

# 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 5 日現在

機関番号：14401  
 研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）  
 研究期間：2008 ～ 2012  
 課題番号：20104010  
 研究課題名（和文） 動的相関電子系における相転移・クロスオーバーと光学スペクトル  
 研究課題名（英文） Phase Transition and Crossover in Dynamically Correlated Electron Systems  
 研究代表者  
 浅野 建一（ASANO KENICHI）  
 大阪大学・大学院理学研究科・准教授  
 研究者番号：10379274

研究成果の概要（和文）：  
 電子と正孔が同数共存する系の熱平衡状態は、物性物理学の縮図と言える程の多様性を示す。この意味で電子正孔系は物性基礎理論を考察する究極の舞台である。同時にこの系の研究は半導体レーザーへの応用面でも重要である。我々は電子正孔系を相関効果まで考慮して取り扱う新しい手法を開発し、低次元電子正孔系の相図に対する統一的理解（グローバル相図）を明らかにした。また、電子正孔系と半導体系のちょうど中間に位置する系として Dirac 電子系に注目し、強磁場下のグラフェンにおけるサイクロトロン共鳴や、半導体カーボンナノチューブにおける荷電励起子と励起子分子について考察した。さらに、電子正孔系と深い関わりを持つ他バンド強相関電子系として、多軌道ハバード模型およびカゴメ格子上的ハバード模型についても考察した。

研究成果の概要（英文）：  
 The equilibrium state of electron-hole systems is an “epitome” of the condensed matter physics, providing an ultimate stage for the fundamental study on it. This system is also important from the viewpoint of application to the laser devices. We developed a novel method to properly deal with the many body effect of the low-dimensional electron-hole systems, and succeeded in clarifying their global phase diagrams. In addition, we made focus on the Dirac electron systems, which interpolates the electron-hole systems (semimetals) and the semiconducting systems. The cyclotron resonance on graphene under strong magnetic field and the biexcitons and trions in semiconducting carbon nanotubes are studied. We further studied the multiband Hubbard models (ex. multiorbital systems and Kagomé lattices), which are the strongly correlated electron systems relevant to the electron-hole systems.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	9,500,000	2,850,000	12,350,000
2009 年度	8,500,000	2,550,000	11,050,000
2010 年度	8,400,000	2,520,000	10,920,000
2011 年度	9,000,000	2,700,000	11,700,000
2012 年度	8,200,000	2,460,000	10,660,000
総計	43,600,000	13,080,000	56,680,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性 I

キーワード：半導体, 電子正孔系, Dirac 電子系

1. 研究開始当初の背景 | 光励起されたノンドープ半導体や Type II

量子井戸（セミメタル系）では、電子と正孔が同数共存した（擬）熱平衡状態が実現される。これが低密度かつ低温で励起子気体、高密度または高温で電子正孔プラズマとなり、その間で励起子モット転移を示すこと、低温で量子凝縮し、励起子 BEC や電子正孔 BCS を示すことが古くから理論的に指摘されてきた。しかしこれらの理論は主に三次元（バルク）系を、遮蔽ハートリー・フォック近似 + はしご近似を用いて、相図上の限られた範囲内で調べる段階に留まっていた。

## 2. 研究の目的

熱平衡状態に達した同数の電子と正孔からなる系（電子正孔系）は、物性物理学における究極の基礎研究の舞台を提供する。全ての物質は負電荷を持つ電子と正電荷を持つ原子核イオンから成り立ち、全体としては電気的に中性で、電子正孔系がこの側面を究極まで簡約した系になっているからである。実際この系の相図は物性物理学の縮図と言うべき多様性を示す。特に半導体を強い光で励起することで実現される電子正孔系はレーザー素子への応用の観点からも重要で、多体効果を考慮した半導体レーザー理論の構築が急務となっている。

電子正孔系はフェルミ準位で複数のバンドが重なったセミメタル系でも実現される。そのため、この系の物理は、半導体とセミメタルの狭間に位置する Dirac 電子系や、強相関電子系の分野で注目されている多軌道・多バンドハバード模型とも密接な繋がりを持っている。こうした広い分野に跨る物理を、多体効果の観点から俯瞰的に考察することが本研究課題の目標である。

## 3. 研究の方法

研究テーマが多岐に渡るため、それぞれのテーマごとに分けて述べる。

- (1) 強磁場下のグラフェンにおけるサイクロトロン共鳴：少数電子系のハミルトニアンの数値的対角化。
- (2) 一次元電子正孔ハバード模型：クラスター摂動法により状態密度を計算。
- (3) 密度がアンバランスな電子正孔系における新奇対凝縮相：BCS タイプの平均場近似を電子正孔対の重心運動量がゼロでない場合に拡張。
- (4) 半導体カーボンナノチューブにおける荷電励起子と励起子分子：バンドの非放物線性、構造因子、遮蔽効果、自己エネルギー補正を取り込んだハミルトニアンを Lanczos 法で数値的に対角化。
- (5) 擬一次元電子正孔系・二次元電子正孔系のグローバル相図：電子間・正孔間・電子正孔間の T 行列、電子および正孔の自己エネルギー、および遮蔽効果の三者を

自己無撞着に決定する新しい自己無撞着 T 行列近似を開発。

- (6) Dirac 電子系の設計：偶然縮退を扱う新しい解析的手法を開発。
- (7) 多軌道ハバード模型およびカゴメ格子上的ハバード模型における金属絶縁体転移：セルラー動的平均場理論。

## 4. 研究成果

以下、年度ごとに研究成果をまとめる。括弧内の番号は雑誌論文の文献番号を表す。

**【2008 年度】** (1) 半導体とセミメタル系の境界に位置する Dirac 電子系の代表例としてグラフェン系を取り上げ、その磁気光学応答を調べた。特に、量子ホール効果領域においてサイクロトロン共鳴に対する多体効果を調べ、 $N=0$  から  $1$  へのランダウ準位間遷移では線幅が非常に小さく近似的にコーンの定理が成立するが、 $N=1$  から  $2$  への遷移では多体効果による大きな線幅の増大が現れることを見出した。(2) 一次元電子正孔ハバード模型をクラスター摂動法で扱い、相互作用の強さによらず基底状態が絶縁体的で、引力相互作用の強さに応じて励起子気体から励起子分子気体へ移り変わる様子を解析した。(3) 電子正孔ハバード模型に動的平均場理論を適用して、励起子モット転移と対凝縮転移について調べた。

**【2009 年度】** (1) タイプ II 型の量子井戸で実現される電子正孔二層系では、電子と正孔が空間的に離れた 2 次元面に閉じ込められているため、電子正孔の再結合を非常に小さく抑えることができる。電子と正孔が熱平衡に達するための時間を十分に確保できるため、電子正孔対が量子凝縮した状態を調べるのに格好の系となっている。我々は電子と正孔の密度が異なる電子正孔二層系において実現する新奇な量子凝縮相について調べた。クーロン相互作用の長距離性を反映し、s 波成分以外の対称性を持つ成分が混合するため、重心運動量がゼロでない対が凝縮した Fulde-Ferrell 相が安定化することを明らかにし、重心運動量がゼロの対が凝縮した Sarma 相が支配的であるという従来の定説を覆した [16]。(2) 二次元正方格子上の二軌道ハバード模型を調べ、 $1/4$  フィリングにおいてリエントラント的な金属-絶縁体転移が現れることをセル型動的平均場理論により示した。バンド幅の違いを導入すると、強磁性・反強軌道状態が安定化した結果、系は絶縁体的になる [17]。

**【2010 年度】** (1) グラフェンを筒状に丸めた（半導体的な）カーボンナノチューブでは、一次元性を反映して励起子が非常に大きな束縛エネルギーを持つ。既存の理論では励起子分子も安定であると予想されていたが、実験では観測されず謎となっていた。そこで、

既存の理論が無視してきたバンドの非放物線性、構造因子、遮蔽効果、自己エネルギー補正を考察した。その結果、構造因子と遮蔽効果による相互作用の補正が非常に重要で、励起子分子の束縛エネルギーはこれまで予想されていた値の半分以下であることを明らかにした[11]。(2) 異方的なカゴメ格子上のハバード模型において金属絶縁体転移を調べた。異方性を強めて幾何学的フラストレーションを弱めるとモット転移が起きる相互作用の値が小さくなる。このとき転移点近傍では、相互作用効果により有効的に異方性が増強され、フェルミ面やスピン相関に劇的な変化が現れる[14]。

**【2011年度】**(1)近年、高品位のT型量子細線上において擬一次元電子正孔系の光学的性質が詳しく調べられ、省電力・低閾値レーザーへの応用が期待されている。そこで、擬一次元電子正孔系の熱平衡状態を考察した。広い密度と温度の領域を同一の理論の枠組みで記述するため、新しい自己無撞着T行列近似を開発した。これは電子間・正孔間・電子正孔間のT行列、電子および正孔の自己エネルギー、および遮蔽効果の三者を自己無撞着に決定する理論である。この理論はプラズマと励起子気体の中間的な状態に埋め込まれた電子と正孔の相関を考察でき、励起子のイオン化率を使って励起子気体と電子正孔プラズマ間の励起子モット転移・クロスオーバーを詳細に調べることが可能にする。また、励起子形成による遮蔽効果抑制の効果を考慮しているため、通常の摂動論では扱えない「純粋なMott転移」まで調べることができる。この枠組を適用し、擬一次元電子正孔系のグローバル相図を描き、実験で測定された光学応答のスペクトルを半定量的に再現することに成功した[3,5]。(2)カーボンナノチューブ上の荷電励起子について考察した。前年度に考察した励起子分子同様に、遮蔽と構造因子の効果が束縛エネルギーを小さく抑えることがわかった。この抑制効果は荷電励起子よりも励起子分子に対して強く効くため、荷電励起子の方が励起子分子よりも大きな束縛エネルギーを持つ。また、クーロン相互作用の短距離部分から生じる準位の微細構造についても調べ、実験の観測結果を定性的に理解することに成功した[4]。(3)固体電子のバンドにDirac点が出現する条件を一般化されたvon-Neumann-Wigner条件の形で提示した。さらに、Dirac点が見られるk点を特定する効率的な手法を開発し、Dirac電子系の設計指針を与えることに成功した[10]。(4)三軌道ハバード模型において金属絶縁体転移を調べ、軌道分裂と相互作用の大きさに対する相図を描いた。フント結合と軌道分裂の競合により、軌道ゆらぎの強さが相互作用の強さに対して非単調に変化し、金属絶縁体

転移にリエントラント的振る舞いが現れることがわかった[7]。

**【2012年度】**(1)電子正孔系を解析するのに伝統的に用いられてきた半導体Bloch方程式を、低次元電子正孔系に適用した結果について再考察した。バルク(三次元)系では、Mott密度(励起子が不安定化する密度)と透明密度(プラズマ利得を生じる密度)が全く異なるのに対し、低次元電子正孔系では両者が一致することを示し、この密度を簡単な古典量子クロスオーバーの条件式で表せることを見出した[3]。(2)前年度に開発した自己無撞着T行列近似を二次元電子正孔系に対して適用し、その相図の全貌を明らかにするとともに、光学応答のスペクトルについて調べた。(3)自己無撞着T行列近似を使って電子正孔対凝縮の転移温度を調べ、低次元電子正孔系では有限温度における相転移が起こらないことを明らかにした。(3)カゴメ格子ハバード模型に対する磁場印加の効果を調べ、金属から絶縁体への磁場誘起モット相転移が起こることを明らかにした。このモット相転移は、単純なBrinkmann-Rice機構ではなく、磁場が幾何学的フラストレーションを抑制し、非局所的な反強磁性相関が強まることで生じる[1]。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 24 件)

1. T. Kita, T. Ohashi, and N. Kawakami, “Field-induced Mott transition in kagome lattice Hubbard model”, *Physical Review B* 87, 155119/1-155119/6 (2013). (DOI: 10.1103/PhysRevB.87.155119), 査読有
2. T. Kita, T. Ohashi, and N. Kawakami, “Mott Transitions in Three-Orbital Hubbard Model at Fractional Band Filling”, *Journal of Physics. : Conference Series* 391, 012157/1-012157/4 (2012). (DOI:10.1088/1742-6596/391/1/012157), 査読有
3. T. Yoshioka and K. Asano, “Classical-quantum crossovers in quasi-one-dimensional electron-hole systems: Exciton-Mott physics and interband optical spectra”, *Physical Review B* 86, 115314/1-115314/16 (2012). (DOI: 10.1103/PhysRevB.86.115314), 査読有
4. K. Watanabe and K. Asano, “Trions in semiconducting single-walled carbon

- nanotubes”, *Physical Review B* 85, 035416/1-035416/9 (2012). (DOI:10.1103/PhysRevB.85.035416), 査読有
5. T. Yoshioka and K. Asano, “Exciton-Mott Physics in a Quasi-One-Dimensional Electron-Hole System”, *Physical Review Letters* 107, 256403/1-256403/5 (2011). (DOI:10.1103/PhysRevLett.107.256403), 査読有
  6. 浅野建一, “準熱平衡状態にある電子正孔系の理論” *固体物理* Vol. 46, 565-576 (2011). 査読有
  7. T. Kita, T. Ohashi, N. Kawakami, “Mott transition in three-orbital Hubbard model with orbital splitting”, *Physical Review B*, 84, 195130/1-195130/9 (2011). (DOI: 10.1103/PhysRevB.84.195130), 査読有
  8. M. Okano, P. Huai, M. Yoshita, S. Inada, H. Akiyama, K. Kamide, K. Asano, and T. Ogawa, “Robust Carrier-Induced Suppression of Peak Gain Inherent to Quantum-Wire Lasers”, *Journal of the Physical Society of Japan* 80, 114716/1-114716/9 (2011). (DOI: 10.1143/JPSJ.80.114716), 査読有
  9. T. Yoshida, T. Ohashi, N. Kawakami, “Effects of Conduction Electron Correlation on Heavy-Fermion Systems”, *Journal of the Physical Society of Japan* 80, 064710/1-064710/8 (2011). (DOI: 10.1143/JPSJ.80.064710), 査読有
  10. K. Asano and C. Hotta, “Designing Dirac points in two-dimensional lattices”, *Physical Review B* 83, 245125/1-245125/14 (2011). (DOI: 10.1103/PhysRevB.83.245125), 査読有
  11. K. Watanabe and K. Asano, “Biexcitons in semiconducting single-walled carbon nanotubes”, *Physical Review B* 83, 115406/1-115406/5 (2011). (DOI: 10.1103/PhysRevB.83.115406), 査読有
  12. K. Yamashita, K. Asano, and T. Ohashi, “Ground state of electron-hole bilayer with density imbalance”, *Physica status solidi (c)* 8, 177-180 (2011). (DOI: 10.1002/pssc.201000683), 査読有
  13. K. Shibata, T. Ohashi, T. Ogawa, and R. Kodama, “Structure dependence of metallization density in solid atomic hydrogen using dynamical mean field theory”, *Physical Review B* 82, 195123/1-195123/5 (2010). (DOI: 10.1103/PhysRevB.82.195123), 査読有
  14. Y. Furukawa, T. Ohashi, Y. Koyama, and N. Kawakami, “Mott transition in the Hubbard model on the anisotropic kagome lattice”, *Physical Review B* 82, 161101/1-161101/4 (2010). (DOI: 10.1103/PhysRevB.82.161101), 査読有
  15. 浅野建一, “電子正孔系における励起子モット転移と量子凝縮”, *素粒子論研究* Vol. 118, 51-58, 査読なし
  16. K. Yamashita, K. Asano, and T. Ohashi, “Quantum Condensation in Electron-Hole Bilayers with Density Imbalance”, *Journal of the Physics Society of Japan* 79, 033001/1-033001/4 (2010). (DOI: 10.1143/JPSJ.79.033001), 査読有
  17. T. Kita, T. Ohashi, and S. Suga, “Cellular Dynamical Mean Field Study on Two-Orbital Hubbard Model with Different Bandwidths”, *Journal of Physical Society of Japan* 79, 014713/1-014713/5 (2010). (DOI: 10.1143/JPSJ.79.014713), 査読有
  18. T. Kita, T. Ohashi, and S. Suga, “Spatial Fluctuations in Two-Orbital Hubbard Model”, *Journal of Physics: Conference Series* 200, 012086/1-012086/4 (2010). (DOI:10.1088/1742-6596/200/1/01208), 査読有
  19. T. Kita, T. Ohashi, and S. Suga, “Spatial fluctuations of spin and orbital nature in two-orbital Hubbard Model”, *Physical Review B* 79, 245128/1-245128/6 (2009). (DOI: 10.1103/PhysRevB.79.24512), 査読有
  20. T. Kita, T. Ohashi, and S. Suga, “Spatial fluctuations of spin and orbital in two-orbital Hubbard model: cluster dynamical mean field study”, *Journal of Physics: Conference Series* 150, 042094/1-042094/4 (2009). (DOI:10.1088/1742-6596/150/4/042094), 査読有
  21. T. Ueda, T. Ohashi, K. Asano, and T. Ogawa, “Exciton Mott transition in electron-hole systems: Dynamical mean-field theory for the continuous-space model”, *Journal of Physics: Conference Series* 148, 012052/1-012052/3 (2009). (DOI:10.1088/1742-6596/148/1/012052), 査読有
  22. K. Watanabe, K. Asano, and T. Ogawa, “Multi-excitonic effects on optical spectra of semiconducting carbon

nanotubes”, Journal of Physics: Conference Series 148, 012053/1-012053/3 (2009).

(DOI:10.1088/1742-6596/148/1/012053), 査読有

23. T. Ohashi, T. Ueda, K. Asano, and T. Ogawa, “Exciton Mott transition and pair condensation in the electron-hole system”, Journal of Physics: Conference Series 148 012050/1-012050/4 (2009). (DOI:10.1088/1742-6596/148/1/012050), 査読有
24. H. Tsunetsugu, K. Hattori, T. Ohashi, N. Kawakami, and T. Momoi, “Strongly Correlated Electrons on Frustrated Lattices”, Journal of Physics: Conference Series 145, 012015/1-012015/8 (2009). (DOI:10.1088/1742-6596/145/1/012015), 査読有

[学会発表] (計 63 件)

1. K. Asano, “Mott physics in electron-hole systems”, The 2nd OU-RuG Symposium on Particle-Nuclear and Condensed Matter Physics: New Challenges and Opportunities, 2012 年 11 月 26 日, 大阪 (招待講演).
2. T. Yoshioka, “Global phase diagram and interband optical spectra in two-dimensional electron-hole system”, DYCE International Workshop, 2012 年 8 月 9 日, 屈斜路 (招待講演).
3. T. Ohashi, “Linearized dynamical cluster approximation study of the two-dimensional Hubbard models”, DYCE International Workshop, 2012 年 8 月 8 日, 屈斜路.
4. K. Asano, “Exciton-Mott physics and interband optical spectra in low-dimensional electron-hole systems”, DYCE International Workshop, 2012 年 8 月 8 日, 屈斜路 (招待講演).
5. K. Asano, “Mott transition and crossover in quasi-one-dimensional electron-hole systems”, The 31st International Conference of the Physics of Semiconductors (ICPS), 2012 年 8 月 3 日, Zurich, Switzerland.
6. T. Yoshioka, K. Asano, “Quasi-equilibrium phase diagram and optical response in two-dimensional electron-hole system”, The 31st International Conference of the Physics of Semiconductors (ICPS), 2012 年 7 月 31 日, Zurich, Switzerland.
7. T. Kita, T. Ohashi, and N. Kawakami, “Mott transition in frustrated Hubbard model with spatial anisotropy: Cellular dynamical mean field study”, The 19th International Conference on Magnetism (ICM), 2012 年 7 月 12 日, Busan, Korea.
8. M. Yoshita, M. Okano, H. Akiyama, L. N. Pfeiffer, K. W. West, P. Huai, K. Kamide, K. Asano, T. Ogawa, “Microscopic study on carrier-density-dependent gain characteristics in cleaved-edge overgrown T-shaped quantum-wire lasers”, The 19th international conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS), 2011 年 7 月 27 日, Tallahassee, USA).
9. K. Asano and C. Hotta, “Designing Dirac points in anisotropic lattices”, The 19th international conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS), 2011 年 7 月 27 日, Tallahassee, USA.
10. T. Yoshioka and K. Asano, “Phase Diagram and Optical Response Spectra in Quasi-One-Dimensional Electron Hole systems”, The 19th international conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (EP2DS), 2011 年 7 月 26 日, Tallahassee, USA.
11. T. Kita, T. Ohashi, N. Kawakami, “Orbital-selective Mott transition in multiorbital Hubbard model with orbital degeneracy lifting”, International Conference on Heavy Electrons 2010, 2010 年 9 月 19 日, 東京.
12. K. Asano and T. Ando, “Spectral lineshapes of cyclotron resonance in monolayer and bilayer grapheme”, The 19th International Conference on the Application of High Magnetic Fields in Semiconductor Physics and Nanotechnology, 2010 年 8 月 3 日, 福岡.
13. K. Watanabe, K. Asano, “Screening effect to biexciton in carbon nanotubes”, The 16th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices, 2010 年 7 月 20 日, Beijing, China.
14. K. Yamashita, K. Asano, T. Ohashi, “Ground state of electron-hole bilayer with density imbalance”, The 9th International Conference on

- Excitonic and Photonic Processes in Condensed and Nano Materials, 2010年7月14日, Brisbane, Australia.
15. T. Kita, T. Ohashi, S. Suga, “Spatial Fluctuations in Two-Orbital Hubbard Model”, The 18th International Conference on Magnetism, 2009年7月28日, Karlsruhe, Germany.
  16. K. Yamashita, K. Asano, T. Ohashi, T. Ogawa, “Quantum Condensation in the electron-hole system with density imbalance”, The 18th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems, 2009年7月21日, 神戸.
  17. K. Asano and T. Ando, “Approximate validity of Kohn’s theorem in cyclotron resonance in grapheme”, The 18th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems, 2009年7月23日, 神戸.
  18. T. Ueda, T. Ohashi, K. Asano, T. Ogawa, “Exciton Mott transition in electron-hole systems: Dynamical mean-field theory for the continuous-space model”, The 3rd International Conference on Photo-Induced Phase Transitions and Cooperative Phenomena, 2008年11月13日, 大阪.
  19. T. Ohashi, T. Ueda, K. Asano, T. Ogawa, “Exciton Mott transition and pair condensation in the electron-hole system”, The 3rd International Conference on Photo-Induced Phase Transitions and Cooperative Phenomena, 2008年11月13日, 大阪.
  20. K. Watanabe, K. Asano, T. Ogawa, “Multi-excitonic effects on optical spectra of semiconducting carbon nanotubes”, The 3rd International Conference on Photo-Induced Phase Transitions and Cooperative Phenomena, 2008年11月13日, 大阪.

[その他]

ホームページ等

<http://www.acty.phys.sci.osaka-u.ac.jp/~asano/research.html>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

浅野 建一 (ASANO KENICHI)

大阪大学・大学院理学研究科・准教授

研究者番号：10379274

### (2) 研究分担者

大橋 琢磨 (OHASHI TAKUMA)

大阪大学・大学院理学研究科・助教

研究者番号：20452419