

レーザーによる固体電子励起過程のための Keldysh 理論の再構築

Revise of the Keldysh theory for the electron excitation in a solid

○乙部智仁¹、篠原康²、佐藤駿丞³、矢花一浩³

(1. JAEA 関西、2. Max-Planck Inst.、3. 筑波大)

○T. Otobe¹, Y. Shinohara², S. A. Sato³, and K. Yabana³

(1. JAEA, 2. Max-Planck Inst., 3. Univ. Tsukuba)

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

超短パルスレーザーによる固体電子励起過程の超高速観測が可能となりつつあり、それに対応する理論およびシミュレーション手法が必要となっている。レーザーと固体の相互作用を最も正確にかつ現実的な計算量でシミュレートできる手法として、発表者が研究を進めている時間依存密度汎関数法(TDDFT)の実時間計算がある[1]。しかし、大規模計算機の利用が不可欠であり、手軽な道具とは言い難い。

本研究では、長年固体電子励起過程の解析的理論として利用されている Keldysh の理論式[2]を再構築することで、各多光子過程の寄与や電子-空孔対の Bloch 位相空間上での分布を解析できるようにした。

図1に本研究で得られた α 水晶の電子励起確率のレーザー電場依存性を示した。レーザー波長は800nmとした。比較対象として Keldysh 理論式による結果と単純な多光子過程の依存性も示した。この結果から、まず我々の解析的式が Keldysh 理論を再現していることが分かる。

次に、励起確率における各多光子過程の寄与を図2に示した。レーザー強度が増加するに従い、励起に必要な光子数が増加していることが分かる。これは Ponderomotive energy によるバンドギャップの実効的増加によるものである。また、光子数の違いは Bloch 位相空間上の電子

-空孔対の分布の変化も伴うことも明らかとなった。

講演では、計算結果の詳細と TDDFT による第一原理計算との比較も行い、解析的理論の信頼度について議論する。

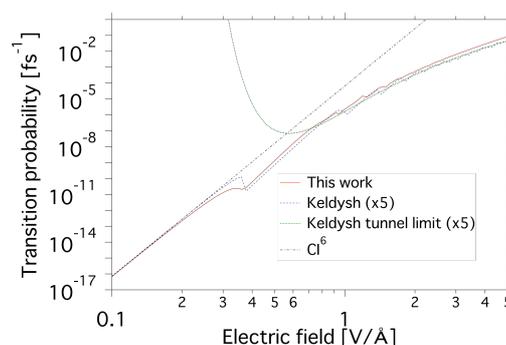


図1 α 水晶の電子励起確率のレーザー電場依存性。本研究(赤実線)を Keldysh 理論(青破線および緑点線)と比較した。

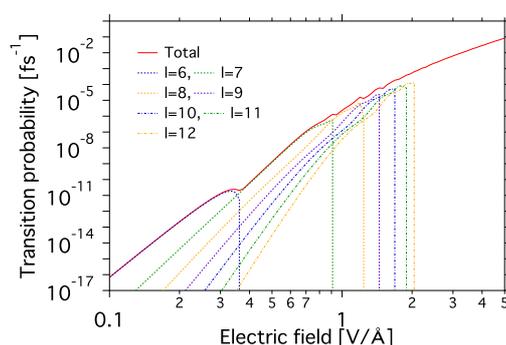


図2 電子励起確率における各 l -光子過程の寄与。

[1] T. Otobe, et al, PRB77, 165104(2008)

[2] L.V. Keldysh, Sov. Phys. JETP20, 1307(1965)