The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Microscopic Theory of a small Electron-Hole Drop in Multivalley Semiconductors
Author(s)	玉谷, 知裕
Citation	大阪大学, 2012, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/59451
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【24】

氏　　名	玉　谷　知　裕（たま　や　とも　ひろ）
博士の専攻分野の名称	博　士（理学）
学　位　記　番　号	第　２５１８６　号
学位授与年月日	平成 24 年 3 月 22 日
学位授与の要件	学位規則第４条第１項該当 理学研究科物理学専攻
学　位　論　文　名	Microscopic Theory of a small Electron-Hole Drop in Multivalley Semiconductors （多谷構造を持つ半導体における電子正孔液滴の微視的理論）
論　文　審　査　委　員	（主査） 教　授　小川　哲生 （副査） 教　授　赤井　久純　　教　授　阿久津泰弘　　教　授　野末　泰夫 准教授　浅野　健一

論　文　内　容　の　要　旨

半導体中の励起子は高密度になるとガス相から電子正孔液体を形成する．この気液相転移の過渡過程において，電子と正孔は凝集して滴のような状態になることが知られており(電子正孔液滴)，近年ダイヤモンドにおいてその存在が確認されている．ダイヤモンドは他の間接遷移型半導体に比べ小さな誘電率をもっていることから安定した比較的小さい電子正孔液滴の存在が期待されている．しかしながらこのような実験的進歩にもかかわらず電子正孔液滴に対する理論的進歩はほとんどない．現在までに存在する微視的理論はすべて十分大きな半径，或いは十分小さな半径を持つ液滴に対するもののみである．そのため液滴サイズが大きいものから小さいものに移り変わるときに液滴の性質がどのように変化していくかということは分かっていない．そこで本研究では一つ電子正孔液滴に着目し，化学ポテンシャルや表面張力などの各種物理量の液滴サイズやバンド縮退度，電子と正孔の質量比に対する依存性を議論することにする．私の理論ではまず一様系の基底状態エネルギーの表式を経路積分法によって導出したのち，これを用いて電子と正孔 2 成分系における密度勾配展開を実行する．このとき，谷数無限大で厳密になる多バンド近似を用いる．そして全体のエネルギーを最小化する電子と正孔の密度分布を Euler-Lagrange 方程式によって決定する．その結果液滴内部の密度分布は液滴表面の厚みが半径程度になったときを境に異なる傾向を示すことが分かった．より具体的には表面の厚みより大きいサイズの液滴では液滴サイズを小さくするほど液滴の中心密度は大きくなるのに対し，表面の厚みより小さなサイズの液滴では液滴サイズを小さくするほど中心密度は小さくなることが分かった(図 1)．これは液滴の表面が明確に定義できる領域において表面張力は液滴全体を圧縮する役割を担うのに対し，表面が明確に定義できない領域ではもはや表面張力という概念自体が成立しなくなるため同様の効果は期待できないという理由のためである．さらに得られた密度分布を密度変化に比べ短い長さスケールで切り分け，各部分をその密度をもつ一様系と見なし，それらの寄与を足し合わせることで有限サイズの液滴からの発光スペクトルを計算した．その結果表面の液滴全体に対する効果が変化する兆候がスペクトルの形状にも反映される可能性があることが分かった(図 2)．

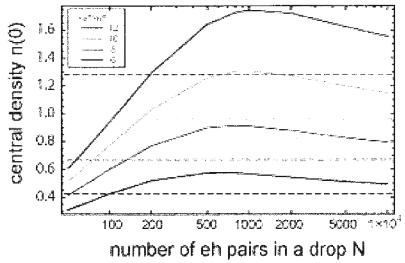

図1. 液滴サイズに対する中心密度の依存性

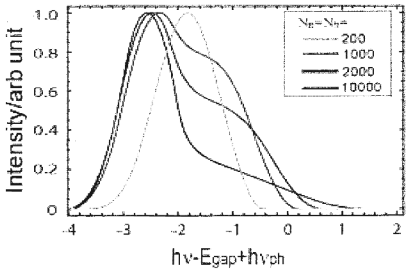

図 2. 発光スペクトルの液滴サイズ依存性

論　文　審　査　の　結　果　の　要　旨

半導体中のバンド間励起状態において重要な素励起である「励起子」は，伝導帯電子と荷電子帯正孔の束縛状態である。この数密度が高くなると，励起子束縛状態は電子と正孔とに分離し，気体相と液体相とが存在することが知られている。準熱平衡状態では，気液相転移やスピノーダル分解が生じ，その過渡過程において，電子と正孔は凝集して液滴のような状態（電子正孔液滴という)になる。 1970 年代にはゲルマニウムなどで大きな(マイクロメーターサイズの)電子正孔液滴が研究され，近年ではダイヤモンドにおいてより小さな電子正孔液滴が実験的に観測されつつある。このような実験的進歩にもかかわらず，電子正孔液滴のサイズクロスオーバーの研究は進んでおらず，中間サイズの電子正孔液滴を取り扱うことのできる理論はほとんどない。すなわち，現在までに存在する微視的理論はすべて，十分大きな半径或いは十分小さな半径を持つ液滴に対するもののみである。

本研究では，多谷構造の半導体を念頭に置いて一つ電子正孔液滴に着目し，小さな液滴から大きな液滴までをカバーできる理論を構築して，化学ポテンシャルや表面張力などの各種物理量の液滴サイズやバンド縮退度，電子と正孔の質量比に対する依存性を議論している。この理論ではまず，一様系の基底状態エネルギーの表式を経路積分法によって導出したのち，これを用いて電子と正孔 2 成分系における密度勾配展開を実行する。このとき，バンド谷数無限大で厳密になる多バンド近似を用いている。そして全体のエネルギーを最小化する電子と正孔の密度分布を，Euler-Lagrange 方程式によって決定している。

液滴内部の密度分布は，液滴表面の厚みが半径程度になったときを境に異なる傾向を示すことが分かった。より具体的には，表面の厚みより大きいサイズの液滴では液滴サイズを小さくするほど液滴の中心密度は大きくなるのに対し，表面の厚みより小さなサイズの液滴では液滴サイズを小さくするほど中心密度は小さくなることが分かった。これは，液滴の「表面」が明確に定義できる領域において表面張力は液滴全体を圧縮する役割を担うのに対し，表面を明確に定義できない領域ではもはや表面張力という概念自体が成立しなくなるため同様の効果は期待できないという理由のためである。さらに，得られた密度分布を密度変化に比べ短い長さスケールで殻状に切り分け，それらの寄与を足し合わせることで，有限サイズの液滴からの発光スペクトルを計算し，実験可能量とのつながりを考察している。表面の液滴全体に対する効果が変化する兆候が，発光スペクトルの形状に反映されることが分かった。

適用可能範囲と近似の妥当性を十分にわきまえた上での本研究は，小さな液滴と大きな液滴の性質の質的違いを明確にして，液滴のサイズクロスオーバー問題に対しての一つの新しい結果を示したと言える。よって，本論文は博士(理学)の学位論文として十分価値あるものと認める。