

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 5 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2009～2012

課題番号：21560002

研究課題名（和文）ワイヤー型フォノンニック結晶における振動モードとフォノンダイナミクス

研究課題名（英文）Vibrational modes and phonon dynamics in wire-type phononic crystals

研究代表者

水野 誠司（MIZUNO SEIJI）

北海道大学・大学院工学研究院・講師

研究者番号：90222322

研究成果の概要（和文）：ワイヤー型フォノンニック結晶、すなわち周期構造を持つナノワイヤー超格子の振動モードの解析を、変分法に基づく xyz アルゴリズムを用いて行った。ワイヤー断面の形状と振動モードの関係を群論に基づいて整理し、各振動モードに対する分散関係およびフォノン変位を計算した。円形断面を持つ GaN/AlN ナノワイヤー超格子において、全ての振動モードが存在しない完全フォノンニックギャップが出現するパラメータを見いだした。

研究成果の概要（英文）：We studied vibrational modes in wire-type phononic crystals, i.e., nanowire superlattices, based on the xyz algorithm. We numerically calculated the phonon dispersion relations and corresponding displacement fields for several nanowire superlattices consisting of anisotropic materials. For a circular cross-section GaN/AlN nanowire superlattice, we determined a set of parameters which gives complete phononic bandgaps.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,900,000	570,000	2,470,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
2012年度	500,000	150,000	650,000
年度			
総計	3,600,000	1,080,000	4,680,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎 応用物性・結晶工学

キーワード：フォノンニック結晶、量子細線、フォノン

## 1. 研究開始当初の背景

（1）フォノンニック結晶とは、おもにバルクな結晶に周期的に異なる物質を埋め込むことによって人工的に作った周期構造のことである。周期構造を変化させることで、周波数ギャップそしてフォノン伝播を制御しようというものである。その新たな候補の1つがナノワイヤー超格子である。ナノワイヤ

ー超格子とは、異なる2種類の物質を軸方向に交互に繰り返して作製されるワイヤー状の人工物質で、2002年に北欧のグループにより初めて合成されたものである[Gudikson et al.: Nature (London) 415 (2002) 617]。これは、1本のナノワイヤー内に異なる物質を混在させることができることを示したものであり、デバイスをナノワイヤー自体に組み込ん

で電子回路をさらに小型化することへの道を開くものでもあった。

その後、電子状態や光物性などの基礎的な研究から電子デバイスへの応用を目指した研究まで幅広い研究が行われており、ナノエレクトロニクス、ナノフォトニクスへの広範な応用が期待されている。実際に、ナノワイヤー超格子を用いた単電子トランジスタや共鳴トンネルダイオードなどが作成され、その特性が調べられている[Thelander et al.: Appl. Phys. Lett. 83 (2003) 2052]。一方、日本でも、GaN と AlN からなるナノワイヤー超格子が作成され、発光ダイオードとしての特性が調べられていた [Kikuchi et al: Jpn. J. Appl. Phys. 43 (2004) L1524]。

(2) このような状況の中で、フォノン（格子振動）に関する研究は、ほとんど行われていなかった。2005 年に、水野によって、ねじれ振動モードのフォノン分散関係が解析的に導出され、通常の超格子（周期多層膜）とも、一樣なナノワイヤーとも異なる特徴をもつことが示された[Mizuno: Phys. Rev. B 71 (2005) 085303]。ただし、この結果は、等方的な媒質からなるナノワイヤー超格子において、軸周りにねじれながら振動するモードに対する解析であった。他の振動モードに対しては、数学的な困難が伴い、解析解の導出が行われていなかった。

## 2. 研究の目的

(1) 本研究の目的は、新しい計算手法を用いて、ワイヤー型フォノン結晶、すなわちナノワイヤー超格子に生じる全ての振動モードのフォノン分散関係を計算し、各々の特徴を調べ、フォノン物性の基礎を明らかにすることである。

(2) また、最近特に興味を持たれている中空構造を持ったナノワイヤー（ナノチューブ）にも注目し、振動モードを解析して、中空構造が振動モードに及ぼす影響を明らかにする。

(3) 液体と固体からなる 1 次元フォノン結晶も研究の対象とし、その系に特有な特徴を明らかにする。

## 3. 研究の方法

(1) 振動モードは、一般にワイヤーの断面の形状に応じて変化する。そこで、まず初めに、ワイヤー断面の形状と振動モードの関係を、群論を用いて明らかにする。ただし、ワイヤーの構成物質としては、立方晶と六方晶を取り上げ、断面形状としては、矩形、正方形、円形、六角形を用いる。

(2) 各々の系において振動モードの分類を行い、正しい対称性を持った変位ベクトルとしてどのような関数が許されるかを調べる。

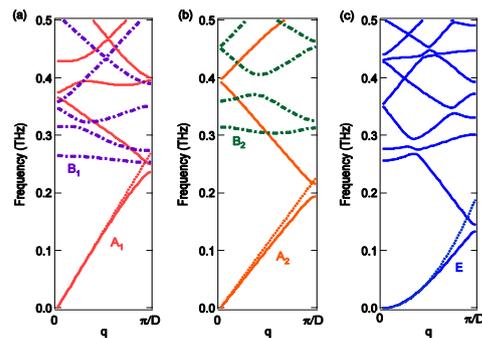
(3) 分散関係を計算し振動モードを解析するために、xyz アルゴリズムと呼ばれる変分

法に基づく数値計算法を用いる。その際、正しい対称性を持った変位ベクトルを基底関数として使い、モードごとに計算を行う。

(4) 固体と液体からなる 1 次元フォノン結晶の振動モードを解析するための定式化を行う。液体層に対してはオイラーの方程式に基づいて速度場と応力場を計算し、固体層内に対しては弾性体の方程式を解く。転送行列法の応用により、分散関係を計算する。

## 4. 研究成果

(1) 立方晶の物質からなり、任意の断面形状を持つナノワイヤー超格子の分散関係を計算するプログラムを開発した。そして、最初の数値例として、閃亜鉛構造をもつ GaAs と AlAs からなるワイヤー型フォノン結晶を取り上げ、計算を行った。加えて、電子的、光学的性質が研究され、デバイスとしての特性が知られている InAs/InP ナノワイヤー超格子に対しても計算を行った。断面形状は、結晶自体の対称性を反映させた正方形に選んで計算を行ったが、これは理論的な取り扱いが簡単になるためである。



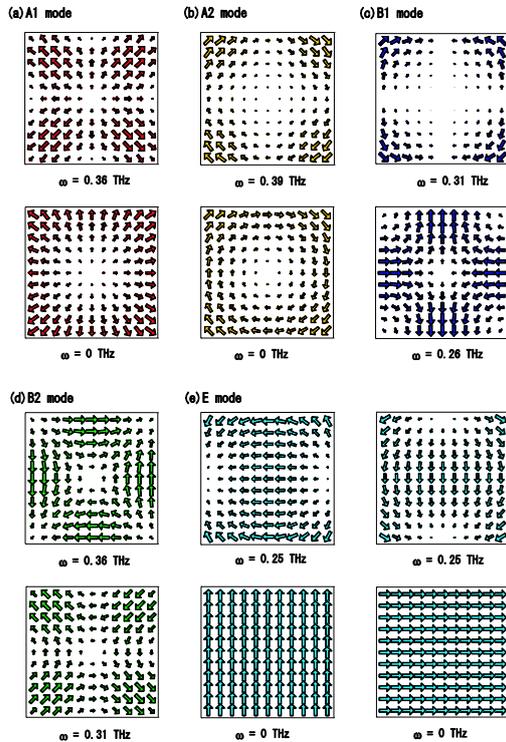
**Fig.1** Phonon dispersion relations of the square cross-section NWSL consisting of GaAs and AlAs. In (c), all dispersion curves are doubly degenerated.

正方形断面の場合の  $k$  群 ( $0 < |k| < \pi/D$ ) は、 $C_{4v}$  であり、規約表現  $A_1, A_2, B_1, B_2, E$  に対応する 5 つの振動モードが現れる。ここでは、GaAs/AlAs ナノワイヤー超格子の分散関係のみを示す (Fig. 1)。

分散関係の大まかな構造は、バンドの折り返しにより説明できる。まず、周期構造を持たないナノワイヤーにおいては、ワイヤー軸方向の波数と振動数の関係を表す分散関係が、半径方向のフォノンの閉じこめ効果により離散化される。ナノワイヤー超格子においては各々の分散曲線は、軸方向の周期性によりミニブリルアン域に折り返され、そのミニブリルアン域の中心と境界において周波数ギャップが生じる。

一番周波数の低い  $A_1, A_2$  モードはブリルアン域の中心から、波数に比例して立ち上がるのに対して、 $E$  モードは波数の 2 乗に比例して立ち上がる。これは、梁のたわみモードに

見られる特徴である。なお、Eモードは全て2重に縮退している。B<sub>1</sub>、B<sub>2</sub>モードは、有限の周波数から立ち上がっており、これらのモードを励起するためには高いエネルギーが必要である。

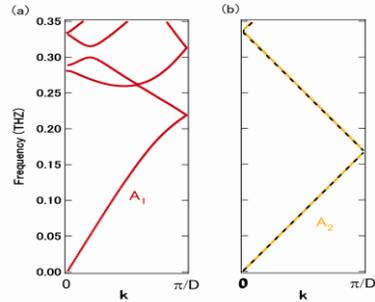


**Fig.2** Displacement pattern corresponding to the lowest and second dispersion curves at  $q=0$ .

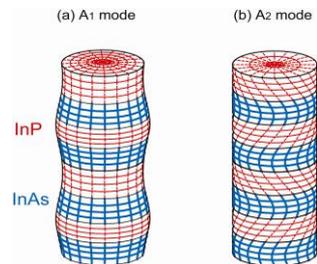
Fig. 2 には、ブリルアン域の中心における下から2つの振動モードの変位パターンを示してある。これらの図から、A<sub>1</sub>、A<sub>2</sub>、B<sub>1</sub>、B<sub>2</sub>、Eモードは、それぞれ、dilatational, torsional, stretching, shear, flexural modes の特徴を持つことが明確に見てとれる。

(2) 次に円形断面を持つ InAs/InP ナノワイヤー超格子の振動モードを解析した。これは、実際に作成されている InAs/InP ナノワイヤー超格子の断面が円形であることによる。円形断面の場合、結晶の異方性を無視すると、torsional mode に対する厳密解を得ることができる [Mizuno: Phys. Rev. B **71** (2005) 085303]。従って、本研究で開発した計算手法の妥当性を確かめることも目的として、等方近似を用いた計算を行った。この場合の  $k$  群は、 $C_{\infty v}$  であり、その規約表現は、A<sub>1</sub>、A<sub>2</sub>、E<sub>n</sub> ( $n=1, 2, \dots$ ) である。E<sub>n</sub> モードは、全てが2重に縮退している。Fig.3 に A<sub>1</sub>、A<sub>2</sub> モードの分散関係を示す。対応する変位パターンを Fig.4 に示すが、A<sub>1</sub>、A<sub>2</sub> モードは、それぞれ dilatational mode と torsional mode である。Fig.3(b)における点線は、A<sub>2</sub> モード (torsional modes) に対する厳密解をプロットしたものである。厳密解と、数値計算による結果との

一致は、かなり良いことがわかる。また、群論的考察により適合関係を調べると、これらのモードは、 $C_{4v}$  における A<sub>1</sub>、A<sub>2</sub> モードに対応することがわかる。

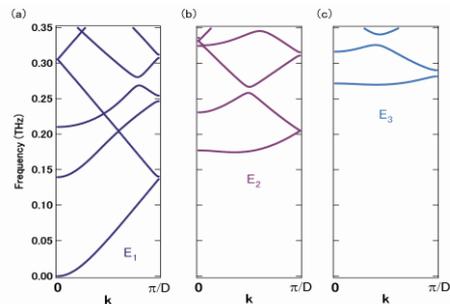


**Fig. 3** Phonon dispersion relations of the circular cross-section InAs/ InP NWSL.



**Fig. 4** Displacement field patterns in InAs/InP NWSL: the lowest A<sub>1</sub> and A<sub>2</sub> modes at  $q=\pi/D$ .

Fig.5 に E<sub>n</sub> モード ( $n=1, 2, 3$ ) の分散関係を示す。これらの分散曲線は全て2重に縮退している。E<sub>1</sub> モードのみ周波数0から値を持ち、波数の2乗に比例して立ち上がっている。対応する変位パターンを Fig.6 に示す。適合関係を調べると、これらのモードは、 $n$  が奇数の時には、 $C_{4v}$  における E モードに対応し、 $n$  が偶数の時には、 $C_{4v}$  における B<sub>1</sub>+B<sub>2</sub> モードに対応することがわかる。すなわち、 $n$  が奇数の時には、flexural mode に対応し、 $n$  が偶数の時には、stretching mode と shear, mode に対応することがわかる。



**Fig. 5** Phonon dispersion relations of the circular cross-section NWSL consisting of InAs and InP.

なお、InAs/InP 超格子に見られる周波数ギャップは非常に狭い。これは、InAs と InP の音響ミスマッチが非常に小さいからであ

る。フォノン結晶としてフォノン光学デバイスへの応用を考える際には、なるべく大きな音響ミスマッチを持つ系を利用するのが望ましい。

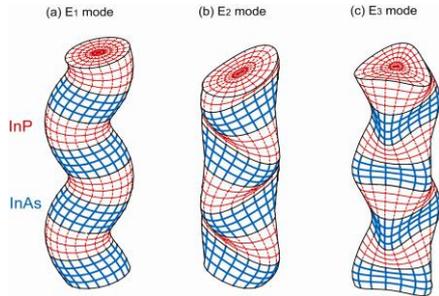


Fig. 6 Displacement field patterns in a InAs/InP NWSL: the lowest  $E_1$ ,  $E_2$ , and  $E_3$  modes at  $q=\pi/D$ .

(3) 大きな音響ミスマッチを持つ系として、GaN/AlNナノワイヤー超格子を取り上げ、その振動モードの計算を行った。GaNとAlNは、閃亜鉛構造またはウルツ鉱構造をとることが知られている。ここでは、まず始めに、(2)の結果と比較するため、立方晶（すなわち閃亜鉛構造）であると仮定し、断面形状を円とした。そして、ワイヤー半径と周期長の比、および、層厚比をうまく選ぶと、すべての振動モードが存在しない領域、すなわち完全ギャップが出現することが示された。言い換えると、完全ギャップが実現されるようなパラメータの組を決定した。その分散関係をFig.7に示す。仮定した構造が立方晶なので、 $B_1$ 、 $B_2$ モードも存在しているが、これらは有限の周波数から立ち上がるモードなので、ワイヤー半径を小さくすることで高周波数領域にシフトさせてある。

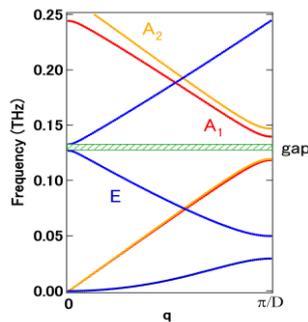


Fig. 7 Phonon dispersion relations of the circular cross-section GaN/AlN NWSL.

(4) 近年作成されているIII族窒化物ナノワイヤーの多くはウルツ鉱構造で、六角形の断面形状をとるものが多い。そこで、構成物質の構造異方性の効果を明らかにするため、等方性近似を適用してみたところ、ギャップが消失した。このことは、バンドギャップエンジニアリングを行う際に、結晶の異方性を十分考慮する必要があることを示している。そこで、ウルツ鉱構造をとり六角形の断面をも

つGaNナノワイヤーの振動モードを解析して、結晶の異方性の効果を議論した。この結果は、周期的な構造を持たないナノワイヤーに対する計算であり、ナノワイヤー超格子の解析は、今後の課題である。

(5) 近年、中空のナノワイヤーが作成され、盛んに研究が行われている。本研究においても、六角形断面のチューブ状Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>ナノワイヤーの振動モード解析を行い、穴を開けたことによる効果を振動モードごとに解析し、その特徴をまとめた。特に、 $A_1$ モードと $E_2$ モードが穴の大きさに敏感で、チューブの厚さを薄くしていくと、それらのモードの固有振動数は大きく低周波数側にシフトしてくることが明らかとなった。ごく最近、中空構造を持つナノワイヤー超格子が作成されているが、その系の振動モードの解析は今後の課題である。

(6) 新たなフォノン結晶として提案されている、固体と液体からなる1次元フォノン結晶を取り上げ、分散関係と透過スペクトルの計算を行った。さらに解析的手法を用いて、この系に特有な共鳴現象の解析を行った。この系においては、よく知られている周期多層構造によるフォノンのブラッグ反射に起因した周波数ギャップに加えて、ブラッグ反射に関係のない周波数ギャップが現れることがわかった。固体液体界面でのモード変換を伴う多重反射の際、横波成分は固体層に完全に閉じ込められる。その閉じ込めモードと入射フォノンとが共鳴相互作用することにより、透過波が完全に打ち消される周波数帯があらわれる。この周波数帯が、この系に特有なギャップである。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 18 件)

- ① Seiji Mizuno: “Acoustic phonon modes and phononic bandgaps in GaN/AlN nanowire superlattices”, *Nanoscale Research Letters*, 7 (2012) 479/1-5. 査読有, doi:10.1186/1556-276X-7-479
- ② Yukihiro Tanaka, Takahiro Murai and Norihiko Nishiguchi: “Rectification of elastic waves in a thin plate”, *J. Appl. Phys.* 111 (2012) 024507/1-7. 査読有 doi: 10.1063/1.3677997
- ③ K. Toda, Yukihiro Tanaka and Norihiko Nishiguchi: “Temperature dependence of thermal conductivity in quantum wires due to interaction between twolevel systems and phonons”, *Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics*, 33 (2012) 301-302. 査読無
- ④ K. Kono, Yukihiro Tanaka and Norihiko

- Nishiguchi: "Rectification of elastic waves in nanowires", Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics, 33 (2012) 417-418. 査読無
- ⑤ Seiji Mizuno: "Phonon Modes in Wire-type Phononic Crystals Composed of Isotropic Materials with Circular Cross-sections", C. J. Phys., 49 (2011) 84-91. 査読有
- ⑥ N. Nishiguchi and M. N. Wybourne, "Phonon Effects on Electric and Thermal Properties in a Single Electron Transistor", C. J. Phys., 49 (2011) 221-230. 査読有
- ⑦ Seiji Mizuno: "Mode Conversion of Phonons and Resonance Gap in Solid-Liquid Superlattices", Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics, 32 (2011) 55-56. 査読無
- ⑧ Yukihiro Tanaka and Yoshiki Iida: "Propagation of surface acoustic waves in a two-dimensional phononic-crystal layer", Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics, 32 (2011) 323-324. 査読無
- ⑨ S. Danworaphong, T. A. Kelf, O. Matsuda, M. Tomoda, Y. Tanaka, and N. Nishiguchi: "Real-time imaging of acoustic rectification", Appl. Phys. Lett. 99 (2011) 201910/1-3. 査読有 doi: 10.1063/1.3662930
- ⑩ T. A. Kelf, Y. Tanaka, O. Matsuda, E.M. Larsson, D.S. Sutherland, and O. B. Wright: "Ultrafast vibrations of gold nanorings", Nano Letters 11 (2011) 3893-3898. 査読有
- ⑪ Seiji Mizuno and Yushi Nakamura: "Vibrational modes in a square cross-section InAs/InP nanowire superlattice", Physica Status Solidi (c), 7 (2010) 370-373. 査読有
- ⑫ Seiji Mizuno: "Eigenfrequency and decay factor of the localized torsional phonon in a nanowire superlattice with a defect layer", Physica Status Solidi (c) 7 (2010) 366-369. 査読有
- ⑬ Norihiko Nishiguchi and M. N. Wybourne: "Effects of breathing and oblong mode phonons on transport properties in a single-electron transistor", Journal of Physics: Condensed Matter 22 (2010) 065301/1-12. 査読有
- ⑭ Seiji Mizuno: "Phonon dispersion relations of GaN/AlN nanowire superlattices with circular cross-sections", Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics 31 (2010) 469-470. 査読無
- ⑮ T. Nakayama and Seiji Mizuno: "Phonon propagation in solid-liquid superlattices", Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics 31 (2010) 465-466. 査読無
- ⑯ T. Murai and Y. Tanaka and N. Nishiguchi: "Effects of elastic anisotropy on acoustic-wave rectification", Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics 31 (2010) 467-468. 査読無
- ⑰ Seiji Mizuno and Norihiko Nishiguchi: "Acoustic phonon modes and dispersion relations of nanowire superlattices", Journal of Physics: Condensed Matter 21 (2009) 195303/1-11. 査読有
- ⑱ Yushi Nakamura and Seiji Mizuno: "Vibrational modes in wire-type phononic crystals with square and circular cross-sections", Proceedings of Symposium on Ultrasonic Electronics, 30 (2009) 471-472. 査読無
- [学会発表] (計 20 件)
- ① 河野大地, 田中之博, 西口規彦: 「矩形断面ワイヤーを用いた音響波の整流器」、第 60 回応用物理学会春期学術講演会、神奈川県工科大学、厚木市、2013 年 3 月 27 日～30 日
- ② N. Nishiguchi, T. Saito and T. Ohnuki: "pH dependence of REEs bio-mineralization using *Saccharomyces cerevisiae*", REIMEI work shop, U. Birmingham, UK, 2013 年 2 月 18 日～19 日
- ③ K. Toda, Yukihiro Tanaka and Norihiko Nishiguchi: "Temperature dependence of thermal conductivity in quantum wires due to interaction between two-level systems and phonons", 第 33 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、千葉大学、千葉市、2012 年 11 月 13 日～15 日
- ④ K. Kono, Yukihiro Tanaka and Norihiko Nishiguchi: "Rectification of elastic waves in nanowires", 第 33 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、千葉大学、千葉市、2012 年 11 月 13 日～15 日
- ⑤ Seiji Mizuno: "Acoustic phonon modes and phononic bandgaps in GaN/AlN nanowire superlattices", International Conference on Superlattices, Nano-structures, and Nanodevices (ICSNN 2012), Dresden, Germany, 22-27 July 2012.
- ⑥ 大柏宣栄, 田中之博, 「基板に取付けられた 2 次元フォノンニック結晶層における表面および界面弾性波」日本物理学会第 67

- 回年次大会、関西学院大学 西宮市、2012年3月24日
- ⑦ Norihiko Nishiguchi: “Model study of nano-precipitates formation on cell surfacer”, The 4th ASRC International Workshop, JAEA, Tokai-mura, 2012年3月12日
- ⑧ N. Nishiguchi, M. N. Wybourne: “Effects of Island Vibrations on Transport Properties in a Single Electron Transistor”, The 2nd Chungbuk National Univ. – Hokkaido Univ. Joint Symposium on Fusing Engineering, Chungbuk Nat'l Univ., Korea, 2011年12月16日
- ⑨ S. Mizuno: “Mode Conversion of Phonons and Resonance Gap in Solid-Liquid Superlattices”, 第32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. 京都大学, 京都市, 2011年11月8日~10日
- ⑩ Y. Tanaka and Y. Iida: “Propagation of surface acoustic waves in a two-dimensional phononic-crystal layer”, 第32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”, 京都大学, 京都市, 2011年11月8日~10日
- ⑪ T. Nakayama and Seiji Mizuno: Phonon propagation in solid-liquid superlattices”, 第31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, 明治大学, 東京, 2010年12月6日~8日
- ⑫ T. Murai, Y. Tanaka and N. Nishiguchi: “Effects of elastic anisotropy on acoustic-wave rectification”, 第31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, 明治大学, 東京, 2010年12月6日~8日
- ⑬ Seiji Mizuno: “Phonon dispersion relations of GaN/AlN nanowire superlattices with circular cross-sections”, 第31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, 明治大学, 東京, 2010年12月6日~8日
- ⑭ S. Mizuno: “Phonon modes in wire-type phononic crystals”, 13th International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 19-23 April 2010.
- ⑮ N. Nishiguchi and M. N. Wybourne: “Phonon effects on transport and thermal properties in a single electron transistor”, 13th International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 19-23 April 2010.
- ⑯ Y. Tanaka: “Rectification of surface acoustic waves”, 13th International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 19-23 April 2010.
- ⑰ T. Murai and Y. Tanaka: “Rectification of Lamb waves” 13th International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter, National Taiwan University, Taipei, Taiwan, 19-23 April 2010.
- ⑱ Yushi Nakamura and Seiji Mizuno: “Vibrational modes in wire-type phononic crystals with square and circular cross-sections”, 第30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, 同志社大学, 京都市, 2009年11月18日~20日
- ⑲ Seiji Mizuno and Yushi Nakamura: “Vibrational modes in a square cross-section InAs/InP nanowire superlattice”, 12th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces, Weimar, Germany, 5-10 July 2009.
- ⑳ Seiji Mizuno: “Eigenfrequency and decay factor of the localized torsional phonon in a nanowire superlattice with a defect layer”, 12th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces, Weimar, Germany, 5-10 July 2009.

[図書] (計2件)

- ① Y. Tanaka, T. Murai and N. Nishiguchi: “Rectifying Acoustic Waves” in “Acoustic Waves”, Sciyo books (2010), 47-56.
- ② Yukihiro Tanaka: “IUTAM Symposium on Recent Advances of Acoustic Waves in Solids”, IUTAM, 193-200 (2010)

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

水野 誠司 (MIZUNO SEIJI)  
北海道大学・大学院工学研究院・講師  
研究者番号：90222322

### (2)研究分担者

西口 規彦 (NISHIGUCHI NORIHIKO)  
北海道大学・大学院工学研究院・教授  
研究者番号：40175518  
田中 之博 (TANAKA YUKIHIRO)  
北海道大学・大学院工学研究院・助教  
研究者番号：00281791