

## 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：若手研究(B)

研究期間：2009～2012

課題番号：21740231

研究課題名（和文） 半導体におけるバンドギャップ制御と相関効果の理論

研究課題名（英文） Theory on band-gap control and correlation effects in semiconductors

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）：

直接半導体でバンドギャップをゼロに近づけると、バンドの非放物線性が増大し、ついには線形分散を持った Dirac 電子系が実現する。バンドギャップをさらに負にすると、バンドが重なってついにはセミメタル系（電子正孔系）となる。本研究ではこうした Dirac 電子系やセミメタル系（電子正孔系）における多体効果の役割について考察した。特に、(1) 強磁場下のグラフェンにおけるサイクロトロン共鳴 (2) アンバランスな電子正孔系における新奇対凝縮相 (3) 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 (4) 低次元電子正孔系のグローバル相図 (5) Dirac 電子系の設計指針について考察し、これらの系に対する新しい知見を得た。

研究成果の概要（英文）：

In decreasing the bandgap of the direct semiconductor, the nonparabolicity of the energy band is enhanced, and the Dirac electron system with linear dispersion is realized at zero band gap. Further making the bandgap negative, one could obtain the semimetallic electron-hole systems. We study the effect of correlation in these Dirac and semimetallic electron-hole systems. We particularly clarified the following five issues; (1) cyclotron resonance on graphene under strong magnetic field (2) novel pair condensations in electron-hole bilayers with density unbalance (3) biexcitons and trions in semiconducting carbon nanotubes (4) global phase diagrams of low-dimensional electron-hole systems (5) Designing of Dirac points in energy band.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2010 年度	700,000	210,000	910,000
2011 年度	700,000	210,000	910,000
2012 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総計	3,600,000	1,080,000	4,680,000

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

Bi 系や Type II 量子井戸で実現されるセミ

メタル系、光励起されたノンドーブ半導体では同数の電子と正孔が共存した熱平衡状態

が実現する。この系は低密度かつ低温で励起子ガス（絶縁体）、高密度または高温で電子正孔プラズマ（金属）となり、その間で励起子 Mott 転移を示す。また極低温では低密度の励起子 BEC 相と高密度の電子正孔 BCS ペアリング相間にクロスオーバーがあると理論的に予想されていた。しかし本研究以前の理論の多くは、三次元系の相図の限定された範囲を調べるに留まっていた。また本研究開始直前に、レーザーへの応用の観点から、低次元電子正孔系が実験的に詳しく調べられた。特に一次元系では高密度でも励起子分子的相関が観測される等、興味深い報告がなされていた。また二次元系でも励起子 Mott 転移の検証や、電子正孔二層系のクーロンドラッグ抵抗の異常な温度依存性等の実験的発見が報告されていた。

光励起した半導体ではバンド分散の変形は無視できるが、直接半導体でバンドギャップ制御を行う場合には、バンドの非放物線性が問題となる。特にゼロギャップ極限となるグラフェン（一層のカーボンシート）や Sb をドーピングした Bi 系では線形バンドを持つ Dirac 電子系が実現する。一般に放物バンドを持つ電子系では Kohn の定理が成り立ち、サイクロトロン共鳴が相互作用によらないが、非放物線性が存在するとスペクトルの位置や幅に相互作用効果が現れる。申請者は弱い非放物線性がある二次元量子ホール系のサイクロトロン共鳴を調べ、相互作用がモード間反発と運動による先鋭化として現れることを過去に示していた。本研究では非放物線性が強い極限としてグラフェンを考察している。また、カーボンナノチューブ（グラフェンを丸めた筒）では、大きな束縛エネルギーを持つ励起子分子が観測されないことが謎となっていた。本研究では荷電励起子や励起子分子の束縛エネルギーを精密に計算することを目指した。

## 2. 研究の目的

直接半導体でバンドギャップをゼロに近づけると、バンドの非放物線性が増大し、ついには線形分散を持った Dirac 電子系が実現する。このような系は例えばグラフェン（単一カーボンシート）で実現され、相互作用効果を考えなくても、特異な輸送現象や巨大反磁性等の多彩で興味深い物理を提供することが知られている。本研究では一歩進んで、相互作用効果が主役を果たす問題に着目する。特に最近盛んに実験が行われている (1) グラフェンのサイクロトロン共鳴、(2) カーボンナノチューブにおける荷電励起子・励起子分子の二つの問題について考察した。

バンドギャップをさらに負にすると、バンドが重なってついにはセミメタル系となる。このようにバンドギャップを正から負へ変

化させた際に何が起こるかという問題は、Mott の予想以来研究されてきた難問である。具体的には、ギャップが大きければ通常の半導体、ギャップが励起子束縛エネルギーを下回ると自発的に多数の励起子が生成された励起子絶縁体、さらにギャップが負になると同数の電子と正孔が励起子を作らずに乖離したセミメタルとなると予想される。こうした強相関から弱相関領域に至るまでの相変化の全貌を記述できる理論は現在のところ存在しない。あらゆる物質が負と正の電荷を持つ粒子の集合体であることから分かるように、この相図は物質科学のショーケースと呼べるほどの多様性を持つことが予想され、その理解は基礎科学的な観点から重要である。

## 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) 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。
- (3) 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。
- (4) 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。
- (5) 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。

## 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。

**【2009 年度】** (1) グラフェン上のサイクロトロン共鳴に現れる電子間相互作用の効果について調べた。単層系と二層系の違い、スピンや谷自由度の効果についても考察し、相互作用効果がモード間反発と散乱による線幅の増大という形でスペクトルに現れることを明らかにした。単層グラフェンの  $N=0$  から  $1$  への遷移に対する線幅は非常に小さく抑えられるのに対して、単層グラフェンにおける  $N=-1$  から  $2$  への遷移や、二層グラフェンの  $N=1$  から  $2$  への遷移に対応する線幅は非常に大きくなることを見出した。(2) 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。我々は密度不均衡がある電子正孔二層系において平均場近似を使って量子凝縮相を調べ、クーロン相互作用の長距離性(パリティ混合効果)が、Fulde-Ferrell状態(重心運動量がゼロでない電子正孔対が凝縮した状態)を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[10].

**【2010年度】** グラフェンを丸めた一次元系である半導体カーボンナノチューブ系の励起子分子について考察し、遮蔽効果と構造因子の効果によって束縛エネルギーが著しく減少することを明らかにした。この計算ではバンドの非放物線性、RPAレベルの遮蔽効果、自己エネルギーによるバンドの変形等の効果がすべて考慮されている[7].

**【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一つの理論的枠組みで記述する新しい手法を開発した。具体的に言えば、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摂動論である。既存の摂動理論の問題点は、プラズマ中に埋め込まれた電子と正孔の相関を考察しているために、プラズマと励起子ガスの中間的な状況を記述できない点にあった。我々の理論ではこの問題が解決され、励起子のイオン化率に相当する量を計算できる。さらにこの情報を遮蔽効果へフィードバックし、励起子形成によって遮蔽効果が抑制される機構まで取り込んでいる。これにより、励起子ガスと電子正孔プラズマ間の励起子モット転移やクロスオーバーを詳細に調べることが可能になった。この手法では、バンド間遷移の光学スペクトルに関する情報も同時に計算することができ、実験結果を半定量的に再現できる [1, 3]. (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、既存の理論が無視してきたバンドの非放物線性、遮蔽、自己エネルギー補正の効果を取り入れた計算を行った。その結果、主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を示した。遮蔽効果が荷電励起子よりも励起子分子に対して強く働くため、励起子分子の束縛エネルギーの方が荷電励起子の束縛エネルギーよりも小さくなる。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、実験で測定されている荷電励起子ピークが、励起子ピークから大きく低エネルギー側に現れることに対する解釈を与えた[2]. (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点が現れる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[6].

**【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[1]. (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。

## 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13件)

1. 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
2. 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
3. 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
4. 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

5. 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
6. 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
7. 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
8. 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
9. 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
10. 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
11. 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
12. 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
13. 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

[学会発表] (計 40 件)

- 1) 国際会議
  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. 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).
  3. 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.
  4. 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.
  5. 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).
  6. 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.
  7. 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.
  8. K. Asano and T. Ando, “Spectral lineshapes of cyclotron resonance in monolayer and bilayer graphene”, The 19th International Conference on the Application of High Magnetic Fields in

- Semiconductor Physics and Nanotechnology, 2010年8月3日, 福岡.
9. 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.
  10. 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.
  11. 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.
  12. K. Asano and T. Ando, “Approximate validity of Kohn’s theorem in cyclotron resonance in graphene”, The 18th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems, 2009年7月23日, 神戸.
- 2) 国内会議
1. 浅野建一, 吉岡匠哉, 上出健仁, “低次元電子正孔系のモット密度に対するパウリブロッキング効果の重要性”, 日本物理学会第68回年次大会, 2013年3月28日, 広島大学.
  2. 浅野建一, “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”, 科研費新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」第7回DYCEシンポジウム, 2012年12月25日, 東京大学浅野キャンパス.
  3. 吉岡匠哉, 浅野建一, “半導体量子井戸における発光スペクトルの解析”, 日本物理学会2012年秋季大会, 2012年9月18日, 横浜国立大学.
  4. 福田圭介, 吉田正裕, 望月敏光, 秋山英文, 岡野真人, 吉岡匠哉, 浅野建一, Loren N. Pfeiffer, Ken W. West, “励起子Mottクロスオーバー領域における単一量子細線の高精度利得吸収スペクトル測定”, 日本物理学会第67回年次大会, 2012年3月27日, 関西学院大学.
  5. 吉岡匠哉, 浅野建一, “電子正孔系における対凝縮の転移温度”, 日本物理学会第67回年次大会, 2012年3月26日, 関西学院大学.
6. 浅野建一, “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”, 科研費新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」第6回DYCEシンポジウム, 2012年1月6日, 京都大学宇治キャンパス
  7. 吉岡匠哉, 浅野建一, “1次元電子正孔系における励起子-プラズマクロスオーバーと光学スペクトル”, 日本物理学会2011年秋季大会, 2011年9月23日, 富山大学.
  8. 上田倫也, 大橋琢磨, 浅野建一, 小川哲生, “二次元ハバード模型におけるモット転移の線形化クラスタ動的平均場理論”, 日本物理学会2011年秋季大会, 2011年9月22日, 富山大学.
  9. 吉岡匠哉, 浅野建一, “半導体量子井戸における吸収・利得スペクトルと励起子イオン化率の解析”, 日本物理学会2011年秋季大会, 2011年9月22日, 富山大学.
  10. 浅野建一, “準熱平衡状態にある電子正孔系の理論”, FIRST-QIPP/DYCE 夏期研修会2011, 2011年8月15日, 京都大学, 招待講演.
  11. 浅野建一, “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”, 科研費新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」第5回DYCEシンポジウム, 2011年6月13日, 京都大学宇治キャンパス.
  12. 浅野建一, “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”, 科研費新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」第4回DYCEシンポジウム, 2011年1月7日, 京都大学.
  13. 上田倫也, 大橋琢磨, 浅野建一, 小川哲生, “電子-正孔系の動的平均場理論による解析”, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010年9月25日, 大阪府立大学.
  14. 堀田知佐, 浅野建一, “異方性のある二次元格子におけるディラック・ポイントの探索”, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010年9月24日, 大阪府立大学.
  15. 大橋琢磨, 稲葉謙介, 浅野建一, 小川哲生, 菅誠一郎, “3成分ハバード模型の動的平均場理論による解析”, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010年9月24日, 大阪府立大学.
  16. 山下和男, 浅野建一, 大橋琢磨, “結合量子井戸における電子正孔系の基底状態”, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010年9月24日, 大阪府立大学.
  17. 渡辺耕太, 浅野建一, “半導体カーボンナノチューブにおける荷電励起子”, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010年9月

- 24日, 大阪府立大学.
18. 浅野建一, “ディラック電子系あれこれ”, 科研費新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」2010年度DYCE理論ワークショップ, 2010年8月10日, 大阪大学.
  19. 上田倫也, 大橋琢磨, 浅野建一, 小川哲生, “連続模型に対する動的平均場理論を用いた電子-正孔系の解析 III”, 日本物理学会第65回年次大会, 2010年3月22日, 岡山大学.
  20. 浅野建一, 安藤恒也, “グラフェン上のサイクロトロン共鳴における多体効果2-内部自由度の効果”, 日本物理学会第65回年次大会, 2010年3月21日, 岡山大学.
  21. 渡辺耕太, 浅野建一, “半導体カーボンナノチューブ中の励起子分子への遮蔽効果の影響”, 日本物理学会第65回年次大会, 2010年3月20日, 岡山大学.
  22. 浅野建一, “グラフェンのサイクロトロン共鳴に対する多体効果”, 短期研究会「ディラック電子系の物性-グラフェンおよび関連物質の最近の研究」, 2009年10月24日, 東京大学物性研究所, 招待講演.
  23. 山下和男, 浅野建一, 大橋琢磨, 小川哲生, “密度不均衡のある電子正孔系における量子凝縮”, 日本物理学会2009年秋季大会, 2009年9月28日, 熊本大学.
  24. 上田倫也, 大橋琢磨, 浅野建一, 小川哲生, “連続模型に対する動的平均場理論を用いた電子-正孔系の解析 II”, 日本物理学会2009年秋季大会, 2009年9月27日, 熊本大学.
  25. 岡野真人, 吉田正裕, 秋山英文, Ping Huai, 浅野建一, 小川哲生, Loren N. Pfeiffer, Ken W. West, “中性及び非中性電子-正孔系を有したT型量子細線の利得及び発振特性”, 日本物理学会2009年秋季大会, 2009年9月26日, 熊本大学.
  26. 浅野建一, “電子正孔系における準熱平衡状態の理論”, 科研費新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」DYCE若手道場2009, 2009年9月14日, 北海道大学.
  27. 浅野建一, “電子-正孔系における励起子Mott転移と量子凝縮”, 基研研究会「熱場の量子論とその応用」, 2009年9月4日, 京都大学基礎物理学研究所, 招待講演.
  28. 浅野建一, “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”, 科研費新学術領域研究「半導体における動的相関電子系の光科学」第2回DYCEシンポジウム, 2009年8月21日, 京都

大学.

[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

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