

n 型半導体における光電流のレーザー制御

(慶大院理工) ○鶴岡 歴人、菅原 道彦、藪下 聡

[序] 図 1 に示すような n 型半導体において 2 つのドナー電子状態 $|1s\rangle, |2p_0\rangle$ を重ね合わせた状態から、 $|1s\rangle, |2p_0\rangle$ のそれぞれと目標とする伝導状態とのエネルギー差に共鳴するレーザー場 $\hbar\omega_1, \hbar\omega_2$ を照射して伝導帯へと励起することにより、外部からの電圧をかけることなく結晶単位格子の z 軸に沿った光電流を流す方法が提案されている¹⁾。しかしこの方法はフェルミの黄金律に基づいた計算であり、初期段階の遷移しか考慮していない。そこで本研究ではこの系について時間依存のシュレーディンガー方程式を解き、ダイナミクスを考慮した制御レーザー場の設計を行った。

[理論] 基底として $|1s\rangle, |2p_0\rangle$ 、波数 \mathbf{k} をもつ伝導状態 $|\mathbf{k}\rangle$ を用い、全波動関数が

$$|\Psi(t)\rangle = c_{1s}(t)|1s\rangle + c_{2p_0}(t)|2p_0\rangle + \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}(t)|\mathbf{k}\rangle \quad (1)$$

で表される系に z 軸方向に振動するレーザー場 $E_z(t)$ を照射する場合を考える。(1)式の各係数の時間発展は時間依存のシュレーディンガー方程式

$$d\Psi(t)/dt = [H - \mu_z E_z(t)]\Psi(t) \quad (2)$$

を解くことにより求められる。ただし μ_z は双極子モーメントの z 成分である。伝導状態 $|\mathbf{k}\rangle$ の間の直接の相互作用は考慮せず計算を行い、得られた係数から伝導状態における電子の持つ z 軸方向の運動量期待値

$$\langle p_z(t) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} k_z |c_{\mathbf{k}}(t)|^2 \quad (3)$$

を求め光電流の大きさと方向を評価する。

まず運動量の大きな伝導状態の生成に有利な重ね合わせ状態 $|\Psi_i\rangle = c_{1s,i}|1s\rangle + c_{2p_0,i}|2p_0\rangle$ を求めるための計算を行う。初期状態 $|\Psi(0)\rangle = c_{1s}(0)|1s\rangle + c_{2p_0}(0)|2p_0\rangle$ に対して ω_1, ω_2 を持つレーザー場

$$E_z(t) = E_0[\cos(\omega_1 t) + \cos(\omega_2 t)] \quad (4)$$

を照射する場合について係数 $c_{1s}(0), c_{2p_0}(0)$ を変化させ、それぞれの場合について時間発展を計算する。そして $\langle p_z(t) \rangle$ の変化の振幅から最適な $|\Psi_i\rangle$ を判断することができる。この $|\Psi_i\rangle$ を考慮し、局所最適化理論により z 軸の正方向へ伝導状態を得るレーザー場の設計を行う。初期状態を $|\Psi(0)\rangle = |1s\rangle$ とし、評価指数は次のものを用いる。

$$y(t) = q_{12} S(\langle P_{1s} \rangle, \langle P_{2p_0} \rangle) + \sum_{\mathbf{k}} q_{\mathbf{k}} \langle P_{\mathbf{k}} \rangle \quad (5)$$

$\langle P_j \rangle$ は状態 $|j\rangle$ への射影演算子の期待値である。第 1 項の S は $\langle P_{1s} \rangle, \langle P_{2p_0} \rangle$ の関数であるが、これは求められた $|\Psi_i\rangle$ を作り出すためのものであり、その影響の大きさをパラメータ q_{12} で調整する。第 2 項は伝導帯への励起にかかわる項である。運動量の期待値の表式からわかるように z 軸の正方向に大きな運動量を持つためには伝導状態における分布が正の k_z を持つものに偏るようによければよい。第 2 項においてパラメータ $q_{\mathbf{k}}$ を $k_z > k_z'$ のとき $q_{\mathbf{k}} > q_{\mathbf{k}'}$ となるように指定すれば k_z の大きな状態の分布を増やすことができる。(5)の表式を具体的に決定した後、評価指数 $y(t)$ を単調増加させるレーザー場

$$E_z(t) = E_0 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial y(t)}{\partial \langle P_{\mathbf{k}} \rangle} \text{Im} \langle P_{\mathbf{k}} \mu \rangle \quad (6)$$

を計算により求める。

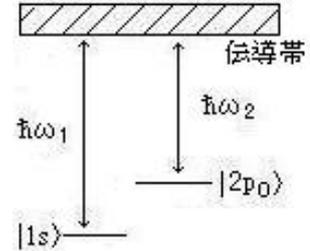


図 1

n 型半導体のエネルギー準位

[計算および結果] まず初期条件 $c_{1s}(0), c_{2p_0}(0)$ と $\langle p_z(t) \rangle$ の時間発展の関係についての結果を示す。行った計算では $0.1^3 \mu\text{m}^3$ の立方体 Si 結晶において、目標状態を $\mathbf{k}_+ = (0, 0, 5.0 \times 10^9 \text{ m}^{-1})$ を持つ z 軸正方向の伝導状態とし、他の伝導状態として $|\mathbf{k}_+\rangle$ とのエネルギー差が $\pm 10^{-22} \text{ J}$ であ

り波数ベクトルの異なる合計 82 個の状態を取り入れた。また、電場 (4) の振幅 E_0 は 10^{-3} V/m とし、回転波近似を適用した。図 2 は $c_{1s}(0) = 1/\sqrt{2}$ 、 $c_{2p_0}(0) = e^{i\theta}/\sqrt{2}$ として θ を変化させた場合、図 3 は $\theta = \pi/2$ 、 $|c_{2p_0}(0)| = \sqrt{1 - |c_{1s}(0)|^2}$ として $|c_{1s}(0)|$ を変化させた場合の $\langle p_z(t) \rangle$ である。これらの結果より、 $\langle p_z(t) \rangle$ の振幅が最大となる初期条件として $c_{1s}(0) = 1/\sqrt{2}, c_{2p_0}(0) = \pm i/\sqrt{2}$ が得られた。また、 $\langle p_z(t) \rangle$ の変化より、運動量が極大または極小となる時間でレーザー場の照射を停止することにより運動量の大きな伝導状態が得られることが示唆された。

大きな運動量を生じる $|\Psi_i\rangle$ は $|c_{1s,i}| = |c_{2p_0,i}|$ のときであるので、(5) の評価指数を

$$y(t) = -q_{12}(|c_{1s}(t)|^2 - |c_{2p_0}(t)|^2) + \sum_{\mathbf{k}_j} q_{\mathbf{k}_j} |c_{\mathbf{k}_j}(t)|^2 \quad (7)$$

とし、(6) のレーザー場を求めた。十分に大きな Si 結晶を考え、伝導状態として

$$\mathbf{k}_j = (k\gamma^{1/2} \sin[\frac{\pi}{4}(j-1)], 0, k \cos[\frac{\pi}{4}(j-1)]), j = 1, 2, \dots, 8 \quad (8)$$

$$k = 5.0 \times 10^9 \text{ m}^{-1}, \gamma = m_{\perp} / m_z = 0.19 \quad (9)$$

を満たす 8 つを取り入れた。表 1 のパラメータを用いた場合について、得られた制御レーザー場を図 4 に、評価指数 $y(t)$ を図 5 に示す。図 5 を見ると 1 ps 付近で $y(t)$ の時間発展が変化していることがわかる。 $t < 1$ では (7) の第 1 項が増大することにより $|\Psi_i\rangle$ が生成される。 $t > 1$ の細かい振動は状態 $|\Psi_i\rangle$ から伝導帯への励起を起こす部分であり、振幅の大きな部分は $|1s\rangle, |2p_0\rangle$ の相対位相が $\pi/2$ となる時刻と一致している。伝導状態として (8) を取り入れた系について

図 4 のレーザー場を照射したときの $\langle p_z(t) \rangle$ の変化を図 6 に示す。

図 6 より、 z 軸正方向の運動量を単調増加させるレーザー場が設計されたことが確認できる。

パラメータ	E_0	q_{12}	$q_{\mathbf{k}_1}$	$q_{\mathbf{k}_2}$	$q_{\mathbf{k}_3}$	$q_{\mathbf{k}_4}$	$q_{\mathbf{k}_5}$	$q_{\mathbf{k}_6}$	$q_{\mathbf{k}_7}$	$q_{\mathbf{k}_8}$
用いた値	10^6	10^{-6}	6	3	0	-3	-6	-3	0	3

表 1 レーザー場、評価指数のパラメータ

[参考文献]

1) G. Kurizki, M. Shapiro, and P. Brumer, Phys. Rev. B. **39**, 3435 (1989).

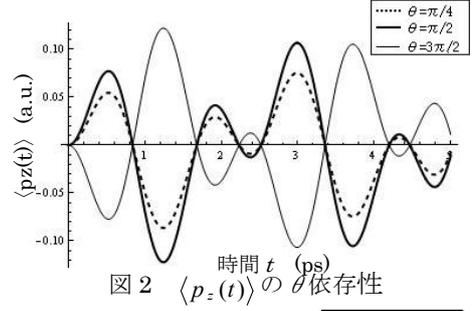


図 2 $\langle p_z(t) \rangle$ の θ 依存性

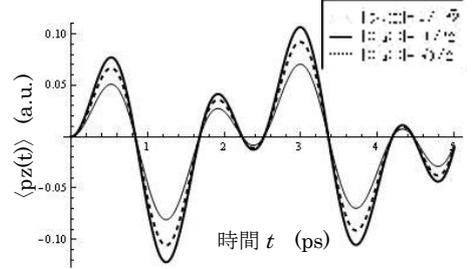


図 3 $\langle p_z(t) \rangle$ の係数依存性

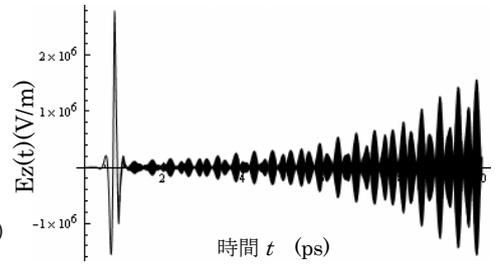


図 4 制御レーザー場

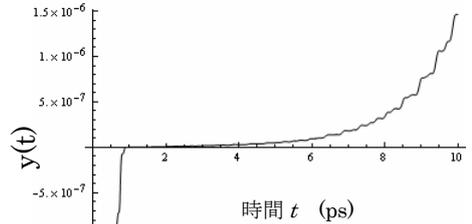


図 5 評価指数 $y(t)$

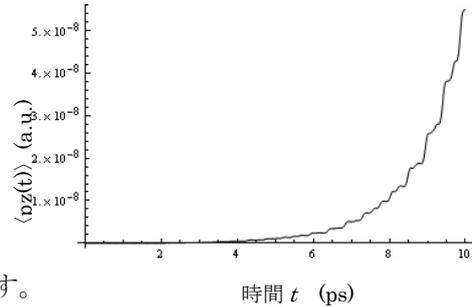


図 6 制御レーザー場中における $\langle p_z(t) \rangle$