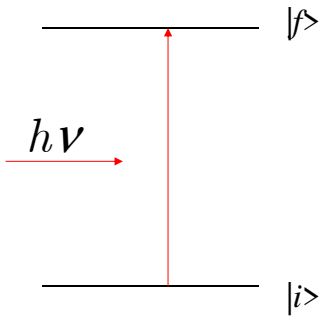
光量子エレクトロニクス特論

1. 電磁気学の復習
2. 量子力学の復習
3. 状態ベクトルとシュレディンガー方程式
4. 時間依存のシュレディンガー方程式
5. 密度行列法
6. 電子と光の相互作用-古典振動子モデル
7. 電子2準位系とブロッホ方程式
8. 電子2準位系におけるコヒーレント光非線形効果
9. 2原子分子のエネルギー準位
10. 固体のエネルギー準位
11. 光学遷移と次元性
12. 光学遷移におけるクーロン相互作用の効果
13. フラーレンの電子状態と光学遷移
14. ナノチューブの電子状態と光学遷移
15.まとめ

光学遷移



電気双極子遷移

$$H' = \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{E}$$

$$\boldsymbol{\mu} \propto e\boldsymbol{r}$$

光学許容

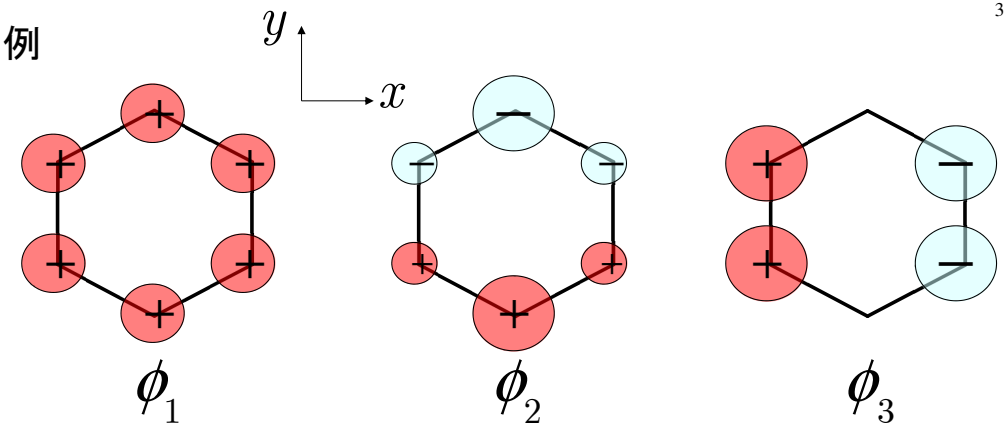
$$< f \mid H' \mid i >\neq 0$$

偶奇性　H': odd

$| i > \times | f >$: odd　光学許容

1s → 2p,・・・

例



$\phi_1 \rightarrow \phi_2$：$y$偏光で許容

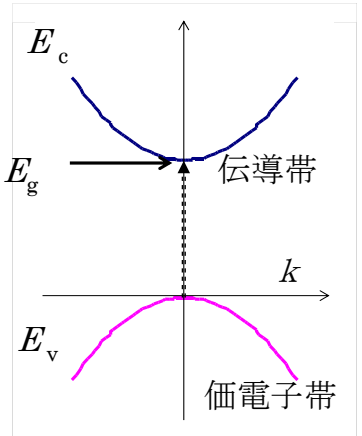
$\phi_1 \rightarrow \phi_3$：$x$偏光で許容

バンド間遷移

価電子帯から伝導帯への光学遷移

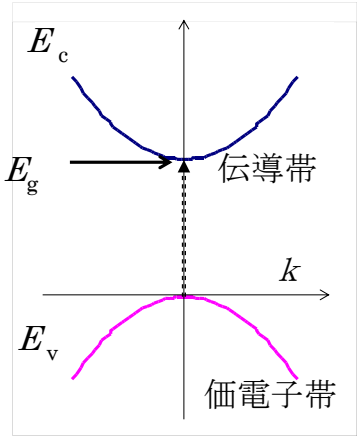
価電子帯の上端
伝導帯の下端　が共にk =0にあり、
両バンドが波数kに対して放物線
(k^2に比例)で与えられるとする。

価電子帯、伝導帯のk：k_v、k_c
エネルギーの原点：価電子帯の頂上
バンドギャップエネルギー：E_g



伝導帯：$E_c(k_c) = E_g + \hbar^2 k_c^2/(2m_e)$
価電子帯：$E_v(k_v) = -\hbar^2 k_v^2/(2m_h)$
(m_e、m_h：伝導帯、価電子帯の電子の有効質量*)

光遷移がおきるための条件：
- 電子状態間の遷移が許容である
- 波数ベクトル（すなわち運動量）k
  および
  エネルギーE　が保存される。



k 保存 → $k_c = k_v + K_{光} \sim k_v$

光の波数$K_{光}$はブリルアンゾーンに比べて小さい

→ k空間で垂直に遷移する。

（遷移の前後でkは保存）

垂直遷移を*直接遷移*という。

E 保存 → $\hbar\omega = E_c(k_c) - E_v(k_v)$

問題　結晶の格子の周期aを5Å、光の波長λを500nmとして、光の波数がブリルアンゾーンの端に比べて小さいことを確かめよ。

状態密度

スペクトルの形を考えるときには、
伝導帯、価電子帯の状態密度を考える必要がある。

状態密度：単位エネルギー範囲に存在する状態の数

例）$E(k) = Ak^2$の場合

まず、kからk+dkに存在する状態の数を求める。

$k = 2\pi s/(Na)$

（$s = 0, 1, 2, \cdots, N-1$）より

1次元の場合：

となりあう状態のkの間隔 → $2\pi/(Na)$

dk の間隔内にある状態数 → dk /$(2\pi/(Na))$

2次元の場合：

となりあう状態のkの間隔 → $2\pi/(Na)$

→ 一つのkの状態の占めるk空間の面積：$(2\pi/(Na))^2$

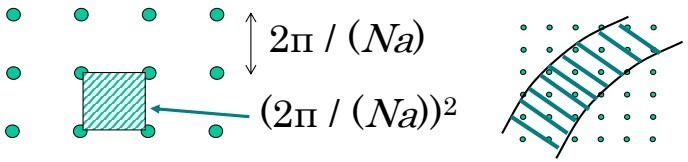
kからk+dkに対応するk空間の面積

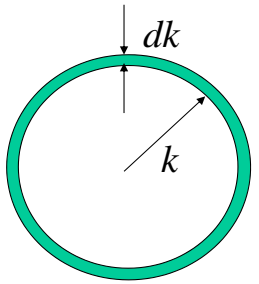
$\pi(k+dk)^2 - \pi k^2 = 2\pi k\,dk + \pi dk^2$

半径kの円周

kからk+dkに存在する状態の数

→ $2\pi k\,dk / (2\pi/(Na))^2$





3次元の場合：

となりあう状態のkの間隔 → $2\pi / (Na)$

→ 一つのkの状態の占めるk空間の体積：$(2\pi / (Na))^3$

kからk+dkに対応するk空間の体積

$4/3\pi(k+\mathrm{d}k)^3 - 4/3\pi k^3$

$= 4\pi k^2 \mathrm{d}k +$ ~~$\mathrm{d}k$の2次以上の項~~

（$4\pi k^2$：半径kの球の表面積）

kからk+dkに存在する状態の数

→ $4\pi k^2 \mathrm{d}k / (2\pi/(Na))^3$

次に、kからk+dkに存在する状態の数を

kからEの関数に書き換える。

$E=Ak^2$より、$dE=2Ak\,\mathrm{d}k$ → $\mathrm{d}k=(2A/k)\cdot\mathrm{d}E$

例えば3次元の場合

$4\pi k^2\,\mathrm{d}k \;/\; (2\pi/(Na))^3$

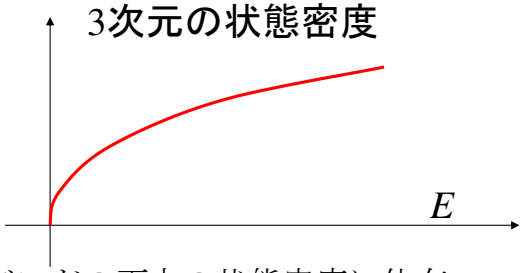
$=4\pi k^2 (2A/k)\cdot\mathrm{d}E / (2\pi/(Na))^3$

$\propto k\cdot\mathrm{d}E$

$\propto E^{1/2}\mathrm{d}E$

よって

三次元の状態密度：$E^{1/2}$



光学スペクトル形状：

遷移前のバンドと遷移後のバンドの両方の状態密度に依存

結合状態密度：

二つのバンドのエネルギー差に対する状態密度を考える必要がある。

問題

1、2次元の場合に状態密度がEにどのように依存するか、求めよ。

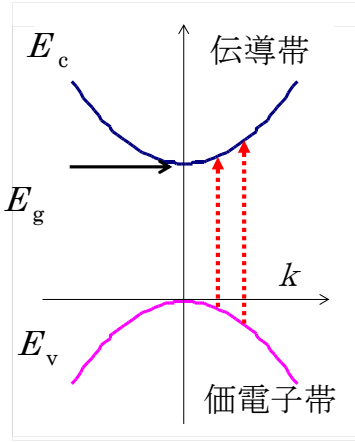
吸収スペクトルの形状を考える

直接遷移

かつ

価電子帯と伝導帯の間の

遷移(双極子遷移)が許容な場合



エネルギー保存則

運動量保存則　より、

光のエネルギーEは

$E = E_c - E_v$

$= E_g + \hbar^2 k_c^2/(2m_e) + \hbar^2 k_v^2/(2m_h)$

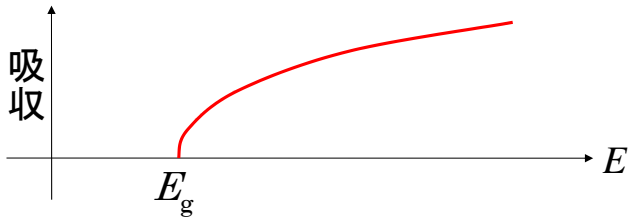
$= E_g + \hbar^2 k_v^2/(2\mu)$

但し、μは換算質量で$\mu = m_e \cdot m_h/(m_e+m_h)$

光遷移は全てのk_vの状態から起こる

ある光子エネルギーEでの吸収スペクトルの強度:
対応するk_vの値（エネルギー保存則より求まる）での
結合状態密度に比例

Eのk_v依存性が状態密度を考えたときと同じ形なので、
（$E \propto k_v^2$）
3次元の場合、結合状態密度は（$E-E_g$）$^{1/2}$ となる。



間接遷移：フォノンの吸収、放出を伴う光遷移

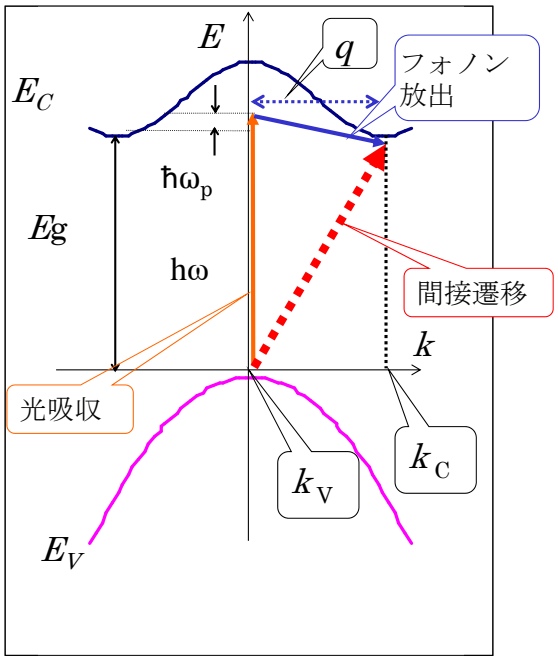
k保存則と
エネルギー保存則

k保存
→ $k_c = k_v + K_{光} \pm q$
$\sim k_v \pm q$
→ k_cとk_vの等しくない（斜めの）遷移を
*間接遷移*という。

±の＋はフォノンの吸収
－はフォノンの放出

E保存
→$\hbar\omega = E_c(k_c) - E_v(k_v) \pm \hbar\omega_p$

低温ではフォノンなし
⇒フォノン放出のみ

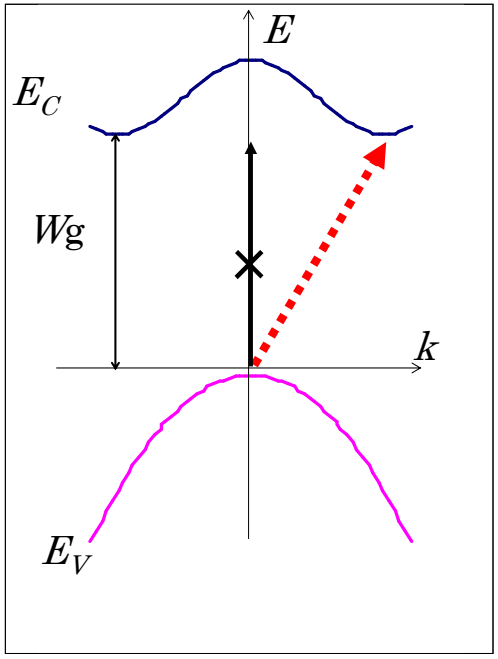


間接遷移の確率
<<直接遷移の確率

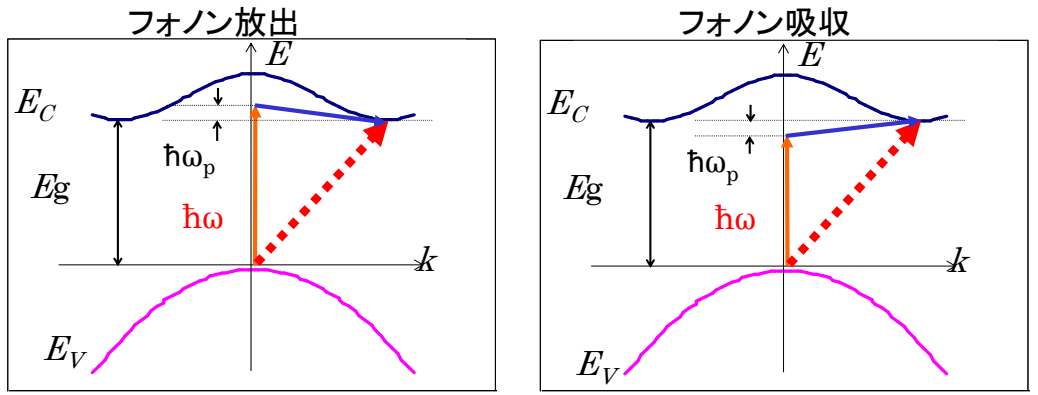
しかし、
価電子帯の極大
伝導帯の極小の
kの値が異なる場合：

・同じエネルギーの光で
直接遷移が起きない。
・結合状態密度の値が
この両状態を結ぶときに
大きい

→ 間接遷移が観測される



フォノン放出を伴う吸収遷移：（$E_g + \hbar\omega_p$）から立ち上がる。
フォノンの吸収を伴う吸収遷移：（$E_g - \hbar\omega_p$）から立ち上がる。



吸収スペクトル形状

