

VII-2 ナノ量子物性グループ

准教授 谷口 伸彦

大学院生 1名（修士課程1名）

量子ドット系・ナノ構造系は、閉じ込め効果による強い電子相関を持つと同時に、有限の電流が駆動される非平衡系である。本研究グループでは、このようなナノ量子構造系での「非平衡電子相関現象」を調べるため、場の量子論の手法に基づき、基礎物性や非線形輸送現象の理解、および様々な解析法・近似法の開発を行っている。ナノ量子系はこれまで電子素子・スピントロニクス素子を中心として応用がなされてきたが、最近では温度差をもつ電極と結合させることで、熱⇄電気のエネルギー変換を行う熱電素子として期待されている（図1）。また、少数系であるナノ量子系の熱力学は興味深い物理の基礎的問題も提起する。巨視的自由度系を想定した熱力学を適用できないため、ナノ量子系の熱力学的性質を記述するには、量子論に基づく熱力学（量子熱力学）を構築・展開する必要がある。

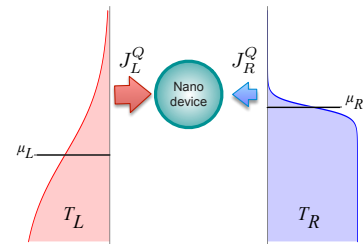


図1 異なる温度と電位をもつ電極と結合するナノ量子系の概念図。 $T_L > T_R$, $\mu_L < \mu_R$ とすれば電位差に抗して電流が流れ熱機関となる。

本年度より文科省科研費「ナノ量子系の量子熱電輸送と非平衡量子熱力学」（外部資金 [1]）の課題研究を開始した。本年度はナノ量子構造系がもつ設計系の自由度を利用することで熱電性能の向上を目指す取り組みを行った。関連研究として、フロケエンジニアリングによる動的制御に関する研究も進めた。本年度の具体的な成果は以下の通りである。

【1】ナノ量子系の量子制御と熱電性能（論文 [1]，講演 [1-3]，外部資金 [1]）

ナノ量子系は、その離散準位が持つエネルギーフィルタリング効果と電子相関効果をもたらす Weidemann-Franz 則からの逸脱効果により、有望な熱電素材として注目されてきた。しかし高い熱電性能指数 ZT や熱電効率 η を実現するには、一般的に動作温度 $k_B T$ をドット共鳴準位幅 γ よりも十分大きくすることが要請され、ナノ量子系でこの条件を実現することは熱電素子としての応用領域を大きく制約することがわかってきた。本研究では、量子ドット干渉計（図2左）で現れるファノ共鳴を利用して量子コヒーレンスを制御することで、温度領域 $k_B T \lesssim \gamma$ の状況においても高い熱電性能をもつナノ量子系を実現することが可能であることを理論的に明らかにした。

(1) 熱電性能指数 ZT の量子制御

温度が $k_B T = 0.2\gamma$ の場合、通常の量子ドット系 ($x = 0$ に相当) では、熱電性能指数は $ZT \approx 0.1$ (対応する熱効率はカルノー効率 η_C に対して $\eta_{\max}/\eta_C = 0.02$) であり、量子ドット系に熱電効果はほとんど存在しない。しかし、パラメータ x を変化させ左右電極間の直接伝導を量子コヒーレン

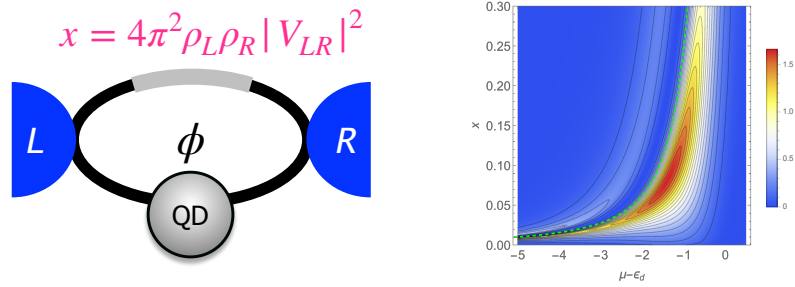


図2 左: 量子ドット干渉計の概念図。左右電極間の直接伝導を無次元量 x により制御する。右: ZT のパラメータ x とゲート電圧 $\mu - \epsilon_d$ 依存性。

スにより制御することで、最適化を行うと ZT の値が最大 1.5 以上に達し、線形熱効率が 10 倍程度 ($\eta_{\max}/\eta_C \approx 0.20$) まで増大し得ることが明らかになった (図 2 右)。

(2) 非線形熱電性能の量子制御

熱電性能指数 ZT は線形応答量で構成されるため、その予測能力の信頼性は線形応答領域に限られる。また、実際に熱電素子として利用するためには、熱効率だけではなく有限の出力パワーが出ている必要がある。そのため素子としての熱電性能を評価する際には、非線形領域において高い熱効率と大きな出力パワーがバランスよく実現されていることが重要である。つまり、 ZT の評価のみでは不十分であり、微視的理論に基づき非線形熱流・電流を評価して熱電性能 (熱効率・パワー) を確認する必要がある。Fano 共鳴を利用した熱電効果の量子制御が現実的状况で有効であることを確認するために、このような微視的解析を行った結果が図 3 である。非線形領域 ($\eta_C = 0.5$) においても熱効率の増強効果が継続し、出力パワーも最大 5 倍程度まで増大することが明らかになった。

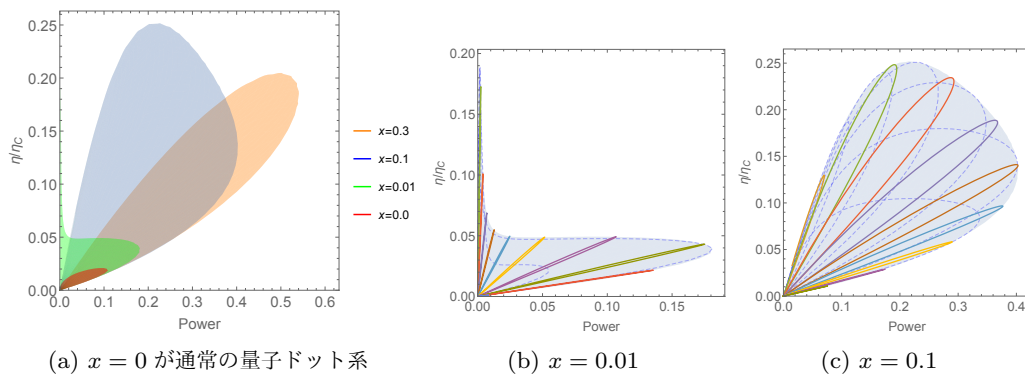


図3 左: 非線形領域 ($k_B T_L = 2k_B T_R = 0.2\gamma$) のパワー効率ダイアグラム。中央・右: $x = 0.01, 0.1$ の詳細。各色線はゲート電圧を固定し、バイアス電圧を変化させる時の挙動。

【2】線形応答量による非線形熱電性能評価 (論文 [1], 講演 [2,3], 外部資金 [1])

ナノ量子系を量子制御することでより良い熱電性能を得るためには、最適なパラメータを探索する作業が必要となる。特に、量子コヒーレンスを制御する場合には x の値に対応する最適なゲート電圧を見つけることが極めて重要である。通常、そのためには、微視的理論に基づいた非線形量子輸送現象の計算を行う必要があり、すべてのパラメータを変化させながら計算を行うのは面倒であり、またそれほど簡単なことではない。その代わりに、ある程度簡便に評価できる線形応答量を使って非線形領域の出力パワーと熱効率を特徴づけられることが望ましい。我々は、量子ドット干渉計が熱機関として動作する場合に得られた詳細な非線形電流と熱流の計算結果に基づき、非線形領域における出力パワーと熱効率が、どのように非線形熱電能 $S_{NL}(T_L, T_R)$ により特徴づけられるかを明らかにした。さらに非線形熱電能 $S_{NL}(T_L, T_R)$ が操作温度 $T_{op} = (T_L + T_R)/2$ における線形熱電能 $S_L(T_{op})$ により精度良く近似できることから、非線形領域における出力パワーと熱効率が、線形熱電能により近似的に評価可能であることを示した。

【3】ナノ量子ドット干渉計の動的制御 (講演 [4], 学位論文 [1], 外部資金 [1])

近年、エネルギー準位やバイアス電圧を高周波駆動することで、通常の平衡系にはない特性を実現する Floquet エンジニアリングの手法が提案されている。本研究では、量子ドット干渉計の制御変数として、量子干渉計を貫く時間変動 AB 磁束 $\phi(t) = \phi_0 + \phi_1 \cos \omega$ を使い、量子ドット干渉計の Fano 効果を通して、量子輸送を制御する可能性を理論的に考察した。今回新たに非平衡グリーン関数法を使い、時間変動電流の挙動を解析的に評価可能な表式を導出した。この表式に基づき、高周波変動 AB 磁束が量子輸送現象に与える影響を調べるとともに、得られた時間依存電流の結果を、前年度に行ったフロケ・マグナス展開による電流の時間平均の解析結果と比較した。 $\phi_0 = \pm\pi/2$ の AB 外場に対して得られた結果は以下の通りである。(1) 時間変動部分は周期平均に比べ大きい、(2) 左右リード間のバイアス電圧が 0 であっても、AB 位相 $\pm\pi/2$ のまわりの時間変動位相により有限電流が誘起され得る、(3) その電流の方向は AB 位相の時間不変部分の符号とゲート電圧の位置に依る。バイアス電圧なしに有限平均電流の誘起を示唆する結果は、高周波 AB 磁束がほかの高周波外場とは大きく異なる性質をもつ現象であることが明らかになった。

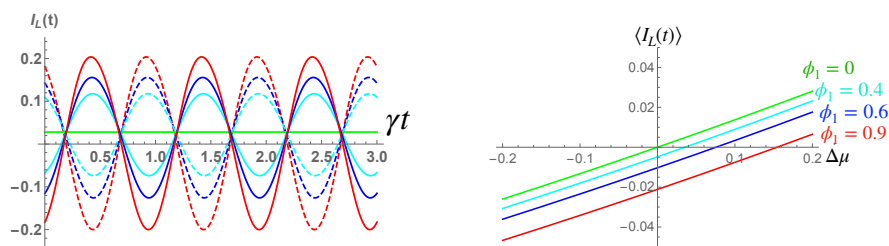


図 4 左: 時間変動電流の時間依存性 ($\phi_1 = 0, 0.4, 0.6, 0.9$). 右: 電流の 1 周期平均の $\Delta\mu$ 依存性。

研究業績

<論文>

1. Nobuhiko Taniguchi, *Quantum control of nonlinear thermoelectricity at the nanoscale*, Phys. Rev. B **101** 115404 (2020) [arXiv:1912.11562].

<学位論文>

1. 修士論文：鎌形優祐「周期変動量子ドット干渉計における非平衡現象の実時間解析」筑波大学数理物質科学研究科 2018 年度 修士（理学）.

<講演>

1. 谷口伸彦 「量子ドット干渉計における非線形熱電輸送の量子制御」日本物理学会 2019 年 秋季大会 (2019 年 9 月 12 日 岐阜大学).
2. N. Taniguchi, “Controlling nonlinear thermoelectricity of a quantum dot by quantum interference” APS March Meeting (2020.03.04, Colorado, USA). Bull. APS, <http://meetings.aps.org/Meeting/MAR20/Session/M62.6>.
3. 谷口伸彦 「量子ドット干渉計における非線形熱電特性の最適化」日本物理学会 第 75 回年次大会 (2020 年 3 月 16 日 名古屋大学)
4. 鎌形優祐・谷口伸彦 「AC 磁束量子ドット干渉計の動的量子輸送」日本物理学会 第 75 回年次大会 (2020 年 3 月 16 日 名古屋大学)

<外部資金>

1. 文部科学省 科研費 基盤研究 (C) 「ナノ量子系の量子熱電輸送と非平衡量子熱力学」(研究代表 谷口伸彦 2019 年度-2021 年度).