



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	乱れた構造を利用したフォノンニックデバイスに関する基礎研究
Author(s)	吉弘, 達矢
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第14865号
Issue Date	2022-03-24
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k14865
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/85154
Type	doctoral thesis
File Information	Tatsuya_Yoshihiro.pdf



乱れた構造を利用したフォノンニックデバイスに関する基礎研究
A fundamental study on phononic devices using disordered
structures

北海道大学 大学院工学院 応用物理学専攻

吉弘 達矢

令和4年2月8日

目次

第 1 章	序論	2
	参考文献	4
第 2 章	1 次元ランダム超格子中のアンダーソン局在	5
2.1	ランダム超格子のモデル	5
2.2	ランダム超格子を伝播するフォノンのアンサンブル平均透過率	7
2.3	Lyapunov 指数とフォノンの平均自由行程	19
2.4	透過率の揺らぎ	20
2.5	透過率の確率分布	22
	参考文献	24
第 3 章	アンダーソン局在におけるモード変換の効果	25
3.1	ランダム超格子のモデル	26
3.2	転送行列法の定式化	27
3.3	モード変換が生じる場合のアンサンブル平均透過率	30
3.4	Lyapunov 指数	33
3.5	透過率の揺らぎと確率分布	35
3.6	まとめ	41
	参考文献	42
第 4 章	ランダム固体／液体超格子による透過特性の動的制御	44
4.1	固体・液体ランダム超格子のモデル	45
4.2	固体・液体ランダム超格子の転送行列の定式化	45
4.3	アンサンブル平均透過率と透過率の揺らぎ	48
4.4	透過波の周波数特性のチューニング	51
4.5	まとめ	52
	参考文献	53
第 5 章	結論	55

第 1 章

序論

固体中のフォノンや音響波を用いたデバイスの研究・開発は長年にわたり行われてきた。代表的なものとして、表面弾性波を用いた SAW(Surface Acoustic Waves) デバイスや超音波エコーが挙げられる。さらに人工的な周期構造を利用したフォノンニック結晶を用いて、バルク音響波回路や表面弾性波、負の屈折率を持つ系が研究されてきた。フォノンニック結晶は、音響インピーダンスの異なる物質を、目的に応じて 1 次元から 3 次元まで周期的に配列した構造を持つ。音響波の分散関係は、周期構造によりバンド構造を示し、電子のエネルギーバンドと同じく、伝導帯（パスバンド）では音響波のモードが存在するため、フォノンニック結晶中を透過する。一方、禁止帯（バンドギャップ）では音響波のモードが存在しないため、その周波数帯域では外部からフォノンニック結晶に入射出来ず、全反射される。このバンド構造は、系を構成する物質とその系の次元性と周期構造に強く依存するため、これらの構成の変化による、音響波の分散関係の変化が多くの研究の対象となっている。フォノンニック結晶の重要な特性の 1 つは、バンドギャップである。バンドギャップの周波数帯域ではフォノンニック結晶が音響波に関して壁となることを利用して、フォノンニック結晶と通常の一様な物質を組み合わせることで、音響波の伝播回路を構築する事が可能となる。また、このようなデバイスを非常に広いバンドギャップを持つフォノンニック結晶で囲むことにより、環境外からのさまざまな周波数のノイズをブロックすることも可能である。もう 1 つの重要な特性は、パスバンドにおける音響波の透過である。非常に狭い通過帯域を得られれば、高分解能での音響波の選択的透過が可能になる。上記に示したように、バンドギャップとパスバンドを自由に調整できれば、フォノンニック結晶は音響波を制御するための非常に便利なデバイスになると期待できる。

一方、フォノンニック結晶には周期構造であるために避けられない問題が存在する。1 つは、バンドギャップの幅を任意に大きく取することは出来ないことである。フォノンニック結晶のバンド構造には、周波数の変化とともに必ず、バンドギャップとパスバンドが交互に現れる。このため、導波路の作製や環境ノイズの遮断にこの系を用いた場合、そのバンドギャップを挟むパスバンドからの音響波を遮蔽出来ないため、漏れの大きい音響波回路や不完全な環境ノイズの遮断となる。もう 1 つの問題は、高分解能の音響波バンドパスフィルターを考えた場合、周波数幅が著しく狭いパスバンドでは分散関係が平坦になることである。その結果、著しく群速度が低下し、高分解能で音響波をフィルタリングすることには限界がある。

本学位論文では、フォノンニック結晶に代わりこれらの課題を解決する新たな構造として、周期構造の代わりに乱れた構造を用いたフォノンニックデバイスを提言する。乱れた構造における波動の伝播は、非周期構造による散乱により決定されるため、周期構造のようなバンド構造を示さない。しかしながら、乱れた構造中の波動

の散乱経路と、その反対の向きの経路をたどる波動は互いに干渉し、その現象は全ての散乱経路にわたり生じる。その結果、波動は局在する。この現象をアンダーソン局在と呼ぶ。アンダーソン局在は空間次元に強く依存し、次元数が少ないほど局在しやすい。系のサイズに対し無限に大きな極限を考えた場合、3次元では構造のランダムさや周波数に依存して、局在状態と非局在状態が入れ替わるが、2次元および1次元系では全ての状態が局在する。1次元系は2次元系に比べさらに局在しやすいことから、例えば以下に述べる1次元ランダム超格子系を用いて、全ての周波数領域で音響波を阻止する系を実現できると期待される。さらに、特定の周波数で非局在モードを生成させ、アンダーソン局在現象を生じさせなくすることで、周波数選択的に音響波を透過させるバンドパスフィルターを実現することが可能となる。

先行研究 [17] を例にこれについて説明をする。最も単純なランダム構造の1つとして、2層の異なる材料をランダムに積み重ねることで構築される1次元ランダム超格子を考える。GaAs層とAlAs層で構成される1次元ランダム超格子中のフォノンの伝播は解析的に求められており、その平均透過率 $\langle T \rangle$ は、アンダーソン局在のため、広い周波数領域で透過率が著しく減少すること、および層の厚さが音響波の半波長の整数倍に等しい場合は共鳴透過により非局在化し、透過率がほぼ1になることが分かっている。この非局在化は共振周波数付近でのみ発生するため、伝送速度は周波数に対して鋭いピークを示す。共振周波数は層の厚さに関係しているため、周波数を選択できるパスフィルターが可能となる。このように、音響波のアンダーソン局在現象と非局在化を利用して、音響波伝搬を制御することができる。

上述の1次元ランダム超格子を用いる事で新たなタイプの音響デバイスが実現できるように思われるが、その実応用のためには明らかにすべき課題がある。上記の先行研究におけるランダム超格子中の音響波のアンダーソン局在の議論では、平面波が界面に垂直入射することを仮定した、スカラー波に対するものであった。そのため、音響波がランダム超格子に斜めに入射し、縦波および横波からなるベクトル波となる場合の局在状態については全く理解されていない。この、斜め入射の場合の局在に関する情報は、1次元ランダム超格子を音響デバイスとして用いる上で大変重要である。縦波または横波のいずれかが1次元ランダム超格子に斜めに入射すると、縦波と横波の両方のモードの反射波と透過波が、境界条件を満たすように生成される。縦波と横波は音速が異なり、伝播に沿った位相変化も異なる。さらに、スネルの法則により、それらの波数ベクトルは平行ではない。このようなモード変換は、1次元ランダム超格子内のすべての界面で生じる。縦波と横波はすべての界面で接続されており、個々のモードの1次元ランダム超格子の干渉条件は異なる。そうすれば、1つの仮説として、アンダーソン局在によりどちらかのモードのフォノンが減衰しても、別のモードのフォノンが伝達されることが考えられる。つまり、異なるモードの音響波の相互変換のために、実質的に音響波伝達が減衰しない可能性が生じる。もう1つの仮説として、界面でのモード結合により、系に特有な新しい音響波モードが生じることが考えられる。このような音響波モードが存在する場合、1つ目の仮説とは異なり、音響波の非弾性散乱がない限り音響波のコヒーレンスを維持するため、アンダーソン局在化により音響波の伝播が減衰すると考えられる。本学位論文の第1の目的は、上述の斜入射の場合の音響波の伝播とモード変換の効果を明らかにする事である。

また、上述の1次元ランダム超格子は固体を構成要素として用いているため、一旦作製すると、その周波数特性を随意に変更することは出来ない。目的に応じて音響波の透過と反射を制御出来れば、デバイスとしての応用範囲が広がる。これを実現する方法として、1次元ランダム超格子を構成する物質として固体と液体の組み合わせを用い、固体層を移動させることにより、透過と反射の周波数特性を制御することが考えられる。本学位論文の第2の目的は、固体／液体1次元ランダム超格子を用いた音響波の透過制御の方法を確立すること

である。

本学位論文の構成は以下の通りである：

第2章では、1次元ランダム超格子に垂直入射した音響波のアンダーソン局在の理論的な解析について紹介するとともに、アンダーソン局在に特有な、(1) 音響波の透過率の周波数依存性、(2) サンプル依存による透過率の揺らぎと平均透過率との普遍的な関係、(3) 透過率の確率分布について紹介する。

第3章では、音響波が1次元ランダム超格子に斜入射する場合の、モード変換が引き起こすアンダーソン局在への影響、および透過特性への影響を明らかにする。これにより、斜め入射の場合でもアンダーソン局在が音響波の伝播を制限していることを示す。

第4章では、実用上必要になると考えられる、固体／液体1次元ランダム超格子の透過特性の制御方法について明らかにし、1次元ランダム超格子のデバイスへの応用の可能性を示す。

最後に第5章では、結論と今後の展望を述べる。

参考文献

- [1] P. W. Anderson, Phys. Rev. **102**, 1008 b(1958).
- [2] B. Souillard, in *Chance and Matter*, edited by J. Souletie, J. Vannimenus, and R. Stora (North-Holland, Amsterdam, 1987), p. 305.
- [3] *Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media*, edited by P. Sheng (World Scientific, Singapore, 1990).
- [4] S. John, H. Sompolinsky, and M. J. Stephen, Phys. Rev. B **27**, 5592 (1983).
- [5] T. R. Kirkpatrick, Phys. Rev. B **31**, 5746-5755 (1985)
- [6] S. John, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486-2489 (1987)
- [7] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, B. O'Quinn, Nature **413**, 597-602 (2001).
- [8] C. Monthus and T. Garel Phys. Rev. B **81**, 224208 (2010)
- [9] J. Ravichandran, A. K. Yadav, R. Cheaito, P. B. Rossen, A. Soukiassian, S. J. Suresha, J. C. Duda, B. M. Foley, C.-H. Lee, Y. Zhu, A. W. Lichtenberger, J. E. Moore, D. A. Muller, D. G. Schlom, P. E. Hopkins, A. Majumdar, R. Ramesh, M. A. Zurbuchen, Nat. Mater. **13**, 168-172 (2014)
- [10] M. N. Luckyanova, J. Mendoza, H. Lu, B. Song¹, S. Huang, J. Zhou, M. Li, Y. Dong, H. Zhou, J. Garlow, L. Wu, B. J. Kirby, A. J. Grutter, A. A. Puretzky, Y. Zhu, M. S. Dresselhaus, A. Gossar² and G. Chen, Science Advances (2018): Vol. 4, no. 12, eaat9460 DOI: 10.1126/sciadv.aat9460
- [11] T. Juntunen, O. Vänskä, and I. Tittonen Phys. Rev. Lett. **122**, 105901 (2019)
- [12] S. D. Pinski, W. Schirmacher and R. A. Römer EPL **97**, 16007(2012).
- [13] H. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 125-126(2003).
- [14] M. Sagev, Y. Silberberg and D. N. Christodoulides, Nat. Photon. **7**, 197 (2013).
- [15] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [16] S. Tamura and F. Nori, Phys. Rev. B **41**, 7941 (1990)
- [17] N. Nishiguchi, S. Tamura and F. Nori, Phys. Rev. B **25**, 2515 (1993).

第 2 章

1 次元ランダム超格子中のアンダーソン局在

本学位論文の目的は、第 1 章に述べたように、2 種類の波動が各々アンダーソン局在を生じている場合に、それらの間の相互作用がアンダーソン局在に及ぼす効果を明らかにする事である。この議論をするためには、個々の波動のアンダーソン局在の示す現象を理解する必要がある。この章では、先行研究 [1] により明らかにされている、1 次元ランダム超格子を伝播する横波音響フォノンのアンダーソン局在による平均透過率の周波数依存性、およびこの局在現象に特有な透過率の揺らぎと平均透過率の普遍的な関係、透過率の確率分布を紹介する。

以下、2.1 節では、1 次元ランダム超格子のモデル、および基本となる方程式の導入を行う。2.2 節では、グリーン関数による解析の概要を述べ、平均透過率の解析解を導出する。2.3 節では局在現象を記述する Lyapunov 指数と平均自由行程長の議論をし、2.4 節において、透過率の揺らぎおよび平均透過率との関係を示す。2.5 節では、透過率の確率分布の具体的な表式を示す。

2.1 ランダム超格子のモデル

互いに異なる材料 A、材料 B からなる 2 種の単位構造が、それぞれ $1/2$ の確率で積み重ねて積層されたランダム超格子を考える。模式図を図 2.1 に示す。単位構造の厚さはそれぞれ d_A 、 d_B とする。連続して同じ種類の構造が選択された場合、それらの境界は認識されず、より厚い構造と同等になる。そこで、以下では同じ種類の単位構造が連続する部分を「セグメント」として定義し、材料 A からなるセグメントを A セグメント、材料 B からなるセグメントを B セグメントと呼ぶ。A セグメントの厚さを D_A とすると、その期待値 $\langle D_A \rangle$ は

$$\begin{aligned}\langle D_A \rangle &= d_A \cdot \frac{1}{2} + 2d_A \cdot \frac{1}{2^2} + 3d_A \cdot \frac{1}{2^3} + \cdots \\ &= 2d_A\end{aligned}\tag{2.1}$$

となる。同様に B セグメントの厚さを D_B とすると、その期待値 $\langle D_B \rangle$ は

$$\langle D_B \rangle = 2d_B\tag{2.2}$$

となる。

簡単のため、材料 A と材料 B の弾性係数は同じ μ であるとし、比重 ρ_A と ρ_B で区別されるものとする。

ランダム超格子は材料 A の基材および検出器に挟まれており、基材から生じた横波フォノンがランダム超格子を通り抜け、検出器で観測されるとする。伝播方向を x 軸に、積層構造の界面は x に対し垂直と仮定すると、界面ではフォノンのモード変換は生じない。

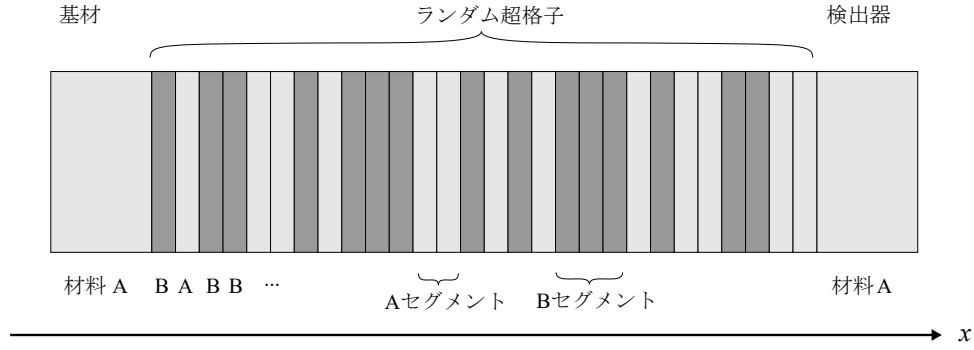


図 2.1 2 種の材料からなるランダム超格子の模式図

ランダム超格子を伝播するフォノンは 1 次元の波動方程式

$$[\rho(x)\omega^2 + \mu\partial_x^2] u(x, \omega) = 0 \quad (2.3)$$

に従う。ここで、 $\rho(x)$ は位置 x における密度、 ω は角周波数、 μ は剛性率、 $u(x, \omega)$ は横波の変位とした。また、ランダム超格子の厚さを L とすると、位置 x は $0 \leq x \leq L$ の範囲がランダム超格子、 $x < 0$ が基材、 $x > L$ が検出器内に対応するため、 $\rho(x)$ は $0 \leq x \leq L$ では ρ_A か ρ_B のいずれか、 $x < 0$ および $x > L$ では ρ_A の値をとる。簡単のため、以降では $\rho_A < \rho_B$ を仮定するが、 $\rho_A > \rho_B$ でも結果は同様に成り立つ。

この系を透過するフォノンの透過率を求めるため、式 (2.3) の Green 関数を考える。 $\omega_{\pm} = \omega \pm i\delta$ (但し δ は十分小さい数) とし、遅延 Green 関数を $G_{\omega+}$ 、先進 Green 関数を $G_{\omega-}$ とすると、それぞれの Green 関数は次式を満たす。

$$[\rho(x)\omega_{\pm}^2 + \mu\partial_x^2] G_{\omega\pm}(x, x') = \delta(x - x') \quad (2.4)$$

また、ランダム超格子がすべて材料 A からなるときの Green 関数を非摂動 Green 関数 $G_{\omega\pm}^0$ と考えると、 $G_{\omega\pm}^0$ は

$$(\rho_A\omega_{\pm}^2 + \mu\partial_x^2) G_{\omega\pm}^0(x, x') = \delta(x - x') \quad (2.5)$$

を満足し、その解は次式で与えられる [2]。

$$G_{\omega\pm}^0(x, x') = \mp \frac{i}{2\rho_A c_A \omega} e^{\pm i\omega|x-x'|/c_A} \quad (2.6)$$

ここで c_A は材料 A の音速であり、 $c_A = \sqrt{\mu/\rho_A}$ 、 c_B は材料 B の音速であり、 $c_B = \sqrt{\mu/\rho_B}$ で与えられる。

ランダム超格子を透過するフォノンの透過率 T は、 $G_{\omega\pm}$ を用いて

$$T(L, \omega) = (2\rho_A c_A \omega)^2 G_{\omega+}(L, 0) G_{\omega-}(L, 0) \quad (2.7)$$

と書ける。

2.2 ランダム超格子を伝播するフォノンのアンサンブル平均透過率

本節では最初に、式 (2.4) 中の遅延 Green 関数 $G_{\omega+}(x, x')$ および先進 Green 関数 $G_{\omega-}(x, x')$ を、前方に伝播するフォノン (添字 $j = 1$) と後方に伝播するフォノン (添字 $j = 2$) に対する 2×2 の行列表現 $[g_{\omega\pm}]_{ij}$ として定式化する。ここで、フォノンの後方散乱の起源として複素質量密度差分 ζ^* を導入し、Green 関数の行列表現 $[g_{\omega\pm}]_{ij}$ を、 ζ^* で表される成分 κ_j を要素にもつ 2×2 の S 行列を用いる。

次いで、超格子構造因子 S_{SL} の 2 乗のアンサンブル平均 $\langle |S_{\text{SL}}|^2 \rangle$ と κ_j の 2 乗の平均値のアンサンブル平均 $\overline{\langle |\kappa_j|^2 \rangle}$ が関係付けられること、および $\langle |S_{\text{SL}}|^2 \rangle$ と後方散乱係数 Γ と関係付けられることから、フォノンの平均自由行程 ℓ を求める。

最後に、フォノンのアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ を、ランダム超格子のサイズ L とフォノンの平均自由行程 ℓ の関数として求める。

2.2.1 1 粒子 Green 関数

以降、密度の表現として、 $\rho(x)$ に代え、材料 A の密度 ρ_A との差分である質量密度差分 $\delta\rho(x) = \rho(x) - \rho_A$ を用いる。式 (2.4) は

$$\begin{aligned} (-\rho_A \omega_{\pm}^2 - \mu \partial_x^2) G_{\omega\pm}(x, x') &= -\delta(x - x') + \delta\rho(x) \omega_{\pm}^2 G_{\omega\pm}(x, x') \\ &= -\delta(x - x') + \omega_{\pm}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_1) \delta\rho(x_1) G_{\omega\pm}(x_1, x') dx_1 \end{aligned} \quad (2.8)$$

となる。式 (2.5) から、非摂動 Green 関数 $G_{\omega\pm}^0$ は形式的に

$$G_{\omega\pm}^0(x, x') = (\rho_A \omega_{\pm}^2 + \mu \partial_x^2)^{-1} \delta(x - x') \quad (2.9)$$

を満たすので、これを式 (2.8) に適用すると

$$G_{\omega\pm}(x, x') = G_{\omega\pm}^0(x, x') + \omega_{\pm}^2 \int_{-\infty}^{\infty} G_{\omega\pm}^0(x, x_1) \delta\rho(x_1) G_{\omega\pm}(x_1, x') dx_1 \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} &= G_{\omega\pm}^0(x, x') + \omega_{\pm}^2 \int_{-\infty}^{\infty} G_{\omega\pm}^0(x, x_1) \delta\rho(x_1) G_{\omega\pm}^0(x_1, x') dx_1 \\ &\quad + \omega_{\pm}^4 \iint_{-\infty}^{\infty} G_{\omega\pm}^0(x, x_1) \delta\rho(x_1) G_{\omega\pm}^0(x_1, x_2) \delta\rho(x_2) G_{\omega\pm}^0(x_2, x') dx_1 dx_2 + \cdots \end{aligned} \quad (2.11)$$

となる。式 (2.10) は $G_{\omega\pm}(x, x')$ に対する自己無撞着方程式であり、第 2 項は質量密度差分 $\delta\rho(x)$ による摂動項と捉えられ、フォノンの前方散乱および後方散乱の源となる。式 (2.11) は、式 (2.10) の右辺をさらに級数展開した式である。図 2.2 に、遅延 Green 関数 $G_{\omega+}(x, x')$ について、以上の式のダイアグラムを示す。結果的に前方散乱となる、後方散乱が偶数回の過程のみを図示した。

となる。同様に、(b) の過程において $x' < x_2 < x_1 < x$ と想定すると、(b) の過程に対応する項 I_2 は

$$\begin{aligned} I_2 &= \omega_{\pm}^4 \int_{x'}^x dx_1 G_{\omega+}^0(x, x_1) \delta\rho(x_1) \int_{x'}^{x_1} dx_2 G_{\omega+}^0(x_1, x_2) \delta\rho(x_2) G_{\omega+}^0(x_2, x') \\ &= G_{\omega+}^0(x, x') \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right) \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right) \int_{x'}^{x_1} \delta\rho(x_2) dx_2 \end{aligned} \quad (2.13)$$

となり、(d) の過程において $x' < x_3 < x_2 < x_1 < x$ を想定すると、(d) の過程に対応する項 I_3 は

$$I_3 = G_{\omega+}^0(x, x') \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right) \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right) \int_{x'}^{x_1} \delta\rho(x_2) dx_2 \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right) \int_{x'}^{x_2} \delta\rho(x_3) dx_3 \quad (2.14)$$

となる。同様に、 n 次の前方散乱に対応する項 I_n は

$$I_n = G_{\omega+}^0(x, x') \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right)^n \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \int_{x'}^{x_1} \delta\rho(x_2) dx_2 \cdots \int_{x'}^{x_{n-1}} \delta\rho(x_n) dx_n \quad (2.15)$$

となる。これらの値を用いて、全ての前方散乱の項のみを厳密に組み入れた Green 関数 $\tilde{G}_{\omega+}^0(x, x')$ を、次式で表すことができる。

$$\tilde{G}_{\omega+}^0(x, x') = \sum_{n=0}^{\infty} I_n \quad (2.16)$$

ここで、式 (2.13) を改めて式 (2.17) と書く。積分変数 x_1 と x_2 の入れ替えにより式 (2.18) が、さらに積分順序の入れ替えにより式 (2.19) が得られる。

$$I_2 = G_{\omega+}^0(x, x') \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right)^2 \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \int_{x'}^{x_1} \delta\rho(x_2) dx_2 \quad (2.17)$$

$$= G_{\omega+}^0(x, x') \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right)^2 \int_{x'}^x \delta\rho(x_2) dx_2 \int_{x'}^{x_2} \delta\rho(x_1) dx_1 \quad (2.18)$$

$$= G_{\omega+}^0(x, x') \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right)^2 \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \int_{x_1}^x \delta\rho(x_2) dx_2 \quad (2.19)$$

以上の結果から、 I_2 は式 (2.17) と式 (2.19) のいずれにも等しいことから

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{2} G_{\omega+}^0(x, x') \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \right)^2 \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \left(\int_{x'}^{x_1} \delta\rho(x_2) dx_2 + \int_{x_1}^x \delta\rho(x_2) dx_2 \right) \\ &= \frac{1}{2} G_{\omega+}^0(x, x') \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \right)^2 \end{aligned} \quad (2.20)$$

となる。同様に I_n は次式となる。

$$I_n = \frac{1}{n!} G_{\omega+}^0(x, x') \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \right)^n \quad (2.21)$$

結局、全ての前方散乱の項のみを組み入れた Green 関数 $\tilde{G}_{\omega+}^0(x, x')$ は、式 (2.16) と式 (2.21) より

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\omega+}^0(x, x') &= G_{\omega+}^0(x, x') \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \right)^n \\ &= G_{\omega+}^0(x, x') \exp \left(-\frac{i\omega}{2\rho_A c_A} \int_{x'}^x \delta\rho(x_1) dx_1 \right) \\ &= G_{\omega+}^0(x, x') \exp(i[\Phi(x) - \Phi(x')]) \end{aligned} \quad (2.22)$$

となる。ここで、位相 $\Phi(x)$ は

$$\Phi(x) = -\frac{\omega}{2\rho_A c_A} \int_0^x \delta\rho(x_1) dx_1 \quad (2.23)$$

と定義した。

式 (2.22) で表される $\tilde{G}_{\omega+}^0(x, x')$ を用いて、式 (2.10) を表す。図 2.2 中 (a)、(b)、(d) のような前方散乱のみを含む過程は全て $\tilde{G}_{\omega+}^0(x, x')$ に組み込まれているため、(c) や (e)~(g) のような偶数回だけ後方散乱する過程のみを考慮し、 $G_{\omega+}(x, x')$ は

$$G_{\omega+}(x, x') = \tilde{G}_{\omega+}^0 + \int_0^L \int_0^L \tilde{G}_{\omega+}^0(x, x_1) [-\delta\rho(x_1)\omega^2] \tilde{G}_{\omega+}^0(x_1, x_2) [-\delta\rho(x_2)\omega^2] \\ \times G_{\omega+}(x_2, x') \theta(x_2 - x_1) \theta(x - x_1) \theta(x_2 - x') dx_1 dx_2 \quad (2.24)$$

となる。上式は、図 2.3 のダイアグラムに対応する。ここで、 $\tilde{G}_{\omega+}^0(x, x')$ を波線で示した。

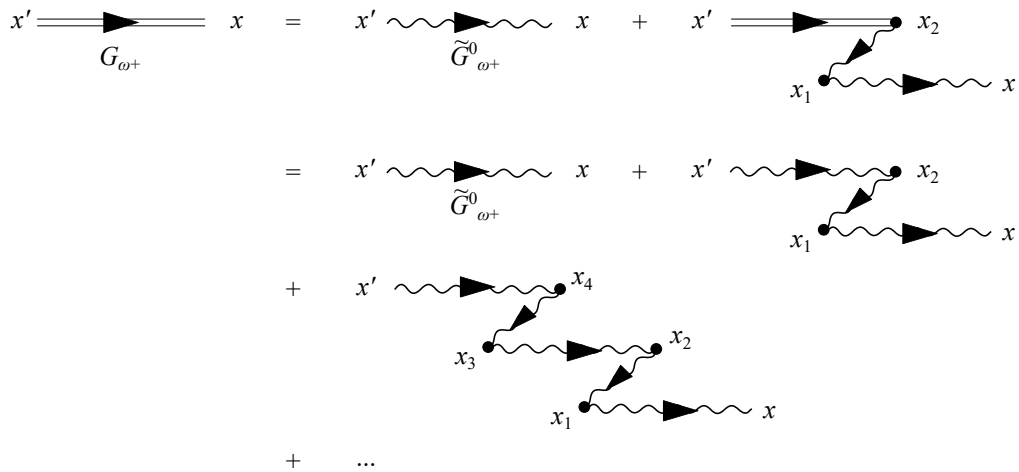


図 2.3 式 (2.24) を表すダイアグラム

式 (2.24) を非摂動 Green 関数 G^0 で表すために、式 (2.24) の両辺に $\exp\{-i[\Phi(x) - \Phi(x')]\}$ をかけ、次式で定義する $\hat{G}(x, x')$ を用いる。

$$\hat{G}_{\omega+}(x, x') = G_{\omega+}(x, x') e^{-i[\Phi(x) - \Phi(x')]} \quad (2.25)$$

式 (2.24) は、次式のようにになる。

$$\hat{G}_{\omega+}(x, x') = G_{\omega+}^0 + \int_0^L \int_0^L G_{\omega+}^0(x, x_1) [-\zeta(x_1)\omega^2] G_{\omega+}^0(x_1, x_2) [-\zeta^*(x_2)\omega^2] \\ \times \hat{G}_{\omega+}(x_2, x') \theta(x_2 - x_1) \theta(x - x_1) \theta(x_2 - x') dx_1 dx_2 \quad (2.26)$$

ここで、 $\zeta(x)$ は複素質量密度差分関数であり、次式で定義される。

$$\zeta(x) = \delta\rho(x)e^{-2i\Phi(x)} \quad (2.27)$$

複素質量密度差分 ζ^* はフォノンを波数 k から波数 $-k$ に、 ζ は波数 $-k$ から波数 k に変換する作用がある。そこで、Green 関数の 2×2 の行列表現 $[g_{\omega+}]_{ij}$ を導入する。添字の i, j の 1 と 2 はそれぞれ、フォノンの波数 k と波数 $-k$ の成分に対応する。非摂動 Green 関数 $g_{\omega+}^0$ に対する対角行列要素を以下で定義する。

$$\begin{aligned} [g_{\omega+}^0(x, x')]_{11} &= G_{\omega+}^0(x, x')\theta(x - x') \\ &= -\frac{i}{2\rho_A c_A \omega} \theta(x - x') e^{i\omega(x-x')/c_A} \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$[g_{\omega+}^0(x, x')]_{22} = G_{\omega+}^0(x, x')\theta(x' - x) \quad (2.29)$$

式 (2.26) を、行列要素 $g_{\omega+}$ と $g_{\omega+}^0$ を用いて再定義すると、次式となる。

$$[g_{\omega+}(x, x')]_{11} = [g_{\omega+}^0(x, x')]_{11} + \int_0^L \int_0^L [g_{\omega+}^0(x, x_1)]_{11} [-\zeta(x_1)\omega^2] [g_{\omega+}^0(x_1, x_2)]_{22} [-\zeta^*(x_2)\omega^2] [g_{\omega+}(x_2, x')]_{11} dx_1 dx_2 \quad (2.30)$$

ここで、 $[g_{\omega+}]_{11}$ は式 (2.25) の $\hat{G}$ と同一である。もう一つの対角要素 $[g_{\omega+}]_{22}$ は式 (2.30) から、 ζ を ζ^* に、添字の 1 を 2 に読み替えることで得られる。後方散乱の回数が奇数の場合も、同様に扱うことができる。非対角要素 $[g_{\omega+}]_{21}$ は次式で定義される。

$$[g_{\omega+}(x, x')]_{21} = G_{\omega+}^0(x, x') \exp(i[\Phi(x) + \Phi(x')]) \quad (2.31)$$

これは複素質量密度差分 ζ と ζ^* を使って次式のように展開できる。

$$\begin{aligned} [g_{\omega+}(x, x')]_{21} &= \int_0^L [g_{\omega+}^0(x, x_1)]_{22} [-\zeta^*(x_1)\omega^2] [g_{\omega+}^0(x_1, x')]_{11} dx_1 \\ &\quad \int_0^L \int_0^L [g_{\omega+}(x, x_2)]_{21} [-\zeta(x_2)\omega^2] [g_{\omega+}^0(x_2, x_1)]_{22} [-\zeta^*(x_1)\omega^2] [g_{\omega+}^0(x_1, x')]_{11} dx_1 dx_2 \end{aligned} \quad (2.32)$$

行列要素 $[g_{\omega+}]_{12}$ は、式 (2.32) の ζ を ζ^* に、添字の 1 を 2 に読み替えることで、次式のように定義される。

$$[g_{\omega+}(x, x')]_{12} = G_{\omega+}^0(x, x') \exp(-i[\Phi(x) + \Phi(x')]) \quad (2.33)$$

ここまでで定義した $g_{\omega+}$ に対する等式は、Pauli のスピン行列 σ_3 と $\sigma^{(\pm)} = \sigma_1 \pm i\sigma_2$ を用いて、次式のように表すことができる。

$$\left\{ 2\rho_A \omega [ic_A \sigma_3 \partial_x + \omega_+] - \frac{\omega^2}{2} [\sigma^{(+)} \zeta(x) + \sigma^{(-)} \zeta^*(x)] \right\} g_{\omega+}(x, x') = \delta(x - x') \quad (2.34)$$

この式 (2.34) を解くために、Abrikosov と Ryzhkin が 1 次元の電子伝導問題を扱うために開発した数学的な方法 [8] に従う。最初に、次式で定義される 2×2 の S 行列を導入する。

$$\left\{ 2\rho_A \omega [ic_A \sigma_3 \partial_x + \omega_+] - \frac{\omega^2}{2} [\sigma^{(+)} \zeta(x) + \sigma^{(-)} \zeta^*(x)] \right\} S_{\omega}(x, x') = 0 \quad (2.35)$$

複素密度ゆらぎ ζ と ζ^* の項は互いに交換しないため、 S 行列は位置順序演算子 T_x を用いて以下のように書ける。

$$S_\omega(x, x') = T_x \exp \left(i \frac{\omega}{c_A} \int_{x'}^x \left\{ \sigma_3 - \frac{1}{4\rho_A} [\sigma^{(+)}\zeta(x_1) - \sigma^{(-)}\zeta^*(x_1)] \right\} dx_1 \right) \quad (2.36)$$

演算子 T_x は、位置依存する演算子を x が増える順に右から左へと並べ替える。 $x > x_1 > x'$ のような x_1 に対して、遅延 Green 関数 $g_{\omega+}(x, x')$ は $g_{\omega+}(x_1, x')$ に対し次式で関連付けられる。

$$g_{\omega+}(x, x') = S_\omega(x, x_1) g_{\omega+}(x_1, x') \quad (2.37)$$

この関係式は $x' > x > x_1$ であっても成り立つ。しかし、 $x > x' > x_1$ に対しては、 $g_{\omega+}(x, x')$ と $g_{\omega+}(x_1, x')$ の関係は式 (2.37) では与えられない。それは、 $g_{\omega+}(x, x')$ は式 (2.34) の δ 関数に由来する追加の項を持つためである。 $x > x' > x_1$ の領域では、 $g_{\omega+}(x, x')$ は次式で与えられる。

$$g_{\omega+}(x, x') = S_\omega(x, x_1) g_{\omega+}(x_1, x') - \frac{i}{2\rho_A c_A \omega} S_\omega(x, x') \sigma_3 \quad (2.38)$$

式 (2.34)、(2.37)、(2.38) は先進 Green 関数に対しても、遅延 Green 関数と同様に成り立つ。

ここで、式 (2.37) と (2.38) の遅延 Green 関数が満たすべき境界条件を考える。式 (2.30) の一連の摂動項 ($[g_{\omega+}(x, x')]_{11}$ で始まり、 $[g_{\omega+}^0]_{11}$ で終わる項) と $[g_{\omega+}^0(x, x')]_{11}$ は、 $x' \rightarrow \infty$ もしくは $x \rightarrow -\infty$ で 0 となることを考えると、 $[g_{\omega+}(x, x')]_{11}$ が満たすべき境界条件は

$$[g_{\omega+}(x, x')]_{11} \rightarrow 0 \text{ at } x \rightarrow -\infty \text{ or } x' \rightarrow \infty \quad (2.39)$$

となる。同様に考えて、遅延 Green 関数の他の要素に対する境界条件は以下となる。

$$[g_{\omega+}(x, x')]_{22} \rightarrow 0 \text{ at } x \rightarrow \infty \text{ or } x' \rightarrow -\infty \quad (2.40)$$

$$[g_{\omega+}(x, x')]_{12} \rightarrow 0 \text{ at } x \rightarrow -\infty \text{ or } x' \rightarrow -\infty \quad (2.41)$$

$$[g_{\omega+}(x, x')]_{21} \rightarrow 0 \text{ at } x \rightarrow \infty \text{ or } x' \rightarrow \infty \quad (2.42)$$

式 (2.38) で $x_1 \rightarrow -\infty$ の極限をとると、式 (2.39)～式 (2.42) の境界条件から

$$[g_{\omega+}(x, x')]_{\alpha\beta} = [S_\omega(x, -\infty)]_{\alpha 2} [g_{\omega+}(-\infty, x')]_{2\beta} - \frac{i}{2\rho_A c_A \omega} [S_\omega(x, x') \sigma_3]_{\alpha\beta} \theta(x - x') \quad (2.43)$$

となる。もし $x \rightarrow \infty$ の極限をとり、 $\alpha = 2$ とおくと、式 (2.43) の左辺は消える。従って、

$$[g_{\omega+}(-\infty, x')]_{2\beta} = \frac{i}{2\rho_A c_A \omega} [S_\omega(\infty, x') \sigma_3]_{2\beta} \quad (2.44)$$

を得る。式 (2.44) を (2.43) に代入することで、遅延 Green 関数は次式で表せる。

$$[g_{\omega+}(x, x')]_{\alpha\beta} = \frac{i}{2\rho_A c_A \omega} \left\{ \frac{[S_\omega(x, -\infty)]_{\alpha 2} [S_\omega(\infty, x') \sigma_3]_{2\beta}}{[S_\omega(\infty, -\infty)]_{22}} - [S_\omega(x, x') \sigma_3]_{\alpha\beta} \theta(x - x') \right\} \quad (2.45)$$

同様に、先進 Green 関数は次式で表せる。

$$[g_{\omega-}(x, x')]_{\alpha\beta} = \frac{i}{2\rho_A c_A \omega} \left\{ \frac{[S_\omega(x, -\infty)]_{\alpha 1} [S_\omega(\infty, x') \sigma_3]_{1\beta}}{[S_\omega(\infty, -\infty)]_{11}} - [S_\omega(x, x') \sigma_3]_{\alpha\beta} \theta(x - x') \right\} \quad (2.46)$$

式 (2.45) と式 (2.46) は、後で透過率の導出に用いる。さらに、 S 行列の相互作用表現を導入すると、それぞれの ω に対して

$$S_\omega(x, x') = e^{i\omega x \sigma_3 / c_A} S(x, x') e^{-i\omega x' \sigma_3 / c_A} \quad (2.47)$$

となる。 $S(x, x')$ を明示的に書くと

$$S(x, x') = T_x \exp \left\{ -i \frac{\omega}{4\rho_A c_A} \int_{x'}^x [\sigma^{(+)} \zeta_\omega(x_1) - \sigma^{(-)} \zeta_\omega^*(x_1)] dx_1 \right\} \quad (2.48)$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sigma^{(+)} \zeta_\omega(x) &= e^{-i\omega x \sigma_3 / c_A} \frac{1}{2} \sigma^{(+)} \zeta(x) e^{i\omega x \sigma_3 / c_A} \\ &= \frac{1}{2} \sigma^{(+)} \zeta(x) e^{-2i\omega x / c_A} \end{aligned} \quad (2.49)$$

となる。注記すべきこととして、 $\zeta(x)$ も $\zeta^*(x)$ も超格子の外 ($x > L$ および $x < 0$) では 0 になるため、相互作用表現の中の S 行列の $S(\infty, -\infty)$ は、 $S(L, 0)$ と等しく、

$$S(\infty, -\infty) = S(L, 0) \quad (2.50)$$

となる。

次に、系を厚さ Δ の層に分け、式 (2.48) の積分を行う。このために、 κ_j を

$$\kappa_j = -i \frac{\omega}{2\rho_A c_A} \int_{x_j}^{x_{j+1}} \zeta_\omega(y) dy \quad (2.51)$$

で定義する。ここで $x_j (= j\Delta)$ は j 番目と $j+1$ 番目の層の界面の位置を表す。 κ_j とその複素共役を用いて、式 (2.48) の積分は和に置き換えることができ、 S 行列は κ_j と κ_j^* を含む積になる。 κ_j と κ_j^* の項を 2 次まで取ること、 S 行列の表式として

$$S(x, x') = \prod_{j=x'/\Delta}^{x/\Delta} \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{2} |\kappa_j|^2 & \kappa_j \\ \kappa_j^* & 1 + \frac{1}{2} |\kappa_j|^2 \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

が得られる。

2.2.2 フォノンの平均自由行程 ℓ

S 行列の成分である $\{\kappa_j\}$ はランダム超格子の具体的な並び方に応じ変化するが、その統計的性質は、ランダム超格子に共通した性質を反映すると考えられる。式 (2.51) は質量密度差分 $\delta\rho(x)$ と、材料 A と B の音速を用いて表せる。式 (2.27) と式 (2.49) を式 (2.51) に代入すると、

$$\kappa_j = -i \frac{\omega}{2\rho_A c_A} \int_{x_j}^{x_{j+1}} dy \delta\rho(y) \exp \left[-i \int_0^y \frac{2\omega}{c(y')} dy' \right] \quad (2.53)$$

となる。ここで、音速 $c(x)$ は材料 A で c_A 、材料 B で c_B の値をとる関数とし、 $\bar{\rho} = \rho_B - \rho_A$ として

$$c_B \simeq c_A \left(1 + \frac{\delta\rho}{2\rho_A} \right)^{-1} \quad (2.54)$$

の近似を用いた。次に、 $\{\kappa_j\}$ のランダム超格子中の平均 $\overline{\kappa_j}$ を

$$\overline{\kappa_j} = \frac{\Delta}{L} \sum_{j=0}^{L/\Delta} \kappa_j \quad (2.55)$$

と定義する。式 (2.55) に式 (2.53) を代入すると、

$$\overline{\kappa_j} = \frac{\Delta}{L} \left(\frac{-i\omega}{2\rho_A c_A} \right) \int_0^L dy \delta\rho(y) \exp \left[-i \int_0^y \frac{2\omega}{c(y')} dy' \right] \quad (2.56)$$

となる。超格子の構造因子 $S_{\text{SL}}(L, \omega)$ を

$$S_{\text{SL}}(L, \omega) \equiv \frac{-2i\omega}{c_B \delta \bar{\rho}} \int_0^L dy \delta\rho(y) \exp \left[-i \int_0^y \frac{2\omega}{c(y')} dy' \right] \quad (2.57)$$

と定義すると、式 (2.56) との比較から

$$\overline{\kappa_j} = \frac{\Delta}{L} \frac{\delta \bar{\rho} c_B}{4\rho_A c_A} S_{\text{SL}}(L, \omega) \quad (2.58)$$

のように、 $\overline{\kappa_j}$ を超格子の構造因子 $S_{\text{SL}}(L, \omega)$ で表すことができる。超格子の構造因子 $S_{\text{SL}}(L, \omega)$ 中の積分は、セグメントが開始する材料が決まれば行うことができ、超格子の構造因子 $S_{\text{SL}}(L, \omega)$ はそれぞれの界面から反射されるフォノンの振幅の重ね合わせで書ける。セグメント B から始まるランダム超格子に対しては、

$$S_{\text{SL}}(L, \omega) = \sum_{j=1}^M \left(1 - e^{-i\theta_{2j-1}} \right) \exp \left[-i \sum_{m=0}^{2j-2} \theta_m \right] \quad (2.59)$$

となる。ここで、 $\theta_m = 2\omega D_m / c_m$ ($\theta_0 \equiv 0$ とする) であり、 D_m は m 番目のセグメントの厚さ、 c_m は音速、 M はセグメント B の数である。セグメント A から始まるランダム超格子では

$$S_{\text{SL}}(L, \omega) = \sum_{j=1}^M \left(1 - e^{-i\theta_{2j}} \right) \exp \left[-i \sum_{m=0}^{2j-1} \theta_m \right] \quad (2.60)$$

となる。ランダム超格子の厚さ L はそれを構成するセグメントの厚さの和で与えられ、

$$L = \sum_{m=1}^N D_m \quad (2.61)$$

である。ここで、 N は超格子の総セグメント数である。

ランダム超格子の取り得る並び方すべてにわたるアンサンブル平均を考える。 $\overline{\kappa_j}$ ($\propto S_{\text{SL}}$) のアンサンブル平均 $\langle \overline{\kappa_j} \rangle$ は $S_{\text{SL}}(L, \omega)$ がランダムな変数であるために 0 となる。 $j \neq k$ に対する積 $\kappa_j \kappa_k^*$ のアンサンブル平均も、同様の理由で 0 となる。一方、 $\overline{\langle |\kappa_j|^2 \rangle}$ は 0 にならず、

$$\begin{aligned} \overline{\langle |\kappa_j|^2 \rangle} &= \frac{L}{\Delta} \langle |\overline{\kappa_j}|^2 \rangle \\ &= \frac{\Delta}{L} R^2 \langle |S_{\text{SL}}(L, \omega)|^2 \rangle \end{aligned} \quad (2.62)$$

となる。ここで、 $R \equiv R_{BA}$ は材料 B から材料 A の界面に入射するときの音響波の反射係数であり、式 (2.58) 中の係数について、 $\delta\bar{\rho}$ の最低次の項を取ると $\delta\bar{\rho}/4\rho_A c_A$ は材料 B から材料 A の界面に入射する音響波の反射係数 R_{BA} に等価であることを用いた。 R は音響インピーダンス Z を用いて

$$\begin{aligned} R \equiv R_{BA} &= \frac{Z_B - Z_A}{Z_B + Z_A} \\ &= -R_{AB} \end{aligned} \quad (2.63)$$

である。ここで、 Z_A と Z_B は材料 A および材料 B の音響インピーダンスで、 $Z_A = \rho_A c_A$ 、 $Z_B = \rho_B c_B$ である。

$\langle |k_j|^2 \rangle$ は複素質量密度差分 $\zeta(x)$ で引き起こされるフォノンの後方散乱係数 Γ に関係付けられる。これは $\langle |k_j|^2 \rangle$ の $\zeta(x)$ による表現から分かる。式 (2.51) に式 (2.49) を代入すると、 $\langle |k_j|^2 \rangle$ は

$$\langle |k_j|^2 \rangle = \Delta \frac{\omega^2}{4\rho_A^2 c_A^2 L} \left\langle \left| \int_0^L \zeta(x) e^{-2i\omega x/c_A} dx \right|^2 \right\rangle \quad (2.64)$$

となる。Born 近似中の後方散乱係数 Γ は

$$\Gamma(L, \omega) = \frac{\omega^2}{4\rho_A^2 c_A^2 L} \left\langle \left| \int_0^L \zeta(x) e^{-2i\omega x/c_A} dx \right|^2 \right\rangle \quad (2.65)$$

となる。式 (2.62)、式 (2.64)、式 (2.65) を比べると、後方散乱に制限される平均自由行程 ℓ は

$$\ell(L, \omega)^{-1} = \frac{\Gamma(L, \omega)}{c_A} = R^2 \frac{\langle |S_{SL}(L, \omega)|^2 \rangle}{L} \quad (2.66)$$

となる。従って、 $\langle |k_j|^2 \rangle$ は ℓ を用いて

$$\langle |k_j|^2 \rangle = \frac{\Delta}{\ell(L, \omega)} \quad (2.67)$$

となる。

以降、超格子の構造因子の絶対値の 2 乗 $\langle |S_{SL}(L, \omega)|^2 \rangle$ の具体的な表式を求める。奇数の N に対して、最初と最後のセグメントは同じである。偶数の N に対して、A セグメントで始まる超格子は B セグメントで終わり、B セグメントで始まる超格子は A セグメントで終わる。もし超格子の端が A セグメントであれば、ランダム超格子を挟んでいる材料 A 基材および検出器の界面との反射は生じない。この場合、端のセグメントは基材もしくは検出器の一部と捉えられる。従って、そのランダム超格子はセグメント B が終端であり、セグメント数が $N = 2M - 1$ のランダム超格子と考えて良い。従って、大きな M に対してランダム超格子の長さ L は $L = (\langle D_A \rangle + \langle D_B \rangle)M$ となる。ここで、 $\langle D_A \rangle$ は A セグメントの厚さの平均、 $\langle D_B \rangle$ は B セグメントの厚さの平均とした。

式 (2.59) から、 $\langle |S_{SL}(L, \omega)|^2 \rangle$ は

$$|S_{SL}(L, \omega)|^2 = \sum_{n=1}^M (1 - e^{-i\theta_{2n-1}}) + \sum_{m=2}^M \sum_{n=1}^{m-1} (1 - e^{-i\theta_{2m-1}})(e^{-i\theta_{2n-1}} - 1) \exp \left[-i \sum_{j=2n}^{2m-2} \theta_j \right] + \text{c.c.} \quad (2.68)$$

となる。隣り合うセグメントの厚さには相関は無いので、 θ_j の A セグメントに関連付けられた部分 ($\theta_j = \theta_A \equiv 2\omega D_A/c_A$) と B セグメントに関連付けられた部分 ($\theta_j = \theta_B \equiv 2\omega D_B/c_B$) は独立した変数である。このことか

ら、セグメント当たりの超格子係数の 2 乗のアンサンブル平均 $I_s = \langle |S_{SL}(L, \omega)|^2 \rangle / N$ は

$$I_s(L, \omega) = \text{Re} \left[\frac{(1 - \epsilon_A)(1 - \epsilon_B)}{1 - \epsilon_A \epsilon_B} \right] + \frac{(\langle D_A \rangle + \langle D_B \rangle)}{L} \text{Re} \left[\left(\frac{1 - \epsilon_B}{1 - \epsilon_A \epsilon_B} \right)^2 \epsilon_A \right] \quad (2.69)$$

となる。ここで、 $\epsilon_A = \langle e^{-i\theta_A} \rangle = e^{-i\theta_A} / (2 - e^{-i\theta_A})$ 、 $\epsilon_B = \langle e^{-i\theta_B} \rangle = e^{-i\theta_B} / (2 - e^{-i\theta_B})$ とした。式 (2.69) は、式 (2.66) によりランダム超格子の後方散乱係数 Γ を与える。式 (2.69) の第 2 項はランダム超格子の厚さ L に依存し、 $L \rightarrow \infty$ の極限で 0 となる。

次に、 $\epsilon_A = 1$ かつ $\epsilon_B \neq 1$ の場合を考える。これは共鳴条件の 1 つで、フォノンが超格子を完全に透過できる場合であり、例えば材料 A の単位構造の厚さの 2 倍が、フォノンの波長の整数倍となる場合である。このとき、超格子は実効的に材料 B のバルク層とみなされ、超格子の両端でのみフォノンの反射が存在する。この状態では、式 (2.69) の第 2 項のみが残る。従って、第 2 項は超格子/基材境界と超格子/検出器境界で生じる散乱と考えることができる。これは共鳴周波数近辺で重要となる。一方、 $\epsilon_A \neq 1$ かつ $\epsilon_B = 1$ のとき、すなわち材料 B の共鳴では、式 (2.69) の両方の項が 0 となる。この非対称性は、超格子が材料 A の基材と検出器に挟まれていることに由来する。

以上の考察に基づき、平均自由行程 ℓ を、超格子で制限される ℓ_{SL} と、境界の散乱で制限される ℓ_b に分けて考えて良いことが分かる。

$$\ell(L, \omega)^{-1} = \ell_{SL}(\omega)^{-1} + \ell_b(L, \omega)^{-1} \quad (2.70)$$

ここで、

$$\ell_{SL}(\omega)^{-1} = \frac{2R^2}{\langle D_A \rangle + \langle D_B \rangle} \text{Re} \left[\frac{(1 - \epsilon_A)(1 - \epsilon_B)}{1 - \epsilon_A \epsilon_B} \right] \quad (2.71)$$

$$\ell_b(L, \omega)^{-1} = \frac{2R^2}{L} \text{Re} \left[\left(\frac{1 - \epsilon_B}{1 - \epsilon_A \epsilon_B} \right)^2 \epsilon_A \right] \quad (2.72)$$

である。

2.2.3 アンサンブル平均透過率

$g_{\omega\pm}$ は式 (2.25)、式 (2.30)、式 (2.31)、式 (2.33) より、 $G_{\omega\pm}$ と位相係数が異なるのみなので、アンサンブル平均透過率 $\langle T(L, \omega) \rangle$ を Green 関数 $g_{\omega\pm}(x, x')$ を用いて表すことができる。式 (2.7) の透過率のアンサンブル平均を取ることで、アンサンブル平均透過率 $\langle T(L, \omega) \rangle$ は

$$\langle T(L, \omega) \rangle = (2\rho_A c_A \omega)^2 \langle [g_{\omega+}(L, 0)]_{11} [g_{\omega-}(L, 0)]_{22} \rangle \quad (2.73)$$

となる。式 (2.45)、(2.46)、(2.50) を式 (2.73) に代入し、

$$\langle T(L, \omega) \rangle = \left\langle \frac{1}{[S(L, 0)]_{11} [S(L, 0)]_{22}} \right\rangle \quad (2.74)$$

と書くことができる。この具体的な表式を得るため、以下で定義される関数列 $\{A_n(L)\}$

$$A_n(x) = \left\langle \frac{\{[S(x, 0)]_{12} [S(x, 0)]_{21}\}^n}{\{[S(x, 0)]_{11} [S(x, 0)]_{22}\}^{n+1}} \right\rangle \quad (2.75)$$

を導入する。求めるべきアンサンブル平均透過率 $\langle T(L, \omega) \rangle$ は $A_0(L)$ に等しい。式 (2.52) から、 $S(x, 0)$ と $S(x - \Delta, 0)$ の関係

$$S(x, 0) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{2}|\kappa|^2 & \kappa \\ \kappa^* & 1 + \frac{1}{2}|\kappa|^2 \end{pmatrix} S(x - \Delta, 0) \quad (2.76)$$

が得られる。ここで、 κ は式 (2.53) で定義され、間隔 $[x - \Delta, x]$ で積分したものである。

式 (2.76) を (2.75) に代入し、 $A_n(x)$ を $|\kappa|^2$ の項まで展開すると、 $A_n(x)$ に関する漸化式

$$A_n(x) - A_n(x - \Delta) = \langle |\kappa|^2 \rangle \{ n^2 A_{n-1}(x - \Delta) + (n + 1)^2 A_{n+1}(x - \Delta) - [n^2 + (n + 1)^2] A_n(x - \Delta) \} \quad (2.77)$$

を得る。ここで、 $\langle |\kappa|^2 \rangle$ を $\langle |\kappa_j|^2 \rangle$ で置き換えた。 $\langle |\kappa_j|^2 \rangle$ は式 (2.67) の $\langle |\kappa_j|^2 \rangle$ に一致する。式 (2.67) を式 (2.77) に代入し、 $\Delta \rightarrow 0$ の極限をとると、 $A_n(t)$ は

$$\frac{dA_n(t)}{dt} = n^2 A_{n-1}(t) + (n + 1)^2 A_{n+1}(t) - [n^2 + (n + 1)^2] A_n(t) \quad (2.78)$$

を満たす。ここで、 $x = L$ とし、 $t = L/\ell$ と変数変換した。次に、関数列 $\{A_n(L)\}$ の母関数 $A(z, t)$ を考える。 $A(z, t)$ は

$$A(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) z^n \quad (2.79)$$

で与えられる。 $A(z, t)$ が満たす偏微分方程式を導出することができ、

$$\frac{\partial A}{\partial t} = z(1 - z)^2 \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} + (1 - z)(1 - 3z) \frac{\partial A}{\partial z} - (1 - z)A \quad (2.80)$$

となる。 S 行列が単位行列となる $t = 0$ もしくは $L = 0$ では、 $A_n = \delta_{n,0}$ となる。従って、母関数の境界条件は $A(z, t = 0) = 1$ である。この境界条件を満たす式 (2.80) の解は

$$A(z, t) = \int_0^{\infty} \frac{2\pi\lambda \tanh \pi\lambda}{\cosh \pi\lambda} \frac{1}{1 - z} F\left(\frac{1}{2} + i\lambda, \frac{1}{2} - i\lambda, -1; \frac{z}{1 - z}\right) e^{-(\frac{1}{4} + \lambda^2)t} d\lambda \quad (2.81)$$

である。ここで、 $F(\alpha, \beta, \gamma; y)$ は超幾何関数である。

アンサンブル平均透過率 $\langle T(L, \omega) \rangle$ は $A(z = 0, t)$ で与えられるため、式 (2.81) に $z = 0$ を代入することで、 $\langle T(L, \omega) \rangle$ の解析解

$$\langle T(L, \omega) \rangle = \int_0^{\infty} \frac{2\pi\lambda \tanh \pi\lambda}{\cosh \pi\lambda} \exp\left[-\left(\frac{1}{4} + \lambda^2\right)t\right] d\lambda \quad (2.82)$$

が得られる。この式から、 $\langle T \rangle$ は $t = L/\ell$ に対し単調減少することが分かる。また、周波数依存性は平均自由行程 ℓ にのみ現れることが分かる。

2.2.4 数値計算結果との比較

具体的なランダム超格子に対し、式 (2.82) のアンサンブル平均透過率 $\langle T(L, \omega) \rangle$ の解析解と転送行列法による数値計算結果を比較する。いま、ランダム超格子の材料として AlAs (材料 A) と GaAs (材料 B) を考え、(100) 面を界面として積層されているとする。剛性率 μ はいずれも 58.9 GPa と近似する。比重は

$\rho_{\text{AlAs}} = 3760 \text{ kg/m}^3$ 、 $\rho_{\text{GaAs}} = 5890 \text{ kg/m}^3$ とする。このとき、界面のフォノン反射率 $R = 0.088$ となる。厚さは $d_{\text{AlAs}} = d_{\text{GaAs}} = 34 \text{ \AA}$ とし、これは 12 原子層に対応する。層数は合計 1000 層 ($L=1000$) とする。

これらの値を式 (2.70) に代入するとフォノンの平均自由行程 $\ell(L, \omega)$ が求まり、さらに $t = L/\ell(L, \omega)$ を式 (2.82) に代入すると、アンサンブル平均透過率 $\langle T(L, \omega) \rangle$ が求められる。図 2.4 に $\langle T(L, \omega) \rangle$ の解析解と、転送行列法による数値計算結果を示す。数値計算結果は 300 の独立したランダム超格子に対し平均した値である。

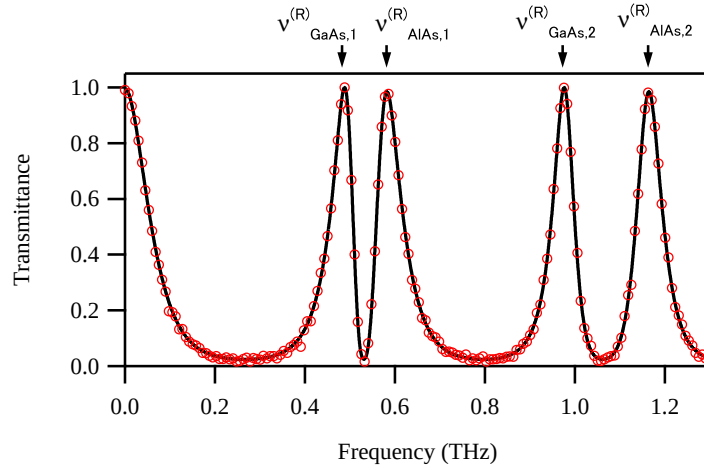


図 2.4 フォノンの透過スペクトル。黒実線が解析解、赤丸が 300 のランダム超格子に対する転送行列法による数値計算結果

アンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ は、低透過率の領域と高透過率のピークを交互に示す。低透過率の領域は、散乱波の間の干渉に起因するアンダーソン局在に由来する。透過率のピーク周波数は、共鳴条件 ($\ell_{\text{SL}} = \infty$) を満たす周波数であり、そのときのアンサンブル平均透過率はほぼ 1 となる。共鳴条件となる共鳴周波数 $\nu_n^{(R)}$ は次式で与えられる。

$$\nu_n^{(R)} = n \times \frac{c}{d} \quad (2.83)$$

ここで、 n は整数、 c は音速、 d は単位構造の厚さである。いま着目しているランダム超格子において、横モードの波の音速は $c_{\text{GaAs}} = 3320 \text{ m/s}$ および $c_{\text{AlAs}} = 3970 \text{ m/s}$ であるので、GaAs 層では $\nu_{\text{GaAs},n}^{(R)} = n \times 0.489 \text{ THz}$ 、AlAs 層では $\nu_{\text{AlAs},n}^{(R)} = n \times 0.583 \text{ THz}$ である。図 2.4 中、 $\nu = \nu_{\text{AlAs},n}^{(R)}$ ($n = 1, 2$) では $\langle T \rangle$ が 1 よりもわずかに減少している。式 (2.70) において、 $L \rightarrow \infty$ の極限で ℓ_b^{-1} は 0 となる一方、これは L/ℓ_b は系のサイズに関わらず定数であることから、 $\langle T \rangle$ のわずかな減少は、ランダム超格子の両端での AlAs/GaAs 層の界面反射に由来すると理解できる。

2.3 Lyapunov 指数とフォノンの平均自由行程

局在状態は局在長 ξ もしくは Lyapunov 指数 $\gamma = 1/\xi$ で特徴付けられる。Lyapunov 指数は透過率の対数のアンサンブル平均を用いて次式で定義される [3]。

$$\gamma = - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \langle \ln T(L, \omega) \rangle \quad (2.84)$$

また、Lyapunov 指数は $z (= 1/T)$ に対する任意の関数 $f(z)$ が満たす以下の再帰的差分式に従う [4]。

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle f \rangle = \left\langle (2z - 1) \frac{\partial f}{\partial z} \right\rangle + \left\langle z(z - 1) \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right\rangle \quad (2.85)$$

$f(z) = \log z$ とし、初期条件を $t = L/\ell = 0$ ($L = 0$ もしくは $\ell \rightarrow \infty$) において $\langle f(z) \rangle = 0$ とすると、

$$\langle -\ln T \rangle = t \quad (2.86)$$

となる。式 (2.84) と式 (2.86) から、Lyapunov 指数 γ は

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{2\ell_{\text{SL}}(\omega)} \quad (2.87)$$

となる。従って、局在長 ξ はフォノンの平均自由行程 ℓ_{SL} の 2 倍に等しい。

大きさが有限な系では、フォノンの局在長 ξ が系の大きさ L より大きい場合は非局在状態とみなされる。そこで、臨界局在長 ξ_{cr} を

$$\xi_{\text{cr}} = \gamma_{\text{cr}}^{-1} \equiv L \quad (2.88)$$

と定義する。Lyapunov 指数 γ が臨界値 γ_{cr} より小さければ非局在状態である。臨界値に対応するフォノンの平均自由行程は $\ell_{\text{cr}} = L/2$ となる。また、式 (2.82) に $t = t_{\text{cr}} = L/\ell_{\text{cr}} = 2$ を代入することで、臨界値におけるアンサンブル平均透過率 T_{cr} は 0.26 であることが分かる。

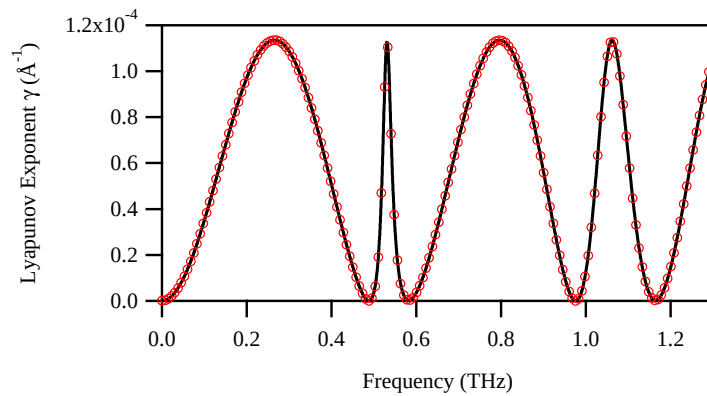


図 2.5 Lyapunov 指数。黒実線が解析解、赤丸が 300 のランダム超格子に対する転送行列法による数値計算結果

図 2.5 に、解析的に得られた Lyapunov 指数 γ を転送行列法による数値計算結果と合わせて示す。数値計算したランダム超格子の層数は 1000 層であるので、基材および検出器との境界面に由来するサイズ効果は無視できるほど小さい。

γ は周期的に $\nu_n^{(B)} = n \times 0.266$ THz でピークを持つことがわかる。これは周期的な超格子のブラッグ周波数に一致する。

Lyapunov 指数は共鳴周波数 $\nu_{j,n}^{(R)}$ ($j=\text{AlAs or GaAs}$) で 0 になり、それらの周囲で次式のように周波数の 2 乗に比例し変化する。

$$\gamma(\nu) = \frac{8\pi^2 R^2}{d_{\text{AlAs}} + d_{\text{GaAs}}} \frac{d_j^2}{c_j^2} \left(\nu - \nu_{j,n}^{(R)} \right)^2 \quad (2.89)$$

2.4 透過率の揺らぎ

非局在状態のフォノンの透過率は、多数の散乱フォノンからの干渉により、ランダム超格子毎に大きく揺らぐと考えられる。透過率の揺らぎの指標として、次式で定義される透過率の標準偏差 ΔT を考える。

$$\Delta T = \sqrt{\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2} \quad (2.90)$$

$\langle T^2 \rangle$ は式 (2.85) で $f(z) = 1/z$ とおくと、

$$\begin{aligned} \langle T^2 \rangle &= -\frac{d}{dt} \langle T \rangle \\ &= -\int_0^\infty \frac{2\pi\lambda \tanh \pi\lambda}{\cosh \pi\lambda} \left(\frac{1}{4} + \lambda^2 \right) \exp \left[-\left(\frac{1}{4} + \lambda^2 \right) t \right] d\lambda \end{aligned} \quad (2.91)$$

と求められる。この式から、透過率の標準偏差 ΔT も $t = L/\ell$ のみの関数となり、ランダム超格子や平均自由行程 ℓ の詳細には依存しないことが分かる。これは、 $\langle T \rangle$ と ΔT の関係は普遍的なものであることを意味する。

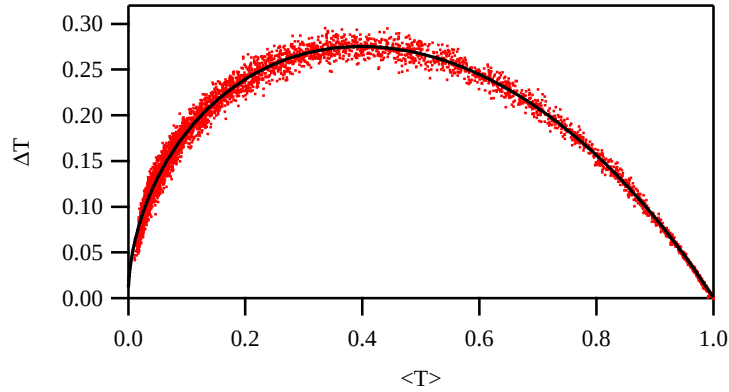


図 2.6 ΔT と $\langle T \rangle$ の関係。黒実線が解析解、赤点が 300 のランダム超格子に対する転送行列法による数値計算結果

図 2.6 に透過率の標準偏差 ΔT とアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ の関係を示す。図 2.6 の結果から、局在したフォノン ($\langle T \rangle \sim 0$) に対しては、揺らぎは小さく、 $\langle T \rangle$ が増加するとともに増加することが分かる。 ΔT は

$\langle T \rangle \simeq 0.4$ となるときに最大値を取る。これは系のサイズと平均自由行程が同程度の $L/\ell = 1.27$ となる場合である。

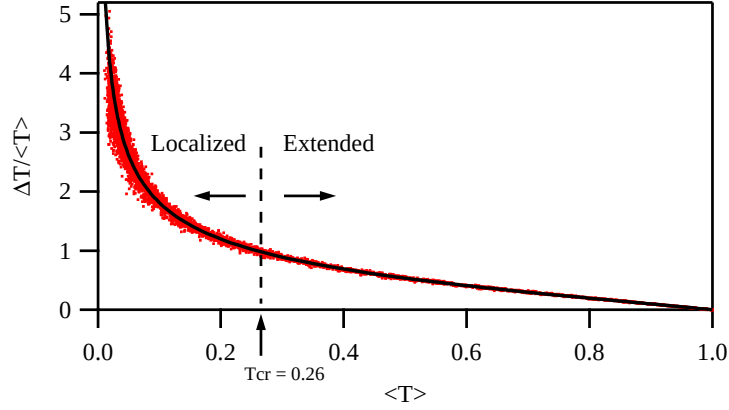


図 2.7 透過率の相対揺らぎ $\Delta T/\langle T \rangle$ と $\langle T \rangle$ の関係。黒実線が解析解、赤点が 300 のランダム超格子に対する転送行列法による数値計算結果

図 2.7 に透過率の相対的な揺らぎ $\Delta T/\langle T \rangle$ とアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ の関係を示す。透過率の相対的な揺らぎは局在したフォノン ($\langle T \rangle \sim 0$) に対し 1 より大きくなり、 $\langle T \rangle = 0$ で発散することが分かる。局在状態と非局在状態の境界 ($\langle T \rangle = T_{cr} = 0.26$) では相対揺らぎは約 1 となり、非局在状態では 1 より小さく、 $\langle T \rangle = 1$ で 0 となる。

1 次元金属では、電導度もしくは抵抗値は本節で定義したフォノン透過率と同じ特性をもつことが知られている。Anderson ら [5] はスケール変換法を適用し、抵抗値が大きくなるスケールにおいては抵抗値の対数が正規分布に従うことを見出した。フォノン透過率に対しても同様に調べるため、透過率の対数 $\ln T$ の標準偏差とアンサンブル平均透過率 $\langle \ln T \rangle$ の比率を調べた。式 (2.85) において、 $f(z) = (\log z)^2$ としたときの結果から、 $\ln T$ の標準偏差は

$$\Delta \ln T = \left\{ 2 \int_0^1 [1 - \langle T \rangle] dt \right\}^{1/2} \quad (2.92)$$

と求められる。

図 2.8 に $\ln T$ の相対揺らぎを示す。図 2.8 から、 $\ln T$ の相対揺らぎが $\langle T \rangle = 0$ で 1 になり発散せず、 $t = L/\ell$ の増加に伴い単調減少することが分かる。従って、 $\ln T$ は、 $\Delta T/\langle T \rangle$ が $\langle T \rangle \sim 0$ で発散する T とは異なり、局在したフォノンに対し良い指標となることが分かる。

$\langle T \rangle$ に対する ΔT のふるまいの理由は、以下のように考えることができる。 $\langle \ln T \rangle$ は Lyapunov 指数に比例するため、 $\ln T$ の相対揺らぎは、 $\Delta \gamma/\gamma$ と等価である。非局在で透過率が高い状態 ($\langle T \rangle \sim 1$) では、 γ は 0 に近くなる。図 2.8 より、 $\langle T \rangle \sim 1$ に対応する $-\langle \ln T \rangle \sim 0$ では $\Delta \gamma/\gamma \simeq 1$ となるので、 $\Delta \gamma \sim 0$ となる。これが、 $\langle T \rangle \sim 1$ の領域では ΔT は十分小さくなる理由である。

そして、 $\Delta \gamma/\gamma$ は $\gamma (\propto t = L/\ell)$ が大きくなるにつれ減少する。局在長の揺らぎ $\Delta \xi/\xi$ は $\Delta \gamma/\gamma$ に等しく、従って $\Delta \xi$ は常に ξ より小さい。非局在領域では、超格子のサイズ L は ξ より小さいが、 $\Delta \xi$ とは同程度になり得

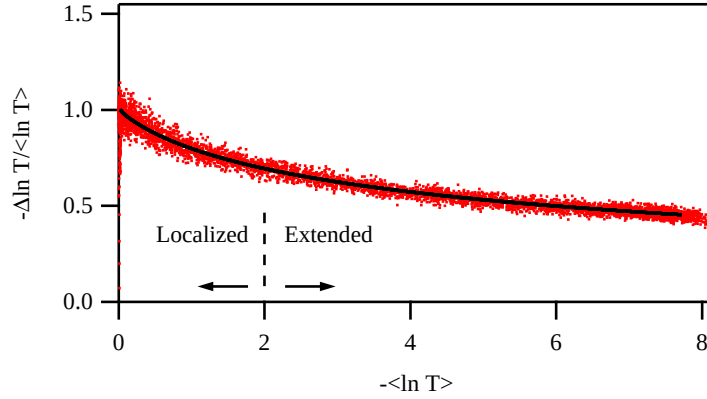


図 2.8 $\ln T$ の相対揺らぎ $\Delta \ln T / \langle \ln T \rangle$ と $-\langle \ln T \rangle = t$ の関係黒実線が解析解、赤点が 300 のランダム超格子に対する転送行列法による数値計算結果

る、 $\Delta \xi \lesssim \xi$ であるためである。この領域では、透過率は局在長 ξ もしくは Lyapunov 指数 γ の揺らぎにより大きくなり得る。

局在領域では、局在長の揺らぎ $\Delta \xi$ は、 $\Delta \xi < \xi \ll L$ であるため、サイズ L の超格子より十分短い。従って、透過率の揺らぎ ΔT は小さくなり、 $\langle T \rangle \approx 0$ では 0 になる。しかし、局在長の揺らぎ $\Delta \xi$ は $\Delta T / \langle T \rangle$ が $\langle T \rangle \approx 0$ で発散するため、局在領域でも透過率に影響を与えうる。

2.5 透過率の確率分布

以降では、ランダム超格子中の透過率 T の確率分布を調べる。共鳴周波数では透過率 1 で、その分布関数は $T=1$ を中心とする δ 関数様のピークを持つと考えられる。電子の局在問題とのアナロジーから、局在したフォノンの確率分布は $\ln T^{-1}$ に応じたガウス分布になると期待される。 $t = L/\ell$ のときに $z = 1/T$ となる確率分布密度を $W(z, t)$ とすると、 z に対する任意の関数 $f(z)$ の平均 $\langle f \rangle$ は

$$\langle f \rangle = \int_1^\infty f(z) W(z, t) dz \quad (2.93)$$

となる。式 (2.93) を式 (2.85) に代入し、部分積分をすると、 $W(z, t)$ に対する Fokker-Plank 方程式

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} [(2z-1)W] + \frac{\partial^2}{\partial z^2} [z(z-1)W] \quad (2.94)$$

を得る。初期条件は $W(z, t=0) = \delta(z-1)$ とした。式 (2.94) は Abrikosov により超幾何関数を用いて解かれており [4]、

$$W(z, t) = \frac{2}{\sqrt{\pi t^3}} \int_{x_0}^\infty \frac{x}{\sqrt{\cosh^2 x - z}} \exp \left[-\left(\frac{t}{4} + \frac{x^2}{t} \right) \right] dx \quad (2.95)$$

となる。ここで、 $x_0 = \cosh^{-1} \sqrt{z}$ とした。

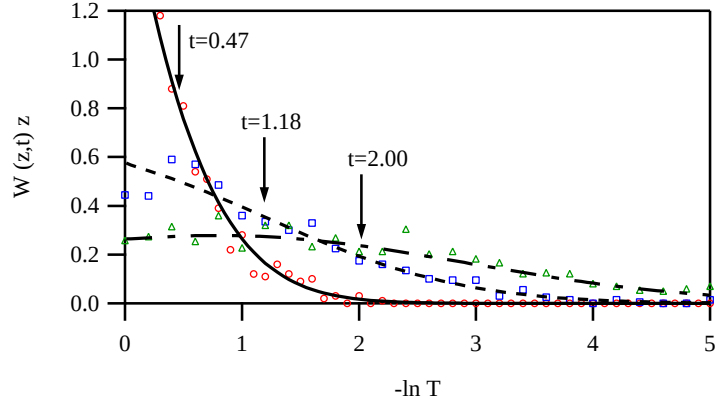


図 2.9 非局在状態に対する $W(z, t)z$ と $-\ln T$ の関係。 $t = 0.47, 1.18, 2.0$ の場合を示した。黒実線が解析解、赤点が 1000 のランダム超格子に対する転送行列法による数値計算結果

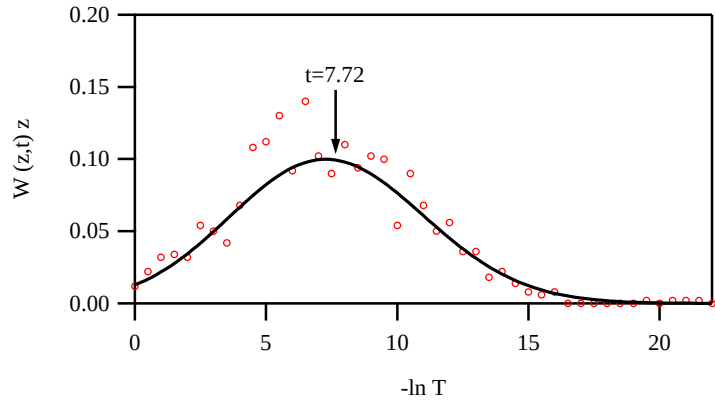


図 2.10 局在状態に対する $W(z, t)z$ と $-\ln T$ の関係。 $t = 7.72$ の場合を示した。黒実線が解析解、赤丸が 1000 のランダム超格子に対する転送行列法による数値計算結果

図 2.9 に、非局在フォノン ($t=0.47, 1.18$ で、 $\langle T \rangle$ は 0.67 および 0.42) と臨界条件 ($t = 2$ 、 $\langle T \rangle = T_{cr} = 0.26$) に対する $\ln T$ の分布を示す。図 2.10 に局在フォノン ($t = 8.22$ 、対応する $\langle T \rangle = 0.02$) に対する $\ln T$ の分布を示す。ここで、縦軸を $W(z, t)z$ とした。

$$\begin{aligned} W(z, t)dz &= W(z, t) \frac{dz}{d \ln T} d \ln T \\ &= -W(z, t)z d(\ln T) \end{aligned} \quad (2.96)$$

であるためである。

図 2.9 の結果から、非局在フォノンの分布は原点の $\ln T = 0$ をピークに持ち、Poisson 分布であることが示唆され、 t の増加に伴いピークの高さは減少することが分かる。ピークの半値全幅は t の増加に伴い増加し、分布曲線は上に凸になるが、非局在フォノンに対してはピーク位置は変化せず $\ln T = 0$ のままである。

図 2.10 の結果から、強く局在した状態、つまり $\langle T \rangle \ll T_{\text{cr}}$ では、Gauss 分布となることが分かる。局在した状態に対する分布 $W(z, t)z$ は式 (2.95) から解析的に求めることができ [4]、

$$W(z, t)z \simeq \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \exp\left[-\frac{(\ln T + t)^2}{4t}\right], \quad t \gg 1 \quad (2.97)$$

である。この式から、ピーク位置は $\ln T = -t$ と 0 でない値を持ち、ピークの半値全幅は $\sqrt{2t}$ であることが分かる。これらの量から、強く局在した状態に対する $\ln T$ の相対揺らぎは $\sqrt{2t}/t = \sqrt{2/t}$ と計算でき、式 (2.92) から解析的に求められる漸近式 ($t \gg 1$ で正しい) と一致する。

以上の結論として、局在したフォノンの透過率は対数正規分布に従い、非局在のフォノンの透過率は Poisson 分布に従う。

参考文献

- [1] N. Nishiguchi, S. Tamura and F. Nori, *Phys. Rev. B* **25**, 2515 (1993).
- [2] 今村, 物理とグリーン関数, 岩波書店 (2016).
- [3] I. M. Lifshitz, S. A. Postur and E. Yankovsky, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988).
- [4] A. A. Abrikosov, *Solid State Commun.* **37**, 997 (1981).
- [5] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **22**, 3519 (1980).
- [6] T. Yoshihiro and N. Nishiguchi, *Phys. Rev. B* **100**, 235441 (2019).
- [7] S. Tamura and F. Nori, *Phys. Rev. B* **41**, 7941 (1990).
- [8] A. A. Abrikosov and I. A. Ryzhkin, *Adv. Phys.* **27**, 147 (1978).
- [9] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F. Y. Juang and P. K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985).
- [10] B. L. Altshuler, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **41**, 530 (1985) [*JETP Lett.* **41**, 648 (1985)]; P. A. Lee and A. D. Stone, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1622 (1985).
- [11] N. Giordano, *Phys. Rev. B* **38**, 4746 (1988); H. Yamada, M. Goda and Y. Aizawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 3501 (1991).
- [12] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **22**, 3519 (1980).
- [13] C. A. Condat and T. R. Kirkpatrick, *Phys. Rev. B* **32**, 495 (1985); **33**, 3102 (1986); D. T. Smith, C. P. Lorenson, R. B. Hallock, K. R. McCall and R. A. Guyer, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1286 (1988); D. T. Smith, C. P. Lorenson and R. B. Hallock, *Phys. Rev. B* **40**, 6648 (1988); K. Kono and S. Nakada, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1185 (1992).

第 3 章

アンダーソン局在におけるモード変換の効果

第 2 章で述べたように、1 次元ランダム超格子は広い周波数領域においてアンダーソン局在によるフォノンの透過を妨げている。このような広い周波数領域にわたる透過率の減少は、周期的なフォノン結晶では現れない。フォノン結晶では必ず伝導帯と禁制帯が交互に現れ、フォノンのエネルギーが透過するためである。ランダム超格子においても、共鳴透過を満たす周波数においてフォノンの透過率は 1 になることがある。しかしながら、その周波数帯域の測度は本質的に 0 であり、実際に透過するフォノンエネルギー量は小さいと考えられる。また、ランダム構造の設計により共鳴透過条件を意図的に消失させ、共鳴透過を人為的に無くすることもできる。これについては、第 4 章で述べる。

以上のような 1 次元ランダム超格子の性質を、実デバイスとして遮音に利用することを考える。例えば特定の方向から入力される特定の周波数の音響波だけ通し、他の音響波は環境ノイズとして遮断するような用途である。このとき、環境ノイズはあらゆる方向から飛来すると考えられ、必ずしもランダム超格子の界面には垂直に入射しない。これは第 2 章で 1 次元ランダム超格子を考えたときには想定していなかったものである。界面に斜めにフォノンが入射した場合、垂直入射とどのように異なるかを以下に予想する。

最初に、フォノンの斜入射により生じるモード変換について述べる。フォノンが斜めに 1 次元ランダム超格子に入射した場合、Snell の法則に従い、界面に平行な方向の波数が保存されるように、入射波と同じ周波数を有した反射波と透過波に分離する。図 3.1 に縦波が界面に入射した場合のモード変換について説明する。

図 3.1 で示した系は、上の赤い領域で示した物質から青い色で示した物質へ、フォノンが入射する様子を表す。半円の半径はフォノンの角振動数をそれぞれの物質における横波および縦波の音速で割った値 ($\frac{\omega}{v_T}$ および $\frac{\omega}{v_L}$) であり、矢印で表したフォノンの波数ベクトルの大きさに対応する。 $\mathbf{q}_L$ は入射した縦波フォノンの波数ベクトルで、界面に入射したときに、界面方向の成分 q_x が共通な縦波透過波 ($\mathbf{q}_{L'}$) と縦波反射波 ($\mathbf{\bar{q}}_{L'}$) を発生する。斜めにフォノンが入射したときには、これらの 3 つの波だけで、変位と応力に関する境界条件を全て満足することは出来ず、横波の透過波 ($\mathbf{q}_{T'}$) と反射波 ($\mathbf{\bar{q}}_{T'}$) も同時に発生する。このようにモード変換が生じる。このモード変換は、縦波から縦波の反射・透過波に加え横波の反射・透過波を生成させるだけでなく、横波が入射した場合も同様に 2 つの波の反射・透過波を生成させる。

次に、モード変換がアンダーソン局在に及ぼす効果について推測する。垂直入射の場合、縦波と横波は干渉条件が異なるため、それぞれ無関係に局在している。音源からのフォノン入射角度が垂直に近く、モード変換

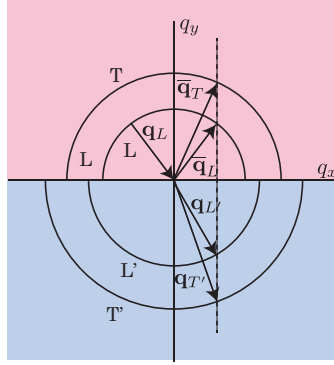


図 3.1 界面におけるモード変換を伴うフォノン透過と反射

が弱い場合にも、縦波と横波はほぼ独立していると考えて良いと思われる。このとき、1つの仮説として考えられるのは、斜入射した縦波フォノンが局在状態で透過できない場合には、モード変換により局在横波モードに変換されることである。さらに、この局在横波モードが、その局在長だけ離れた領域で局在縦波モードにモード変換を繰り返し、結果としてフォノンが透過することで、アンダーソン局在の弱化即ち局在長の増加を招く。この場合、モード変換の影響のために、遮音デバイスとしてランダム超格子を用いることは不適ということになる。

もう1つの仮説として考えられるのは、モード変換は、縦波と横波の「新たな結合モード」を生成することである。界面におけるモード変換はスネルの法則に従っているため、縦波と横波が無関係に存在するのではないためである。この場合は、垂直入射時の単一モードの場合と同様、新たな結合モードに対してもランダム超格子構造に起因するアンダーソン局在が生じ、フォノンは透過できなくなると考えられる。この仮説のもとでは、モード変換があっても、遮音デバイスとしてランダム超格子を用いることは適切ということになる。

以上の、モード変換がもたらす影響の2つの仮説は、フォノンの透過即ち遮音効果について正反対の結果にたどり着くものである。1次元ランダム超格子の遮音素子としての可能性を考えるにあたり、モード変換のアンダーソン局在に及ぼす影響を明らかにする必要がある。このことから、本章ではフォノンのアンダーソン局在におけるモード変換の効果を明確にする。

以下に本章の構成を述べる。3.1節では改めて、1次元ランダム超格子のモデル化、および基本となる方程式の導入を行う。3.2節では、縦波フォノンと横波フォノンが相互作用しながら存在する場合の伝播を記述する、転送行列法の定式化を行う。3.3節では、AlAs/GaAsのランダム超格子において、アンサンブル平均透過率の入射角依存性について述べる。3.4節では、局在の指標となる、Lyapunov指数の入射角依存性について述べる。3.5節では、透過率の揺らぎと確率分布について述べる。3.6節では、これまでの結果をまとめ、フォノンのアンダーソン局在におけるモード変換の効果を述べる。

3.1 ランダム超格子のモデル

第2章同様、互いに異なる材料A、材料Bからなる2種の単位構造が、それぞれ1/2の確率で積み重ねて積層されたランダム超格子を考える。模式図を図3.2に示す。ランダム超格子の積層方向を x 軸にとり、積層構

造の界面は x に対し垂直と仮定し、その面を $y-z$ 面とする。ランダム超格子は材料 A の基材および検出器に挟まれており、基材から生じた縦波フォノン (L)、もしくは横波フォノン (T) が、各層の界面で互いに変換されながらランダム超格子を通り抜け、検出器で観測されるとする。フォノンフォーカシングなどの複雑な現象を避けるため、材料 A、材料 B とともに、等方弾性体を仮定する。

単位構造の厚さはそれぞれ d_A 、 d_B とし、同じ種類の単位構造が連続する部分をセグメントとして定義する。それぞれの材料が選ばれる確率がそれぞれ $1/2$ であることから、A セグメントの厚さの期待値 $\langle D_A \rangle = 2d_A$ 、B セグメントの厚さの期待値 $\langle D_B \rangle = 2d_B$ となる。

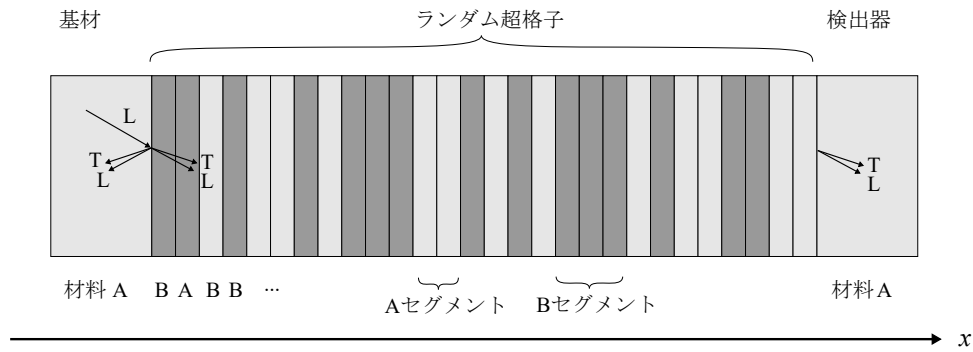


図 3.2 2 種の材料からなるランダム超格子の模式図

ランダム超格子を伝播するフォノンは運動方程式

$$\rho_{[n,S,D]} \ddot{u}_i = \partial_j C_{[n,S,D],ijkl} \partial_k u_l, \quad (i, j, k, l = x, y, z) \quad (3.1)$$

に従う。ここで、 u_i は変位ベクトルの i 番目の成分、 $\rho_{[n,S,D]}$ と $C_{[n,S,D],ijkl}$ は対応する層の密度と弾性ステイフネステンソルである。また、同じ添え字については和を取る。

横波フォノンには偏極ベクトルが異なる 2 つのモードが考えられ、その偏極ベクトルは互いに直交する 2 つの方向を取る。そのうち、フォノンの波数ベクトル $\mathbf{q}$ と x 軸が作る面に平行な成分は、ランダム超格子を伝播する過程で、セグメントの界面で縦波フォノンと互いに変換され得る。一方、フォノンの波数ベクトル $\mathbf{q}$ と x 軸が作る面に直交する成分は、セグメントの界面で異なるモードには変換されず、本質的に、第 2 章で述べた横波フォノンと全く同様のふるまいとなる。そこで、本章ではフォノンの波数ベクトル $\mathbf{q}$ と x 軸が作る面を $x-y$ 平面として定義し、その面内における縦波フォノンと横波フォノンのふるまいを調べる。従って、フォノンの波数ベクトルの z 成分 q_z は常に 0 であり、 z 方向の変位 u_z が常に 0 である横波フォノンを考える。

3.2 転送行列法の定式化

ランダム超格子中のフォノンの伝播を調べるため、転送行列法を用いる。 n 層目、基材 (S)、検出器 (D) 中のフォノンの音速と波数を $c_{[n,S,D],\{L,T\}}$ 、 $\mathbf{q}_{[n,S,D],\{L,T\}}$ とし、次式の通り線形な分散関係

$$\omega = |\mathbf{q}_{[n,S,D],\{L,T\}}| c_{[n,S,D],\{L,T\}} \quad (3.2)$$

を仮定する。ここで、添え字 L と T は LA と TA モードを表す。波数ベクトルは、Snell の法則のため、すべての層で同じ y 成分を持ち、

$$q_y = \frac{\omega}{c_{\{n,S,D\},\{L,T\}}} \sin \theta_{\{n,S,D\},\{L,T\}} \quad (3.3)$$

となる。ここで、 $\theta_{\{n,S,D\},\{L,T\}}$ は、各層で測定されたフォノンの波数ベクトルの x 軸からの角度である。 x_+ 方向に伝播するフォノンの x 方向の波数は、

$$q_{\{n,S,D\},\{L,T\}} = \frac{\omega}{c_{\{n,S,D\},\{L,T\}}} \cos \theta_{\{n,S,D\},\{L,T\}} \quad (3.4)$$

となる。透過フォノンの波数ベクトルを $\mathbf{q}^+$ 、反射フォノンの波数ベクトルを $\mathbf{q}^-$ とすると、

$$\mathbf{q}_{\{n,S,D\},\{L,T\}}^\pm = (\pm q_{\{n,S,D\},\{L,T\}}, q_y, 0) \quad (3.5)$$

であり、対応する偏極ベクトルは

$$\mathbf{e}_{\{n,S,D\},L}^\pm = \mathbf{q}_{\{n,S,D\},L}^\pm / |\mathbf{q}_{\{n,S,D\},L}^\pm| \quad (3.6)$$

$$\mathbf{e}_{\{n,S,D\},T}^\pm = \mathbf{q}_{\{n,S,D\},T}^\pm / |\mathbf{q}_{\{n,S,D\},T}^\pm| \times \mathbf{e}_z \quad (3.7)$$

となる。これらを用いると、 n 層目のフォノンの変位ベクトルは、反射および透過係数 a_n, b_n, c_n, d_n を用いて

$$\mathbf{u}_n = (\mathbf{e}_{n,L}^+ a_n e^{iq_{n,L}x} + \mathbf{e}_{n,L}^- b_n e^{-iq_{n,L}x}) e^{iq_y y} + (\mathbf{e}_{n,T}^+ c_n e^{iq_{n,T}x} + \mathbf{e}_{n,T}^- d_n e^{-iq_{n,T}x}) e^{iq_y y} \quad (3.8)$$

と書ける。基材と検出器層における変位ベクトルも同様に、

$$\mathbf{u}_S = (\mathbf{e}_{S,L}^+ a_S e^{iq_{S,L}x} + \mathbf{e}_{S,L}^- b_S e^{-iq_{S,L}x}) e^{iq_y y} + (\mathbf{e}_{S,T}^+ c_S e^{iq_{S,T}x} + \mathbf{e}_{S,T}^- d_S e^{-iq_{S,T}x}) e^{iq_y y} \quad (3.9)$$

$$\mathbf{u}_D = \mathbf{e}_{D,L}^+ t_L e^{iq_{D,L}(x-l_D)} e^{iq_y y} + \mathbf{e}_{D,T}^+ t_T e^{iq_{D,T}(x-l_D)} e^{iq_y y} \quad (3.10)$$

と書ける。ここで、 a_S と c_S はそれぞれ基材における縦波フォノンと横波フォノンの入射係数、 b_S と d_S はそれぞれ基材における縦波フォノンと横波フォノンの反射係数である。 t_L と t_T はそれぞれ検出器層における縦波フォノンと横波フォノンの透過係数である。ここで、 $l_D = l_{N+1}$ はランダム超格子と検出器層の界面を表す。以上の式 (3.8)、式 (3.9)、式 (3.10) で表される変位ベクトルは、各層内で式 (3.1) の運動方程式を満たす。

y - z 平面内で働く応力ベクトルの x と y 成分は、

$$\sigma_{\{n,S,D\},xX} = C_{\{n,S,D\},11} \partial_x u_{\{n,S,D\},x} + C_{\{n,S,D\},12} \partial_y u_{\{n,S,D\},y} \quad (3.11)$$

$$\sigma_{\{n,S,D\},yX} = C_{\{n,S,D\},44} \partial_x u_{\{n,S,D\},y} + C_{\{n,S,D\},44} \partial_y u_{\{n,S,D\},x} \quad (3.12)$$

となる。ここで、弾性スティフネステンソルは、面心立方材料の Voigt 表記で弾性係数から求められる。

変位ベクトルと応力ベクトルは、隣り合う層の界面で一致することを考慮すると、入射フォノンと透過フォノンの係数に関する以下の式を得ることができる。

$$(a_S, b_S, c_S, d_S)^T = W(t_L, 0, t_T, 0)^T \quad (3.13)$$

ここで、 W は以下で定義される行列である。

$$W \equiv \Lambda_S^{-1} \left[\prod_{n=1}^N \Lambda_n(0) \Lambda_n^{-1}(d_n) \right] \Lambda_D \quad (3.14)$$

さらに、 $\Lambda_n(d_n)$ 、 Λ_S 、 Λ_D も行列である。 $\Lambda_n(d_n)$ の行列要素は以下で与えられる。

$$\lambda_{11}^n(d_n) \equiv e^{iq_{n,L}d_n} \cos \theta_{n,L} \quad (3.15)$$

$$\lambda_{12}^n(d_n) \equiv -e^{-iq_{n,L}d_n} \cos \theta_{n,L} \quad (3.16)$$

$$\lambda_{13}^n(d_n) \equiv -e^{iq_{n,T}d_n} \sin \theta_{n,T} \quad (3.17)$$

$$\lambda_{14}^n(d_n) \equiv e^{-iq_{n,T}d_n} \sin \theta_{n,T} \quad (3.18)$$

$$\lambda_{21}^n(d_n) \equiv e^{iq_{n,L}d_n} \sin \theta_{n,L} \quad (3.19)$$

$$\lambda_{22}^n(d_n) \equiv e^{-iq_{n,L}d_n} \sin \theta_{n,L} \quad (3.20)$$

$$\lambda_{23}^n(d_n) \equiv e^{iq_{n,T}d_n} \cos \theta_{n,T} \quad (3.21)$$

$$\lambda_{24}^n(d_n) \equiv e^{-iq_{n,T}d_n} \cos \theta_{n,T} \quad (3.22)$$

$$\lambda_{31}^n(d_n) \equiv \frac{C_{n,11} \cos^2 \theta_{n,L} + C_{n,12} \sin^2 \theta_{n,L}}{c_{n,L}} e^{iq_{n,L}d_n} \quad (3.23)$$

$$\lambda_{32}^n(d_n) \equiv \frac{C_{n,11} \cos^2 \theta_{n,L} + C_{n,12} \sin^2 \theta_{n,L}}{c_{n,L}} e^{-iq_{n,L}d_n} \quad (3.24)$$

$$\lambda_{33}^n(d_n) \equiv -\frac{(C_{n,11} - C_{n,12}) \sin \theta_{n,T} \cos \theta_{n,T}}{c_{n,T}} e^{iq_{n,T}d_n} \quad (3.25)$$

$$\lambda_{34}^n(d_n) \equiv -\frac{(C_{n,11} - C_{n,12}) \sin \theta_{n,T} \cos \theta_{n,T}}{c_{n,T}} e^{-iq_{n,T}d_n} \quad (3.26)$$

$$\lambda_{41}^n(d_n) \equiv \frac{C_{n,44} \sin 2\theta_{n,L}}{c_{n,L}} e^{iq_{n,L}d_n} \quad (3.27)$$

$$\lambda_{42}^n(d_n) \equiv -\frac{C_{n,44} \sin 2\theta_{n,L}}{c_{n,L}} e^{-iq_{n,L}d_n} \quad (3.28)$$

$$\lambda_{43}^n(d_n) \equiv \frac{C_{n,44} \cos 2\theta_{n,T}}{c_{n,T}} e^{iq_{n,T}d_n} \quad (3.29)$$

$$\lambda_{44}^n(d_n) \equiv -\frac{C_{n,44} \cos 2\theta_{n,T}}{c_{n,T}} e^{-iq_{n,T}d_n} \quad (3.30)$$

Λ_S と Λ_D の行列要素は、上の式で $d_n = 0$ とおき、基材 (S) もしくは検出器 (D) の材料の弾性定数および入射角 $\theta_{S,\{L,T\}}$ もしくは $\theta_{D,\{L,T\}}$ を代入し求める。

W の行列要素を w_{ij} と置くと、透過係数 t_L と t_T は入射係数 a_S と c_S と以下のように関連付けることができる。

$$\begin{pmatrix} t_L \\ t_T \end{pmatrix} = \frac{1}{w_{11}w_{33} - w_{13}w_{31}} \begin{pmatrix} w_{33} \\ -w_{31} \end{pmatrix} a_S + \frac{1}{w_{11}w_{33} - w_{13}w_{31}} \begin{pmatrix} -w_{13} \\ w_{11} \end{pmatrix} c_S \quad (3.31)$$

従って、入射フォノンが縦波フォノン ($a_S = 1, c_S = 0$) や横波フォノン ($a_S = 0, c_S = 1$) であっても、透過フォノンはそれらの重ね合わせになる。反射波についても同様に、基材中の反射係数 b_S と d_S は

$$\begin{pmatrix} b_S \\ d_S \end{pmatrix} = \frac{1}{w_{11}w_{33} - w_{13}w_{31}} \begin{pmatrix} w_{21}w_{33} - w_{23}w_{31} \\ w_{41}w_{33} - w_{43}w_{31} \end{pmatrix} a_S + \frac{1}{w_{11}w_{33} - w_{13}w_{31}} \begin{pmatrix} -w_{21}w_{13} + w_{23}w_{11} \\ -w_{41}w_{13} + w_{43}w_{11} \end{pmatrix} c_S \quad (3.32)$$

で与えられる。

ここで、フォノンの透過率をポインティングベクトルを用いて定義する。弾性エネルギーの連続の方程式から、ポインティングベクトルの i 番目の成分を $J_i \equiv -\dot{u}_j \sigma_{ij}$ と定義する。周波数 ω で波数 q_y の入射波のポイン

ティングベクトルの x 成分 $J_{S,x}$ は、

$$J_{S,x}(\omega, q_y) = |a_S|^2 \omega^2 \frac{C_{S,11}}{c_{S,L}} \cos \theta_{S,L} + |c_S|^2 \omega^2 \frac{C_{S,44}}{c_{S,T}} \cos \theta_{S,T} \quad (3.33)$$

であり、検出層の透過波のポインティングベクトルの x 成分 $J_{D,x}$ は、

$$J_{D,x}(\omega, q_y) = |t_L|^2 \omega^2 \frac{C_{D,11}}{c_{D,L}} \cos \theta_{D,L} + |t_T|^2 \omega^2 \frac{C_{D,44}}{c_{D,T}} \cos \theta_{D,T} \quad (3.34)$$

となる。透過率 $T(\omega, q_y)$ はこれらの量の比を取り、

$$T(\omega, q_y) \equiv \frac{J_{D,x}(\omega, q_y)}{J_{S,x}(\omega, q_y)} \quad (3.35)$$

と定義する。

ここで、入射フォノンのモードが l で透過フォノンのモードが m のときのポインティングベクトルの比を T_{lm} とする。これを用いると、縦波フォノン入射時の透過率 T_L は $T_L = T_{LL} + T_{LT}$ の 2 つに分けられ、横波フォノン入射時の透過率 T_T は $T_T = T_{TL} + T_{TT}$ の 2 つに分けられる。それぞれの寄与は後の章で議論する。反射フォノンに関しても、入射フォノンのモードが l で反射フォノンのモードが m の時のポインティングベクトルの比を R_{lm} と定義する。

3.3 モード変換が生じる場合のアンサンブル平均透過率

以降、第 2 章同様に、AlAs と GaAs からなるランダム超格子の透過特性を示す。但し、GaAs を材料 A、AlAs を材料 B として扱う。単位構造の厚さは GaAs 結晶において 12 原子層に相当する $d_A = d_B = 3.4$ nm とし、ランダム超格子のサイズ $N = 1000$ とする。各材料の物性値として、 $x-y$ 平面で平均化した音速から求めた実効 Lamé 定数 $\lambda_{A,B}$ と $\mu_{A,B}$ を導入し、 $\lambda_A = 43.51$ GPa、 $\mu_A = 44.90$ GPa、 $\lambda_B = 46.52$ GPa、 $\mu_B = 44.19$ GPa から弾性スティフネス定数 $C_{[n,S,D],[11,44]}$ を求める。密度は $\rho_A = 5.36 \times 10^3$ kg/m³ と $\rho_B = 3.76 \times 10^3$ kg/m³ とする。これらの材料定数は GaAs は [21] [22]、AlAs は [23] [24] の値から求めた。

以上の材料パラメータから縦波フォノンと横波フォノンの音速が得られ、 $c_{A,L} = 4.987 \times 10^3$ m/s、 $c_{A,T} = 2.894 \times 10^3$ m/s、 $c_{B,L} = 5.990 \times 10^3$ m/s、 $c_{B,T} = 3.428 \times 10^3$ m/s となる。 $c_{A,L}/c_{B,L} < 1$ であるため、臨界角以下のフォノンの伝播を行うためには、フォノンの入射角 $\theta_{S,L}$ と $\theta_{S,T}$ は式 (3.3) から、以下の範囲である必要がある。

$$0 < \theta_{S,L} < \sin^{-1} \frac{c_{A,L}}{c_{B,L}} = 56.3^\circ \quad (3.36)$$

$$0 < \theta_{S,T} < \sin^{-1} \frac{c_{A,T}}{c_{B,L}} = 29.0^\circ \quad (3.37)$$

同じ周波数 ω と y 方向の波数 q_y を持つ縦波フォノンと横波フォノンは、入射フォノンのモードに関わらず、ランダム超格子の全ての層で存在する。しかし、透過率は入射フォノンのモードに依存する。そこで、Snell の法則 $q_y = \omega \sin \theta_{S,L}/c_{S,L} = \omega \sin \theta_{S,T}/c_{S,T}$ を満たす $\theta_{S,L}$ と $\theta_{S,T}$ の組み合わせに対し、単一モード入射時の透過率を調べる。

図 3.3 に、 $N = 1000$ のランダム超格子に縦波フォノン入射時 ($a_S = 1, c_S = 0$) および横波フォノン入射時 ($a_S = 0, c_S = 1$) のアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ の周波数依存性を示す。入射角は (a) $\theta_{S,L} = \theta_{S,T} = 0^\circ$ 、(b)

$\theta_{S,L} = 15^\circ, \theta_{S,T} = 8.6^\circ$ 、(c) $\theta_{S,L} = 30^\circ, \theta_{S,T} = 16.9^\circ$ 、(d) $\theta_{S,L} = 45^\circ, \theta_{S,T} = 24.2^\circ$ の 4 種類とし、アンサンブル平均は 300 種の異なるランダム超格子のサンプルに対し行った。

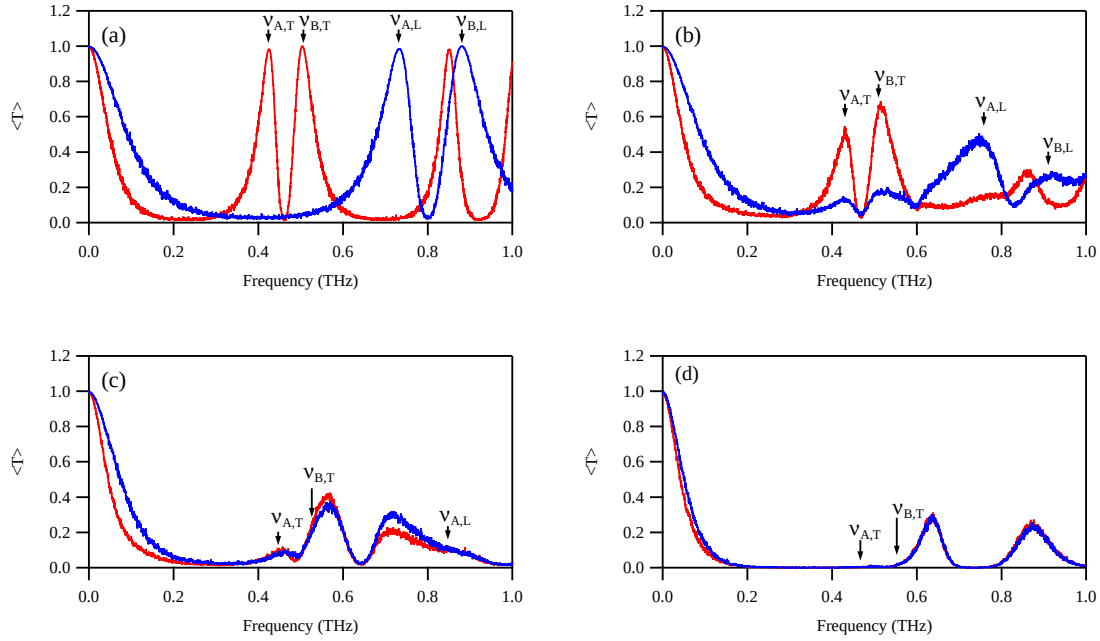


図 3.3 N=1000 のランダム超格子の、300 サンプルに対する平均透過率。青線は縦波フォノン入射時の平均透過率 $\langle T \rangle$ を、赤線は横波フォノン入射時の平均透過率 $\langle T \rangle$ を示す。(a) $\theta_{S,L} = \theta_{S,T} = 0^\circ$ 、(b) $\theta_{S,L} = 15^\circ, \theta_{S,T} = 8.6^\circ$ 、(c) $\theta_{S,L} = 30^\circ, \theta_{S,T} = 16.9^\circ$ 、(d) $\theta_{S,L} = 45^\circ, \theta_{S,T} = 24.2^\circ$

垂直入射したフォノン (図 3.3 (a)) に対しては、縦波フォノンと横波フォノンは互いにモード変換することなく、独立して伝播するため、第 2 章で調べた単一モードの場合と同様の透過特性となる。アンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ は、アンダーソン局在のためにそれぞれ個別に減衰し、単位格子の厚さと音速で決まる共鳴周波数で透過ピークを持つ。共鳴周波数は式 (2.83) より

$$\nu_{\{A,B\},\{L,T\}} = \frac{c_{\{A,B\},\{L,T\}}}{2d_{\{A,B\}}} \quad (3.38)$$

で与えられ、図 3.3 (a) におけるピーク周波数と良く対応している。

図 3.3 (b) に、入射角 $\theta_{S,L} = 15.0^\circ$ と $\theta_{S,T} = 8.6^\circ$ に対するアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ の周波数依存性を示す。図 3.3 (a) の垂直入射の場合と同様に、アンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ は横波フォノンと縦波フォノンに対して、明確な透過率の減少および透過ピークを示す。周波数依存性は垂直入射に似ているが、透過ピークの周波数は、次式のように高周波領域にシフトしている。

$$\nu_{\{A,B\},\{L,T\}} = \frac{c_{\{A,B\},\{L,T\}}}{2d_{\{A,B\}} \cos \theta_{\{L,T\}}} \quad (3.39)$$

これは、入射角が増加すると、伝播方向である x 方向の波数が減少するためである。また、透過ピークにおける透過率は、垂直入射時よりも小さい。これは、入射フォノンから変換された、もう一方のモードのフォノン

は入射フォノンの共鳴条件とは異なるためである。さらに、例えば 0.4 THz 付近のような、片方のモード (この場合は横波フォノン) でのみ共鳴条件を満たす周波数に着目すると、共鳴条件にないモードでの入射条件時 (この場合は縦波フォノン入射) の透過率は、垂直入射時よりも大きいことが分かる。入射された縦波フォノンの一部が横波フォノンに変換され、共鳴条件を満たすために、透過率を引き上げたためと考えられる。このことから、1 つめの仮説として挙げた、モード変換の影響でアンダーソン局在が弱まり、透過率が増加することが起きていると考えられる。但し、このときの透過率は 10% 程度であることから、フォノンの局在を解消する程の効果ではないことも分かる。

図 3.3 (c) に、入射角 $\theta_{S,L} = 30.0^\circ$ と $\theta_{S,T} = 16.9^\circ$ におけるアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ の周波数依存性を示す。アンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ は、入射フォノンのモードに関わらず、ほぼ同一の周波数特性となる。透過率のピークは $\nu_{A,T}$ と $\nu_{B,T}$ に現れ、 $\nu_{A,L}$ でこぶが見られる。それらのピークに加え、式 (3.39) では予測されないピークが $\nu_{B,T}$ と $\nu_{A,L}$ の間に見られる。この傾向は、図 3.3 (d) に示す、入射角 $\theta_{S,L} = 45.0^\circ$ と $\theta_{S,T} = 24.2^\circ$ においてさらに顕著となる。縦波フォノンと横波フォノン入射のアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ は、全ての周波数領域でよく一致し、その大きさは図 3.3 (c) よりも減少している。2 つの顕著なピークの周波数は式 (3.39) とは全く一致しない。このことから、入射角が大きくなるにつれ、縦波フォノンとも横波フォノンとも共鳴特性が異なるモードが生じていると考えられる。これは 2 つ目の仮説として挙げた新たな結合モードの形成が起きていることを支持する結果である。

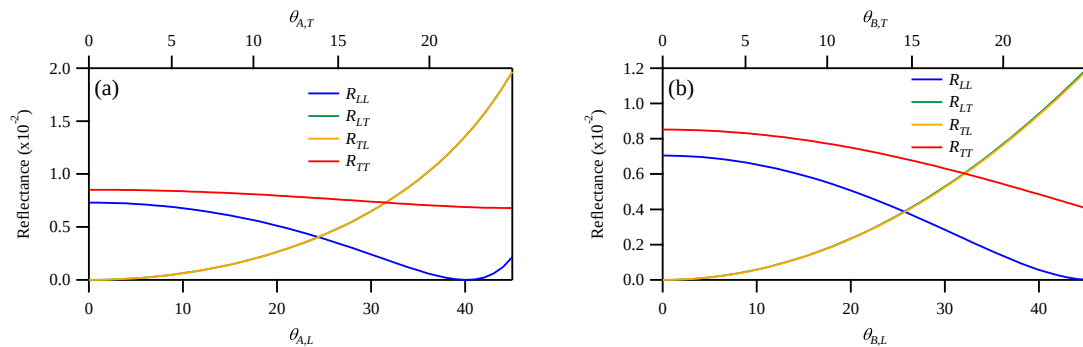


図 3.4 単一の界面に対する縦波フォノンおよび横波フォノンのモード毎の反射率。(a) 材料 A から入射する場合 (b) 材料 B から入射する場合。入射角 $\theta_{[A,B],L} > 25^\circ$ もしくは $\theta_{[A,B],T} > 17^\circ$ でモード変換が支配的となる

3.3.1 反射時のモード変換と結合モードの生成

入射角の増加に伴うアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ の変化の特徴を調べるために、材料 A と材料 B の単一の界面に対する、モード毎の反射率の角度依存性を調べた。アンダーソン局在はフォノンの後方散乱が原因であるためである。図 3.4 に、(a) 材料 A から材料 B に入射する場合の反射率、(b) 材料 B から材料 A に入射する場合の反射率を示す。入射角が小さいと、モード変換は十分に行われず。結果として、ランダム超格子中のフォノンの伝播は、入射フォノンの特徴を維持する。一方、大きな入射角ではモード変換されるフォノンの方が多くなり、特に $\theta_L > 25^\circ$ もしくは $\theta_T > 16^\circ$ では、モード変換されたフォノンは反射波の半分以上を占める。

ランダム超格子では、このようなモード変換がすべての界面で繰り返し起こり、異なるモードの透過および反射フォノンで、異なる波数ベクトル $\mathbf{q}_{n,L}^\pm$ と $\mathbf{q}_{n,T}^\pm$ を持つフォノンがすべての層で出会う。

高入射角時のモード変換の強さを理解するために、それぞれの偏極ベクトルの向きを考察する。垂直入射時には、縦波フォノンと横波フォノンの偏極ベクトルは直交しているが、斜入射時には Snell の法則によりそれぞれの屈折角が異なるため、直交ではなくなり、平行に近くなることもある。フォノンの偏極ベクトルのスカラー積を考えると、モード変換される反射波に対しては

$$\mathbf{e}_{L(T)}^\pm \cdot \mathbf{e}_{T(L)}^\mp = \sin(\theta_{n,L} + \theta_{n,T}) \quad (3.40)$$

となり、モード変換される透過波に対しては、

$$\mathbf{e}_{L(T)}^\pm \cdot \mathbf{e}_{T(L)}^\pm = \sin(\theta_{n,L} - \theta_{n,T}) \quad (3.41)$$

となる。図 3.5 に、例として材料 A 中を伝播する反射波と透過波の偏極ベクトルのスカラー積を示す。いずれに対しても、縦波フォノンと横波フォノンの偏極ベクトルは、伝播角の増加につれ平行になることが分かる。そのため、大きな入射角でフォノン間の結合が強くなり、縦波フォノンと横波フォノンが結合した、新たな結合モードを作ると考えられる。実際、そのような結合モードは周期的な超格子への斜入射で見られており、結合モードは、第 1 ブリルアンゾーン内に透過率の禁制帯を形成する。結合モードがランダム超格子でも同様に生じると仮定すると、透過率は単に結合モードの量を表すことから、入射フォノンモードに鈍感になること、および特定の共鳴周波数を持つことは理解できる。

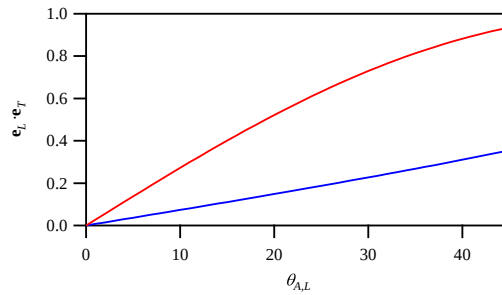


図 3.5 入射角に対する偏極ベクトルの内積。赤線は $\mathbf{e}_{L(T)}^\pm \cdot \mathbf{e}_{T(L)}^\mp$ を、青線は $\mathbf{e}_{L(T)}^\pm \cdot \mathbf{e}_{T(L)}^\pm$ を示す。

3.4 Lyapunov 指数

局在状態の特徴を調べるため、第 2 章で述べた 1 次元のランダム超格子の場合と同様に、式 (2.86) で定義される Lyapunov 指数 $\gamma = -\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \langle \ln T(L, \omega) \rangle$ を調べた。図 3.6 に、図 3.3 の結果から求めた γ の周波数依存性を示す。

図 3.6 (a) に示す垂直入射では、 γ は 1 次元ランダム超格子と全く同様のピークと谷を持つことがわかる。ピークは縦波フォノンで約 $1.1 \mu\text{m}^{-1}$ 、横波フォノンで約 $1.3 \mu\text{m}^{-1}$ となる。図 3.6 (b) に示す $\theta_{S,L} = 15.0^\circ$ 、 $\theta_{S,T} = 8.6^\circ$ のとき、 γ は全周波数領域で垂直入射の場合よりも小さくなり、ピークは縦波フォノンで約 0.8

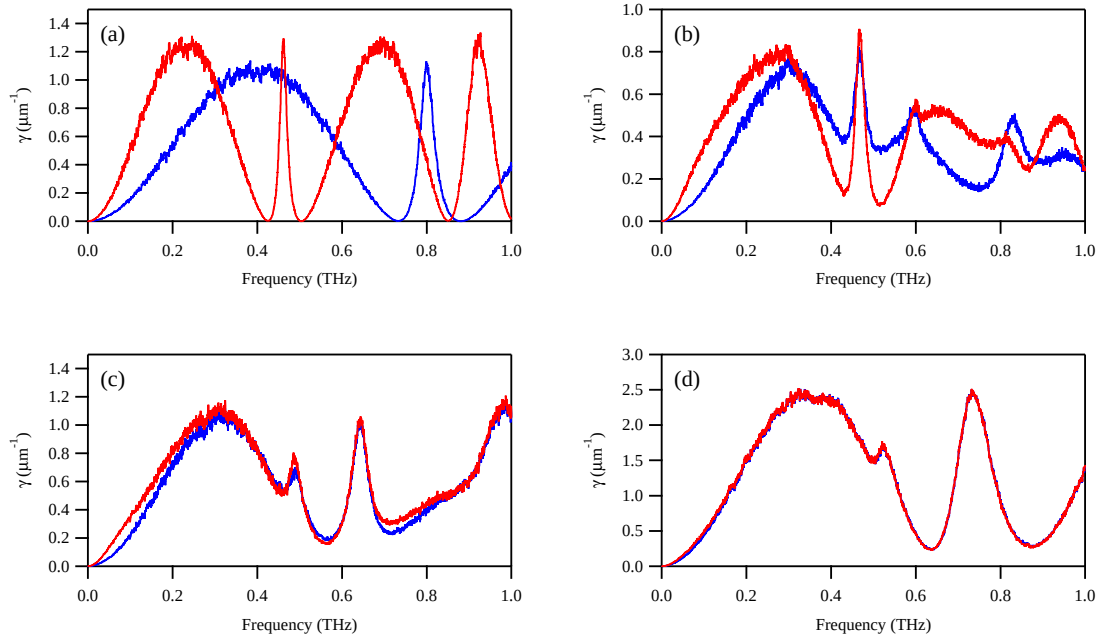


図 3.6 $N=1000$ のランダム超格子の、300 サンプルに対する Lyapunov 指数 γ 。青線は縦波フォノン入射時の値を、赤線は横波フォノン入射時の値を示す。(a) $\theta_{S,L} = \theta_{S,T} = 0^\circ$ 、(b) $\theta_{S,L} = 15^\circ, \theta_{S,T} = 8.6^\circ$ 、(c) $\theta_{S,L} = 30^\circ, \theta_{S,T} = 16.9^\circ$ 、(d) $\theta_{S,L} = 45^\circ, \theta_{S,T} = 24.2^\circ$

μm^{-1} 、横波フォノンで約 $0.9 \mu\text{m}^{-1}$ である。これは、斜入射によりフォノンの局在が弱まったことを示す。図 3.3 (b) に示した透過率において、一方のモードの共鳴周波数においても片方のモードの透過率が上がったように、一方のモードでフォノンが局在する周波数においては、そのエネルギーが非局在のもう片方のモードに変換され、局在が弱まると考えられる。

図 3.6 (c) に示す $\theta_{S,L} = 30.0^\circ$ 、 $\theta_{S,T} = 16.9^\circ$ や、図 3.6 (d) に示す $\theta_{S,L} = 45.0^\circ$ 、 $\theta_{S,T} = 24.2^\circ$ の場合には、Lyapunov 指数は縦波フォノン入射と横波フォノン入射とでほぼ同様の周波数依存性を示す。これは、入射角が大きい場合には、モード変換が強くなるために、生成される結合モードは入射フォノンのモードに依存しないことを示している。また、図 3.6 (d) では γ の大きさは、図 3.6 (b) や図 3.6 (c) よりも大きく、ピークでは $\gamma \approx 2.5 \mu\text{m}^{-1}$ となり、図 3.6 (c) の約 2 倍である。従って、入射角の増加に伴い誘起される結合モードは、強い局在を示すことが分かる。

以上の結果から、入射角が小さくモード変換が比較的弱いときには、モード変換の影響で局在が弱まり、フォノンの透過率の増加が生じること、および入射角が大きくモード変換が強い場合には、縦波とも横波とも異なる結合モードが強く誘起され、結合モード自身は強い局在を示し、フォノンの透過率は減少することが分かった。仮説として挙げた、モード変換によりアンダーソン局在が弱まることと、新たな結合モードの生成は、モード変換の強さに応じ、ともに生じるものであると考えられる。

3.5 透過率の揺らぎと確率分布

以降、第2章同様に透過率の統計的な性質を調べる。図3.7に、式(2.90)で定義される透過率の揺らぎ ΔT と平均透過率 $\langle T \rangle$ の関係を、縦波フォノン入射時と横波フォノン入射時それぞれに対し示す。入射角はそれぞれ図3.3と同様に、(a) $\theta_{S,L} = \theta_{S,T} = 0^\circ$ 、(b) $\theta_{S,L} = 15^\circ, \theta_{S,T} = 8.6^\circ$ 、(c) $\theta_{S,L} = 30^\circ, \theta_{S,T} = 16.9^\circ$ 、(d) $\theta_{S,L} = 45^\circ, \theta_{S,T} = 24.2^\circ$ の4種類とした。数値実験の結果と合わせ、式(2.82)、(2.90)、(2.91)から得られる単一モードフォノンに対する解析解を示す。

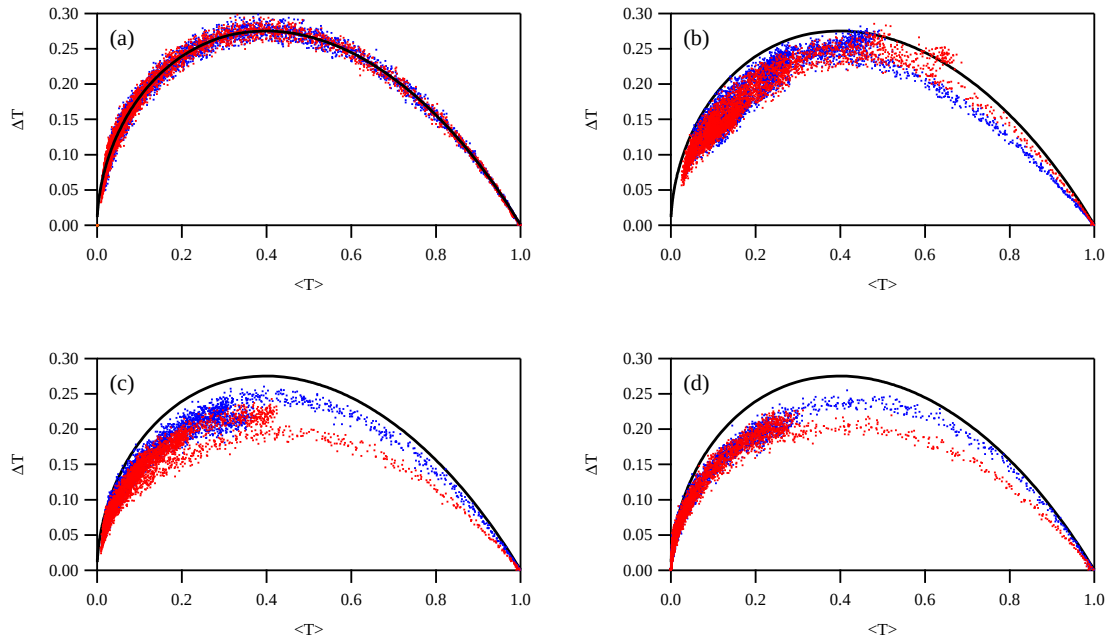


図 3.7 N=1000 のランダム超格子の、300 種のサンプルに対する透過率の揺らぎ ΔT と平均透過率 $\langle T \rangle$ の関係。黒線は単一モードフォノンに対する解析解を、青色の点は縦波フォノン入射時の値を、赤色の点は横波フォノン入射時の値を示す。(a) $\theta_{S,L} = \theta_{S,T} = 0^\circ$ 、(b) $\theta_{S,L} = 15^\circ, \theta_{S,T} = 8.6^\circ$ 、(c) $\theta_{S,L} = 30^\circ, \theta_{S,T} = 16.9^\circ$ 、(d) $\theta_{S,L} = 45^\circ, \theta_{S,T} = 24.2^\circ$

図 3.7 (a) に示す透過率の揺らぎ ΔT と平均透過率 $\langle T \rangle$ の関係は、縦波フォノン入射時、横波フォノン入射時いずれも解析解とよく一致することが分かる。垂直入射ではモード変換が生じないため、それぞれが単一モードフォノンとしてふるまうためである。図 3.7 (b)～(d) の大きな特徴として、斜入射フォノンに対する透過率の揺らぎ ΔT は、いずれも単一モードフォノンに対する理論曲線よりも小さく、揺らぎが抑制されていることが挙げられる。さらに、図 3.7 (c) と (d) では平均透過率 $\langle T \rangle$ が比較的小さい領域で、透過率の揺らぎ ΔT の分布が複雑になっており、2つの弧状の分布が見られる。

以下、それぞれについて考察する。

3.5.1 2つの弧状の分布

2つの弧状の分布のうち、透過率の揺らぎ ΔT が小さい分布は、高 $\langle T \rangle$ の領域から低 $\langle T \rangle$ の領域まで連続的に現れている。一方、 ΔT が大きい分布は、図 3.7 (c) では $\langle T \rangle < 0.4$ 、図 3.7 (d) では $\langle T \rangle < 0.3$ の領域でのみ現れている。このことから、 ΔT が小さい分布は低周波数領域に、 ΔT が大きい分布は高周波数領域に由来することが推測される。そこで、図 3.7 (d) のデータを 0.2 THz で分け、それぞれの透過率の揺らぎ ΔT と平均透過率 $\langle T \rangle$ の関係を、(a) $\nu < 0.2$ THz と (b) $0.2 \text{ THz} < \nu < 1.0$ THz として図 3.8 に示す。図 3.8 (a) では、縦波フォノン入射時と横波フォノン入射時の透過率の揺らぎ ΔT は異なるが、図 3.8 (b) ではいずれも同様の透過率の揺らぎ ΔT を示している。このことから、低周波数領域では縦波フォノンと横波フォノンの結合は比較的弱く、それぞれが単一モードに近い形で伝播するが、高周波数領域では縦波フォノンと横波フォノンが結合した結合モードとして伝播すると考えられる。

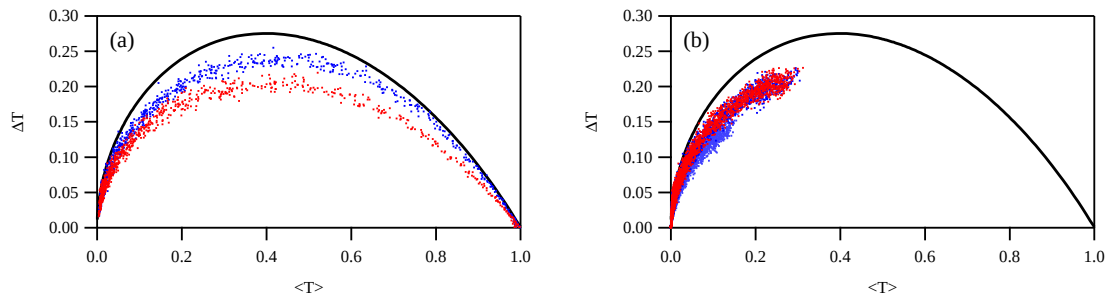


図 3.8 ランダム超格子の透過率の揺らぎを、(a) $\nu \leq 0.2$ THz、(b) $0.2 \text{ THz} \leq \nu \leq 1.0$ THz の領域に分け示した図。黒線は単一モードフォノンに対する解析解を、青色の点は縦波フォノン入射時の値を、赤色の点は横波フォノン入射時の値を示す。入射角は $\theta_{S,L} = 45^\circ$, $\theta_{S,T} = 24.2^\circ$ 。図 3.7 (d) は上図の (a) と (b) を重ね合わせた結果に相当する

低周波数領域で、透過フォノンが単一モードのフォノンによることを確認するために、図 3.3 (d) のランダム超格子の平均透過率 $\langle T \rangle$ を、透過フォノンの成分を縦波フォノンと横波フォノンに分け、図 3.9 に示す。入射フォノンを $l = \{L, T\}$ 、透過フォノンを $m = \{L, T\}$ としたときの平均透過率を T_{lm} とした。

0.05 THz 以下では、入射フォノンと同じモード (T_{LL} および T_{TT}) が支配的であり、フォノンは単一モードに近い形で伝播することが分かる。この周波数領域では、フォノンの波長は単位構造の厚さ $d_{A,B}$ よりも十分大きいので、フォノン散乱は Rayleigh 散乱に由来する。第 2 章で示した垂直入射フォノンの場合、フォノンの後方散乱係数は周波数 ν の 2 乗に比例するので、この周波数領域における反射はごく小さい。斜入射フォノンについても同様と考えると、透過フォノンと後方散乱フォノンの重ね合わせによるモード結合は、結合モードを誘起するには不十分であり、入射フォノンは優勢なフォノンとして残ると考えられる。従って、ある入射角における、単一モードによる伝播から結合モードによる伝播への移り変わりは、周波数に応じた散乱強度の変化に起因するものと言える。

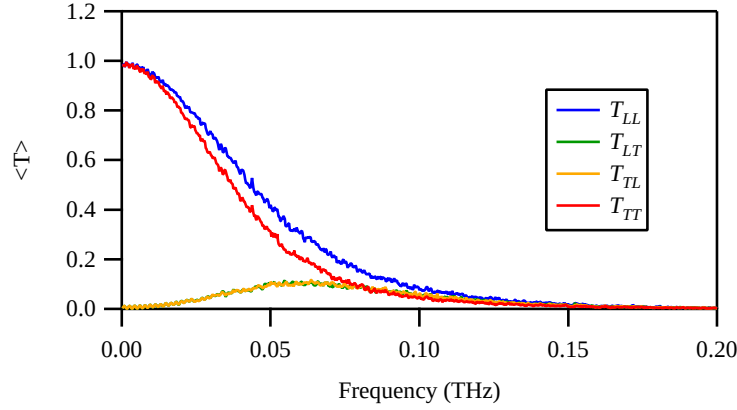


図 3.9 N=1000 のランダム超格子の、300 種のサンプルに対する平均透過率 $\langle T \rangle$ の縦波成分および横波成分。入射角は $\theta_{S,L} = 45^\circ$, $\theta_{S,T} = 24.2^\circ$ 。

3.5.2 透過率の確率分布 – 低入射角の場合

最初に、ごく小さい入射角におけるフォノンの透過を調べる。モード変換効果は小さいため、入射フォノンの大部分は変化せず、入射フォノンのエネルギーのうちごくわずかな部分が、もう一つのモードのフォノンに変換される。ここで、モード変換効果が十分小さく、2 回以上のモード変換を無視できると仮定すると、フォノンの透過率は、それぞれのモードの単一モードフォノンの透過率の合成として近似することができる。

図 3.10 に、入射角 $\theta_{S,L} = 1^\circ$ 、 $\theta_{S,T} = 0.58^\circ$ 、周波数 $\nu = 0.1$ THz に対し、10000 種のサンプルに対する透過率の確率分布を示す。(a) は T_{LL} 、(b) は T_{LT} を、(c) は T_{TT} を、(d) は T_{TL} を示す。縦軸と横軸は、第 2 章同様に式 (2.96) から、横軸を $-\ln T_{lm}$ 、縦軸を $W(z, t)dz$ とした。平均透過率は $\langle T_{LL} \rangle = 0.452$ 、 $\langle T_{TT} \rangle = 0.189$ であり、 $\langle T_{LT} \rangle$ と $\langle T_{TL} \rangle$ は約 8×10^{-4} である。実線は式 (2.95) から計算した単一モードフォノンに対する理論的な確率分布 $W(z, t)dz$ であり、 $W(z, t)dz$ に対するパラメータ t は透過率の数値実験の値から $t = -\langle \ln T_{lm} \rangle$ として求めた。ここで、数値実験と理論曲線のピーク位置と幅を明瞭に比較するため、数値的な結果は、ピークにおける値が理論曲線のピークと一致するように定数倍を乗じ示した。

図 3.10 (a) と (c) に示す結果から、入射フォノンと同じモードである T_{LL} および T_{TT} に対する数値実験の結果は、単一モードフォノンに対する理論値と良く一致している。一方、図 3.10 (b) と (d) に示す結果から、入射フォノンから変換されたモード T_{LT} と T_{TL} では、数値実験結果のピーク位置は理論的な曲線と一致しているものの、分布の幅は理論曲線よりも著しく狭い。単一モードフォノンに対する理論値では、式 (2.95) にあるように、パラメータ t はピーク位置と分布の幅の両方を決定する。図 3.10 (b) と (d) で見られる幅の不一致は、モード変換で生じるフォノンの確率分布を表すためには一つのパラメータでは不十分であることを示す。Lyapunov 指数 γ に比例する透過率の分散はアンダーソン局在の本質的なパラメータであることを考慮し、 t と確率分布のピーク位置の関係を、単一モードの場合から見直すことを試みる。

検出されるフォノンのモードが同じである限りは、つまり T_{LL} と T_{TL} 、および T_{TT} と T_{LT} の間では、同じ周波数依存性を仮定することができる。1 より小さい正の係数 α 、 β 、 α' 、 β' を導入し、モード l のフォノンに

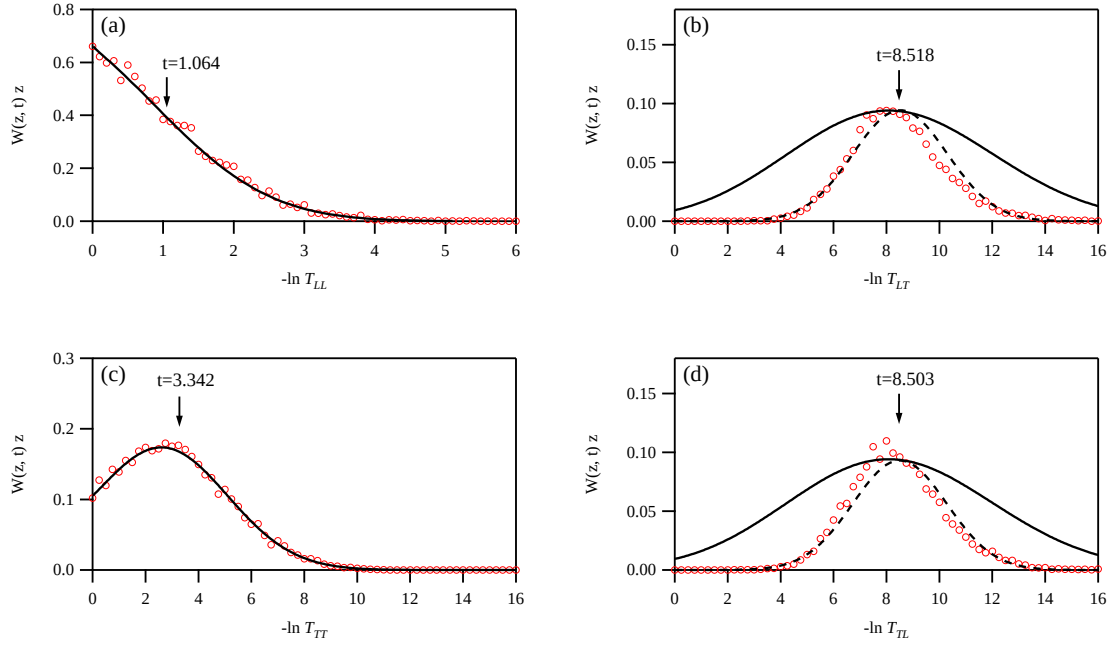


図 3.10 $\nu = 0.1$ THz における、 $-\ln T_{lm}$ の確率分布。入射角は $\theta_{s,L} = 1^\circ$ 、 $\theta_{s,T} = 0.58^\circ$ とした。赤丸は $N=1000$ のランダム超格子の、10000 種のサンプルに対する透過率から求めた確率分布、黒線は単一モードフォノンに対する解析解。(a)～(d) はそれぞれ (a) $-\ln T_{LL}$ 、(b) $-\ln T_{LT}$ 、(c) $-\ln T_{TT}$ 、(d) $-\ln T_{TL}$ 。ピークにおける値が解析解と一致するようにスケール示した。

対する、垂直入射でモード変換が無いときの透過率 T_l^0 を用いて、

$$T_{LL} = \alpha T_L^0 \quad (3.42)$$

$$T_{LT} = \beta T_T^0 \quad (3.43)$$

$$T_{TT} = \alpha' T_T^0 \quad (3.44)$$

$$T_{TL} = \beta' T_L^0 \quad (3.45)$$

とする。十分小さい入射角のとき、 $\alpha, \alpha' \approx 1$ である。

まず、 T_{LT} に着目し議論する。 T_{LT} に対する確率分布のパラメータ t は、 $t = -\langle \ln T_{LT} \rangle = -\ln \beta - \langle \ln T_T^0 \rangle$ となる。 T_T^0 は本質的には Lyapounov 指数と系のサイズの積 $t = 2\gamma L = -\langle \ln T \rangle$ に依存し、その大きさのオーダーは図 3.10 (c) で得られた t と同じであることが期待される。しかし、ランダム超格子を通る中でモード変換が起こるためそれらは一致せず、この場合の系のサイズ L は良く定義できない。

そこで、 $t_{LT} = -\langle \ln T_T^0 \rangle$ の大きさを、数値実験データの実際の分散から求める。図 3.10 (b) に示すデータから、 $t = \langle -\ln T_{LT} \rangle = 8.518$ 、 $t_{LT} = \Delta \ln T_{LT} / 2 = 1.599$ である。従って、 β は減算から $-\ln \beta = t - t_{LT} = 8.518 - 1.599 = 6.919$ となる。これらを考慮すると、 T_{LT} の確率分布は、分散が t_{LT} で与えられ、ピーク位置は t_{LT} から $-\ln \beta$ だけシフトした分布となる。確率分布に関する理論式 (2.97) を次式のように書き換えれば、

T_{LT} の分布を表現できる。

$$W(z, t)z = \frac{1}{2\sqrt{\pi t_{LT}}} \exp \left[-\frac{(\ln z - \ln \beta - t_{LT})^2}{4t_{LT}} \right] \quad (3.46)$$

次いで、ここまでの議論における T_{LT} を T_{TL} に、 t_{LT} を t_{TL} に、 β を β' に置き換えることで、 T_{TL} に関して同様の結果を得ることができる。図 3.10 (d) に示すデータから、 $t = \langle -\ln T_{TL} \rangle = 8.503$ 、 $t_{TL} = \Delta \ln T_{TL}/2 = 1.576$ である。従って、 β' は減算から $-\ln \beta' = t - t_{TL} = 8.503 - 1.576 = 6.927$ となる。

図 3.10 (b) および (d) に、式 (3.46) として再定義した確率分布のカーブを点線で示す。いずれの場合でも、数値的データと良く一致する。このことから、 T_{LT} および T_{TL} の確率分布と、単一モードの場合の理論的な確率分布の不一致は、アンダーソン局在の本質的な性質が変化したためではなく、 β, β' で表される、モード変換によるフォノンの強度の変化に起因すると言える。また、モード変換によるフォノンの強度の変化は、単一モードの場合に比べ、同じ透過率であっても揺らぎを抑制する影響があることがわかる。

3.5.3 透過率の確率分布 – 高入射角の場合

ここまでで述べたような、ごく小さい入射角に対しては、モード変換されたフォノンの透過率もごく小さいため、合計の透過率の統計には、モード変換されたフォノンの透過率の揺らぎの抑制は影響を及ぼさない。ただ、入射角の増加に伴い、 R_{LT} と R_{TL} は大きくなり、従って α と α' は減少し、 β と β' は増加する。入射フォノンとモード変換されたフォノンの両方の確率分布が、上述のようにシフトすることで、透過率の揺らぎが抑制されると考えられる。図 3.11 に、入射角 $\theta_{S,L} = 30^\circ$ 、 $\theta_{S,T} = 16.9^\circ$ の場合について、10000 種のサンプルに対する透過率の確率分布を示す。(a) は T_{LL} 、(b) は T_{LT} 、(c) は T_{TT} 、(d) は T_{TL} の確率分布であり、周波数は (a) および (b) に対しては 0.0912 THz、(c) および (d) に対しては 0.0552 THz とした。いずれの場合も、パラメータ t は数値的データから $t = -\langle \ln T_{lm} \rangle$ とアンサンブル平均を取ることで求めた。

さらに、図 3.12 に、入射モードに応じて図 3.11 に示した値の合計の透過率の揺らぎを示す。図 3.12 (a) と (b) に示した分布の平均透過率 $\langle T \rangle$ は、いずれも約 0.4 とおおよそ等しい。それぞれ比べると、横波フォノン入射時の確率分布は、縦波フォノン入射時よりも抑制されており、特に高透過率領域で著しいことが分かる。この違いの由来は、図 3.11 (c) で示す横波フォノンの確率分布のシフトが、図 3.11 (a) で示す縦波フォノンの確率分布のシフトよりも大きいためと考えられる。これが、図 3.7 (b)~(d) に示されるような、横波フォノン入射時の透過率の揺らぎが縦波フォノン入射時よりも抑制されることの原因と言える。

3.5.4 透過率の確率分布 – 結合モードが支配的な場合

最後に、フォノンの結合モードが強く誘起される場合として、入射角 $\theta_L = 30^\circ$ 、 $\theta_T = 16.9^\circ$ 、周波数 $\nu = 0.4$ THz における確率分布を調べる。図 3.13 に (a) 縦波フォノン入射時、(b) 横波フォノン入射時の透過率の確率分布を、単一モードの場合の理論曲線とともに示す。

図 3.13 (a) および (b) の結果から、透過率の確率分布は図 3.3 (c) の平均透過率や、図 3.6 (c) の Lyapunov 指数のように、入射モードに依存しないことがわかる。図 3.12 と対照的に、数値データは単一モードの場合の理論曲線とよく一致する。これは、ランダム超格子中で新たな結合モードが生じており、単一モードとして振る舞うことを示していると考えられる。数値データと単一モードの場合の理論曲線の違いは、高透過率領域で

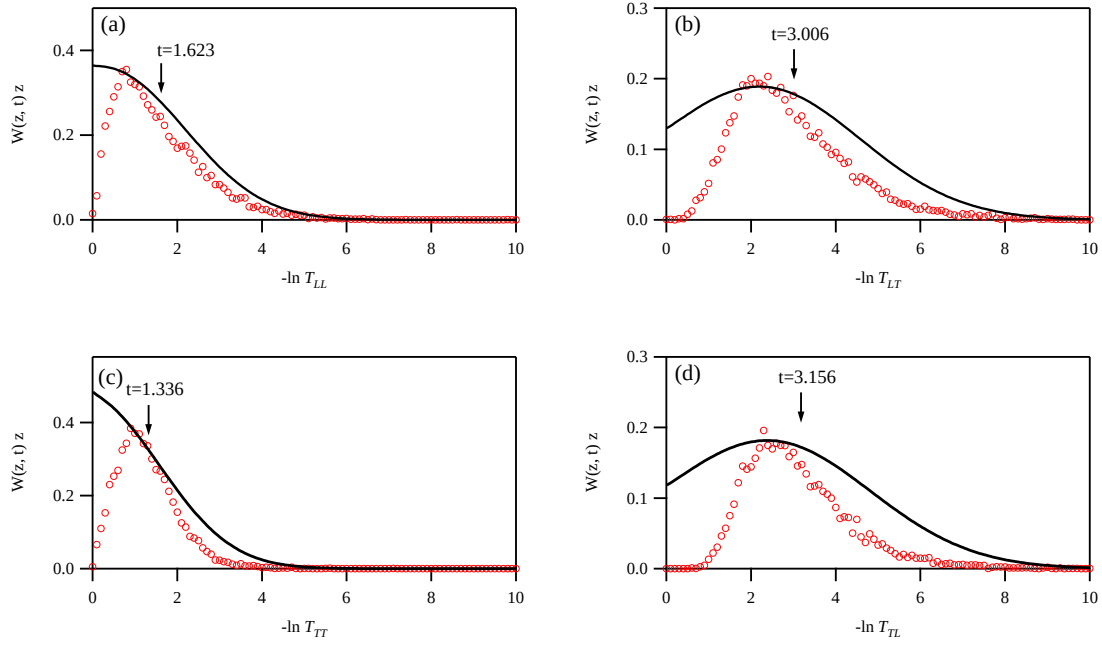


図 3.11 $-\ln T_{lm}$ の確率分布。入射角は $\theta_{S,L} = 30^\circ$ 、 $\theta_{S,T} = 16.9^\circ$ とした。赤丸は $N=1000$ のランダム超格子の、10000 種のサンプルに対する透過率から求めた確率分布、黒線は単一モードフォノンに対する解析解。周波数 ν は、(a) $-\ln T_{LL}$ と (b) $-\ln T_{LT}$ に対しては 0.0912 THz、(c) $-\ln T_{TT}$ と (d) $-\ln T_{TL}$ に対しては 0.0552 THz とした。

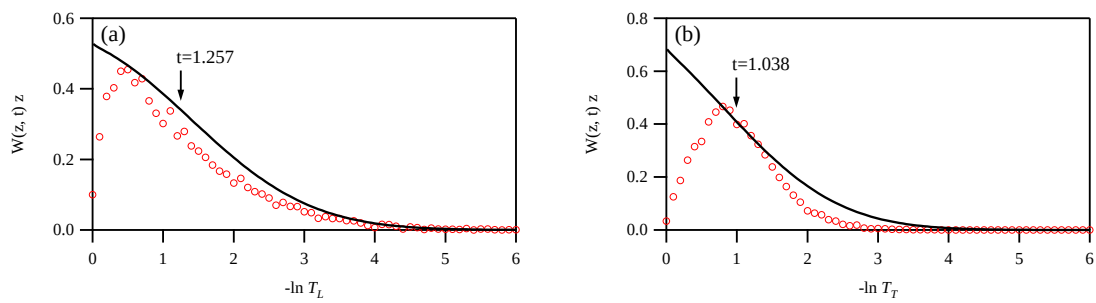


図 3.12 周波数 0.0912 THz における $-\ln T_L$ の確率分布と周波数 0.0552 THz における $-\ln T_T$ の確率分布。 T_L と T_T は図 3.11 に示したデータの全透過率を示す。赤丸は $N=1000$ のランダム超格子の、10000 種のサンプルに対する透過率から求めた確率分布、黒線は単一モードフォノンに対する解析解。

見られ、数値データでは高透過率となる確率が小さい。これは縦波フォノンの共鳴条件と横波フォノンの共鳴条件を同時に満たすフォノンが存在しないことに由来する。

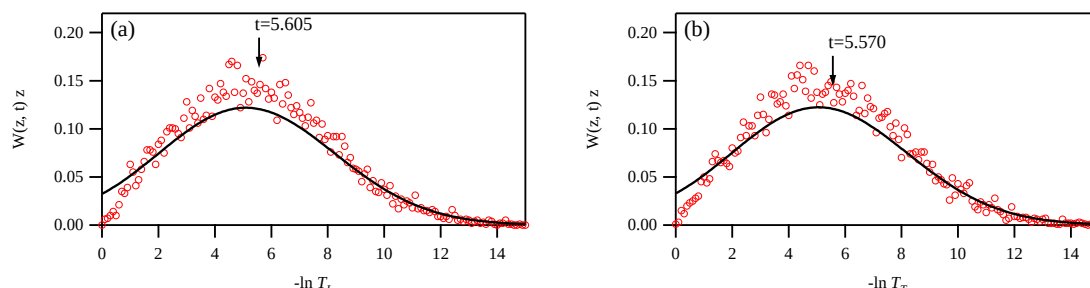


図 3.13 周波数 0.4 THz における (a) $-\ln T_L$ の確率分布と (b) $-\ln T_T$ の確率分布。入射角は (a) $\theta_{s,L} = 30^\circ$ 、(b) $\theta_{s,T} = 16.9^\circ$ とし、 T_L と T_T はそれぞれ全透過率を示す。赤丸は $N=1000$ のランダム超格子の、10000 種のサンプルに対する透過率から求めた確率分布、黒線は単一モードフォノンに対する解析解。

3.6 まとめ

転送行列法を用いて、GaAs/AlAs ランダム超格子のアンダーソン局在におけるモード変換の効果を調べた。

斜入射時のフォノンの透過率および Lyapunov 指数からは、入射角が小さいときにはモード変換の影響で局在が弱まり、フォノンの透過率の増加が生じるものの、非局在に至るものではないことが分かった。入射角が大きくモード変換が強い場合には、縦波とも横波とも異なる結合モードが生じ、フォノンの透過率が減少することが分かった。

透過率の揺らぎからは、モード変換の影響が比較的小さいとき、および横波フォノンでは、透過率の揺らぎが小さいことが分かった。透過率の確率分布の考察から、モード変換が生じてても、透過率の分布の幅を決める本質的な統計は変化せず、透過強度のみがモード変換の影響で減少するために、透過率の揺らぎが小さくなると推測した。また、縦波と横波の透過率減少量の差が透過率の揺らぎの差に現れていることが分かった。さらに、モード変換の影響が強くなると誘起される結合モードが、新たな単一モードとして振る舞うことも示された。

以上の結果をまとめると、モード変換の影響として、最初に 2 つの仮説として挙げた、アンダーソン局在を弱める影響と、新たな結合モードの生成により単一モードの場合同様の局在を示すことは、モード変換の強さに応じ、いずれも生じることが分かったと言える。モード変換の存在は局在現象を単に破壊するものではなく、フォノン間の相互作用に由来する様々な現象を引き起こすものである。

遮音デバイスへの応用においては、入射角のフォノンが寄与することから、相対的に高入射角の影響が強まると考えられるため、本研究のようなランダム超格子を遮音デバイスに用いることは適切と言える。

参考文献

- [1] B. Souillard, in *Chance and Matter*, edited by J. Souletie, J. Vannimenus, and R. Stora (North-Holland, Amsterdam, 1987), p. 305.
- [2] *Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media*, edited by P. Sheng (World Scientific, Singapore, 1990).
- [3] S. John, H. Sompolinsky, and M. J. Stephen, Phys. Rev. B **27**, 5592 (1983).
- [4] T. R. Kirkpatrick, Phys. Rev. B **31**, 5746-5755 (1985)
- [5] S. John, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486-2489 (1987)
- [6] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, B. O'Quinn, Nature **413**, 597-602 (2001).
- [7] C. Monthus and T. Garel Phys. Rev. B **81**, 224208 (2010)
- [8] J. Ravichandran, A. K. Yadav, R. Cheaito, P. B. Rossen, A. Soukiasian, S. J. Suresha, J. C. Duda, B. M. Foley, C.-H. Lee, Y. Zhu, A. W. Lichtenberger, J. E. Moore, D. A. Muller, D. G. Schlom, P. E. Hopkins, A. Majumdar, R. Ramesh, M. A. Zurbuchen, Nat. Mater. **13**, 168-172 (2014)
- [9] M. N. Luckyanova, J. Mendoza, H. Lu, B. Song¹, S. Huang, J. Zhou, M. Li, Y. Dong, H. Zhou, J. Garlow, L. Wu, B. J. Kirby, A. J. Grutter, A. A. Puretzky, Y. Zhu, M. S. Dresselhaus, A. Gossard² and G. Chen, Science Advances (2018): Vol. 4, no. 12, eaat9460 DOI: 10.1126/sciadv.aat9460
- [10] T. Juntunen, O. Vänskä, and I. Tittonen Phys. Rev. Lett. **122**, 105901 (2019)
- [11] S. D. Pinski, W. Schirmacher and R. A. Römer EPL **97**, 16007(2012).
- [12] H. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 125-126(2003).
- [13] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [14] S. Tamura and F. Nori, Phys. Rev. B **41**, 7941 (1990).
- [15] N. Nishiguchi, S. Tamura, and F. Nori, Phys. Rev. B **48**, 14426 (1993).
- [16] A. Chaudhuri, A. Kundu, D. Roy, A. Dhar, J. L. Lebowitz, and H. Spohn, Phys. Rev. B **81**, 064301 (2010).
- [17] H. A. Fertig and T. L. Reinecke, Phys. Rev. B **50**, 7443 (1994).
- [18] J. Mendoza and G. Chen, Nano Lett. **16**, 7616 (2016).
- [19] M. N. Luckyanova, J. Mendoza, H. Lu, B. Song, S. Huang, J. Zhou, M. Li, Y. Dong, H. Zhou, J. Garlow, L. Wu, B. J. Kirby, A. J. Grutter, A. A. Puretzky, Y. Zhu, M. S. Dresselhaus, A. Gossard and G. Chen, Sci. Adv. **4**, eaat9460 (2018).
- [20] P. Chakraborty, L. Cao, and Y. Wang, Scientific Reports **7**, 8134 (2017).
- [21] L. R. Weisberg and J. Blanc, J. Appl. Phys. **34**, 1002 (1963).
- [22] T. B. Bateman, H. J. McSkimin, and J. M. Whelan, J. Appl. Phys. **30**, 544 (1959).
- [23] J. D. Wiley, *Semiconductors and Semimetals*(Academic, New York,1975), vol. 10, p. 115
- [24] S. Adachi, J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985).
- [25] S. Tamura and J. P. Wolfe, Phys. Rev. B **35**, 2528 (1987).
- [26] I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul, L. A. Pastur and E. Yankovsky, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988).

[27] A. A. Abrikosov, Solid State Commun. **37**, 997(1981).

第 4 章

ランダム固体／液体超格子による透過特性の動的制御

第 3 章で、1 次元のランダム超格子は斜入射時のような 2 つ以上の伝播モードのモード変換が起こる場合に対してもアンダーソン局在が生じ、フォノンの透過を妨げることを述べた。1 次元ランダム超格子は広い周波数帯のみならず、広い入射角に対してもフォノンの伝播を制御できることを示すものであり、様々な方位から入射する音響波を制御するデバイスとなる可能性が示唆された。

一方、これまで述べた 1 次元ランダム超格子は固体を構成要素として用いているため、一旦作製すると、その周波数特性を随意に変更することは出来ない。目的に応じて音響波の透過と反射を制御出来れば、デバイスとしての応用範囲が広がる。これを実現する方法として、1 次元ランダム超格子を構成する物質として固体と液体の組み合わせが考えられる。これまで述べてきたように、共鳴透過は 1 次元ランダム超格子を構成するそれぞれの層の厚さおよび音速で決まる共鳴透過周波数で生じる。固体層の厚さを変化させることは容易ではないが、液体層の厚さは、固体層を移動させることで容易に可変とできるため、液体層に由来する共鳴透過は随意に変更し、チューナブルに透過特性を制御できるものと言える。

固体と液体からなるランダム超格子の別の利点として、大きな音響インピーダンス差が挙げられる。第 2 章での結果から、十分なフォノンの減衰のためには、ランダム超格子のサイズは減衰長よりも大きいことが要求されることが分かる。減衰長は界面での波動の散乱、すなわち反射が強いほど、より短くなる。第 3 章までに考えてきたような GaAs と AlAs の組み合わせでは、音響インピーダンス比は約 1.2 であり、反射率は約 0.8% に過ぎない。一方、例えばアルミニウム (Al) と水では、音響インピーダンス比は約 12 であり、界面での反射率は約 70% に達する。GaAs/AlAs のランダム超格子よりも減衰長は短くなると期待され、より小型のデバイスで音響波を制御できることになる。

以上の背景から、本章では、ランダム超格子の材料として固体の Al と液体の水に着目し、音響波の透過特性を調べるとともに、伝播をチューナブルに制御するデバイスの具体例を与える。

4.1 節では固体と液体からなるランダム超格子のモデル化を行い、4.2 節で転送行列の定式化を行う。4.3 節でアンサンブル平均透過率と透過率の揺らぎを調べ、アンダーソン局在との結び付けを行う。4.4 節で透過波の周波数特性の調整の方法と、デバイスに応じた透過特性の例を示す。4.5 節で結論を述べる。

4.1 固体・液体ランダム超格子のモデル

互いに異なる固体の材料 A と、液体の材料 B からなる 2 種の単位構造が積層されたランダム超格子を考える。これまでの章同様に、ランダム超格子の積層方向を x 軸にとり、積層構造の界面は x に対し垂直と仮定し、その面を $y-z$ 面とする。ランダム超格子は材料 A の基材および検出器に挟まれており、ランダム超格子を通り抜けた音響波は、検出器で観測されたとする。また、入射波は積層構造の界面に垂直に入射する (入射角 0°) 場合を考える。ランダム超格子の模式図を図 4.1 に示す。

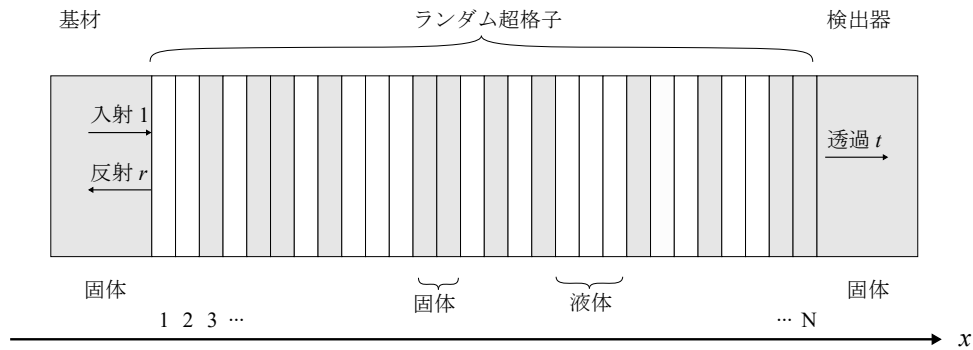


図 4.1 2 種の材料からなる固体/液体ランダム超格子の模式図

本章では、固体の材料 A として金属アルミニウム (Al) を、液体の材料 B として液体の水を考える。Al は等方的な固体として考え、密度 $\rho_S = 2700 \text{ kg/m}^3$ 、Lamé の第 1 定数 $\lambda = 59.2 \text{ GPa}$ 、Lamé の第 2 定数 $\mu = 25.6 \text{ GPa}$ とする。このとき、縦波音速 $c_S = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho_S} = 6394 \text{ m/s}$ である。水は温度 20°C と仮定し、密度 $\rho_F = 998 \text{ kg/m}^3$ 、音速 $c_F = 1479.9 \text{ m/s}$ とする。

積層数 N は 30 とし、Al と水がそれぞれ $1/2$ の確率で積層されているとする。

周波数は超音波帯である数 MHz 近辺を対象とし考察する。

4.2 固体・液体ランダム超格子の転送行列の定式化

粘度が十分小さい液体中では、横波の音響波は伝播しない。そのために、入射角が 0° の場合には、固体中を伝播する横波は、最初に出会う固体/液体界面ですべて反射され、縦波のみがランダム超格子を伝播する。そこで、固体中を伝播する音響波として、次式で表される縦波成分のみを考える。

$$\left(\frac{1}{c_S^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u_S = 0 \quad (4.1)$$

ここで、 u_S は x 方向に伝播する縦波の変位で、 c_S は横波音速 $c_S = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho_S}$ である。平面波を仮定すると、変位 u_S は

$$u_S = (ae^{iq_S x} - be^{-iq_S x})e^{-i\omega t} \quad (4.2)$$

となる。ここで、 q_S は波数、 ω は角周波数であり、係数 a は x 方向の前進波の振幅、 b は後退波の振幅である。式 (4.2) を式 (4.1) に代入すると、次式の分散関係を得る。

$$\omega = c_S q_S \quad (4.3)$$

また、 x 方向、 X 面の応力テンソル要素 σ_{xX} は、式 (4.2) から

$$\sigma_{xX} = (\lambda + 2\mu)iq_S(ae^{iq_S x} + be^{-iq_S x})e^{-i\omega t} \quad (4.4)$$

となる。簡単のため、粒子速度 $v_S = -i\omega u_S$ と応力テンソル要素 σ_{xX} からなり、次式で定義されるベクトル $\mathbf{V}_S$ を考える。

$$\mathbf{V}_S(x) \equiv \begin{pmatrix} v_S \\ -\frac{\sigma_{xX}}{Z_F} \end{pmatrix} = -i\omega \Lambda_S E_S(x) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} e^{-i\omega t} \quad (4.5)$$

但し、 Λ_S と E_S は、固体の音響インピーダンス $Z_S = \rho_S c_S$ と液体の音響インピーダンス $Z_F = \rho_F c_F$ を用いて

$$\Lambda_S \equiv \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \frac{Z_S}{Z_F} & \frac{Z_S}{Z_F} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

$$E_S(x) \equiv \begin{pmatrix} e^{iq_S x} & 0 \\ 0 & e^{-iq_S x} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

と定義した。式 (4.5) から、以下で定義される転送行列 $\mathcal{S}$ を用いることで、位置が Δx だけ離れた点における $\mathbf{V}_S$ を表すことができる。

$$\mathbf{V}_S(x + \Delta x) = \mathcal{S}(\Delta x) \mathbf{V}_S(x) \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\Delta x) &\equiv \Lambda_S E_S(\Delta x) \Lambda_S^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(q_S \Delta x) & i \frac{Z_F}{Z_S} \sin(q_S \Delta x) \\ i \frac{Z_S}{Z_F} \sin(q_S \Delta x) & \cos(q_S \Delta x) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.9)$$

転送行列 $\mathcal{S}$ は以下の性質を持つ。

$$|\mathcal{S}| = 1 \quad (4.10)$$

$$\mathcal{S}(x)\mathcal{S}(y) = \mathcal{S}(x + y) \quad (4.11)$$

$$\mathcal{S}(\Delta x)^n = \mathcal{S}(n\Delta x) \quad (4.12)$$

次に、流体中の圧力を考える。流体は断熱近似下にある理想流体であると仮定する。このとき、流体中の粒子速度 $\mathbf{v}_F$ と、背圧 P_0 に対する圧力 P は、ポテンシャル関数 Ψ を用いて次式で表せる。

$$\mathbf{v}_F = -\nabla \Psi \quad (4.13)$$

$$P = \rho_F \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (4.14)$$

ポテンシャル関数 Ψ は、連続の式と流体の Navier-Stokes 方程式から導かれる次式の波動方程式に従う。

$$\frac{1}{c_F^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \nabla^2 \Psi = 0 \quad (4.15)$$

波動は x 方向に伝播することから、 Ψ は液体中の波数 q_F 、進行波の振幅係数 α 、後退波の振幅係数 β を用いて

$$\Psi = c_F(\alpha e^{iq_F x} + \beta e^{-iq_F x})e^{-i\omega t} \quad (4.16)$$

と書ける。式 (4.16) を式 (4.13) から (4.15) に代入すると、 v_F と P および分散関係

$$v_F = -i\omega(\alpha e^{iq_F x} - \beta e^{-iq_F x})e^{-i\omega t} \quad (4.17)$$

$$P = -i\omega Z_F(\alpha e^{iq_F x} + \beta e^{-iq_F x})e^{-i\omega t} \quad (4.18)$$

$$\omega = c_F q_F \quad (4.19)$$

が得られる。ここで、固体中の $\mathbf{V}_S$ 同様、 v_F と P を用いて次式で定義されるベクトル $\mathbf{V}_F$ を考える。

$$\mathbf{V}_F(x) \equiv \begin{pmatrix} v_F \\ \frac{P}{Z_F} \end{pmatrix} = -i\omega \Lambda_F E_F(x) \begin{pmatrix} \alpha & \beta \end{pmatrix} e^{-i\omega t} \quad (4.20)$$

但し、 Λ_F と E_F は

$$\Lambda_F \equiv \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

$$E_F(x) \equiv \begin{pmatrix} e^{iq_F x} & 0 \\ 0 & e^{-iq_F x} \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

で定義した。固体の場合同様、以下で定義される転送行列 $\mathcal{F}$ を用いることで、 Δx だけ離れた点における $\mathbf{V}_F$ を表すことができる。

$$\mathbf{V}_F(x + \Delta x) = \mathcal{F}(\Delta x) \mathbf{V}_F(x) \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\Delta x) &\equiv \Lambda_F E_F(\Delta x) \Lambda_F^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(q_F \Delta x) & i \sin(q_F \Delta x) \\ i \sin(q_F \Delta x) & \cos(q_F \Delta x) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.24)$$

転送行列 $\mathcal{F}$ は以下の性質を持つ。

$$|\mathcal{F}| = 1 \quad (4.25)$$

$$\mathcal{F}(x)\mathcal{F}(y) = \mathcal{S}(x+y) \quad (4.26)$$

$$\mathcal{F}(\Delta x)^n = \mathcal{S}(n\Delta x) \quad (4.27)$$

以上で定義した転送行列 $\mathcal{S}$ と $\mathcal{F}$ を用いて、固体および流体における $\mathbf{V}_S$ および $\mathbf{V}_F$ の伝播を表すことができる。固体と流体の界面において、 $\mathbf{V}_S$ と $\mathbf{V}_F$ は一致するため、ランダム超格子の界面と検出層の界面におけるベクトル $\mathbf{V}_S(L)$ は、各層の材質に応じた転送行列 $\mathcal{S}$ もしくは $\mathcal{F}$ の積と、基材とランダム超格子の界面におけるベクトル $\mathbf{V}_S(0)$ の積の形で、次式のように書くことができる。

$$\mathbf{V}_S(L) = \prod_{k=1}^N U_k(d_k) \mathbf{V}_S(0) \quad (4.28)$$

$$= \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} \mathbf{V}_S(0) \quad (4.29)$$

ここで、 $U_k(d_k)$ は層の材質に応じ $S(d_k)$ と $\mathcal{F}(d_k)$ のいずれかであり、 $\{R_{ij}\}$ は 2×2 の行列で、 U_k の積で決定される。

$\mathbf{V}_S(0)$ において $a = 1$ 、 $b = r$ とし、 $\mathbf{V}_S(L)$ において $a = t$ 、 $b = 0$ と置くと、 r はランダム超格子の反射係数、 t はランダム超格子の透過係数となり、次式で表せる。

$$r = \frac{R_{11} - R_{22} + (Z_S/Z_F)R_{12} - (Z_F/Z_S)R_{21}}{R_{11} + R_{22} - (Z_S/Z_F)R_{12} - (Z_F/Z_S)R_{21}} \quad (4.30)$$

$$t = \frac{2e^{-iq_S L}}{R_{11} + R_{22} - (Z_S/Z_F)R_{12} - (Z_F/Z_S)R_{21}} \quad (4.31)$$

ここで、式 (4.10) および式 (4.25) から、 $\det R = \prod_k |U_k| = 1$ を用いた。求めるべきランダム超格子の透過率 T は、式 (4.31) から、

$$T = |t|^2 = \left| \frac{2}{R_{11} + R_{22} - (Z_S/Z_F)R_{12} - (Z_F/Z_S)R_{21}} \right|^2 \quad (4.32)$$

となる。

4.3 アンサンブル平均透過率と透過率の揺らぎ

4.3.1 アンサンブル平均透過率

Al と水からなるランダム超格子の透過特性を調べる。厚さは $d_S = d_F = 1$ mm とした。透過率は層の配置に依存するため、1000 種の異なるランダム超格子に対するアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ を求めた。周波数 ν に対するアンサンブル平均透過率 $\langle T \rangle$ を図 4.2 に示す。

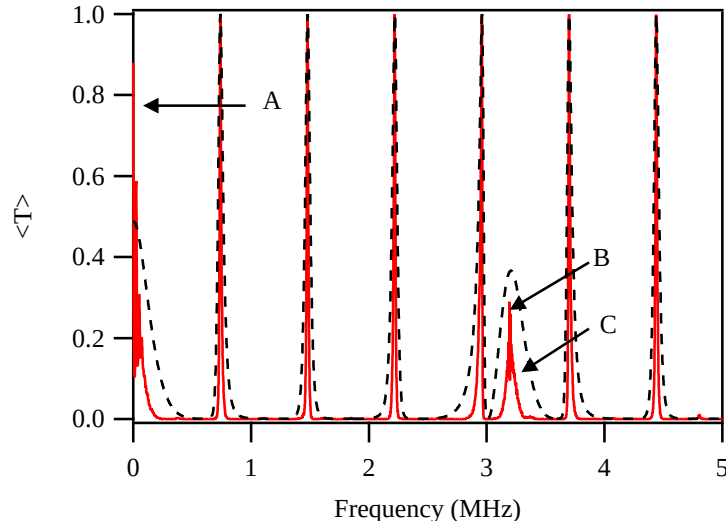


図 4.2 フォノンのアンサンブル平均透過スペクトル $\langle T \rangle$ 。赤線が 1000 のランダム超格子に対する数値計算結果、黒点線が 2 章で示した方法で求めた解析解

図 4.2 から、平均透過率 $\langle T \rangle$ は $\langle T \rangle = 1$ と $\langle T \rangle \approx 0.3$ の、2 種のピークが見られることが分かる。第 1 の種類の、平均透過率 $\langle T \rangle = 1$ のピークの半値全幅 (FWHM) $\Delta\nu$ は $\Delta\nu = 0.015$ MHz である。第 2 の種類のピークでは平均透過率 $\langle T \rangle$ は周波数に応じ、(B)0.28 もしくは (C)0.09 の間で急速に振動する。ピーク以外の周波数では、平均透過率 $\langle T \rangle$ はアンダーソン局在のため減衰し、ほとんど 0 である。

これらの透過率のピークは、Al 層および水層の共鳴透過に由来する。周波数が、水層の共鳴透過周波数 $\nu_{F,n} = \frac{n c_F}{2d_F} = 0.740 \times n$ MHz ($n = 1, 2, \dots$) に一致するとき、転送行列 $\mathcal{F}(d_F)$ は 2×2 の単位行列に位相係数 $e^{in\pi} = (-1)^n$ を乗じた行列となり、従って全体の転送行列 R は $S(d_k)$ の積にのみ依存する。言い換えれば、そのランダム超格子は実効的に Al 層のみからなると認識される。水層が系に含まれないと認識されるため、反射振幅 r は $r = 0$ に、透過振幅 t は $t = e^{i\phi}$ となり、 $T = 1$ となる。ここで、 $e^{i\phi}$ は Al の層数に依存する位相係数である。

一方、第 2 の種類のピークは、Al 層の共鳴透過に由来する。共鳴周波数 $\nu_{S,n}$ は $\nu_{S,n} = 3.197 \times n$ MHz ($n = 1, 2, \dots$) であり、 $\nu_{S,1}$ は第 2 の種類のピーク周波数に一致する。Al 層の共鳴周波数では、 $S(d_S)$ は 2×2 の単位行列に位相係数 $e^{in\pi} = (-1)^n$ を乗じた行列となる。水層の間の Al 層は無いと認識されるため、ランダム超格子は大きな水層として取り扱われる。音響波が影響を受ける反射は、基材と検出器の界面の反射のみであるため、単一の水層を通るときの透過率は

$$T_R(n_F d_F) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{Z_S}{Z_F} - \frac{Z_F}{Z_S} \right)^2 \sin^2(q_F n_F d_F)} \quad (4.33)$$

で求められる。 n_F はランダム超格子に依存する、水層の合計数である。 N 層のランダム超格子が水層を n_F だけ含む確率 $P_N(n_F)$ を考えると、

$$P_N(n_F) = \frac{N C_{n_F}}{2^N} \quad (4.34)$$

となる。このとき、透過率の期待値 $\langle T_R \rangle$ は

$$\langle T_R \rangle = \sum_{n_F=0}^N P_N(n_F) T_R(n_F d_F) \quad (4.35)$$

となる。Al 層の共鳴周波数 $\nu_{S,1}$ では、 $\langle T_R \rangle = 0.09$ となり、図 4.2 で C で示したピークの中心の値と一致する。 $\langle T_R \rangle$ は共鳴周波数の周りの狭い周波数領域で振動し、B で示した値の $\langle T \rangle = 0.28$ に達する。従って、振動する $\langle T_R \rangle$ の幅は $\langle T \rangle$ の幅と同程度である。これが $\langle T \rangle$ の 2 つ目のピークの周りで平均透過率 $\langle T \rangle$ の値が振動することの説明となる。

図 4.2 中の点線は、第 2 章で示した方法で求めた理論曲線である。周波数依存性は数値解と理論曲線とで一致するものの、理論曲線では平均透過率 $\langle T \rangle$ を過大評価している。Al と水の音響インピーダンス比は約 12 であり、Fresnel 反射率は約 0.7 である。そのため、Al/水のランダム超格子に対しては、解析解導出時に仮定した、後方散乱が弱いという Born 近似の適用範囲を超えているためと考えられる。そこで、この後の節では数値解に基づいて透過特性を議論する。

4.3.2 透過率の揺らぎ

以上で述べたように、ランダム超格子における波動の伝播は、ランダム構造で散乱された波の干渉で透過特性が決まる。そのため、本質的にアンダーソン局在による透過率の揺らぎを引き起こす。透過率の揺らぎ ΔT

は $\Delta T = \sqrt{\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2}$ で定義され、第 2 章で示したように平均透過率 $\langle T \rangle$ にのみ依存する。

図 4.3 (a) に、透過率の揺らぎ ΔT と平均透過率 $\langle T \rangle$ の関係を示す。ここで白丸は数値解を、実線で第 2 章の方法で求めた理論曲線を示す。ほとんどのデータ点で、数値解は理論曲線に従っているが、いくつかのデータ点では、明確に理論曲線とは異なる。注目すべき差異の一つは、 $0.1 < \langle T \rangle < 1$ での ΔT が、理論曲線より下部にループ状に分布している点、もう一つは、 $0.1 < \langle T \rangle < 0.2$ での ΔT が、理論曲線と交差して分布している点である。図 4.3 (a) 中のラベル A、B、C で示す 3 つの点は、これらの ΔT の異常な振る舞いに対応しており、図 4.2 に対応するラベルを示す。A のピークは周波数 $\nu = 0$ に極めて近く、S 行列はデータ点 B や C のように、単位行列に近くなる。データ点 B や C は Al 層の共鳴透過ピークであり、異常な透過率揺らぎは共鳴透過に関係していると考えられる。

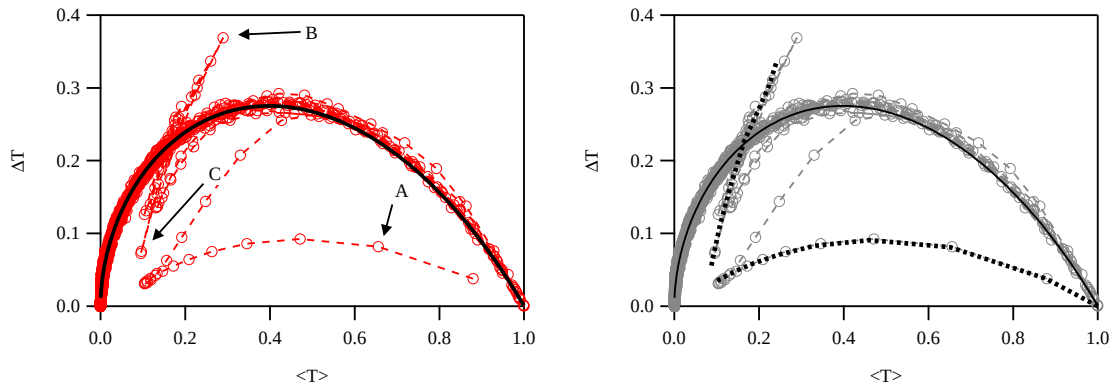


図 4.3 (a) ΔT と $\langle T \rangle$ の関係。赤丸が数値計算結果、黒実線が 2 章で示した解析解。(b) さらに黒点線で式 (4.36) から得られた ΔT と $\langle T \rangle$ の関係を示した

透過率の揺らぎの異常な振る舞いは、これまでの章で示した GaAs/AlAs のランダム超格子では見られなかったことから、いま着目している Al/水ランダム超格子に特有のものである。Al/水ランダム超格子の透過特性の完全な理解のためには、この現象のメカニズムを明確にする必要がある。前述の議論の、合計の水の層の厚さ $n_F d_F$ はランダムに変化する量であり、式 (4.35) に示すように、Al 層の共鳴透過のために平均透過率 $\langle T \rangle$ に影響を与える。合計の水層の厚さの変化で引き起こされる透過率の揺らぎ ΔT_R は、式 (4.34) に示す確率分布 P_N を用いて

$$(b) \Delta T_R = \left[\sum_{n_S=0}^N P_N(n_S) [T_R(n_S d_S)]^2 - \langle T_R \rangle^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.36)$$

で与えられる。周波数 ν を $0 < \nu < 0.02$ MHz および $\nu_{S,1} - 0.02$ MHz $< \nu < \nu_{S,1} + 0.02$ MHz の範囲で変化させたときの平均透過率 $\langle T_R \rangle$ に対する透過率の揺らぎ ΔT_R を、図 4.3 (b) に黒点線として示す。ここで、図 4.3(a) の数値データを、灰色の点として示した。 $\langle T \rangle = 1$ における $\Delta T = 0$ から始まる点線は、周波数領域 $0 < \nu < 0.02$ MHz から得られたもので、データ点 A を含む数値データと極めてよく一致している。数値解と異なり、この点線はループの中にも理論曲線にも向かわずに分布している。これは Al 層における位相発展が式 (4.36) では無視されているためである。 $\Delta T \approx 0.23$ かつ $\langle T \rangle \approx 0.2$ で理論曲線と交差しているデータ点は、

$\nu_{S,1}$ を含む周波数領域で式 (4.36) により再現されている。これは数値解と定量的な一致を示している。 ΔT_R と ΔT が一致していることから、異常な透過率の揺らぎは、Al 層の共鳴透過における水層の合計膜厚の不確定性に由来していることが分かった。

4.4 透過波の周波数特性のチューニング

水層の共鳴透過では平均透過率 $\langle T \rangle = 1$ となり、対応する透過率揺らぎ $\Delta T = 0$ となる。透過率揺らぎ $\Delta T = 0$ となるために、すべてのランダム超格子は層構成によらず、 $\nu_{F,n}$ では透過率 $T = 1$ となる。これは平均透過率 $\langle T \rangle = 0$ の場合も同様である。 $\Delta T = 0$ であるために、すべてのランダム超格子で透過率 $T = 0$ となる。対照的に、平均透過率 $\langle T \rangle = 0.3$ である Al 層の共鳴透過では図 4.3 に示すように、 $\Delta T \approx \langle T \rangle$ となる。この $\Delta T \approx \langle T \rangle$ という関係は透過率に著しい試料依存性を持たせる。デバイスの透過特性は、できる限りサンプル依存のバラつきを持たないことが望ましいため、Al 層の共鳴透過を抑制することを考える。

ここで、共鳴周波数 $\nu_{S,n}$ における波動の伝播を妨げるものを導入する。それは、元の厚さに無理数を乗じた厚さを持つ Al 層である。厚さの比率が無理数であるため、元の Al 層と新たな Al 層は共通の共鳴周波数を持たない。そのため、Al 層の共鳴透過は消失し、透過率のピークとしては、水層における共鳴透過のみが残る。

図 4.4 (a) に、水と 2 種の Al 層からなる Al/水ランダム超格子の周波数に対する平均透過率 $\langle T \rangle$ を示す。水層の厚さ $d_F = 1$ mm で、2 種の Al 層の厚さは $d_{S_1} = 1$ mm および $d_{S_2} = \sqrt{2}$ mm である。2 種の Al 層の出現確率はそれぞれ 1/4 で、水層は 1/2 である。層数の合計 $N = 30$ で、透過率は 1000 サンプルの平均値を求めた。Al 層の共鳴透過は、明らかに期待通り抑制されており、水層の共鳴透過に由来するピークのみが見られる。

同様に、透過帯域を選び、主ピークの外に追い出すことができる。厚さ d_{F_2} をもち、それが元の厚さ d_{F_1} に有理数を掛けた値であるような新たな水層を導入する。共鳴周波数 $\nu_{F,n}$ は元の水層に対しては $\nu_{F,n} = nc_F/2d_{F_1}$ となり、新たな水層に対しては $\nu'_{F,n'} = n'c_F/2d_{F_2}$ となる。これらの周波数 $\nu_{F,n}$ と $\nu'_{F,n'}$ は、 $c_F/2d_{F_1}$ と $c_F/2d_{F_2}$ の公倍数を除き一致しない。従って、両方の水層を通る共鳴透過は、 $\nu_{F,n} = \nu'_{F,n'}$ となる周波数でのみ起こる。図 4.4 (b) は厚さ $d_{S_1} = 1$ mm および $d_{S_2} = \sqrt{2}$ mm の Al 層と、厚さ $d_{F_1} = 1$ mm および $d_{F_2} = 1.4$ mm の水層からなるランダム超格子の周波数に対する平均透過率 $\langle T \rangle$ を示す。4 種の層が、それぞれ同じ 1/4 の確率で積層されている。 $\nu_{F,n}$ と $\nu'_{F,n'}$ の最小公倍数は $\nu_{F,5} = \nu'_{F,7} = 3.7$ MHz である。図 4.4 (b) では、その周波数の透過ピークのみが見られ、他の透過ピークは期待通り消失している。

全ての層が、共鳴透過する共通の周波数を持たないとき、すべての波は局在し、透過率の大きな減衰を示すと期待される。図 4.4 (c) に、3 つの異なる厚さ $d_{F_1} = 1$ mm、 $d_{F_2} = \sqrt{2}$ mm、 $d_{F_3} = \sqrt{3}$ mm の水層と、2 つの異なる厚さ $d_{S_1} = 1$ mm および $d_{S_2} = \sqrt{2}$ mm の Al 層からなる超格子の周波数 ν に対する平均透過率 $\langle T \rangle$ を示す。それぞれの層は同じ確率でランダムに積層されており、水層はそれぞれ 1/6、Al 層はそれぞれ 1/4 の確率である。平均透過率は、周波数 0 近辺を除き、全ての周波数で 0 に近くなっており、期待通りの挙動を示している。周波数 0 近辺で透過率が減少しなかった原因は、低周波数領域では平均自由行程がランダム超格子のサイズに対し大きいために、音響波が局在せず、拡張して存在しているためである。

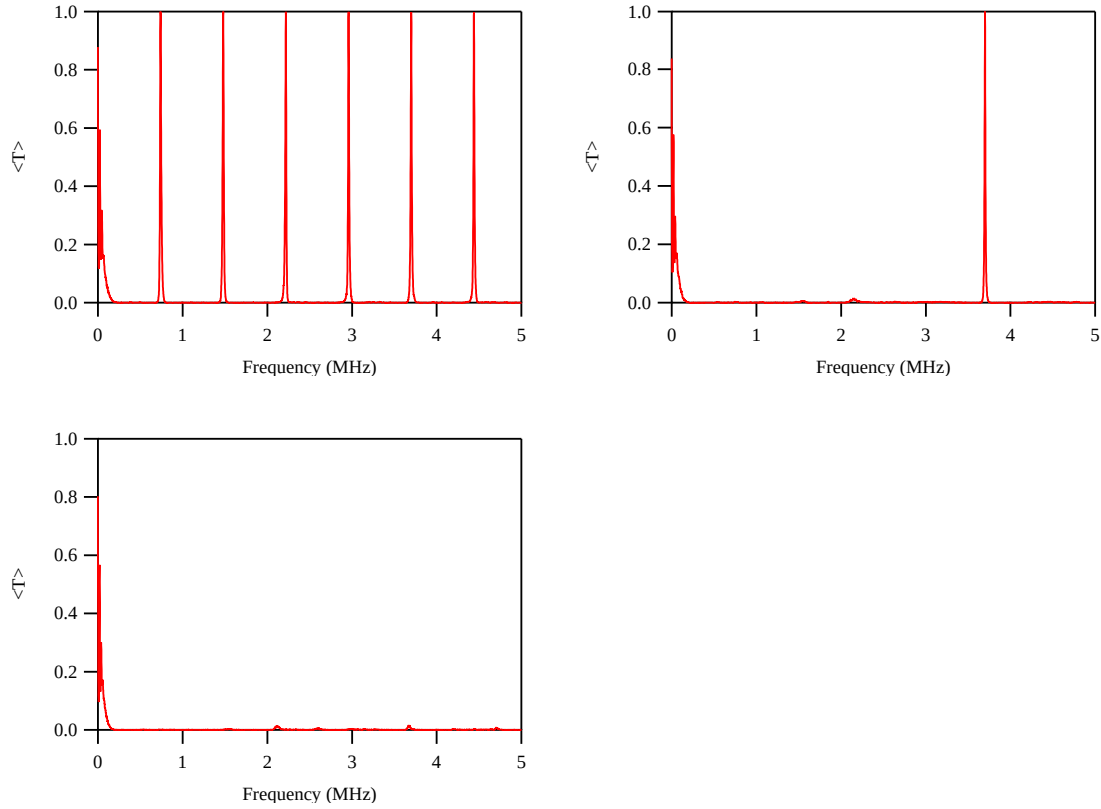


図 4.4 フォノンの平均透過スペクトル $\langle T \rangle$ 。1000 のランダム超格子 ($N=30$) に対する数値計算結果。(a) 固体層の厚さが $1/2$ の確率で $d_{S1} = 1\text{mm}$ 、 $1/2$ の確率で $d_{S2} = \sqrt{2}\text{mm}$ の場合 (b) 図 (a) の条件に加え、液体層の厚さが $1/2$ の確率で $d_{F1} = 1\text{mm}$ 、 $1/2$ の確率で $d_{F2} = 1.4\text{mm}$ の場合 (c) 図 (a) の条件に加え、液体層の厚さが $1/3$ の確率で $d_{F1} = 1\text{mm}$ 、 $1/3$ の確率で $d_{F2} = \sqrt{2}\text{mm}$ 、 $1/3$ の確率で $d_{F3} = \sqrt{3}\text{mm}$ の場合

4.5 まとめ

本章では、Al/水ランダム超格子によるランダム超格子の透過特性を調べた。

これまで述べてた GaAs/AlAs ランダム超格子同様、ランダム超格子中の音響波は、共鳴透過が起こる周波数を除き、アンダーソン局在のために強く減衰した。共鳴透過は層の厚さが波長の半整数倍のときに生じ、音響波は拡張して存在し、透過率は 1 となった。共鳴透過の発生条件に注意を払い、構成する層厚を変えることで、ランダム超格子を伝播する音響波の透過スペクトルを、透過から非透過まで設計できることを示した。

水層の厚さは Al 層を動かすことで調整が可能であることから、本章で示した Al/ランダム超格子は、広い阻止帯と、狭い透過帯域を持ち、その周波数を動的に変化させることができるチューナブル音響フィルターとして動作することが分かった。

Al/水ランダム超格子の透過特性は、第 2 章で述べた解析解と周波数依存性は一致した。一方、透過ピーク周辺では透過率の値は一致しなかった。解析解導出において、後方散乱の 1 次までのみを考慮したため、Al/

水ランダム超格子のような、音響インピーダンス比が大きく、後方散乱がより強い系では、Born 近似の適用条件から外れたためと考えられる。より精度良く記述するためには、解析解の導出において、より高次の後方散乱の効果を取り込むことが必要である。

遮音デバイスの実用性をより高めるためには、十分な阻止能をより小さいサイズで実現できることが求められる。少ない層数で十分な遮音性能を得るためには、音響インピーダンス比の大きい材料の組み合わせが必要となるため、本章で述べた Al/水ランダム超格子のような固体と液体からなる系は、フィルターデバイスとして有用と考えられる。

参考文献

- [1] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade and J. N. Winn, *Photonic Crystals*, Princeton University Press, Princeton, (1995).
- [2] C. M. Soukoulis, *Photonic Band Gap Materials*, Kluwer Academic, Dordrecht (1996).
- [3] Z. Y. Li and K. M. Ho, Phys. Rev. B **68**, 155101(2003).
- [4] L-M. Li and Z-Q. Zhang, Phys. Rev. B **58**, 9587(1998).
- [5] Pendry, J. B., Phys. Rev. Lett. **85**, 3966(2000).
- [6] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2nd ed. (2005).
- [7] O. Sigmund and K. Hougaard, Phys. Rev. Lett. **100**, 153904(2008).
- [8] E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
- [9] E. N. Economou and M. M. Sigalas, Phys. Rev. B **48**, 13434(1993).
- [10] M. S. Kushwaha and P. Halevi, J. Acoust. Soc. Am. **101**, 619(1997).
- [11] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Chenni, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, and D. Prevost, Phys. Rev. Lett. **86**, 3012(2001).
- [12] M. Kafesaki and E. N. Economou, Phys. Rev. B **60**, 11993(1999).
- [13] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. Lett. **71**, 2022 (1993).
- [14] R. Martínez-Sala, J. Sancho, J. V. Sánchez, V. Gómez, J. Llinares and F. Meseguer, Nature **378**, 241-242(1995).
- [15] M. M. Sigalas and E. N. Economou, J. Sound Vib. **158**, 377(1992).
- [16] C. Y. Qiu and L. Zhengyou, Appl. Phys. Lett. **89**, 063106 (2006).
- [17] J. H. Page, Ping Sheng, H. P. Schriemer, I. Jones, Xiaodun Jing and D. A. Weitz, Science **271**, 634(1996).
- [18] H. P. Schriemer, M. L. Cowan, J. H. Page, Ping Sheng, Zhengyou Liu, and D. A. Weitz, Phys. Rev. Lett. **79**, 3166(1997).
- [19] X. D. Zhang and Z. Y. Liu, Appl. Phys. Lett. **85**, 341 (2004).
- [20] K. Imamura and S. Tamura, Phys. Rev. B **70**, 174308(2004).
- [21] A. V. Akimov, Y. Tanaka, A. B. Pevtsov, S. F. Kaplan, V. G. Golubev, S. Tamura, D. R. Yakovlev, and M. Bayer, Phys. Rev. Lett. **101**, 033902(2008).
- [22] M. S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martínez, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. B **49**, 2313 (1994).

- [23] W. Fugen, L. Zhengyou and L. Youyan, J. Phys. D: Appl. Phys. **35** 162-165(2002).
- [24] T. Wang, M.-P. Sheng, H. Wang and Q.-H. Qin, Acoustics Australia **43**, 275-281(2015).
- [25] P.W. Anderson, Rev. Mod. Phys. **50**,191(1978).
- [26] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V. Ramakrishnam: Phys. Rev. Lett., **42**, 673 (1979)
- .
- [27] K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. 53, 77 (1973).
- [28] *Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media*, edited by P. Sheng (World Scientific, Singapore, 1990).
- [29] S. John, H. Sompolinsky, and M. J. Stephen, Phys. Rev. B **27**, 5592(1983)
- [30] T. R. Kirkpatrick, Phys. Rev. B **31**, 5746(1985).
- [31] S. John, Phys. Rev. Lett. **53**, 2169(1985).
- [32] S. John, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486(1987).
- [33] S. Tamura and F. Nori, Phys. Rev. B**41**, 7941(1990).
- [34] N. Nishiguchi, S. Tamura, and F. Nori, Phys. Rev. B **48**, 2515-2528 (1993).
- [35] N. Nishiguchi, S. Tamura, and F. Nori, Phys. Rev. B **48**, 14426-14435 (1993)
- [36] T. Yoshihiro and N. Nishiguchi, Phys. Rev. B **100**, 235441(1-10) (2019) .
- [37] A. Chaudhuri, A. Kundu, D. Roy, A. Dhar, J. L. Lebowitz, and H. Spohn, Phys. Rev. B **81**, 064301 (2010).
- [38] H. A. Fertig and T. L. Reinecke, Phys. Rev. B **50**, 7443-7452(1994).
- [39] L.D. Landau, E. M. Lifshitz, L. P. Pitaevskii and A. M. Kosevich *Theory of Elasticity* 3rd ed. (Elsevier, 2012) Chapter I.
- [40] L.D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics* (Pergamon Press,1959) Chapter VIII.
- [41] A. A. Abrikosov, Solid State Commun. **37**, 997(1981).

第 5 章

結論

本学位論文では、乱れた構造を用いたフォノンニックデバイスである 1 次元ランダム超格子の実応用にあたり、第 1 にランダム超格子に音響波が斜入射するときの伝播とモード変換の効果を明らかにすること、第 2 に、固体／液体 1 次元ランダム超格子を用いた音響波の透過制御の方法を確立することを目的に議論を行った。

第 1 章では、本研究の背景および目的理由について述べた。

音響波デバイスとして盛んに研究されている周期構造に基づくフォノンニック結晶の説明をした。そしてその限界について述べ、ランダムな構造を有するフォノンニック結晶を導入する経緯を述べた。具体的には、1 次元ランダム超格子を導入することとした。それと同時に、解決すべき 2 つの点を明らかにし、それぞれを本学位論文で明らかにする事を述べた。

第 2 章では、1 次元ランダム超格子を透過する音響波の局在に関する基本的な性質を明らかにした。

ランダム系における音響波の透過波はアンダーソン局在による局在現象を示す。先行研究に基づき、1 次元ランダム超格子を伝播する横波音響フォノンのアンダーソン局在による平均透過率の周波数依存性、および透過率の揺らぎと平均透過率の関係について述べた。このときのフォノンの振る舞いは解析的に求められた理論式で記述することができ、数値実験の結果と極めてよく一致した。また、フォノンの透過率の統計的な性質はランダム超格子の特定の配置には依存せず、ランダム超格子に普遍的なものであることを述べた。

第 3 章では、フォノンのアンダーソン局在におけるモード変換の効果を調べた。

本章では、1 次元ランダム超格子を音響波デバイスとして用いる場合、斜め方向からの音響波入射により第 2 章で設定した状況が成立しなくなることを受け、界面で生じる音響波のモード変換の効果を詳細に調べた。その結果、垂直入射時には縦波フォノンと横波フォノンが独立してアンダーソン局在を示す一方、斜入射時には縦波フォノンと横波フォノンのモード変換が起こり、入射角が増加するほどモード変換が強くなり、ついには縦波とも横波とも異なる結合モードが生じることが分かった。第 2 章で述べた、モード変換の無い 1 次元ランダム超格子を透過するフォノンとの統計的な性質の比較から、高入射角で生じた結合モードもまた、ある単一のモードとしてアンダーソン局在を引き起こし、ランダム超格子の透過は妨げられることが分かった。応用の観点からは、垂直入射のみならず、あらゆる入射角のフォノンが入射する。高入射角でもフォノンはランダム超格子中で局在することから、ランダム超格子を遮音デバイスに用いる場合でも、アンダーソン局在によるフォノン伝播の抑制効果は期待できることが分かった。

第 4 章では、1 次元ランダム超格子をチューナブルな音響波デバイスとして応用することを想定し、可変可能な構造の 1 次元ランダム超格子として固体/液体超格子を導入し、音響波の透過特性の制御方法について明

らかにした。ランダム超格子の構成材料の音響インピーダンスが大きい例として、固体/液体超格子である Al/水ランダム超格子によるランダム超格子の透過特性を調べた。これまで述べてきた全固体のランダム超格子同様、共鳴透過周波数を除き、アンダーソン局在のために振動波の透過率は大きく減衰することが分かった。水層の厚さは Al 層を動かすことで調整が可能であることから、ランダム超格子は広い阻止帯と狭い透過帯域を持ち、その周波数を動的に変化させることができるチューナブル音響フィルターとしての可能性を示すことが出来た。また、Al/水ランダム超格子の透過率は、共鳴透過周波数の近傍で、第 2 章で述べた解析解とは異なる振る舞いをする事が分かった。これは構成する材料の音響インピーダンス比が固体/固体超格子の場合より散乱の強度が大きくなるためであり、音響波の反射において第 2 章で述べた理論解析の場合の Born 近似以上の近似を要するためと考えられた。

以上の結果から、乱れた構造を用いたフォノンニックデバイスである 1 次元ランダム超格子は、音響波の透過・遮蔽ともに有効である事が分かった。これは従来盛んに研究されてきた周期構造を有するフォノンニック結晶とは原理が異なるものの、新たな音響デバイスの可能性を開くものと期待される。

謝辞

本研究の遂行にあたり、指導教官として終始、懇切丁寧かつ多大なご指導を賜りました、北海道大学名誉教授 西口規彦先生に深謝いたします。

北海道大学大学院 工学研究院教授 矢久保考介先生には主査としてご助言を賜りました。ここに感謝を申し上げます。

本研究のうち第3章の内容は、富士フイルム株式会社との共同研究として行ったものです。納谷ラボ代表 納谷昌之博士 (元 富士フイルム株式会社 先端コア技術研究所 研究主幹) および富士フイルム株式会社 先端コア技術研究所 主席研究員 笠松直史博士には、本研究を行う機会を与えて頂くとともに、心強い激励を賜りました。厚く御礼を申し上げます。

同社 解析技術センター 研究員 安田英紀博士には、本研究をまとめるにあたりご助言を賜りました。御礼申し上げます。

最後に、本研究の遂行に理解を示し惜しみなく支えてくれた、私の家族に感謝の意を表します。