

コヒーレントフォノンとプローブ光シグナルの位相差の 理論解析およびシミュレーションによる検証

Theoretical and Simulation Study of Phase Difference

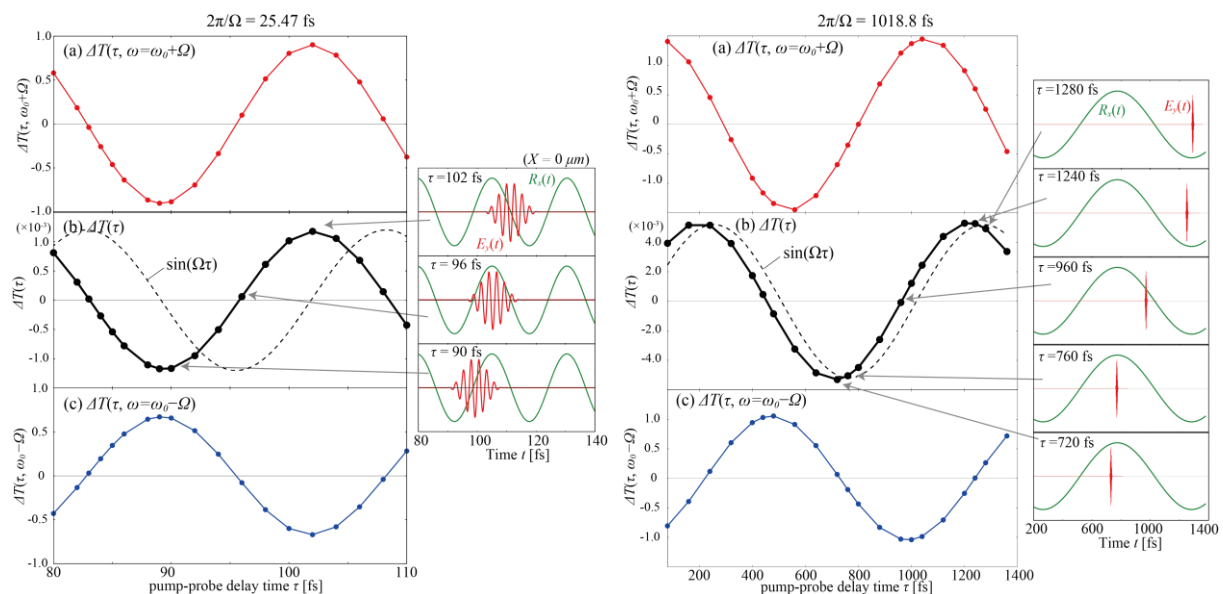
between Probe Signal and Coherent Phonon

筑波大・計科セ¹ ○山田 篤志¹, 矢花 一浩¹

Univ. Tsukuba¹, °Atsushi Yamada¹, Kazuhiro Yabana¹

E-mail: ayamada@ccs.tsukuba.ac.jp

瞬間誘導ラマン散乱機構(ISRS)において、バンドギャップよりも低いエネルギーの超短パルス(ポンプ光)によりコヒーレントフォノンが生成され、プローブ光によりその振る舞いが時間領域で観測される。理論および実験データに基づく理解は 1995/1997 年の Merlin の論文で示されており[1]、ポンプ・プローブ遅延時間 τ の関数で計測されたコヒーレントフォノンは $\sin$ 型であると考えられている。生成されるフォノンが $\tau=0$ を起点とした $\sin$ 型関数であることを考えればプローブ光による計測も同様に $\sin$ 型になることは直感的にも理解しやすい。当研究グループでは昨年、第一原理計算に基づく Maxwell + TDDFT + MD マルチスケールシミュレーションを開発するとともにダイヤモンドの ISRS 機構のシグナルを再現した。しかしながら、計算結果はフォノンが $\sin$ 型であるにもかかわらず透過変化シグナルは位相が $\pi/2$ 異なる $\cos$ 型であり、これまで考えられてきた $\sin$ 型ではなかった。本研究では、一見矛盾して見える $\sin/\cos$ 型のシグナルを理解するため Merlin の理論式を再考し、シグナルとフォノンとの位相差がフォノン周期や試料の厚さなどの物質系に依存することを示す。同時にポテンシャルモデルに基づくマルチスケールシミュレーションにより、フォノン周期の異なるダイヤモンド型モデル系(厚さ 6 μm)を用いて透過・反射変化を数値的にも検証した。このモデルにおける解析の結果、フォノン周期が 25fs のダイヤモンドでは $\cos$ 型(下図の左側)になり、Merlin の論文で示されているような周期が 1ps 程度の長い系ではほぼ $\sin$ 型(下図の右側)になる。周波数分解したスペクトルの τ 依存性については物質系とプローブ光スペクトル形に依存し、これについても本発表で議論する。



[1] Y. Liu, et al, *Phys. Rev. Lett.*, 75,334 (1995), R. Merlin, *Solid State Comm.* 102, 207 (1997)