

n 型半導体におけるドナー電子制御レーザー場の理論的設計

(慶大院理工) ○鶴岡 歴人、菅原 道彦、藪下 聡

[序]

Si 結晶に As、P など 5 価原子をドーピングした n 型半導体では、不純物上にゆるく束縛され水素様原子軌道の振る舞いをするドナー電子が電流の原因となる。このドナー電子の束縛状態として図 1 に示した基底状態 $|1s\rangle$ と Si 結晶単位の格子の z 軸方向を向いた $|2p_0\rangle$ の重ね合わせ状態から伝導帯へ励起することにより、外部から電圧をかけることなく光のみで方向の定まった電流を流す方法が提案されている¹⁾。この方法は高速な電流方向の切り替えなど、正確でコントロール可能な光電流の生成手法として期待されている。ただし文献 1) は、電流の見積りにフェルミの黄金律を用いて時間発展の初期段階を評価したのみであり、本来重要である初期状態としての重ね合わせ状態の生成方法、およびそれから伝導状態への励起といった実際には時間的に連続する量子ダイナミクスの全体を扱っていない。そこで本研究では時間依存のシュレーディンガー方程式を解くことにより系の時間発展を考慮した制御を目指す。初期状態として基底状態 $|1s\rangle$ を用い、ドナー電子を Si 結晶単位の格子 z 軸正方向へ運動させるために必要な 2 段階の操作を含むレーザー場の設計を局所最適化理論に基づいて行った。

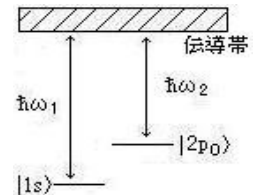


図 1 n 型半導体のエネルギー準位

[計算及び結果]

(i) 全波動関数

ダイナミクスの計算では、束縛状態 $|1s\rangle, |2p_0\rangle$ および、波数ベクトル \mathbf{k} を持ち、結晶格子により変調を受けた平面波で表される伝導状態 $|\mathbf{k}\rangle = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ ($u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は結晶の周期性を持つ関数) を考慮する。このときドナー電子の全波動関数は $|\Psi(t)\rangle = c_{1s}(t)|1s\rangle + c_{2p_0}(t)|2p_0\rangle + \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}(t)|\mathbf{k}\rangle$ のように書ける。レーザー場の設計では $|\mathbf{k}\rangle$ としてエネルギーが等しく ($E_0 = 0.97 \text{ eV}$ 、バンドの底付近) 同一平面上において方向が 45° ずつ異なる 8 つの状態 $|\mathbf{k}_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots, 8$) を考慮した。

(ii) 制御の目標とする重ね合わせ状態と伝導状態

制御で目標とすべき電流の発生に有利な重ね合わせ状態を調べるため、初期条件を $|\Psi(0)\rangle = c_{1s}(0)|1s\rangle + c_{2p_0}(0)|2p_0\rangle = |c_{1s}(0)\rangle|1s\rangle + \sqrt{1 - |c_{1s}(0)|^2} e^{i\theta} |2p_0\rangle$ として 2 色のレーザー光 $\varepsilon_z(t) = \varepsilon_0 [\cos(\omega_1 t) + \cos(\omega_2 t)]$ を照射する場合について、z 方向の運動量期待値 $\langle p_z(t) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} k_z |c_{\mathbf{k}}(t)|^2$ を計算した。まず、 $\varepsilon_0 = 1.3 \times 10^7 \text{ V/m}$ とし、 $|1s\rangle$ と $|2p_0\rangle$ の相対位相 θ と係数の大きさ $|c_{1s}(0)|$ を独立に変化させ、それぞれの場合について、 $\langle p_z(t) \rangle$ を求めた。結果を図 2、図 3 に示す。

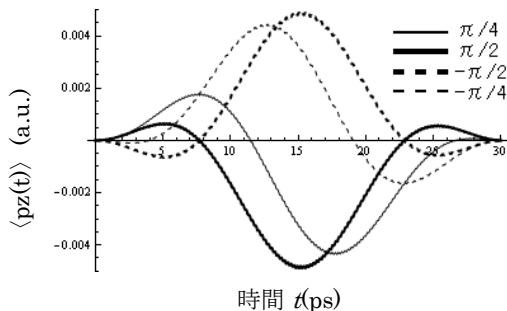


図 2 $\langle p_z(t) \rangle$ の θ 依存性

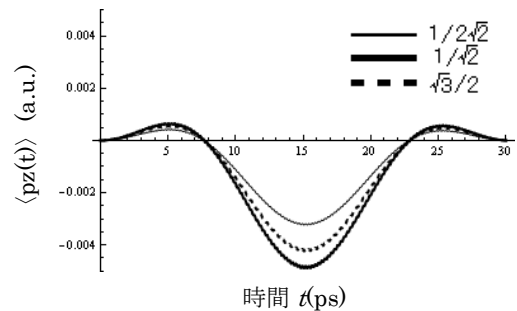


図 3 $\langle p_z(t) \rangle$ の係数の大きさ依存性

図 2 は係数の大きさを $|c_{1s}(0)| = |c_{2p_0}(0)| = 1/\sqrt{2}$ に固定して相対位相 θ を変えた場合、図 3 は相対位相を $\theta = \pi/2$ に、係数の大きさを $|c_{2p_0}(0)| = \sqrt{1 - |c_{1s}(0)|^2}$ とし、 $|c_{1s}(0)|$ を変えた場合の $\langle p_z(t) \rangle$ を比較したものである。これらより $\langle p_z(t) \rangle$ の振幅が大きいのは相対位相 $\theta = \pm\pi/2$ 、 $|c_{1s}(0)| = |c_{2p_0}(0)| = 1/\sqrt{2}$ のときであることがわかり、重ね合わせ状態 $1/\sqrt{2}(|1s\rangle \pm i|2p_0\rangle)$ から励起したときに大きな運動量変化が期待できる。しかし相対位相 θ の変化を止めることはできないため制御の目標には $|c_{1s}(0)| = |c_{2p_0}(0)| = 1/\sqrt{2}$ のみを取り入れた。次に伝導状態への励起について考える。z 軸方向の成分の大きな伝導状態の分布を増やすことのみを考慮して設計したところ、レーザー場ではなく静電場に対応する電場しか得られなかった。そのため、先に述べたのと同様の2色のレーザー光を照射した時の $\langle p_z(t) \rangle$ より、 $\langle p_z(t) \rangle$ が極大値を取る時刻の8つの伝導状態の分布を求め制御の目標とした。具体的には初期状態を $1/\sqrt{2}(|1s\rangle + i|2p_0\rangle)$ 、レーザー光の振幅を $\varepsilon_0 = 1.3 \times 10^7$ V/m とし $\langle p_z(t) \rangle$ を計算し、最初の極大値をとる時刻 t_m における分布 $P_n = |c_{k_n}(t_m)|^2$ を用いた。

(iii) レーザー場の設計

目標とした重ね合わせ状態と伝導状態を実現するため、評価指数として

$y(t) = -q_{ex} \sum_n^8 (P_n - |c_{k_n}(t)|^2)^2 - q_{12} (|c_{2p_0}(t)|^2 - |c_{1s}(t)|^2)^2$ を設定し、 $y(t)$ の時間微分が常に正となるように制御レーザー場を計算した(局所最適化理論)。 q_{ex}, q_{12} は 2 項の影響の大きさを調整するパラメータである。この $y(t)$ を用いて得られたレーザー場は目標の分布を実現することはできたが、照射時に得られる $\langle p_z(t) \rangle$ を計算したところ、一度

$\langle p_z(t) \rangle$ が増加した後に減少するものであった。そこで $\langle p_z(t) \rangle$ が最大になるときの $P_n = |c_{k_n}(t_m)|^2$ を再び伝導状態の目標として取り直し、再度計算を行った。得られたレーザー場を図 4 に示す。図 4 に見える振幅の大きな部分は伝導状態への励起に関わる部分である。図中右上部は 1ps 付近を拡大したものであり、レーザー場の振動数が $|1s\rangle, |2p_0\rangle$ のエネルギー差と

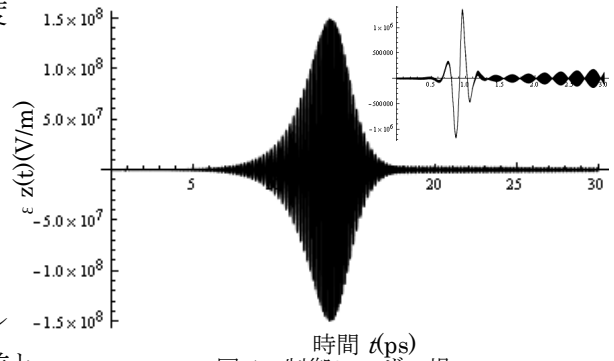


図 4 制御レーザー場

一致することから $|1s\rangle, |2p_0\rangle$ の重ね合わせ状態の生成に関わる部分であるといえ、2 段階の操作を含む一連のレーザー場が設計できた。

(iv) 連続な伝導状態を考慮したシミュレーション

本来伝導状態はエネルギー、方向について連続な無数の状態が存在するが、設計の段階では 8 つの伝導状態しか考慮していない。そこでそのようにして設計したレーザー場を照射した際の時間発展について、連続な伝導状態を考慮した計算²⁾を行い $\langle p_z(t) \rangle$ の変化からレーザー場の有効性を評価した。計算では伝導帯のうち目標状態付近のエネルギー (0.80~3E₀ eV) を持つすべての方向への伝導状態を考慮した。図 5 に示す $\langle p_z(t) \rangle$ の計算結果より、設計したレーザー場により、ドナー電子が z 軸の正方向へ運動することが確認できた。

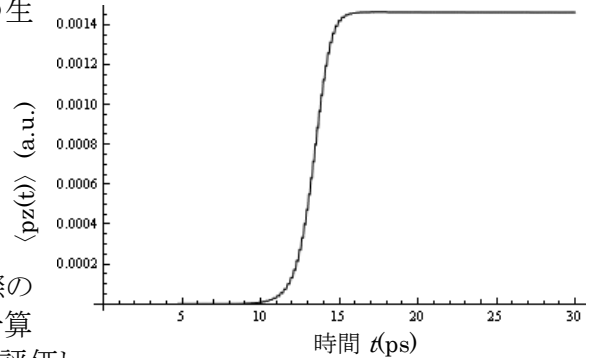


図 5 照射により得られる $\langle p_z(t) \rangle$

[参考文献]

- 1) G. Kurizki, M. Shapiro, and P. Brumer, Phys. Rev. B. **39**, 3435 (1989).
- 2) M. Shapiro and P. Brumer, Phys. Rep. **425**, 195 (2006).