

## 時間分解動的 Franz-Keldysh 効果観測の理論及び第一原理計算

### Calculations for the time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect

原子力機構関西<sup>1</sup>, マックスプランク研究所<sup>2</sup>, 筑波大<sup>3</sup>, 筑波大計算科セ<sup>4</sup>, ワシントン大<sup>5</sup>

○乙部 智仁<sup>1</sup>, 篠原 康<sup>2</sup>, 佐藤駿丞, 矢花一浩, George F. Bertsch

JAEA KPSI<sup>1</sup>, Max-Planck Inst.<sup>2</sup>, Univ. of Tsukuba<sup>3</sup>, CCS Univ. of Tsukuba<sup>4</sup>, Univ. of Washington<sup>5</sup>

○T. Otoe<sup>1</sup>, Y. Shinohara<sup>2</sup>, S. A. Sato<sup>3</sup>, K. Yabana<sup>3,4</sup>, G. F. Bertsch<sup>5</sup>

E-mail: otoe.tomohito@jaea.go.jp

固体と超短パルスレーザーの相互作用の研究は、主にレーザー励起後の光学特性の変化の観測によってされている。しかし近年のアト秒パルスや高強度 THz 光の発展により、周期的光電場中での光物性変化の観測が可能となってきた[1,2]。一方で、このような時間分解での分光実験を正しく取り扱う理論及び計算手法の発展は遅れている。本研究では、強い周期的電場に曝された誘電体の代表的な光物性変化であり、超高速な光スイッチに繋がる現象としても注目されている、動的 Franz-Keldysh 効果(DFKE)の解明を目指している。

DFKE に対する理論研究は過去幾つか報告されているが、時間分解分光による誘電関数の時間変化を扱えるものは未だない状況である。我々は二つのアプローチから DFKE の理論研究を行った。まず一つ目に、時間依存密度汎関数法(TDDFT)に基づいた第一原理シミュレーション[3]によるダイヤモンドの中赤外光 Pump-紫外光 Probe 数値実験を行った。その結果、Pump 光の比較的弱い時には DFKE による物性変化の時間変化と、光電場の位相が大きくずれており、Pump 光強度を増大させるに従って位相は一致して行くことが分かった。

次に我々は、このような Pump-Probe 実験に対応した誘電関数を計算する解析的理論を、Houston 関数[4]とパラボリックバンドを仮定して構築した。その結果上記の第一原理シミュレーション結果を定性的に再現する事ができた。この解析理論は、一般的な定常状態での誘電関数の理論式と、定常電場による非平衡状態を記述する Tharmalingam の理論[5]を繋ぐ、新しい非平衡状態での光学応答理論である。この理論からフォトリックサイドバンドの生成とポンドロモーティブエネルギーによるバンドギャップ上昇が DFKE の時間依存性を理解するのに重要であることが分かった。

講演では計算結果共に、計算手法及び解析理論の解説を行う予定である。

[1] Tim Paash-Colberg *et al*, Nature Photonics 8, 214 (2014)

[2] Fabio Nobelli, *et al*, Scientific Reports 3, 1227 (2013)

[3] T. Otoe, *et al*, Phys. Rev. B 77, 165104 (2008)

[4] W. V. Houston, Phys. Rev. 51, 184 (1940)

[5] K. Tharmalingam, Phys. Rev. 130, 2204 (1963)