

近接場光によるシリコン半導体の波数励起

Wavenumber Excitation of a Silicon Semiconductor by an Optical Near-Field

分子研¹, 東大院工² °野田 真史¹, 山口 真生², 信定 克幸¹

IMS¹, Univ. Tokyo², °Masashi Noda¹, Maiku Yamaguchi², and Katsuyuki Nobusada¹

E-mail: noda@ims.ac.jp

シリコン半導体の光吸収効率が低い大きな理由の一つに、そのバンド構造に起因した間接遷移型（光励起前後の波数が異なる）の物質であることが挙げられる。可視光が持つ波数では小さ過ぎるために直接的な励起が出来ず、フォノンを介して異なる波数の収支を合わせる間接的な光励起が考えられるが、その遷移効率は非常に低い。もし何らかの光を使って、シリコンを直接的に励起することが出来れば、シリコンの光高機能化に極めて重要な寄与をすることが期待できる。我々はここ最近、近接場光を用いてこの問題に取り組んできた。近接場光は極めて狭い空間領域に局在することが可能であり、それゆえに波数の幅（不確定性）が大きく、可視光に比べて3桁も大きな波数を持ちうる。実際に、近接場光の高い波数成分によって間接バンドギャップ型物質を直接的に光励起できることを、解析モデルを用いて明らかにした[1]。本研究では、より現実的な系であるシリコン半導体における近接場光励起を、第一原理計算に基づく電子励起ダイナミクスにより検証した。

我々が開発してきた実時間・実空間光励起電子ダイナミクス法 GCEED[2]を、波数励起を扱うために拡張した。通常バンド計算で用いられる Bloch の境界条件では異なる波数間の光励起を扱うことができないため、代わりに Born-von Karman の境界条件を採用した。

水素終端シリコン 3 bilayer を対象とした。近接場光照射下における遷移確率の見積もり[1]により、 Γ 点の最も高い価電子帯から $(0, \pi/L_y, 0)$ 点の最も低い伝導帯への遷移が起こりやすいことが分かり、それらのエネルギー差は 1.6eV である。実際の近接場光励起でも異なる波数間におけるそれらのバンド間の光吸収は 1.6eV 付近で立ち上がっていることが分かった(図 1)。この近接場光を用いた異なる波数への直接励起による吸収は、通常のレーザー光による吸収よりも1桁大きく、シリコンの光高機能化に強くつながると言える。

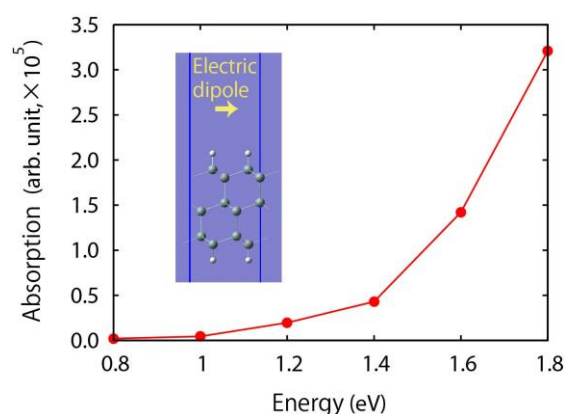


Fig. 1: Absorption from a highest valence band to a lowest conduction band with different wavenumbers by near-field excitation.

[1] M. Yamaguchi and K. Nobusada; Phys. Rev. B, **93**, 195111 (2016).

[2] M. Noda *et al.*; J. Comput. Phys., **265**, 145 (2014), M. Noda *et al.*; JPS Conf. Proc., **5**, 011010 (2015), K. Iida *et al.*; J. Phys. Chem. C, **120**, 2753 (2016).