

論文審査の結果の要旨

氏名 加藤 洋生

本論文は10章からなる。第1章は序論である。2～5章は多重励起子の安定性に関する第1部であり、2章で概要、3章で計算手法、4章で計算結果と考察、5章でまとめを述べている。6～9章は励起子系の光学トラップに関する第2部であり、6章で概要、7章で計算手法、8章で計算結果と考察、9章でまとめを述べている。10章では研究全体の結論と展望を述べている。

第1章は序論である。固体中の電子正孔系には、励起子気体、電子正孔プラズマ、電子正孔液体、励起子ボーズ・アインシュタイン凝縮体といった様々な相が存在すると考えられている。しかし、励起子の多体束縛状態である多重励起子は、特に三体以上の束縛状態が存在するかどうか確立されていない。これを理論的に明らかにすることは、固体の光応答における多体相関の効果をより深く理解する上で重要である。また、励起子を狭い空間領域に閉じ込める技術があれば、電子正孔多体系の物理的性質を研究する上で有用である。このような背景を踏まえ、近年多重励起子由来と推測される発光ピークが観測されたダイヤモンドを対象として、多重励起子の安定性を数値的に研究すること、および、冷却原子系で使われている光学トラップの機構を利用して固体中の励起子系をトラップできるかを、二次元半導体グラフェンを対象に数値的に研究することという目的が述べられている。

第2～5章はダイヤモンド中の多重励起子の安定性に関する第1部である。

第2章では第1部の概要が述べられている。

第3章は理論的枠組みと計算手法について述べている。電子正孔系を $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 摂動に基づく有効質量近似ハミルトニアンで記述している。ブロッホ軌道の縮退自由度を実効的に取り入れていることや、有効質量の異方性が考慮されていることが特筆される。また、粒子間の相関を取り入れつつ計算コストの低いあらわに相関したガウス基底関数を用いている。

第4章は計算結果と考察を述べている。励起子、荷電励起子、励起子分子、荷電励起子分子、励起子三量体の安定性を示すことに成功している。特に、バルク固体での計算で、荷電励起子分子、励起子三量体の束縛が示されたのは初めてである。荷電励起子分子と励起子三量体は、単一バンドを仮定した計算では束縛しないことから、これらの束縛がブロッホ状態の縮退自由度に由来することを示している。また、束縛エネルギーは、実験値の80%程度を与え、定量的によく再現している。

第5章では第1部のまとめが述べられている。

第6～9章は励起子系での光学トラップの実現可能性に関する第2部である。

第6章では第2部の概要が述べられている。

第7章は理論的な背景と計算手法について述べている。レーザー場を印加された量子系における光ポテンシャル、輻射圧による系の加熱の理論を概説した後、密度汎関数理論とGW-BSE法を組み合わせた励起子状態の計算手法を説明している。

第8章は計算結果と考察を述べている。バンド構造が単純で、また励起子の束縛エネルギーが大きく実験に向いていることから二次元半導体グラファンを対象としている。計算の結果、光子エネルギー500 meV、強度 10^7 W/cm² のレーザー一定在波を用いることで、0.1 meV オーダーの光ポテンシャルを印加して励起子をトラップできることを示している。さらに、励起子の最低エネルギー状態は二重に縮退しているが、円偏光を使ってその一方を選択的にトラップする光励起子フィルターの可能性も示している。

第9章では第2部のまとめが述べられている。

第10章は研究全体の結論であり、本論文のまとめと展望が述べられている。

以上のように本研究では、計算コストの低い基底関数を適切に選ぶことで量子六体系までの波動関数を求め、バルク固体で初めて、ダイヤモンド中の荷電励起子分子と励起子三量体の安定性を示すことに成功している。その起源については、ブロッホ軌道の縮退が内部自由度として機能することでパウリ斥力を回避しているという結果が得られた。また、レーザー一定在波を用いた光トラップの機構によってグラファン中の励起子をトラップできること、円偏光を用いることで特定の励起子状態を選択的にトラップできることを示している。本論文の成果は、実用上重要な他の半導体の光応答における電子正孔多体系の効果をより深く理解することにつながる可能性を持つ点で、また、レーザーを用いて励起子系の状態を操作したりその振る舞いを研究したりする新しい実験技術につながる可能性を含む点で、その意義は大きい。

なお、本論文は、常行真司、明石遼介らとの共同研究であるが、論文提出者が主体となって研究計画の立案、数値計算コードの拡張、数値計算の実行及び結果の解析を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。