

ダイヤモンド(111)基板における窒素-空孔複合欠陥の配向整列機構

Alignment mechanism of nitrogen-vacancy complex defects in diamond (111) substrates

○宮崎 剛英^{1,2}、宮本 良之^{1,2}、牧野 敏晴^{1,3}、加藤 宙光^{1,3}、山崎 聡^{1,3}、福井 貴大^{1,4}、
土井 悠生^{1,4}、徳田 規夫⁵、波多野 睦子^{1,6}、水落 憲和^{1,4} (1. JST-CREST、2. 産総研ナノシステム、
3. 産総研エネルギー技術、4. 大阪大院基礎工、5. 金沢大理工、6. 東工大院理工)

○T. Miyazaki^{1,2}, Y. Miyamoto^{1,2}, T. Makino^{1,3}, H. Kato^{1,3}, S. Yamasaki^{1,3}, T. Fukui^{1,4}, Y. Doi^{1,4}, N.
Tokuda⁵, M. Hatano^{1,6}, N. Mizuochi^{1,4} (1.JST-CREST, 2.AIST-NRI, 3.AIST-ETRI, 4.Osaka Univ.,
5.Kanazawa Univ., 6.Tokyo Inst. Technol.)

E-mail: takehide.miyazaki@aist.go.jp

ダイヤモンド中の窒素-空孔複合欠陥 (NV センター) [1]を量子情報処理やナノスケールセンシング等へ応用する研究が活発に行われている。近年、化学気相成長法 (CVD) で合成したダイヤモンド(111)に存在する NV センターのうちほぼ95%以上が[111]方向に整列することがいくつかのグループにより報告された[2,3,4]。一方、(001)基板[5]や(110)基板[6]でも NV 欠陥は整列するがその割合は(111)基板よりずっと低い。これらの実験事実は NV センターの整列がダイヤモンド表面の微細構造に強く依存することを示唆しているが、原子レベルでの整列機構は未解明であった。

本研究の目的は第一原理計算によってダイヤモンド(111)表面で NV センターがどのようにして[111]方向に成長するかを原子レベルでモデリングすることである[7]。NV が[111]方向へ配列するには N が最表面[α 層、図 1(a)] の C を置換し、その上に V ができることが必要である。従前の第一原理計算では NV は表面第二層[β 層、図 1(a)]に N、 α 層に V が出るのが最安定であり[8]、実験と合わない。そこで本研究では、(111)基板では $[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向を向いた二重層ステップに沿ったキンクフローが CVD による二重層単位の横方向成長素過程とされる[9]点に注目した。その結果、キンクの α サイトに N が入る[図 1(a)]のを皮切りに、最表面への N 取込み[図 1(b)]、炭素二重層の成長[図 1(c)]を経て V が[111]方向に配置する[図 1(d)]までの構造発展が他のルートより低いエネルギーで起こり得ることを見出した。

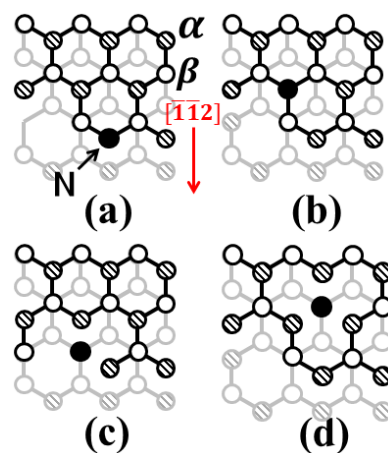


図1 C(111)面近傍での NV 生成過程。簡単のため表面終端する水素原子は表示していない。(a)で N は窒素、 α と β はそれぞれ最表面と第二層の炭素原子副格子を表す。赤文字はステップの方位。

[1] M. W. Doherty et al., Phys. Rep. **528**, 1 (2013). [2] J. Michl et al., Appl. Phys. Lett. **104**, 102407 (2014). [3] M. Lesik et al., Appl. Phys. Lett. **104**, 113107 (2014). [4] T. Fukui et al., Appl. Phys. Express **7**, 055201 (2014). [5] L. M. Pham et al., Phys. Rev. B **86**, 121202 (2012). [6] A. M. Edmonds et al., Phys. Rev. B **86**, 035201 (2012). [7] T. Miyazaki et al., Appl. Phys. Lett., **105**, 261601 (2014). [8] Atumi et al., Phys. Rev. B **88**, 245301 (2013). [9] N. Tokuda et al., Jpn. J. Appl. Phys. **53**, 04EH04 (2014).