

令和 6 年 5 月 17 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K05341

研究課題名（和文）ファノ効果に起因したフォノニックバンドギャップの形成メカニズムと応用

研究課題名（英文）Formation mechanism and application of phononic band gaps due to Fano effects

研究代表者

水野 誠司（Mizuno, Seiji）

北海道大学・工学研究院・講師

研究者番号：90222322

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：非ブラッグギャップが生じる系である固体液体超格子に対して、バンドギャップ中のブロッホ波数の虚部を周波数の関数として求めて解析し、この系に生じるギャップは周期性に基づくブラッグギャップとファノ共鳴に基づくギャップに分類できることを示した。さらに、後者のギャップの形成メカニズムを理論的に明らかにした。また、周期的な外力の印加された結合振動子系における共鳴プロファイルの解析的表式を導き出し、ファノパラメータを既知のパラメータの関数として表すことによって、共鳴プロファイルの制御のための基礎を与えた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

固体液体超格子における非ブラッグギャップの形成メカニズムをファノ共鳴の観点から理論的に解明することは、ファノ効果に基づくギャップとブラッグギャップの定性的違いを明確に理解するという基礎学問としての意義がある。また、ファノ共鳴に起因したギャップにおいては、系が数周期の有限でありながら、ギャップとバンドの間の急峻な境界が現れるため、この特性を利用した、高感度センサー、スイッチング素子等のデバイスへの応用へとつながる。

研究成果の概要（英文）：For solid-liquid superlattices, where non-Bragg gaps occur, we determined the imaginary part of the Bloch wave vector in the band gap as a function of frequency. We demonstrated that the gaps in this system can be classified into Bragg gaps and gaps based on Fano resonance. Furthermore, we theoretically elucidated the formation mechanism of the latter gaps. Additionally, we derived analytical expressions for the resonance profile in the mechanical system of coupled oscillators subjected to periodic external forces. Particularly, by expressing the Fano parameter as a function of known parameters, we provided a foundation for controlling the resonance profile.

研究分野：応用物理学

キーワード：フォノニック結晶 ファノ共鳴

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

(1) 「ファノ共鳴」は、その発見以来、原子、分子、量子ドット、ナノワイヤー、トンネル接合などの様々な量子系で注目され研究されてきた。ファノ共鳴の起源は、同じエネルギー準位をもつ連続状態と離散状態の干渉効果であるため、量子系に限らず種々の波動において見ることが出来る。実際、フォトニック結晶、プラズモニックナノ結晶、金属スリット超格子やフォトニックメタマテリアル等において報告がなされている。また、共鳴エネルギーの前後で透過スペクトルが最大値と最小値の間で急激に変化するため、その特性を用いたセンサーやスイッチング素子への応用が期待され、共鳴プロファイルの制御に注目が集まっている。

(2) 異なる誘電率や弾性定数を持つ物質を周期的に配列させて人工的に作られるフォトニック結晶やフォニック結晶においては、それぞれ電磁波と弾性波の人工的な周期構造によるブラッグ反射によりバンドギャップが生じる。バンドギャップ中のフォトンやフォノン結晶中に存在できないため、その特性を利用したフィルターやミラーあるいは共振器への応用がなされている。ギャップ周波数は人工的に作製した構造の周期長で定まるため、低周波領域への応用を考える際には、構造の巨大化が要求され、このメカニズムは利用できない。それを克服する波動制御の試みとして、周期構造中に微小な共振器を埋め込んだ複雑な系が提案され、局所共鳴を利用したギャップ形成の研究が行われている。

(3) 共振器を埋め込むことと原理的に同じで、さらにフォノン制御の自由度を広げる試みとして、固体と液体の周期構造からなる超格子構造が研究されている。この系のフォノンの透過スペクトルを見ると、ブラッグ反射とは異なる要因によるとみられる周波数ギャップの存在を見て取ることができる。研究代表者は、2016年の論文 (Mizuno: Jpn. J. Appl. Phys. 55 (2016) 017302) でこのギャップの形成メカニズムを提案した (図1参照)。単一固体層のみの系で見られる透過ゼロ点、周期数Nの系ではN個の透過ゼロ点に分裂して幅を持ち、ギャップを形成するというものである。

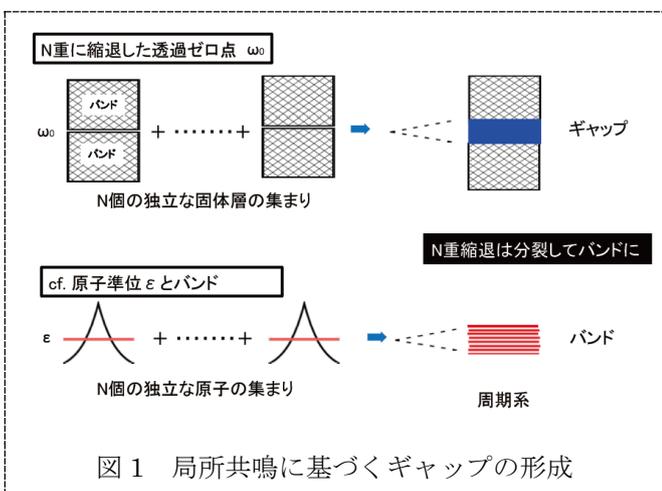


図1 局所共鳴に基づくギャップの形成

これは原子準位と固体のバンド構造の関係における強結合近似的なアプローチと同じ見方であるが、許される状態と許されない状態が入れ替わっている。研究代表者は2019年に、単一固体層のみの系で見られる透過ゼロ点はファノ共鳴による弾性波の破壊的干渉による反共鳴効果によると説明できることを明らかにしているが、周期構造におけるギャップ形成メカニズムの厳密な数学的基礎づけはまだ行われておらず、理論的に証明すべき課題として残されていた。

2. 研究の目的

(1) 本研究の目的は、固体液体超格子における非ブラッグギャップの形成メカニズムをファノ共鳴の観点から理論的に解明することである。これには「ファノ効果に基づくギャップとブラッグギャップの定性的違いを明らかにする」という基礎学問としての意義がある。

(2) また、有限系でありながら、ギャップとバンドの間の急峻な境界が現れるため、これを利用して、高感度センサー、スイッチング素子等への応用が期待できる。このメカニズムを利用したデバイスへの応用のための基礎を与えることも本研究の目的である。

3. 研究の方法

(1) 固体液体超格子中の透過スペクトルの計算とバンドギャップの分類
 まず初めに、過去にいろいろな研究グループによって実験的および理論的に研究された、Plexiglas、PVC、エポキシ樹脂、Alなどの固体層と水からなる超格子構造を対象にして、フォノン分散関係と透過スペクトルを数値的に計算する。計算手法は、これまでに発展させてきたトランスフォーマトリックスに基づく方法である。さらに、トランスフォーマトリックスの固有値から、バンドギャップ中のブロッホ波数の虚部を周波数の関数として計算する。ブロッホ波数の虚部は、有限系におけるフォノン伝播を調べる上で重要な情報を有しているが、これまで注目されてこなかった。入射角を変化させたときの透過スペクトルの計算から、ブラッグギャップとファノ共鳴に基づくギャップの入射角依存性を明らかにする。さらに、周期を増やしていった際の

バンドとギャップの間の急峻性の変化を定量的に評価する。次に、ブロッホ波数の虚部の計算結果に基づいてギャップを分類し、その違いを定性的に吟味する。

(2) 固体液体超格子の有効物質パラメータの導出

研究代表者は、ごく最近、液体中の単一固体層に見られるファノ共鳴 (図2参照) に対して、線形状を表すファノ因子の解析解の導出を行った (Applied Physics Express 12 (2019) 035504)。ファノ効果の共鳴プロファイルは(1)式で表される。ここで、 ω_m と Γ_m は、それぞれ m 番目の共鳴周波数とピークの幅である。 q_m はファノ因子と呼ばれ、プロファイルの非対称性を定量的に表すパラメータである。これまでに研究された多くの物理系において、ファノ因子は経験的なフィッティングパラメータとして取り扱われているが、申請者は、物質パラメータの関数として explicit な表式を導出した。この式から、ファノ因子および共鳴プロ

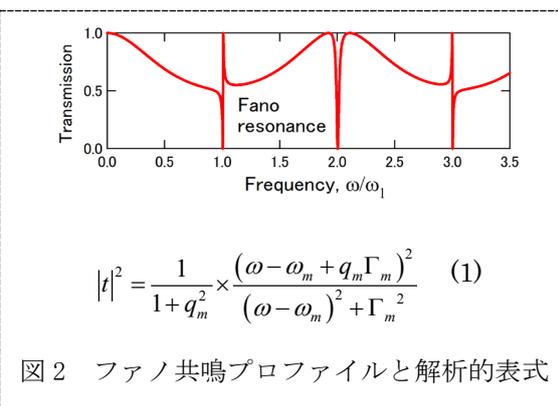


図2 ファノ共鳴プロファイルと解析的表式

ファイルの制御方法がわかる。この表式を周期的な固体液体超格子に援用するために、固体液体超格子を一様な固体媒質に対応させることによって定義される、有効密度や有効音響インピーダンス等の「有効物質パラメータ」を入射角と周波数の関数として計算する。このようなメタマテリアル的な考え方に基づいてファノギャップの形成メカニズムを解明する。

(3) 単一層に対する解析解と有効物質パラメータを用いた反共鳴ファノギャップの解析

原子準位と固体のエネルギーバンドの関係はよく知られているが、これは透過スペクトルで考えると、ローレンツ型の対称共鳴ピークが集まって透過バンドを形成することに対応している。本研究では、非対称なファノ反共鳴ピーク (ディップ) が集合した場合のギャップを考察することになり、ブラッグギャップとは全く異なる特徴を持つこととなる。従って、まずファノギャップの形成メカニズムの解明を理論的に行う。その際、②の有効物質パラメータを用いたメタマテリアル的な考え方に基づく理論を構築することを目指す。

4. 研究成果

(1) 固体液体超格子に生じる周波数ギャップの分類

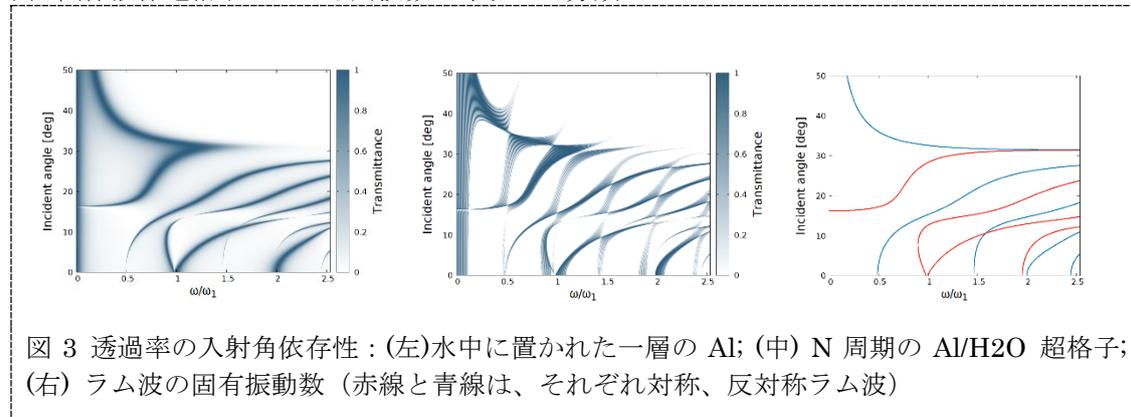


図3 透過率の入射角依存性：(左)水中に置かれた一層の Al; (中) N 周期の Al/H₂O 超格子; (右) ラム波の固有振動数 (赤線と青線は、それぞれ対称、反対称ラム波)

A1 固体層と水の液体層およびエポキシ樹脂固体層と水の液体層からなる超格子構造に対して、フォノン分散関係と透過スペクトルの数値計算を行った。特に、転送行列の固有値から、バンドギャップ中のブロッホ波数の虚部を周波数の関数として計算した。ブロッホ波数の虚部は、有限系におけるフォノン伝播を調べる上で重要な情報を有しているが、これまであまり注目されてこなかった。

これらの計算により、フォニックバンドギャップは、周期性に基づくブラッグギャップと局所共鳴に基づくギャップに分類できることが数値的に明らかとなった。この系においては、固体層に閉じ込められた横波フォノンと、系全体に広がった縦波フォノンとの相互作用により、局所共鳴に基づいたギャップが生じる。この局所共鳴ギャップ中のある周波数で、ブロッホ波数の実部はブリルアン域の端から中心に (あるいは中心から端に) 不連続に変化し、虚部は発散することを示した。

一方、バンド内では、透過率に周期数に等しい数だけの完全透過のピークが生じる (図3)。これは、液体中に置かれた固体層に生じるラム波モードに対応していることが明らかになった。各固体層に生じるラム波モードが液体層を介して相互作用することにより、固有振動数が層の数だけ分裂し、バンドを生じる。有限周期の系では、共鳴ピークが幅を持つため、それらが重なり

合って透過バンドを生じている。また、入射角を変化させたときの透過スペクトルの計算から、ブラッグギャップと局所共鳴ギャップの入射角依存性を明らかにした。

(2) 非ブラッグギャップをファノ共鳴に基づいて理解するための基礎研究

先述したように、ファノ共鳴はファノ式と呼ばれる共鳴式で記述され、共鳴周波数、共鳴幅および非対称性を表すファノパラメータ q を用いて表される。しかしながら、最も簡単な結合調和振動子系においてさえ、これらの値は、系を規定する既知のパラメータ（質量、ばね定数など）の関数として明示的に求められてはいなかった。今回の研究において、周期的な外力の印加された結合振動子の力学系における共鳴プロファイルの解析的表式を導出することができ、その結果に基づいて、下記のような知見を得ることができた。

共振器として機能する振動子の振幅は、ローレンツ関数で表される対称的な線形状を示すが、外力が印加された振動子の振幅は、ファノ式で表される非対称的な線形状を示す(図4)。ただし、 q は一般には複素数となる。共振器に摩擦が作用しない場合あるいは実質的に摩擦が無視できるほど小さい場合のみ、外力が加えられた振動子の共鳴振幅は実数の q をもつ Fano 式で記述できる。摩擦が作用し、 q が複素数となる場合、共鳴線が同じ共鳴周波数と幅のローレンツ共鳴とファノ共鳴（実数 q ）の和で表される。その結果、共鳴線の最小値はゼロにならない。言い換えると、ディップの有限な値は、共振器に作用する摩擦の強さを表している。また、外力が作用する振動子に作用する摩擦がかなり小さいとき、共振振幅はローレンツ共振の形で表される。

(3) 固体液体超格子のメタマテリアルとしての有効パラメータ

(2)で得られた結果を周期的な固体液体超格子に援用するために、固体液体超格子を一般的な固体媒質に対応させ、一種のメタマテリアルと見なすアプローチを行った。その際、固体液体超格子の特性は、有効密度や有効音響インピーダンス等の「有効物質パラメータ」で記述される。これらの有効パラメータの導出方法として、本研究では、先行研究で提案された方法のいくつかの問題点を解決する新しい方法を考えた。

まず、固体固体超格子に対して定義される転送行列と、一般的な媒質（メタマテリアル）に対して定義される転送行列の行列要素を対応させることによって、有効波数を導出した。有効波数は、周波数の多価関数として複素数で表される。この波数を、低周波の極限から高周波に向けて連続的につながるように、いわば拡張ゾーン形式で一価関数として表した。その結果を用いて、有効速度（あるいは有効屈折率）の表式を導出した。さらに転送行列の別の行列要素の対応から、有効音響インピーダンスの表式を導出できることを示した。有効音響インピーダンスと有効速度の表式から、有効質量密度の表式も導出できる。ここで開発した動的有効パラメータの導出方法の有用性を検証するために、GaAs と AlAs からなる固体固体超格子に適用し(図5)、結果の再現性の確認を行い、さらに動的有効パラメータそのものもつ意味を明らかにした。

(4) 局所共鳴によるギャップの形成メカニズムの本質をなるべく簡単なモデルを用いて理解することを試みた。1次元単原子鎖の構成原子の一つに側鎖を接続しその透過スペクトルの計算を解

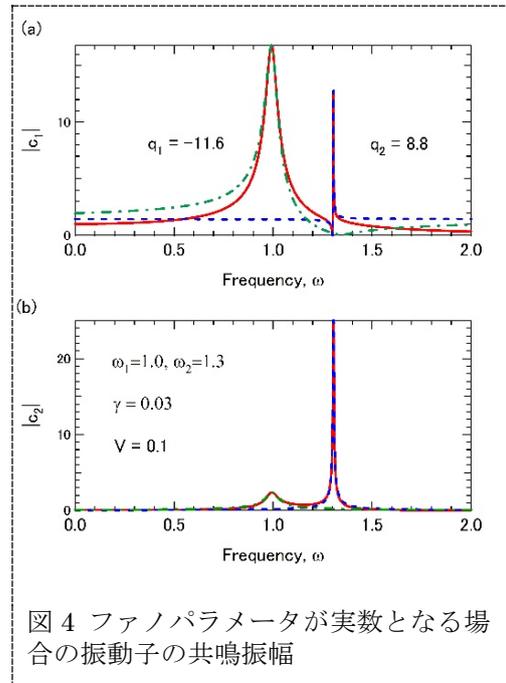


図4 ファノパラメータが実数となる場合の振動子の共鳴振幅

は実質的に摩擦が無視できるほど小さい場合のみ、外力が加えられた振動子の共鳴振幅は実数の q をもつ Fano 式で記述できる。摩擦が作用し、 q が複素数となる場合、共鳴線が同じ共鳴周波数と幅のローレンツ共鳴とファノ共鳴（実数 q ）の和で表される。その結果、共鳴線の最小値はゼロにならない。言い換えると、ディップの有限な値は、共振器に作用する摩擦の強さを表している。また、外力が作用する振動子に作用する摩擦がかなり小さいとき、共振振幅はローレンツ共振の形で表される。

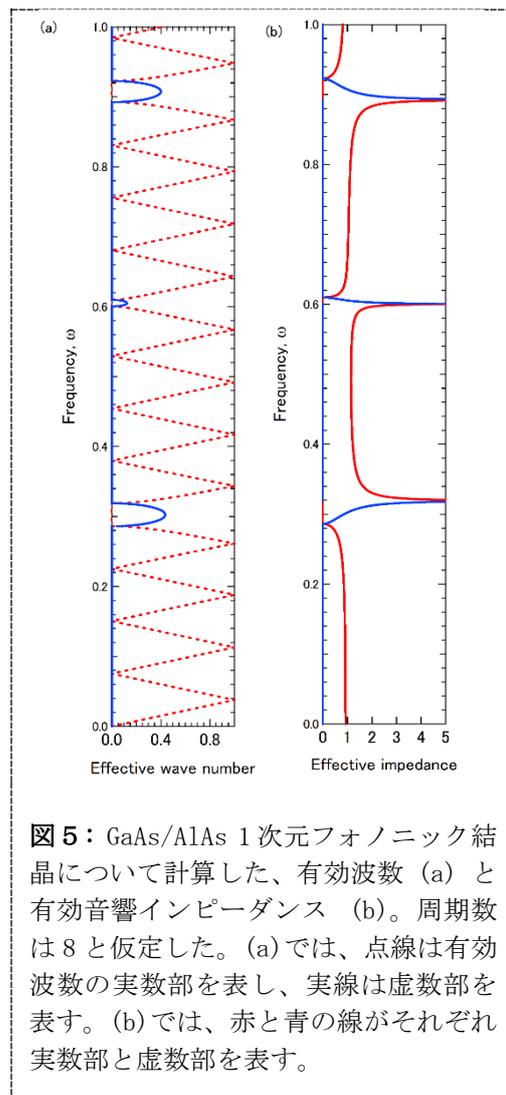


図5: GaAs/AlAs 1次元フォニック結晶について計算した、有効波数 (a) と有効音響インピーダンス (b)。周期数は8と仮定した。(a)では、点線は有効波数の実数部を表し、実線は虚数部を表す。(b)では、赤と青の線がそれぞれ実数部と虚数部を表す。

析的に行った。その結果、側鎖の固有振動数に対応する振動数において局所共鳴に起因した完全反射が生じ、透過率が厳密に0となることが示された。さらに、側鎖に含まれる原子の質量あるいはばね定数、その個数を変化させることで固有振動数を制御できることを具体的な数値計算例とともに示した。次に、1次元単原子鎖の構成原子の全てに側鎖を結合させることにより、新たなバンドギャップが生じることが示された。1次元鎖と側鎖の間の結合を切ると、側鎖の振動モードは独立なN個の振動子が振動するアインシュタインフォノンとなり、フラットバンドを形成する。このフラットバンドと1次元鎖の分散曲線が交差する振動数でバンド間の反発が生じ、その結果としてバンドギャップが生じる。このようなメカニズムで非ブラッグギャップが生じることがわかった。また、固体・液体超格子におけるフォノン変位の従う方程式は、この1次元モデルにマッピングできるので、以上の研究により本質的な理解は得られたと思われる。さらに、両者の間のパラメータの関係をより詳細に調べることは、デバイスへの応用に対して有益である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Seiji Mizuno	4. 巻 43
2. 論文標題 Resonance profiles and complex Fano parameters in weakly coupled oscillator systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proc. Symp. on Ultrason. Electron.	6. 最初と最後の頁 2Pb1-3/1-2
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 水野誠司	4. 巻 35
2. 論文標題 シンプルな調和振動子系に生じるファノ共鳴の 実数および複素数ファノパラメータ	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 超音波テクノ	6. 最初と最後の頁 87-92
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
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 水野誠司	4. 巻 33
2. 論文標題 流体中の固体層を透過する弾性波のローレンツ共鳴とファノ共鳴	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 超音波テクノ	6. 最初と最後の頁 29-34
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
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 Seiji Mizuno	4. 巻 61
2. 論文標題 Analytical expressions for real and complex Fano parameters in a simple classical harmonic oscillator system	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SG1010/1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/ac4448	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 Seiji Mizuno	4. 巻 42
2. 論文標題 Real and complex asymmetric parameters of Fano resonance in a simple classical harmonic oscillator system	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proc. Symp. on Ultrason. Electron.	6. 最初と最後の頁 2Pa1-5/1-2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yohei Takahashi and Seiji Mizuno	4. 巻 41
2. 論文標題 Acoustic waves propagating through a solid-fluid superlattice by resonance with Lamb wave modes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceeding of Symposium on Ultrasonic Electronics	6. 最初と最後の頁 2Pb1-4/1-2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mizuno Seiji	4. 巻 59
2. 論文標題 Symmetric and asymmetric spectra of acoustic waves resonantly transmitted through a slab in a fluid	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SKKA02 ~ SKKA02
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 Yuki Inoue and Seiji Mizuno	4. 巻 44
2. 論文標題 A method for deriving the effective acoustic impedance of one-dimensional phononic materials	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proc. Symp. Ultrasonic Electronics	6. 最初と最後の頁 3P1-6/1-2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 水野誠司
2. 発表標題 弱く結合した調和振動子系における複素数ファノパラメーターと共鳴プロファイル
3. 学会等名 第43回超音波エレクトロニクスの基礎と応用に関するシンポジウム（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 水野誠司
2. 発表標題 古典的調和振動子系に生じるファノ共鳴の 実数および複素数の非対称パラメータ
3. 学会等名 第42回超音波エレクトロニクスの基礎と応用に関するシンポジウム（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋洋平、水野誠司
2. 発表標題 ラム波モード共鳴との共鳴により固体液体超格子を透過する音響波
3. 学会等名 第41回超音波エレクトロニクスの基礎と応用に関するシンポジウム（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 井上 祐樹、水野 誠司
2. 発表標題 1次元音響メタマテリアルにおける有効パラメーターの導出
3. 学会等名 第 44 回超音波エレクトロニクスの基礎と応用に関するシンポジウム（国際学会）（国際学会）
4. 発表年 2023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
---------	---------