時間依存ボゴリューボフ-ドジャン方程式のためのエネルギー保存数値積分法

Energy-conservation numerical integrator for the time-dependent Bogoliubov-de Gennes equation

○松野 哲也A，東 陽一B，馬渡康徳B，小田部荘司C

有明高専A，産総研B，九工大C

Tetsuya MatsunoA, Yoichi HigashiB, Yasunori MawatariB , Edmund Soji OtabeA

ANIT Ariake college, BAIST , CKyushu Inst. Tech.

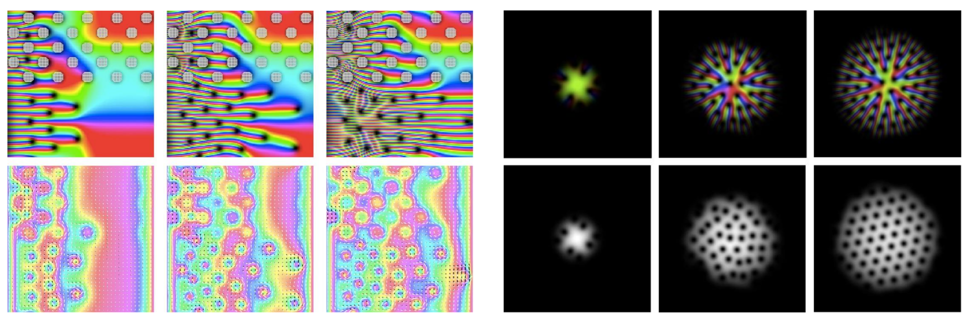
背景

第2種超伝導体における電磁現象と超伝導工学

- 臨界電流密度
- 量子化磁束とピン(不純物，欠陥)の相互作用
- トポロジカル超伝導

超流体の物理

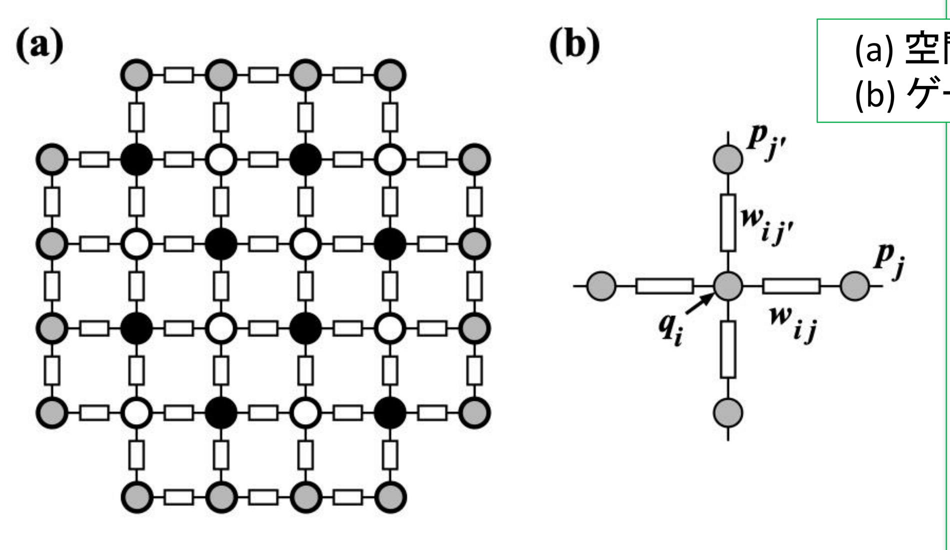
- 回転超流体における量子渦
- 乱流における量子渦



$$\gamma\frac{\partial\psi}{\partial t} = (\nabla - \mathrm{i}\boldsymbol{A})^2\psi - \alpha\psi - \beta|\psi|^2\psi$$

超伝導体内の量子化磁束や回転超流体内の量子渦の力学を記述できる非線形複素偏微分方程式，すなわち時間依存ギンツブルグ・ランダウ(TDGL)方程式や時間依存グロス・ピタエフス キー(TDGP)方程式を効率よく数値的に解くことは重要である.

最近我々はゲージ場存在下での複素偏微分方程式を解くための高安定な陽的数値積分法(Affine Integrator: AFI)を提案した[1]. AFI は，空間離散化格子を2部グラフと見做すことによって高次元複素ベクトルを導出し，それらにアフィン変換を逐次的に作用させて時間発展させていく形の陽的数値積分法である.



(a) 空間に関する離散化のための格子.
(b) ゲージ場(磁場，回転速度場)をリンク変数(格子点間で定義される)により導入.

AFI: Affine Integrator の構成

(1)「チェッカボード」格子の導入にともなう Affine変換対による離散時間発展：AFIの場合は，共役変数ペアは(a)の「黒丸」と「白丸」上で定義される従属変数ψ.
(2) 指数関数時間発展演算子のLie-Trotter-Suzuki 分解

$$\gamma\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix} = (\hat{A}_Q + \hat{A}_P)\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix},$$

Q:「黒丸」格子点指定インデックス集合
P:「白丸」格子点指定インデックス集合

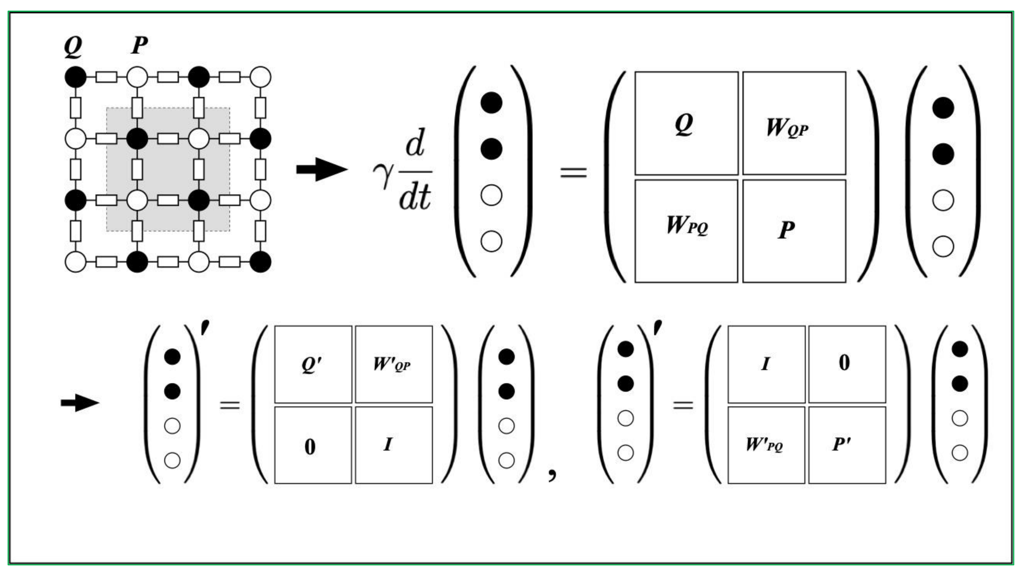
$$\hat{A}_Q = \sum_{i\in Q}\left[-U_i q_i + \sum_{j\in P(i)}(-q_i + w_{ij}p_j)/h_{ij}^2\right]\frac{\partial}{\partial q_i},$$

$$\hat{A}_P = \sum_{i\in P}\left[-U_i p_i + \sum_{j\in Q(i)}(-p_i + w_{ij}q_j)/h_{ij}^2\right]\frac{\partial}{\partial p_i},$$

$$U_i = \alpha_i + \beta_i|\tilde{\psi}_i|^2,$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(a_Q) & D(b_Q)W \\ 0 & I\end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix},$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ D(b_P)W^\dagger & D(a_P)\end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix},$$



参考文献 [1] T. Matsuno, E. S. Otabe, and Y. Mawatari: J. Phys. Soc. Jpn. 89 (2020) 054006.
https://jpsht.jps.jp/article/1.012.html

目的

AFIが時間依存ボゴリューボフ・ドジャン方程式に対しても(複素ベクトル場に対しても)有効であることを示す.
すなわち，このときもエネルギー厳密保存数値積分法であることを示す.

時間依存ボゴリューボフ・ドジャン (Time-dependent Bogoliubov-de Gennes) 方程式：

$$i\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} u \\ v\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\nabla - ig\boldsymbol{A})^2 + V(\boldsymbol{r}) - \mu & \Delta \\ \Delta^* & (\nabla + ig\boldsymbol{A})^2 - V(\boldsymbol{r}) + \mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v\end{pmatrix}$$

- ($u(\boldsymbol{r}, t)$, $v(\boldsymbol{r}, t)$)：波動関数(超伝導状態における低エネルギー励起：ボゴリューボフ準粒子のための波動関数)
- Δ：オーダーパラメータ(超伝導電子の波動関数) (* は複素共役)
- $\boldsymbol{A}$：ベクトルポテンシャル，g：電荷，$V(\boldsymbol{r})$：ポテンシャル，μ：化学ポテンシャル(フェルミ準位)

理論解析：エネルギーが厳密保存(時間に関して区分的に)すること

- 簡単な空間離散化格子(波動関数の標本化点が2つ，ベクトルポテンシャルの標本化点が1つ)を利用する.
  (2次元や3次元のチェッカボード格子への一般化は容易である.)
- 任意の時間刻み幅τに対して$H(t+\tau) = H(t)$であることを示す.

$$q \quad W \quad p$$

$$i\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix} = G\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix} \qquad G = \begin{pmatrix} S_q & -W \\ -W^\dagger & S_p\end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{q} = (q_u, q_v)^T,\ \boldsymbol{p} = (p_u, p_v)^T$$

$$S_q = \begin{pmatrix} 1+\alpha_q & \Delta_q \\ \Delta_q^* & -1-\alpha_q\end{pmatrix},\quad S_p = \begin{pmatrix} 1+\alpha_p & \Delta_p \\ \Delta_p^* & -1-\alpha_p\end{pmatrix},\quad W = \begin{pmatrix} w_u & 0 \\ 0 & -w_v\end{pmatrix}$$

$$\alpha_q \longrightarrow V(\boldsymbol{r}) - \mu,\quad \alpha_p \longrightarrow -V(\boldsymbol{r}) + \mu \qquad w_u = \exp(-ihgA),\ w_v = \exp(ihgA)$$

$$\begin{pmatrix} q(t+\tau) \\ p(t+\tau)\end{pmatrix} = A_Q(c_1\tau)A_P(d_1\tau)\cdots A_Q(c_k\tau)A_P(d_k\tau)\cdots\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t)\end{pmatrix}$$

- 時間に関する離散化
- Lie-Trotter-Suzuki分解

$$A_Q(\tau) = \begin{pmatrix} e^{-i\tau S_q} & S_q^{-1}(I - e^{-i\tau S_q})W \\ 0 & I\end{pmatrix},\quad A_P(\tau) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ S_p^{-1}(I - e^{-i\tau S_p})W^\dagger & e^{-i\tau S_p}\end{pmatrix}$$

全エネルギー：$H = (\boldsymbol{q}^\dagger\ \boldsymbol{p}^\dagger)G\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix}$

全エネルギー保存：$H(t+\tau) = H(t)$

全エネルギー保存が成り立つとき $A_Q^\dagger G A_Q = G,\ A_P^\dagger G A_P = G$ である. なぜならば，

$$(q^\dagger(t+\tau)\ p^\dagger(t))G\begin{pmatrix} q(t+\tau) \\ p(t)\end{pmatrix} = (q^\dagger(t)\ p^\dagger(t))A_Q^\dagger G A_Q\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t)\end{pmatrix}$$

$$(q^\dagger(t)\ p^\dagger(t+\tau))G\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t+\tau)\end{pmatrix} = (q^\dagger(t)\ p^\dagger(t))A_P^\dagger G A_P\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t)\end{pmatrix}$$

であるからである.

$$\begin{aligned} A_Q^\dagger G A_Q &= \begin{pmatrix} e^{i\tau S_p} & 0 \\ W^\dagger(I - e^{i\tau S_p})S_q^{-1} & I\end{pmatrix}\begin{pmatrix} S_q & -W \\ -W^\dagger & S_p\end{pmatrix}A_Q \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\tau S_q}S_q & -e^{i\tau S_q}W \\ -W^\dagger e^{i\tau S_q} & -W^\dagger(I - e^{i\tau S_q})S_q^{-1}W + S_p\end{pmatrix}A_Q \\ &= \begin{pmatrix} S_q & -W \\ -W^\dagger & S_p\end{pmatrix} = G\end{aligned}$$

※ A_Pについても同様

$$H(t+\tau) = H(t)$$

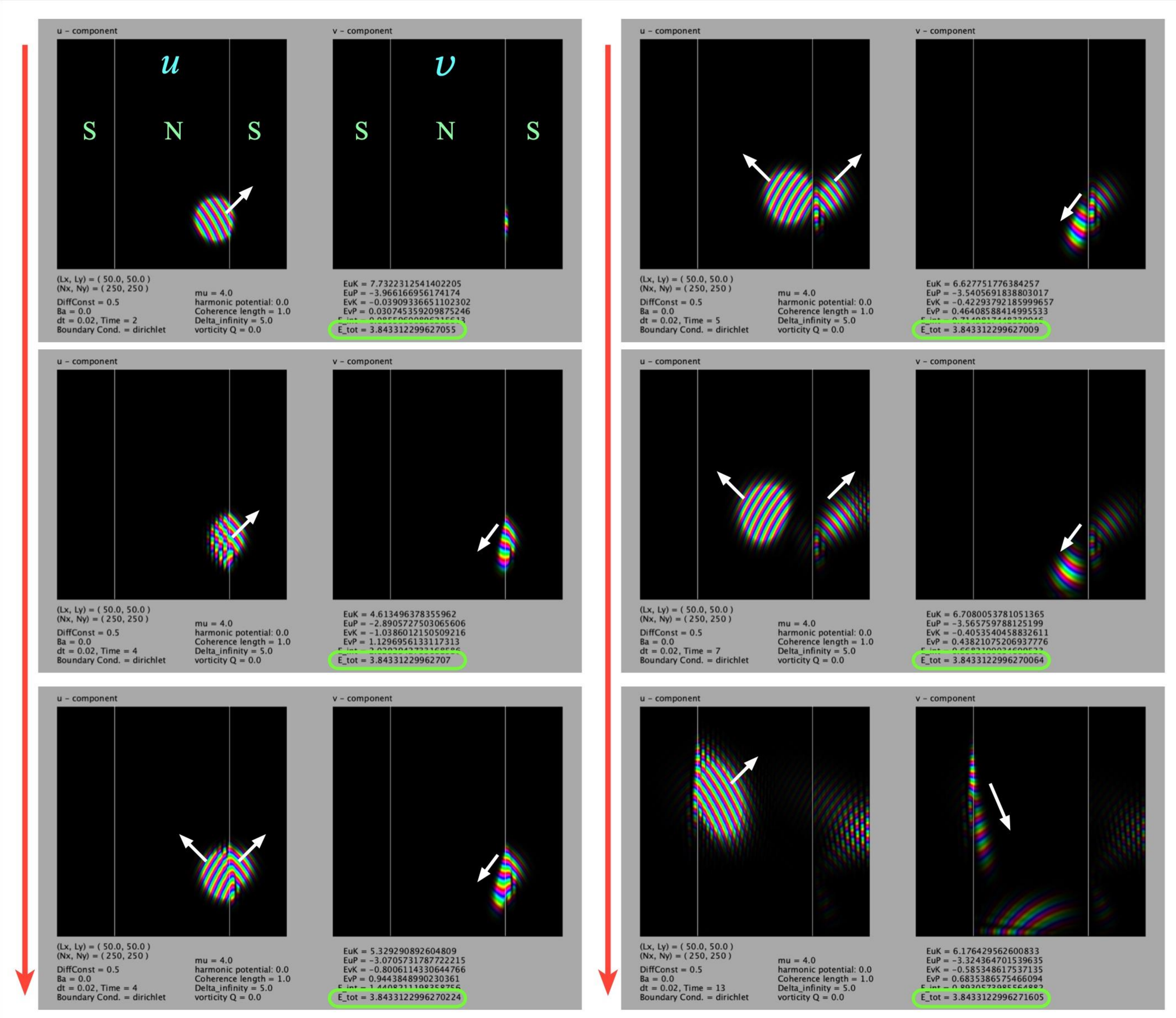
エネルギー厳密保存

※Symplectic integrator の場合は**位相空間の体積**を厳密に保存する.

数値計算結果

超伝導(S)-常伝導(N)-超伝導(S)領域において，
適当な電子波束を運動させてエネルギー保存性を確認した.

→ 緑色囲みは全エネルギーを示す.
丸め誤差レベルでエネルギーが保存されていることが確認できる. 理論通りである.



関連動画サイト ● URL：https://www.youtube.com/user/pftetsuyaGPU/videos

補足

● 電子波束が常伝導領域(N)から超伝導領域(S)に侵入する際に，超伝導領域(S)ではクーパー対を組む必要があるので新たにホール(正孔)が生じ，それが常伝導領域(N)へ反射する. そのホールは電子の侵入方向を逆向きに辿る. この物理現象(**アンドレーエフ反射**)が数値的に再現された.

● 上記例はゲージ場(磁場)無しの場合であるが，磁場存在下でもエネルギーが厳密(数値的に丸め誤差レベル)保存することが確認された.

今後の課題

複素ベクトル場の時間発展
数値シミュレーション →

- 2成分超伝導系
- 時間依存量子電磁力学
- 時間依存量子色力学

$$\begin{aligned} \gamma_1\frac{\partial}{\partial t}\psi_1 &= \frac{\hbar^2}{2m_1}(\nabla - ig\boldsymbol{A})^2\psi_1 - \alpha_1\psi_1 - \beta_1|\psi_1|^2\psi_1 - \eta\psi_2, \\ \gamma_2\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 &= \frac{\hbar^2}{2m_2}(\nabla - ig\boldsymbol{A})^2\psi_2 - \alpha_2\psi_2 - \beta_2|\psi_2|^2\psi_2 - \eta^*\psi_1, \\ \tau_A\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} &= g\mathrm{Im}[\sum_{j=1,2}\psi_j^*(\nabla - ig\boldsymbol{A})\psi_j] - \nabla\times\nabla\times\boldsymbol{A}\end{aligned}$$

$$\mathcal{L}_{\mathrm{QED}} = \bar{\psi}[i\gamma^\mu(\partial_\mu - igA_\mu) - m]\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \qquad F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

$$\mathcal{L}_{QCD} = \bar{\psi}_i\{i[\gamma^\mu(\partial_\mu + igA_\mu^a)]_{ij} - \delta_{ij}m\}\psi_j - \frac{1}{4}G_{\mu\nu}^a G_a^{\mu\nu}$$

- トポロジカル物質の動特性

$$G_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc}A_\mu^b A_\nu^c$$

日本物理学会 2021年秋季大会 9月20日－23日(オンライン開催)