

半導体における中赤外領域強光子場現象の理論的解析

Theoretical analysis on strong field induced phenomena in semiconductors

佐藤駿丞

筑波大学 計算科学研究センター

1. 研究目的

『光による物性の制御、新奇な物性の創発』は光物性物理学の究極の目標の一つである。近年のレーザー技術の発展により、高強度な光によって固体中の電子を非摂動領域で駆動することで、様々な非線形光学現象を調べ、制御することが可能となって来た。特に最近では、高強度な光を固体に照射することで、入射した光の数十から百倍程度のエネルギーを持つ光が物質から放たれる「固体からの高次高調波発生現象」が大きな興味を持たれ研究が進められている。高次高調波発生は、光と物質の非線形相互作用を介した極限的な光子エネルギーのアップコンバージョン過程であり、新奇な光源の開発や、非線形過程を介した物質内の電子ダイナミクスを観測するための新奇な実験手法として様々な応用が期待されている。

我々はこれまで、量子マスター方程式と強束縛モデルを結合した理論的枠組みにより、光が駆動するグラフェン(単層のグラフェイトシート)における非線形・非平衡電子ダイナミクスを理論的に調べてきた。この理論的枠組みでは、光による極限的な非線形駆動と物質内の緩和現象の両方を扱うことが可能である。この手法を応用することでグラフェンにおける光誘起異常 Hall 効果や高次高調波発生、光起電力効果等について解析してきた。本研究では、この理論的枠組みを半導体である GaAs に応用することで中赤外光領域における非線形光学現象の理論的解析を行い、半導体における光駆動非線形・非平衡現象の微視的機構を明らかにするとともに、光駆動現象の制御方法を発展させることを目的としている。また、強束縛モデルに基づく量子マスター方程式の計算コードを GPU に対応させることで、次年度以降のプロジェクトの加速を目指す。

2. 研究成果の内容

本研究では、量子マスター方程式と強束縛モデルを結合した理論的枠組みを用いて、高強度レーザー照射下における半導体 GaAs 中の電子ダイナミクスを計算し、光が駆動する高次高調波発生現象の微視的解析を行った。また、理論計算結果を、京都大学化学研究所の実験グループの実験結果と比較することで、実験で観測された高調波発生における特異なレーザー強度依存性、楕円率依存性、および方位角依存性の解析を行った。その結果、高次高調波発生における半導体特有の光のパラメータ依存性は、半導体における特定のバンド構造と、その構造に由来する複数の非線形な励起経路の干

渉に起因していることが明らかになった。この研究成果は、固体高次高調波発生の微視的機構に関する理解を進展させると同時に、効率的な高調波発生を実現するための基盤となる知見を提供するものである。

また、本プロジェクトでは、上記の量子マスター方程式と強束縛模型を組み合わせた計算コードの高度化のため、GPU を用いた計算の実行に着手した。東京大学情報基盤センター及び筑波大学計算科学研究センターが主催する GPU 移行相談会に参加するなど、計算コードの GPU 対応を進めている。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

上記の半導体 GaAs からの高次高調波発生の研究においては、京都大学化学研究所の実験グループと筑波大学計算科学研究センターの理論グループの共同研究により、実験と理論の両面から高次の非線形光学現象が調べられている。実験結果は、現実の現象を直接測定する重要な研究手法である一方、現象の背後にある微視的な情報を調べることは容易ではない。学際共同利用プログラムを活用したスーパーコンピュータによる微視的な電子ダイナミクス計算を行うことで、実験では調べにくい微視的情報にアクセスできるようになり、実験で測定された現象の背後にある微視的な物理過程を明らかにすることができる。

4. 今後の展望

今回の研究では、高次高調波発生と呼ばれる高次の非線形光学現象の背後にある微視的な物理過程の研究を行った。しかし、今回の解析では、微視的な電子のダイナミクスの役割が完全に解明されたわけではない。今後はより詳細な解析によって、Brillouin zone 内でのどのような電子のダイナミクスが高調波発生の光のパラメータ依存性に寄与しているのかを明らかにし、高次高調波発生およびその他の非線形光学現象を効率的に駆動するための方法論を構築していく必要がある。今後の理論計算では、このような点に焦点を当て、さらなる電子ダイナミクスの計算を実行していく予定である。

5. 成果発表

(1) 学術論文

Fumiya Sekiguchi, Minoru Sakamoto, Kotaro Nakagawa, Hirokazu Tahara, Shunsuke A. Sato, Hideki Hirori, Yoshihiko Kanemitsu, "Enhancing high harmonic generation in GaAs by elliptically polarized light excitation", Phys. Rev. B 108, 205201 (2023)

(2) 学会発表

(3) その他

筑波大学計算科学研究センター 2023 年度学際共同プログラム利用報告書

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	199,800	0
Wisteria/BDEC-01	○	1,000	0
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			