

大規模超伝導シミュレーションのための超高速新手法

[1] 要旨

超伝導体の接合や磁束での準粒子励起の研究は、マヨラナ準粒子励起を用いたトポロジカル量子コンピューティングの提案等もあり重要度を増してきている。しかしながら、空間的に非一様な超伝導体のシミュレーションは計算量の問題で困難があった。本研究で提案された **Localized Krylov Bogoliubov-de Gennes method(LK-BdG)**では、超伝導体の一粒子グリーン関数の実空間局在性の利用により計算量が劇的に削減され、ボゴリューボフドジャン(BdG)方程式の超高速シミュレーションが可能となった。これにより、ハミルトニアン行列の次元が数十万-数千万となる巨大な系の計算が現実的な時間で実行可能となった。

[2] 本文

超伝導状態を記述する基礎方程式としてボゴリューボフドジャン(BdG)方程式がある。この方程式を解くことで、準粒子励起の情報を得ることができる。超伝導体の準粒子励起は超伝導電子対の超伝導対称性を反映するため、これまで様々な研究が行われてきた。近年では、超伝導体におけるマヨラナ準粒子励起を用いたトポロジカル量子コンピューティングの可能性が提案され、接合や量子磁束の存在する系における準粒子励起はこれまで以上に重要性を増してきている。しかしながら、接合や量子磁束が存在する場合には、系は空間的に非一様となり、実空間においてこの方程式を解かなければならない。そして、BdG 方程式は固有値方程式であり、解くべき行列サイズ N に対して $O(N^3)$ の計算コストがかかる。行列のサイズは扱う格子点のサイズに比例しているため、大きな系の計算をすることはこれまで困難であった。さらに、BdG 方程式は平均場方程式であるために、自己無撞着な平均場を得るためには繰り返し解く必要があり、実際のデバイスの長さスケールを持つ系の計算は非常に困難であった。近年、この問題を回避するために、チェビシエフ多項式展開法や縮約シフト共役勾配法など様々な手法が開発されている。これらの手法ではハミルトニアン行列が疎であることを利用し、疎行列ベクトル積の繰り返し計算を行う。これらの手法の計算コストは $O(N^2)$ となることが知られていた。

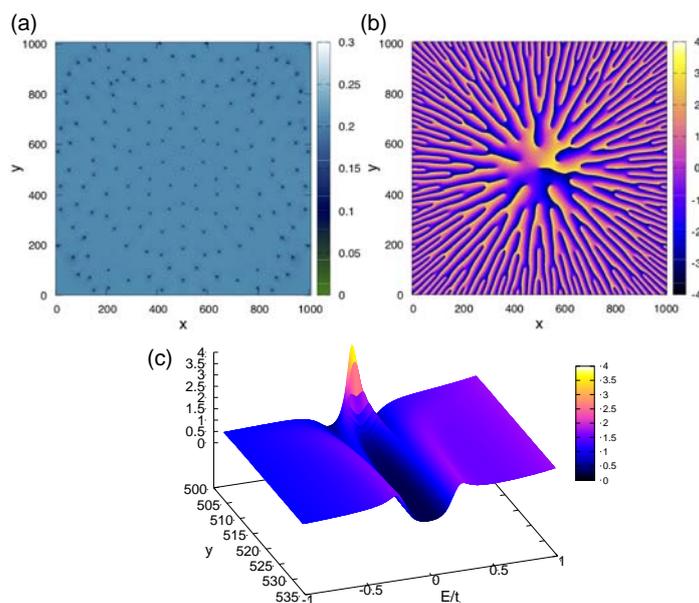


図 1. 約 100 万格子点を持つ正方格子 s 波超伝導体の磁束集団の例。初期状態として磁束をペンローズスタイル

状に配置した場合の準安定解。(a)秩序変数の絶対値、(b)秩序変数の位相、(c)磁束周りの局所状態密度

最近、日本原子力研究開発機構システム計算科学センターの永井佑紀副主任研究員は、超伝導状態の一粒子グリーン関数の実空間局在性を利用することで、局所状態密度や局所超伝導秩序変数などの局所的物理量の計算コストを $O(1)$ にまで落とす計算手法(著者は **LK-BdG** と呼んでいる)を提案した。これにより自己無撞着計算の計算コストは $O(N)$ となり、**BdG** 方程式の超高速シミュレーションが可能となった。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 **Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)** の 2020 年 7 月号に掲載された。

超伝導体においては、特徴的な長さスケールとしてコヒーレンス長が存在し、準粒子励起のサイズはこの長さによって規定される。これを言い換えると、ある場所における準粒子励起の情報は実空間に局在していると考えられることができる。そのため、基底として実空間に局在したものを選べば、局所物理量を記述するために必要な基底の数や計算機で保持するメモリーは系のサイズに依存しない。その結果、計算コストの劇的な減少が実現された。

図 1 は、 1008×1008 の 2 次元正方格子強束縛モデルにおける s 波超伝導体のシミュレーション結果である。このように、**BdG** 方程式で多数の渦(図 1(a)の黒い各点が渦の中心)を取り扱うことができる。また、ここまで大きな系を考えると、コヒーレンス長とフェルミ波数の逆数の比を実験値に近づけることが可能となり、走査型トンネル顕微鏡で観測されるような連続的な準粒子励起スペクトルを得ることができる(図 1(c))。また、論文中では、空間的に非一様な系の代表例である準結晶(ペンローズ格子)の超伝導状態についても計算しており、空間的に非一様な超伝導秩序分布と特異な低エネルギー束縛状態の存在について報告している。さらに通常の **Lanczos** 法での計算時間(computational complexity)がシステムサイズに比例するのに対し、本論文で提案されている **LK-Lanczos** 法ではシステムサイズに依存せず、 5000×5000 の正方格子強束縛モデル(行列次元 $50,000,000$)の局所状態密度のエネルギー依存性がラップトップ上で約 26 秒で終わることができることもデモンストレーションされている。

超伝導体には必ずコヒーレンス長という長さスケールがあり、局所的な物理量はこの長さスケールで規定されるため、本研究で提案された手法は様々な超伝導体の適用が可能である。計算量の劇的な減少によって、第一原理有効モデルなどの現実的な物質のモデルでの実スケールでの超伝導シミュレーションなどが可能になると期待される。また、マジックアングルグラフェンや準結晶等、非一様性が本質的に重要であると思われる系の超伝導状態へのアプローチも可能となるだろう。今後の研究の展開が期待される。

原論文(6月8日公開済)

[N-independent Localized Krylov-Bogoliubov-de Gennes Method: Ultra-fast Numerical Approach to Large-scale Inhomogeneous Superconductors](#)

Yuki Nagai, *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 074703 (2020).

<情報提供：永井佑紀（国立研究開発法人日本原子力研究開発機構システム計算科学センター）>