

ドレスト光子の構成要素、フォノンはどこにいるか？

三宮 俊(株式会社リコー)

E-mail: suguru.sangu@jp.ricoh.com

ここ数年にわたり、ドレスト光子の数値シミュレーションについて検討を進めている。ドレスト光子の局在性や高速なエネルギー移動といった物理的な特徴を表現するために、ドレスト光子を量子場のキャリアと見なし、量子密度行列の手法を用いてドレスト光子の存在確率や基底状態間の遷移、外場への散逸プロセス等々をシミュレートしている。本シミュレーションの特筆すべき点は、ドレスト光子を単なる調和振動子と見なし、その構成要素には深入りしていないところである。換言すると、従来のモデルにおいて扱われる光子、励起子、格子振動(フォノン)といった素励起達を一纏めにして【ドレスト光子】と呼んでいる。誤解のない表現に改めるならば、ドレスト光子-フォノンである。このようなモデルから出発することで、ドレスト光子が質量の衣を捨て、自由光子として外場に放出されるような物理描像を定性的に説明することに成功している[1]。このドレスト光子のシミュレーションを、実験的に観察されているドレスト光子特有の物理現象の説明に適用しようとしているのが現在の研究開発フェーズである。実際の物理現象の説明を試みようとする、やはり励起子やフォノンといった用語との対応関係を求められることが多い。例えば、ドレスト光子-フォノン(DPP)援用アニールと呼ばれる現象(デバイス作製方法)は、シリコンのような間接半導体に光を照射しながらドーパント(ボロン)をバイアス電流印加により物質中に拡散させると、ドーパントの拡散が自律的に停止するものであり、2個または複数のドーパントが近接する状況下でドレスト光子が局在し、またフォノンとの結合が生じることで誘導放出を促し、不純物位置近傍が冷却されるといった解釈が為され、フォノン、特にコヒーレントフォノンが介在することが重要なメカニズムとして、数々の実験結果をもって証明されている[2]。前置きが長くなったが、本稿では、我々の数値シミュレーションで取り扱う構成要素を一纏めと見なした【ドレスト光子】において、実験的に介在が認められているフォノンに対応するものが何であるか、という点について思考を巡らせてみたい。(混乱を避けるため、構成要素を一纏めにしたものをすみ付き括弧【ドレスト光子】として区別した。)現時点で明確な結論を出せている訳ではなく、我々のモデルが表現しているもの、表現できないものを概観することで、理解を深めたいというモチベーションであることを断っておきたい。

まず、我々のモデルでの【ドレスト光子】は離散的なノードに束縛された調和振動子であり、隣接ノードもしくは離れたノード間を生成と消滅を繰り返しながら伝搬していく。ドレスト光子を、励起子ポラリトンを介在したエネルギー移動であると考えれば、電気双極子-電気双極子相互作用の拡張のような形で記述される[3]。励起子ポラリトンの分散曲線の曲率により有効質量が与えられ、ノード間の相互作用は有限距離をもつ湯川関数により記述され、これが局在性の源となる。この時点では、フォノンが登場していない。上述した DPP 援用アニールの様相からフォノンの役割を推察すると、これは急峻な電場勾配が結晶格子を歪ませ、長波長近似を破綻させることで間接半導体の光学禁制遷移を許容遷移に変える役割を担っている。その結果、ドレスト光子のエネルギーの一部を自由光子として外界に放出することができる。したがって、フォノンは局在するドレスト光子と

同じ場所に留まり、外部熱浴へのエネルギー散逸を誘導している。我々のモデルで同様の現象を表現しようとする、相互作用ハミルトニアンに【ドレスト光子】をノードに留めるための空間的な異方性を与えるか、応答に遅延を付与しその場に【ドレスト光子】を留まらせるかの2つの導入手段が考えられる。前者については不純物の有無によりノード間の結合強さに違いがあるとして、すでに導入済みである。後者は、相互作用ハミルトニアンの対角成分に各ノードに留まる強さを自己エネルギーとして導入すればよさそうであるが、物理的な解釈の難しさから、いまの時点では明示的に含めていない。(量子ウォークの検討ではフォノンによる影響を自己ループとして含めているが、我々のモデルでは湯川関数で相互作用を表現しており、距離がゼロの点では発散してしまう。ノードのさらに内部構造まで言及する必要がありそうであり、単なる調和振動子として記述しよう、という戦略から逸脱してしまう。) 光学禁制遷移を許容にする効果については、【ドレスト光子】の空間分布(対称性または非対称性)と熱浴へのエネルギー散逸が現状のモデルで関係づけられており、改めて導入する必要はなさそうである。フォノンをドレスト光子が局在する場に留めることについて再考したい。我々のモデルにおいてフォノンの寄与が欠落しているかと言うと、必ずしもそうではないと考えている。各ノードにおける【ドレスト光子】の有無を表わした基底関数を、系内の【ドレスト光子】の空間分布を反映するように定常解を用いて対角化した基底関数に変換すると、変換後の相互作用ハミルトニアンに対角成分が現れ、すなわち、【ドレスト光子】をその場に留める効果が表現されている。各ノードにドレスト光子をその場に留める機構はないが、複数のノード間のコヒーレントな結合により、局在性の強い【ドレスト光子】成分ほど長い寿命を持ち、フォノンが停留するがごとく機能している。DPP 援用アニールにおいて、格子定数の整数倍の間隔を有してドーパントが固定されるという実験結果とも対応していそうである。我々のモデルに、なぜフォノンに相当する特性が内在しているかと言うと、結局のところ、ノードに束縛された【ドレスト光子】としてあらゆる素励起を集約させているためと考えられる。

以上のように考えると、量子ウォークを用いて検討されているモデル(ドレスト光子2成分、フォノン1成分により構成)との若干の差異は感じるものの、実験状況を説明する要素としては我々のモデルにおいても欠落部分はないと考えられる。我々のモデルは、【ドレスト光子】の局在を多数の高励起状態の重なりによる欠陥や境界部への確率の集中(逆正弦法則)と捉え、並進対称性などに基づく少数のきれいなモードで対角化することはできない、という想定からスタートしている。フォノンや励起子といった個別構成要素(物理的実体?)との対応について議論するときには、その説明に必要なモードや構造を抽出する変換方法、分解方法が常に付きまとうことになる。このあたりの問題への対応方針や各種モデル間の相互関係の詳細について、今後備えていく必要性を改めて感じている。

参考文献

- [1] S. Sangu and H. Saigo, *Symmetry* 13 (2021) 1768.
- [2] M. Ohtsu, *Silicon Light-Emitting Diodes and Lasers*, (Springer Cham, 2016).
- [3] S. Sangu, K. Kobayashi, A. Shojiguchi, and M. Ohtsu, *Phys. Rev. B* 69 (2004) 115334.