

## VII-2 ナノ量子物性グループ

准教授 谷口 伸彦

大学院生 3名（修士課程3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・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。ナノ量子構造系は、強い電子相関を持つと同時に、有限の電流・熱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と様々な解析法・近似法の開発を行っている。本年度より新たに、ナノ量子系の熱電流輸送の研究を本格的に開始した。ナノ量子構造系は電子素子・スピントロニクス素子としての応用が主であったが、最近ではエネルギー素子・熱電素子として期待が高まっている。これは、ナノ量子構造系がもつ設計の自由度を利用することで、従来のバルク系熱電素子で熱電性能の向上を阻んでいた要因を払拭できる可能性があるためである。本年度の具体的な成果は以下の通り。

### 【1】 ナノ量子系の量子熱力学と熱力学関数 (論文 [1], 講演 [1])

熱力学極限（バルク多体系）の対極に位置するナノ量子系（微小少数系）では、「熱力学極限」に代表される巨視的多数自由度系で発展してきた熱力学の法則が成立する保証はない。少数量子系であるナノ量子系では巨視的多自由度に基づくアンサンブル平均がなく量子平均のみが存在するからである。しかし最近わかってきたのは、やはりナノスケールにおいても熱力学の基本法則は成立するということである。逆に言うと、ナノ量子系では、アンサンブル平均・確率論を用いることなく量子力学のみを指導原理として、非平衡熱力学や熱力学法則を満たす非線形量子輸送が構築できることを意味する。我々は、このような「量子熱力学」の観点より、ナノ量子系の非線形量子輸送現象と非平衡熱力学の研究を進めている。

#### ナノ定常状態の熱力学関数 (論文 [1])

相互作用のない単純化された量子ドット系に対し、任意の非線形領域で、時間不変な Massieu-Planck 関数を定常状態に拡張した  $\Phi_{ss}$  が熱力学関数として、定常状態の熱力学量のみならず Landauer-Büttiker 公式 (LB 公式) による非線形量子輸送をも特徴づけることを示した。具体的には次のような熱力学関係式（の定常状態拡張）が成立する。

$$d\Phi_{ss} = \hat{N}d(\beta\mu) - \bar{E}d\beta + \frac{\hbar}{2\gamma} \sum_a (I_a dA_a^N + J_a dA_a^E)$$

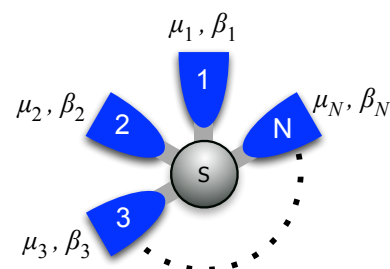


図1 逆温度  $\beta_a$  と化学ポテンシャル  $\mu_a$  を保持する複数の外部環境と結合したナノ構造系 (S)。

ここで  $A_a^N, A_a^E$  は外部環境によるアフィニティー（親和力）を表し、端子  $a$  からドットへ流入する非線形粒子流を  $I_a$ , 非線形エネルギー流を  $J_a$  とする。この微分関係式に基づき、非線形領域に Maxwell 関係式や Onsager の相反定理を拡張可能であることも明らかになった。

#### 低温領域における臨界熱揺らぎ (論文 [1])

統計力学における大偏差原理によれば、熱力学関数は平均のみならずその揺らぎをも特徴づける。我々がナノ量子系で得た定常状態熱力学関数  $\Phi_{ss}$  に、このような特徴付けが可能かを調べるため、非平衡共形場理論により考察されてきた低温領域の普遍的臨界熱流に注目し比較を行った。後者で得られた熱流キュムラント生成関数  $F(\lambda)$  が、本質的に我々が得た定常状態熱力学関数  $\Phi_{ss}$  と等価であり、 $F(\lambda) = \frac{\gamma}{\hbar} [\Phi_{ss}(\bar{\beta}, A^E + 2i\lambda) - \Phi_{ss}(\bar{\beta}, A^E)]$  により関連づけることを見出した（熱流は異なる逆温度  $\beta_{1,2}$  をもつ端子間に流れ、 $\bar{\beta} = (\beta_1 + \beta_2)/2, A^E = -\beta_1 + \beta_2$ ）。

相互作用のない量子ドット系については、完全計数統計として高温領域も含めた電流・熱流のキュムラント生成関数が Levitov-Lesovik 公式として得られている。関数  $\Phi_{ss}$  も任意の温度で評価できるため、両者の間には一般的な関係が存在すると考えられる。現時点では「ゆらぎの定理」を通して得られる、低次の非線形輸送係数間の関係が成立することは確認できるものの、低温領域でのようなキュムラント生成関数と  $\Phi_{ss}$  との直接的な関係は確認できていない。

#### 非マルコフ的外部環境の影響 (講演 [1])

論文 [1] で非平衡定常状態の議論を行う際には、ドットと環境との結合がワイドバンド極限 (Markov 的) との仮定を用いていた。結合が非 Markov 的な場合に定常状態熱力学に与える影響を調べるため、非 Markov 過程として有限バンド幅をもつ Drude 模型に対して解析を行った。ワイドバンド極限と異なり、各外部環境による緩和関数にエネルギー依存性が現れる。しかし、系が各端子による緩和のエネルギー依存性が等しい「比例端子結合条件」を満たすならば、環境との結合が非マルコフ的であっても論文 [1] で行った議論を拡張することができ、LB 公式による量子輸送を熱力学的に記述することが可能であることがわかった。一方で、比例端子結合条件を満たさない系では、そもそも量子輸送が LB 公式により記述できず、これまでの LB 公式に立脚した議論を適用することは難しいことが明らかになった。

## 【2】 ナノ系非平衡定常状態と熱力学第二法則 (講演 [1])

外部環境と結合する非平衡定常ナノ量子系が、少数系であってもなぜ熱力学の基本法則を満たすのか、この極めて基本的な問いに対し、我々が十分な理解に達しているとは言い難い。例えば、非線形量子輸送が LB 公式に従う場合には、熱力学第二法則の成立を容易に確認可能であるが、一般的に LB 公式に帰せられない多くの非線形輸送現象でエントロピー生成の正値性は必ずしも自明ではない。LB 公式とならない原因としては、電子間相互作用、複数量子準位、外部環境との非 Markov 的結合などがある。このような場合の量子輸送は非平衡グリーン関数理論で知られている Meir-Wingreen (MW) 公式により記述される。物理的には、量子輸送現象を透過係数のみで特徴づけできず、ドットの分布関数を必要とする状況を意味する。

本研究では、Hershfield (1993), Fröhlich ら (2003) により提案された定常状態密度行列  $\rho_{ss}$  を散

乱状態  $\psi_\lambda$  により形式的に表す手法 (Y 演算子法) を用い、LB 公式が成立しない定常状態に対し熱力学第二法則を調べた。密度行列を陽に構成することで、量子情報量=相対エントロピーと MW 公式の関係が明らかになる。たとえば量子ドットに局所相互作用があっても  $\rho_{ss}$  は散乱状態に関してガウス型となることから、任意の演算子  $\hat{A}$  について KMS 的關係式  $\langle \frac{\dagger}{\lambda} \hat{A} \rangle = f_\lambda \langle \{ \hat{A}, \frac{\dagger}{\lambda} \} \rangle$  を示すことができ、ナノ系と環境が線形結合するモデルでは、これが MW 公式と等価となることがわかった。その結果、相対エントロピー  $S(\rho_t || \rho)$  の正值性を用いることで、MW 公式で示される定常的な熱流は、必ず第二法則を満たすことがわかる。

### 【3】 ナノ量子干渉計の動的制御 (講演 [2], 学位論文 [1])

ナノ構造系素子の利点の1つは、外部環境により系の特性を変化させることが可能な点である。リング系の片側に量子ドット系を埋め込んだ量子ドット干渉計 (図2左) は、ゲート電圧、バイアス電圧、AB 磁束やラッシュバ電圧を変化させることにより、様々な量子輸送現象を制御可能なナノ量子構造系であることが知られている。近年、制御手段として、高周波数周期外場が注目されていることを踏まえ、本研究では、量子ドット干渉計の制御変数として高周波変動 AB 磁束を考え、量子ドット干渉計の Fano 効果を変動磁場により制御する可能性を理論的に調べた。変動 AB 磁束の効果を Floquet ハミルトニアンを用い、Magnus 展開の最低次で近似することで周期外場の効果を取り込んだ静的ハミルトニアンへと近似した。これにより、量子ドット干渉計において高周波変動 AB 磁束が量子輸送現象における役割を理論的に明らかにすることができた。変動磁束の効果が大きく現れるのは主にリング系のアーム部分の結合であり、従って時間変動磁束により量子ドット干渉計の Fano 効果を実質的に制御することが可能であることがわかった (図2右)。

### 【4】 ナノ量子系の熱電機能制御 (講演 [2], 学位論文 [1])

線形応答理論での理論計算に基づき、熱電素子の特徴づける熱電性能指数  $ZT$  を増大させる一つの方法として、強い非対称性・エネルギー依存性を示す透過スペクトルを持つ素材を探索することが提案されている。ナノ量子系では、透過スペクトルは接合の性質を強く反映することが知られる。その代表的なものが量子ドット干渉計に現れる Fano 効果である。一方、ナノ量子系における熱電応答は非線形領域に顕著である。そのため、 $ZT$  などの線形応答理論に基づく指標に留まら

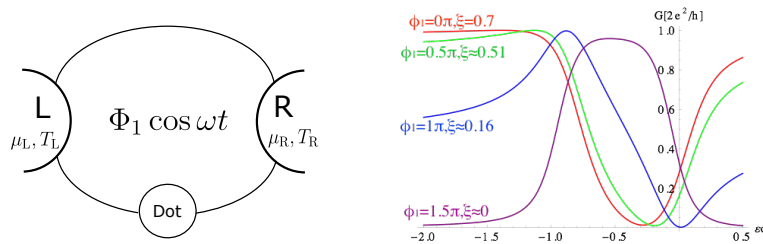


図2 左: 時間変動磁束  $\Phi_1 \cos \omega t$  をもつ量子ドット干渉計、右: 微分コンダクタンスの  $\Phi_1$  依存性

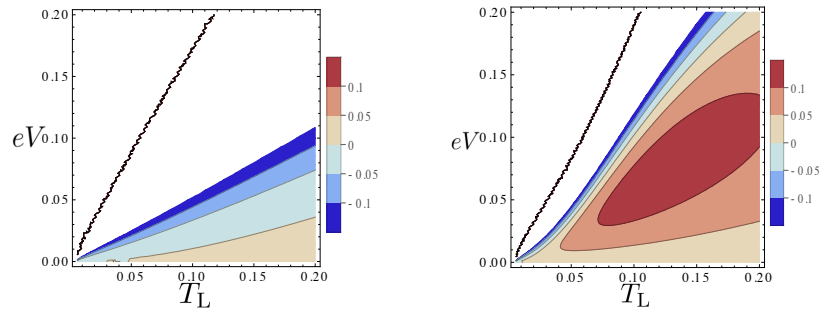


図3 非線形熱電素子の変換効率  $\eta = \bar{W}/J_L^Q$  (マイナス部分は冷却機関)。  $\gamma = 1, T_R = 0.005$   
 (左図) 量子ドット系、(右図) 量子ドット干渉計

ず、非線形効果を取り込んだ熱電輸送解析が必須となる。

以上を踏まえ、本研究では変動 AB 磁束を制御手段として用いることにより、量子ドット干渉計がどのような熱機関としての機能と性能を持ち得るかを非線形領域を含めた理論解析を行った。量子ドット系の相互作用として、相互作用なし、Fano-Coulomb 領域、Fano-Kondo 領域、を比較し、熱機関としての動作の可否とその性能を調べた。得られた結果は次のとおり。(1) 熱機関としてのナノ構造系の熱効率が、量子ドット干渉計を構成することで、相互作用なし、Fano-Coulomb 領域の場合には、単一量子ドット系に比べて著しく向上する (図 3)。一方、Fano-Kondo 領域では電流が流れ易く加熱機関にならない。(2) 量子ドット干渉計において高効率の熱機関が実現されるパラメータ領域は、かなり限られた領域であり、基本的に線形応答理論で高い  $ZT$  を示す領域と一致する。絶対零度で  $ZT$  が発散する透過スペクトルの零点は、加熱機関と冷却機関の境界にあっており、有限温度効果によりその境界のすぐ近傍で高効率の熱機関が実現する。(3) 時間変動磁束の振幅  $\Phi_1$  を変えることにより、加熱機関と冷却機関の機能制御が可能である。

## 研究業績

### <論文>

1. Nobuhiko Taniguchi, “Quantum thermodynamics of nanoscale steady states far from equilibrium” Phys. Rev. B **97** 155404 (2018) [arXiv:1710.07385].

### <学位論文>

1. 修士論文：今井翔貴：「時間変動 AB 磁束による量子ドット干渉計の量子輸送フロケエンジニアリング」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「ナノ系非平衡定常状態の量子輸送と熱力学形式」日本物理学会 2018 年周期大会 (2018 年 9 月 同志社大学)
2. 今井翔貴・谷口伸彦 「時間変動 AB 磁束による量子ドット干渉計の量子輸送フロケエンジニアリング」日本物理学会第 74 回年次大会 (2019 年 3 月 15 日 九州大学)。