

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 24 年 3 月 31 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2009～2011

課題番号：21740232

研究課題名（和文） 半導体光励起状態における強相関効果

研究課題名（英文） STRONG CORRELATION EFFECTS ON PHOTO-EXCITED STATES IN 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（和文）：

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)や量子凝縮転移は基礎・応用の両面から非常に重要である。このような相転移現象を理論的に正しく理解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を理論的に研究した。DMFTは格子フェルミオン系を解析する強力な手法であるが、電子正孔系は励起粒子数が少ないため、格子模型ではなく連続模型による記述が適している。そこで連続模型に対するDMFTを定式化し、厳密対角化法を組み合わせることにより低密度電子正孔系の相図を決定した。

研究成果の概要（英文）：

Metal insulator transition (exciton Mott transition) and quantum condensation transition in photo-excited semiconductors (electron-hole systems) are very important in the field of both fundamental and applied physics. To correctly understand these phase transitions, proper theoretical treatment of many body effects is essential. In this study, we have theoretically investigated the exciton Mott transition in these systems by means of extensions of the dynamical mean field theory (DMFT). The DMFT is powerful methods to analyze the lattice fermion systems. For the electron-hole system with a small number of excited particles, a continuous model is more suitable than a lattice model. Therefore, we have formulated DMFT for a continuous model and combining this method with the exact diagonalization method, we have determined the phase diagram in the electron-hole systems at low density.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	600,000	180,000	780,000
2010年度	500,000	150,000	650,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	1600,000	480,000	2,080,000

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り、非常に難しい問題である。これまでに電子-正孔系に適用されてきた近似理論は、主として、相互作用を微小パラメータとした摂動理論であり、摂動理論によって、金属絶縁体転移を含む相転移現象の問題を解決するのは困難である。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、長年未解決の問題となっている。

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。しかし、上記のように従来型の理論では、この相転移現象を本質的に解明することが困難であると考え、本研究では全く新しい試みとして、格子フェルミオン系において発展してきた電子相関理論をこの系に適用した。特に、強相関電子系の分野における強力な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した。

3. 研究の方法

本研究では、動的平均場理論(DMFT)および拡張された DMFT を用いて電子-正孔系における量子相転移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ェ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。本研究では、この DMFT を拡張して用いることにより、電子-正孔系における電子相関効果について研究する。

4. 研究成果

DMFT は格子フェルミオン系を解析する強力な手法であるが、電子正孔系は励起粒子数が少ないため、格子模型ではなく連続模型による記述が適している。最近、フェルミ原子ガス系の分野において、粒子数密度が低い連続模型に対して DMFT を応用する手法が開発されており、この手法を拡張して用いた。この枠組みでは、励起粒子数密度は散乱長を制御することによって考慮される。また、連続系における電子または正孔のエネルギーに関してカットオフを導入することにより実空間を離散化し、得られた格子模型に対して DMFT を適用する。さらに、カットオフエネルギーに対する外挿を行うことにより、連続模型における物理量が求められる。このような手法を用いて決定した相図を図. 1 に示す。散乱長の逆数($1/k_{Fa}$)が大きくなると電子正孔プラズマ相から励起子絶縁相へ一次相転移することがわかる。

また、2次元系を念頭においた新しい DMFT の拡張法を考案した。2次元系においては、通常 DMFT では取り扱うことのできない空間揺らぎの効果が重要となる。そこで、DMFT の不純物模型をクラスタに拡張し、クラスタ内の電子相関を正しく取り入れた、セル型動的平均場理論(CDMFT)や動的クラスタ近似(DCA)が開発されている。しかし、こ

図. 1 励起子モット転移に対する相図

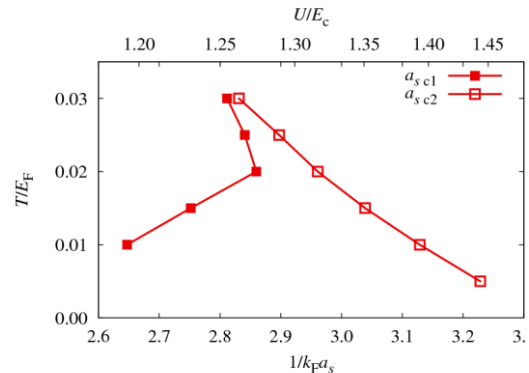
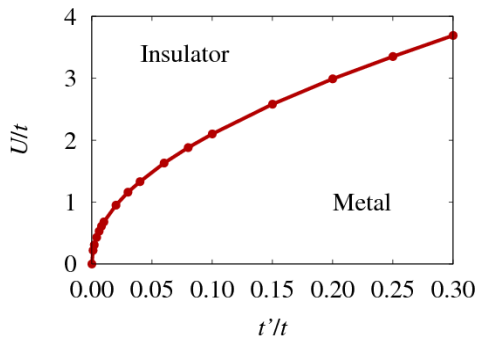


図. 2 $t\ell$ ハバード模型の相図

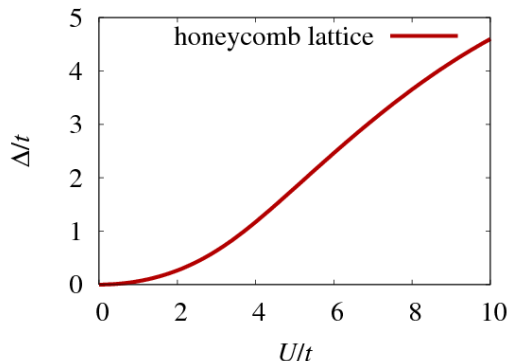


これらのクラスタ DMFT では、有効クラスタ模型を解くために膨大な数値計算を要するため、より簡便で本質を捉えた近似法の開発が求められていた。

そこで本研究では、既に通常の DMFT に対して考案されていた線形化 DMFT をクラスタ DMFT に拡張した新しい方法を開発し、金属絶縁体転移の問題に適用した。まずこの方法を、次近接ホッピングを取り入れたハバード模型に適用し、相互作用の強さ U と次近接ホッピングの大きさ t' に対する相図を得た。この結果を図. 2 に示す。これは、以前に大規模数値計算によって得られた結果と非常に良く一致しており、本研究により開発された線形化クラスタ DMFT が、非常に数値計算コストが低いにも関わらず、本質を捉えた近似となっていることを示す結果である。

更に、この方法をハニカム格子上的ハバード模型に適用し、相転移について調べた。ハニカム格子ハバード模型は、ゼロギャップ半導体であるグラフェンの興味深い物性に関連して、近年精力的に研究されている。線形化クラスタ DMFT の計算結果により、この系では、フェルミ面上に状態密度が存在しないことに起因して、反強磁性転移が有限の相互作用に対して実現することを確かめた。さらに、モット転移について調べ、図. 3 に示す

図. 3 ハニカム格子ハバード模型のエネルギーギャップ



ように、無限小の相互作用により微小なエネルギーギャップが開き、絶縁体となることが分かった。これは、ハニカム格子ハバード模型においては、相互作用の小さい領域において新奇なスピン液体相が実現することを示唆する結果である。

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 9 件)

[1]"Mott transition in three-orbital Hubbard model with orbital splitting"

T. Kita, T. Ohashi, N. Kawakami

Physical Review B Vol. 84 pp. 195130-1-9 (2011).

DOI:10.1103/PhysRevB.84.195130

査読有

[2]"Effects of Conduction Electron Correlation on Heavy-Fermion Systems"

T. Yoshida, T. Ohashi, N. Kawakami

Journal of the Physical Society of Japan Vol. 80 pp. 064710-1-8 (2011).

DOI:10.1143/JPSJ.80.064710

査読有

[3]"Ground State of Electron-Hole Bilayer with Density Imbalance"

K. Yamashita, K. Asano, T. Ohashi

Physica Status Solidi (c) Vol. 8 pp. 0177-0180 (2011).

DOI: 10.1002/pssc.201000683

査読有

[4]"Structure dependence of metallization density in solid atomic hydrogen using dynamical mean field theory"

K. Shibata, T. Ohashi, T. Ogawa, R. Kodama

Physical Review B Vol. 82 pp. 195123-1-5 (2010).

DOI: 10.1103/PhysRevB.82.195123

査読有

[5]"Mott transition in the Hubbard model on the anisotropic kagome lattice"

Y. Furukawa, T. Ohashi, Y. Koyama, and N. Kawakami,

Physical Review B: Rapid Communications Vol. 82 pp. 161101-1-4 (2010).

DOI: 10.1103/PhysRevB.82.161101

査読有

[6]"Spatial Fluctuations in Two-Orbital Hubbard Model"

T. Kita, T. Ohashi, and S. Suga
Journal of Physics: Conference Series Vol. 200
pp. 012086-1-4 (2010).
DOI:10.1088/1742-6596/200/1/012086
査読有

[7]"Quantum condensation in electron-hole bilayers with density imbalance"

K. Yamashita, K. Asano, T. Ohashi
Journal of Physical Society of Japan Vol. 79 pp.
033001-1-4 (2010).
DOI: 10.1143/JPSJ.79.033001
査読有

[8]"Cellular Dynamical Mean Field Study on Two-Orbital Hubbard Model with Different Bandwidths"

T. Kita, T. Ohashi, S. Suga
Journal of Physical Society of Japan Vol. 79, pp.
014713-1-5 (2010).
DOI: 10.1143/JPSJ.79.014713
査読有

[9]"Spatial fluctuations of spin and orbital nature in two-orbital Hubbard model"

T. Kita, T. Ohashi, and S. Suga
Physical Review B Vol. 79 pp. 245128-1-6
(2009).
DOI: 10.1103/PhysRevB.79.245128
査読有

[学会発表] (計 24 件)

[1]北倫子, 大橋琢磨, 川上則雄
三軌道ハバード模型におけるモット絶縁相
とバンド絶縁相
日本物理学会秋季大会 2011 年 9 月 22 日 富
山大学

[2]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
日本物理学会秋季大会 2011 年 9 月 21 日 富
山大学

[3]北倫子, 大橋琢磨, 川上則雄
軌道分裂を有する三軌道ハバード模型にお
けるモット転移
日本物理学会 2011 年年次大会 2011 年 3 月 28
日 新潟大学

[4]吉田恒也, 大橋琢磨, 川上則雄
重い電子系における軌道間相互作用の効果
日本物理学会 2011 年年次大会 新潟大学
2011 年 3 月 26 日 新潟大学

[5]大橋琢磨, 桃井勉, 常次宏一, 川上則雄
クラスタ動的平均場理論を用いたプログラ
ム開発と有限温度モット転移への応用
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウ
ェアの研究開発 第 5 回公開シンポジウム
2011 年 2 月 23 日 甲南大学

[6]大橋琢磨 (招待講演)
有限温度モット転移に対する幾何学的フラ
ストレーションの効果
フラストレーションが創る新しい物性第 6 回
トピカルミーティング 2010 年 10 月 15 日 宮
島グランドホテル

[7]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

[8]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

[9]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

[10]吉田恒也, 大橋琢磨, 川上則雄
連続時間量子モンテカルロ法を用いた拡張
周期アンダーソンモデルの解析 II
日本物理学会 2010 年秋季大会 2010 年 9 月
23 日 大阪府立大学

[11]北倫子, 大橋琢磨, 川上則雄
多軌道ハバード模型の軌道依存モット転移
における軌道揺らぎの効果
日本物理学会 2010 年秋季大会 2010 年 9 月
23 日 大阪府立大学

[12]北倫子, 大橋琢磨, 川上則雄
Orbital-selective Mott transition in multiorbital
Hubbard model with orbital degeneracy lifting
International Conference on Heavy Electrons
2010 2010 年 9 月 19 日 首都大学東京

[13]山下和男, 浅野建一, 大橋琢磨
Ground state of electron-hole bilayer with density imbalance
9th EXCON Conference, International Conference on Excitonic and Photonic Processes in Condensed and Nano Materials
2010年8月14日 ブリスベン (オーストラリア)

[14]大橋琢磨
多成分フェルミ粒子系におけるモット転移の動的平均場理論による解析
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

[15]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 2010年年度大会 2010年3月22日 岡山大学

[16]古川雄大, 大橋琢磨, 小山洋太, 川上則雄
異方的三角およびカゴメ格子における有限温度モット転移
日本物理学会 2010年年度大会 2010年3月22日 岡山大学

[17]北倫子, 大橋琢磨, 菅誠一郎
二次元ハバード模型におけるモット転移: クラスタ動的平均場理論による解析
日本物理学会 2010年年度大会 2010年3月20日 岡山大学

[18]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

[19]古川雄大, 大橋琢磨, 小山洋太, 川上則雄
異方的カゴメ格子における有限温度モット転移
日本物理学会 2009年秋季大会 2009年9月28日 熊本大学

[20]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

[21]上田倫也, 大橋琢磨
フラストレート系における動的帯磁率の動的平均場理論による解析
日本物理学会 2009年秋季大会 2009年9月26日 熊本大学

[22]北倫子, 大橋琢磨, 菅誠一郎
二軌道ハバード模型のクラスタ動的平均場理論
日本物理学会 2009年秋季大会 2009年9月26日 熊本大学

[23]大橋琢磨
動的クラスタ近似による有限温度モット転移の解析
日本物理学会 2009年秋季大会 2009年9月26日 熊本大学

[24]北倫子, 大橋琢磨, 菅誠一郎
Spatial Fluctuations in Two-Orbital Hubbard Model
The 18th International Conference on Magnetism
2009年7月28日 カールスルーエ (ドイツ)

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