光物性基礎とデバイス応用

電子と光（電磁波）との相互作用

２準位間遷移と電気双極子のイメージ

半導体中の光の吸収と放出

　誘導放出，誘導吸収，自然放出

Maxwell方程式における電磁波の放出

- Maxwell方程式でρ=0,i=0を仮定した自由空間中であっても、電界Eと磁界Hが直交して進行する波（＝電磁波）の存在が導出された。

- それでは、E=0,H=0のようにあらかじめ電磁波が存在しない状況から、電磁波が発生する、という現象は、どのようにして生じるだろうか？ (電磁波の波動方程式でE=0としたらH=0が導かれ,電磁波はいつまでたっても生じない。)

Maxwell方程式における電磁波の放出

- 可能性1:
  時間的に変化する電流密度 $\boldsymbol{i}$

$$\frac{\partial \boldsymbol{i}}{\partial t} \neq 0 \Rightarrow \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \Rightarrow \boldsymbol{E}$$

Maxwell方程式(固体中,自由空間)

$$\begin{cases} \boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E} \\ \boldsymbol{B} = \mu \boldsymbol{H} \end{cases} \qquad \begin{cases} \rho = 0 \\ \boldsymbol{i} = 0 \end{cases}$$

	通称, 意味	$\boldsymbol{E}=(E_x,E_y,E_z)$, $\boldsymbol{H}=(H_x,H_y,H_z)$を用いた成分表記
$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho$	ガウスの法則: 電荷密度により電束密度(電界)が生じる。(時間変化がなくても生じる)	$\varepsilon\left(\frac{\partial E_x}{\partial x}+\frac{\partial E_y}{\partial y}+\frac{\partial E_z}{\partial z}\right)=0$
$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0$	磁気単極子は無い	$\frac{\partial H_x}{\partial x}+\frac{\partial H_y}{\partial y}+\frac{\partial H_z}{\partial z}=0$
$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}$	ファラデーの法則: 磁束密度の時間変化により電界が生じる	(x成分) $\frac{\partial E_z}{\partial y}-\frac{\partial E_y}{\partial z}=-\mu\frac{\partial H_x}{\partial t}$ (y成分) $\frac{\partial E_x}{\partial z}-\frac{\partial E_z}{\partial x}=-\mu\frac{\partial H_y}{\partial t}$ (z成分) $\frac{\partial E_y}{\partial x}-\frac{\partial E_x}{\partial y}=-\mu\frac{\partial H_z}{\partial t}$
$\nabla \times \boldsymbol{H} = \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} + \boldsymbol{i}$	アンペア・マクスウェルの法則: 電束密度の時間変化, または電流密度により磁界が生じる	$\frac{\partial H_z}{\partial y}-\frac{\partial H_y}{\partial z}=\varepsilon\frac{\partial E_x}{\partial t}$ $\frac{\partial H_x}{\partial z}-\frac{\partial H_z}{\partial x}=\varepsilon\frac{\partial E_y}{\partial t}$ $\frac{\partial H_y}{\partial x}-\frac{\partial H_x}{\partial y}=\varepsilon\frac{\partial E_z}{\partial t}$

- 可能性2:
  時間的に変化する電荷密度ρ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \neq 0 \Rightarrow \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} \Rightarrow \boldsymbol{H}$$

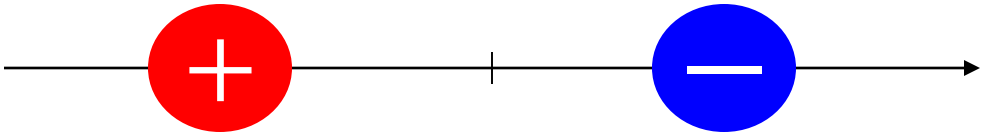
⇒まずは電荷密度に注目してみよう。

Maxwell方程式における電磁波の放出

- Maxwell方程式中のガウスの法則の両辺を時間で微分すると、電荷密度ρの時間変化により電束密度（電界）の時間変化（$\partial D/\partial t$）が生じることが示される。
- 電束密度の時間変化は、アンペールの法則により磁界を発生させる。
- 磁界の発生はファラデーの法則により電界の変化を誘起する。
- 以上のような過程を繰り返し、電磁波が発生する。

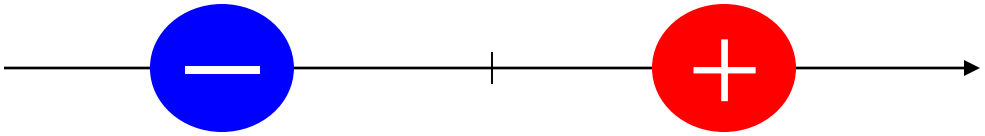
Maxwell方程式における電磁波の放出

- 電磁波（光）を発生させるには、電荷密度ρの時間変化が必要
- たとえば、下図のように振動する電気双極子は電磁波を放射する



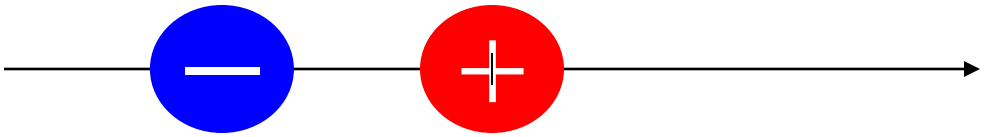
Maxwell方程式における電磁波の放出

- 電磁波（光）を発生させるには、電荷密度ρの時間変化が必要
- たとえば、下図のように振動する電気双極子は電磁波を放射する



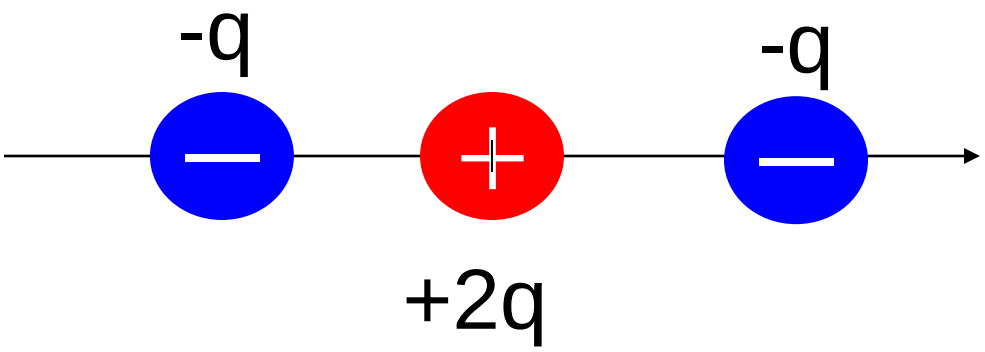
Maxwell方程式における電磁波の放出

- 同じことだが、これでもよい。
- 電気力線の方向が逆転するほど電荷が振動的に移動していることがわかる



Maxwell方程式における電磁波の放出

- しかし、これはだめ。
- 電荷は動いているが、電気力線が常に打ち消しあって、正味の電荷の移動量は常に0.

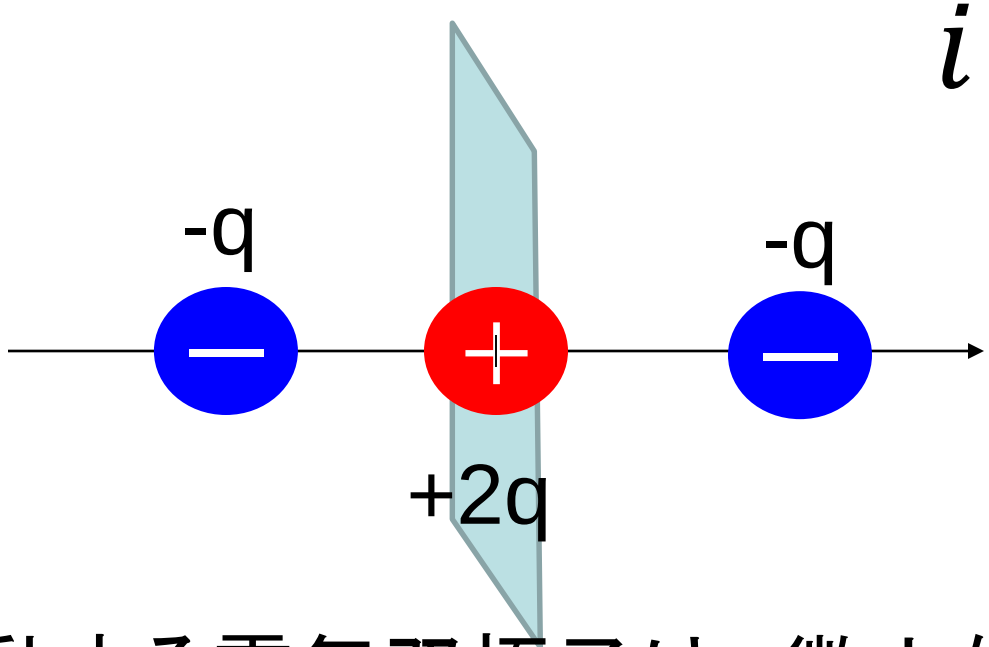


正味の電荷を打ち消すように電荷が運動する場合は、電磁波は生じない

Maxwell方程式における電磁波の放出

- 電荷の移動量で判断してもよいし、この面を横切る電荷量（＝電流）が交流的に振動しているかを見てもよい。

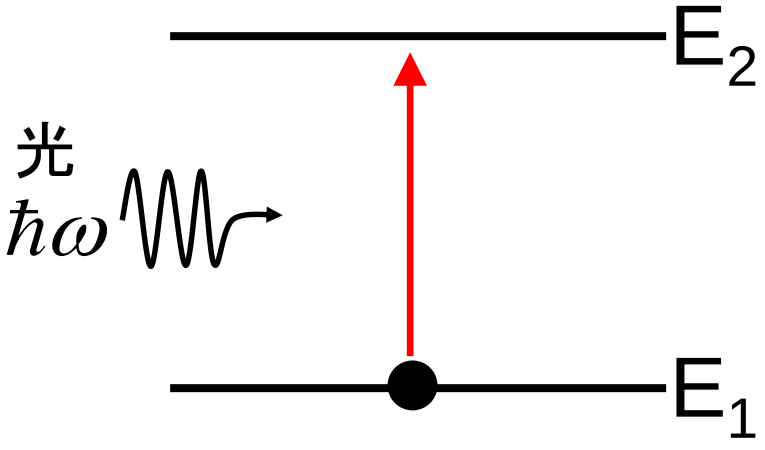
$$i = i_0 e^{j\omega t}$$



振動する電気双極子は、微小な交流電流源と見なすこともできる。上図の場合、常に i=0.

振動する電気双極子

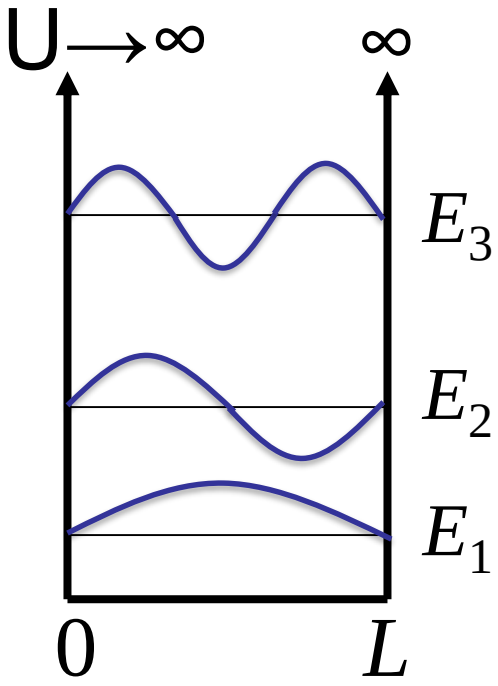
- エネルギー準位間の遷移で電荷の振動は発生するか？
- 量子井戸の中の2つのエネルギー準位で調べてみよう。



1次元無限ポテンシャル井戸のエネルギー準位と波動関数

有効質量：m^*

井戸幅：L



$$\begin{cases} 0 \le x \le L & : \ U(x) = 0 \\ x < 0, L < x & : \ U(x) \to \infty \end{cases}$$

時間に依存しない1次元のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi + U\varphi = E\varphi$$

エネルギー固有値

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m^*L^2}n^2 \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots.)$$

規格化した波動関数

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

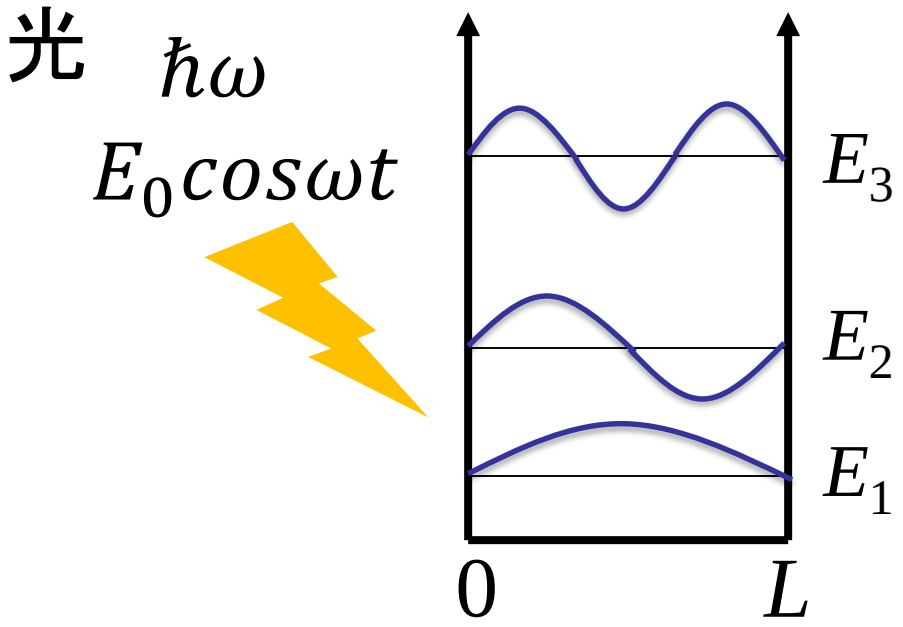
波動関数の時間に依存する項は、

$$e^{-i\omega t} \quad \text{ただし、} \omega \equiv \frac{E}{\hbar}$$

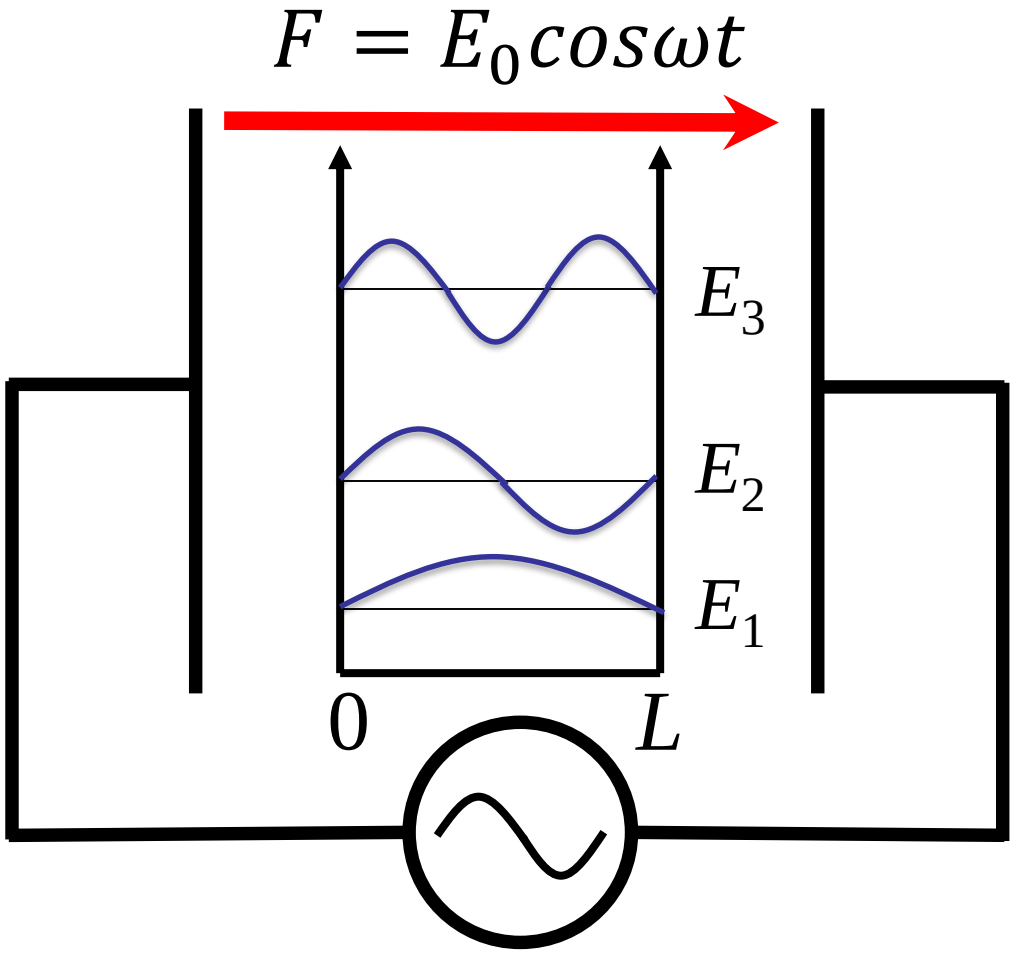
と表される．時間項も含めた波動関数は、空間に依存する関数と時間の関数の積で表されるので、これを$\varphi_n(x,t)$とすると、

$$\varphi_n(x,\mathrm{t}) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-i\omega_n t}$$

光を照射した場合の解



光を照射した場合の解



空間的に一様な交流電界Fの中に置いたものと考える

(光の波長が量子井戸幅Lよりはるかに長いものと近似していることに相当する)

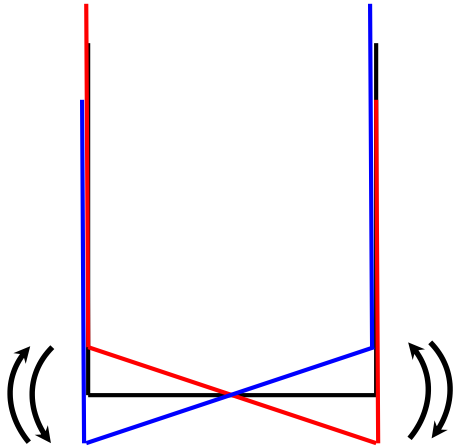
空間的に一様な電界F中の静電ポテンシャルエネルギー

まず電位 $V = -\int_0^x F\,dx$

$= -Fx$

ただし，上式は電位の原点を$x=0$に取った場合の表式．外部から印加される電界によるポテンシャルによって、井戸内のポテンシャル（の平均値）が上下すると、準位のエネルギーがずれることになるので面倒．なので、平均値が動かないように、量子井戸の中心$x=2/L$を電位原点に設定する．

$$V = -F\left(x - \frac{L}{2}\right)$$



電子の静電ポテンシャルUは

$$U = -eV = eF\left(x - \frac{L}{2}\right)$$

前ページのVを代入

時間に依存するシュレディンガー方程式に代入

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi + U\varphi$$

光を照射した場合のシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi + eF\left(x-\frac{L}{2}\right)\varphi$$

$F = E_0 cos\omega t$ を代入

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi + \left\{eE_0\left(x-\frac{L}{2}\right)cos\omega t\right\}\varphi$$

この解$\varphi(x,t)$を求めたい。

光を照射した場合のシュレディンガー方程式の解

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi + \left\{eE_0\left(x-\frac{L}{2}\right)cos\omega t\right\}\varphi$$

次式は光を照射していない時の解$\varphi_n(x,t)$であり,
光を照射した時の解にはならない.

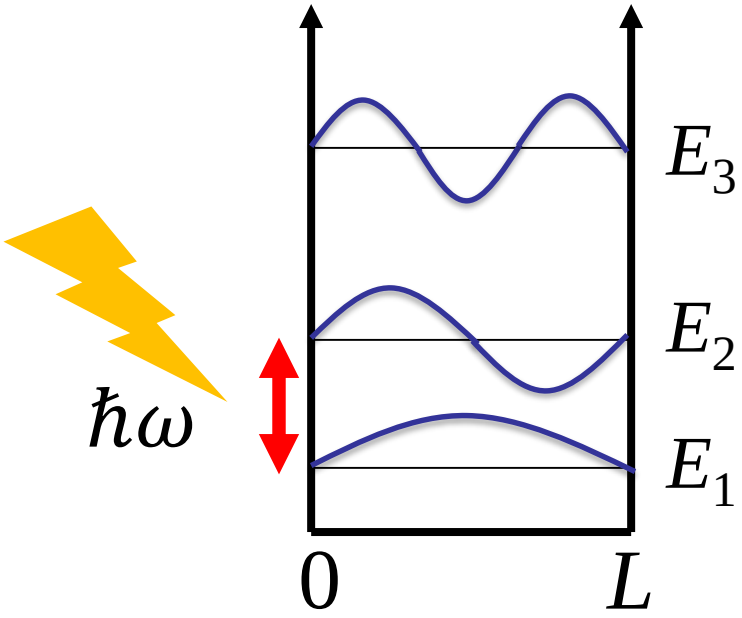
$$\varphi_n(x,\mathrm{t}) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)e^{-i\omega_n t}$$

しかし一方、上記の解$\varphi_n(x,t)$の n=1,2,3,…の各関数を適当な係数を乗じて$n\to\infty$まで加え合わせると、(同様の境界条件を満たす任意の関数を表すことができることが数学で保証されている。

なので、今、求めたい解を、次のように考える。

$$\varphi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x,\mathrm{t})$$

$$= c_1 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) e^{-i\omega_1 t} + c_2 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) e^{-i\omega_2 t} + c_3 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{3\pi}{L}x\right) e^{-i\omega_3 t} + \cdots$$



一般には無限項必要だが、光の周波数が

$$\hbar\omega = E_2 - E_1$$

の時は、最初の2項だけ取ればきわめて良い近似解となる。

なので、今、求めたい解を、次のようにおく。

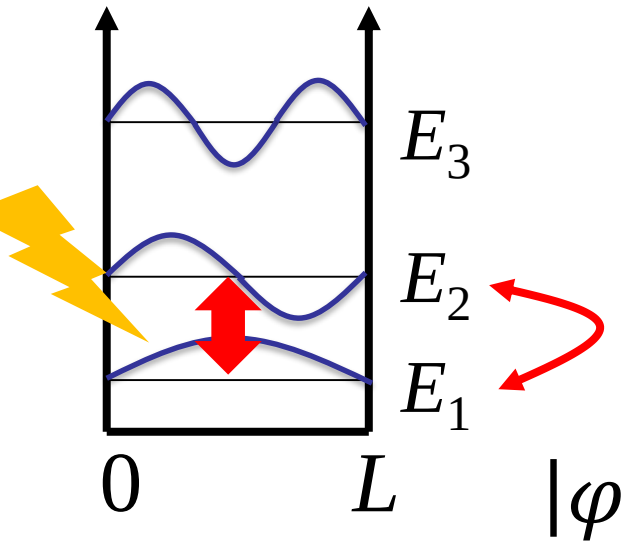
$$\varphi = c_1\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)e^{-i\omega_1 t} + c_2\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)e^{-i\omega_2 t}$$

c_1,c_2は規格化条件から決まる複素定数である。
上記の解が本当に今解きたいシュレディンガー方程式を(どの程度)満たしているのかは別途考察するとして、
上記の$\varphi(x,t)$の絶対値の２乗$|\varphi|^2$（確率密度）がどのような関数形になっているか，今仮に，$c_1\sqrt{\frac{2}{L}} = 1$，$c_2\sqrt{\frac{2}{L}} = re^{i\theta}$ と仮定して調べてみよう。

$$\varphi = \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)e^{-i\omega_1 t} + re^{i\theta}\cdot\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)e^{-i\omega_2 t}$$

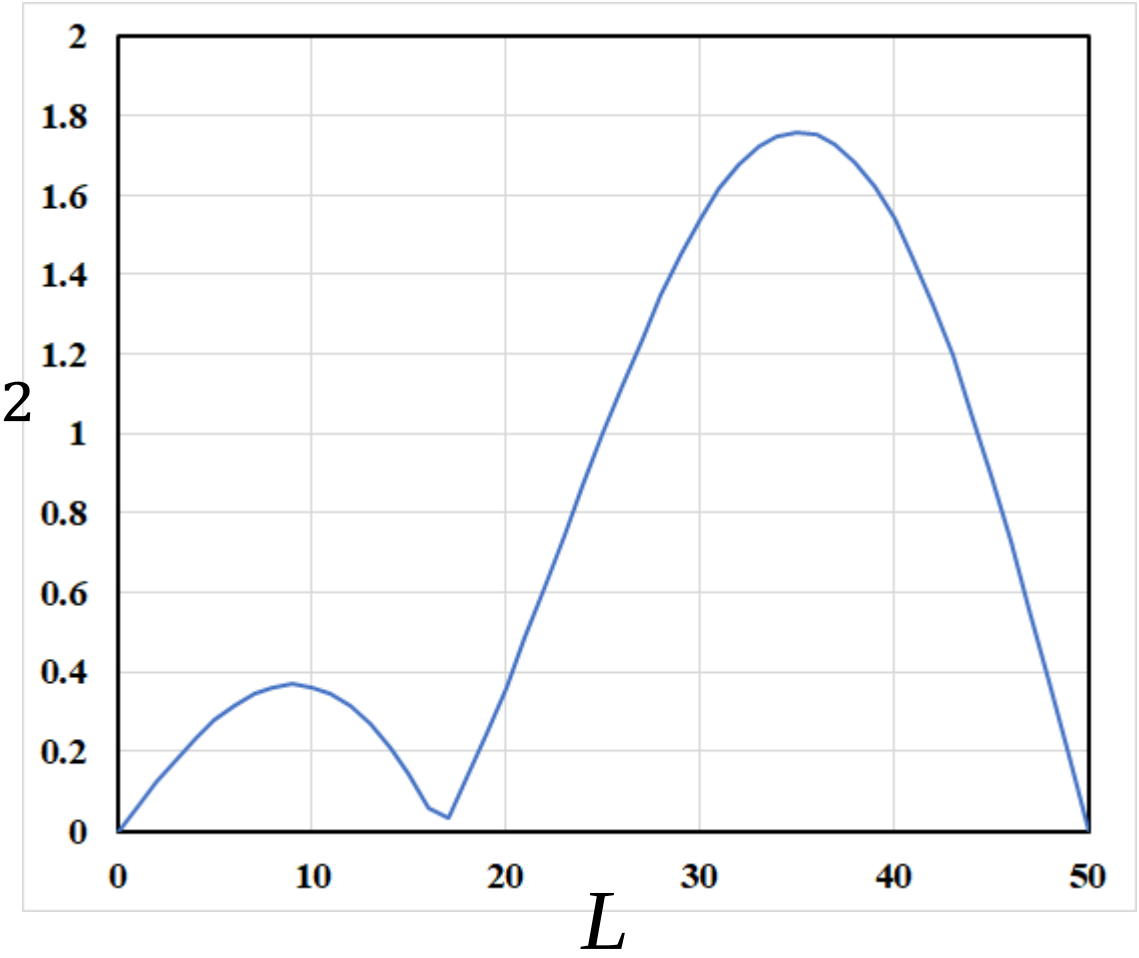
電子密度に相当する$|\varphi|^2$の関数の形が時間的にどのように変化するか、実際にグラフ描画して調べてみる.

準位E_1とE_2間の遷移



$|\varphi|^2$

$|\varphi|^2$ 電子密度 (規格化していないので縦軸の数値は気にしない)



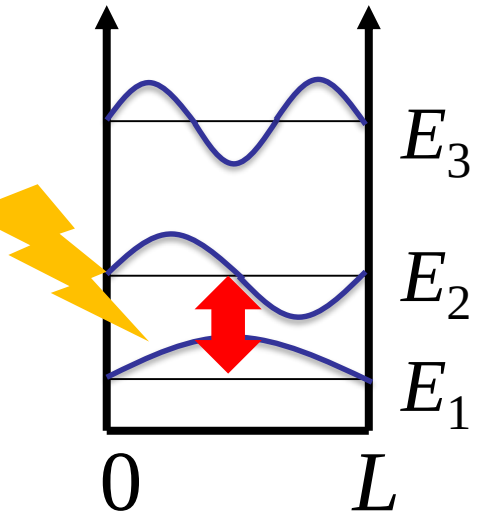
$L = 50$

$\omega_1 = 1$

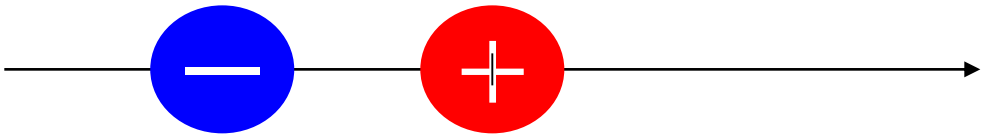
$\omega_2 = 4$

$r = 1, \theta = 0$

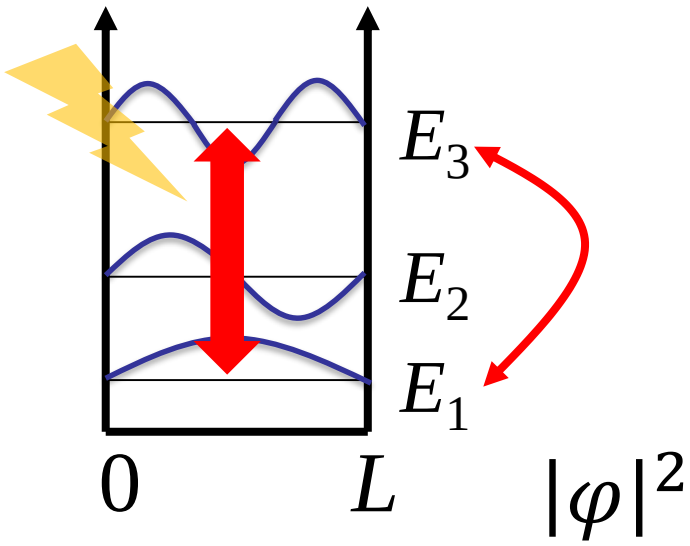
準位E_1とE_2間の遷移



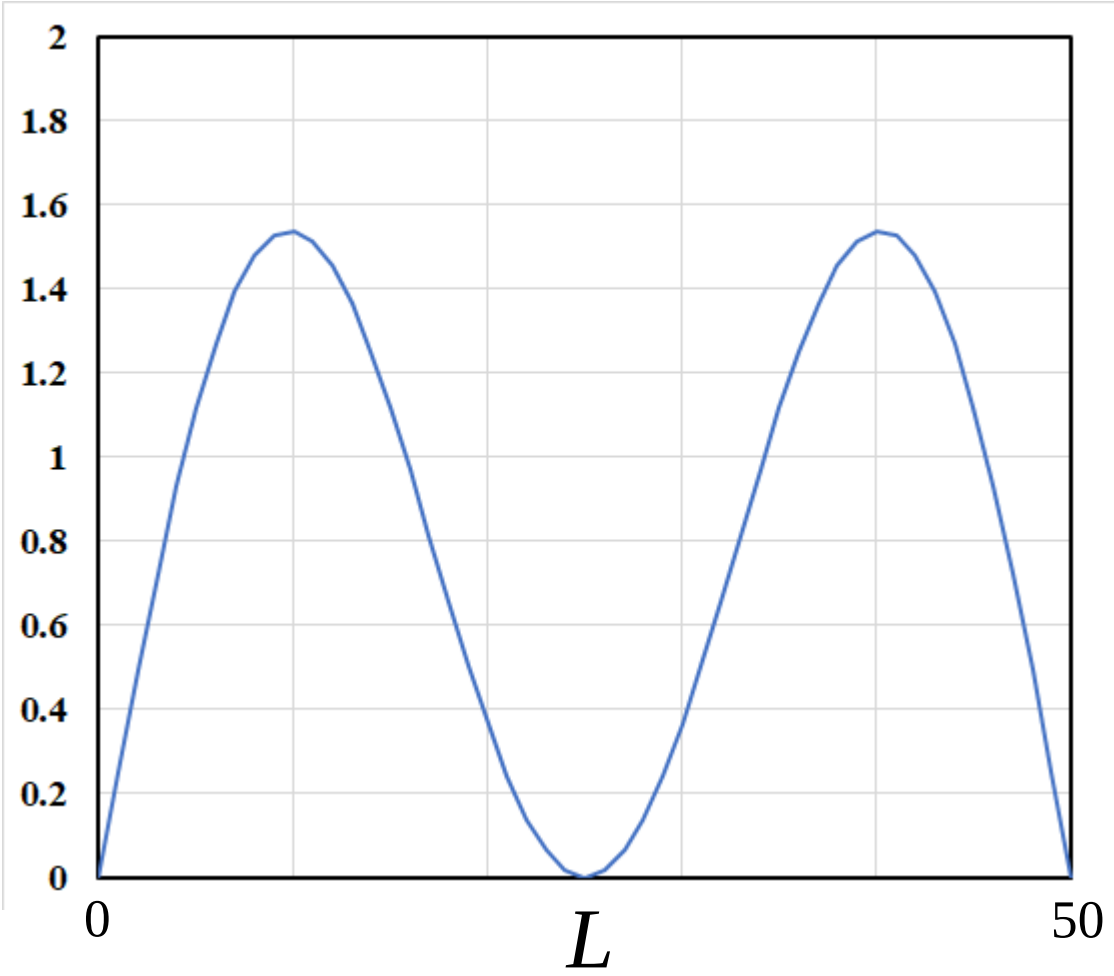
- 量子井戸の中で、電子密度の重心位置が振動していることがわかる。
- 振動する分極→電気双極子



準位E_1とE_3間の遷移



$|\varphi|^2$ 電子密度



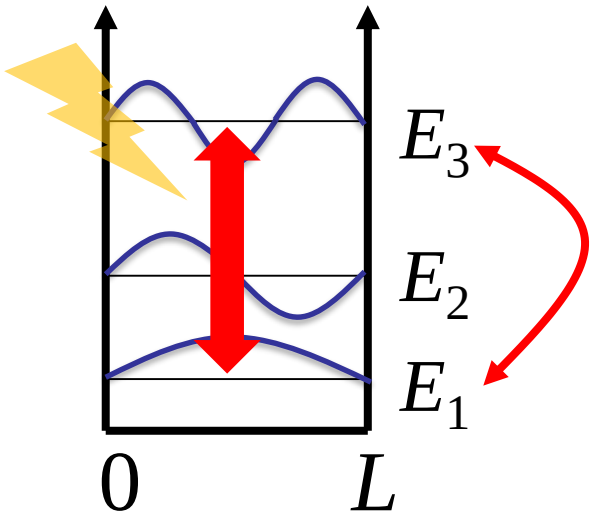
$L = 50$

$\omega_1 = 1$

$\omega_3 = 9$

$r = 1, \theta = 0$

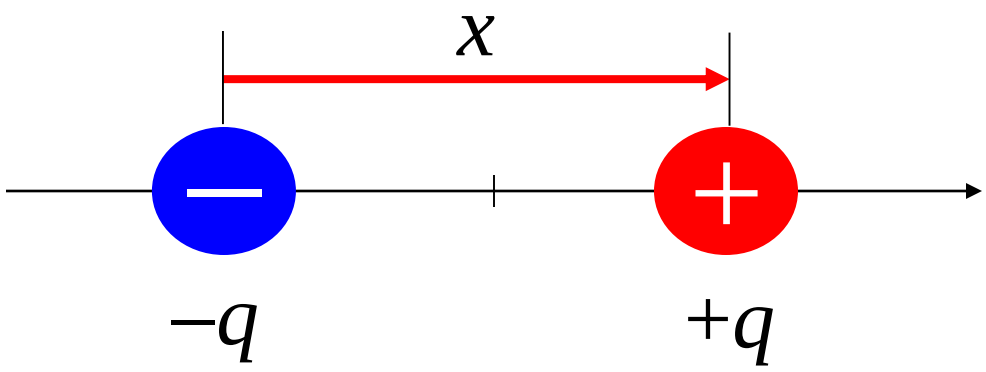
準位E_1とE_3間の遷移



- 量子井戸の中で、電子密度の重心位置は変化していない（中心で固定されている）ことがわかる。

電気双極子が0である、という.
この場合、光の吸収や放出は起こらない

電気双極子モーメント



電気双極子モーメント = qx

参考：誤差の見積もり

ポテンシャル項を$U(x,t)$と書くと

$$U(x,t)\varphi(x,t) = eE_0\left(x-\frac{L}{2}\right)cos\omega t\left(c_1 \sin\frac{\pi}{L}x\, e^{-i\omega_1 t} + c_2 \sin\frac{2\pi}{L}x\, e^{-i\omega_2 t}\right)$$

ただし，ωは外部から入射する電磁波の角周波数．ω_1, ω_2は量子井戸のエネルギー準位
$E_1 = \hbar\omega_1, E_2 = \hbar\omega_2$ である．

$\mathrm{c}_1 = 1$, $\mathrm{c}_2 = re^{i\theta}$とおくと $U(x,t)\varphi(x,t)$は

$$\begin{aligned} U(x,t)\varphi(x,t) &= eE_0\left(x-\frac{L}{2}\right)cos\omega t\left(\sin\frac{\pi}{L}x\, e^{-i\omega_1 t} + re^{i\theta}\sin\frac{2\pi}{L}x\, e^{-i\omega_2 t}\right) \\ &= eE_0\left(x-\tfrac{L}{2}\right)cos\omega t\left(\sin\tfrac{\pi}{L}x\, e^{-i\omega_1 t} + r\sin\tfrac{2\pi}{L}x\, e^{-i(\omega_2 t-\theta)}\right) \end{aligned}$$

仮定した波動関数φは、光を照射した場合のシュレディンガー方程式の近似解なので若干の誤差が出る。
その誤差は、下記のシュレディンガー方程式に代入してみると、左辺と右辺第1項は打ち消しあって0になるので、
右辺第2項から出てくる値(上記Uφ)が(0でない値として)残る．これが誤差に相当する．

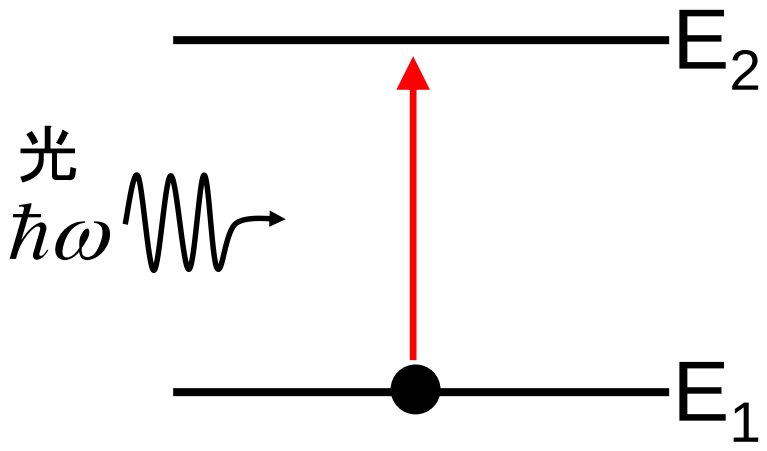
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi + \left\{eE_0\left(x-\frac{L}{2}\right)cos\omega t\right\}\varphi$$

光の吸収と放出

誘導放出と自然放出

2つのエネルギー状態を考える

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega$$



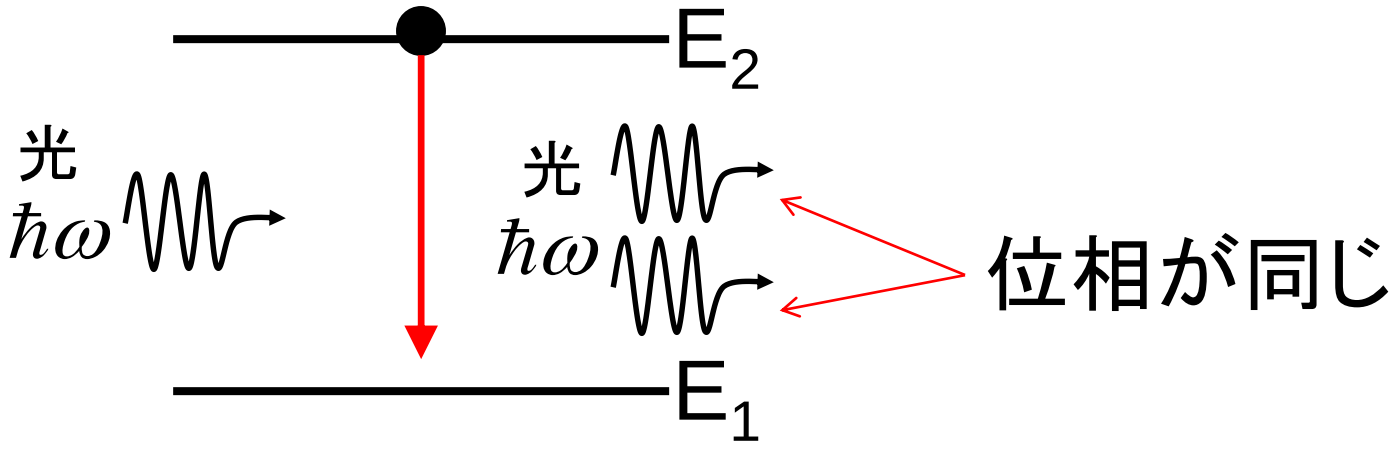
誘導吸収

電磁波(光)に誘導されて吸収遷移が生じる

誘導放出と自然放出

2つのエネルギー状態を考える

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega$$



誘導放出

電磁波(光)に誘導されて放出遷移が生じる

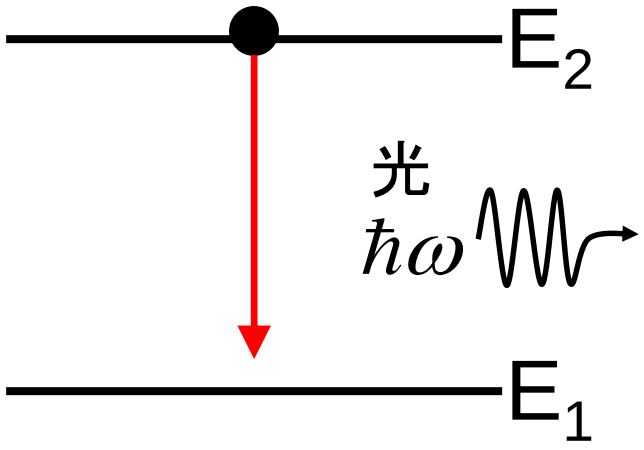
（電磁波の振幅が大きくなる⇔フォトンの数が増える）

光が無いと起こらない

誘導放出と自然放出

2つのエネルギー状態を考える

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega$$

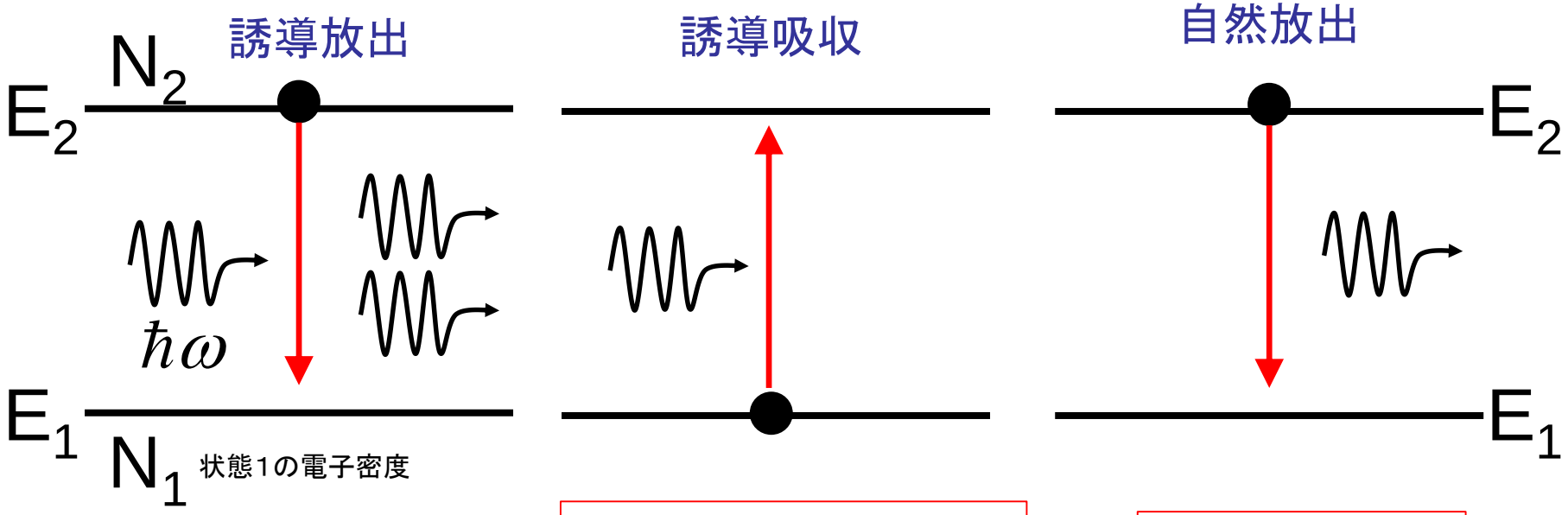


自然放出

電磁波(光)に誘導されることなく
自発的に放出遷移が生じる
（フォトンが発生する）

光が無くても起こる！

誘導放出・誘導吸収と自然放出の遷移確率



遷移確率

$B_{21} \cdot u_\omega \cdot N_2$

比例係数

光強度に比例

状態2の電子密度に比例

誘導放出係数

$B_{12} \cdot u_\omega \cdot N_1$

状態1の電子密度

誘導吸収係数

$A_{21} \cdot N_2$

比例係数
（自然放出係数）

自然放出の遷移確率は
光強度には無関係

熱平衡状態では、吸収と放出は釣り合っている

誘導吸収　　誘導放出　　自然放出

$$B_{12}u_{\omega}N_1 = B_{21}u_{\omega}N_2 + A_{21}N_2 \quad \cdots①$$

ボルツマン分布

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp(-\frac{E_2 - E_1}{kT}) = \exp(-\frac{\hbar\omega}{kT}) \quad \cdots②$$

プランクの熱放射 (単位体積当たりのエネルギー密度)

$$u_{\omega}(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{\exp(\frac{\hbar\omega}{kT}) - 1} \quad \cdots③$$

①~③の関係式が、全てのTで成り立つ必要がある

（ωは1つのE_2-E_1に注目しているので固定）

①~③の関係式を、全ての温度Tで成立させるための必要十分条件が

$$\begin{cases} B_{12} = B_{21} \\ A_{21} = \dfrac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{21} \end{cases}$$

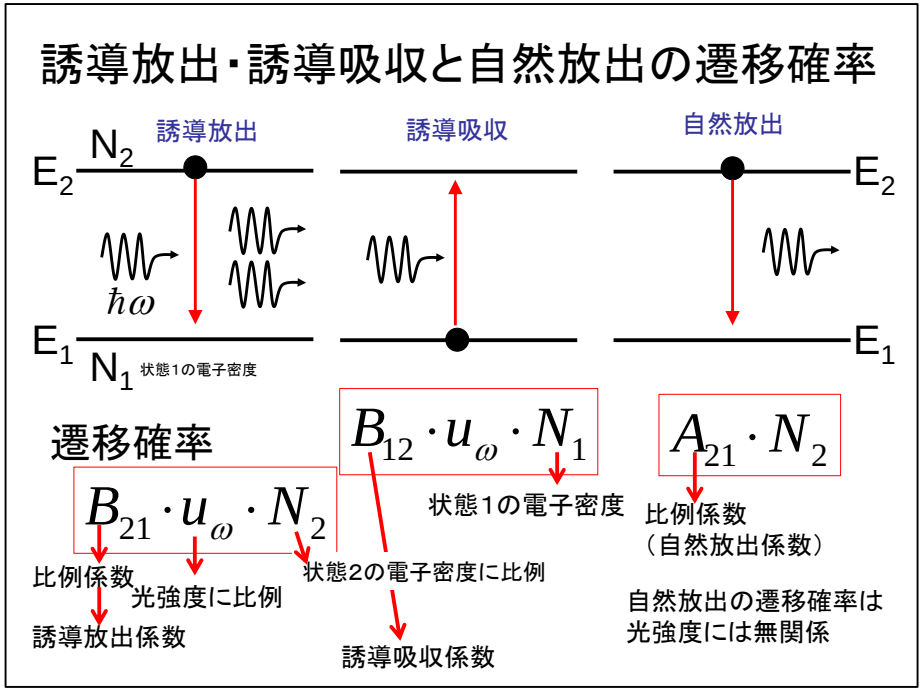
であることを示せ。（→演習問題）

（ヒント：①~③からN_1,N_2を消去して一つの式にまとめ、Tに依存する項と依存しない項に分離する。）

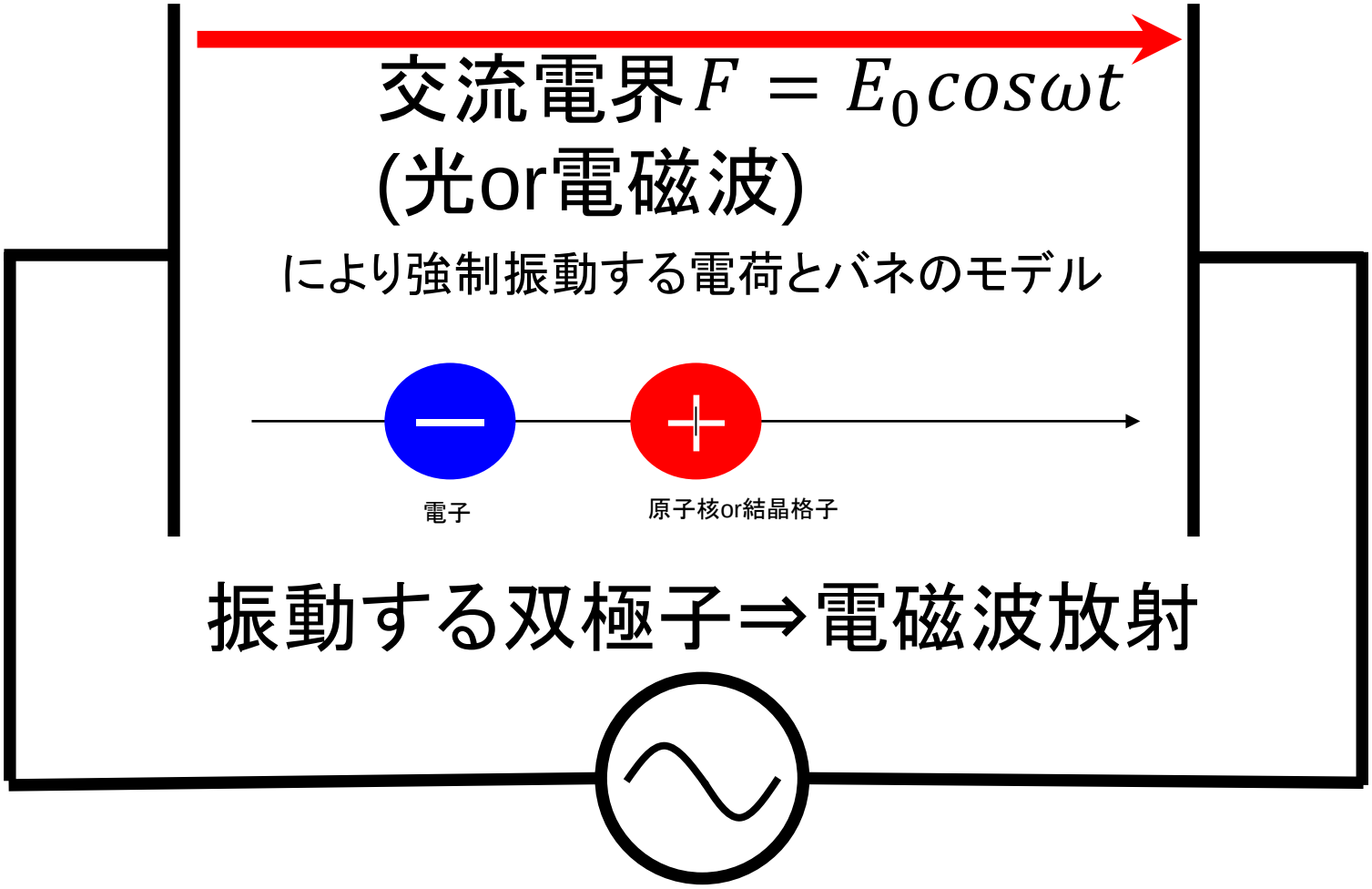
光吸収と光増幅

ここまでに学んだこと

- 誘導吸収
- 誘導放出
- 自然放出



誘導吸収と誘導放出のイメージ



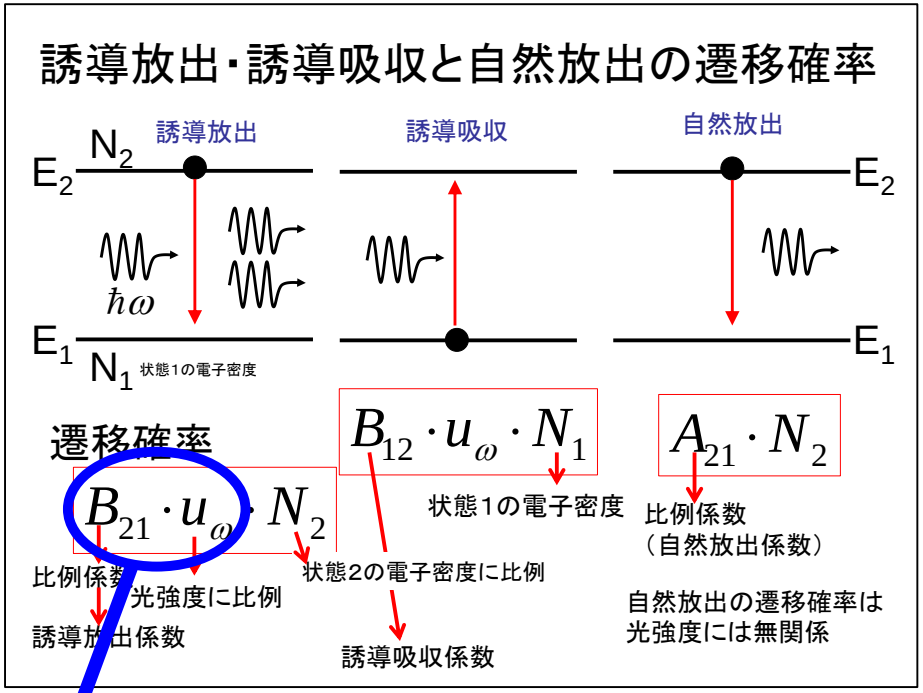
電磁波(光)が無いと起こらない光の吸収と放出
⇒誘導吸収と誘導放出に相当

- 誘導放出と誘導吸収は、外部から入射する光の電界と同位相で強制振動することにより起こるので、誘導放出される光の位相と、誘導吸収される光の位相は等しい。
- その場合、正味の光吸収、光放出は、単純な重ね合わせで考えてよい。
- 自然放出は外部光と無関係に生じるので、位相も無関係。⇒加算するとむしろ打ち消しあう
- 光の吸収と放出を、誘導吸収と誘導放出の差として見積もることができる。

光吸収と光増幅

ここまでに学んだこと

- 誘導吸収
- 誘導放出
- 自然放出



B係数と光のエネルギー密度の積を便宜上、w と定義する。(後でまた分解する)

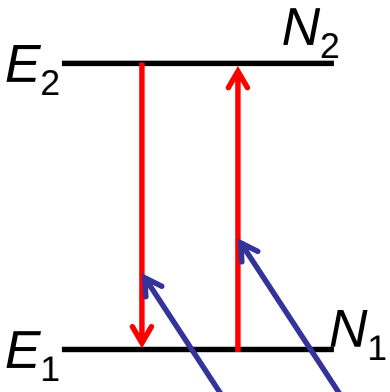
単位体積, 単位時間当たりの

- 誘導放出回数： wN_2
- 誘導吸収回数： wN_1

（ただし、B_{12}=B_{21}、すなわち、単位時間、単位体積あたり、電子1つあたりの誘導吸収と誘導放出の遷移確率は等しいことを使った）

吸収係数と遷移確率

単位体積、単位時間に正味の光吸収遷移が起きる回数 $r_{吸収}$ は、
誘導吸収ー誘導放出　で表される。



$$r_{吸収} = w(N_1 - N_2) \quad \cdots式①$$

単位時間，単位体積の
電子1つが遷移する確率
と光強度に比例する

誘導吸収に
寄与するキャリア密度

放出に寄与する分

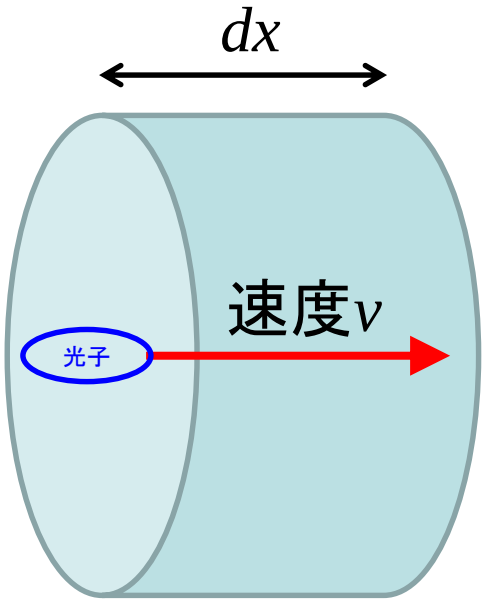
前ページの$r_{吸収}$の定義より、単位体積当たりの光子密度をρ_ωとすると、

その時間変化は $\dfrac{d\rho_\omega}{dt} = -r_{吸収} \Leftrightarrow d\rho_\omega = -r_{吸収} \times dt$

これは、光が厚さdxの層を速度vで通過すると、その通過時間dtは

$dt = \dfrac{dx}{v}$ だから、 $r_{吸収} \times dt = r_{吸収} \times \dfrac{dx}{v} \ (= -d\rho_\omega)$

これは、単位体積当たりの光子密度 ρ_ωが、時間dtの間に、この分だけ減少することを意味している。



すなわち、

$$d\rho = -r_{吸収} \times \frac{dx}{v}$$

前ページの式①

$$\Leftrightarrow \frac{d\rho}{dx} = -\frac{r_{吸収}}{v} = -\frac{w(N_1 - N_2)}{v} \quad \cdots \text{式②}$$

媒質中を進行する光を考える。

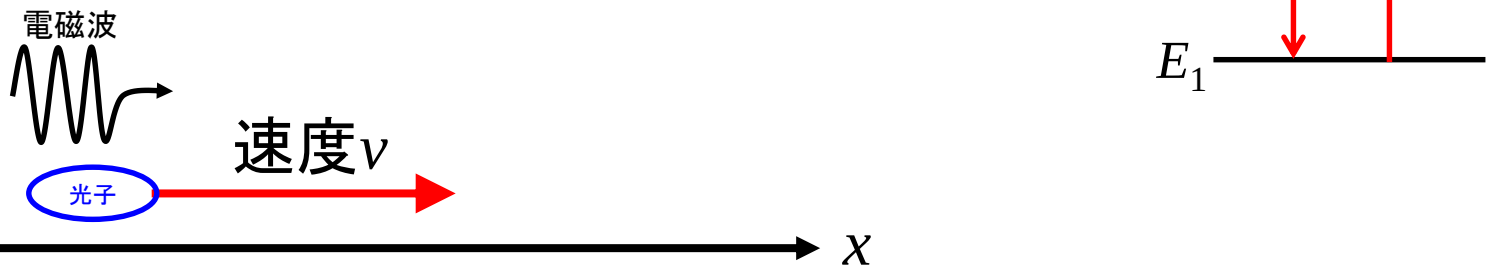
・周波数ω_{12} (周波数が単一の色；単色光ともいう。ただしω_{12}は)

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega_{12}$$

・光強度$I_\omega(x)$

・進行方向：x方向

とする。



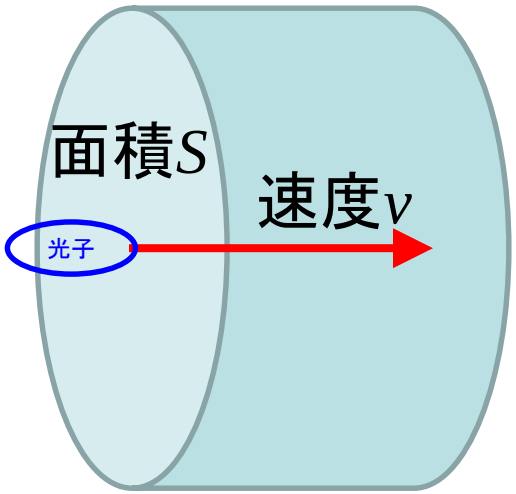
光を、電磁波と考えてもよいし、1個当たりのエネルギーが$\hbar\omega$の「光子」と考えてもよい。

先に定義した係数 w は、光強度I_ωにも比例するから

$$w = B' I_\omega \quad \cdots \text{式③}$$

光のエネルギーを、定在波のエネルギー密度u(単位体積当たりのエネルギー)として表現するか、光を進行波と考えてエネルギーの流れ密度I(単位面積当たり単位時間に通過するエネルギー＝光強度)として表現するかで単位が異なる。B_{12}=B_{21}と、ここで定義するB'は次元が異なるため記号を区別してある。

また、光強度I_ωの定義は、単位面積を単位時間に通過する光子＝フォトンのエネルギー([J/m^2/s]=[W/m^2])であることから、



面積Sを1秒間に光が通過する体積は Sv

フォトン密度を ρとすると、フォトン数は ρSv

1フォトン当たりのエネルギーは $\hbar\omega$ なので、

$$I_\omega = \frac{\rho S v \hbar\omega}{S} \qquad \therefore I_\omega = \hbar\omega v\rho \quad \cdots \text{式④}$$

式②、③、④より、

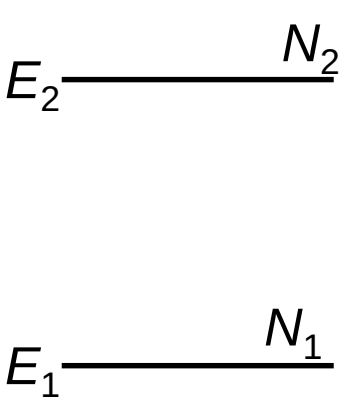
$$\frac{dI_\omega}{dx} = \hbar\omega v \frac{d\rho}{dx} = \hbar\omega v\left\{-\frac{w(N_1 - N_2)}{v}\right\} = -\hbar\omega B'(N_1 - N_2) I_\omega \quad \text{式⑤}$$

この微分方程式の解は、

$$I_\omega = \underbrace{C}_{\text{定数}} \exp\left(-\hbar\omega B'(N_1 - N_2)x\right) \quad \cdots \text{式⑥}$$

よって、単位長さあたりの光の減衰率 α （吸収係数）は

$$\alpha = \hbar\omega B'(N_1 - N_2) \quad [\mathrm{m}^{-1}] \qquad \cdots \text{式⑦}$$



$N_1 > N_2$のとき、$\alpha > 0$なので光は減衰していく。

一方、$N_1 < N_2$のとき、吸収係数$\alpha < 0$となり、これはフォトン数が指数関数的に増加していくこと、すなわち、光増幅を意味する。

ここから、利得係数 $g \equiv -\alpha$ を定義すると、

$$g = \hbar\omega B'(N_2 - N_1) \quad \cdots \text{式⑧}$$

熱平衡状態では必ず$N_1>N_2$なので、$\alpha>0$、$g<0$となるが、
電流注入や光励起等により$N_2>N_1$が実現すると、光利得
($g>0$)が発生する。

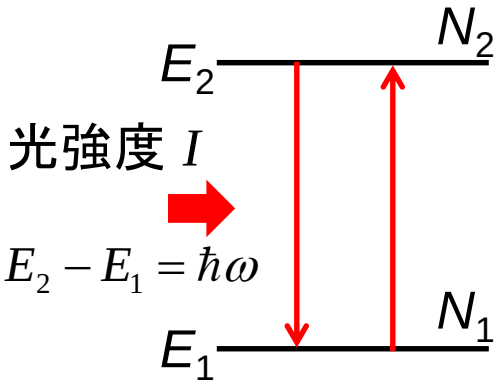
$N_2 > N_1$ の状態を、反転分布 (population inversion) という。

光増幅を得るには、反転分布が必須

光増幅はレーザ発振の実現に不可欠な要素

発光ダイオード(LED)の光は、基本的に自然放出光が主

2準位系で反転分布は可能か？



全体で一定のキャリア密度 $N \equiv N_1 + N_2$
を仮定して、光励起で反転分布($N_2 > N_1$)が
可能かどうかを調べる。

	誘導吸収	誘導放出	自然放出
遷移確率	$B' I N_1$	$B' I N_2$	$A_{21} N_2$

（ただし、$I \propto u$であるが比例係数の分、異なるので
B_{12}とB'は厳密には異なる量である）

2つの状態それぞれに存在するキャリア密度の
時間変化を次の式に表す。（←レート方程式と呼ぶ）

N_2のレート方程式(準位2のキャリア密度の変化率)

$$\frac{dN_2}{dt} = \underset{\text{増加}}{B'IN_1} - \underset{\text{減少}}{B'IN_2} - \underset{\text{減少}}{A_{21}N_2} \qquad \cdots \text{式①}$$

N_1のレート方程式(準位1のキャリア密度の変化率)

$$\frac{dN_1}{dt} = \underset{\text{増加}}{B'IN_2} + \underset{\text{増加}}{A_{21}N_2} - \underset{\text{減少}}{B'IN_1} \qquad \cdots \text{式②}$$

全キャリア数をNで一定と仮定

$$N_1 + N_2 = N \quad \text{（一定）} \qquad \cdots \text{式③}$$

③より、 $\dfrac{dN_2}{dt} = -\dfrac{dN_1}{dt}$ ・・・式④

定常状態では $\frac{dN_2}{dt}=0,\ \frac{dN_1}{dt}=0$　なので、式①より、

$$0 = B'IN_1 - B'IN_2 - A_{21}N_2$$

上式からN_2とN_1の比（N_2/N_1）を求めると、

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{1}{1+\frac{A_{21}}{B'I}} \quad \cdots\text{式⑤}$$

ここで、$\frac{A_{21}}{B'I}$ は、常に正（＞0）なので、その結果、常に

$\frac{N_2}{N_1} < 1 \Leftrightarrow N_2 < N_1$　が結論される。すなわち、閉じた2準位系では、どれほど強い光を照射しても($I\rightarrow\infty$)、反転分布($N_2>N_1$)は起こらない！

（実は、光励起による反転分布には、3準位以上が必要）

まとめ

- 電子と光（電磁波）との相互作用
- ２準位間遷移と電気双極子のイメージ
- 半導体中の光の吸収と放出
  誘導放出，誘導吸収，自然放出
- 反転分布，光増幅
- レート方程式