

研究種目：若手研究（スタートアップ）

研究期間：2007-2008

課題番号：19840031

研究課題名（和文） 半導体光励起状態における量子協力現象と動的応答

研究課題名（英文） QUANTUM COOPERATIVE PHENOMENA AND DYNAMICAL RESPONSES
IN PHOTOEXCITED SEMICONDUCTORS

研究代表者

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

研究成果の概要：

半導体の光励起状態(電子-正孔系)における金属-絶縁体転移(励起子モット転移)や量子凝縮転移を理解することは、レーザー発振への応用や光超放射の実現に向けた第一歩として重要である。うえ、基礎物理学としても非常に興味深い。しかし、このような相転移現象を理論的に正しく記述するためには多体相関効果を適切に取り扱う必要がある。本研究では、動的平均場理論(DMFT)を拡張した方法により、この系の励起子モット転移および量子凝縮転移を理論的に研究した。電子-正孔系における励起子モット転移を調べるために、長距離クーロン相互作用の効果を取り入れた DMFT の構築を行った。特に、電子間・正孔間の斥力相互作用と電子-正孔間の引力相互作用が異なっている場合、励起子モット転移に劇的な変化が現れることを明らかにした。斥力と引力相互作用が等しい場合、短距離相互作用を仮定した場合と比べて、励起子モットに大きな違いが現れないが、斥力が引力より少しでも大きい場合、励起子の密度波揺らぎが劇的に大きくなる。この密度波の揺らぎにより系は金属的状态から絶縁体的状態へと一気に変化することがわかった。更に、光学応答を正確に計算する手法を開発した。DMFT の枠内で厳密なバーテックス補正を取り入れる理論を構築し、Non-Crossing 近似を用いて具体的な計算を実行した。光学応答に対する 2 粒子グリーン関数は、空間的に一様で静的な部分を抜き出すと、凝縮転移に対する秩序変数の揺らぎを表すため、これを調べることにより、凝縮転移温度も決定した。光学スペクトルを計算した結果、低温の凝縮転移温度付近において、鋭いピークが現れ、励起子効果が急激に増強されることを明らかにした。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	1,350,000	0	1,350,000
2008 年度	1,350,000	405,000	1,755,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,700,000	405,000	3,105,000

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：物理学・物性 I

キーワード：(1)物性理論 (2)半導体物性 (3)光物性 (4)強相関電子系 (5)高性能レーザー

1. 研究開始当初の背景

非ドープ半導体（絶縁体）の光励起状態は、電子-正孔系と呼ばれる相関多体系により記述される。この系においては、励起粒子数密度や有効温度を制御することにより、電子-正孔プラズマ相、励起子ガス相、電子-正孔対凝縮相などの間の量子相転移の実現が示唆されている。この相転移の制御はレーザー発振への応用や光超放射の実現に向けた第一歩として必要不可欠な重要課題であるうえ、この量子相転移現象自体に基礎物理学としてこれまでにない興味深い物理現象を数多く含んでいる。しかし、量子相転移点近傍を正しく記述するためには多体相関効果を適切に取り扱う必要がある、これまでに電子-正孔系に適用されてきた近似理論では、この相転移現象を統一的に記述することはできない。したがって、この転移現象の統一的理解は、非常に重要であるが、未解決の課題として長年残されたままであった。

2. 研究の目的

電子-正孔系において、様々な興味深い物性が観測されている。とりわけ、準熱平衡状態における量子協力現象は非常に興味深い。この系においては、古くから電子-正孔プラズマ相（金属）、励起子ガス相（絶縁体）、電子-正孔対凝縮相などの間の量子相転移の実現が示唆されている。特に、励起子ガス相からプラズマ相への相転移は光学利得を生じるためレーザー発振への応用に繋がり、また、凝縮相の応用は光超放射の実現可能性を秘めているため非常に重要である。よって、電子-正孔系においてどのような条件の下にどのような量子秩序が形成されるかを明らかにし、準熱平衡状態における相図を統一的に理解することは、既存の半導体レーザー技術の更なる飛躍のための第一歩であり、必要不可欠である。そこで本研究では、主に強相関電子系の分野で発展してきた理論的枠組みである動的平均場理論を用いることにより、電子-正孔系における量子相転移現象の統一的記述を目指す。

3. 研究の方法

本研究では、動的平均場理論(DMFT)と拡張された DMFT を用いて電子-正孔系における量子相転移や光学応答について明らかにする。DMFT は、強相関電子系の分野で開発された理論的枠組みで、格子フェルミオン系や格子ボゾン系の弱相関から強相関まで正しく記述することができる強力な方法である。この方法では、元の格子模型を動的な有効フ

エルミオン場と量子不純物がカップルした有効不純物模型にマップする近似を行い、局所的相互作用を厳密に取り扱う。このマッピングは系の空間次元が無限大の極限で厳密であり、現実の3次元系に対しても非常に良い近似を与えることが知られている。動的有効場は、有効不純物模型と元の模型が自己無撞着になるように決定する。有効不純物模型を解くことは多体問題となるため厳密に解くことは難しい。本質的に厳密な数値計算手法としては、数値繰り込み群法(NRG)や量子モンテカルロ法(QMC)があり、近似的な方法として数値対角化法(ED)やnoncrossing 近似(NCA)などがある。NRG や QMC には厳密である長所と数値計算コストが高い短所があり、ED や NCA などには有効なパラメータ領域が限定される短所と短時間で結果を出すことのできる長所がある。

電子-正孔系では粒子数密度により遮蔽効果が異なるため、相互作用のレンジを短距離力から長距離力まで変化させることができる。長距離クーロン相互作用の効果を調べるために拡張動的平均場理論(EDMFT)を適用する。EDMFT では、通常の DMFT では扱うことの出来ない長距離相互作用を取り入れることができる。この方法は、元の格子模型を有効不純物模型にマップする近似を用いる点で通常の DMFT と同じであるが、有効フェルミオン場に加えて有効ボゾン場を導入する点が DMFT と異なっている。この有効ボゾン場により、長距離クーロン相互作用を取り扱うことが可能となる。

本研究では、主として、DMFT と EDMFT の両方に対して容易に適用できる NCA を用い、DMFT および EDMFT による電子-正孔系の解析を行った。

4. 研究成果

(1) 電子-正孔系の準熱平衡状態においては、励起粒子数密度に依存して励起子モット転移 や電子-正孔対凝縮転移が実現することが示唆されている。このような相転移現象を正しく理解することは、レーザー発振への応用などの観点から非常に重要であり、また、基礎物理学としても長年研究されている重要な問題である。しかし、量子相転移を正しく記述するためには多体相関効果を適切に取り扱う必要がある、これまでに電子-正孔系に適用されてきた近似理論では、この相転移現象を統一的に記述することはできない。最近、富尾・小川により、この系における励起子モット転移や凝縮転移を記述する理論が報告されている。これらの研究においては、電子

-正孔系を 2 バンドハバード模型により記述し、動的平均場理論(DMFT)を適用することにより、電子相関効果を正しく取り入れることに成功している。しかし、ハバード模型においては、on-site のクーロン相互作用のみが取り入れられているため、励起粒子が低密度の場合に重要となると考えられる、クーロン相互作用の長距離性が相転移にどのような影響を与えるかという問題は未解明であり、かつ重要な問題である。ここでは、ハバード模型を出発点とし、長距離性クーロン力の効果について調べるため、サイト間相互作用を含む拡張ハバード模型を用い、拡張 DMFT による解析を行った。

サイト間の電子-電子・正孔-正孔斥力 v と電子-正孔引力 v' が等しい場合は金属相を安定化する傾向があり(図 1)、逆に、 v と v' が異なる場合には絶縁相を安定化することを明らかにした(図 2)。on-site の引力相互作用 U が大きい状況を考えて、 U によりフレンケル的な励起子状態が形成され、系は絶縁体となる。このとき $v=v'$ としてサイト間相互作用が導入されると、この相互作用は励起子を空間的に広げるためフレンケル型励起子を不安定化し、電子-正孔プラズマ状態に近づく方向に働き、一方、 $v \neq v'$ は、フレンケル型励起子の密度波(質量密度波)的揺らぎを誘起するため絶縁相を安定化すると考えられる。実際に、質量密度波の相関関数や光学応答関数を計算した結果、 $v \neq v'$ のとき、光学応答の励起子ピークは小さいが、質量密度相関関数が非常に大きくなることが確かめられた。したがって、 $v \neq v'$ の場合、励起子メカニズムではない新しいメカニズムとして、質量密度波の揺らぎによる絶縁化が実現することが明らかとなった。

図 1. 状態密度 ($U=1.7, v=v'$)

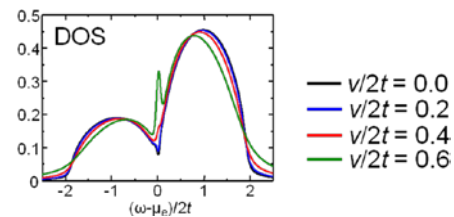
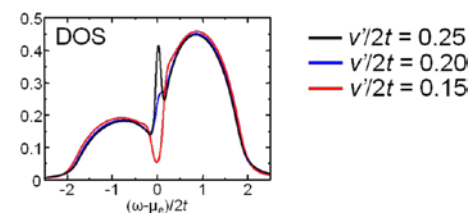


図 2. 状態密度 ($U=1.5, v=0.25$)



(2)電子-正孔系における相転移現象を理解する上で、光学応答を調べることは非常に重要である。状態密度などの物理量は、1 粒子グリーン関数を計算することによって得られるが、光学応答を調べるためには 2 粒子グリーン関数が必要となる。2 粒子グリーン関数においては、1 粒子グリーン関数において重要となる自己エネルギー補正に加えて、パーテックス補正も適切に取り入れる必要がある。以前の我々の研究においては、光学応答に対応する 2 粒子グリーン関数に対して、パーテックス補正を静的に取り入れた梯子近似を適用した。しかしこの方法では、特に、励起子ガス相における光学応答を正しく計算できない。そこで、動的平均場近似の枠内で厳密なパーテックス補正を取り入れる理論を構築し、Non-Crossing 近似(NCA)を用いて具体的な計算を実行した。光学応答に対する 2 粒子グリーン関数は、空間的に一様で静的(時間依存のない)部分を抜き出すと、凝縮転移に対する秩序変数の揺らぎを表すため、これを調べることにより、凝縮転移温度を決定した(図 3)。光学スペクトルを計算した結果、低温の凝縮転移温度付近において、鋭いピークが現れ、励起子効果が急激に増強されることが明らかとなった(図 4)。

図 3. 対相関関数

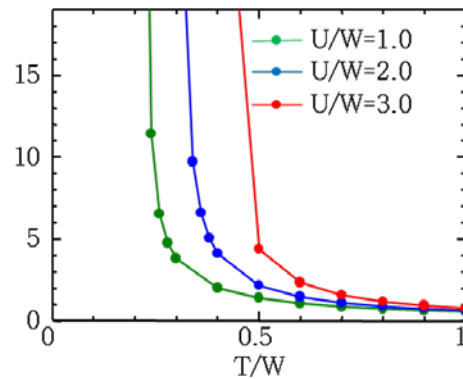
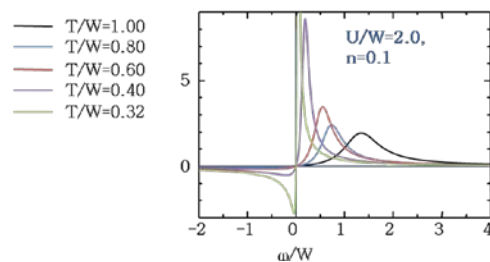


図 4. 光学応答関数



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 6 件)

[1]“Spatial fluctuations of spin and orbital in two-orbital Hubbard model: cluster dynamical mean field study”

T. Kita, T. Ohashi and S. Suga

Journal of Physics: Conference Series Vol. 150 pp. 042094-1-4

[2]“Exciton Mott transition and pair condensation in the electron-hole system”

T. Ohashi, T. Ueda, K. Asano and T. Ogawa

Journal of Physics: Conference Series Vol. 148 pp. 012050-1-4 (2009).

[3]“Exciton Mott transition in electron-hole systems: Dynamical mean-field theory for the continuous-space model”

T. Ueda, T. Ohashi, K. Asano and T. Ogawa

Journal of Physics: Conference Series Vol. 148 pp. 012052-1-3 (2009).

[4]“Strongly Correlated Electrons on Frustrated Lattices”

H. Tsunetsugu, K. Hattori, T. Ohashi, N. Kawakami, and T. Momoi

Journal of Physics: Conference Series Vol. 145 pp. 012015-1-8 (2009).

[5]“Finite-Temperature Mott Transition in Two-Dimensional Frustrated Hubbard Models”

T. Ohashi, T. Momoi, H. Tsunetsugu, and N. Kawakami

Progress of Theoretical Physics Supplement, No. 176, pp. 97-116 (2008).

[6]“Effects of inter-site interaction on the exciton Mott transition in the extended attractive Hubbard model”

T. Ohashi, Y. Tomio, T. Ogawa

Physica Status Solidi (b). 245, 2725-2728 (2008).

[学会発表] (計 20 件)

(A) 国際会議

[1]“Exciton Mott transition and pair condensation in the electron-hole system”

大橋琢磨、上田倫也、浅野建一、小川哲生

The 3rd International Conference on Photo-Induced Phase Transitions and Cooperative Phenomena

大阪、2008年11月

[2]“Exciton Mott transition in electron-hole

systems: Dynamical mean-field theory for the continuous-space model”

上田倫也、大橋琢磨、浅野建一、小川哲生

The 3rd International Conference on Photo-Induced Phase Transitions and Cooperative Phenomena

大阪、2008年11月

[3]“Spatial Fluctuations of Spin and Orbital in Two-Orbital Hubbard Model: Cluster Dynamical Mean Field Study”

北倫子、大橋琢磨、菅誠一郎

The 25rd International Conference on Low Temperature Physics

アムステルダム(オランダ)、2008年8月

[4]“Effects of long-range Coulomb interaction on the exciton Mott transition”

大橋琢磨、富尾祐、小川哲生

8th International Conference on Excitonic Processes in Condensed Matter

京都、2008年6月

[5]“Mott transition and magnetism in the Hubbard model on the anisotropic triangular lattice”

大橋琢磨、桃井勉、川上則雄、常次宏一

International Symposium on Physics of New Quantum Phases in Superclean Materials

岐阜、2007年10月

(B) 日本物理学会

[6]「二軌道ハバード模型における非局所的スピン・軌道揺らぎの効果」

北倫子、大橋琢磨、菅誠一郎

日本物理学会 2009 年年次大会

立教大学 2009 年 3 月

[7]「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」

上田倫也、大橋琢磨、浅野建一、小川哲生

日本物理学会 2009 年年次大会

立教大学 2009 年 3 月

[8]「電子-正孔系における光学応答と凝縮転移の動的平均場理論」

大橋琢磨、上田倫也、浅野建一、小川哲生

日本物理学会 2008 年秋季大会

岩手大学 2008 年 9 月

[9]「連続空間動的平均場理論による電子-正孔系の解析」

上田倫也、大橋琢磨、浅野建一、小川哲生

日本物理学会 2008 年秋季大会

岩手大学 2008 年 9 月

[10] 「二軌道ハバード模型における軌道フラ
ストレーションと非局所揺らぎの効果」
北倫子、大橋琢磨、菅誠一郎
日本物理学会 2008 年秋季大会
岩手大学 2008 年 9 月

[11] 「低次元半導体の光学応答におけるフェ
ルミ端特異性の効果」
中田喜之、小川哲生、高際睦起、浅野健一、
大橋琢磨
日本物理学会 2008 年秋季大会
岩手大学 2008 年 9 月

[12] 「電子-正孔系に対する拡張動的平均場理
論」
大橋琢磨、富尾祐、小川哲生
日本物理学会 2008 年年次大会
近畿大学 2008 年 3 月

[13] 「二軌道ハバード模型のモット転移に対
する非局所的スピン・軌道揺らぎの効果 II」
北倫子、大橋琢磨、菅誠一郎
日本物理学会 2008 年年次大会
近畿大学 2008 年 3 月

[14] 「フラストレート系モット転移のセル型
動的平均場理論による解析」
上田倫也、大橋琢磨、川上則雄
日本物理学会 2008 年年次大会
近畿大学 2008 年 3 月

[15] 「クラスター摂動法を用いた 1 次元電子
-正孔系の解析」
西田拓人、浅野建一、富尾祐、大橋琢磨、小
川哲生
日本物理学会 2008 年年次大会
近畿大学 2008 年 3 月

[16] 「励起子モット転移における長距離クー
ロン力の効果：拡張動的平均場理論による研
究」
大橋琢磨、富尾祐、小川哲生
日本物理学会 2007 年年次大会
北海道大学 2007 年 9 月

[17] 「フラストレートした強磁性体における
ボンドネマティック状態：Schwinger ボゾン
平均場理論」
大橋琢磨、桃井勉
日本物理学会 2007 年年次大会
北海道大学 2007 年 9 月

[18] 「二軌道ハバード模型のモット転移に対
する非局所的スピン・軌道揺らぎの効果」
北倫子、大橋琢磨、菅誠一郎
日本物理学会 2007 年年次大会
北海道大学 2007 年 9 月

[19] 「有限温度モット転移の拡張動的平均場
理論による解析」
上田倫也、大橋琢磨、川上則雄
日本物理学会 2007 年年次大会 北海道大学
2007 年 9 月

[20] 「クラスター摂動法を用いた電子-正孔
系の解析」
西田拓人、浅野建一、富尾祐、大橋琢磨、小
川哲生
日本物理学会 2007 年年次大会 北海道大学
2007 年 9 月

6. 研究組織

(1) 研究代表者

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

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし