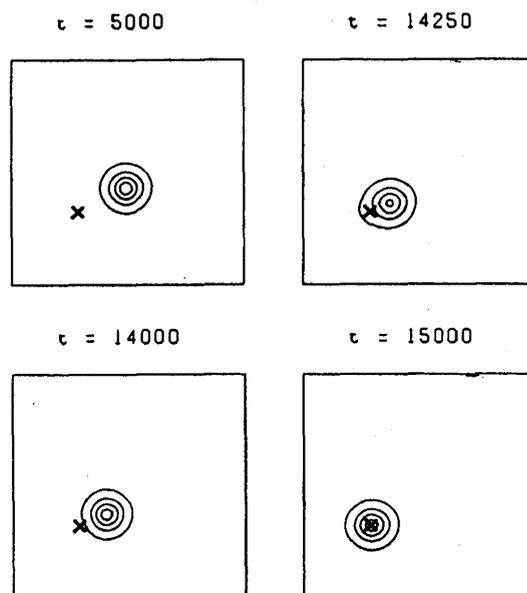


図2：外部磁場がない場合の磁束量子のピン止め過程。磁束密度の空間変化の等高線図。図中の×はピン止め中心を表す。同心円状の等高線が磁束量子を表す。

今後さまざまな計算をする前に、本研究で用いた数値計算の妥当性を検討してみた。数値計算によって求められた下部臨界磁場と磁束量子の値は、理論から求められる値と一致した。従って、本研究で用いた計算方法が妥当であることが確認された。

まず、外部磁場がない場合に、超伝導状態が急冷により生成する過程を調べた。熱力学的に非平衡な常伝導状態を初期条件とする。超伝導状態が生成する過程において、外部磁場を加えていないにも拘らず、図1のように超伝導体中に磁束量子が形成される。このとき、磁束量子を取り囲む超伝導電流の向きが右回りと左回りの2種類の磁束量子が生成する。電流の向きが異なる磁束量子同士が、対をつくり互いに引きあい消滅していく。対を作れなかった磁束量子は超伝導体の外に押し出される。そして、最後には、最も安定な秩序変数の位相がそろった一様な状態に落ちつく。つまり、秩序変数は空間的に一様に成長するのではなく、磁束量子と反磁束量子が形成され、それらが対消滅することによって空間的に一様な超伝導状態（マイスナー状態）が実現することが明らかにされた。また、初期条件によって生じる磁束量子の個数が違うことから、磁束量子の形成には、位相のゆらぎが重要であることが指摘された。

次に、下部臨界磁場より弱い磁場を加えた場合、超伝導の状態が急冷により生成する過程を調べた。理論的には、外部磁場がない場合と同様なマイスナー状態になることが期待される。しかし、数値計算の結果以下のことが明らかになった。超伝導体中に取り残された磁場は、外部磁場がない場合と同様に量子化されて磁束量子となる。ただし、このときに生じる磁束量子は、すべて加えた磁場と同じ向きである。このため、磁束量子は、互いに反発しあいながら運動する。系の外に押し出される磁束量子もあるが、最終的には、系の中に磁束量子が取り残されてマイスナー状態とは異なる混合状態が実現した。両者の状態のエネルギーの差が小さいために、取り残された磁束量子が系の外にでるまでには、非常に時間がかかると考えられる。

さらに、超伝導状態から常伝導状態に相転移する上部臨界磁場と、下部臨界磁場の中間の値の磁場を加えた場合を調べる。磁束量子は、前の場合と同様に形成されるが、この場合には、それらは規則的な配列になるように運動する。最もエネルギーが低い安定な配列は、正三角形格子といわれている。しかし、計算している系が有限な系であるために完全な正三角格子は実現しなかった。しかし、局所的には、正三角格子が形成された。

最後に、不純物による磁束量子のピン止めを考える。一般に、磁束量子のピン止めは、実験で得られた結果をもとに仮定したピン止めポテンシャルを用いて議論されている。本研究では、不純物の存在する領域は、常伝導状態になっていることから、その場所での秩序変数の振幅がゼロであるとしてピン止め中心を導入した。数値計算の結果、超伝導体中に不純物によるピン止め中心が一つ存在する場合、そのピン止め中心に磁束量子が、図2のようにピン止めされることが確認された。

### § 3. 今後の課題

今後、この手法を拡張することにより、様々な超伝導状態を研究する予定である。具体的には、不純物濃度によって磁化過程のヒステリシスにどのような変化が現れるかを研究する予定である。この場合、不純物が増加するに従って残留磁束密度が増加することが期待される。さらに、磁束量子間の相互作用、磁束量子と不純物との相互作用の大きさの違いによってヒステリシスの変化の仕方が異なってくることが考えられる。また、外部電流がある場合の磁束量子の運動を研究する予定である。外部電流がある場合には、磁束量子はローレンツ力によって運動する。従って、不純物によってピン止めされた磁束量子は、ある値を越える電流によってピン止めがはずれ磁束量子が動いて抵抗が生じる。不純物濃度によって、この臨界電流がどのように変化するかを研究する予定である。さらに、温度勾配がある場合や熱揺らぎをランダム力として導入した場合に磁束量子の運動に与える影響についても研究する予定である。