

博士論文

**高密度励起された半導体中の電子正孔BCS状態に
おけるエネルギーバンドの異方性と電子正孔有効
質量差の効果**

平成17年6月

奈良先端科学技術大学院大学
物質創成科学研究科 物質創成科学専攻
複雑系解析学講座

0141017 溝尾 数雅

目次

第1章 序論	1
1.1 緒言：半導体中の低温高密度電子正孔系	1
1.2 ボーズ・アインシュタイン凝縮とBCS状態	4
1.2.1 ボーズ・アインシュタイン凝縮	4
1.2.2 BCS状態	4
1.3 高密度励起された半導体中の電子正孔BCS状態	6
1.3.1 励起子ボーズ・アインシュタイン凝縮（励起子BEC）	6
1.3.2 電子正孔BCS状態	9
1.3.3 関連研究：フェルミ原子ガス系におけるBEC-BCSクロスオーバー	11
1.4 研究の目的	12
1.5 本論文の構成	13
参考文献	14
第2章 定式化	18
2.1 緒言	18
2.2 電子正孔ハミルトニアン第二量子化表示	18
2.3 電子正孔BCSエネルギーギャップ方程式の導出	25
2.4 クーロンポテンシャルの遮蔽効果	30
参考文献	32
第3章 結果と考察	33
3.1 計算方法	33
3.2 開発コード	34
3.2.1 3次元電子正孔有効質量差・有限温度効果計算用コード	34
3.2.2 3次元バンド異方性効果計算用コード	34
3.3 計算環境	34
3.4 緒言	35
3.4.1 ボゴリューボフ準粒子対エネルギー	35
3.4.2 電子正孔BCSエネルギーギャップ	37

3.4.3	電子正孔対の相対運動の波動関数	39
3.4.4	変分パラメータ	40
3.5	電子正孔 BCS 状態に対する電子正孔有効質量差の効果	41
3.5.1	電子正孔 BCS エネルギーギャップの温度依存性	41
3.5.2	電子正孔 BCS エネルギーギャップの有効質量比依存性	44
3.6	電子正孔 BCS 状態に対するエネルギーバンドの異方性の効果	46
3.6.1	エネルギーバンドの異方性による電子正孔 BCS 秩序の増強効果	46
3.6.2	エネルギーバンドの異方性差による電子正孔 BCS 秩序の減少効果	48
3.7	一軸性圧力による電子正孔 BCS 秩序の安定化	53
3.7.1	一軸性圧力によるエネルギーバンドの一軸的異方性	53
3.7.2	熱的效果との競合	53
3.7.3	電子正孔有効質量差による効果との競合	54
3.7.4	伝導体と価電子帯の異方性差による効果との競合	56
	参考文献	58
第 4 章	結論と今後の課題	60
4.1	結論	60
4.2	今後の課題	61
付 録 A	直交座標におけるクーロンポテンシャルのフーリエ変換	62
A.1	二次元直交座標の場合	62
A.2	三次元直交座標の場合	63
付 録 B	準静的遮蔽クーロンポテンシャル	65
B.1	プラズマ遮蔽	65
B.2	誘電関数の解析	67
B.3	プラズモン・ポール近似	68
付 録 C	光双安定性	71
	参考文献	76
付 録 D	電子正孔の高密度励起による有効質量の変化	77
付 録 E	電子正孔 BCS 状態に対する電荷非中性の効果	80
	参考文献	82
	謝辞	83

目 次

1.1	高密度電子正孔系の相図（模式図）	3
1.2	半導体超格子の模式図	7
1.3	時間分解光起電圧の温度依存性 ²⁸⁾	8
1.4	時間分解光起電圧の励起光強度依存性 ²⁸⁾	8
1.5	PL スペクトルの空間依存性 ³⁶⁾	9
3.1	ボゴリューボフ準粒子対エネルギー	36
3.2	r_s と $G_{\text{eff}}, k_{\text{eff}}$ の関係	37
3.3	電子正孔 BCS エネルギーギャップ	38
3.4	フェルミ波数近傍の拡大図	38
3.5	電子正孔対の相対運動の波動関数	39
3.6	変分パラメータ	40
3.7	電子正孔 BCS エネルギーギャップの温度依存性 ($r_s = 1.00$)	43
3.8	電子正孔 BCS エネルギーギャップの温度依存性 ($r_s = 0.80$)	43
3.9	電子正孔 BCS エネルギーギャップの有効質量比依存性 ($r_s = 1.00$)	45
3.10	電子正孔 BCS エネルギーギャップの有効質量比依存性 ($r_s = 0.80$)	45
3.11	電子正孔 BCS エネルギーギャップのエネルギーバンド異方性依存性	47
3.12	異方性がある場合のフェルミ面の模式図	47
3.13	電子正孔 BCS エネルギーギャップのエネルギーバンド異方性差依存性 ($r_s = 1.00$)	48
3.14	電子正孔 BCS エネルギーギャップのエネルギーバンド異方性差依存性 ($r_s = 0.80$)	49
3.15	異方性がある場合のフェルミ面の模式図 2	49
3.16	エネルギーバンドの模式図	50
3.17	エネルギーバンドの模式図 2	51
3.18	Zittartz による Excitonic Phase の相図 ⁴⁾	51
3.19	熱的効果に対するエネルギーバンドの異方性による電子正孔 BCS 秩序の増強効果 ($r_s = 1.00, \sigma = 1$)	54

3.20	電子正孔有効質量差の効果に対するエネルギーバンドの異方性による電子正孔 BCS 秩序の増強効果 ($r_s = 1.00, T = 0$)	55
3.21	電子正孔有効質量差の効果に対するエネルギーバンドの異方性による電子正孔 BCS 秩序の増強効果 ($r_s = 1.00, T = 0.03$)	55
3.22	伝導体と価電子帯の異方性差の効果に対する電子正孔 BCS 秩序の増強効果 ($r_s = 1.00, m_{hl}/m_{el} = 1.5$)	56
3.23	異方性がある場合のフェルミ面の模式図 3	57
C.1	r_s の光双安定性	73
C.2	G_{eff} の光双安定性	74
C.3	r_s の光双安定性	75
C.4	G_{eff} の光双安定性	75
D.1	電子正孔対エネルギー $\zeta_{\mathbf{k}}$ の分散関係	77
D.2	電子正孔の励起による換算質量の変化	78
D.3	電子正孔の励起による電子正孔有効質量差の変化	79
E.1	電子正孔 BCS エネルギーギャップに対する電荷非中性の効果	81

表 目 次

1.1	励起子 BEC と電子正孔 BCS 状態の比較	11
1.2	BCS 状態と電子正孔 BCS 状態の比較	11
3.1	各種パラメータ	36
3.2	有効質量比と計算結果	42
3.3	半導体物性定数	42
3.4	半導体における有効質量の異方性	53

第1章 序論

1.1 緒言：半導体中の低温高密度電子正孔系

半導体中のバンド端近傍を強いレーザー光で励起すると、高密度の電子と正孔を生成する事が出来る。ここで励起された電子と正孔は、その間に働くクーロン引力に起因してその密度や温度によって様々な状態をとりうる。図 1.1(a)、(b) に直接遷移型半導体における電子正孔密度と温度と状態の関係を模式図で示す。図において (I),(M) はそれぞれ絶縁相、金属相を意味する。また、相図の上部に実空間での励起子ガス層と電子正孔プラズマ相の模式図を描いた。

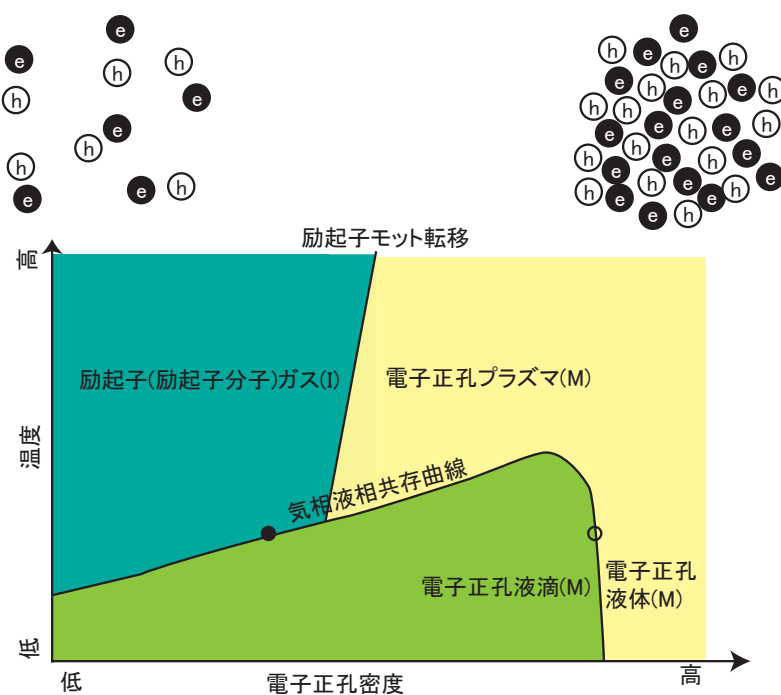
先ず、高温において電子と正孔の対（電子正孔対）の密度が比較的低い、すなわち電子正孔対同士が十分離れているような場合、電子と正孔はクーロン引力により一対一で対を形成し、この場合電子正孔対はボゾンの性質を持つ励起子ガス状態となる。また、励起子同士が近づいたとき、一方の励起子を構成する電子（正孔）のスピン向きと、他方の励起子を構成する電子（正孔）のスピン向きがそれぞれ逆向きである場合、これらは結合し励起子分子 (biexciton, exciton molecule) を形成する。このとき励起子は電氣的には中性であり、系は絶縁相である。ここで電子正孔密度を増して行き、励起子間距離が励起子のボーア半径に近くなり励起子同士が互いに重なり合うような高密度状態になると、クーロン相互作用の遮蔽効果により励起子は解離し、電子正孔プラズマ状態 (electron-hole plasma) となる。このとき系は金属相であるが、この電子正孔系における絶縁体-金属転移は励起子モット転移と呼ばれる⁴⁾。電子正孔プラズマ状態は臨界温度以下では電子正孔気相と電子正孔液相に相分離する。さらに低温では、低密度側の電子正孔気相は励起子ガス相に転移する（図 1.1(a) 参照）。臨界温度以下では励起子状態よりも電子正孔プラズマ状態の方がエネルギー的に安定になるため、電子正孔対は凝縮し密度を増加させることでエネルギー的な利得を得ようとする。この時、励起子は半導体中に一様に分布するのではなく空間的に凝縮し、励起子は電子と正孔に分離し系は金属相となる。これが液相が形成される原因である。Keldysh は 1968 年にこれを理論的に予測し、空気中の水滴に対応させ電子・正孔液滴と呼んだ⁵⁾。また、図 1.1(a) において臨界温度以下で電子正孔密度を増加させていくと、液滴が半導体全体を占めるようになり、電子正孔液体の状態になる。電子正孔液滴はまず Rogachev らによって Ge において観測された⁶⁾。最近では Kuwata-Gonokami

らによって間接遷移型半導体 (ダイヤモンド)、直接遷移型半導体 (CuCl) 中にサブピコ秒光源で励起した励起子に関する時間分解発光スペクトルの実験から、励起子ガスから電子正孔液滴への転移が観測された⁷⁾⁻⁹⁾。しかしながら、十分低温では、励起子のボーズ統計性を考慮すると、励起子ボーズ・アインシュタイン (Bose-Einstein) 凝縮相 (励起子 BEC) が形成されることが理論的に予測されている^{1),2)}。この場合は運動量が零の状態に励起子凝縮するため、励起子の分布は実空間的には一様になる (図 1.1(b) 参照)。励起子が実空間で凝縮することで古典的な相分離が生ずるか、それとも運動量空間で凝縮し、実空間的には均一な巨視的量子現象が生ずるかは、バンド構造に複雑に依存し、物質固有の問題である。

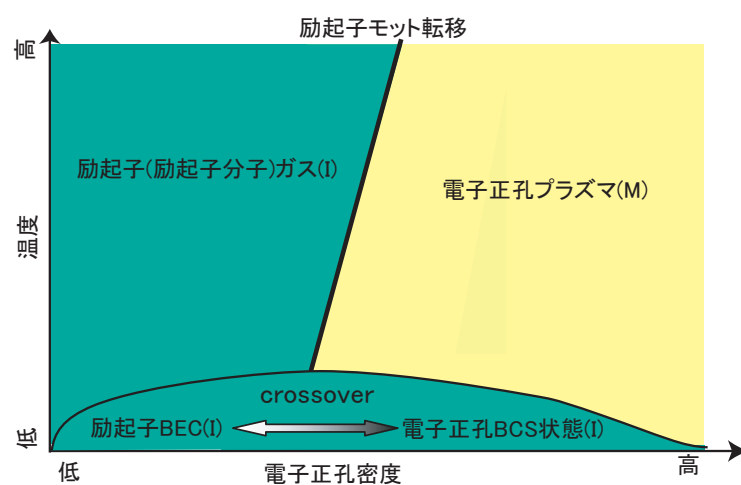
一方、励起子 BEC 相が形成されるような低温において、電子正孔対が互いに重なり合うような高密度状態では、電子と正孔のフェルミオンとしての性質が顕在化し上述の様なボゾンの描像は成り立たなくなる。またこのような低温・高密度では電子正孔対は電子正孔プラズマや電子正孔液滴における様な解離をせず、束縛状態を形成すると考えられる。この、クーロン引力により束縛しあった電子正孔対は、ちょうど超伝導対中において電子同士がフォノンを介した引力により結合しているクーパー (Cooper) 対の様に運動量空間で凝縮を起こし、超伝導体中の BCS 状態と類似した巨視的量子現象を示すことが理論的に予測されている (電子正孔 BCS 状態)³⁾。電子正孔 BCS 状態は、金属相である電子正孔プラズマや電子正孔液滴とは事なり絶縁相であり、励起子 BEC 等の低密度領域の巨視的量子状態と同様の絶縁体としての電氣的性質を持つ。また、電子正孔 BCS 状態と励起子 BEC の間では連続的な移り変わり (クロースオーバー) を示し、^{10),11)} 励起子モット転移とは全く異なる様相を呈すると考えられている。これらのことから電子正孔 BCS 状態は半導体中の低温高密度電子正孔系の巨視的量子現象の中でも特異な存在であると言える。励起子 BEC、電子正孔 BCS 状態、については後に詳しく述べる。

なお、バンドギャップが小さい間接遷移型半導体では、圧力をかける事によってバンドギャップを変化させたとき、伝導帯と価電子帯のエネルギー的な重なりに起因する電子正孔密度の変化によって、半導体-半金属転移が起こるが、この相転移の間で電子正孔間相互作用に起因して絶縁体への相転移が存在する事が指摘されている (Excitonic Phase)¹²⁾⁻¹⁴⁾。

以上のように、低温高密度の電子正孔系は凝縮系の巨視的量子現象を研究する上で非常に興味深い対象である。この系は、照射するレーザー光の強度や周波数によって電子正孔対密度を容易に変化させる事が出来るため、系統的な現象の調査が可能であり、また有効質量が小さいため比較的高温で凝縮状態が得やすいという利点があり、なおかつ光を用いた物性制御による新素材開発 (例えば半導体光スイッチング素子) に繋がる可能性を含む点で、学術的にも産業的な観点からも非常に興味深い対象である。それにも関わらず、電子正孔対の有限寿命に起因して低温で高密度の電子正孔対を長時間維持する事が非常



(a)



(b)

図. 1.1: 高密度電子正孔系の相図 (模式図)

に困難であり、また物質の個々の状態に大きく影響を受けることから、励起子 BEC や電子正孔 BCS 状態の様に実験的に確実な検証がされていない未解決な問題も存在する。しかし、最近の実験技術の進歩により半導体中に非常に多くの低温の電子正孔対を生成し維持する事が可能になり、⁸⁾ 理論面においても計算機の性能も著しい向上を続けているため、今後この分野に関して更なる進歩が見込まれるであろう。

1.2 ボーズ・アインシュタイン凝縮とBCS状態

本論文の研究対象である高密度励起された半導体中の電子正孔BCS状態を理解する上で、一般に知られるBCS状態とボーズ・アインシュタイン凝縮について知ることは不可欠である。本節では次節の理解を助けるため、これらについて概要を述べる。なお、本節の記述は文献15、16、17を参考にした。

1.2.1 ボーズ・アインシュタイン凝縮

^4He はスピンが0のボーズ粒子であり、ボーズ統計に従う。ボーズ統計に従う粒子は多数の粒子が同一の量子状態に入り込むことができる性質を持ち、例えば運動量0の状態に複数のボーズ粒子が落ち込むことも可能である。今、粒子間の相互作用を無視し得るようなとき、温度が下がるにしたがって、最低エネルギーに存在する粒子の数は増えていくが、他の粒子を引き込もうとする量子力学的凝集力によりさらに粒子数は増える。これらが相乗した結果、ある温度で最低エネルギーに存在する粒子の数は急激に増加する。このように一つの1粒子状態にマクロな数の粒子が入り込む現象がボーズ・アインシュタイン凝縮である。なお、この凝縮は運動量空間での凝縮である。ボーズ・アインシュタイン凝縮は凝縮している粒子の数の割合を秩序変数として特徴付けられ、転移温度以下では全粒子数の数%もの粒子が集まる。 ^4He を2.17 K以下に冷やしたとき、摩擦なしの流れを示す超流動現象は、 ^4He のボーズ・アインシュタイン凝縮に関連付けられる。

1.2.2 BCS状態

金属や合金の電気抵抗が低温において消滅する超伝導の量子論的な理論であるBCS理論は1957年にBardeen, Cooper, およびSchriefferの3人によって確立された¹⁸⁾。この理論の本質であるフォノンを介した電子同士の引力は、次のような過程で生ずる。ある電子が運動することにより格子中に歪みを生じる。電子の速度(約 10^8cm/s)は格子歪みの速度(約 10^4cm/s)に比べて極めて速いので、格子歪みに伴う分極は他の電子を引き寄せ、電子格子電子相互作用をもたらす。これが仮想的に電子同士がフォノン(格子振動の量子化)を媒介して対を形成しているように扱うことができるのである。BCS理論によれば、フェルミ面近傍の電子に引力が働くとき、それがいかに弱くても正常状態の電子配置は不安定になり、代わって正常状態から有限の大きさのエネルギーギャップを隔てた位置に新しい基底状態ができる。これが超伝導状態(BCS状態)であり、秩序変数(秩序の度合いを示すパラメータ)はこのエネルギーギャップである。BCSのハミルトニアンは次のよ

うに与えられる。

$$H_{sc} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - V \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\uparrow} \quad (1.1)$$

ここで、 $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}\sigma}$ は電子の生成、消滅演算子であり、 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ は一電子状態のエネルギーである。 $-V$ は電子間の引力であるが、この引力が有効的に働く範囲はフェルミ面の上下 $2\omega_D$ の球殻内にある。ここで ω_D はフォノンのエネルギースケールであるデバイ・エネルギーであるが、これはフェルミエネルギーよりもはるかに小さいため、この球殻は非常に薄いものである。(1.1) 式の右辺第二項の $\sum'$ はこの球殻の範囲内で和をとることを意味している。

次に波動関数を考える。まず電子間に引力がない正常状態の波動関数は次のように書ける。

$$|\Phi_{normal}\rangle = \prod_{\mathbf{k} < k_F} B_{\mathbf{k}}^{\dagger} |vac\rangle \quad (1.2)$$

ここで、

$$B_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}, \quad B_{\mathbf{k}}^{\dagger} = c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \quad (1.3)$$

は全運動量が零の電子対の電子対の消滅、生成演算子である。電子対にはスピンの平行（三重項）と反平行（一重項）のものが考えられるが、金属中では後者のみ問題になるので、ここでは半平行の場合のみを考える。また、 $|vac\rangle$ は真空を表す波動関数である。

また BCS 理論によると、BCS 状態の波動関数は、次のように与えられる

$$|\Phi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + e^{i\theta} v_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) |vac\rangle \quad (1.4)$$

θ は BCS 状態の位相を表すパラメータ、 $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ は変分パラメータであり、 $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ の関係を満たす。この式は電子対の位相はそろっているが、電子数が不確定であること（コヒーレントな状態）を意味している。この波動関数の特徴は、 $B_{\mathbf{k}}$ の期待値 $\langle \Phi_{BCS} | B_{\mathbf{k}} | \Phi_{BCS} \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}$ が有限の値を持つことである。また、BCS 状態の秩序変数である BCS エネルギーギャップ方程式は次のように定義される。

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv V \sum'_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \quad (1.5)$$

フェルミオンである電子は1電子状態に1個までしか存在しえないが、電子対は2電子状態にマクロな数が落ち込むことができる。これを対凝縮と言ひ、BCS 状態は電子対が対凝縮を起こすことにより形成されると考えることができる。この凝縮した電子対はクーパー対と呼ばれ、多くのボゾンの特長を持つ。しかしながら電子濃度に対して計算された

ボーズ・アインシュタイン凝縮の転移温度はフェルミ温度 ($10^4 \sim 10^5 \text{K}$) 程度であり、実際の超伝導転移温度（クーパー対が二個の電子に解離する温度）よりはるかに高い。また、クーパー対の電子間距離（コヒーレンス長）は数 $100 \text{ \AA}$ と、金属中の電子間距離よりはるかに長い。このことはクーパー対同士が互いに間に入り込んで存在していることを意味している。そのため BCS 状態のメカニズムを考える際、単純に BCS 状態はクーパー対がボーズ・アインシュタイン凝縮を起こしたものだとするモデルは成り立たないことに注意すべきである。

1.3 高密度励起された半導体中の電子正孔 BCS 状態

本節では本論文の研究対象である電子正孔 BCS 状態について解説する。そのために、まず電子正孔 BCS 状態を語る上では外すことのできない励起子ボーズ・アインシュタイン凝縮について記述する。また関連分野として、最近特に注目を集めているフェルミ原子ガス系の BCS-BEC クロスオーバーについても説明を与える。

1.3.1 励起子ボーズ・アインシュタイン凝縮（励起子 BEC）

液体ヘリウムの超流動現象は、前述したようにボーズ粒子である ^4He のボーズ・アインシュタイン凝縮が主な原因である。これと同様に、半導体に照射するレーザー光の強度を強くしていくことによって電子正孔対の密度を増加させたとき、半導体中に生成された電子正孔対（励起子）もボーズ・アインシュタイン凝縮を起こし超流動を示すのではないかと考えられている。これは励起子 BEC とよばれ、1962 年、Blatt ら、Moskalenko らにより独立に予測された後、多くの実験的・理論的な研究が試みられてきた^{1), 2), 19)}。例えば、Akimoto-Hanamura らによる理論的な研究によれば、励起子そのものによる BEC は殆ど起こらず、二つの励起子間の二つの電子と正孔の各々に対してスピンの反対称である場合に働く引力によりつくられた束縛状態である励起子分子により励起子 BEC は起こると考えられている²⁰⁾。また、Iida らはタイプ II 半導体超格子に対する理論研究で、井戸幅が十分小さい場合、励起子系の超流動が存在しうることを見出した。ここで半導体超格子の模式図を図 1.2 に示す。半導体超格子とは、異なる種類の半導体超薄膜（図では A、B とした）の周期積層構造のことであり、伝導帯と価電子帯の量子井戸が同じ層にある場合をタイプ I という。また、異なる層にある場合はタイプ II と言い、GaAs/AlAs がこのタイプである。

この研究において Iida らは外部電流をこの量子井戸に流した場合を考え、ある臨界電流以上では励起子の超流動に起因する電流が流れることを見出した。これらの結果から彼

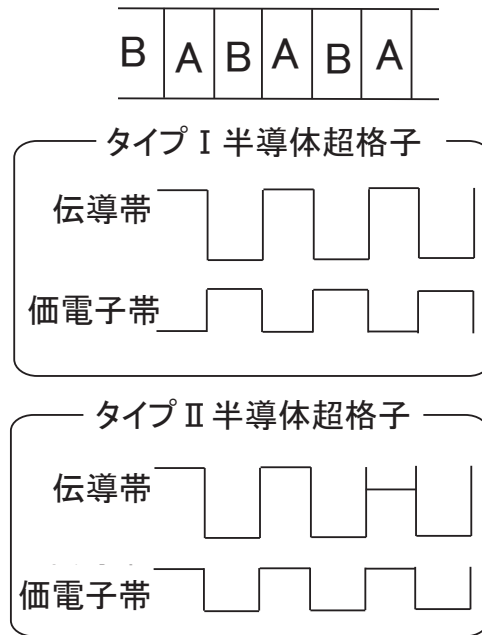


図. 1.2: 半導体超格子の模式図

等は励起子 BEC の直接観測が可能であることを示した^{21), 22)}。

また、励起子 BEC を実験的に見出したとする研究が数多く発表された^{23)–27)}。例えば、1993 年 Fortin らにより Cu_2O 中の励起子の異常伝播が報告された²⁸⁾。ここで図 1.3、1.4 は Fortin らの実験結果であり、幾つかの温度と入射光強度に対する時間分解光起電圧である。 Cu_2O を光励起すると、初めに一重項励起子が生成されるが、これは速やかに、エネルギーが低い三重項励起子へと緩和する。三重項励起子は一重項励起子より寿命が長く、発光しにくいため、Fortin らは試料表面で励起子が再結合して壊れる際に観測される起電圧を測定した。

ここで図 1.3 における $T < 3\text{K}$ 、図 1.4 における $I > 2.5I_0$ の $1\mu\text{s}$ 付近に見られるピークは、巨視的量子状態にある励起子集団のコヒーレンス伝播の証拠によると考えられた。電子正孔が高密度の状態では、励起子の位相緩和時間は極めて短くなると考えられるが、この結果のように光を照射した位置から離れた場所で時間幅の狭い光起電圧が観測されるということは、励起子が集団でコヒーレントに伝播していること反映していると考えられる。さらに、このピークは高温では消えてしまうが、非常に低い温度でこの転移が起きている。Fortin らはこれらの特徴は励起子 BEC を反映している可能性があると考えた。また、Goto は Cu_2O の二光子共鳴吸収実験において、二つの部分からなる発光線の内の一つが励起子 BEC と関連すると考えた²⁹⁾。Hasuo らは CuCl に対する二光子吸収実験により観測された零波数の励起子分子の数の増加に伴う位相共役波の増強が励起子 BEC と関連すると考えた³⁰⁾。一方、Kondo らによる BiI_3 結晶を光強励起子した際の吸収、発

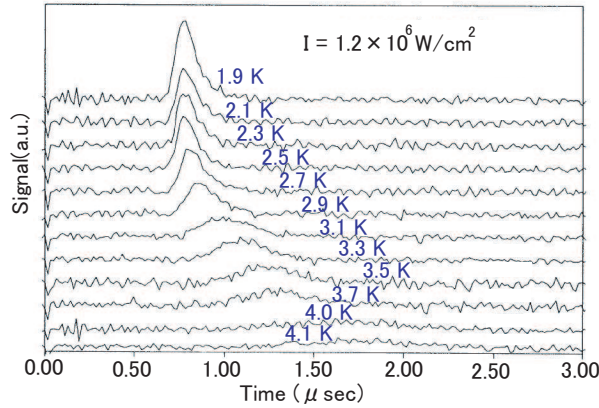


図. 1.3: 時間分解光起電圧の温度依存性²⁸⁾

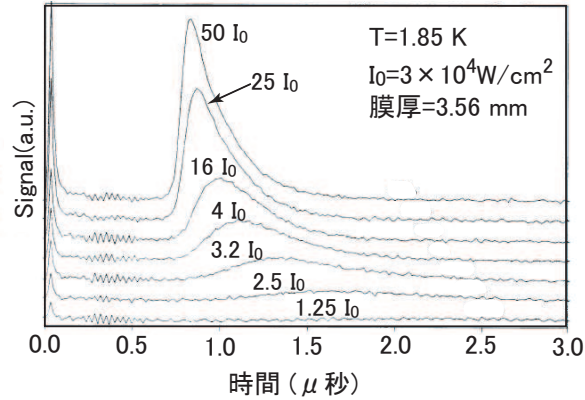


図. 1.4: 時間分解光起電圧の励起光強度依存性²⁸⁾

光スペクトルの変化、非線形光学応答についての実験によって高密度励起子のコヒーレントな集団運動が示唆された³¹⁾。また、Nakayama らによる GaAs/AlAs タイプ II 半導体超格子での励起子-励起子分子系での PL 強度の減衰過程から、励起子-励起子分子系が Bose-Einstein 統計に従う事を示した実験^{32), 33)}、Deng らによる GaAs/AlAs マイクロキャビティ励起子ポラリトンの凝縮に関する研究³⁴⁾ などが励起子 BEC に関連する研究として存在する。

最近では 2002 年、Snoke らのグループと Butov らのグループがそれぞれ独立に行われた半導体量子井戸による実験において観測された特殊な励起子発光が、励起子 BEC の形成に帰せられると考えられている^{35), 36)}。図 1.5 は Butov ら実験結果の一つであり、GaAs/AlGaAs 量子井戸を光励起した際の PL スペクトルの空間依存性である³⁶⁾。図において一番上の線は入射光を照射した位置 ($r = 0$) であり、下に行くに従って遠ざかり、最下段の線は $r = 107 \mu\text{m}$ である。今、低温 ($T = 2.4\text{K}$) において、入射位置より離れた場所

にピークが存在する。これは入射位置からある程度離れた円環状の発光であり、Butov らはこの発光が励起子 BEC の形成に起因するのではないかと考えた。

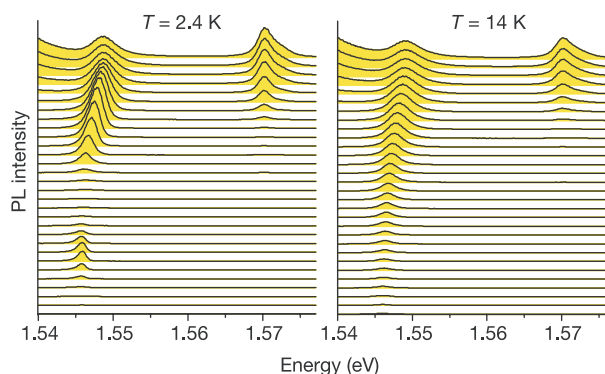


図. 1.5: PL スペクトルの空間依存性³⁶⁾

この様に、励起子 BEC は精力的にその検証が試みられているにも関わらず、現在までの所何れの結果も励起子 BEC の存在を決定付けるまでには至っていない。例えば図 1.3, 1.4 の Fortin らの結果は光励起と同時に生成されたフォノンウインド（フォノンが電荷に運動量を与える現象）と区別ができないと指摘されている³⁷⁾。また、図 1.5 の Butov らの結果についても円環は空間的に隔てられた電荷の境界であると報告されており^{38), 39)}、更なる検討が必要であるとされている。なお、光励起でない系に関しては、量子ホール系において 2004 年、Kellogg らによるグループと Tutuc らによるグループによって実験でそれぞれ独立に観測された伝導特性が新たに注目を集めている^{40), 41)}。

1.3.2 電子正孔 BCS 状態

電子正孔系の BCS 状態は励起子 BEC 同様 1960 年代に Keldysh らにより予言された後³⁾、過去 40 年以上に渡って精力的に研究が行われてきた^{10), 42)–49)}。励起子 BEC と電子正孔 BCS 状態の相違点を表 1.1 にまとめた。平均対間距離が励起子ボア半径より短いような高密度では電子正孔対同士が互いに重なり合っており、一对の電子正孔間に多数のフェルミオンが存在するため、粒子間のクーロン相互作用とパウリの排他原理が重要になり、もはや電子正孔対はボゾンの性質を持つ励起子として扱うことはできなくなる。この場合、実空間において電子と正孔是一对一で束縛しあっているのではなく、常に相互作用する相手を変えながら対を形成している（すなわち、実空間ではパートナーを特定できない）。この時、クーロン引力で束縛しあっている電子正孔対は、BCS 状態におけるクーパー対からの類推より、電子正孔クーパー対と呼ばれる。この電子正孔クーパー対が形成されることによって半導体中においても超伝導状態と同様にフェルミ面は不安定にな

り、フェルミ準位近傍（この場合は、電子と正孔を励起後にできた新たなフェルミ準位を意味し、基底状態のそれではない）に新たなエネルギー状態とエネルギーギャップが形成される。ここで、1 個の電子正孔クーパー対を形成する電子と正孔の間の平均距離は、数十～数百 Å 離れており、電子（正孔）は直近の正孔（電子）と実空間で対を形成しているのではないことに注意すべきである。また、電子正孔クーパー対を形成している電子と正孔は、クーパー対と同様に逆符号の波数ベクトルを持つが、このことは電子正孔クーパー対は実空間では対を組むパートナーを特定はできないが、運動量空間では互いに逆方向に運動するもの同士の結合であることを意味する。なお、励起子 BEC と電子正孔 BCS 状態は、前述の通り励起子モット転移のように急激に転移するのではなく、連続的に移り変わる（BCS-BEC クロスオーバー）事が理論的に示されているが、このことはクロスオーバー領域では転移温度より高温で束縛状態が関与していることを意味しており、高温超伝導のメカニズムと関連している可能性が考えられている^{10), 11)}。

励起子 BEC と同様、電子正孔 BCS 状態も実験的な観測はなされていない。特に後者については検証を試みた実験すら、現在までの所殆ど行われていない。それは超伝導若しくはフェルミ原子系と電子正孔系との間の違いによる実験上の困難に起因するであろう。電子正孔 BCS 状態の観測を困難している問題、例えば高密度に光励起された系が熱平衡に達する前に電子正孔対は再結合により消滅してしまうこと、また、試料中のイオン化不純物による電荷非中性、エネルギーバンドの異方性、電子と正孔の有効質量の差異などは電子正孔相関を妨げると考えられる。この中で、電子正孔対の短寿命については、近年の実験技術の進歩により、低温高密度の電子正孔系を保持することが実現されており^{7)–9)}、問題が克服されつつある。一方、電荷非中性の問題も試料の純度を向上させることにより、ある程度は解決できるであろう。しかしながら、エネルギーバンドの異方性、電子と正孔の有効質量の差異はどうであろうか。ここで、特に構成要素に注目して BCS 状態と電子正孔 BCS 状態の相違をまとめた表を表 1.2 に示す。クーパー対を構成する電子同士は、スピンの向きと波数ベクトルが反平行なこと以外は全て同じ性質を持ち、有効質量やバンドの異方性についての差異は考慮しなくても良い。しかしながら電子正孔クーパー対を構成する電子と正孔はそれぞれ伝導帯と価電子帯に存在する別種のフェルミオンであるため、電子正孔間の有効質量差、エネルギーバンドの異方性差は殆どの物質において存在する。これらのことから電子正孔間の有効質量差、エネルギーバンドの異方性差も電子正孔 BCS 状態を不安定にし、観測を困難にしていると予想するのは妥当であろう。

電子正孔 BCS 状態の観測にはこのように困難な問題が残されているが、これを直接観測するための手段としては例えば、テラヘルツ (THz) 領域の光吸収実験が挙げられる。電子正孔 BCS 状態の秩序変数（電子正孔 BCS エネルギーギャップ）は数 meV 程度と非常に小さく、従来の赤外線吸収実験では観測ができなかった。テラヘルツ波は、周波数が

10^{12}Hz (THz) の遠赤外線領域にある光である。テラヘルツ波の定義は明確にされていないが、およそ周波数が $0.1\text{THz}\sim 10\text{THz}$ の領域、波長に換算すると $30\mu\text{m}\sim 3\text{mm}$ 、エネルギー的には $0.4\sim 40\text{meV}$ の領域を指し、光と電波の境界領域にある。テラヘルツ波の光源には、例えば低温成長 GaAs (過剰 As 雰囲気中で低温成長させた GaAs) や GaAs p-i-n ダイオードなどが考えられる^{50),51)}。これらの発生素子に数 10fs ($1\text{fs} = 10^{-15}$) のパルス幅をもつ近赤外領域の光を照射することで発生する。近・中赤外線より波長が長く低エネルギーのテラヘルツ波の吸収スペクトルを測定することにより、電子正孔 BCS エネルギーギャップの存在を調べることができると考えられる。また、2つの接合させた半導体を、位相差のある二本のレーザーでそれぞれ励起することで起こる光ジョセフソン効果による位相差に応じた正弦関数的な光強度の変化を利用して、励起子 BEC、電子正孔 BCS を直接観測できるとの理論的な提唱もある⁴⁹⁾。

表 1.1: 励起子 BEC と電子正孔 BCS 状態の比較

	励起子 BEC	電子正孔 BCS 状態
電子正孔対	離れて存在	重なり合っている
構成要素	励起子	電子正孔クーパー対
対の様相	実空間で対を形成	運動量空間で対を形成
秩序変数	凝縮している対の数の割合	電子正孔 BCS エネルギーギャップ

表 1.2: BCS 状態と電子正孔 BCS 状態の比較

	超伝導	電子正孔 BCS 状態
構成要素	クーパー対	電子正孔クーパー対
構成要素の演算子	$c_{\mathbf{k}\uparrow}c_{-\mathbf{k}\downarrow}$	$c_{\mathbf{k}}d_{-\mathbf{k}}$
有効質量差	なし	電子正孔間で存在する
バンド異方性差	なし	電子正孔間で存在する

1.3.3 関連研究：フェルミ原子ガス系における BEC-BCS クロスオーバー

1995 年に ^7Li や Na 等のアルカリボーズ原子系で、磁場とレーザーによりトラップされレーザーで冷却された極低温の原子ガスにおいて BEC が実現された^{52)–54)}。この状態は隣り合う原子の波動関数が重なり合う程度にまで原子ガスを極低温 ($10^{-6} - 10^{-7}[\text{K}]$) に冷却することで得られた。それ以降、次なる目標としてフェルミ原子系でも同様に BEC が起

こるかどうかが探索され続けてきたが、2004 年、 ^{40}K 、 ^6Li に対し、フェルミ原子ガスでの BEC 及び BCS-BEC クロスオーバーが達成された^{55)–58)}。この系での対形成の機構は超伝導や高密度電子正孔系とは異なり、フェッシュバッハ共鳴という現象がその役割を担っている。これは外部磁場の強度がある特定な値に近づくと、原子散乱の際、2 原子間の衝突エネルギーと弱く結合した分子の束縛エネルギーとが殆ど同じになる現象であり、この共鳴近くで相互作用は非常に強くなる。この方法の特徴は、共鳴を横切るように磁場を制御する事で原子間の相互作用を変化させ、BEC が起こる領域から BCS 状態へとフェルミ原子ガスの状態を制御する事ができる点にあり、これにより BCS – BEC クロスオーバーを実現した。ただし、現在までの所達成できたのは BEC からクロスオーバー領域までであり、完全な BCS 状態は実現されていないと考えられている。この系の研究について特に注目すべきは、BCS 相転移温度がフェルミ温度 ($T_F = 10^{-6} - 10^{-7}[\text{K}]$) の 10%を超えていることである。これを金属電子系 ($T_F = 10^4 - 10^5[\text{K}]$) の超伝導に対応させると転移温度 T_c が 1000 度以上の超高温超伝導が実現した事になり、高温超伝導のメカニズムの研究にも大きな影響をもたらすと考えられる。

1.4 研究の目的

本研究の目的は、電子正孔有効質量差とエネルギーバンドの異方性が有限温度において電子正孔 BCS 秩序に与える効果を明らかにすることである。具体的には電子正孔有効質量差やエネルギーバンドの異方性による電子正孔 BCS 状態-電子正孔プラズマ転移を電子正孔 BCS エネルギーギャップ方程式を数値的に解くことで調べる。これは超伝導において BCS 状態-常伝導転移を調べることに対応する。

1.3.2 で説明したように、半導体中のエネルギーバンドの異方性、電子正孔有効質量差は電子正孔 BCS 状態に大きな影響を与えると考えられるため、これに関する問題は理論、実験の両面において非常に重要である。現在までの所、まず 1966 年に Kopaev によって半金属–絶縁体相転移について有効質量の異方性と電子正孔有効質量差をそれぞれ別個に扱った定性的な研究が行われた⁵⁹⁾。また、エネルギーバンドの異方性については 1967 年、Zittartz によって異方性を持った系に対して、半金属–Excitonic Phase 間の相転移に関する定性的な解析が行われた⁶⁰⁾。また、Conti らによって⁶¹⁾、エピタキシャルに育成された AlAs/GaAs 二重量子井戸を考え、現象論的な電子正孔間相互作用やエネルギーバンド構造を用いて伝導帯と価電子帯の非対称性を扱った研究がある。Conti らはこの研究において、一軸性の圧力を試料に加えることによって電子正孔 BCS 状態への転移温度を上昇させることができると考えた。

以上のことから、電子正孔有効質量差やエネルギーバンドの異方性は電子正孔 BCS 状

態に大きな影響を及ぼすと考えられる。これらの問題に対して定量的な研究はこれまで行われていない。しかしながら、高密度電子正孔多体系を利用した研究開発にはこれらの問題に対する理解が不可欠である。

1.5 本論文の構成

本論文は以下の様な構成を取る。第2章において定式化を行い電子正孔BCSエネルギーギャップ方程式等を導出する。第3章では電子正孔BCS状態を特徴付ける基本的な物理量についての数値計算の結果と考察を示した後、電子正孔有効質量差、エネルギーバンドの異方性及び電荷非中性が電子正孔BCS状態に及ぼす効果についての数値計算の結果と考察を示した。また、最後に電子正孔励起による有効質量の変化についても触れた。第4章では本研究の結論と今後の課題を述べた。

参考文献

- [1] J. M. Blatt, K. W. Böer and W. Brandt, Phys. Rev. **126**, 1691 (1962).
- [2] S. A. Moskalenko, Soviet Phys.Solid State **4** 199 (1962).
- [3] L. V. Keldysh and Yu. V. Kopaev, Fiz. Tverd. Tela **6**, 2791 (1964) [Sov. Phys. Solid State **6** (1965) 2219]
- [4] L. V. Keldysh, Contemp. Phys. **27**, 395 (1986).
- [5] L. V. Keldysh, *Proc. Intern. Conf. on Physics of semiconductors*, Moscow (1968) p. 1303.
- [6] A. A. Rogachev, *Proc. Intern. Conf. on Physics of semiconductors*, Moscow (1968) p. 409. V. M. Asnin, A. A. Rogachev and S. M. Ryvkin, Fiz. Tekh. Polupr. **1** 1742 (1967) (Soviet Phys. Semicond. **1** 1447 (1968)).
- [7] M. Nagai, R. Shimano, K. Horiuchi, and M. Kuwata-Gonokami, Phys. Rev. B **68**, 081202 (2003).
- [8] R. Shimano, M. Nagai, K. Horiuchi, and M. Kuwata-Gonokami, Phys. Rev. Lett. **88**, 057404 (2002).
- [9] M. Nagai, Ryo. Shimano and M. Kuwata-Gonokami, Phys. Rev. Lett **86**, 5795 (2001).
- [10] T. J. Inagaki, and M. Aihara, Phys. Rev. B **66**, 075204 (2002).
- [11] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, J. Low. Temp. Phys. **59**, 195 (1985).
- [12] N. F. Mott, Phil. Mag. **6** 287 (1961).
- [13] R. S. Knox, Solid State Phys. Suppl. **5** 100 (1963).
- [14] W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **19** 439 (1967).
- [15] 黒沢達美, 物性論-固体を中心とした- (1971) 裳華房.

- [16] 東京大学物性研究所編, 物性科学事典 1048 (1996) 東京書籍.
- [17] 中嶋貞雄, 親物理学シリーズ 9 超伝導入門 (1971) 培風館.
- [18] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **106**, 162 (1957); J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [19] R. C. Casella, J. Phys. Chem. Solids **24** 19 (1963).
- [20] O. Akimoto, E. Hanamura, J. Phys. Soc. Japan **33** 1537 (1972).
- [21] M. Tsubota and T. Iida, J. Low Temp. Phys. **113** 1165 (1998).
- [22] T. Iida and M. Tsubota, Phys. Rev. B **60** 5802 (1999).
- [23] I. Kh. Akopyan, E. F. Gross and B. S. Razbirin, JETP Letters **12** 251 (1970).
- [24] H. Kuroda, S. Shionoya, H. Saito and E. Hanamura, Solid State Commun. **12** 533 (1973); H. Kuroda, S. Shionoya, H. Saito and E. Hanamura, J. Phys. Soc. Japan **35** 534 (1973).
- [25] W. Czaja and C. F. Schwerdtfeger, Solid State Commun. **15** 87 (1974).
- [26] N. Nagasawa, N. Nakata, Y. Doi and M. Ueta, J. Phys. Soc. Japan **39** 987 (1975).
- [27] N. Nagasawa, T. Mita and M. Ueta, J. Phys. Soc. Japan **41** 929 (1976).
- [28] E. Fortin, S. Farad. and A. Mysyrowicz, Phys. Rev. Lett. **70**, 3951 (1993).
- [29] T. Goto, M. Shen, S. Koyama and T. Yokouchi, Phys. Rev. B **12** 7609 (1997).
- [30] M. Hasuo, N. Nagasawa, T. Itho, A. Mysyrowicz, Phys. Rev. Lett. **70** 1303 (1993); M. Hasuo, N. Nagasawa, T. Itho, A. Mysyrowicz, J. Lumin. **60-61** 758 (1994).
- [31] H. Kondo, T. Kawai, T. Karasawa, I. Akai, and T. Komatsu, J. Lumin. **66-67**, 448 (1996); H. Kondo, H. Mino, I. Akai, and T. Karasawa, Phys. Rev. B **58**, 13 835 (1998).
- [32] M. Nakayama, H. Ichida, Physica E, **21**, 651 (2004).
- [33] H. Ichida, M. Nakayama, Phys. Rev. B **63**, 195316 (2001).
- [34] H. Deng, G. Weihs, C. Santori, J. Bloch, Y. Yamamoto, Science **298**, 199 (2002).

- [35] D. Snoke, S. Denev, L. Pfeiffer, and K. West, *Nature* **418**, 754 (2002); D. Snoke, *Science* **298**, 1368 (2002).
- [36] L. V. Butov, A. C. Gossard, and D. S. Chemla, *Nature* **418**, 751 (2002).
- [37] A. E. Bulatov and S. G. Tikhodeev, *Phys. Rev. B* **46**, 11503 (1992). G. A. Kopelevich, S. G. Tikhodeev, and N. A. Gippius, *JETP* **82** 1180 (1996).
- [38] R. Rapaport, G. Chen, D. Snoke, Steven H. Simon, Loren Pfeiffer, Ken West, Y. Liu, and S. Denev, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 117405 (2004).
- [39] L. V. Butov, L. S. Levitov, A. V. Mintsev, B. D. Simons, A. C. Gossard, and D. S. Chemla, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 117404 (2004).
- [40] M. Kellogg, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036801 (2004).
- [41] E. Tutuc, and M. Shayegan, D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036802 (2004).
- [42] H. Haug and Schmitt-Rink, *Prog. Quantum Electron.* **9**, 3 (1984).
- [43] T. Iida, Y. Hasegawa, H. Higashimura, and M. Aihara, *Phys. Rev. B* **47**, 9328 (1993).
- [44] T. J. Inagaki, T. Iida, and M. Aihara, *Phys. Rev. B* **62**, 10 852 (2000).
- [45] T. J. Inagaki and M. Aihara, *Phys. Rev. B* **65**, 205204 (2002).
- [46] S. A. Moscalenko and D. W. Snoke, *Bose Einstein Condensation of Excitons and Biexcitons* (Cambridge University Press, Cambridge 2000).
- [47] C. Comte and P. Nozières, *J. Phys. (Paris)* **43**, 1069 (1982).
- [48] P. Nozières and C. Comte, *J. Phys. (Paris)* **43**, 1083 (1982).
- [49] M. Aihara, T. Iida, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3597 (1996).
- [50] S. Gupta, M. Y. Frankel, J. A. Valdmanis, J. F. Whitaker, G. A. Mourou, F. W. Smith and A. R. Calawa, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 3276 (1991).
- [51] A. Leitenstorfer, S. Hunsche, J. Shah, M. C. Nuss, and W. H. Knox, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5140 (1999).

- [52] M. Anderson, J. Ensher, M. Matthews, C. Wieman, E. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [53] K. B. Davis, M. -O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [54] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [55] C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin, Phys. Rev. Lett. **92**, 040403 (2004).
- [56] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, A. J. Kerman, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **92**, 120403 (2004).
- [57] M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, C. Chin, J. Hecker Denschlag, and R. Grimm, Phys. Rev. Lett. **92**, 203201 (2004).
- [58] T. Bourdel, L. Khaykovich, J. Cubizolles, J. Zhang, F. Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S. J. J. M. F. Kokkelmans, and C. Salomon, Phys. Rev. Lett. **93** 50401 (2004).
- [59] Yu. V. Kopaev, Fiz. Tverd. Tela. **8**, 223 (1966) [Sov. Phys. Solid State **8**, 175 (1966).].
- [60] J. Zittartz, Phys. Rev. **162**, 752 (1967).
- [61] S. Conti, G. Vignale, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **57**, R6846 (1998).

第2章 定式化

2.1 緒言

定式化の出発点となるハミルトニアンとして、スピン自由度及びバンドの縮退は無視したスピンレス2バンドハミルトニアン (Spin-less two band Hamiltonian) を用いた¹⁾。ここで、単一の励起子分子を取り扱った研究では、スピン自由度は常に考慮されているが²⁾、現在我々が扱っている多体系の問題においてさらにスピン自由度を含むことは、計算を極めて煩雑にする。それゆえ我々は議論を電子正孔有効質量差とエネルギーバンドの異方性が電子正孔 BCS 状態にどのような影響を及ぼすかに絞むことで数値計算を可能にする。なお、 Cu_2O のように励起子分子を形成しない物質を考えた場合には、スピンレスモデルで正確に状態を記述できる。

このハミルトニアンをボゴリューボフ (Bogoliubov) 変換し、有限温度におけるハートリー・フォック近似 (Hartree-Fock) 近似を用いて、電子正孔 BCS 状態の秩序変数を与える電子正孔 BCS エネルギーギャップ方程式等を導出する。ハミルトニアンの対角化は BCS 形の平均場近似に基づいた。電荷同士のクーロン相互作用は準静的乱雑位相近似に基づいた準静的遮蔽クーロンポテンシャル (Quasi Static Screened Coulomb Potential) を用いた。これは電子正孔対が高密度の場合において有効な近似である³⁾。

ここで、平均場近似において電子正孔 BCS エネルギーギャップを評価することは、電子正孔 BCS 状態と電子正孔プラズマ間の転移を調べることであり、これが本定式化の適用範囲であることに注意するべきである。つまり、励起子 BEC-電子正孔 BCS 状態間のクロスオーバーや励起子ガス-電子正孔プラズマ間の転移 (励起子 Mott 転移) については、本定式化の適用範囲外である。

2.2 電子正孔ハミルトニアンの第二量子化表示

シュレーディンガー (Schrödinger) 表示のハミルトニアンから、半導体中の電子正孔系のスピンレス2バンドハミルトニアンの第二量子化表示を導出する⁴⁾。電子に対するシュ

レーディンガー方程式のハミルトニアンを

$$H = T + V, \quad (2.1)$$

$$T = \sum_i^N f(r_i) (\text{運動エネルギー}), \quad (2.2)$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N v(r_i, r_j) (\text{ポテンシャルエネルギー}). \quad (2.3)$$

と表す。ここで $f(r_i)$ は一体の演算子、 $v(r_i, r_j)$ は二粒子系の演算子である。これらを第二量子化するために、場の演算子

$$\hat{\psi}(r) \equiv \sum_i^N \varphi_i(r) a_i, \quad \hat{\psi}^\dagger(r) \equiv \sum_i^N \varphi_i^*(r) a_i^\dagger \quad (2.4)$$

を定義する。ここで $a_i^{(\dagger)}$ は電子の消滅（生成）演算子、 $\varphi(r_i)$ は完全規格直交基底である。ここで、この生成・消滅演算子に対する真空は、全ての a_i に対して

$$a_i |0\rangle = 0$$

である状態をいう。 f, v の第二量子化された演算子 $\hat{f}, \hat{v}$ は

$$\begin{aligned} \hat{f} &= \int dr \sum_i \varphi_i^\dagger(r) a_i^\dagger f \sum_j \varphi_j(r) a_j \\ &= \sum_{i,j} \int dr \varphi_i^\dagger(r) f \varphi_j(r) a_i^\dagger a_j \\ &= \sum_{i,j} \langle \varphi_i | f | \varphi_j \rangle a_i^\dagger a_j \\ &= \sum_{i,j} f_{ij} a_i^\dagger a_j \end{aligned} \quad (2.5)$$

と表される。ただし

$$f_{ij} \equiv \langle \varphi_i | f | \varphi_j \rangle$$

である。同様に

$$\begin{aligned} \hat{v} &= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \iint dr_1 dr_2 \varphi_i^*(r_1) \varphi_j^*(r_2) v(r_1, r_2) \varphi_k(r_2) \varphi_l(r_1) a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle \varphi_i \varphi_j | v(r_1, r_2) | \varphi_k \varphi_l \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \end{aligned} \quad (2.6)$$

となる。ここで

$$v_{ijkl} \equiv \langle \varphi_i \varphi_j | v(r_1, r_2) | \varphi_k \varphi_l \rangle$$

である。以上より

$$\hat{H} = \sum_{ij} f_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (2.7)$$

次に、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーを求める。ここで

$$H = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (2.8)$$

である。また、周期的境界条件を用いると、波動関数 $\varphi_i(\mathbf{r})$ は次の様に平面波で与えられる。

$$\varphi_i(\mathbf{r}) = V^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \quad (2.9)$$

V は系の体積である。これらより、運動エネルギーの項は

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1 | T | \mathbf{k}_2 \rangle &= (2mV)^{-1} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} (-\hbar^2 \nabla^2) e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2mV} \int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \quad \left(\int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} = V \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \right) \end{aligned} \quad (2.10)$$

であるから

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (2.11)$$

となる。一方、ポテンシャルエネルギーの項は

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle &= \frac{e^2}{V^2} \iint d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{r}_2} \\ &\quad \mathbf{x} = \mathbf{r}_2, \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \text{ と変数変換すると} \\ &= \frac{e^2}{V^2} \int d^3\mathbf{x} e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{x}} \int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{r} \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$= \frac{e^2}{V} \frac{4\pi}{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)^2 + \eta^2} \delta_{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 + \mathbf{r}_4} \quad (2.13)$$

となる。(2.12) 式から (2.13) 式を導くに際し、収束因子 $e^{-\eta r}$ を導入し次のような計算を行った。 η は計算の最終段階で $\eta \rightarrow 0$ とするが、このとき $V \rightarrow \infty$ を行ってから $\eta \rightarrow 0$ と

する（すなわち $\eta^{-1} \ll V$ ）。これは、中性のバルクを扱う場合、系の大きさを無限大にする熱力学的極限をとったとしても、(2.8) 式はクーロンポテンシャルの長距離効果にもとづく発散はしないからである。(2.12) 式において積分部分は

$$\begin{aligned}
\int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}} e^{-\eta r} \frac{1}{r} &= \int r^2 dr \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi e^{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|r \cos\theta} e^{-\eta r} \frac{1}{r} \\
&= 2\pi \int r dr \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|r \cos\theta} e^{-\eta r} \frac{1}{r} \\
&= 2\pi \int r dr \frac{1}{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|r} \left[-e^{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|r \cos\theta} \right]_0^\pi e^{-\eta r} \\
&= 2\pi \int dr \frac{1}{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|} (e^{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|r} - e^{-i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|r}) e^{-\eta r} \\
&= 2\pi \frac{1}{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|} \left[\frac{e^{(i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|-\eta)r}}{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|-\eta} + \frac{e^{-(i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|+\eta)r}}{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|+\eta} \right]_0^\infty \\
&= -\frac{2\pi}{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|} \left(\frac{1}{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|-\eta} + \frac{1}{i|\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1|+\eta} \right) \\
&= \frac{4\pi}{(k_3-k_1)^2 + \eta^2}
\end{aligned} \tag{2.14}$$

となる。(2.11)、(2.14) 式より、全ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \cdots \mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \frac{4\pi}{(k_3-k_1)^2 + \eta^2} a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_3} \tag{2.15}$$

となる。運動量の保存 ($\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$) を考慮して、次の様に変数を変換する

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} + \mathbf{q}, \quad \mathbf{k}_3 = \mathbf{k} \tag{2.16}$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}' - \mathbf{q}, \quad \mathbf{k}_4 = \mathbf{k}' \tag{2.17}$$

これにより、(2.15) 式の右辺第二項は、

$$\frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \frac{4\pi}{q^2 + \eta^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} \tag{2.18}$$

となる。ここで、(2.18) 式を $\mathbf{q} \neq 0$ と $\mathbf{q} = 0$ の二つの項

$$\frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q} \neq 0} \frac{4\pi}{q^2 + \eta^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{4\pi}{\eta^2} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} \tag{2.19}$$

に分ける。この式の第二項の和は、反交換関係を用いて、

$$\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\eta^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{\mathbf{k}'} - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}) = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\eta^2} (\hat{N}^2 - \hat{N}) \tag{2.20}$$

と書き直される。ここで、系の粒子数の演算子を $\hat{N}$ として、 $\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$ の関係を用いた。結局この項は以下の解析に対して、エネルギーの原点をずらす事にだけ寄与する。また、特に $V \rightarrow \infty$ としたとき、零になる。(2.18) 式から $\mathbf{q} = 0$ の場合を除外することは理にかなっていることがわかる。収束因子 η を $\eta \rightarrow 0$ とした全ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q} \neq 0} \frac{4\pi}{q^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} \quad (2.21)$$

である。これを2バンドモデルへと拡張する。まず、全ハミルトニアン $\hat{H}_{\text{total}}$ は

$$\hat{H}_{\text{total}} = \hat{H}_c + \hat{H}_v + \hat{H}_{\text{int}} \quad (2.22)$$

を定義する。ここで $\hat{H}_c, \hat{H}_v$ はそれぞれ伝導帯と価電子帯の電子の運動エネルギーに対する項であり、 $\hat{H}_{\text{int}}$ は相互作用に起因する項である。 $\hat{H}_c, \hat{H}_v$ は (2.11) 式から

$$\begin{aligned} \hat{H}_c &= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} \\ \hat{H}_v &= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.23)$$

となる。ここで

$$\epsilon_{c,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + E_g, \quad \epsilon_{v,\mathbf{k}} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} \quad (2.24)$$

である。価電子帯を添え字 v 、伝導帯を添え字 c で表した。(2.24) 式において、 m_c, m_v はそれぞれ伝導帯と価電子帯の電子の有効質量、 E_g はエネルギーギャップを表す。有効質量は、有効質量近似により

$$\frac{1}{m_{c(v)}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \xi_k^{c(v)}}{dk^2} \quad (2.25)$$

と定義される⁵⁾。ここで ξ_k^c, ξ_k^v はそれぞれ伝導帯と価電子帯のエネルギー分散である。また、非等方的なエネルギー分散の場合、逆有効質量テンソルの成分は、 x, y を直交座標の成分として

$$\left(\frac{1}{m_{c(v)}} \right)_{x,y} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \xi_{k_x, k_y}^{c(v)}}{dk_x dk_y} \quad (2.26)$$

と与えられる。次に、 $\hat{H}_{\text{int}}$ を得るために、(2.4) 式を

$$\hat{\psi}(r) \equiv \sum_i^N \varphi_{c,i}(r) a_{c,i} + \sum_i^N \varphi_{v,i}(r) a_{v,i} \quad (2.27)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(r) \equiv \sum_i^N \varphi_{c,i}^*(r) a_{c,i}^\dagger + \sum_i^N \varphi_{v,i}^*(r) a_{v,i}^\dagger \quad (2.28)$$

と書き換える。(2.6) 式と同様に

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl} \left(2a_{c,i}^\dagger a_{v,j}^\dagger a_{v,l} a_{c,k} + a_{c,i}^\dagger a_{c,j}^\dagger a_{c,l} a_{c,k} + a_{v,i}^\dagger a_{v,j}^\dagger a_{v,l} a_{v,k} \right) \quad (2.29)$$

である。ここで、(2.29) 式右辺には生成消滅演算子が、全部 $c(v)$ からなる項と、 c と v の組み合わせが2組現れる項が現れている。前者は伝導帯（価電子帯）の電子同士の相互作用であり、後者は伝導帯の電子と価電子帯の電子の間の相互作用を意味する。しかしながら、実際に (2.27)、(2.28) から (2.6) 式と同様の計算をすると、例えば c, v, v, v などのような組み合わせも現れる。これは伝導帯と価電子帯の間の電子の飛び移りが存在することを意味しているが、このような相互作用は半導体のエネルギーバンドギャップが大きい場合には殆ど起こらないので、本研究では無視する。(2.29) 式は (2.21) 式を導いた時と同じ手順により

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} \quad (2.30)$$

となる。ここで

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2} \quad (2.31)$$

である。以上より、全ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{total}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{c,\mathbf{k}} a_{c,\mathbf{k}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{v,\mathbf{k}} a_{v,\mathbf{k}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}} + \hat{V} \quad (2.32)$$

となる。ここで $\hat{V}$ を

$$\begin{aligned} \hat{V} \equiv & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} (a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{c,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}} + a_{v,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{v,\mathbf{k}} \\ & + 2a_{c,\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{v,\mathbf{k}'} a_{c,\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (2.33)$$

と定義した。今、真空として

$$| \rangle \equiv a_{v,1}^\dagger a_{v,2}^\dagger \cdots a_{v,N}^\dagger |0\rangle \quad (2.34)$$

を採用した場合、(2.27)、(2.28) 式における生成・消滅演算子に対して

$$b_{c,i} = a_{c,i}, \quad b_{v,i} = a_{v,i}^\dagger \quad (2.35)$$

で $b_{c,i}, b_{v,i}$ を定義すると、任意の i に対して $b_{(c)v,i} | \rangle = 0$ になるから $b_{(c)v,i}$ が消滅演算子になる。そこで、 $b_{(c)v,i}$ を、次の様に電子と正孔の演算子に置き換える。

$$\begin{aligned} b_{c,\mathbf{k}} & \rightarrow c_{\mathbf{k}} \quad (\text{電子}) \\ b_{v,\mathbf{k}} & \rightarrow d_{-\mathbf{k}} \quad (\text{正孔}) \end{aligned} \quad (2.36)$$

これを、(2.32)、(2.33) 式に代入すると

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{c,\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{v,\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}} + \hat{V} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \hat{V} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} + d_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q})} d_{-(\mathbf{k}'-\mathbf{q})} d_{-\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \\ & + 2c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{-(\mathbf{k}'-\mathbf{q})} d_{-\mathbf{k}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (2.38)$$

となる。(2.38) 式の右辺第二項はフェルミオンの反交換関係を使って、

$$\begin{aligned} d_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q})} d_{-(\mathbf{k}'-\mathbf{q})} d_{-\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} = & -\delta_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-\mathbf{k}'} \delta_{-\mathbf{k},-(\mathbf{k}'-\mathbf{q})} + \delta_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-\mathbf{k}'} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-(\mathbf{k}'-\mathbf{q})} \\ & + \delta_{-\mathbf{k},-(\mathbf{k}'-\mathbf{q})} d_{-\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q})} - d_{-\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q})} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-(\mathbf{k}'-\mathbf{q})} \end{aligned} \quad (2.39)$$

と書き換えられる。ここで、 $V(\mathbf{q}) = V(-\mathbf{q})$ であることから、系は $\mathbf{k}, \mathbf{q}$ の符号の反転に対して対称である。このため (2.38) 式は、和において、 $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}$ の符号の反転に対して不変であるので、(2.39) 式は結局

$$\begin{aligned} & -\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \\ & + \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'-\mathbf{q}} d_{\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - d_{\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (2.40)$$

となる。ここで $\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{k}'$ の場合は

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'-\mathbf{q}} &= -1 \\ \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} &= d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} \\ -\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'-\mathbf{q}} d_{\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} &= d_{\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'} \\ d_{\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} &= -d_{\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (2.41)$$

であり、 $\mathbf{k}' = \mathbf{K} + \mathbf{q}, \mathbf{k} = \mathbf{K}' - \mathbf{q}$ とおきかえると

$$d_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{K}'-\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{K}'} d_{\mathbf{K}} \quad (2.42)$$

となる。以上より (2.39) 式は

$$-1 + 2d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{K}'-\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{K}'} d_{\mathbf{K}} \quad (2.43)$$

また、(2.38) 式右辺第三項は

$$2c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{-(\mathbf{k}'-\mathbf{q})} d_{-\mathbf{k}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} = -2c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}'}^{\dagger} d_{-(\mathbf{k}'-\mathbf{q})} c_{\mathbf{k}} \quad (2.44)$$

と書き換えられる。上と同様に、 $-\mathbf{k}' = \mathbf{K}' - \mathbf{q}$ と置き換え、その後 $\mathbf{K}'$ を $\mathbf{k}'$ と置き換えると

$$-2c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} \quad (2.45)$$

となる。以上より (2.32) 式は

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{c,\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{v,\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}} \left(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}} - 2c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} d_{\mathbf{k}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \right) \\
& + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}} d_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}}
\end{aligned} \tag{2.46}$$

であるが、右辺第五項は定数として扱えるのでこれを省略すると、結局ハミルトニアン

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{k}} \left(\varepsilon_{e,\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{h,\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}} \right) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}} \left(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}} - 2c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} d_{\mathbf{k}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \right)
\end{aligned} \tag{2.47}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{e,\mathbf{k}} &= \epsilon_{c,\mathbf{k}} \\
\varepsilon_{h,\mathbf{k}} &= -\epsilon_{v,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}}
\end{aligned} \tag{2.48}$$

とした。また、 $m_c = m_e, m_h = -m_v$ すると $\varepsilon_{e,\mathbf{k}}, \varepsilon_{h,\mathbf{k}}$ は

$$\varepsilon_{c,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + E_g, \quad \varepsilon_{v,\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} + \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}} \tag{2.49}$$

である。

2.3 電子正孔BCSエネルギーギャップ方程式の導出

前節より、3次元の電子正孔系ハミルトニアンは

$$H = H_0 + H_{ee} + H_{hh} + H_{eh} \tag{2.50}$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} [\xi_{\mathbf{k}}^e c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}}^h d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}}] \tag{2.51}$$

$$H_{ee} + H_{hh} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger d_{\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}}) \quad (2.52)$$

$$H_{eh} = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger d_{\mathbf{k}'}) \quad (2.53)$$

$$\xi_{\mathbf{k}}^{e(h)} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_l^2}{m_{el(hl)}} + \frac{k_t^2}{m_{et(ht)}} \right) - \mu_{e(h)} \quad (2.54)$$

と与えられる。ここで $c_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}}^\dagger)$ と $d_{\mathbf{k}} (d_{\mathbf{k}}^\dagger)$ はそれぞれ電子と正孔の消滅（生成）演算子であり、 $\mu_{e(h)}$ は電子（正孔）の化学ポテンシャルである。また、電子（正孔）のエネルギー $\xi_{\mathbf{k}}^{e(h)}$ には一軸性の異方性を考慮した。 $m_{el(hl)}$ は電子（正孔）の $l (= z)$ 方向の有効質量、 $m_{et(ht)}$ は電子（正孔）の $t (= x, y)$ 方向の有効質量を意味する。 $V_{\mathbf{q}}$ は非遮蔽のクーロンポテンシャルであり、3次元の場合は

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \quad (q \neq 0) \quad (2.55)$$

である。ここで、 ϵ_0 非励起状態の結晶の誘電率である。また、 $q = \sqrt{k_t^2 + k_l^2}$ である。これはクーロンポテンシャルを実空間直交座標から波数空間直交座標へフーリエ変換することで得られる。詳しくは付録 A で述べる。

次にハミルトニアンをボゴリユーボフ（Bogoliubov）変換

$$c_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger, \quad d_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (2.56)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger - v_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}, \quad \beta_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \quad (2.57)$$

をする。ここで、ボゴリユーボフ準粒子の消滅（生成）演算子 $\alpha_{\mathbf{k}}^{(\dagger)}, \beta_{-\mathbf{k}}^{(\dagger)}$ を導入した。 $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ は変分パラメータであり、 $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ の条件に従う。これをハミルトニアンに代入して整理すると

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (2.58)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} [(\xi_{\mathbf{k}}^e + \xi_{\mathbf{k}}^h) v_{\mathbf{k}}^2 - V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \{v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 + (vu)_{\mathbf{k}} (vu)_{\mathbf{k}'}\}] \quad (2.59)$$

$$\begin{aligned} H_1 = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \left[\{v_{\mathbf{k}'}^2 (v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) + 2(uv)_{\mathbf{k}'} (uv)_{\mathbf{k}}\} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \right. \\ & + \left. \{(uv)_{\mathbf{k}'} (v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) + 2v_{\mathbf{k}'}^2 (uv)_{\mathbf{k}}\} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}) \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}} [(\xi_{\mathbf{k}}^e u_{\mathbf{k}}^2 - \xi_{\mathbf{k}}^h v_{\mathbf{k}}^2) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} - (\xi_{\mathbf{k}}^e v_{\mathbf{k}}^2 - \xi_{\mathbf{k}}^h u_{\mathbf{k}}^2) \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} \\ & + (\xi_{\mathbf{k}}^e - \xi_{\mathbf{k}}^h) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}})] \end{aligned} \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned}
H_2 = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \left[(v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}})^2 \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} - (u_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}})^2 \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}'}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \right. \\
& + \{ (u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}})^2 - (uv)_{\mathbf{k}} (uv)_{\mathbf{k}'} \} (\alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}'}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{-\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'} \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}) \\
& + \{ (uv)_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}'}^2 - u_{\mathbf{k}'}^2) - (uv)_{\mathbf{k}'} (v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) \} (\alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'} + \beta_{-\mathbf{k}'}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}'}^\dagger) (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger + \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}) \\
& \left. - \frac{1}{2} (v_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}})^2 (\alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}'}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}'}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \right] \quad (2.61)
\end{aligned}$$

となる。

BCS型の超伝導では、常伝導から超伝導への相転移において、フェルミ準位近傍にエネルギーギャップができる。これはBCSエネルギーギャップと呼ばれ、超伝導の秩序変数として考えられる。これは半導体や絶縁体中の、伝導体と価電子帯の間のエネルギーギャップとは異なるものであり、今考えている半導体中の電子正孔系においては特に注意して区別しなくてはならない。

ボゴリューボフ変換したハミルトニアンにBCS的平均場近似を適用して電子正孔BCSエネルギーギャップ方程式を導出する。このとき、現在考えている系が真性半導体であるため、(励起された)電子と正孔の数が等しいという条件(電荷中性条件)を課する。

我々は有限温度でのハートリー・フォック(Hartree-Fock)近似を用いる。まず、適当なハミルトニアン $\tilde{H}$ を仮定して、自由エネルギー

$$G[\tilde{\rho}] = \text{Tr}(\tilde{\rho} \tilde{H}) - k_B T \text{Tr}(\tilde{\rho} \ln \tilde{\rho}). \quad (2.62)$$

を最小にするように $\tilde{H}$ を決める。この時その最小値は真の自由エネルギーの値に一致し、この近似の中では最良の $\tilde{H}$ を選んだことになる。ここで、統計演算子 ρ

$$\tilde{\rho} = \exp\left[-\frac{\tilde{H}}{k_B T}\right] / \tilde{Z}, \quad \tilde{Z} = \text{Tr}\left[\exp\left[-\frac{\tilde{H}}{k_B T}\right]\right]. \quad (2.63)$$

を導入した。次に、 $\tilde{H}$ を

$$\tilde{H} = \sum_{\mathbf{k}} (e_{\mathbf{k}}^{\alpha} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + e_{\mathbf{k}}^{\beta} \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}) \quad (2.64)$$

とする。ここで、 $e_{\mathbf{k}}^{\alpha(\beta)}$ はボゴリューボフ準粒子 $\alpha(\beta)$ を一個生成為に要するエネルギーである。以下の解析では、 A の期待値を $\langle A \rangle = \text{Tr}\{\tilde{\rho} A\}$ と表す。これより、ボゴリューボフ準粒子 α と β の分布関数は

$$\langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = f_{\mathbf{k}}^{\alpha}, \quad \langle \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \rangle = f_{\mathbf{k}}^{\beta} \quad (2.65)$$

$$f_{\mathbf{k}}^{\alpha(\beta)} = \frac{1}{e^{e_{\mathbf{k}}^{\alpha(\beta)}/k_B T} + 1}. \quad (2.66)$$

で与えられる。(2.65) 式において、我々は平均場近似を用いた。これはある一つの電荷が他の電荷から受ける相互作用の全てをその平均値で置き換えることができるような高密度に対して適用できる。式の上ではボゴリューボフ変換後のハミルトニアン (2.60)、(2.61) 式において、 $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}}$ と $\beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}}$ のように、同じ運動量をもつ同士の組み合わせのみを残せばよい。しかしながら低密度の場合は、位相の揺らぎにより $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}'}$ ($\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$) の様に別の運動量の電荷同士の組み合わせも考慮する必要がある。さらにこの場合、相互作用する電荷の相対運動だけでなく、対の重心運動も重要になる。また、平均場近似においても、 $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ の組み合わせを考える場合がある。また、例えば CDW は $\mathbf{k}$ と $\mathbf{k} \pm \mathbf{Q}$ のの結合 ($\mathbf{Q}$ は電子と相互作用するフォノンの波数ベクトル) である。 $\langle H \rangle$ は

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[(\xi_{\mathbf{k}}^e + \xi_{\mathbf{k}}^h) v_{\mathbf{k}}^2 + (\xi_{\mathbf{k}}^e u_{\mathbf{k}}^2 - \xi_{\mathbf{k}}^h v_{\mathbf{k}}^2) f_{\mathbf{k}}^\alpha - (\xi_{\mathbf{k}}^e v_{\mathbf{k}}^2 - \xi_{\mathbf{k}}^h u_{\mathbf{k}}^2) f_{\mathbf{k}}^\beta \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \left[\{ v_{\mathbf{k}'}^2 (v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) + 2(uv)_{\mathbf{k}'} (uv)_{\mathbf{k}} \} (f_{\mathbf{k}}^\alpha + f_{\mathbf{k}}^\beta) \right. \\ & + (v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}})^2 f_{\mathbf{k}'}^\alpha f_{\mathbf{k}}^\beta - \frac{1}{2} (v_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}})^2 (f_{\mathbf{k}}^\alpha f_{\mathbf{k}'}^\alpha + f_{\mathbf{k}}^\beta f_{\mathbf{k}'}^\beta) \\ & \left. - \{ v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 + (vu)_{\mathbf{k}} (vu)_{\mathbf{k}'} \} \right] \end{aligned} \quad (2.67)$$

となる。 $\langle \tilde{H} \rangle$ は

$$\langle \tilde{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} (e_{\mathbf{k}}^\alpha f_{\mathbf{k}}^\alpha + e_{\mathbf{k}}^\beta f_{\mathbf{k}}^\beta) \quad (2.68)$$

と計算できる。電荷中性条件は、

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^e &= \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^h \\ \longrightarrow \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}}^e - n_{\mathbf{k}}^h) &= \sum_{\mathbf{k}} (f_{\mathbf{k}}^\alpha - f_{\mathbf{k}}^\beta) = 0 \end{aligned} \quad (2.69)$$

で与えられる。 G を最小にするような $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}, e_{\mathbf{k}}^\alpha, e_{\mathbf{k}}^\beta$ を求めると、

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad (2.70)$$

$$e_{\mathbf{k}}^\alpha = \frac{1}{2} (E_{\mathbf{k}} + \delta \zeta_{\mathbf{k}}), \quad e_{\mathbf{k}}^\beta = \frac{1}{2} (E_{\mathbf{k}} - \delta \zeta_{\mathbf{k}}). \quad (2.71)$$

が得られる。(2.70)、(2.71) 式中に新たに出てきた量は以下の方程式で定義される。バンドギャップの再規格化の効果を含んだバンドの分散 (電子正孔対のエネルギー) $\zeta_{\mathbf{k}}$ は

$$\zeta_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_{el}} + \frac{1}{m_{hl}} \right) k_l^2 + \left(\frac{1}{m_{et}} + \frac{1}{m_{ht}} \right) k_t^2 \right] - 2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'} - \mu, \quad (2.72)$$

であり、電子と正孔の分散の差（すなわち電子と正孔の有効質量が等しい状態からの $\zeta_{\mathbf{k}}$ のずれ）は

$$\begin{aligned} \delta\zeta_{\mathbf{k}} = & \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_{el}} - \frac{1}{m_{hl}} \right) k_l^2 + \left(\frac{1}{m_{et}} - \frac{1}{m_{ht}} \right) k_t^2 \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} (f_{\mathbf{k}'}^\beta - f_{\mathbf{k}'}^\alpha) - \delta\mu, \end{aligned} \quad (2.73)$$

となる。また、電子正孔 BCS エネルギーギャップ方程式は

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}} (1 - f_{\mathbf{k}'}^\alpha - f_{\mathbf{k}'}^\beta). \quad (2.74)$$

で与えられる。ここで、 $\mu \equiv \mu_e + \mu_h$ は電子正孔対の化学ポテンシャルであり、 $\delta\mu \equiv \mu_e - \mu_h$ は電子と正孔の化学ポテンシャルの差である。また、 $n_{\mathbf{k}}$ は

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(n_{\mathbf{k}}^e + n_{\mathbf{k}}^h) = \frac{1}{2} - \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} (1 - f_{\mathbf{k}}^\alpha - f_{\mathbf{k}}^\beta), \quad (2.75)$$

で与えられる電子正孔対の数であり、 $n_{\mathbf{k}}^e \equiv \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle$ 、 $n_{\mathbf{k}}^h \equiv \langle d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \rangle$ である。また、 $E_{\mathbf{k}}$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \zeta_{\mathbf{k}}^2}. \quad (2.76)$$

はボゴリューボフ準粒子対のエネルギーである。(2.64) 式に (2.73) 式を代入すると

$$\tilde{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{2} (E_{\mathbf{k}} + \delta\zeta_{\mathbf{k}}) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} (E_{\mathbf{k}} - \delta\zeta_{\mathbf{k}}) \beta_{-\mathbf{k}}^\dagger \beta_{-\mathbf{k}} \right] \quad (2.77)$$

となるから、 $e_{\mathbf{k}}^{\alpha(\beta)}$ はそれぞれ、ボゴリューボフ準粒子 α, β を一つ生成するのに必要なエネルギーであることがわかる。

次に、電子正孔対の相対運動を記述する波動関数を

$$\psi_{\mathbf{k}} \equiv \langle c_{\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}} \rangle = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} (1 - f_{\mathbf{k}}^\alpha - f_{\mathbf{k}}^\beta) \quad (2.78)$$

と定義する。これと (2.72)、(2.74) 式より

$$\left(\xi_{\mathbf{k}}^e + \xi_{\mathbf{k}}^h - 2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'} \right) \psi_{\mathbf{k}} = (1 - 2n_{\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}} \quad (2.79)$$

が得られる。 $n_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$ の低密度極限では (2.79) 式は励起子の相対運動を記述するワニエ (Wannier) 方程式と一致する。このことから、電子正孔対の相対運動については高密度だけでなく低密度においても平均場近似を適用することができることが確認できる。

2.4 クーロンポテンシャルの遮蔽効果

次に、上で導出された式に単一プラズモン・ポール近似 (single-plasmon-pole approximation) を用いた準静的乱雑位相近似 (quasistatic random-phase approximation)³⁾ によるプラズマ遮蔽効果を取り入れる。これは高密度に励起された状態で、CuCl と ZnO のバンドギャップ再規格化の実験値を定量的に説明する事が出来る⁷⁾。準静的遮蔽クーロンポテンシャル (quasistatically screened Coulomb potential) $V_{\mathbf{k}}^s$ は

$$V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^s = V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \{1 + 2\chi_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}(-E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})\}, \quad (2.80)$$

である。幾つかの電荷が存在するとき、その間に働くクーロン相互作用には本来時間遅延があり、これは動的遮蔽効果と呼ばれる。一方、時間遅延を全く考えない場合は静的遮蔽効果と呼ばれる。動的遮蔽効果の場合、部分遮蔽関数 (partial screening function) $\chi_{\mathbf{k}}(\omega)$ は積分方程式の形で与えられる。一方準静的近似では、動的遮蔽における $\chi_{\mathbf{k}}(\omega)$ の積分変数を波数に依存すると近似する。これは平均場近似が適用できるような高密度において有効な近似法である。準静的近似の場合 $\chi_{\mathbf{k}}(\omega)$ は

$$\chi_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{\omega_{\text{pl}}^2}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left(\frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} \right) \quad (2.81)$$

で定義される³⁾。ここで、 $\omega_{\text{pl}} = [4\pi n e^2 / (\epsilon_0 m^*)]^{1/2}$ はプラズマ振動数であり、 $n = V^{-1} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$ は、電子正孔対の密度であり、 $m^* = m_e m_h / (m_e + m_h)$ は電子正孔対の換算質量である。電子と正孔の光学的有効質量はそれぞれ $m_{e(h)}^{-1} = (2m_{et(ht)}^{-1} + m_{el(hl)}^{-1})/3$ と定義される。3次元の有効プラズマ振動数 $\omega_{\mathbf{k}}$ は

$$[\hbar\omega_{\mathbf{k}}]^2 = [\hbar\omega_{\text{pl}}]^2 \left(1 + \frac{k^2}{k_{\text{TF}}^2} \right) + G_{\text{eff}}^2, \quad (2.82)$$

である。この式の導出は、付録 B で詳しく解説する。ここで、 k_{TF} はトーマス・フェルミ (Thomas-Fermi) 波数、

$$k_{\text{TF}} = \left[\frac{4(m_e + m_h)e^2}{\pi\epsilon_0\hbar^2} \right]^{1/2} (6\pi^2 n)^{1/6}, \quad (2.83)$$

である。ここで

$$G_{\text{eff}} = \min_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \quad (2.84)$$

はボゴリューボフ準粒子対のエネルギーの最小値である。動的遮蔽効果の場合では一意的には決まらない $\chi_{\mathbf{k}}(\omega)$ における積分変数を、 $\omega_{\mathbf{k}}$ と置き換えたのが準静的近似の特徴である。

クーロン・ホール効果 (Coulomb-hole effect) を取り入れるために、(2.72)、(2.73)、(2.74) 式で $V_{\mathbf{k}}$ を $V_{\mathbf{k}}^s$ に置き換える^{3),6)}。(2.72) の右辺第二項は

$$-2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^s n_{\mathbf{k}'} \rightarrow -2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^s n_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}'} [V_{\mathbf{k}'}^s - V_{\mathbf{k}'}]. \quad (2.85)$$

で置き換えられる。(2.85) 式の右辺第一項は電子正孔対の交換エネルギー、また第二項は電子正孔対のクーロン・ホールエネルギー (Coulomb-hole energy) であり、電子同士、正孔同士の斥力に起因する。これらはバンドギャップの縮小を引き起こし、再規格化 (band gap renormalization) の原因となる。¹⁾

結局、(2.72)、(2.73)、(2.74) 式は遮蔽効果を取り入れる事によって、

$$\begin{aligned} \zeta_{\mathbf{k}} = & \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_{el}} + \frac{1}{m_{hl}} \right) k_l^2 + \left(\frac{1}{m_{et}} + \frac{1}{m_{ht}} \right) k_t^2 \right] - 2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^s n_{\mathbf{k}'} \\ & + \sum_{\mathbf{k}'} [V_{\mathbf{k}'}^s - V_{\mathbf{k}'}] - \mu, \end{aligned} \quad (2.86)$$

$$\begin{aligned} \delta \zeta_{\mathbf{k}} = & \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_{el}} - \frac{1}{m_{hl}} \right) k_l^2 + \left(\frac{1}{m_{et}} - \frac{1}{m_{ht}} \right) k_t^2 \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^s (f_{\mathbf{k}'}^\beta - f_{\mathbf{k}'}^\alpha) - \delta \mu, \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^s \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}} (1 - f_{\mathbf{k}'}^\alpha - f_{\mathbf{k}'}^\beta) \quad (2.88)$$

と書きなおされる。

参考文献

- [1] H. Haug and Schmitt-Rink, Prog. Quantum Electron. **9**, 3 (1984).
- [2] S. Mazumdar, F. Guo, K. Meissner, B. Fluegel, N. Peyghambarian, M. Kuwata-Gonokami, Y. Sato, K. Ema, R. Shimano, T. Tokihiro, H. Ezaki, E. Hanamura, J. Chem. Phys. **104**, 9292 (1996).
- [3] R. Zimmermann, Phys. Status Solidi (b) **76**, 191 (1976).
- [4] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*, (McGraw-Hill Inc., 1971).
- [5] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics 6th edition*, (John Wiley & Sons Inc., New York 1986).
- [6] T. Iida, Y. Hasegawa, H. Higashimura, and M. Aihara, Phys. Rev. B **47**, 9328 (1993).
- [7] T. J. Inagaki and M. Aihara, Phys. Rev. B **65**, 205204 (2002).

第3章 結果と考察

3.1 計算方法

本節では、数値計算用に開発したプログラムコードとそれらを用いた計算の手順及び、計算環境について説明する。

数値計算を開始する段階で、次のパラメータを設定する。空間は3次元である。長さ、エネルギーはそれぞれ励起子のボーア半径 (a_B)、励起子の束縛エネルギー (E_B) で無次元化した。

- (1) 電子正孔対の化学ポテンシャル（計算を通じて電子正孔対密度を決める）
- (2) 温度
- (3) 電子と正孔の有効質量比、有効質量の異方性
- (4) $\delta\mu$ の変域
- (5) カットオフ波数（積分の上限を決める。適当の値から増やして行き、結果が変動しなくなった設定値を採用する）
- (6) 分点（これにより積分の精度が決まる。設定の方針は (2) と同様である）
- (7) 収束条件（適当な値から減らして計算を行い、解が変動しなくなったときの値を用いる）

これらの設定値と適当な試行関数を (2.86)、(2.87)、(2.88) 式に代入し計算を行う。得られた解と試行関数を比較し、収束条件を満たせばそれを収束解とし、満たさなければ新たな試行関数として自己無撞着な解が得られるまで計算を繰り返す。また、計算毎にクーロンポテンシャルの遮蔽効果により生じるバンドギャップの再規格化を計算し、考慮に入れた。バンドギャップ再規格化の効果 δE_g は

$$\delta E_g = E_g + \zeta_{\mathbf{k}=0} + \mu \quad (3.1)$$

で与えられる。

3.2 開発コード

開発コードは有効質量比・有限温度効果計算用コードと異方性効果計算用コードに大別される。以下簡単に説明する。

3.2.1 3次元電子正孔有効質量差・有限温度効果計算用コード

本コードの特徴は、電子と正孔の有効質量が非等値（有効質量比が1以外の値をとる）の場合に計算が必要となる (2.87) 式を任意の有効質量比について電荷中性条件の下で解くことで、電子正孔有効質量差の効果について定量的で詳細な解析を行う事ができる点にある¹⁾。このコードではバンドは等方的な場合に限定され、異方性は考慮されていない。電子正孔有効質量差は、正孔と電子の有効質量比 (σ) としてパラメータで与えられる。

数値計算上では電子と正孔の電荷が等しくなる $\delta\mu$ を決定するが、この際 $\delta\mu$ の変域を有限な数の点（数万点）で一定範囲に区切り、それぞれについて電荷中性条件を課し、最適な値を決める。また、電子正孔 BCS 秩序の温度依存性について詳細に調べられた例は未だないが²⁾、本コードは有効質量比の効果と同時に計算できる。

3.2.2 3次元バンド異方性効果計算用コード

本コードは有効質量比・有限温度効果計算用コードの機能に加え、エネルギーバンド異方性（有効質量の異方性）の効果を計算できる。有効質量の異方性は $m_x = m_y \neq m_z$ として（ m の添え字はそれぞれ x, y, z 方向の電子正孔対の換算質量を意味する）、3次元空間を l 方向 (Longitudinal、 z 方向)、 t 方向 (Transvers、 x, y 方向) に分け、それぞれの方向についての有効質量比 ($m_{hl(el)}/m_{ht(et)}, m_{hl(ht)}/m_{el(et)}$) の形で、パラメータとして与えることで、バンド異方性効果について定量的な解析を行える^{3), 4)}。

3.3 計算環境

数値計算は主に日本原子力研究所 関西研究所の HP(旧 Compaq) 製 AlphaServerSC シリーズスーパーコンピュータである超並列計算機システム (以下：MPP システム) で行った。MPP システムは、高性能スカラー型並列スーパーコンピュータであり、227 台の AlphaServerES40-4 を高速なシステムインターコネクトにより結合し構成されている。MPP システムの AlphaServerES40-4(以下 ES40-4) の特徴を以下に列挙する⁵⁾

(1) 高速最新 Alpha CPU である Alpha21264 833MHz を 1 ノードあたり 4CPU 搭載

(2) 共有メモリ型 SMP 機

(3) 1CPU で 1.666GFlops、4CPU で約 6.65 GFlops の総理論演算性能

(4) グラフィックノード、データサーバ等それぞれの用途に合わせ 8GByte～32GByte のメモリを搭載

(5) 全ノードを、高速システムインターコネクトスイッチ "QSW" に接続

MPP システムは、デバック、小・中規模計算用の「開発計算環境」と大規模計算用の「超並列計算環境」から構成されている。開発計算環境のジョブクラスは合計 14 ノード、56CPU、メモリ 224GByte、超並列計算環境は 180 ノード、720CPU、メモリ 1440GByte で構成される。計算は各 CPU に 1 つずつジョブを実行させることで、並列計算機全体で複数のジョブを同時実行させるいわゆるジョブ並列方式で行った。この際、全 CPU から同時にホームディレクトリーサーバー（開発、超並列計算環境とも 1 ノード）に結果を排出させると計算速度が著しく劣化するため（特に超並列環境）、開発に 2 ノード、超並列に 20 ノード用意されているデータサーバのワークディレクトリーに分散して排出させた。

3.4 緒言

本節では、半導体中の巨視的量子状態を表す基本的な物理量や性質について解説する。また、付録 C では、Iida らによって理論的に予測された定常光により励起した状態における励起子 BEC 相と電子正孔 BCS 相の間の光双安定性を紹介する^{2),6)}。以下の解析では Bohr 半径で規格化された平均対間距離 $r_s = (4\pi n/3)^{-1/3}$ を電子正孔対の密度の尺度とする。化学ポテンシャルを変化させる事により電子正孔対密度を変化させ、 $r_s = 0.5, \sim 10$ の場合について、ボゴリューボフ準粒子対生成エネルギー E_k 、電子正孔対の相對運動の波動関数 ψ_k 、電子正孔 BCS エネルギーギャップ Δ_k 、変分パラメータ u_k^2, v_k^2 を計算した。なお、本節では簡単のために $T = 0$ であり、なおかつ $m_h/m_e = 1$ （電子と正孔の有効質量が同値）、 $m_l/m_t = 1$ （バンドが等方的）に限定し計算した結果を示す。化学ポテンシャルと r_s 等を表 (3.1) にまとめた。ここで $k_{\min}$ は $\min_k E_k$ を与える波数であり、(2.84) 式で定義した通り、 $G_{\text{eff}} = \min_k E_k$ である。表中の記号 (a)～(g) は図中の記号に対応する。

3.4.1 ボゴリューボフ準粒子対エネルギー

まず、(2.76) 式で定義されたボゴリューボフ準粒子対のエネルギーの分散を図 (3.1) に示す。(a) の分散は殆ど放物線状の形をしており、 G_{eff} は $k = 0$ 近傍に存在し、その値は

表 3.1: 各種パラメータ

	μ	r_s	$k_{\min}$	G_{eff}
(a)	-0.89	10.00	0.24	0.99
(b)	0.67	3.00	0.81	1.38
(c)	2.30	2.00	1.21	1.29
(d)	3.85	1.5	1.61	0.79
(e)	7.70	1.00	2.40	0.30
(f)	11.65	0.80	3.02	0.18
(g)	27.00	0.50	4.77	0.05

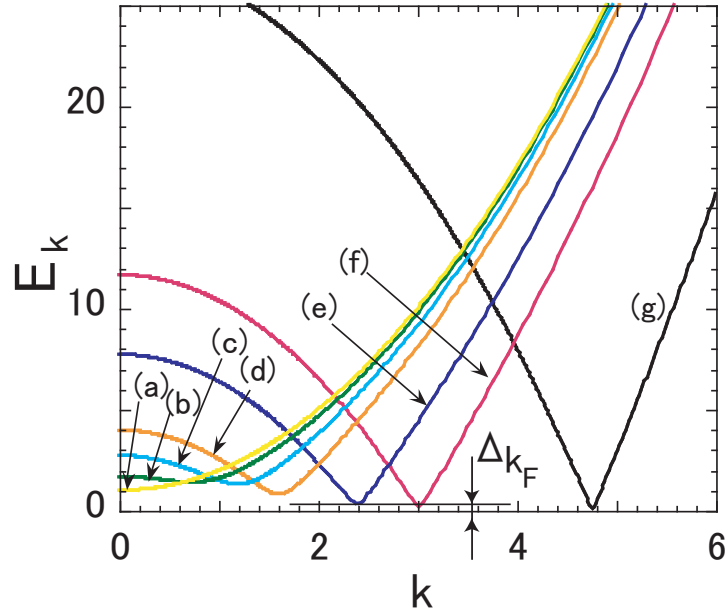


図. 3.1: ボゴリユーボフ準粒子対エネルギー
(パラメータは表 3.1 を参照)

$-\mu$ に近い。すなわちこの密度は十分低密度であり、状態は励起子ガスの的であると言える。電子正孔対の密度が低い状態では電子正孔相関やバンドギャップの再規格化の効果が無視する事ができ、そのとき ζ_k の最小値は $\zeta_0 = -\mu (> 0)$ であるため、 E_k は $k = 0$ に最小値を持つ放物線状の形となる。そのため、 $G_{\text{eff}} = \zeta_0$ である。なお、ここからさらに化学ポテンシャルを減少させ密度を低くすると、 $\mu \rightarrow -1$ では $r_s \rightarrow \infty$ 、 $G_{\text{eff}} \rightarrow 1$ となり、3次元系における自由励起子状態に近づく。また、このことは電子正孔対の相対運動は、平均場近似により得られた電子正孔 BCS エネルギーギャップ方程式で表せることを反映して

いる^{7),8)}。(b)~(g)は $k_{\min}$ が零でなく、これは状態が電子正孔 BCS 秩序を持つときの特徴の一つである。なお、3.4.2で詳しく述べるが、系が電子正孔 BCS 秩序を持つ場合、 E_k の最小値は、フェルミ波数で電子正孔 BCS エネルギーギャップ Δ_k と一致する。すなわち、高密度では $k_{\min} = k_F$ であり、これはフェルミ面が現れていることを反映している。以下、フェルミ波数での電子正孔 BCS エネルギーギャップを Δ_{k_F} と表し、電子正孔 BCS 状態の秩序変数として議論を進める。なお、この状況下では系は絶縁体であり、Nozières と Schmitt-Rink⁸⁾が示したように、低温においても励起子 Mott 転移を起こさずに、BEC と BCS の間でクロスオーバーを起こす。

次に、 r_s と G_{eff} 、 $k_{\min}$ の関係を図 3.2 に示す⁹⁾。 $r_s \gtrsim 10$ では $G_{\text{eff}} \sim 1$ 、 $k_{\min} \sim 0$ であり、励起子状態である事がわかる。一方、 $r_s \lesssim 10$ において、 G_{eff} は Δ_k と一致しており、 $r_s \sim 2.3$ で最大の値をとり r_s の減少と共に減少する。これは有限温度では高密度極限では電子正孔 BCS エネルギーギャップが消滅することを意味している。また、このとき $k_{\min}$ は k_F と一致しており、密度の増加とともに大きくなる。

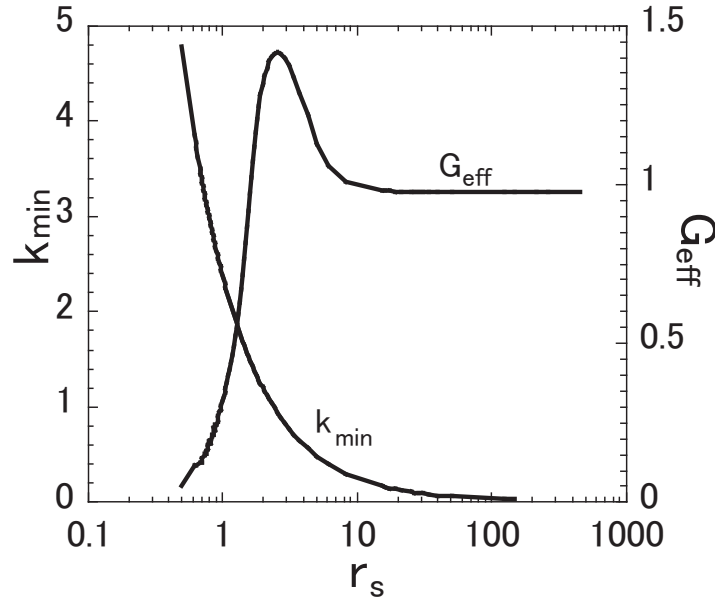


図. 3.2: r_s と G_{eff} , k_{eff} の関係
(パラメータは表 3.1 を参照)

3.4.2 電子正孔 BCS エネルギーギャップ

図 3.3 は (2.88) 式で定義された電子正孔 BCS エネルギーギャップ Δ_k の波数依存性である。1.2.2 において解説した BCS 状態と同様に、電子正孔対が BCS 的な相関を持つとき、

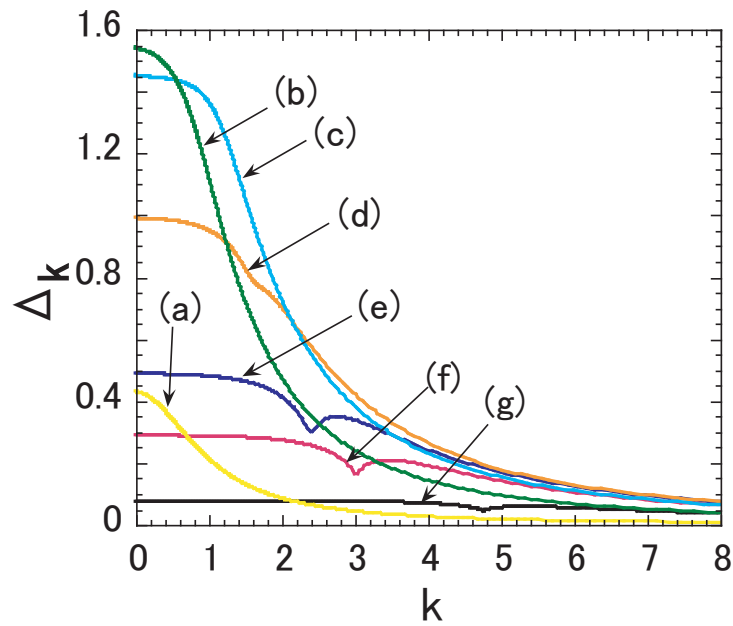


図. 3.3: 電子正孔 BCS エネルギーギャップ
(パラメータは表 3.1 を参照)

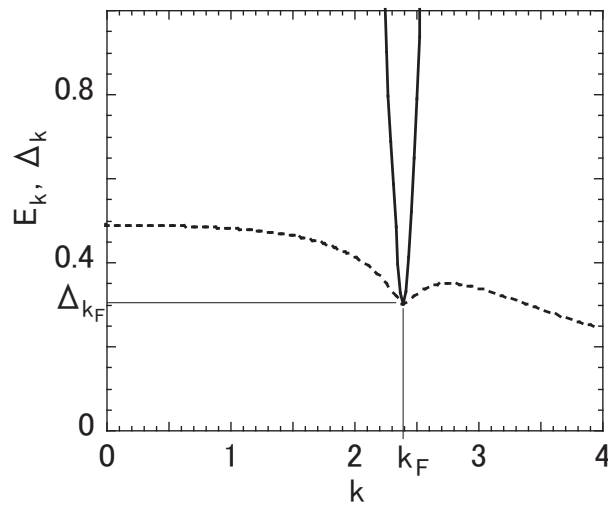


図. 3.4: フェルミ波数近傍の拡大図

フェルミエネルギー近傍に有限の大きさを持つエネルギーギャップが生じる。これが電子正孔 BCS エネルギーギャップである。これは (e)~(g) の様な高密度においては前節で述べた様に電子正孔 BCS 状態の秩序変数であり、いわば電子正孔 BCS 秩序を破壊する為に必要なエネルギーと言える。高密度になるほど電子正孔 BCS エネルギーギャップは小さくな

る傾向にあるが、これは電子正孔対の密度が高い場合、クーロン相互作用に対する遮蔽効果が強いので、電子正孔相関が弱くなるためである。一方、低密度の場合、(a)に見られる様に $k \sim 0$ に最大値を持つ単調減少を示しているが、低密度の極限では消滅する。これは低密度では、電子正孔対が励起子として一対一で結合しており、電子正孔 BCS 秩序が消滅することを意味する。図 3.3 は (e) の密度での Δ_k と E_k のフェルミ波数近傍の拡大図である。実線が E_k を、破線が Δ_k を表す。この図から、フェルミ波数では $\min_k E_k = \Delta_{k_F}$ が成り立っていることがわかり、これは系が電子正孔 BCS 秩序を持ち、 Δ_{k_F} が秩序変数として適していることを示唆している。

3.4.3 電子正孔対の相対運動の波動関数

図 3.5 は (2.78) 式で定義される電子正孔相関を表す巨視的波動関数である。先ず、密度 (a) の状態を考えると、水素原子の動径方向の波動関数に近い振る舞いを示す。すなわち、このとき電子正孔対は水素原子のように一対一で結合し、励起子として存在している事を意味している。

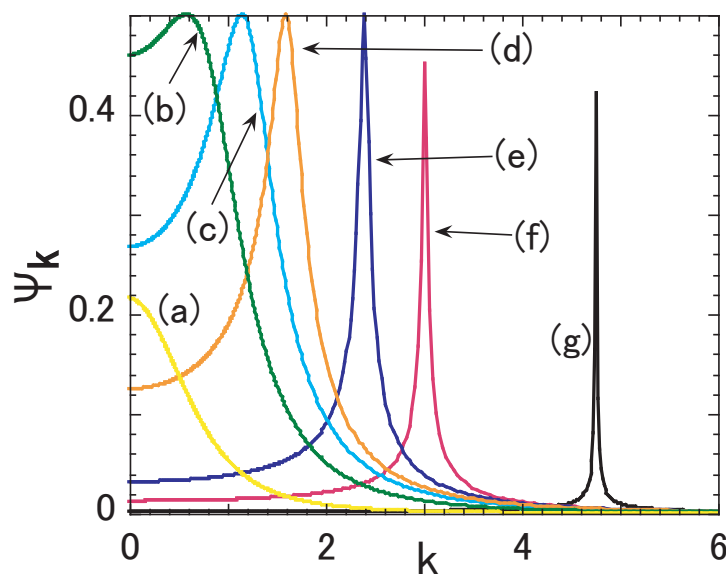


図. 3.5: 電子正孔対の相対運動の波動関数
(パラメータは表 3.1 を参照)

一方、高密度である (e)、(f)、(g) は、フェルミ波数近傍で最大値を持つピーク構造を示している。このことは、超伝導体中のクーパー対の波動関数が、フェルミ波数近傍で鋭いピークを持つ事に対応している。また、これは実空間では電子正孔クーパー対は広がり幅の逆数程度の広い範囲でゆるく束縛されている定在波であることを意味する。最大

値がおよそ 0.5 であることは、次の様な簡単な考察で理解できる。すなわち系が電子正孔 BCS 状態であるとき、フェルミ波数では $E_{\mathbf{k}_F} = \Delta_{\mathbf{k}_F}$ であり、さらに $T = 0$ であり、なおかつ $m_h/m_e = 1$ (伝導帯と価電子帯が対称的)、 $m_l/m_t = 1$ (バンドが等方的) の場合には $f_{\mathbf{k}}^\alpha = f_{\mathbf{k}}^\beta = 0$ であるため、結局 $\psi_{\mathbf{k}_F} = 0.5$ となるのである。

3.4.4 変分パラメータ

(2.57) 式で導入した変分パラメータ $u_{\mathbf{k}}^2, v_{\mathbf{k}}^2$ の波数依存性を図 3.6 に示す。破線が $u_{\mathbf{k}}^2$ で、実線が $v_{\mathbf{k}}^2$ に対応する。いま考えている状態では $\langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \rangle = \langle d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}} \rangle = v_{\mathbf{k}}^2$ であるので、 $v_{\mathbf{k}}^2$ は一粒子状態に存在する電子と正孔の数という物理的意味を持つ。すなわち、(a) の場合 $v_{\mathbf{k}}^2 \ll 1$ であるのは、この状態が低密度であることを反映している。一方、(e)、(f)、(g) については、 $v_{\mathbf{k}}^2$ は大きさ 1 の平坦な領域を持ち、フェルミ波数の周り $\sim \Delta_{\mathbf{k}_F}/\zeta'_{\mathbf{k}_F}$ の幅で 0 になる。これは、電子正孔対がフェルミ波数の前後 $\sim \Delta_{\mathbf{k}_F}/\zeta'_{\mathbf{k}_F}$ の範囲で電子正孔系クーパ対を形成していることを意味している。

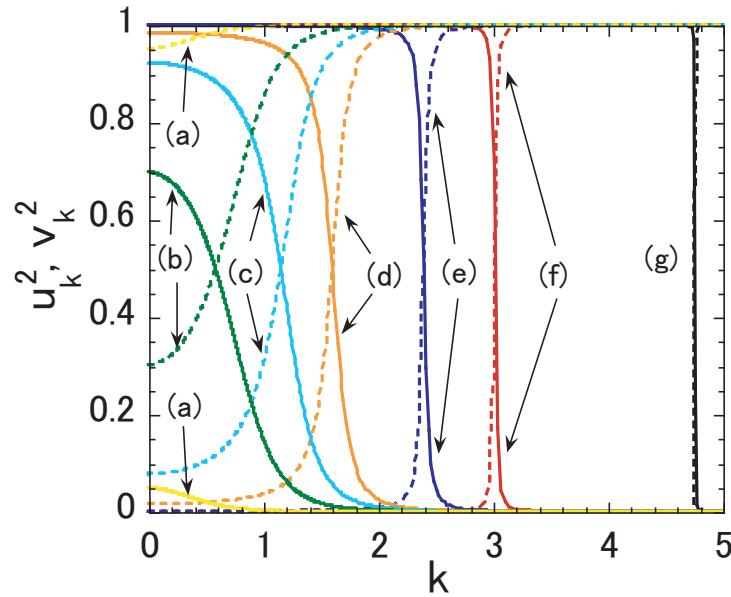


図. 3.6: 変分パラメータ
(パラメータは表 3.1 を参照)

3.5 電子正孔 BCS 状態に対する電子正孔有効質量差の効果

本節では、電子正孔 BCS 状態に対する電子正孔有効質量差の効果を明らかにするために、電子正孔 BCS エネルギーギャップの温度依存性と有効質量比依存性の結果と考察を示す。本節においては、エネルギーバンドは伝導帯価電子帯とも等方的とし、曲率の差（すなわち電子正孔有効質量差）のみを考えた。ここで、電子と正孔の密度は $r_s = 0.80, 1.00$ について計算した。これは前節の議論から、この密度で系は十分高密度であると考えられるからである。有効質量比 $m_h/m_e = \sigma$ は物質における値を考慮し、 $\sigma \leq 10$ で変化させた。これは InAs ($\sigma \sim 17$) などの僅かな例を除いて現実的な値であると言える¹⁰⁾。なお、電子正孔有効質量差は入力パラメータとして設定したが、有効質量近似 ((2.25) 式) では有効質量はエネルギーバンドの分散の曲率に依存するため、 ζ_k を求める際に自己無撞着に求めた自己エネルギーによる影響を受ける。自己エネルギーの効果をくり込むことによる有効質量の変化については付録 D で解説する。

3.5.1 電子正孔 BCS エネルギーギャップの温度依存性

幾つかの電子正孔有効質量比に対する電子正孔 BCS エネルギーギャップの温度依存性を計算した結果を図 3.7、3.8 に示す。ここで図中の記号と有効質量比の対応は表 3.2 にまとめた。(a)~(f) は $r_s = 1.00$ 、(g)~(l) は $r_s = 0.80$ の結果である。両図において、 $T = 0$ での Δ_{k_F} ($\Delta_{k_F, T=0}$) はそれぞれの σ で異なるが、何れの場合においても Δ_{k_F} は温度の上昇にともなう準粒子の熱生成により減少しており、転移温度で消滅する。 $r_s = 0.80$ は定性的に $r_s = 1.00$ と同じ振る舞いをするので、本節における以下の考察は $r_s = 1.00$ について行う。 Δ_{k_F} が消滅する温度を T_c として温度依存性の曲線を外挿して推算した T_c と、 $T = 0$ での Δ_{k_F} を $\Delta_{k_F, T=0}$ として表 3.2 にまとめた。また、幾つかの半導体の電子正孔の有効質量などの物性定数と計算により得られた $T = 0.01$ でのそれぞれの物質の温度 T_{001} 、 T_c を表 3.3 にまとめた。

$T_c < T$ の電子正孔 BCS エネルギーギャップが完全に消滅している温度では、系は金属的である。この転移は金属-絶縁体転移であるが、励起子が解離することで起こる励起子 Mott 転移ではない。なぜなら、励起子 Mott 転移の電子正孔密度は電子正孔対が励起子とみなせる程度であり、本研究で扱う密度よりはるかに低いからであり、また励起子 Mott 転移を起こす温度は電子正孔 BCS 状態が存在する温度よりはるかに高いからである。むしろこの転移は超伝導-常伝導転移に対応するとみることができる。

一方、 $T = 0.01$ 程度の低温に注目すると、 σ に関わらず、 Δ_{k_F} は有限な値をとっていることがわかる。従来は、BCS 状態と電子正孔 BCS 状態の数学的な対応関係のもと、電子正孔有効質量差は電子正孔 BCS 状態を破壊すると考えられていた。なぜなら数学的には、

表 3.2: 有効質量比と計算結果

	$\sigma(r_s = 1.00)$	T_c	$\Delta_{k_F, T=0}$		$\sigma(r_s = 0.80)$	T_c	$\Delta_{k_F, T=0}$
(a)	1	0.075	0.299	(g)	1	0.047	0.175
(b)	2	0.064	0.265	(h)	2	0.038	0.147
(c)	4	0.044	0.194	(i)	4	0.022	0.094
(d)	6	0.030	0.141	(j)	6	0.012	0.063
(e)	8	0.023	0.111	(k)	8	0.009	0.046
(f)	10	0.018	0.086	(l)	10	0.008	0.035

表 3.3: 半導体物性定数

	$m_e[m_0]$	$m_h[m_0]$	$E_B [\text{meV}]$	$a_B[\text{\AA}]$	$T_{0.01} [\text{K}]$	$T_c [\text{K}]$
ZnO	0.24 ¹²⁾	1.8 ¹³⁾	59 ¹⁴⁾	17	2.0	4.6
CuCl	0.5 ¹⁵⁾	2 ¹⁵⁾	190 ¹⁶⁾	7 ¹⁷⁾	6.3	27.7
GaAs	0.067 ¹⁸⁾	0.71(<i>hh</i>) ^{19), 20)} 0.12(<i>lh</i>)	4.2 ²¹⁾	120	0.14	0.25(<i>hh</i>) 0.95(<i>lh</i>)
GaN	0.19 ²²⁾	0.6 ²²⁾	160 ²²⁾	4	5.3	28.6

ハミルトニアンにおける電子正孔 BCS 状態での電子と正孔の関係は、BCS 状態における電子の $\uparrow$ スピンと $\downarrow$ スピンの関係に形式的に対応する ((1.1) 式と (2.51) 式)。アンダーソン (Anderson) の定理によれば、BCS 状態においてクーパー対を構成する電子間には $\uparrow$ スピンと $\downarrow$ スピンの時間反転対称性が存在する。そのため BCS 状態は時間反転対称性を保つ摂動に対しては大きな反応を示さない。例えば非磁性不純物の存在は T_c に大きな影響を与えない。しかし時間反転対称性を破るような摂動（例えば外部磁場、磁性不純物等）が存在する場合、BCS 状態は速やかに消滅する¹¹⁾。これに基づいて電子正孔 BCS 状態について超伝導の BCS 状態から類推をすると、電子と正孔の間の対称性を破壊することは、 $\uparrow\downarrow$ スピン間の対称性（すなわち時間反転対称性）を破壊することに相当し、これは BCS エネルギーギャップを消滅させる原因となる。しかしながら、電子正孔 BCS エネルギーギャップは、十分低温では電子と正孔の有効質量が異なっていたとしても安定に存在することが本研究で始めて定量的に示された。これは、電子と正孔の有効質量差は電子と正孔の間の対称性を容易には破壊しないことを示唆している。なぜなら、伝導帯と価電子帯を等方的に保ちつつ曲率のみを差を与えたとしても、両者のフェルミ面の形状は一致しているからである。次節で詳しく考察するが、これは伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状が一致しているとき、電子正孔間の対称性は保たれていると考えることができるためである。

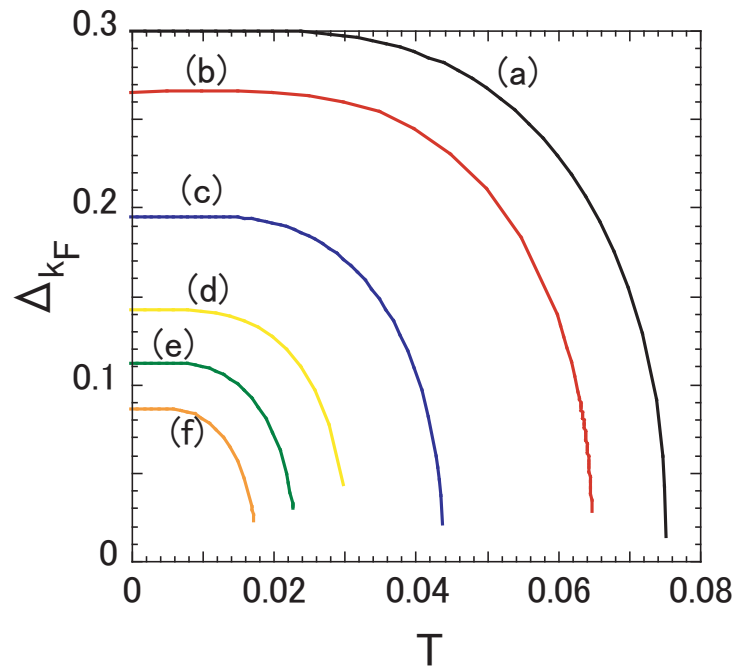


図. 3.7: 電子正孔 BCS エネルギーギャップの温度依存性 ($r_s = 1.00$)
(パラメータは表 3.2 を参照)

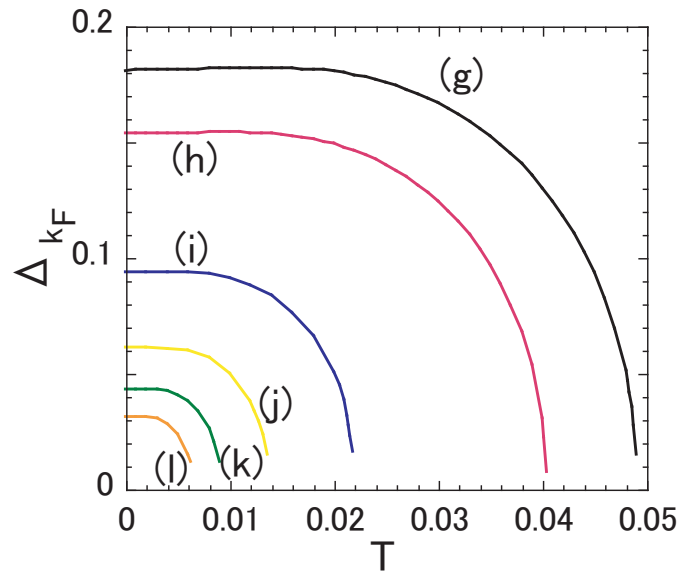


図. 3.8: 電子正孔 BCS エネルギーギャップの温度依存性 ($r_s = 0.80$)
(パラメータは表 3.2 を参照)

ここで、Kopaev による研究の概略を示す。Kopaev は、電子正孔有効質量差が半導体中の半金属-絶縁体転移（電子正孔プラズマ-電子正孔 BCS 状態）に与える効果について、摂動論に基づいた定性的な研究を行った³⁾。非常に小さな電子正孔有効質量差 ($\sigma \sim 1$) を摂動パラメータとして、Kopaev は $(\Delta/T)^2 \ll 1$ （すなわち T_c 近傍）に対する秩序パラメータ Δ の温度依存性の式

$$\Delta = \pi T_c \sqrt{\frac{8}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)} \quad (3.2)$$

$$T_c = 2\omega_0 \frac{\pi}{\gamma} \exp \left[\frac{2\pi p_0}{me^2 \ln \frac{\chi_D^2}{4p_0^2 + \chi_D^2}} \right] - \frac{|m_e - m_h| \pi p_0^2}{2m_e m_h \gamma} \quad (3.3)$$

を与えた。(3.3) 式の右辺第二項より、電子正孔有効質量差は T_c を減少させることがわかる（すなわち、電子正孔 BCS 状態を不安定にする）。ただし、 $m_e \approx m_h$ の条件が課されているので、右辺第二項が非常に小さい範囲で本結果は成立する。一方、本研究では、十分大きな電子正孔有効質量差にまで計算を拡張し、それに対しても転移温度は有限な値を保つことを示した。

3.5.2 電子正孔 BCS エネルギーギャップの有効質量比依存性

図 3.9、3.10 は幾つかの温度における電子正孔 BCS エネルギーギャップの有効質量比依存性である。図中の記号はそれぞれ (m) $T = 0$ 、(n) $T = 0.01$ 、(o) $T = 0.02$ 、(p) $T = 0$ 、(q) $T = 0$ 、(r) $T = 0.01$ に対応する。また (m)~(p) は $r_s = 1.00$ 、(q)、(r) は $r_s = 0.80$ の結果である。また、 $r_s = 1.00$ における (p) は、クーロン相互作用に遮蔽効果を考えなかった場合の結果であり、遮蔽効果がある場合の結果と比較するために載せた。遮蔽効果を考えなかった場合において、 $T \leq 0.02$ の結果は $T = 0$ の場合と殆ど一致していたため省略した。ここで有効質量比は図 3.7 と同様に $1 \leq \sigma \leq 10$ で変化させた。(i) において $8, 6 < \sigma$ は、電子正孔 BCS エネルギーギャップが殆ど消滅するため、計算ができなかった。(m) と (p) を比較したとき、遮蔽効果を考慮しない場合は電子正孔 BCS エネルギーギャップは殆ど変化しないのに対し、考慮した場合は σ の増加と共に減少することがわかる。この違いは、遮蔽効果を考えた場合 (2.83) 式で与えられたトーマス・フェルミ波数が有効質量比の増加と共に大きくなり、結果としてクーロン相互作用の遮蔽を強くするためであると考えられる。しかし $T \sim 0.01$ の低温において、電子正孔 BCS エネルギーギャップは有効質量比の増加に対して減少はするが、 $\sigma \leq 10$ で考えた場合、完全に消滅はしないことがわかる。この結果は前項の結果と一致する。ここで、それでは電子正孔系においては、何の対称性が超伝導におけるスピンの時間反転対称性に対応し、電子正孔 BCS 秩序を破壊するのかという疑問が生ずる。それを明らかにするために、我々は次節で電子正孔 BCS 状態

に対するエネルギーバンドの異方性の効果の結果と考察を示す。

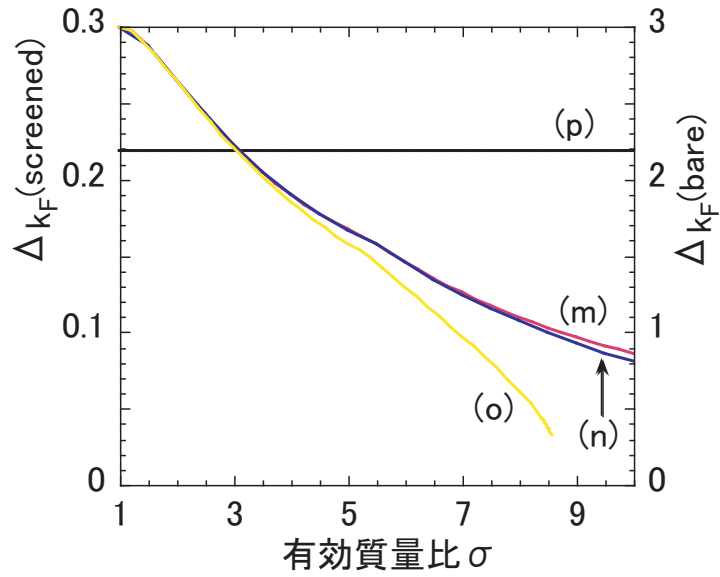


図. 3.9: 電子正孔 BCS エネルギーギャップの有効質量比依存性 ($r_s = 1.00$)
(図中の記号はそれぞれ (m) $T = 0$ 、(n) $T = 0.01$ 、(o) $T = 0.02$ 、(p) $T = 0$ に対応する。
(p) は、クーロン相互作用に遮蔽効果を考えなかった場合の結果である。)

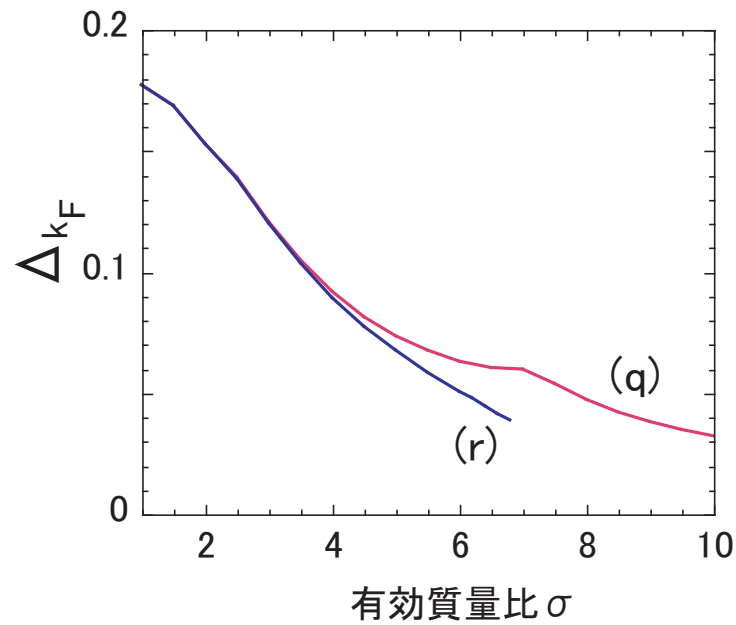


図. 3.10: 電子正孔 BCS エネルギーギャップの有効質量比依存性 ($r_s = 0.80$)
(図中の記号はそれぞれ (q) $T = 0$ 、(r) $T = 0.01$ に対応する。)

3.6 電子正孔 BCS 状態に対するエネルギーバンドの異方性の効果

本節では、エネルギーバンドの異方性が電子正孔 BCS 秩序に与える効果について議論する。以下では、 k_F を E_k の最小値を与える波数として定義する。また、電子正孔対の $l(= z)$ (longitudinal) 方向と $t(= x, y)$ (transverse) 方向の換算質量をそれぞれ $1/m_{l(t)} = 1/m_{el(et)} + 1/m_{hl(ht)}$ として定義する。異方性は伝導帯と価電子帯が同じ異方性を持つ場合と伝導帯と価電子帯が異なる異方性（異方性差）を持つ場合についてそれぞれ議論する。

3.6.1 エネルギーバンドの異方性による電子正孔 BCS 秩序の増強効果

図 3.11 は伝導帯と価電子帯の異方性が等しい場合の Δ_{k_F} のエネルギーバンドの異方性 (m_l/m_t) 依存性である。ここで、電子と正孔の有効質量は同じであり ($m_h/m_e = 1$)、 $T = 0$ 、 $r_s = 1.00$ とした。ここで、 $m_{e(h)}$ は電子（正孔）の光学的有効質量であり、

$$\frac{1}{m_{e(h)}} = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{m_{et(ht)}} + \frac{1}{m_{el(hl)}} \right) \quad (3.4)$$

で定義される。また、図 3.12 は異方性がある場合のフェルミ面の模式図である。紙面と垂直な方向にエネルギー軸を持ち、曲線は伝導帯と価電子帯のフェルミ面を表している。エネルギーバンドが等方的な場合フェルミ面は円を描くが、伝導帯と価電子帯に同じ異方性がある場合、フェルミ面は有効質量の大きな方向に長軸を持つ楕円形を描く。

図 3.11 に見られるように、電子正孔 BCS エネルギーギャップは異方性が強くなるにつれて増大する。以降、この効果を「エネルギーバンドの一軸的異方性による電子正孔 BCS 秩序の増強効果」とよぶ。この効果は、単純に言えばエネルギーバンドが低次元的になることで電子と正孔の運動の自由度の低下に伴い運動エネルギーが減少し、それにより電子正孔束縛が強くなるということに理解できる。例えば励起子系においては、2次元系での電子と正孔の束縛エネルギーは3次元の4倍であり、一次元では無限大となる。また、 $m_l/m_t \rightarrow 0$ と $m_l/m_t \rightarrow \infty$ の極限では、系はそれぞれ一次元、二次元系と一致するため、増強効果は $m_l/m_t < 1$ の方が $1 < m_l/m_t$ よりも顕著である。エネルギーバンドの異方性は、試料に圧力をかけエネルギーバンドの分散の曲率を変化させる事で制御することができる^{23)–25)}。すなわち、エネルギーバンドの一軸的異方性は、試料に一軸性圧力をかける事で与える事ができ^{27), 28)}、電子正孔 BCS エネルギーギャップを増大させるであろう。もし、この増強効果が温度や電子と正孔の有効質量の相違などのエネルギーギャップを減少させる要因を凌駕するのならば、電子正孔 BCS 状態の実現の有力な手段の一つとなるだろう。この問題については次節で詳しく考察する。

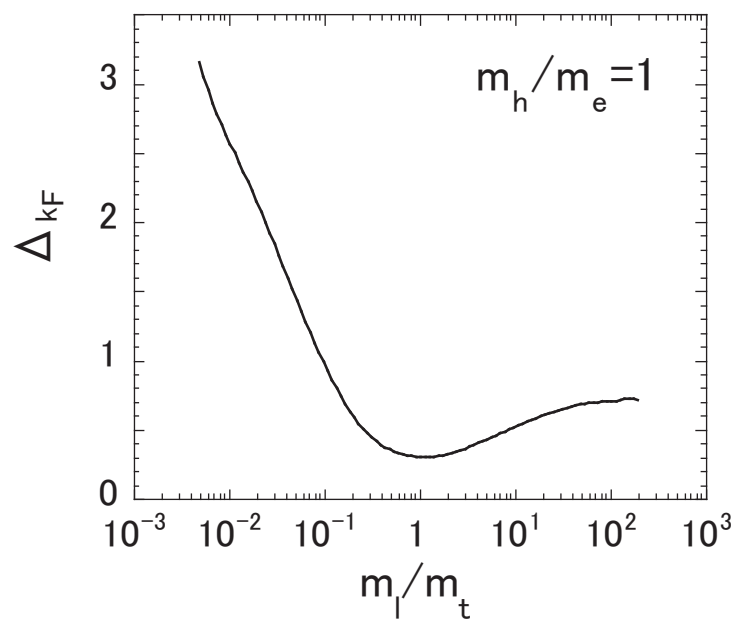


図. 3.11: 電子正孔 BCS エネルギーギャップのエネルギーバンド異方性依存性
($r_s = 1.00, m_h/m_e = 1, T = 0$)

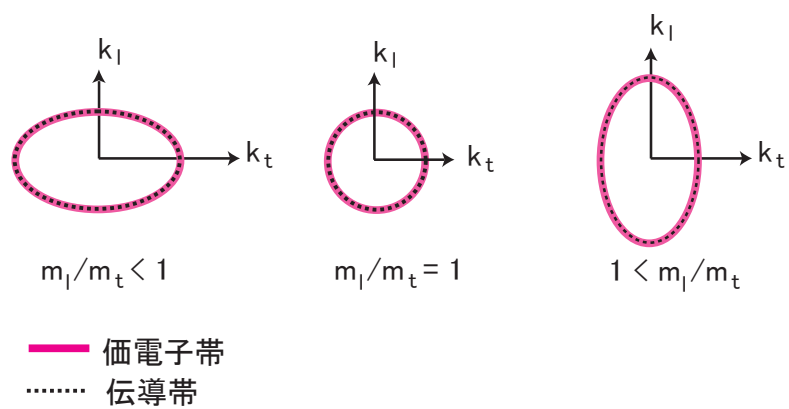


図. 3.12: 異方性がある場合のフェルミ面の模式図

3.6.2 エネルギーバンドの異方性差による電子正孔BCS秩序の減少効果

次に、伝導帯と価電子帯が異なる異方性を持つ（エネルギーバンドの異方性差）場合について考察する。今、簡単のために伝導帯は等方的で価電子帯のみに異方性を考えた。幾つかの温度における電子正孔BCSエネルギーギャップに対する正孔の有効質量の異方性（ m_{hl}/m_{ht} ）依存性を図3.13（ $r_s = 1.00$ ）、3.14（ $r_s = 0.80$ ）に示す。また、図3.12と同様にフェルミ面の模式図を図3.15に示した。(e)を除いてクーロン相互作用に遮蔽効果を考慮した場合の結果であり、それぞれ(a) $T = 0$ 、(b) $T = 0.03$ 、(c) $T = 0.04$ 、(d) $T = 0.06$ 、(f) $T = 0$ 、(g) $T = 0.02$ 、(h) $T = 0.03$ 、(i) $T = 0.04$ に対応する。また(e)は遮蔽効果を考えなかった場合の結果であり、(e) $T = 0$ であるが、この場合において、 $T \leq 0.06$ の結果は $T = 0$ の場合と殆ど一致していたため省略した。

(e)の場合、電子正孔BCSエネルギーギャップは、正孔の有効質量の異方性の増加に対して殆ど変化を見せない。一方、遮蔽効果を考慮した(a)~(d)は、顕著な減少を示した。これは電子と正孔の有効質量の異方性が異なる場合、伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状が一致しておらず(図3.15)、そのため電子正孔相関を保持するために大きなエネルギー

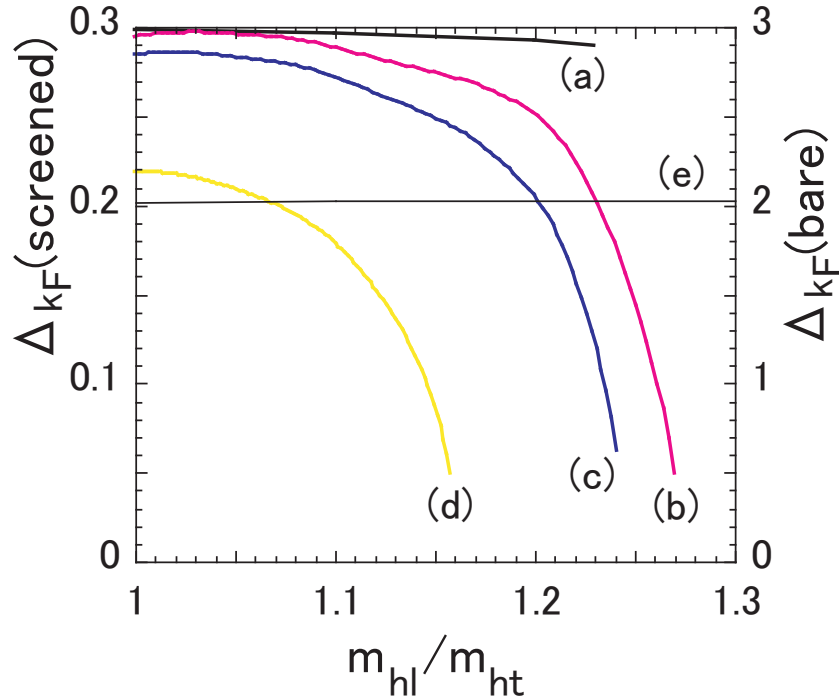


図. 3.13: 電子正孔BCSエネルギーギャップのエネルギーバンド異方性差依存性（ $r_s = 1.00$ ）
（図中の記号はそれぞれ(a) $T = 0$ 、(b) $T = 0.03$ 、(c) $T = 0.04$ 、(d) $T = 0.06$ 、(e) $T = 0$ に対応する。また、(e)は遮蔽効果を考えなかった場合の結果である。）

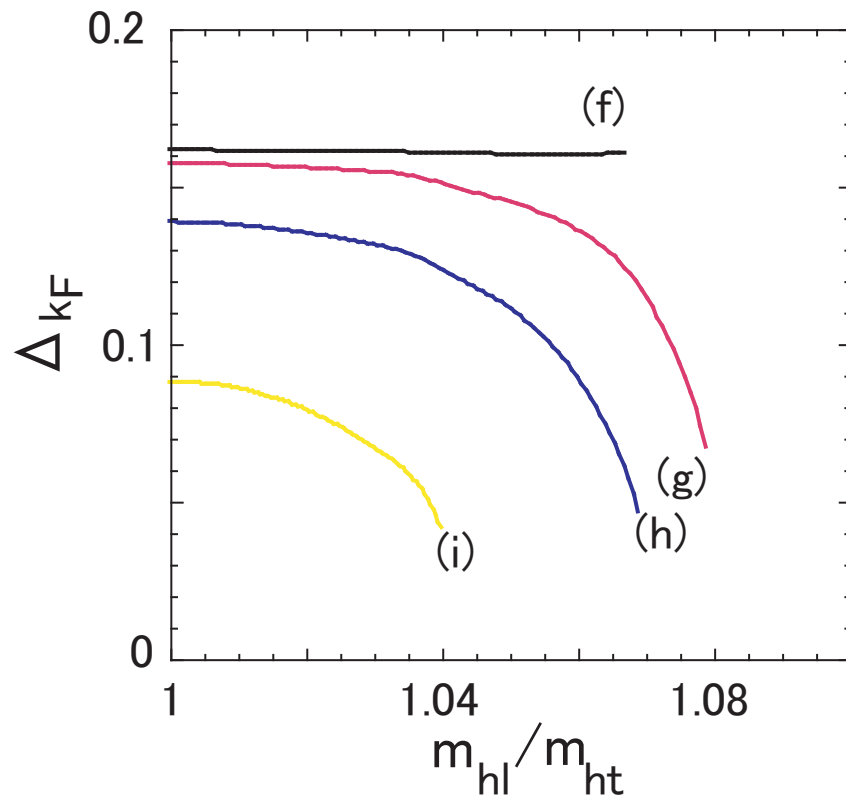


図. 3.14: 電子正孔 BCS エネルギーギャップのエネルギーバンド異方性差依存性 ($r_s = 0.80$)
(図中の記号はそれぞれ (f) $T = 0$ 、(g) $T = 0.02$ 、(h) $T = 0.03$ 、(i) $T = 0.04$ に対応する。)

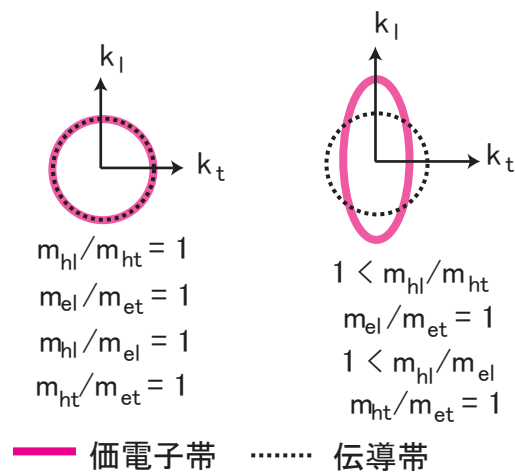


図. 3.15: 異方性がある場合のフェルミ面の模式図 2

が必要なためであると考えられる⁴⁾。特に (a) は、 $m_{hl}/m_{ht} \sim 1.23$ 近傍で急激に減少する。これは、運動量空間においてフェルミ面の形状が一致していない領域では (2.71) 式で与えられるボゴリューボフ準粒子の生成エネルギー e_k^α, e_k^β の何れかが負になり、そのため (2.66) 式のボゴリューボフ準粒子の分布関数が $f_k^{\alpha(\beta)} = 1$ となるため、結局 $\Delta_k = 0$ となってしまうことが原因であると考えられる^{1), 4)}。これについては、次のような簡単なモデルで説明できる。図 3.16 はエネルギーバンドの模式図である。(a) はバンドが等方的かつ電子正孔有効質量差がある場合であり、(b) はエネルギーバンドの異方性差がある場合である。ここで $m_h > m_e$ とした。赤線は励起電子により占有されている状態、青線は正孔により占有されている状態を表すが、電子と正孔の k_F は (a) では一致しているが、(b) では異なっている。次に (2.87) 式を次のように書き換える。

$$\delta\zeta_k = \varepsilon_k^e - \varepsilon_k^h - \delta\mu \quad (3.5)$$

$\varepsilon_k^{e(h)}$ は (2.86) 式の右辺第一項と第二項である。ボゴリューボフ準粒子の生成エネルギー $e_k^{\alpha(\beta)} < 0$ になるかどうかを検討するのは、 $k \sim k_F$ に限ってのみ行えばよい。なぜなら $k \ll k_F$ 若しくは $k \gg k_F$ においては明らかに $|\zeta_k| \gg \delta\zeta_k$ であるため、 $e_k^{\alpha(\beta)} = (E_k \pm \delta\zeta_k)/2 > 0$ となるからである。(a) の場合、 $k \sim k_F$ では $\varepsilon_k^e > \varepsilon_k^h$ であるが、電荷中性条件を満たすように $\delta\mu$ を決めた場合 $k \sim k_F$ の場合は $\varepsilon_k^e - \mu_e \sim 0, \varepsilon_k^h - \mu_h \sim 0$ であるため、 $\delta\zeta_k \sim 0$ となり、結局 $e_k^{\alpha(\beta)} > 0$ となる。(b) の場合でも $k \ll k_{F(h)}$ 若しくは $k \gg k_{F(h)}$ においては $e_k^{\alpha(\beta)} > 0$ であるが、 $k \sim k_{F(h)}$ では $\varepsilon_k^e - \mu_e > 0$ となり、このとき $e_k^{\alpha(\beta)} < 0$ が成り立つ場合がある。

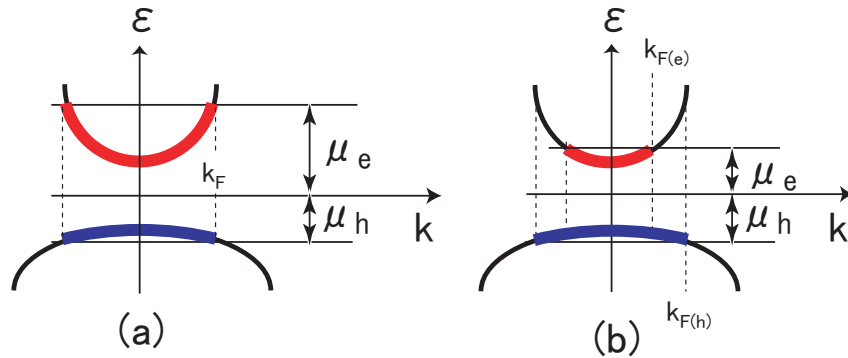


図. 3.16: エネルギーバンドの模式図

伝導帯と価電子帯の異方性差が電子正孔 BCS 状態を不安定にすることは、Zittartz による結果と定性的に一致する⁴⁾。Zittartz はバンドギャップの小さな間接遷移型半導体中の、半金属-Excitonic Phase 転移におけるエネルギーバンドの異方性の効果について定性的（一部定量的）な議論を行った。図 3.17 はバンドギャップ G の模式図である。 G は本研究では化学ポテンシャル μ に対応し、電子正孔対数を与える。図 3.18 は Zittartz が示し

た半導体中の半金属-エキシトニック・フェーズ (Excitonic Phase) 相図である。相図において、横軸は G であり、縦軸は転移温度 T_c である。 $G > E_B$ は $\mu < -E_B$ にあたる。このとき電子正孔対は励起されておらず系は半導体的である。 $G \leq E_B$ ($\mu > -E_B$) では系は Excitonic Phase である。このとき相は絶縁体であり、電子正孔 BCS 状態と物理的に等価である。バンドが等方的な場合 (点線)、 T_c は G の減少 (バンドの重なり増加) とともに緩やかに減少する。一方、伝導帯と価電子帯に僅かな異方性差がある場合 (実線)、 T_c は $G = G_{cr}$ で消滅し、系は半金属相へと転移する。これは本研究における電子正孔 BCS 状態-電子正孔プラズマ転移と対応する。以上のことから、伝導帯と価電子帯の異方性差

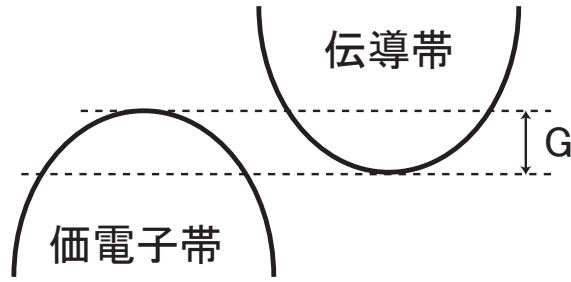


図. 3.17: エネルギーバンドの模式図 2

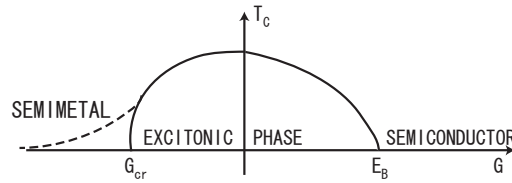


図. 3.18: Zittartz による Excitonic Phase の相図⁴⁾

(伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状の非対称性) は電子正孔 BCS 秩序を消滅させるという事がわかった。これは実際の物質において電子正孔 BCS 状態を消滅させる重大な原因の一つだと考えられる。このことから、伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状の非対称性こそが BCS 状態における $\uparrow, \downarrow$ スピン間の時間反転対称性に対応すると類推することができるが、これは数学的には次のように説明できる。BCS 状態に対して磁場を与えた場合、(1.1) 式に次のハミルトニアン

$$H_Z = - \sum_{\mathbf{k}} \omega_Z \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \quad (3.6)$$

を付加することに相当する。 ω_Z は磁場 $\mathbf{B}$ とスピンの相互作用であり、電子のスピンの磁気モーメントの大きさを β とすると、磁場に平行か反平行かで電子は $\pm\beta B \equiv \pm\omega_Z$ だけ

余分のエネルギーを持つ。定式化の途中経過は省略するが、これは結果的にボゴリューボフ準粒子のエネルギーに $e_{\mathbf{k}}^{\uparrow(\downarrow)}$ にだけ次のような効果

$$e_{\mathbf{k}}^{\uparrow(\downarrow)} = \frac{1}{2} (E_{\mathbf{k}} \pm \omega_Z) \quad (3.7)$$

を与える。 $T = 0$ の場合、ボゴリューボフ準粒子の分布関数は、 $e_{\mathbf{k}}^{\uparrow(\downarrow)} < 0$ となるような強さの磁場をかけたとき $f_{\mathbf{k}}^{\uparrow(\downarrow)} = 1$ となり、BCS 状態を消滅させる。物理的にも、超伝導体に磁場をかけることは、 $\uparrow$ スピンの電子と $\downarrow$ スピンの電子の数を変え、それぞれのフェルミ面の形状の対称性を破ることでクーパ対の形成を妨げる効果を持つ。一方、上述の通り、エネルギーバンドの異方性差も数学的にも物理的にもこれと同様の効果を持ち、電子正孔 BCS 状態を破壊する。ハミルトニアンにおいてエネルギーバンドの異方性差の効果は (2.51) 式に (3.6) 式に対応する次のような項を

$$H_m = - \sum_{\mathbf{k}} \delta \xi_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} - d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}} \right) \quad (3.8)$$

加える形で表すことができる。ここで、 $\delta \xi_{\mathbf{k}}$ は (2.54) 式において、有効質量の変化による運動エネルギーの変化分だけを取り出したものであり、 ω_Z に相当する。このように、電子正孔 BCS 状態において、エネルギーバンドの異方性差により、伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状の対称性を破る摂動を加えることは、BCS 状態において $\uparrow, \downarrow$ スピン間の時間反転対称性を破ることに対応することがわかる。一方、電子正孔 BCS 状態の磁場に対する応答はどうであろうか。電子と正孔のスピンの自由度を考慮した場合、エネルギーバンドは伝導帯、価電子帯とも $\uparrow$ スピン $\downarrow$ スピンに分裂するであろう。分裂により生じたエネルギー差はエネルギーの高いバンドから低いバンドへのキャリアの流出をまねき、 $\uparrow, \downarrow$ スピン間の電荷数の差異を生ずる。上述のように BCS 状態においてはこれは電子電子相関を妨げ BCS 状態を破壊するが、電子正孔系においては伝導帯と価電子帯が同様に分裂するため電子正孔相関に対する影響は無いと考えられる。

残念ながら現在までの所、エネルギーバンドの異方性については森垣、三浦による文献 26 にまとめられた僅かな例を除いて実験的にも理論的にも殆ど調査されていない。参考までに表 3.4 に有効質量の異方性が調べられている半導体を幾つかあげた。この表において AlAs は $m_{el}/m_{et} = 3.52$, $m_{hl}/m_{ht} = 2.16$ であり、電子が正孔より 1.6 倍以上 l 方向の異方性が高い。これは図 3.19 において電子正孔 BCS 秩序が完全に消滅してしまう異方性差である。一方、PdS は $m_{el}/m_{et} = 1.31$, $m_{hl}/m_{ht} = 1.4$ であり異方性差は約 1.07 と非常に小さいため、エネルギーバンドの異方性差による減少効果は重要でないと考えられる。PdS で電子正孔 BCS 状態が観測されたという実験例は存在しないが、このような異方性差の小さい物質を選定することで、電子正孔 BCS 状態の検証の可能性をあげることができるだろう。

表 3.4: 半導体における有効質量の異方性

	$m_e[m_0]$	$m_h[m_0]$
AlAs	$m_l = 0.88, m_t = 0.25^{10)}$	$m_l = 1.06, m_t = 0.49^{29)}$
GaP	$m_l = 0.254,^{30)} m_t = 1.7^{31)}$	$0.55(h), 0.13(l)^{32)}$
PbS ²⁰⁾	$m_l = 0.105, m_t = 0.080$	$m_l = 0.105, m_t = 0.075$

なお、伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状の対称性の破れは、エネルギーバンドの異方性差だけでなく電子と正孔の数が異なる場合にも起こる。電荷の非中性が電子正孔 BCS 状態に与える効果については付録 D で解説をする。

3.7 一軸性圧力による電子正孔 BCS 秩序の安定化

3.7.1 一軸性圧力によるエネルギーバンドの一軸的異方性

本節では、3.6.1 で議論した一軸的異方性による増強効果と、有限温度、電子正孔有効質量差、異方性差による減少効果が競合する場合の電子正孔 BCS 秩序の安定性について調べる。本節では、 $r_s = 1.00$ とした。3.6.1 で述べたように、有効質量の一軸的異方性は、試料に一軸的圧力をかけることによって制御ができる。文献 27、28 によると、有効質量は、 $l(z)$ 方向の一軸的圧力に対し

$$m_{\alpha\beta} = m_\alpha[1 + \gamma_{\alpha\beta}P_l] \quad (3.9)$$

の依存性をもつ。ここで、 $\alpha = h(e)$ 、 $\beta = l(t)$ であり、それぞれ正孔（電子）、 $z(x, y)$ 方向を意味する。また P_l は l 方向への一軸的圧力であり、単位は kbar である。文献 28 によると、 $\gamma_{hl} = \gamma_{el} = -0.09\text{kbar}^{-1}$ 、 $\gamma_{ht} = \gamma_{et} = 0.11\text{kbar}^{-1}$ であるので、ここから一軸的異方性と圧力の関係は、次の様な簡単な式

$$\frac{m_l}{m_t} = \frac{1 - 0.09P}{1 + 0.11P} \quad (3.10)$$

で表される。本節では一軸的異方性は $0.1 \leq m_l/m_t \leq 10$ の範囲で変化させた。

3.7.2 熱的效果との競合

図 3.19 は幾つかの有限温度における電子正孔 BCS エネルギーギャップと有効質量の一軸的異方性の関係である。本項では電子と正孔の有効質量は等しいとした ($\sigma = 1$)。系が等方的 ($m_l/m_t = 1$) な場合、3.5.1 で見たように電子正孔 BCS エネルギーギャップは

$T_c \sim 0.075$ で完全に消滅する。しかし、一軸的異方性の強い領域では温度による減少は等方的な場合に比べ、非常に小さく、高温 ($T_c > 0.09$) においても安定に存在する。電子正孔対を高密度に励起する場合、照射光による温度の上昇のため、電子正孔 BCS 秩序が破壊されてしまうという問題があるが、増強効果によりかなり高温においても秩序は安定に存在すると考えられる。

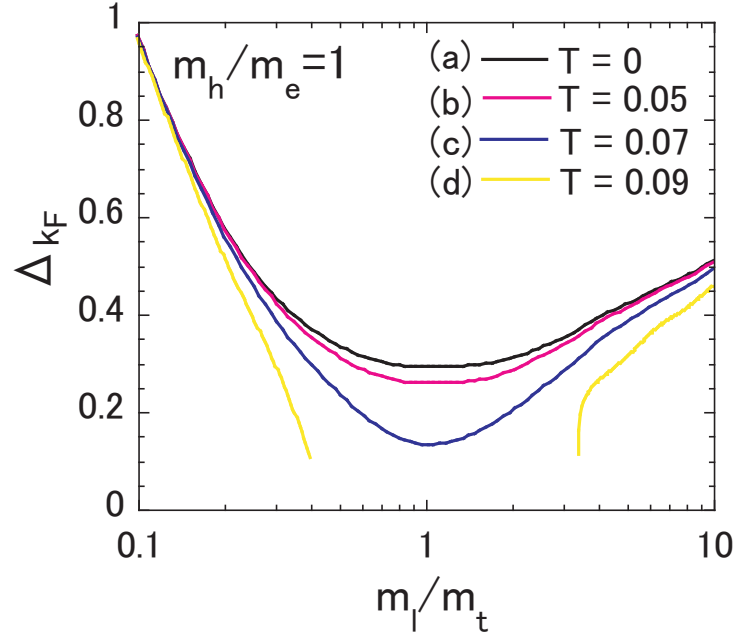


図. 3.19: 熱的效果に対するエネルギーバンドの異方性による電子正孔 BCS 秩序の増強効果 ($r_s = 1.00, \sigma = 1$)

3.7.3 電子正孔有効質量差による効果との競合

図 3.20、図 3.21 は幾つかの有効質量比に対する電子正孔 BCS エネルギーギャップと有効質量の一軸的異方性の関係である。異方性がある場合の σ は (3.4) 式より

$$\sigma = \frac{m_h}{m_e} = \frac{m_{hl}m_{ht}(2m_{el} + m_{et})}{m_{el}m_{et}(2m_{hl} + m_{ht})} \quad (3.11)$$

で定義される。3.5 で見た通り、 $T = 0$ の場合、異方性の有無に関わらず全ての σ で Δ_{k_F} は安定に存在する。一方、図 3.21 において、 $T = 0.03$ で系が等方的に近い ($m_l/m_t \sim 1$) 状態では、 $\sigma = 6, 8, 10$ で Δ_{k_F} は完全に消滅しているが、異方性の強い領域 ($\sigma = 8$ において $4 \lesssim m_l/m_t, m_l/m_t \lesssim 0.2$, $\sigma = 10$ において $6 \lesssim m_l/m_t, m_l/m_t \lesssim 0.15$) では Δ_{k_F} は有限の値を持つ。ここで、エネルギーバンドの一軸的異方性により電子正孔 BCS エネルギー

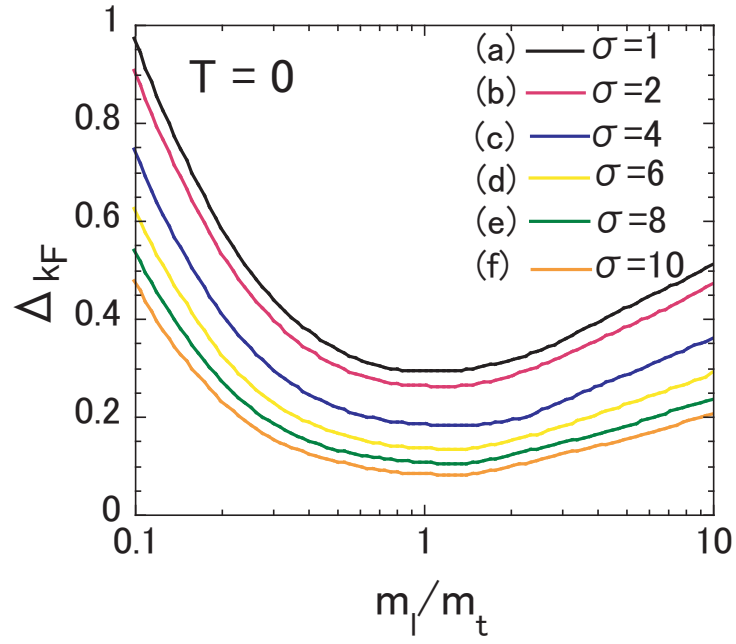


図. 3.20: 電子正孔有効質量差の効果に対するエネルギーバンドの異方性による電子正孔BCS 秩序の増強効果 ($r_s = 1.00, T = 0$)

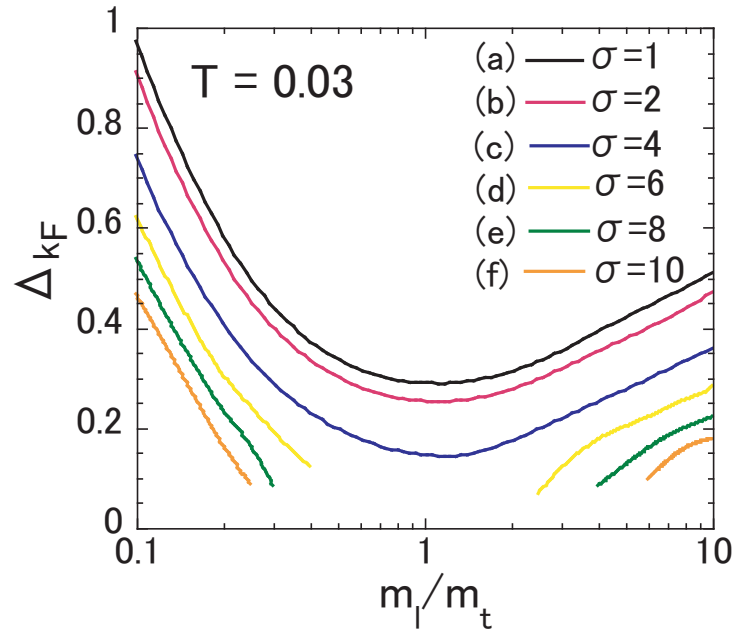


図. 3.21: 電子正孔有効質量差の効果に対するエネルギーバンドの異方性による電子正孔BCS 秩序の増強効果 ($r_s = 1.00, T = 0.03$)

ギャップが増大する傾向は、電子正孔有効質量差が存在する場合でも変わらない。このことは、電子正孔有効質量差と温度により電子正孔 BCS 秩序が消滅する場合でも人為的に与えた一軸的異方性が十分強い場合、それによる電子正孔 BCS 秩序の増強効果は、電子正孔有効質量差による減少効果を凌駕し、電子正孔 BCS エネルギーギャップを保持できることを意味する。

3.7.4 伝導帯と価電子帯の異方性差による効果との競合

3.6.2 において伝導帯と価電子帯の異方性が相違する場合（すなわち、伝導帯と価電子帯のフェルミ面がの形状が一致しない場合）、電子正孔 BCS 秩序を急速に消滅させる事がわかった。本項では、この減少効果と一軸的異方性による増強効果が併存する場合の電子正孔 BCS エネルギーギャップの安定性について調べた。図 3.22 は電子と正孔の l 方向の有効質量比を $m_{hl}/m_{el} = 1.5$ に保ったまま、一軸的な異方性を与えた場合の電子正孔 BCS エネルギーギャップの増強効果である。図において、上横軸が価電子帯の異方性 (m_{hl}/m_{ht})、下の横軸は伝導帯の異方性 (m_{el}/m_{et}) である。ここで、 $r_s = 1.00$ とした。こ

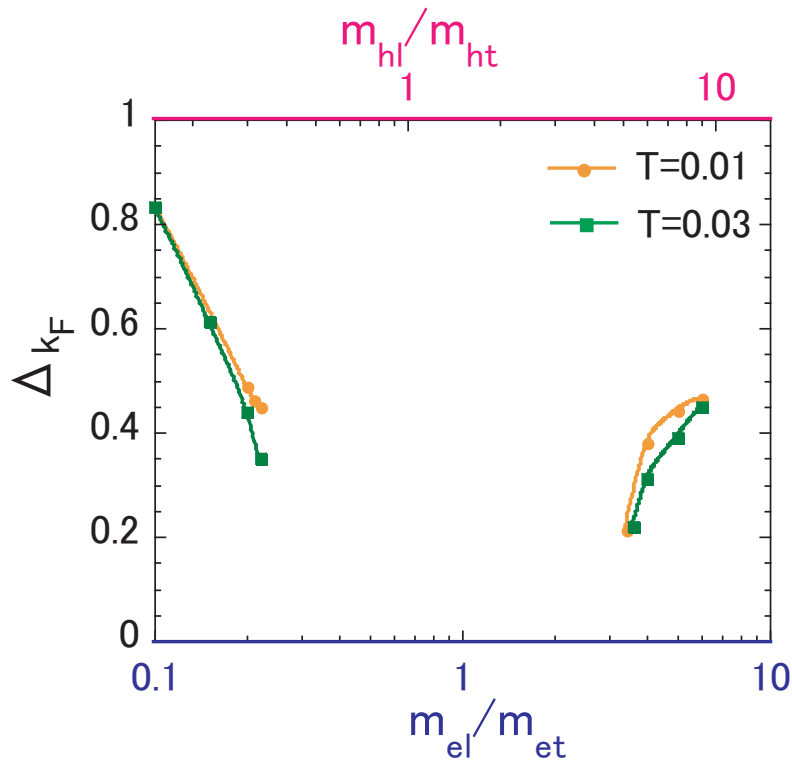


図. 3.22: 伝導帯と価電子帯の異方性差の効果に対する電子正孔 BCS 秩序の増強効果 ($r_s = 1.00, m_{hl}/m_{el} = 1.5$)

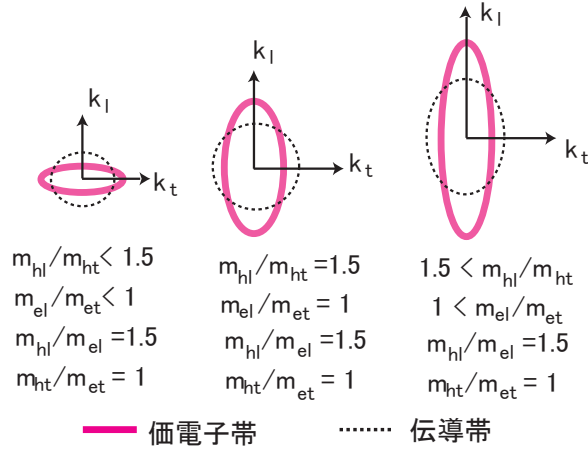


図. 3.23: 異方性がある場合のフェルミ面の模式図 3

の場合のフェルミ面の模式図を図 3.23 に示す。

図 3.13 からわかる通り、伝導帯が等方的 ($m_{el}/m_{et}=1$) な場合、 $m_{hl}/m_{el} = 1.5$ で Δ_{k_F} は完全に消滅している。一方、 $m_{el}/m_{et} \lesssim 0.25$ 、 $3.5 \lesssim m_{el}/m_{et}$ では増強効果により Δ_{k_F} は安定に存在する。ここでは $m_{hl}/m_{el} = 1.5$ 、 $m_{ht}/m_{et} = 1$ を仮定した。現実の半導体物質ではこれらは様々な値をとるが、一軸的異方性を与える事によって異方性差による減少効果を相殺することができる。

3.6.1 で述べた通り、電子正孔 BCS 秩序の増強効果は、単純には、エネルギーバンドの一軸的異方性によるキャリアの運動の自由度の低下に伴う運動エネルギーの減少により電子正孔相関が強くなることに起因すると考えることができる。これは単に有効質量比を変えずに有効質量だけを大きくして運動エネルギーの寄与を小さくすることと類似の効果をもたらす。しかしながら、前者は次元性の低下を伴っているのに対して、後者はあくまで次元性を保ったまま運動エネルギーの寄与のみを小さくしている。運動する電子と正孔の散乱強度は、運動の自由度の低下に伴い増加し、一次元系においては無限大となる。そのため、一次元ではクーロン力が非常に小さくても電子と正孔には非常に強い束縛効果が働く。しかしながら、単に有効質量を大きくしただけではこのような物理的なメカニズムは発生しない。また、低次元的な系は様々な特有の物性を持つため、その意味においても単純に次元性の低下を有効質量の増加に対応させることはできない³³⁾。例えば、系が極めて一次元的になった場合、電子-フォノン相互作用により起こるパイエルス転移により電荷密度波 (CDW) が発生する。このような場合、CDW との間の競合により、電子正孔 BCS 秩序は不安定になると予測される。他にも次元性の低下に伴う物性の変化は電子正孔 BCS 秩序に影響を与えると考えられ、重要な問題として残されている。

参考文献

- [1] S. Conti, G. Vignale, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **57**, R6846 (1998).
- [2] T. Iida, Y. Hasegawa, H. Higashimura, and M. Aihara, Phys. Rev. B **47**, 9328 (1993).
- [3] Yu. V. Kopaev, Fiz. Tverd. Tela. **8**, 223 (1966) [Sov. Phys. Solid State **8**, 175 (1966)].
- [4] J. Zittartz, Phys. Rev. **162**, 752 (1967).
- [5] MPP システム利用手引書 日本原子力研究所関西研究所情報システム管理課 編
- [6] T. J. Inagaki, T. Iida, and M. Aihara, Phys. Rev. B **62** 10 852 (2000).
- [7] L. V. Keldysh and A. N. Kozlov, Zh. Eks. Teor. Fiz. **54**, 978 (1968) [Sov. Phys. JETP **27**, 521 (1968)].
- [8] P. Nozières and S. Schmitt-Rink, J. Low. Temp. Phys. **59**, 195 (1985).
- [9] T. J. Inagaki and M. Aihara, Phys. Rev. B **65**, 205204 (2002).
- [10] 東京大学物性研究所編, 物性科学事典 1048 (1996) 東京書籍.
- [11] P. W. Anderson: Phys. Chem. Solids **11** (1959) 26.
- [12] R. E. Dietz, J. J. Hopfield and D. G. Thomas, J. Appl. Phys. **32**, Suppl. 2282 (1961).
- [13] W. S. Baer, Phys. Rev. **154**, 785 (1967).
- [14] G. O. Müller and R. Zimmermann, Proc. Intern. Conf. Phys. Ser. No.43 165 (1979).
- [15] B. Hönerlage, C. Klingshirn, and J. B. C. Grun, Phys. Status Solidi (b) **78**, 59 (1976).
- [16] A. Goldmann: Phys. Status Solidi (b) **81** 9 (1977).
- [17] J. Ringeissen and S. Nikitine, J. Phys. (France) **28**, C3-48 (1967).
- [18] F. Farbe, Phys. Status Solidi (a) **9**, 259 (1972).

- [19] R. G. Ulbrich and C. Weisbuch, Phys. Rev. Lett. **38** 865 (1977).
- [20] D. Long, *Energy Bands in Semiconductors*, (Interscience Pub., N.Y. 1968).
- [21] O. Akimoto and E. Hanamura, J. Phys. Soc. Jpn. **33**, 1537 (1972).
- [22] B. B. Kosicki, R. J. Powell and J. C. Burgiel, Phys. Rev. Lett. **24**, 1421 (1970).
- [23] E. D. Jones, S. W. Tozer, T. Schmiedel, Physica E **2** (1998) 146.
- [24] V. V. Schennikov, S. V. Ovsyannikov, Solid State Commun. **121** 323 (2002).
- [25] A. John Peter, K. Navaneethakrishnan, Solid State Commun. **130** 155 (2004).
- [26] *Kotai Butsuri*(Solid State Physics), ed. K. Morigaki, N. Miura (Agne Gijutsu Center, Tokyo, 1979) Vol.14, No.9 [in Japanese]..
- [27] N. K. Dutta, J. Appl. Phys. **55** (1984) 285.
- [28] S. Lee, K. M. Yoo, R. R. Alfano, H. Qiang and Fred H. Pollak, Phys. Rev. B **47** 7036 (1993).
- [29] J. Pankove, *Optical Process in Semiconductors*, (Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs 1971).
- [30] K. Suzuki and N. Miura, Solid State Commun. **18** 233 (1976).
- [31] A. Onton, Phys. Rev. **186** 786 (1969).
- [32] M. Cardon, J. Phys. Chem. Solids **24** 1543 (1963).
- [33] *Optical Properties of Low-Dimensional Materials Vol.2*, ed. T. Ogawa, K. Kanemitsu (World Scientific).

第4章 結論と今後の課題

4.1 結論

本研究では、電子正孔間のクーロン引力の他、電子間及び正孔間のクーロン斥力を考慮したモデルを用いて、有限温度におけるクーロン相互作用の遮蔽効果を考慮した BCS 的な平均場近似に基づき、電子正孔 BCS 状態に対するエネルギーバンドの異方性と電子正孔有効質量差の効果に関する解析を行った。

電子正孔 BCS に対する電子正孔有効質量差の効果については、電子正孔有効質量差は電子正孔 BCS 秩序を減少させるが、十分低温においては、電子と正孔の有効質量の相違に関わらず電子正孔 BCS エネルギーギャップは安定に存在することが本研究で初めて数値的にわかった。このことは有効質量差は電子と正孔の間の対称性を容易には破壊しないことを示唆している。これは、エネルギーバンドが等方的なまま有効質量差のみを考えた場合、伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状は一致しているからである (3.5)。

エネルギーバンドの異方性が電子正孔 BCS 秩序に与える効果は、その状況により大きく異なる。まず、伝導帯と価電子帯が異なる異方性を持つ場合、電子正孔 BCS 秩序は急速に消滅する。これは、伝導帯と価電子帯の間でのフェルミ面の形状の不一致が原因であり、電子正孔 BCS 状態が実験的に検証されていない主な原因の一つと考えられる。この伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状の不一致は、BCS 理論におけるクーパー対を構成する電子のスピン反転対称性の破れに相当することがわかった (3.6.2)。

一方、伝導帯と価電子帯が同じ異方性を持つ場合、エネルギーバンドの異方性は電子正孔 BCS 秩序を増大させる。これは有効質量が一軸的な異方性を持つ事により電子正孔対の運動の自由度が低次元的になるため、電子正孔間の束縛力が相対的に強くなったためだと考えられる。この効果は異方性が十分強い場合、電子正孔有効質量差の効果、熱的效果、伝導帯と価電子帯のエネルギーバンドの異方性差による電子正孔 BCS エネルギーギャップの減少を凌駕し、電子正孔 BCS 状態を安定にする場合がある。これは試料に一軸性の圧力をかけエネルギーバンドの一軸的な異方性を制御することで、電子正孔 BCS 状態の実験的検証が可能であることを示唆するものである。

なお、試料中のイオン化不純物などの存在により電子と正孔の数が異なる場合（電荷非中性）にも伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状の対称性は破れる。これはエネルギーバ

ンドの異方性差と同じ効果を電子正孔 BCS 対してもたらす。しかしながら不純物の密度が十分少ない場合、電子正孔 BCS 状態は殆ど影響を受けない（付録 E）。

4.2 今後の課題

本研究で用いた BCS 的平均場近似は、電子正孔対の相対運動に関しては、低密度高密度ともに正しく記述できる。しかし、励起子 BEC と電子正孔 BCS 状態の中間状態（クロスオーバー領域）においては電子正孔対の重心運動に関連した位相の揺らぎの効果が大きな問題となる。この揺らぎの効果を取り込むには、Eliashberg 方程式に基づいて解析を行う必要がある。

また、議論をエネルギーバンドの異方性と電子正孔有効質量差による効果に絞り込むため、ハミルトニアンにスピンの自由度を無視した。しかし、現実の物質ではバンド縮退が存在する。一方、外部磁場や磁性不純物の影響、励起子分子について調べようとする場合はスピン自由度の議論は不可欠である。

さらに、低温高密度電子正孔系においてクーロン相互作用に起因する巨視的量子秩序にのみ注目したが、実際は他の種類の秩序がこれと競合するため、より現実的な系を考える場合これらの効果も考慮しなくてはならない。例えば、3.7 で議論した場合のように、電子の運動の自由度が極めて低次元的になった場合、強い電子-フォノン相互作用により電荷密度波との競合がおこり電子正孔 BCS 状態は不安定になる。また、短距離の強いクーロン相互作用を考えた場合、スピン密度波を考慮しなくてはならない場合もある。

この様に、高密度電子正孔系は、種々の自由度が関与する多体問題であり、理論的に解決すべき問題が山積している。今後も、本論文を出発点として、多様な光誘起相転移現象の理論的研究に取り組んでいきたい。

付 録 A 直交座標におけるクーロンポテンシャルのフーリエ変換

ここでは、クーロンポテンシャルを実空間の直交座標から波数空間の直交座標へフーリエ変換する。(A.4)、(A.6) 式の積分については、I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products*, (Academic press 1980) を参考にした。

A.1 二次元直交座標の場合

まず、簡単のために二次元の場合について考える。フーリエ変換は

$$V(k_x, k_y) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \frac{e^{-ik_x x} \cdot e^{-ik_y y}}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad (\text{A.1})$$

で与えられる。はじめに、 x について積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-yik_x \frac{x}{y}}}{y \sqrt{(\frac{x}{y})^2 + 1}} \quad (\text{A.2})$$

を行う。(A.2) 式において $t = \frac{x}{y}$ と置換積分すると、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dt y \frac{e^{-yik_x t}}{y \sqrt{t^2 + 1}} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-yik_x t}}{\sqrt{t^2 + 1}} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\cos(yk_x t) - i \sin(yk_x t)}{\sqrt{t^2 + 1}} \\ &= 2 \int_0^{\infty} dt \frac{\cos(yk_x t)}{\sqrt{t^2 + 1}} \quad \left(\because \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin t dt = 0 \right) \\ &= 2K_0(|yk_x|) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

である。ここで

$$\int_0^{\infty} \frac{\cos(at) dt}{\sqrt{\beta^2 + t^2}} = K_0(a\beta) \quad [a > 0, \text{Re}\beta > 0] \quad (\text{A.4})$$

を使った。(A.6) 式を (A.1) 式に代入すると

$$V(k_x, k_y) = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ik_y y} K_0(|k_x y|) \quad (\text{A.5})$$

であり、

$$\int_0^{\infty} dz K_0(\alpha \sqrt{x^2 + \beta^2}) \cos(\gamma x) = \frac{\pi}{2\sqrt{\alpha^2 + \gamma^2}} \exp(-\beta \sqrt{\alpha^2 + \gamma^2})$$

$\text{Re}\alpha > 0, \text{Re}\beta > 0, \gamma > 0$

(A.6)

を使うと (A.5) 式の積分部分は

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ik_y y} K_0(|k_x y|) &= \int_{-\infty}^{\infty} dy (\cos(k_y y) - i \sin(k_y y)) K_0(|k_x y|) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \cos(k_y y) K_0(|k_x y|) \quad \left(\int_{-\infty}^{\infty} dy \sin(k_y y) K_0(|k_x y|) = 0 \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \cos(k_y y) K_0(k_x y) \\ &= \pi (k_x^2 + k_y^2)^{-1/2} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

となる。以上より 2 次元の場合は

$$V(k_x, k_y) = \frac{e^2}{2\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \quad (\text{A.8})$$

となる。

A.2 三次元直交座標の場合

フーリエ変換は

$$V(k_x, k_y, k_z) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dz \frac{e^{-ik_x x} \cdot e^{-ik_y y} \cdot e^{-ik_z z}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (\text{A.9})$$

で与えられる。前節と同様に、まず x について積分を行うと

$$V(k_x, k_y, k_z) = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-ik_y y} \cdot e^{-ik_z z} K_0(k_x \sqrt{y^2 + z^2}) \quad (\text{A.10})$$

となる。(A.10) 式の z についての積分

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-ik_z z} K_0(k_x \sqrt{y^2 + z^2}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dz K_0(k_x \sqrt{y^2 + z^2}) \{ \cos(k_z z) - i \sin(k_z z) \} \\ &= 2 \int_0^{\infty} dz K_0(k_x \sqrt{y^2 + z^2}) \cos(k_z z) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

を考える。(A.11) 式の積分部分に対して (A.6) を使うと

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz K_0(k_x \sqrt{y^2 + z^2}) \cos(k_z z) = \frac{\pi}{\sqrt{k_y^2 + k_z^2}} \exp\left(-|y| \sqrt{k_y^2 + k_z^2}\right) \quad (\text{A.12})$$

となる。(A.12) 式を (A.10) 式に代入すると

$$\begin{aligned} V(k_x, k_y, k_z) &= \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_y y} \frac{\pi}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \exp\left(-|y| \sqrt{k_x^2 + k_y^2}\right) dy \\ &= \frac{e^2}{2\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-|y| \sqrt{k_x^2 + k_y^2}\right) \{\cos(k_y y) - i \sin(k_y y)\} dy \\ &= 2 \frac{e^2}{2\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \int_0^{\infty} \exp\left(-y \sqrt{k_x^2 + k_y^2}\right) \cos(k_y y) dy \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

である。この積分は

$$\int e^{-ax} \cos(bx) dx = \frac{1}{a^2 + b^2} (be^{-ax} \sin(bx) - ae^{-ax} \cos(bx)) \quad (\text{A.14})$$

より

$$\begin{aligned} V(k_x, k_y, k_z) &= \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \frac{1}{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \\ &= \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

が得られる。式 (2.55) の様に一軸性異方性を考える場合は $\sqrt{k_x^2 + k_y^2} = k_t, k_z = k_l$ とすれば良い。さらに、極座標で考える場合は $\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = k$ とする。

付 録 B 準静的遮蔽クーロンポテンシャル

本章では、2.4 でクーロンポテンシャルの準静的遮蔽効果を導入する際に用いた有効プラズマ振動数 ω_k の定式化を説明する。この導出過程は、H. Haug, Stephan W. Koch, *Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors Third Edition*, (World Scientific) を参考にした。

B.1 プラズマ遮蔽

プラズマ遮蔽を量子力学的に議論するために、有効一体ハミルトニアン (effective single particle Hamiltonian)

$$\mathcal{H} = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{r}) + \int d^3r V^{\text{eff}}(r) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{B.1})$$

から始める。ここで

$$V^{\text{eff}}(r) = V(r) + V^{\text{ind}}(r) \quad (\text{B.2})$$

は、試電荷のクーロンポテンシャル $V(r)$ と、遮蔽粒子の誘起されたポテンシャル V^{ind} である。有効ポテンシャル V^{eff} は自己無撞着に決められる。(B.1) 式のフーリエ変換は

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{p}} V^{\text{eff}}(p) \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (\text{B.3})$$

$a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$ についての運動方程式は

$$\frac{d}{dt} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}}] \quad (\text{B.4})$$

$$= i(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}} V^{\text{eff}}(p) (a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} - a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}}) \quad (\text{B.5})$$

である。最右辺第二項に乱雑位相近似 (RPA) を使い期待値を取ると

$$\frac{d}{dt} \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = i(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k) \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle - \frac{i}{\hbar} V^{\text{eff}}(p) (f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}) \quad (\text{B.6})$$

となる。試電荷が $\exp(-i(\omega + i\delta)t)$ の時間依存性を持つとする

$$\langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle \propto \exp(-i(\omega + i\delta)t) \quad (\text{B.7})$$

である。従って (B.6) 式は

$$\hbar(\omega + i\delta + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k) \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = V^{\text{eff}}(p)(f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}) \quad (\text{B.8})$$

となる。

$$\langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle = V^{\text{eff}}(p) \frac{(f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}})}{\hbar(\omega + i\delta + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k)} \quad (\text{B.9})$$

これに $-e/L^3$ をかけて、 $\mathbf{k}$ について和を取ると

$$\langle \rho_q \rangle = -\frac{e}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{B.10})$$

となる。これは分極関数

$$P^1(q, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{(f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}})}{\hbar(\omega + i\delta + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k)} \quad (\text{B.11})$$

を使って

$$\langle \rho_q \rangle = -\frac{e}{L^3} V^{\text{eff}}(p) P^1(q, \omega) \quad (\text{B.12})$$

と表せる。電荷のポテンシャルは、ポワソン (Poisson) 方程式

$$\nabla^2 V^{\text{ind}}(r) = \frac{4\pi e \rho(r)}{\epsilon_0} \quad (\text{B.13})$$

に従う。これをフーリエ変換し (B.10) 式を使うと

$$\begin{aligned} V^{\text{ind}}(q) &= \frac{4\pi e}{\epsilon_0 q^2} \rho_q = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2 L^3} V^{\text{eff}}(q) P^1(q, \omega) \\ &= V^q V^{\text{eff}}(q) P^1(q, \omega) \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

となる。(B.14) 式を (B.2) 式をフーリエ変換したものに代入すると

$$\begin{aligned} V^{\text{eff}}(q) &= V^q + V^{\text{ind}}(q) \rightarrow \\ V^{\text{eff}}(q) &= V^q [1 + V^{\text{eff}}(q) P^1(q, \omega)] \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

若しくは

$$V^{\text{eff}}(q) = \frac{V^q}{1 - V^q P^1(q, \omega)} = \frac{V^q}{\epsilon(q, \omega)} \equiv V^s(q, \omega) \quad (\text{B.16})$$

となる。ここで遮蔽クーロンポテンシャルとして $V^s(q, \omega)$ を導入した。誘電関数 $\epsilon(q, \omega)$ は

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - V^q P^1(q, \omega) \quad (\text{B.17})$$

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - V^q \sum_{\mathbf{k}} \frac{(f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}})}{\hbar(\omega + i\delta + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})} \quad (\text{B.18})$$

である。

B.2 誘電関数の解析

まず、 $q \rightarrow 0$ の長波長極限

$$\hbar(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} + q^2) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \simeq -\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m} \quad (\text{B.19})$$

$$f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} + \cdots - f_{\mathbf{k}} \simeq -\mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \quad (\text{B.20})$$

を考える。これらの近似から、(B.18) 式の右辺第二項は

$$-V^q \sum_{\mathbf{k}, i} \frac{q_i \frac{\partial f}{\partial k_i}}{\hbar\omega_0 - \hbar^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}/m} \simeq -\frac{V^q}{\hbar\omega_0} \sum_{\mathbf{k}, i} q_i \frac{\partial f}{\partial k_i} \left(1 + \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m\omega}\right) \quad (\text{B.21})$$

と書き換えられる。ここで、 $\omega_{q \rightarrow 0} = \omega$ とおいた。 $\sum \partial f / \partial k$ は、 $k \rightarrow \infty$ における分布関数を与えるので

$$\begin{aligned} -\frac{V^q}{\hbar\omega} \sum_{\mathbf{k}, i} q_i \frac{\partial f}{\partial k_i} \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m\omega} &= \\ V^q \frac{q^2}{m\omega^2} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} &= V^q \frac{q^2 N}{m\omega^2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2 L^3} \frac{q^2 N}{m\omega^2} \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

となる。ここで $\omega_{\text{pl}}^2 = 4\pi n e^2 / \epsilon_0 m$ とおくと

$$\epsilon(0, \omega) = 1 - \frac{\omega_{\text{pl}}^2}{\omega^2} \quad (\text{B.23})$$

となる。これは古典的なドルーデ (Drude) の誘電関数である。 $\omega + i\delta \rightarrow 0$ の定常的な極限では (B.18) 式は

$$\epsilon(q, 0) = 1 - V^q \sum_{\mathbf{k}} \frac{(f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}})}{\hbar(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})} \quad (\text{B.24})$$

(B.19)、(B.20) 式の展開式を使い、熱平衡状態でのフェルミ・ディラック分布を仮定すると

$$\sum_i q_i \frac{\partial f}{\partial k_i} = -\sum_i q_i \frac{\partial f}{\partial \mu} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_i} = -\sum_i q_i k_i \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial f_k}{\partial \mu} \quad (\text{B.25})$$

となる。以上より

$$\begin{aligned}\epsilon(q, 0) &= 1 - \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \\ &= 1 + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\partial n}{\partial \mu} \equiv 1 + \frac{\kappa^2}{q^2}\end{aligned}\quad (\text{B.26})$$

となる。ここで3次元遮蔽波数 κ は

$$\kappa = \sqrt{\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} \frac{\partial n}{\partial \mu}} \quad (\text{B.27})$$

$$(\text{B.28})$$

結局、3次元静的遮蔽クーロンポテンシャルは

$$V^s(q) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 L^3} \frac{1}{q^2 + \kappa^2} = \frac{V^q}{\epsilon(q, 0)} \quad (\text{B.29})$$

で与えられる。3次元の場合、低温でフェルミ縮退しているとみなせる場合は

$$\frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{3}{2} \frac{n}{E_F} \quad (\text{B.30})$$

が成り立つため、(B.27) 式は

$$\kappa = \sqrt{\frac{6\pi e^2 n}{\epsilon_0 E_F}} \equiv k_{\text{TF}} \quad (\text{B.31})$$

となる。 k_{TF} は3次元トーマス・フェルミ遮蔽波数である。

B.3 プラズモン・ポール近似

(B.23) 式で示した長波長極限の誘電関数

$$\frac{1}{\epsilon(q \rightarrow 0, \omega)} = \frac{\omega^2}{(\omega + i\omega)^2 - \omega_{pl}^2} = 1 + \frac{\omega_{pl}^2}{(\omega + i\delta) - \omega_{pl}^2} \quad (\text{B.32})$$

は、その逆数は一つの極を持つ。この結果を完全誘電関数 $\epsilon(q, \omega)$ を近似するために使う。

$$\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} = 1 + \frac{\omega_{pl}^2}{(\omega + i\delta) - \omega_q^2} \quad (\text{B.33})$$

は (B.18) 式に含まれる極の連続性を、 ω_q に置き換えることで作られる。有効プラズモン周波数 ω_q はクラマス・クローニッヒ (Kramers-Kronig) の関係から得られる、和の法則

$$\epsilon'(q, \omega) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega' \epsilon''(q, \omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (\text{B.34})$$

を満たす事で選ばれる。(B.26) 式により与えられる3次元についての静的長波長極限を使うと

$$\epsilon'(q, 0) - 1 = \frac{k_{\text{TF}}^2}{q^2} = \frac{2}{\pi} \lim_{q \rightarrow 0} P \int_0^\infty d\omega' \frac{\epsilon''(q, \omega')}{\omega'} \quad (\text{B.35})$$

であり、(B.33) 式より、

$$\epsilon(q, \omega) = \frac{\omega^2 - \omega_q^2}{(\omega + i\delta - \Omega_q)(\omega + i\delta + \Omega_q)} \quad (\text{B.36})$$

となる。ここで

$$\Omega_q^2 = \omega_q^2 - \omega_{pl}^2 \quad (\text{B.37})$$

である。(B.36) 式は

$$\epsilon(q, \omega) = \frac{\omega^2 - \omega_q^2}{2\Omega_q} \left(\frac{1}{\omega + i\delta - \Omega_q} - \frac{1}{\omega + i\delta + \Omega_q} \right) \quad (\text{B.38})$$

ここでディラックの関係式を使うと

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\omega + i\delta - \Omega_q} &= P \frac{1}{\omega - \Omega_q} - i\pi\delta(\omega - \Omega_q) \\ \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\omega + i\delta + \Omega_q} &= P \frac{1}{\omega + \Omega_q} - i\pi\delta(\omega + \Omega_q) \end{aligned}$$

であり、(B.36) 式にもディラックの関係式を使うと

$$\epsilon''(q, \omega') = \frac{\omega'^2 - \omega_q^2}{2\Omega_q} [-\pi\delta(\omega' - \Omega_q) + \pi\delta(\omega' + \Omega_q)] \quad (\text{B.39})$$

が得られる。この結果を (B.35) 式に入れると

$$\begin{aligned} & P \int_0^\infty d\omega' \frac{\epsilon''(q, \omega')}{\omega'} \\ &= \frac{1}{2\Omega} \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega'^2 - \omega_q^2}{\omega'} [-\pi\delta(\omega' - \Omega_q) + \pi\delta(\omega' + \Omega_q)] \\ &= \frac{1}{2\Omega} \left[-\pi \frac{\Omega_q^2 - \omega_q^2}{\Omega_q} - \pi \frac{\Omega_q^2 - \omega_q^2}{\Omega_q} \right] \\ &= \frac{1}{2\Omega} \pi \omega_q^2 \end{aligned}$$

となる。以上より

$$\frac{k_{\text{TF}}^2}{q^2} = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\omega_{pl}^2}{\Omega_q^2} \quad (\text{B.40})$$

であり、(B.37) 式より 3 次元有効プラズモン周波数 ω_q は

$$\lim_{q \rightarrow 0} \omega_q^2 = \omega_{pl}^2 \left(1 + \frac{q^2}{k_{\text{TF}}^2} \right) \quad (\text{B.41})$$

となる。半導体中の電子正孔系の場合は

$$[\hbar\omega_q]^2 = [\hbar\omega_{pl}]^2 \left(1 + \frac{q^2}{k_{\text{TF}}^2} \right) + G_{\text{eff}}^2 \quad (\text{B.42})$$

となる。ここで、 G_{eff} は $E_{\mathbf{k}}$ の最小値である。なお、2 次元の有効プラズモン振動数、プラズマ振動数、遮蔽波数はそれぞれ

$$[\hbar\omega(\mathbf{k})]^2 = [\hbar\omega_{\text{pl}}(k)]^2 \left(1 + \frac{k}{\kappa} \right) + G_{\text{eff}}^2 \quad (\text{B.43})$$

$$\omega_{\text{pl}}(k)^2 = \frac{2\pi n e^2}{\epsilon_0 m^*} k \quad (\text{B.44})$$

$$\kappa = \frac{2me^2}{\epsilon_0 \hbar^2} (1 - e^{-\hbar^2 \beta \pi n / m^*}) \quad (\text{B.45})$$

である。

付 録 C 光双安定性

遮蔽されたクーロンポテンシャルはバンドギャップの再規格化を引き起こし、光双安定性をもたらす^{1),2)}。これは入射光の振動数 ω_L を変化させた（これは化学ポテンシャルを変えることに相当する）とき、電子正孔対密度若しくは準粒子のエネルギーの最小値 G_{eff} が ω_L に対して安定な領域が二箇所存在する事である。今、ハミルトニアン (2.50) 式に次の様な入射光とキャリアの相互作用の項

$$H_{\text{pump}} = \lambda \sum_{\mathbf{k}} \left[c_{\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \exp(-i\omega_L t) + d_{-\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \exp(i\omega_L t) \right], \quad (\text{C.1})$$

を加える。ここで、入射光は古典場と考えた。また、 λ は入射光とキャリアの相互作用のエネルギーである。今、系は定常状態であると仮定し、ハミルトニアンに次の様なユニタリー変換

$$T(t) = \exp \left[\frac{-i\omega_L t}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}} \right) \right], \quad (\text{C.2})$$

をする事で、(C.1) 式の時間依存性を除去する³⁾。まず、一般の場合について考える。 A, B を演算子、 λ を係数として、演算子 B をユニタリー変換をすると

$$e^{i\lambda A} B e^{-i\lambda A} = e^{iL_A \lambda} \quad (\text{C.3})$$

となる。ここで

$$L_A \equiv AB - BA \quad (\text{C.4})$$

を定義した。これを用いてハミルトニアンから時間依存性を除去する。ハミルトニアンを時間依存の項 H_{pump} と非依存の項 $H(= H_0 + H_{ee} + H_{hh} + H_{eh})$ に分けて考え、変換後の全ハミルトニアンを H_{total} 、時間依存の項を $\tilde{H}_{\text{pump}}$ 、時間非依存の項を $\tilde{H}$ とすると、

$$H_{\text{total}} = e^{iH_t t/\hbar} (H + H_{\text{pump}}) e^{-iH_t t/\hbar} - H_t \quad (\text{C.5})$$

であるが、時間非依存の項 H は、(C.2) 式のユニタリー変換に対して不変である。このことは次の様にして簡単に説明できる。例えば、 $\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}$ について考える。 H_t を

$$H_t = \frac{\hbar\omega_L}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + d_{-\mathbf{k}}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}} \right) \quad (\text{C.6})$$

と定義するとユニタリー変換は

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{k}} e^{iH_t t/\hbar} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} e^{-iH_t t/\hbar} &= \sum_{\mathbf{k}} e^{iH_t t/\hbar} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-iH_t t/\hbar} e^{iH_t t/\hbar} c_{\mathbf{k}} e^{-iH_t t/\hbar} \\ &= e^{iL_1 t/\hbar} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{iL_2 t/\hbar} c_{\mathbf{k}}\end{aligned}\quad (\text{C.7})$$

となる。また、(C.7) 式において、

$$\begin{aligned}L_1 c_{\mathbf{k}'}^\dagger &= [H_t, c_{\mathbf{k}'}^\dagger] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} + d_{-\mathbf{k}'}^\dagger d_{-\mathbf{k}'} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger - c_{\mathbf{k}}^\dagger \left(c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} + d_{-\mathbf{k}'}^\dagger d_{-\mathbf{k}'} \right) \right] \frac{\hbar\omega_L}{2}\end{aligned}\quad (\text{C.8})$$

となる。(C.8) 式において $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ のときは右辺 = 0 となるので、演算子はユニタリー変換に対して不変である。 $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ の場合は $L_1 c_{\mathbf{k}}^\dagger = (\hbar\omega_L/2) c_{\mathbf{k}}^\dagger$ であり、ここから

$$L_1 c_{\mathbf{k}}^\dagger = e^{i\hbar\omega_L t/2} c_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (\text{C.9})$$

となる。同様な計算により $e^{iL_2 t/\hbar} c_{\mathbf{k}} = e^{-i\hbar\omega_L t/2} c_{\mathbf{k}}$ であるので、(C.7) 式は

$$e^{iL_1 t/\hbar} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{iL_2 t/\hbar} c_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (\text{C.10})$$

となり、結局ユニタリー変換に対して不変であり、これは H の他の項についても同様である。一方、 H_{pump} に対しては

$$\begin{aligned}e^{iH_t t/\hbar} c_{\mathbf{k}}^\dagger d_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{-iH_t t/\hbar} &= e^{i\omega_L t/2} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\omega_L t/2} d_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ &= e^{i\omega_L t} c_{\mathbf{k}}^\dagger d_{-\mathbf{k}}^\dagger\end{aligned}\quad (\text{C.11})$$

である。第二項についても同様な計算により $e^{-i\omega_L t} c_{\mathbf{k}} d_{-\mathbf{k}}$ であることがわかるので、結局

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{\text{pump}} &= \lambda \sum_{\mathbf{k}} \left[e^{i\omega_L t} c_{\mathbf{k}}^\dagger d_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t} d_{-\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i\omega_L t} \right] \\ &= \lambda \sum_{\mathbf{k}} \left[c_{\mathbf{k}}^\dagger d_{-\mathbf{k}}^\dagger + d_{-\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \right]\end{aligned}\quad (\text{C.12})$$

となる。以上まとめると、ユニタリー変換後の全ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}H_{\text{total}} &= H_0 + H_{ee} + H_{hh} + H_{eh} + \lambda \sum_{\mathbf{k}} \left[c_{\mathbf{k}}^\dagger d_{-\mathbf{k}}^\dagger + d_{-\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \right] \\ &\quad - \frac{\hbar\omega_L}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + d_{-\mathbf{k}}^\dagger d_{-\mathbf{k}} \right)\end{aligned}\quad (\text{C.13})$$

で与えられる。ここで (C.13) 式の右辺第六項は、ユニタリー変換により回転する座標系へ座標系を変換したことによるエネルギーの底上げに起因する項であり、化学ポテンシャ

ルの役割を担う。(C.13) 式について (2.57) 式以降と同様な計算を行うと電子正孔 BCS エネルギーギャップ方程式は

$$\Delta_{\mathbf{k}} = 2\lambda + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^s \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}} (1 - f_{\mathbf{k}'}^{\alpha} - f_{\mathbf{k}'}^{\beta}), \quad (\text{C.14})$$

と書き換えられる。なお、 $\zeta_{\mathbf{k}}, \delta\zeta_{\mathbf{k}}$ は (2.86)、(2.87) と同様である。図 C.1、C.2 にボーア半径で規格化した平均対間距離 r_s 及び準粒子対のエネルギーの最小値 G_{eff} と化学ポテンシャルの関係を示す²⁾。今、化学ポテンシャルと入射光は $\mu = \hbar\omega_L - E_g$ の関係で結ばれる。図中の実線は化学ポテンシャルを最小値から増加させたときの結果であり、破線は最大値から減少させた場合のものである。

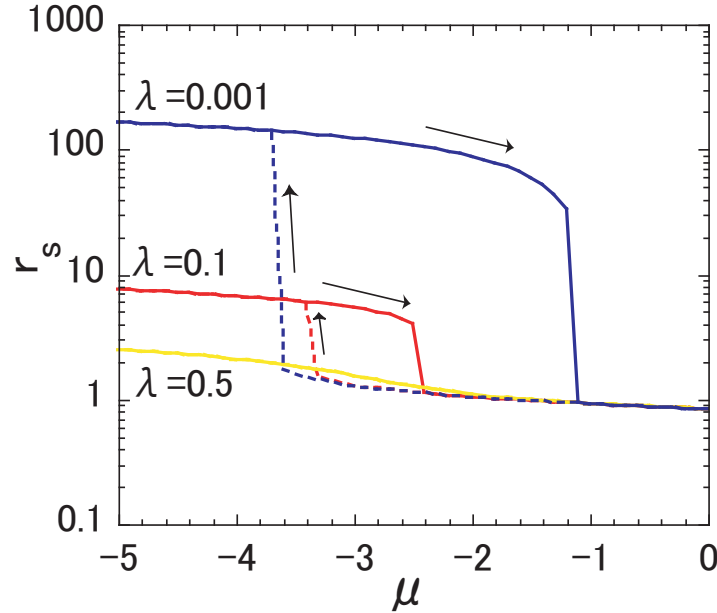


図. C.1: r_s の光双安定性

図 C.1 において $\lambda = 0.001, 0.1$ は、 r_s が同じ μ に対して安定な領域が二箇所存在するのがわかる。 r_s の光双安定性はバンドギャップの再規格化が原因である。電子正孔対の密度は (2.85) 式から解るように、クーロンポテンシャルの遮蔽効果を通じてバンドギャップの再規格化を引き起こす。一方、電子正孔対密度はバンドギャップの再規格化から自己無撞着的に決められる。このことによりある範囲では化学ポテンシャルの変化の仕方（増加しているか減少しているか）によって 2 つの安定な解が存在する事になる。図 C.2 においては G_{eff} の双安定性が確認される。ここで高密度領域において、 λ が大きい場合 ($\lambda = 0.5$)、 G_{eff} も大きくなるのは、電子と正孔の間の相関が入射光が強くなるに伴い増大するためであると考えられる。また、 λ が小さい場合 ($\lambda = 0.001$) の G_{eff} は励起子の束縛エネルギーより大幅に小さいが、これは電子正孔間の相互作用が弱いためであると考えられる。すな

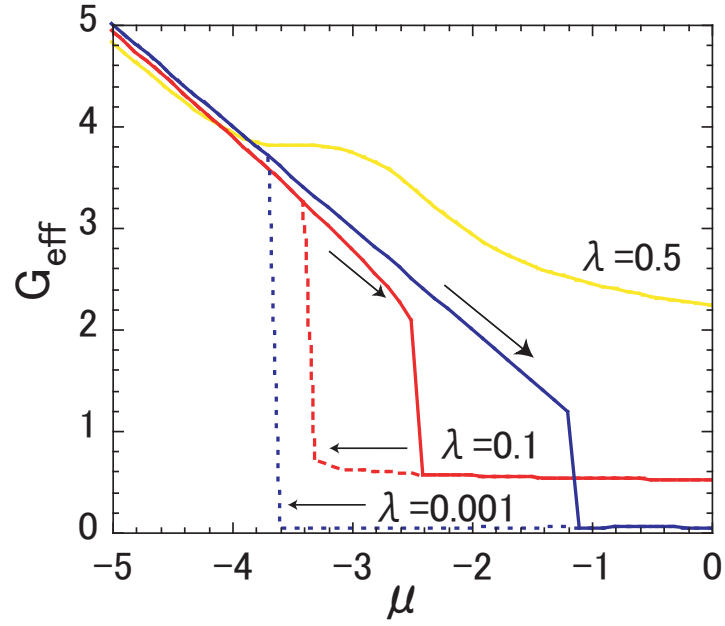


図. C.2: G_{eff} の光双安定性

わち、この領域で電子正孔 BCS 秩序が形成されているということがわかる。一方、低密度では $G_{\text{eff}} \sim \mu$ であるが、これは系が励起子ガス状態であるため、 $\min_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}} \sim \mu$, $\Delta_{\mathbf{k}} \sim 2\lambda$ であり、従って $G_{\text{eff}} \sim \sqrt{\mu^2 + 4\lambda^2}$ となるためであると考えられる。図 C.3、C.4 に非遮蔽クーロンポテンシャルの場合の結果を示す。光双安定性は非遮蔽クーロンポテンシャルの場合は起こらないことがわかる⁴⁾。

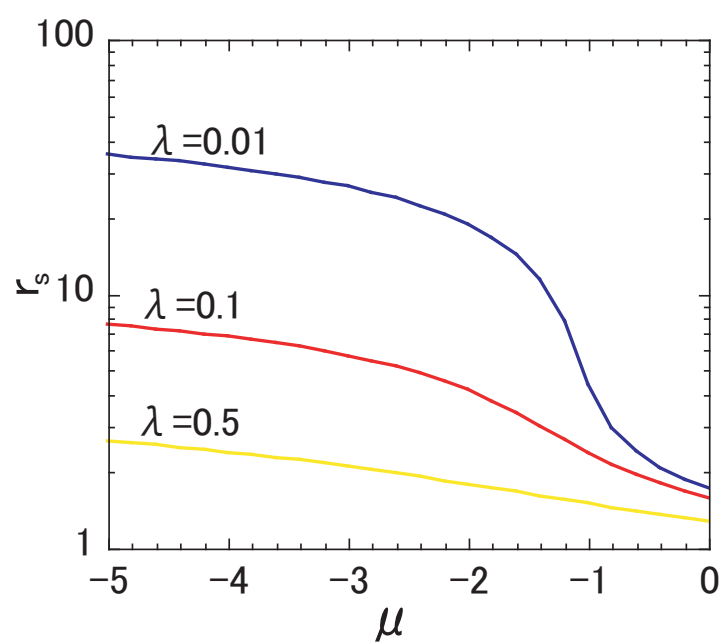


図. C.3: r_s の光双安定性

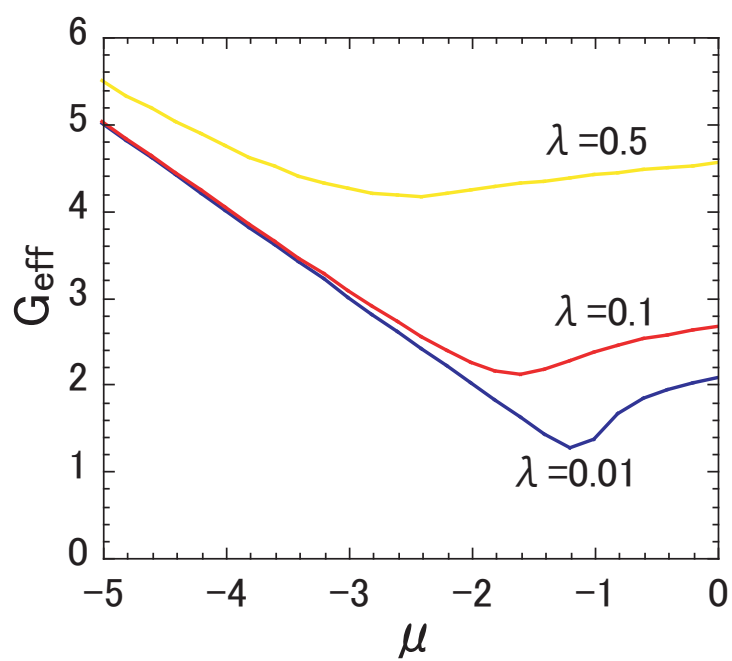


図. C.4: G_{eff} の光双安定性

参考文献

- [1] T. Iida, Y. Hasegawa, H. Higashimura, and M. Aihara, Phys. Rev. B **47**, 9328 (1993).
- [2] T. J. Inagaki, T. Iida, and M. Aihara, Phys. Rev. B **62** 10 852 (2000).
- [3] V. M. Galitzkii, S. P. Goreslavskii, and V. F. Elesin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **57**, 207 (1969) [Sov. Phys.-JETP **30**, 117 (1970)].
- [4] C. Comte and G. Mahler, Phys. Rev. B **34**, 7146 (1986).

付 録 D 電子正孔の高密度励起による有効質量の変化

本研究では有効質量は電子正孔有効質量差や異方性差の形で入力パラメータとして設定した。また、我々は数値計算で $\zeta_{\mathbf{k}}$ を求める際に、自己エネルギーについて自己無撞着な解を求めたが、有効質量は有効質量近似 ((2.25) 式) ではエネルギーバンドの分散の曲率に依存するため、実際には自己エネルギーによる変化を受ける。本節では高密度励起による自己エネルギーの効果がくり込まれた換算質量と有効質量比の変化を調べる。(2.86) 式より、エネルギーバンドが等方的な場合の電子正孔対の分散は

$$\zeta_{\mathbf{k}}^{e(h)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{e(h)}} - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^s n_{\mathbf{k}'} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} [V_{\mathbf{k}'}^s - V_{\mathbf{k}'}] - \mu_{e(h)} \quad (\text{D.1})$$

である。ここで、 $m_{e(h)}$ はパラメータとして与える電子（正孔）の有効質量である。はじめに、図 D.1 は幾つかの r_s における電子正孔対のエネルギー ($\zeta_{\mathbf{k}}$) の $0 \leq k \leq 2$ の分散関係である（以下ではくり込まれた有効質量またはくり込まれた換算質量を単に有効質量、換算質量と呼ぶ）。 r_s 間の比較をしやすいように縦軸は $\zeta_{\mathbf{k}} - \zeta_{\mathbf{k}=0}$ とした。図か

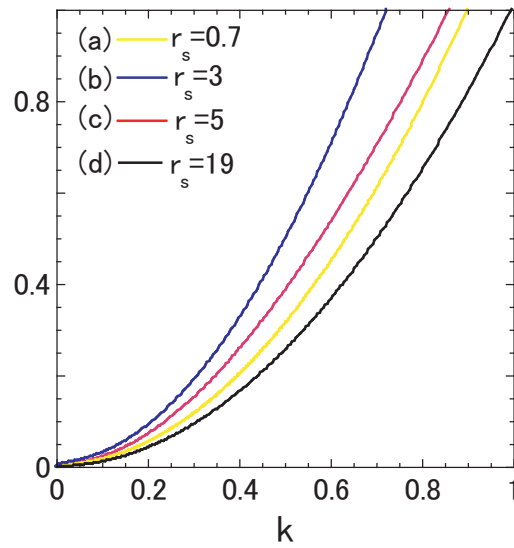


図. D.1: 電子正孔対エネルギー $\zeta_{\mathbf{k}}$ の分散関係

ら $10 \leq r_s \leq 2$ では ζ_k の曲率は大きくなっているのがわかるが、これは換算質量が小さくなっていることを意味する。一方、 $2 \leq r_s \leq 0.7$ では r_s の減少とともに換算質量は大きくなっている。このことを詳細に調べるために、 r_s を低密度から高密度へ連続的に変化させて換算質量の変化を調べる。図 D.2 は基底状態の換算質量 (m_r) と励起状態での換算質量 (m'_r) の比 (δm) の r_s 依存性である。ここではエネルギーバンドは等方的、 $T = 0$ 、 $\sigma = 1$ とした。ここで我々は有効質量近似において、有効質量 (2.25) 式は $k \ll 1$ において定義されるということを考慮し、 ζ_k の曲率の逆数を $k \ll 1$ の幾つかの点で平均化したものを m'_r と定義した。図 D.2 において、 δm は低密度 ($1 < r_s$) では $m'_r/m_0 \rightarrow 1$ である。これは電子正孔対数が少ないことで ζ に対する自己エネルギーの寄与が小さくなったためである。低密度から高密度になるに従い、自己エネルギーの増加により換算質量は大きく減少し、 $r_s \sim 3$ で極小値を取るがこれは図 D.1 からわかる曲率の変化の様子と一致する。

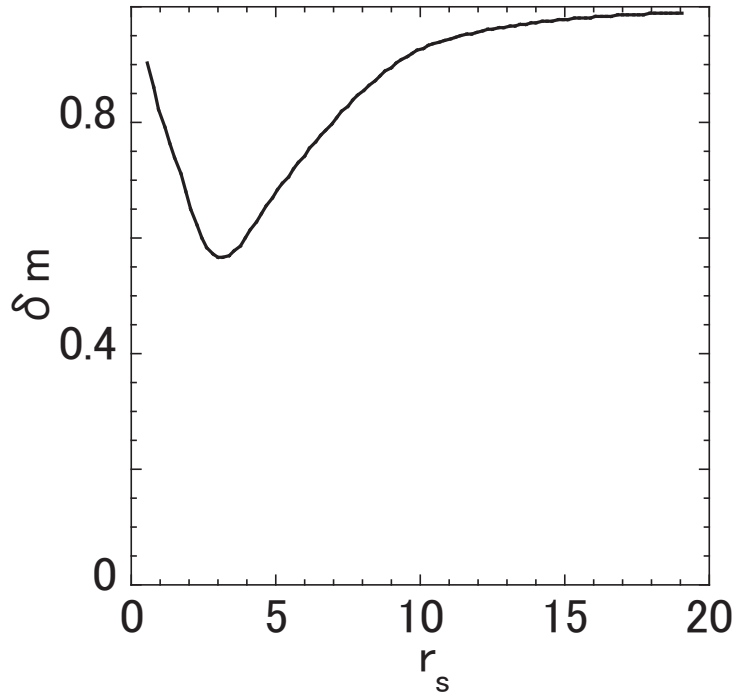


図. D.2: 電子正孔の励起による換算質量の変化

図 D.3 は有効質量比の r_s 依存性である。 σ はパラメータとして初期設定した有効質量比、 σ' は励起状態での有効質量比である。 σ' は m'_r と同様に $\zeta_k^{(h)}$ の曲率の逆数を十分小さい k に対して求めたものである。有効質量比は $\sigma = 1$ 以外は δm と同様に $r_s \sim 3$ で極小値を取る。

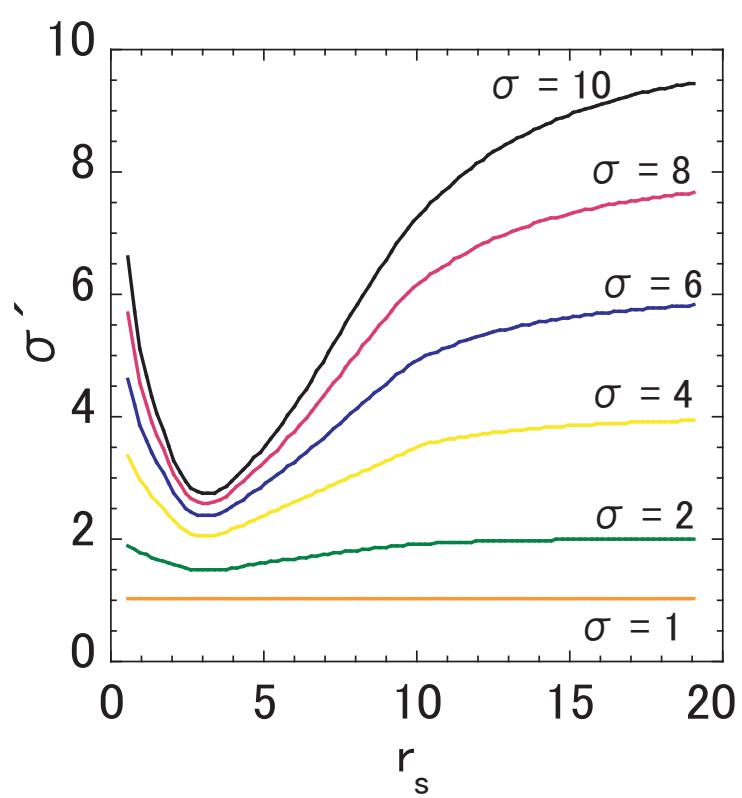


図. D.3: 電子正孔の励起による電子正孔有効質量差の変化

付 録 E 電子正孔 BCS 状態に対する電荷非中性の効果

伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状の対称性の破れは、エネルギーバンドの異方性差だけでなく電子と正孔の数が異なる場合にも起こる。ここでは電子と正孔の数が異なる場合、電子正孔 BCS 秩序にいかなる影響を与えるかを調べる。本研究の結果は全て (2.69) 式で与えられる電荷中性条件が満たされている前提で得られた。しかしながら、実際は試料作成の際に多少なりとも不純物の混入するため、電子と正孔の数を完全に等しくするの困難な場合が多い。例えば、非常に純度の高い Si 結晶においても約 10^{12}cm^{-3} の過剰正孔が存在する。¹⁾ これは Si のモット転移密度 (約 10^{18}cm^{-3}) の 0.001% 程度である。また、CuCl や GaAs 等の化合物半導体ではこれよりかなり高いイオン化不純物が混入すると予測される。そのため、電荷非中性の効果調べることは、エネルギーバンドの異方性を考えることと同様、非常に重要である。今、 $n_h \leq n_e$ の場合を考える。正孔数に対する過剰電子数の割合を $\delta n_e\%$ で表した。ここで系は等方的 ($m_l/m_t = 1$) であり、電子正孔有効質量差は無い ($\sigma = 1$) 場合を想定するため、正孔数が過剰な場合も結果は同じである。有限温度 ($T = 0.01, 0.03$) における Δ_{k_F} の δn_e 依存性を図 E.1 に示す。電子正孔密度は $r_s = 1.0, 0.8$ について計算した。 r_s は本来電子正孔対数によって決めるため、 $n_e = n_h$ の場合のみに正確に得られるが、ここでは δn_e は n_e に対して非常に小さいので r_s を求めることに限って近似的に $n = (n_e + n_h)/2$ とした。 $T = 0.01$ に注目したとき、 Δ_{k_F} は δn_e の増加に対してある程度までは緩やかに減少するが、 $r_s = 1.0$ では $\delta n_e = 0.74\%$ 、 $r_s = 0.8$ では $\delta n_e = 0.66\%$ で急激に消滅する。これは過剰電子のために伝導帯と価電子帯のフェルミ面の形状の対称性が破れたためであり、上述の通り、エネルギーバンドの異方性差の効果と同様のメカニズムである。この結果は言い換えれば、イオン化不純物の濃度を十分低く抑えることができれば電荷の非中性は電子正孔 BCS 状態に大きな影響を与えないこととなる。 $T = 0.03$ については、 $r_s = 1.0, 0.8$ ともに $\delta n_e \sim 2.3\%$ 程度まで Δ_{k_F} は有限の値をとる。これは、温度が高くなるにつれ、 $e_{\mathbf{k}}^{\alpha(\beta)} = 0$ 前後でのボゴリューボフ準粒子の分布関数の $e_{\mathbf{k}}^{\alpha(\beta)}$ に対する変化が緩やかになるためである。

さらに Kopaev は、電荷の非中性は電子正孔 BCS 秩序を破壊する反面、エネルギーバンドの異方性差による電子正孔 BCS 秩序の消滅効果を軽減する働きがあると予測した²⁾。

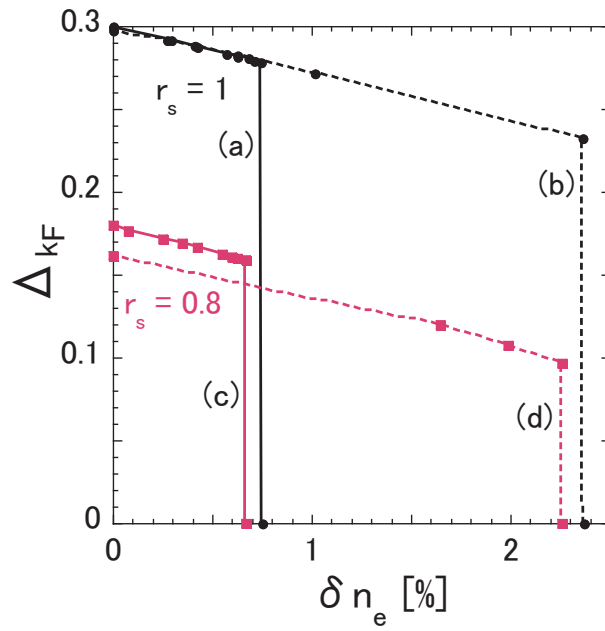


図. E.1: 電子正孔 BCS エネルギーギャップに対する電荷非中性の効果
 $(\sigma = 1, m_l/m_t = 1, (a)T = 0.01, (b)0.03, (c)T = 0.01, (d)0.03)$

なお、清水らは電子正孔系において電子が僅かに過剰に存在しその電子同士に引力相互作用が働いている場合、電子・電子相関もできて超伝導状態になるが、このとき超伝導 BCS 秩序は電子正孔 BCS 秩序のない場合より数桁大きくなることを平均場近似を用いた計算により予測した。清水らはこれを、電子正孔 BCS 状態にある電子と正孔が分極した媒体となり、電子・電子相関を増強しているためだと考えている³⁾。

参考文献

- [1] F. M. Steranka and J. P. Wolfe, Phys. Rev. B **34** 1014 (34).
- [2] Yu. V. Kopaev, Fiz. Tverd. Tela. **8**, 223 (1966) [Sov. Phys. Solid State 8, 175 (1966).].
- [3] M. Shigemori, A. Shimizu, T. Brandes and J. Inoue, J. Phys. Soc. Jpn. **68** 2194 (1999).

謝辞

本論文の研究は、奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科物質創成科学専攻複雑系解析学講座博士後期課程及び日本原子力研究所関西研究所光量子科学研究センター光量子シミュレーション研究グループ特別研究生在籍中に行われたものです。なお、この研究の一部は、奈良先端科学技術大学院大学学長助成金の支援のもとで行われました。初めに、同講座相原正樹教授並びに高橋聡助教授、稲垣剛助手、同グループ山極満グループリーダー、上島豊研究員に深くお礼申し上げます。先生方、上司の方々には研究全般はもとより進路や生活に関する事まで熱心かつ寛大なご指導を頂きました。学校生活及び研究所生活を共にした複雑系解析学講座と光量子シミュレーション研究グループの皆様には、公私に渡って様々な点でご助力頂きました。深く感謝いたします。最後になりましたが、私が大学院及び研究所生活を遂行する上でお力添えを頂いた全ての方に御礼申し上げます。有難うございました。

平成 17 年 6 月
溝尾数雅

業績一覧

論文等

- (1) Carrier Scattering by Intercalated Fe Spin Ordering in 2H-NbS₂ van der Waals Gap,
M. Koyano, K. Mizoo, K. Nagao, S. Katayama, Y. Yamamura and T. Tsuji,
Synth. Met. **121** (2001) 1341 (Proc. of ICSM2000, Gastein).
- (2) Effects of effective mass anisotropy and effective mass difference in highly photoex-
cited semiconductors,
K. Mizoo, T. J. Inagaki, Y. Ueshima and M. Aihara,
J. Phys. Soc. Jpn. (in press)
- (3) Enhancement effect of the *e-h* BCS order by uniaxial anisotropy of energy band,
K. Mizoo, T. J. Inagaki, Y. Ueshima and M. Aihara,
投稿予定

国内学会発表

- (1) 層間化合物 Fe_xNbS₂ における 伝導キャリアの磁気散乱
溝尾数雅, 片山信一, 小矢野幹夫, 山村泰久, 辻利秀
日本物理学会 2000 年 9 月 25 日 新潟大学
- (2) 電子正孔系 BCS 状態におけるエネルギーバンドの異方性の効果
溝尾数雅, 稲垣剛, 上島豊, 相原正樹
日本物理学会 2004 年 9 月 14 日 青森大学
- (3) エネルギーバンドの一軸性異方性による電子正孔 BCS 秩序の増大効果
溝尾数雅, 稲垣剛, 上島豊, 相原正樹
日本物理学会 2005 年 3 月 24 日 東京理科大学

国際会議等発表

- (1) Carrier scattering by intercalated Fe spin ordering in 2H-NbS₂ van der Waals Gap,
M. Koyano, K. Mizoo, K. Nagao, S. Katayama, Y. Yamamura and T. Tsuji,
International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals,
15-21 July 2000, Gastein.
- (2) Electron-hole BCS state in photoexcited semiconductors,
K. Mizoo, T. J. Inagaki, M. Aihara,
2nd K-JIST/NAIST Joint Symposium on Advanced Materials,
6-9 November, 2002, Nara.
- (3) Electron-hole BCS state in photoexcited semiconductors,
K. Mizoo, T. J. Inagaki, Y. Ueshima, M. Aihara,
6th International Conference on Excitonic Processes in Condensed Matter,
6-9 July 2004, Cracow.