

令和 3 年 5 月 13 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K03977

研究課題名(和文)自己エネルギーの幾何学的制御によるフォノン・ブロッキング

研究課題名(英文)Phonon blocking due to geometrically-engineered self-energy

研究代表者

服部 公則 (HATTORI, Kiminori)

大阪大学・基礎工学研究科・准教授

研究者番号：80228486

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：メゾスピック系において、フォノンによる熱輸送はmassless Goldstone modeの存在のため低温下で普遍的に量子化される。この量子化は、低温での熱電変換を妨げる原理的要因となる。本研究では、非平衡グリーン関数を用いた理論解析から、外部熱浴との接触による自己エネルギーを幾何学的に制御することで、低温のフォノン輸送を任意次元において抑制可能であることを示した。また、系を自己無撞着な仮想熱浴と接触させると、自己エネルギーの関数形および系の次元により正常輸送と異常輸送が移り変わることが示された。熱輸送のクロスオーバーは有限サイズ熱伝導度の理論解析から厳密に証明される。

研究成果の学術的意義や社会的意義

熱電効果の新しいプラットフォームとして、ナノワイヤなどのナノ構造が注目されている。ナノ構造では、電子系の低次元化や熱伝導の抑制による効率向上が期待される。本研究では、従来になかった新たな方法論として、自己エネルギーの幾何学的制御によるフォノン・ブロッキングを提案し、その有効性を理論的に実証した。本研究からは、熱電発電・冷却の飛躍的効率化に向けたブレークスルーが期待される。また、本研究の成果をまとめた論文は世界的に権威のある学術誌Physical Reviewに掲載されており、数世紀以上の長きにわたり未解明な問題であるFourierの法則に対しても重要な示唆を与えている。

研究成果の概要(英文)：Because of the presence of massless modes, the heat current carried by phonons tends to survive at low temperatures even when scattering mechanisms are incorporated into the system. This becomes a fundamental obstacle to thermoelectric applications at low temperatures. In this study, we investigate the effect of energy broadening on phonon transport in mesoscopic systems coupling to external reservoirs such as leads and probes in various geometries using a nonequilibrium Green's function formalism. An analytic theory shows that geometrically induced broadening sizably suppresses low-temperature phonon transport in a harmonic chain. Numerical calculations demonstrate that this scheme for phonon blocking is viable for realistic systems in higher dimensions. It is also shown that in the presence of self-consistent reservoirs, normal transport emerges for a linear self-energy in arbitrary dimensions, while nonlinear higher-order ones lead to anomalous transport in low dimensions.

研究分野：量子熱輸送と量子熱制御

キーワード：フォノン 熱輸送 熱コンダクタンス 熱伝導度 自己エネルギー

1. 研究開始当初の背景

廃熱から電気エネルギーを直接回収あるいは電氣的に熱流を制御する熱電発電と熱電冷却は、人類文明を持続可能な形で維持発展させる基盤技術の一つとして期待されている。発電効率と冷却効率はともに、無次元性能指数 ZT の単調増加関数である。ここで、 $Z = \sigma S^2 / \kappa$ は電気伝導度 σ とゼーベック係数 S および熱伝導度 κ の関数である。一般に、熱伝導度には電子とフォノンの寄与が含まれる。通常、金属であれば電子の寄与が主要となるが、その場合、電気伝導度と熱伝導度が **Wiedemann-Franz** 則で結合するため、効率の向上は難しい。一方、半導体では電子のそれに比較してフォノンの寄与が支配的なため、後者が効率を制限する。したがって、高効率の熱電応用にはフォノンの輸送制御が必要不可欠となる。

現在、熱電効果の新しいプラットフォームとして、ナノワイヤや超格子に代表されるメゾスコピック・ナノ構造が注目されている。ナノ構造では、電子系の低次元化や熱伝導の抑制による効率向上が期待される。熱伝導を効果的に抑制する方法論としては、フォノンの散乱機構の導入が国内外研究のスタンダードになっている。例えば、人為的に作られた微細な表面ラフネスは、短波長フォノンに対する有効な散乱体となる。しかしながら、この機構で長波長フォンは散乱されない。ごく簡単に言えば、これはラフネスがフォノンの波長スケールで平均化されるためである。また、ラフネスを過度に大きくすると、電子の表面散乱も顕在化するため、熱電効果の効率はかえって減少する。この例から示唆されるように、散乱機構によるフォノン輸送抑制へのアプローチには本質的な限界がある。

2. 研究の目的

そもそも、励起ギャップのない長波長モード (**massless Goldstone mode**) の存在は、音響総和則を通じて、系の全運動量保存に関連しており、これを排除することは原理的に不可能である。では、長波長モードによるフォノンの伝搬を遮断することはできないのであろうか？通常、我々が扱う系には、リードやプローブのような外部熱浴が接続されている。熱浴との接触により、系には自己エネルギーが導入される。本研究では、自己エネルギーのもつ自由度に着目し、フォノン輸送抑制に向けた新規アプローチとして、自己エネルギーの幾何学的な制御によるフォノン・ブロッキングを提案し、関連物理の理論解析と数値的検証を行う。また、この研究は低次元系に見られる異常熱輸送の解析にも応用できる。言うまでもなく、熱輸送の基本法則は 1808 年に提唱された **Fourier** の法則である。しかしながら、この法則の厳密な証明は未だ成されていない。過去の膨大な数の理論的および実験的研究から、この法則は全運動量を保存する低次元系では成立しないことが確認されている。本研究では、系を自己無撞着な仮想熱浴と接触させ、自己エネルギーの関数形と系の次元による熱輸送のクロスオーバーを詳細に調べる。この研究からは **Fourier** 則にまつわる諸問題の解明に向けた学術的に重要な示唆が得られるものと期待される。

3. 研究の方法

本研究では、フォノン輸送の抑制への新規アプローチとして、自己エネルギーの幾何学的制御によるフォノン・ブロッキングを新たに提案し、関連物理の理論解析と数値的検証を行う。解析的に扱えるミニマルモデルとしては、1次元系と2次元系の接触を考え、逐次グリーン関数とランダウアー公式に基づき、フォノンの透過係数と熱コンダクタンスを厳密に定式化する。もちろん、現実の系の多くは3次元系である。系が高次元化すると問題は解析的に扱えないため、非平衡グリーン関数などを用いた数値計算を実施する。数値計算では、弾性体ハミルトニアンを格子上にマップした格子モデルを用い、リードやプローブなどの外部熱浴を接続した格子系における熱輸送を定量的に評価する。ランダウアー公式は自己無撞着な仮想熱浴と接触した格子系における熱輸送の解析に応用できる。本研究では、自己エネルギーの関数形と系の次元による熱輸送のクロスオーバーを詳細に調べる。

4. 研究成果

運動量保存に保護された **massless Goldstone mode** の存在のため、系に導入された散乱機構の如何によらず、フォノンによる熱輸送は低温で保持される。これは低温での熱電応用に対する原理的障害になる。本研究では、様々な幾何学的形状を有するリードやプローブなどの外部熱浴との接触がフォノン輸送に与える影響を非平衡グリーン関数により定量的に調査した。1次元と2次元調和格子により構成されるミニマルモデルからは、自己エネルギーの幾何学的制御により、低温のフォノン輸送が顕著に抑制されることが解析的に示された。また、弾性体ハミルトニアンを格子上にマップした有効格子モデルを用いて、このフォノン・ブロッキングが現実的な高次元系においても有効であることが数値的に実証された。

図1は乱れた2次元系におけるフォノンの透過係数と熱コンダクタンスを示す。質量乱れと表面乱れはとともに高エネルギー域 (高温域) のフォノン輸送を抑制するが、低エネルギー域

(低温域)の熱輸送には影響を及ぼさない。図2(上段)は様々な幅をもつリードが接続された2次元系と3次元系の熱コンダクタンスの温度依存性である。リードの幅が増大すると、低温の熱輸送は顕著に抑制されている。同様な現象はプローブと接触した高次元系にも見られる。これらの数値結果は熱浴の幾何学的デザインで熱輸送が制御可能なことを実証している。図2(下段)は乱れた2次元系に異なる幅のリードを接続した場合の計算結果である。乱れは高温の熱輸送を抑制し、自己エネルギーの幾何学的制御により低温の熱輸送が抑制されている。つまり、全温度域におけるフォノン・ブロッキングが可能である。詳細は、文献[1]を参照されたい。

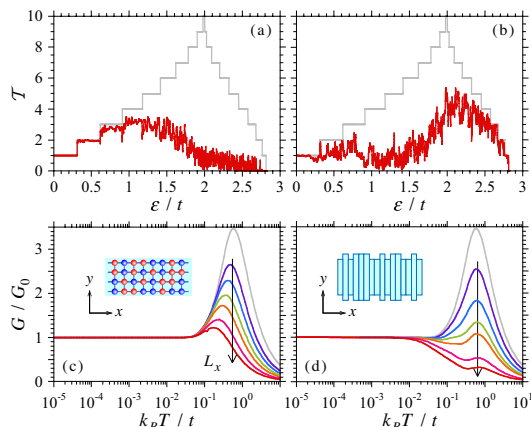


図1 質量乱れと表面乱れを有する2次元系における透過係数のエネルギー依存性と熱コンダクタンスの温度依存性。

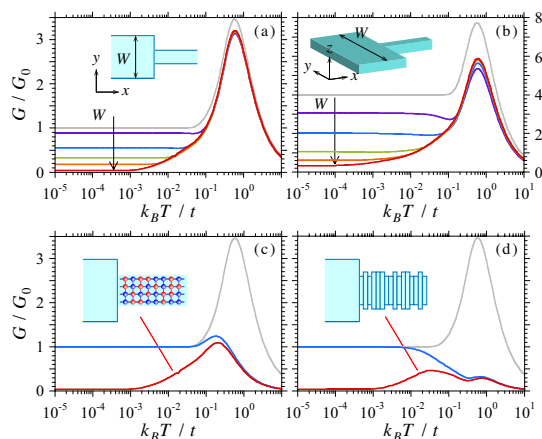


図2 (上段) 様々な幅のリードが接続された2次元系と3次元系の熱コンダクタンスの温度依存性と(下段)乱れた2次元系に異なる幅のリードを接続した場合の計算結果。

仮想熱浴との接触は格子系に散乱機構と位相緩和を付与し、これらは自己エネルギーとして系のグリーン関数に取り込まれる。本研究では無限に長い1次元系に自己無撞着条件を満たす仮想熱浴を配したSCR (self-consistent reservoir) モデルを新たに考案した。このモデルは格子並進対称であるため界面不整合が存在しない。本研究からは、線形な自己エネルギーでは全運動量保存が破られるためmassless modeが消失し熱力学的極限の熱伝導度は有限になるが、高次の非線形な自己エネルギーでは全運動量保存が維持されるためmassless modeが残存し熱伝導度はべき発散することが明らかにされた。

図3は本研究において新規に考案された格子並進対称なSCRモデルの模式図である。各サイトには仮想熱浴が接続されており、それにともない局所的な自己エネルギー Σ が系に誘起される。左右の半無限領域L,Rは有限系に接続されたリードと見なせる。リードにも同一の自己エネルギーを考慮しており、全系は格子並進対称になっている。図4は計算結果の一例である。上段は有限サイズ熱伝導度のサイズN依存性である。線形な自己エネルギー(n=1)では、熱伝導度は十分に大きなNで飽和し一定値をとる。これは、漸近的極限において、フーリエ則を満たす正常輸送が回復することを意味する。一方、非線形な自己エネルギー(n=3)では高温下でべき発散が見られる。熱伝導度の発散はフーリエ則にしたがわない異常輸送が起こることを意味する。下段は状態密度のエネルギー依存性である。n=1のとき、状態密度は低エネルギー域で消失している。これはmassless modeの抑制を意味する。一方、n=3では、状態密度は低エ

エネルギー域で一定値をとっており、massless mode の残存がわかる。詳細は、文献[2]を参照されたい。

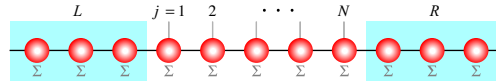


図3 SCRモデルの模式図。各サイトには自己無撞着条件を満たす仮想熱浴が接続されている。

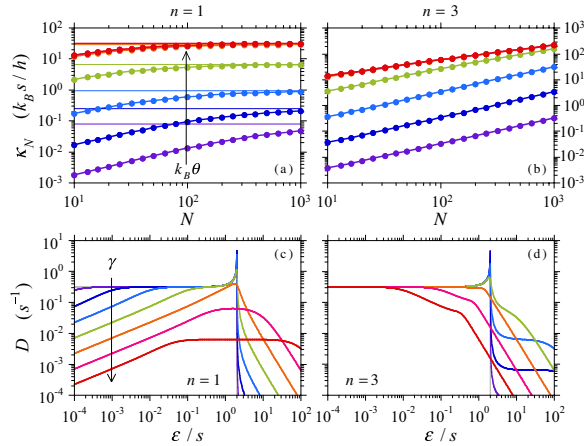


図4 (上段)有限サイズ熱伝導度のサイズ依存性と(下段)状態密度のエネルギー依存性。 γ は仮想熱浴と系の結合強度である。

本研究では仮想熱浴と接触した高次元調和格子における熱輸送も研究している。高次元調和格子は直交変換により1次元 Klein-Gordon 格子に分解できる。本研究ではこの分解を利用して高次元系の SCR モデルを構築した。仮想熱浴による自己エネルギーは一般にエネルギーのべき関数で表現できる。この研究からは、べき指数 $n=1$ では任意次元 $d=1, 2, 3, \dots$ において Fourier 型の正常輸送が回復するが、 $n>d$ では非 Fourier 型の異常輸送が発現し熱伝導度はサイズの増大とともに対数発散あるいはべき発散することが明らかにされた。このような自己エネルギーの関数形と系の次元による熱輸送のクロスオーバーは、有限サイズ熱伝導度の理論解析から厳密に証明される。

図5は2次元調和格子の分散関係である。基底モードは原点に接する massless mode であり、それ以外の高次モードは全て励起ギャップをもつ massive な Klein-Gordon mode である。図6は $n=3, d=2$ における有限サイズ熱伝導度のサイズ依存性であり、この系の熱伝導度が対数発散することがわかる。詳細は、文献[3]を参照されたい。

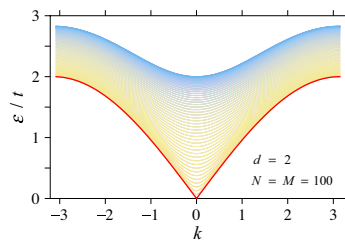


図5 2次元調和格子の分散関係。基底モードは原点に接する massless mode であり、それ以外の高次モードは全て励起ギャップをもつ massive な Klein-Gordon mode である。

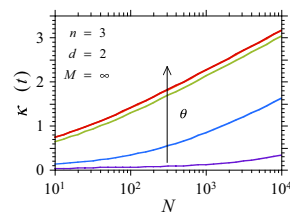


図6 $n=3, d=2$ の有限サイズ熱伝導度のサイズ N 依存性。輸送方向に垂直な2次元系の幅 M は無限大にとられている。

- [2] K. Hattori and M. Yoshikawa, Phys. Rev. E **99**, 062104 (2019).
- [3] K. Hattori and M. Sambonchiku, Phys. Rev. E **102**, 012121 (2020).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hattori Kiminori, Nakamura Yohei	4. 巻 97
2. 論文標題 Geometrically induced broadening for phonon blocking at low temperatures	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 224312 -1~7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.97.224312	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hattori Kiminori, Yoshikawa Miyuki	4. 巻 99
2. 論文標題 Generalized self-consistent reservoir model for normal and anomalous heat transport in quantum harmonic chains	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 062104 -1~7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.99.062104	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hattori Kiminori, Sambonchiku Masaya	4. 巻 102
2. 論文標題 Dimensional crossover of thermal transport in quantum harmonic lattices coupled to self-consistent reservoirs	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 012121 -1~7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.102.012121	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件／うち国際学会 0件）

1. 発表者名 中村洋平、服部公則
2. 発表標題 自己エネルギーの幾何学的制御によるフォノン輸送抑制
3. 学会等名 応用物理学会
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 吉川美由紀、服部公則
2. 発表標題 量子調和格子における正常及び異常熱輸送
3. 学会等名 応用物理学会
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 三本竹将也、服部公則
2. 発表標題 量子調和格子における熱輸送の次元クロスオーバー
3. 学会等名 応用物理学会
4. 発表年 2020年～2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関