

ドレスト光子が関わる量子的散逸構造

～ 最小作用の原理 vs. 最小エネルギーの原理 ～

坂野 齋

山梨大学工学部 *

(Dated: February 23, 2022)

ドレスト光子が関わるフォトンブリーディング [1] は間接遷移型半導体から高効率の発光素子を作り出すことを可能にしました。それがエポックメイキングであることは、発光波長を決めるのが従前のように物質のバンドギャップではなく、作成プロセス中の照射光波長であることです。

フォトンブリーディングでは、間接遷移型半導体に過剰に不純物ドーピングし、将来発光してほしい波長の光を照射しながらキャリア電流を流してアニールします。不純物が拡散し、たまたま発光に適した配置になると誘導放出によるエネルギー放出で冷却され、その配置が固定されます。さらに、このように作成されたフォトンブリーディングデバイスは、高効率発光のほか、巨大磁気光学効果、強磁性的磁気応答、光学フォノンの関与など、ドレスト光子が関わると思われる不思議な性質を伴います。フォトンブリーディングデバイスの一連の現象を非平衡開放量子系として理論的に記述することは、ドレスト光子の働きを理解する試金石だと私は考えています。

フォトンブリーディングデバイスの一連の現象の中に「磁気」に関わるものがあるのは、内在するベクトルポテンシャルが関わっていることを示唆します。物性物理学や分子化学では、物質に内在するスカラーポテンシャルは電荷密度間相互作用として必須のこととして考慮しますが、内在するベクトルポテンシャルを電流密度間相互作用として考慮することはありません。それは電流密度が常在する系を対象とすることが少ないからと思われます。ドレスト光子を相互作用を担う内在電磁場と捉えると、そこに蓄積された内部エネルギーが逃げ場を求めて発光する、というのがフォトンブリーディングデバイスの高効率発光のシナリオのように思われます。

ここで、ドレスト光子=相互作用を担う内在電磁場は人間が制御できない自由度であり、何らかの意味でエントロピーと結びつくものと想像すると、フォトンブリーディング系の類似として、プリゴジンらにより理論的記述がなされた、非平衡開放熱力学系の散逸構造 [2]

*Electronic address: banno@yamanashi.ac.jp

に思い当たります。系内で化学反応という非線形過程でのエントロピー生成と系外へのエントロピー散逸のバランスで達成される、平衡状態から遠い動的秩序状態として散逸構造は現れます。系に非線形性と散逸があることが必要条件であり、フォトンブリーディング系に想定される電流密度間相互作用と発光ということと対応が取れます。

プリゴジンらは、散逸構造と熱平衡状態の違いを次のように論じました。エントロピーの最大値原理（熱力学第2法則）を達成すべくエントロピーの1次変化量が0となった基準状態を考えます。もし、この基準状態が熱平衡状態であり、与えた揺らぎが微量なら、熱平衡状態の安定性から揺らぎは消失してエントロピー最大が保たれます。熱平衡状態から遠く離れた基準状態からは、系外へのエントロピーの散逸の代償として揺らぎが成長することがあり、これが散逸構造出現の兆候です。

フォトンブリーディングデバイスの発光という非平衡開放系の記述を、エントロピーの最大値原理のかわりに、最小作用の原理（作用積分の最小値原理）を使ってできないでしょうか？系外からのキャリア電流の注入、系内の内在電磁場が関わるキャリア電子・キャリア正孔の対消滅という非線形過程、発光という散逸の均衡による動的構造の出現の兆候として、基準状態からの作用積分の揺らぎの成長として捉えることができそうに思えます。¹

ここで、フォトンブリーディングデバイスの発光の記述にエントロピーを使わないのは、他の最大値原理、または、最小値原理があれば、プリゴジンの理論と相似なやり方で量子的散逸構造の兆候がとらえられるだろう、という予想だけでなく、原理的な理由もあります。流れ、運動量が関与するような開放系の状態は、最小エネルギー原理により決まる基底状態から遠くにあり、ハミルトニアン固有状態をつくり、基底状態からの摂動論で辿り着けない可能性が高いのです。プリゴジンの理論のエントロピーはギブスのエネルギーを基に定義されています。プリゴジンは賢くも散逸構造の記述に成功しましたが、そもそも熱力学関数というものはすべてエネルギーの次元をもっているのです。流れがある動的状態を記述することを想定していないと考えられます。それゆえ、現実を決める根本である最小作用の原理を拠り所にするのが相応しいのです。

量子論の教科書には、最小エネルギーの原理に基づき、ハミルトニアンと基底状態から出発する摂動論が記されています。流れがない系を対象とすることが多く、エネルギー一定の状態を使って議論しやすいので最小作用の原理から導かれた最小エネルギーの原理が便利です。物質を場として記述すると、摂動ハミルトニアン密度を時空間座標で積分しますが、空間積分は遷移行列要素の計算とされ、時間積分はときにエネルギー共鳴により目立った結

¹ この処方でも量子的散逸構造出現の兆候を捉えた後は、それを探索するもうひとつの作業が待っています。

果をもたらします。空間積分は消滅則をもたらすことはありますが、積分値の巨大化は想定されていません。凝縮系で場の空間積分の巨大化はありうるのですが、量子論は空間的に小さな領域にある原子分子からはじまった履歴からの習い性か、場の量の空間積分の大きさについてあまり気にすることはないように思います。

流れがある系で運動量共鳴ともいうべき空間積分の巨大化による現象を扱うには、物質を場として扱い、最小作用の原理を拠り所にするのが相応しい考え方です。実際、作用積分はラグランジュ密度の時間、空間積分であり、その時間微分は、ラグランジュ密度の空間積分です。それゆえ、作用積分の揺らぎが時間的に成長して散逸構造が出現するのは摂動ラグランジュ密度という場の量の空間積分増大の結果と見ることができます。

ドレスト光子が関わるフォトンブリーディング系の発光をはじめとして、動的秩序構造の記述には最小エネルギーの原理から最小作用の原理への先祖返りが必要と思われます。

-
- [1] Minh Anh Tran, Tadashi Kawazoe, and Motoichi Ohtsu. Fabrication of a bulk silicon p-n homojunction-structured light-emitting diode showing visible electroluminescence at room temperature. *Appl. Phys. A*, 115:105–111, 2014. DOI 10.1007/s00339-013-7907-9.
- [2] G. ニコリス and I. プリゴジーン. 散逸構造 – 自己秩序形成の物理学的基礎. 岩波書店, 1980.