

VII-2 ナノ量子物性グループ

准教授 谷口 伸彦

卒研究生 2名

微細構造技術の進歩に伴い、ナノ量子系を自由にデザインし、温度や電位が制御された非平衡環境と結合させることが可能となった。ナノ量子系は外部環境により有限の電流・熱流が駆動される非平衡系であり、同時に強いドットでのクーロン反発が重要な電子相関系でもある。本研究グループでは、ナノ量子構造系で重要となる「非平衡量子相関現象」が絡んだ非平衡熱力学・非線形量子輸送現象の理解と応用を目指し、場の量子論の手法に基づく理論研究を行っている。

ナノ量子系は、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、最近期待を集めている。今年度は、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]) の下、昨年度に引き続き、ナノ量子構造系がもつ設計上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うとともに、ナノ系の量子力学に基づく非平衡熱力学(量子熱力学)の確立に向けて、量子輸送現象を記述する散乱行列理論を微視的理論より構成・拡張を行った。また関連する研究として、非平衡定常状態に関する固有状態熱可仮説(ETH)と純粋状態近似の妥当性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】電子相関ドット系の量子制御と熱電性能 (論文 [1], 講演 [2], 外部資金 [1])

ナノ量子系を実際の熱電素子として利用するためには、熱効率だけでなく有限の出力パワーが出ている必要がある。つまり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ることが重要であり、線形領域で指標(例えば性能指数 ZT) の評価のみでは不十分である。

昨年度に引き続き、本研究では、量子ドット干渉計(図1)で現れるファノ共鳴を利用した熱電素子を考え、量子制御により期待される非線形領域で熱電特性の向上を調べた。特に、ドットに強いクーロン反発が存在する時の評価を行った。クーロン閉塞効果により、輸送に寄与する透過スペクトルは2つのピークに分裂し、その挙動は2つのファノ共鳴により支配される(図2左・中央)。その一方のファノ共鳴において、電子相関がないときと同様、熱電効率と出力パワーの双方に顕著に向上することがわかった(図2右)。

$x = 0$ の時と比べると、電子相関の有無に関わらず、熱効率で最大10倍、出力パワーで5倍程度の向上が見られた。

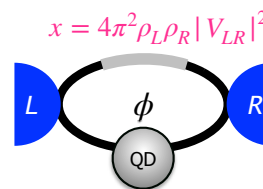


図1 左: 量子ドット干渉計の概念図。左右電極間の直接伝導を無次元量 x により制御する。ドットに強いクーロン反発がある。

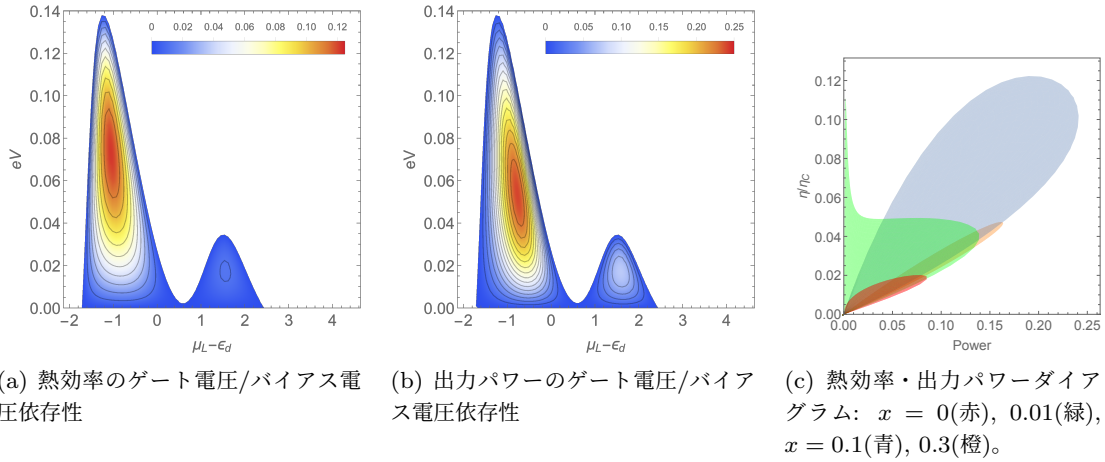


図2 相互作用ドット $U = 2\gamma$ の非線形領域 ($\eta_C = 0.5$) の結果

【2】 ナノリボン系の量子干渉と非線形熱電性能 (学位論文 [1], 外部資金 [1])

グラフェンは、バルク系では大きな熱伝導度を持つため、熱電素子としては不利と考えられているが、1次元化したナノリボン系は伝導度が低く、有望な熱電素子の候補と考えられている。量子コヒーレンスがよく保持されることから、量子制御可能な系である本研究では、フォノンによる熱伝導機構が無視できる比較的小さなナノリボン系において、形状を変化させることで非線形熱電特性の向上につながることを示した。

具体的には、図3に示すようなナノリボン系のリング系（量子干渉素子）を考え、リング穴の高さ W_{ring} とサイドゲート電圧を変えることで量子干渉効果を調節する。数値計算の結果、得られた非線形領域で熱効率・出力パワーダイアグラムを図4に示す。 W_{ring} とサイドゲート電圧を調節することで、大きな熱効率を保持しつつ、出力パワーを向上させることが可能であることがわかる（図4中央）。

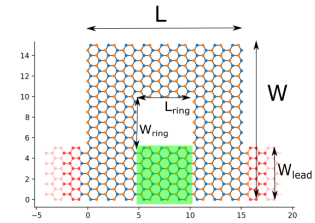


図3 緑領域にサイドゲート電圧を印加、両端の赤い部分は電極を示す。

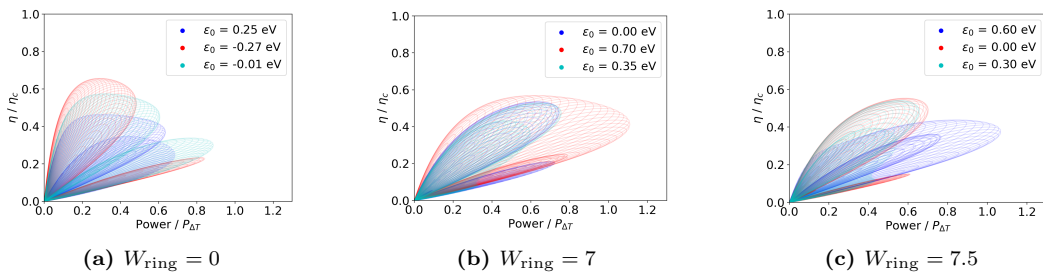


図4 非線形領域 (T_L, T_R) = (150 K, 50 K) における熱効率-出力パワー・ダイアグラム。 W_{ring} とサイドゲート電圧の大きさにより熱電特性が大きく変わる。

【3】散乱行列理論と量子熱力学 (講演 [1,3], 外部資金 [1])

(1) 量子接続性と量子熱力学

量子ドットを埋め込んだリング系を量子ドットは、ある特定の量子コヒーレンスをもつ外部環境(電極端子/熱浴)に結合していることになる。ファノ効果に代表されるこのような外部環境の量子接続性が熱電特性に大きな影響を与える。つまり、これまでバルク系では考慮されてこなかった外部環境の量子コヒーレンスは、ナノ量子系の開放系/非平衡量子熱力学では大変重要な役割を果たすと考えられる。このような外部環境の量子接続性は、一体問題の範疇では散乱の S 行列により特徴づけることができる。これを踏まえ、散乱の S 行列を使った定常状態熱力学の定式化を提案した。非平衡定常状態を記述する熱力学関数として外部環境の量子接続性効果を含む物理量を提案し、その性質を調べた。この効果は、バルク系にはないナノ系特有の現象であり、ドット系の定常状態熱力学がドットを埋め込む外部ネットワーク形状に大きく依存することを示す。

(2) 電子相関ドットに対する散乱行列理論

散乱の S 行列を用いた量子輸送現象解析は、広く使われている強力な方法であるが、本質的に現象論であり、通常、一体近似を超えて強い電子相関を扱うのは困難である。そこで本研究では、量子輸送の散乱理論を微視的理論の見地から見直し、定常状態熱力学で使われる密度演算子、漸近場、演算子版 Lippmann-Schwinger 方程式を使うことで、散乱理論の枠組みにクーロン閉塞現象、近藤効果等の強い電子相関効果を系統的に取り込むことが可能であることを示した。同時に、局所相関ドット系に対し、一般的な非線形量子輸送方程式 (Meir-Wingreen 公式) がどのような状況で、散乱理論による記述 (Landauer 公式) に正当化され、導出されるかを明らかにした。

【4】固有状態熱化仮説と非平衡定常状態の純粋状態近似 (学位論文 [2], 外部資金 [1])

固有状態熱化仮説 (ETH=Eigenstate Thermalization Hypothesis) は、孤立量子多体系における熱平衡化を説明する機構として有力な概念であり、その妥当性は多くの非可積分系において数値計算により実証されてきた。最近、孤立系の研究で用いられてきた ETH を非平衡定常状態に応用することで、混合状態である非平衡定常状態を、(代表的) 純粋状態により近似できる可能性が示唆されている。これは、定常状態密度演算子 $\rho_{ss} = e^{-H_{ss}}$ の擬ハミルトニアン H_{ss} に対する固有状態 $|E_p\rangle$ の ETH を考えることで、物理量の定常状態平均 $\langle \hat{O} \rangle_{ss}$ を代表的純粋状態 $|E_p^{\text{rep}}\rangle$ の平均値 $\langle E_p^{\text{rep}} | \hat{O} | E_p^{\text{rep}} \rangle$ で近似できることを意味する。

本研究では、異なる温度をもつ熱浴と両端で結合する量子多体系 (外場下の 1 次元 Ising 模型) をとりあげ、その非平衡定常状態を純粋状態によりどの程度近似することができるのか、その妥当性と適用範囲を数値的に検証した。孤立系が非可積分系である場合には、定常状態に対しても ETH が成立することがわかる。しかし、スペクトル重み関数のピーク形状は熱浴の温度や散逸強度に大きく依存し、それらのパラメータの選択の仕方によっては重み関数に複数のピークも現れることがわかった。定常状態を代表的純粋状態で近似するのが許容されるのは、スペクトル重み関数が 1

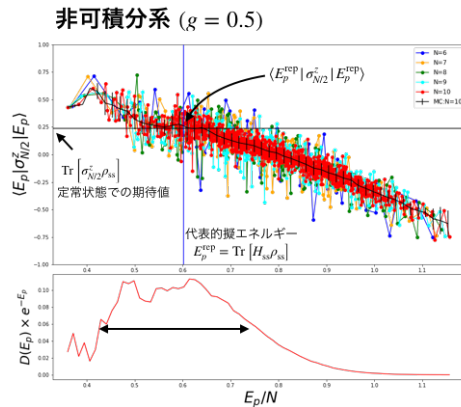


図5 非可積分系の非平衡定常状態に対する、(上) 定常状態平均 $\langle \sigma_{N/2}^z \rangle_{ss}$ と固有状態期待値との比較、(下) スペクトル重み関数のエネルギー依存性

ピーク形状の場合に限られる。複数ピークを持つ状況 (低温や散逸の大きい場合) には、ETH が成り立っていても定常状態を代表的純粋状態で近似することは困難となる。

研究業績

<論文>

1. N. Taniguchi, *Quantum control of nonlinear thermoelectricity at the nanoscale*, Phys. Rev. B **101** 115404 (2020).

<学位論文等>

1. 卒業論文：児玉優河「ナノリボン系における量子干渉効果と非線形熱電特性の向上」筑波大学物理学類 2020 年度卒業論文.
2. 卒業論文：長谷川大典「開放スピン鎖の固有状態期待値と非可積分性」筑波大学物理学類 2020 年度卒業論文.

<講演>

1. 谷口伸彦 「ナノ系の非線形熱電輸送と非平衡熱力学」日本物理学会 2020 年 秋季大会 (2020 年 9 月 9 日 熊本大学オンライン開催).
2. N. Taniguchi, *Enhanced thermoelectricity and steady-state thermodynamics of a quantum dot embedded in networked reservoirs*, APS March Meeting (2021.03.15, Online, USA). Bulletin of the American Physical Society, <https://meetings.aps.org/Meeting/MAR21/Session/B55.2>
3. 谷口伸彦 「非線形熱電輸送と定常熱力学への S 行列アプローチと拡張」日本物理学会 第 76 回年次大会 (2020 年 3 月 13 日 東京大学オンライン開催)

<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).