

## 自己評価報告書

平成 23 年 4 月 12 日現在

機関番号：63902

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：平成 20 年度～平成 23 年度

課題番号：20340101

研究課題名（和文）

量子熱電効果の非平衡物理と熱駆動ナノデバイスの開拓

研究課題名（英文）

Development of nonequilibrium physics and nanodevices in quantum thermoelectric effect

研究代表者

中村 浩章 (NAKAMURA HIROAKI)

核融合科学研究所・ヘリカル研究部・准教授

研究者番号：30311210

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理学・物性基礎

キーワード：ネルンスト効果、ビスマス、フォノンドラッグ、熱電効果、量子輸送現象、二次元電子系、温度勾配、金属半導体接合界面

## 1. 研究計画の概要

温度勾配を駆動力とする量子効果の系統立てた研究は、理論・実験とも未開拓である。そこで、温度勾配が引き起こす熱流による新しい量子輸送現象(量子熱電効果)を探索し、それらを系統的に記述できる非平衡理論を構築することを研究目的とした。我々の研究方針として、新奇な熱量子効果を示す物理現象を提案し、理論的に解明する。さらに提案した熱量子効果現象の実証実験を行う。具体的な量子熱電効果の現象として、磁場中接合界面の非対称ポテンシャル系、そして、相互作用がある系という以下の場合である。

- (1) 磁場中の量子熱電効果(量子ネルンスト効果)
- (2) スピン軌道相互作用系での量子熱流輸送現象

## 2. 研究の進捗状況

(1) ビスマスにおける量子ネルンスト効果の新理論の構築の成功である。我々が二次元電子系を使い予言していたネルンスト係数の理論値と、1997 年の Behnia(仏)グループによるビスマスの実験データとの間には定量的な相違があった。この相違を克服するべく、キャリアとフォノンの相互作用によるフォノンドラッグの効果を考慮してネルンスト係数を計算し、フィッティングパラメーターなしで定性的かつ定量的にも実験と一致する結果を得た。この成果に修正を行い、Physical Review B 80(2009)075313 として発表した。この論文は、Editors' Suggestion に選ばれた。

(2) 独自にネルンスト係数測定を行うための二つの実験システム開発を行い、予備計測を

行えるようになった。一つ目の実験システムは、4.2K 付近で 4 テスラまでの磁場中のビスマスのネルンスト係数の測定を行うものである。この装置では、前述の実験で不十分な物性値を得ることを目的にした。もう一つ装置では、量子ホール系の電子温度勾配下におけるネルンスト係数の測定を行えるようになった。これは、ビスマス以外での物質で、量子ネルンスト効果を新しく探し出すことを目的としたもので、量子ホール効果の実験でよく用いられる GaAs/AlGaAs 単一ヘテロ接合二次元電子系試料を用いている。ネルンスト係数およびゼーベック係数の測定が行えるようになった。

(3) GaAs/AlGaAs でのネルンスト係数の測定において、予想外の磁場依存性が観測された。これは、試料中で温度と電位が想定外の分布をしているからではないかと考えている。そこで、試料中の温度・電位分布を正確に求めるため、電流および熱流の輸送方程式の数値計算を始めた。これは、試料中での温度分布・電位分布の「歪み」を正確に求めるため、輸送方程式の計算機シミュレーションを行うものである。このシミュレーションのアルゴリズムは、試料をメッシュ状に切り、そのメッシュ点上での温度・電位を、輸送方程式から導かれる非線形ポアソン方程式を数値的に解くというものである。この際、実験状況に応じた境界での温度・電位を与えると、試料中の温度・電位分布が求められるようになっていく。この一連のシミュレーションコードを完成することができた。さらに、このシミュレーションコードを用いて、測定実験で肝となる加熱領域（電流を流してジュール

加熱による熱源部)を模した長方形のシミュレーション領域で、磁場中で電流を流した場合、局所的に周辺の部分より温度が下がる部分が生じることを発見することができた。この技法は、試料全体を含む領域に拡張することで、測定実験のネルンスト電圧の振る舞いを説明できることが期待できるものである。

(4)金属-半導体接合面で作られる非対称なポテンシャルを伝導する熱流の解析を行うための基礎研究として、接合界面を通じた集団的電荷輸送の非平衡グリーン関数による解析を行った。本研究により、従来の数値計算では扱えなかった定常状態での輸送特性を計算し、整流作用の抑制を再現するとともに、電荷分布の計算からそのメカニズムを解明した。

### 3. 現在までの達成度

#### ②おおむね順調に進展している

理論解明目的であった低温(4 K程度)かつ強磁場(~10 テスラ)でのBiのネルンスト係数を、理論解明できた。さらに、二次元電子系での電子輸送のみのネルンスト係数測定実験を行い、測定データを得ることができた。さらには、当初の予定を超え、試料中での輸送方程式の数値シミュレーションコード開発を行った。

### 4. 今後の研究の推進方策

(1)これまでの研究成果である輸送方程式のシミュレーションコードの第一版をほぼ開発が完成できるに至った。この計算コードを用いて、磁場の値や、温度勾配などを、いろいろ変えたシミュレーションを行い、系統立てて二次元電子気体の輸送現象を解明を行う。

(2)Biのマイクロワイヤー構造を皮切りに、より微細なナノワイヤー構造に加工する手法を開発した。このようなナノワイヤー構造を極低温になると、平均自由行程とナノワイヤーの直径が同程度になり、フォノンの伝搬現象が三次元のバルク構造とは定性的に異なることが期待できる。実際、測定で、各種輸送係数を測定すると、そのような現象が確認されている。しかし、この実験結果の理論説明は、未解明である。かつて、我々は本プロジェクトの成果として、Biのバルク形状における輸送特性をフォノンドラッグ効果を組み込んだ理論で、定量的に解明した実績がある。この理論を、ナノワイヤー構造に拡張し、同構造中での熱電特性の理論解明を目指す。

### 5. 代表的な研究成果

[雑誌論文] (計 42 件)

- ① H. Nakamura, N. Hatano, R. Shirasaki, N. Hirayama, K. Yonemitsu, “Quantum Oscillations of Thermoelectric Effects in a Pseudo-one-dimensional Electron Gas with a Spin-Orbit Interaction”, *Journal of Electronic Materials*, (in press) 査読あり.
- ② N. Hirayama, A. Endo, K. Fujita, Y. Hasegawa, N. Hatano, H. Nakamura, R. Shirasaki, K. Yonemitsu, “Temperature Distribution in Two-Dimensional Electron Gases under a Strong Magnetic Field”, *Journal of Electronic Materials*, (in press) 査読あり.
- ③ N. Hirayama, A. Endo, K. Fujita, Y. Hasegawa, N. Hatano, H. Nakamura, R. Shirasaki, “Temperature Distribution in Nano-Devices under a Strong Magnetic Field”, *Computer Physics Communications*, vol. 182, issue 1 (2011) pp. 90-92 査読あり.
- ④ A. Endo, N. Hatano, H. Nakamura and R. Shirasaki, “Fundamental relation between longitudinal and transverse conductivities in the quantum Hall system”, *Journal of Physics: Condensed Matter* 21 (2009) 345803-1-11 査読あり.
- ⑤ M. Matsuo, A. Endo, N. Hatano, H. Nakamura, R. Shirasaki and K. Sugihara, “Quantum Nernst effect in a bismuth single crystal”, *Physical Review B* 80 (2009) 075313-1-6 査読あり.

[学会発表] (計 50 件)

- ① N. Hirayama, “Temperature distribution in two-dimensional electron gases under a strong magnetic field”, *The 29th International Conference on Thermoelectrics (ICT2010)*, May 30 ~ June 3, 2010, Shanghai, China (P1-31).
- ② H. Nakamura, “Quantum oscillation of the Peltier effect in a pseudo-one-dimensional system with a spin-orbit interaction”, *The 29th International Conference on Thermoelectrics (ICT2010)*, May 30 ~ June 3, 2010, Shanghai, China (P1-42)

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

- 出願状況 (計 0 件)
- 取得状況 (計 0 件)

〔その他〕 特になし