

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 5 日現在

機関番号：32612

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400404

研究課題名(和文)熱電効果と熱現象の統計力学

研究課題名(英文)Statistical physics on thermoelectricity and thermodynamic phenomena

研究代表者

齊藤 圭司 (Saito, Keiji)

慶應義塾大学・理工学部(矢上)・准教授

研究者番号：90312983

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：熱電現象とは、電子を流すことができる導体を異なる温度の熱浴でつないで熱が流れた時、同時に電流が流れる現象のことです。熱が電流に変換されその電流が外界に仕事をすることができるので、熱電変換は典型的な熱機関と見做すことができます。本研究では、熱電変換を含む幅広い熱機関で通用する、効率と仕事率に関する議論を行いました。磁場が起因して起こるネルンスト効果や、コロイド粒子を操作して実現する微小な熱機関なども考察して、効率と仕事率の間に成立する普遍的なトレードオフ関係式を導出しました。

研究成果の概要(英文)：Thermoelectric phenomenon is a phenomenon in which current flows simultaneously when heat flows by connecting conductors that allow electrons to flow through a thermal bath of different temperature. Thermoelectric conversion can be regarded as a typical heat engine because heat is converted to current and its current can work in the outside world. In this research, we discussed the thermodynamic efficiency and the power that are applicable to a wide range of heat engine including thermoelectric conversion. Considering the Nernst effect caused by the magnetic field and a small heat engine realized by manipulating colloidal particles, we derived a universal trade-off relation between efficiency and power.

研究分野：非平衡統計物理学

キーワード：非平衡熱力学 熱電機関 熱機関

1. 研究開始当初の背景

熱電現象は、古くから知られている物理現象ですが、省エネルギー社会を掲げる昨今の風潮から、社会的にも関心が高まりつつあります。そのため、純粋物理学だけでなく、応用物理学においても盛んに研究がなされています。

熱電効果における熱から電流への変換効率、 ZT と書かれる性能指数で与えられます。物質科学において、この ZT をあげることが最大の目標です。2000 年代に入って、 ZT の世界最高記録は従来の 1 付近の値から 3 付近に上昇しました。そのため、性能指数を上げるための根本原理や、その原理の物質科学への反映のさせかたなどが一層興味を持たれるようになってきています。

純粋物理学との関連では、熱電現象が典型的な熱機関の一種であるという認識から、議論がはじまります。熱電変換では、異なる温度の熱浴に接したことから熱浴間の熱のやりとりが生まれ、その結果熱の一部は電流に変換されます。電流の向きを妨げるような電場をかけておけば、電流は電場に逆らいながら流れるため、外界に仕事をします (図 1 参照)。熱電現象は、まさに熱から仕事に変換される熱機関なのです。このような対応関係から、熱電現象は、純粋物理学の中でも特に、非平衡統計物理学との接点強い現象になります。

非平衡統計物理学は、この 20 年の間飛躍的な進歩をとげ、現在もなお進歩している分野です。それらの進歩の代表格が、「ゆらぎの定理」や「非平衡仕事定理」です。熱電現象は定常状態の物理現象ですが、常に仕事として使われない熱を捨てており、エントロピーを生成している非平衡状態にあります。この 20 年間の非平衡統計物理学の研究では、主にこのエントロピー生成を詳細に理解することに焦点が当てられてきました。上にあげた 2 つの代表格も、このような研究に属します。理論だけでなく、多くの詳細な実験があるということも、触れておきたい重要な事実です。例えば、コロイド粒子をレーザートラップさせることにより微小な熱機関を作成し、ゆらぎ微小系の熱力学を見ることなどが、近年なされています (図 2 参照)。このような実験や熱電現象は、ともに非平衡熱力学という土台で眺めることにより、それらにひそむ深遠な物理構造を深く理解できると期待されます。

本プロジェクトの狙いは、まさに、これら 2 つの分野、つまり熱電現象と非平衡統計物理学を融合し、新たな視点で非平衡熱力学を深く掘り下げることです。これら 2 つの分野は、上に述べたように、実験や物質科学と密接に関わる生きた物理です。この背景のなかで、我々は特に重要なキーワードである「効率」と「仕事率」に焦点をあて、この間に成立する普遍的な関係を探求して行きます。

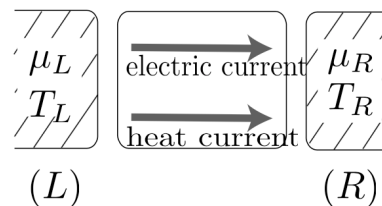


図 1 : 熱電変換のイメージ図。異なる温度によって駆動された熱流の一部が電流に変換され、外界に仕事をします。

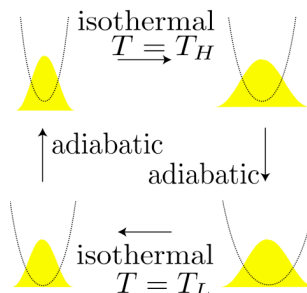


図 2 : コロイド粒子をレーザートラップして熱機関を作るための最も簡単な熱機関サイクルのイメージ図。分布はコロイド粒子の分布で、トラップポテンシャルによって閉じ込められています。温度の調節、トラップポテンシャルの形状などを変化させることにより、微小な熱機関を実現することができます。

2. 研究の目的

熱電現象を評価するための従来の性能指数 ZT は、磁場などの時間反転対称性を破る系では使えないことが分かっています。またその代わりとなる性能指数は、我々の研究により定義されており、その新たな定義を使った形式的な議論をすると、熱効率や仕事率 (熱電現象では仕事率は電流に比例) との関係はかなり直感的でなくなることが知られております。例えば、線形応答領域における形式的な議論をすると、熱力学第 2 法則だけからはカルノー効率と有限な仕事率の共存を否定できません。これはかなり非直感的なので、具体的な系を通じて本来あるべき関係を模索する必要があります。このような理由から、以下のことを、研究目的としてかけます。(1) コロイド粒子に対する熱機関を意識し、微小なゆらぎ熱機関を線形応答理論で記述すること、そして効率と仕事率の一般的な関係を明らかにします。(2) マルコフ的な時間発展をする古典系に焦点をあて、一般的な熱機関における効率と熱効率との関係を明らかにします。

3. 研究の方法

研究の目的にかかげた(1)の問題から説明します。コロイド粒子にトラップされたブラウン粒子の熱機関では、図2に示したようにポテンシャルが時間的に変動し、また温度も変化します。ブラウン運動をする熱機関ですので、議論は時間に依存するポテンシャルを有するフォッカープランク方程式を基礎とします。フォッカープランク方程式は温度を含んでいますが、その温度も時間変化することになります。これまで、サイクルをなす熱機関に対する線形応答理論は構築されてきませんでした。フォッカープランク方程式の枠内では、ダイナミクスが確立されているのでそれが可能です。我々は、異なる二つの温度の差が微小なこと、およびトラップポテンシャルのポテンシャル変化が小さいことを課します。線形応答とは、この場合、コロイド粒子が外界になす単位時間あたりの仕事と、熱浴に捨てる熱流を、これら2つの微小量で1次まで展開することを言います。

次に2つ目の目的(2)の方法を述べます。一般に物理学において、時間発展を厳密に追うことは極めて困難です。しかしクラスを限定すればある程度厳密なことが言えます。確率的な時間発展のうち、マルコフ的なダイナミクスは適用範囲も広く、またさまざまな数学的、物理的性質が分かっています。そこで我々は、マルコフ的な時間発展に限定して、効率や仕事率の間に成立する関係を得ることを考えます。そのために、エントロピー生成率を、時間発展の遷移行列を使ってカルバックダイバージェンスの形で書くことから出発します。これは、非平衡統計物理学の発展の過程で分かってきた表現の一つで、数学的にも非常に綺麗な形をしています。この表現に着目し、熱電効果を含む広いクラスの熱機関で成立する効率と仕事率の間の関係を探ります。

4. 研究成果

研究目的(1)に関する結果を以下に述べます。まず、コロイド粒子に対する熱機関に対して、線形応答理論を構築しました。この結果は熱機関に対する線形応答理論としての初めての結果で、以後さまざまな観点から引用されております。この研究における主要な物理的結果は以下ようになります。

(i): 仕事率と熱流に対して、2つの微小なパラメータ(今の場合異なる二つの温度差と微小なポテンシャル変化)に関して展開した時のオンサーガ行列は一般に非対称。

(ii): 線形応答理論の範囲内で、カルノー効率が達成されると常に仕事率が消失。

(i)の結果は、一見すると意外です。意外さを実感するために熱電変換を最初に考えてみます。熱電変換では、電流と熱流が電圧差や温度差の関数です。そしてこれらの微小変

数をもとに、熱力学力を定義し線形応答展開をすることが可能です。こうして得られたオンサーガ行列は、磁場などダイナミクスに時間反転対称性を破る原因がなければ、対称行列であることが知られています。これは、オンサーガの相反定理と言われている性質です。これを踏まえると、我々の結果(i)は、各瞬間のダイナミクスは磁場などを含んでおらず時間反転対称なので、一見するとオンサーガ行列は対称になりそうなものです。しかしながら、熱力学的サイクルがそもそも時間依存のサイクルで、時間反転対称性を大域的に破っているため、オンサーガ行列は一般に非対称になります。

上の結果は、図2を意識した微小系の熱機関の結果ですが、図1にあるような熱電効果に対する線形応答理論も考えました。熱電効果の線形応答理論の展開に関する方法論は、古くから知られていますから、ここではオンサーガ行列の具体的な値を考えます。特に磁場が入ったことによる力学の対称性の効果を考えます。そのために、具体的にこれまであまり理論の対象にならなかったネルンスト効果に焦点を当てました。ネルンスト効果では、通常4端子を考え、2次元電子系に垂直に磁場を加えます。電子は磁場によりローレンツ力を受け、その結果非自明な熱力学的な現象を与えます。熱流が流れているとそれに垂直な方向に起電力が生じます。これがネルンスト効果です。我々は古典系でこの現象を厳密に議論するためのモデルを構築しました。そして、効率が極端に低くなりカルノー効率は達成することが困難であることを理論的に示しました。

次に、研究の目的にあげた(2)に関する結果を述べたいと思います。上に述べたように、ブラウン粒子系に対する厳密な線形応答理論を構築することにより、(ii)のような効率と仕事率に関する関係式を得ていました。ここでは、これをさらに一般化します。研究の方法で述べたエントロピー生成率に関する表現に基づいて、マルコフダイナミクスで表現される熱電効果ならびにサイクルをなす熱機関に対して、効率と仕事率の間に成立する普遍的な関係式を導出しました。古くから、効率と仕事率の間には、効率が上がれば仕事率はさがり、仕事率を上げようとすると効率がさがるといいうわゆるトレードオフがあると思われていました。今回の我々の研究では、このトレードオフを厳密な不等式評価によって数学的に示しました。

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 6 件)

1. T. Akimoto, E. Barkai and K. Saito, Phys. Rev. Lett. vol. 117, 180602 (2016) 査読有.

2. N. Shiraishi, K. Saito and H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. vol. 117, 190601 (2016) 査読有.

3. K. Saito and A. Dhar, Europhys Lett. vol. 114, 5004 (2016) 査読有.

4. K. Brandner, K. Saito and U. Seifert, Phys. Rev. X 5, 031019 (2015) 査読有.

5. S. G. Das, A. Dhar, K. Saito, C. B. Mendl and H. Spohn, Phys. Rev. E vol 90, 012124 (2014) 査読有.

6. J. Stark, K. Brandner, K. Saito and U. Seifert, Phys. Rev. Lett. vol. 112, 140601 (2014) 査読有.

[学会発表] (計 1 件)

1. 「低次元系での異常熱輸送現象の理論」、齊藤圭司、日本物理学会 年次大会 2016 年 3 月 21 日、宮城県仙台市.

[図書] (計 1 件)

1. A. Dhar and K. Saito, Lecture note in Physics (springer), vol. 921 (2016).

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

[その他]
ホームページ等
<http://www.phys.keio.ac.jp/faculty/ksaito/syousai/index-saito.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

齊藤 圭司 (Saito, Keiji)
慶應義塾大学・理工学部・准教授
研究者番号：90312983

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：

(4) 研究協力者

()