1次元周期超格子におけるフォノンの群速度と 格子熱伝導に関する理論的研究

学位論文内容の要旨

近年、サブ・ピコ秒領域の光パルスを用いてコヒーレントな音響フォノンを励起・検出するスペクトロスコピー技術（ピコ秒超音波法）が確立し、ナノスケールの単一薄膜やヘテロ多層膜構造の音響的特性や熱伝導度に関する実験的研究が急速に進んでいる。しかし、これらの系における音響フォノンの振る舞いに関する理論的研究は少なく、実験結果の多くは十分に解明されていない。このような状況を踏まえ、本研究では超格子における音響フォノンに関し、特に以下の3点の興味深い現象との係わりにおいて理論的考察を展開し、新知見を得た。

(1) 第一章ではナノ構造の表面・界面における局在振動と、バルクフォノンの共鳴相互作用、特に半無限超格子表面に局在振動（表面フォノン）が存在する場合の固体（基盤）-超格子-液体系におけるフォノン透過の理論解析を行った。一般に大きな音響不整合のため、固体-液体間のフォノン透過率は小さな値を持つが、その界面に表面フォノンが存在し得る超格子を介在させると、表面フォノンの固有振動数に一致する入射フォノンは、この系を透過率1で共鳴的に透過することを明らかにした。さらに、このような固有振動数を含むフォノンパルスが、GaAs-(GaAs/AlAs)_N-H₂Oの系を透過するときの時間発展を考察した。特に、矩形パルスを入射させた場合の波束の変形と遅延効果を、位相時間に基づいて解析した。興味深いことに反射フォノン波束には2重ピーク構造が生じることを、解析的計算、並びにシミュレーションにより明らかにした。また、その物理的起源が表面局在振動の有限な寿命に由来するものであると、突き止めた。

(2) 第二章では有限周期超格子中のフォノンの群速度に対する解析を、波束の数値シミュレーションと、転送行列法に基づく解析計算により展開した。分散関係においてフォノンの伝播が禁止される周波数禁制帯（ギャップ）中のフォノンの群速度は、伝播が禁止されることより0に落ち込むと予想される。しかし有限周期超格子においては、群速度はギャップ近傍で期待通り一旦0に近づくが、ギャップ内部では0とはならず、逆に許容帯（バンド）中の値を大きく上回ることを見いだした。この群速度の増大は超格子の周期数に依存し、またゾーン端（または中心）とゾーン内部に存在するギャップでは定性的に異なることを理論的に示し、更にその物理的理由を解析的計算に基づいて明らかにした。

(3) 第三章では半導体超格子の垂直熱伝導率に対する理論解析を、分子動力学(MD)法に基づき行った。ここ 10 年余りの間に行われた超格子の熱伝導率の測定実験により、その値がバルク結晶と比較して著しく減少し、また超格子の周期長が短くなるにつれ減少することが明らかになった。これは超格子におけるフォノンの分散関係の折り返し効果とそれに伴う群速度の低下が原因であると考えられたが、群速度に基づく理論解析では熱伝導率の低下の理由を十分に説明出来なかった。そこで本研究では、MD 法を用いて超格子における熱伝導率を計算し、その減少の物理的起源を明らかにすることを目的とした。MD 法のアルゴリズムとして非平衡 MD 法を用いた。超格子の両端に高温と低温の熱浴をそれぞれ設定し、超格子中に温度勾配と定常的な熱流を生じさせ、フーリエ則を用いて熱伝導率を求めた。理想的な界面を有する超格子においては、フォノンの群速度に基づく理論解析から予測される熱伝導率と同様の結果が得られ、実験とは合致しなかった。一方、界面の乱れを有する超格子においては、実験で見出された熱伝導率の著しい減少とその周期長に対する依存性が良く再現された。このことから超格子で見られる短周期領域での熱伝導率の低下が、超格子の界面の乱れの効果によるものと判明した。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 田 村 信一朗
副 査 教 授 明 楽 浩 史
副 査 教 授 ライト・オリバ

学 位 論 文 題 名

1 次元周期超格子におけるフォノンの群速度と 格子熱伝導に関する理論的研究

非金属超格子中の熱エネルギー伝播は音響フォノンが担っており、その群速度がエネルギー輸送特性を決定する重要な要素となっている。これまでの研究の蓄積により、サブ・ピコ秒領域の光パルスを用いてコヒーレントな音響フォノンを励起・検出するピコ秒超音波法が確立し、単一薄膜やヘテロ多層膜構造の熱伝導度をはじめとし、ナノ構造中のエネルギー輸送特性に関する多くの実験的研究が行われている。しかし、これらの構造中の音響フォノンの振る舞いに関する理論的研究は少なく、実験結果の多くは十分に解明されていない。本論文は超格子における音響フォノンの群速度を中心に、以下に述べるように3点の興味深い物理現象の理論的考察を展開し、新知見を得たものである。

本論文は全五章よりなっている。

第一章は序論であり、超格子構造におけるフォノン研究の背景と意義が述べられている。

第二章では超格子構造の表面・界面における局在振動と、バルクフォノンの共鳴相互作用、特に半無限超格子表面に局在振動（表面フォノン）が存在する場合の固体（基盤）-超格子-液体系におけるフォノン透過の理論解析を行っている。一般に大きな音響不整合のため、固体-液体間のフォノン透過率は小さな値を持つ。しかし、その界面に表面フォノンが存在し得る超格子を介在させると、表面フォノンの固有振動数に一致する入射フォノンは、この系を透過率1で共鳴的に透過することを明らかにしている。さらに、このような固有振動数を含むフォノンパルスが、GaAs-(GaAs/AlAs)_N-H₂Oの系を透過するときの時間発展を考察し、特に、矩形パルスを入射させた場合の波束の変形と遅延効果を、位相時間に基づいて解析している。興味深いことに反射フォノン波束には2重ピーク構造が生じることを、解析的計算、並びにシミュレーションにより見出し、また、その物理的起源を説明している。

第三章では有限周期超格子中のフォノンの群速度に対する解析を、波束の数値シミ

ュレーションと、転送行列法に基づく解析計算により展開している。周波数禁制帯（ギャップ）中のフォノンの群速度は、伝播が禁止されることより0に落ち込むと予想される。しかし有限周期超格子においては、群速度はギャップ内部で0とはならず、逆に許容帯（バンド）中の値を大きく上回ることを見いだしている。この群速度の増大は超格子の周期数に依存すること、またゾーン端（または中心）とゾーン内部に存在するギャップでは定性的に異なることを理論的に示し、更にその物理的理由を解析的計算に基づいて明らかにしている。

第四章では半導体超格子の垂直熱伝導率に対する理論解析を、格子の非調和性を取り込んだ分子動力学法（MD法）に基づき行っている。超格子中の熱伝導率は、測定実験により大きさがバルク結晶と比較して著しく小さく、また超格子の周期長が短くなるにつれ減少することが明らかになっている。これは、超格子におけるフォノンの分散関係の折り返し効果と、それに伴う群速度の低下が原因であると考えられたが、解析では熱伝導率の低下を十分に説明出来なかった。本論文では、MD法を用いて超格子における熱伝導率を計算し、その減少の物理的起源の解明を試みている。解析の結果、理想的な界面を有する超格子においては、フォノンの群速度に基づく理論解析から予測される熱伝導率と同様の結果が得られ、実験とは合致しないが、界面の乱れを有する超格子においては、実験で見出された熱伝導率の著しい減少と、その周期長に対する依存性が良く再現された。このことから超格子で見られる短周期領域での熱伝導率の低下が、超格子の界面の乱れの効果によるものと結論している。

第五章は結論であり、本研究で得られた結果をまとめている。

これを要するに、著者は、非金属超格子中のエネルギー伝播を担う音響フォノンの群速度と、垂直熱伝導率に対する理論解析を展開し、実験結果を良く説明し、さらに新たな予言を行ったものであり、量子物理工学、応用物理学の発展に寄与するところ大なるものがある。よって、著者は北海道大学博士（工学）の学位を授与される資格あるものと認める。