

共有結合性半導体におけるチャネル構造と その電子物性（バンドギャップと有効質量）との関係

Interstitial Channels that Control Band Gaps and Effective Masses in Covalent Semiconductors

東大院工¹, マックス-プランク研究所² °松下 雄一郎^{1,2}, 押山 淳¹

The Univ. of Tokyo¹, Max-Planck Institute of Microstructure Physics²,

°Yu-ichiro Matsushita^{1,2}, Atsushi Oshiyama¹

E-mail: matsushita@comas.t.u-tokyo.ac.jp

これまで共有結合性半導体においてその電子状態は、価電子帯は結合性軌道によって、伝導帯は反結合性軌道によって構成されると理解されてきた。しかし、本研究においてこのことは必ずしも正しくないことを密度汎関数理論に基づいた理論計算により明らかにした。伝導帯の電子状態は、これまで考えられてきたような原子軌道のキャラクターを持った軌道ではなく、原子から離れたナノ内包空間(チャネル)内に閉じこめられた特異な電子状態; *floating state* (チャネル内を「浮遊した」状態)であることを見出した [1]。このことはチャネル構造(チャネルの長さやその対称性)を制御することにより伝導帯のバンド構造: 伝導帯下端の k 点位置やそのエネルギー準位(つまりはバンドギャップ)を制御することが出来るという興味深い現象を導く [2]。つまり、チャネル長さの違いが *floating state* に対して量子閉じこめ効果の強さに違いを生じさせることを明らかにした。実際にこの顕著な現象は実験的にも観測されている。次世代パワーデバイス半導体として大きな注目を集めています炭化ケイ素 (SiC) は数百もの多形構造が知られており、それら構造の違いは単なる積層構造の違いでしかないにも関わらず、バンドギャップは 40%もの多形構造依存性を示す。その微視的メカニズムは、半世紀もの間未解明な問題として知られていたが、本研究において、それぞれの多形構造の持つチャネル長さに注目することにより定性的にも定量的にも理解できることを明らかにした。また、チャネル構造の異方性に由来して有効質量に異方性が生じること、そしてこのことは既に実験においても観察されており *floating state* の存在を示す実験的な *finger print* の一つとなっていることを明らかにした。さらには、チャネル構造を制御することにより低次元電子・正孔ガスを 3次元 SiC 結晶中に実現しうることを見出した。本発表ではその詳細を報告する。

[1] Y. -i. Matsushita, S. Furuya, A. Oshiyama, PRL **108**, 246404 (2012).

[2] Y. -i. Matsushita, A. Oshiyama, submitted