

Cu₄ 複合体の対称性問題

A problem on the symmetry of the structure Cu₄ complex

阪大産研, °白井光雲, 藤村卓巧

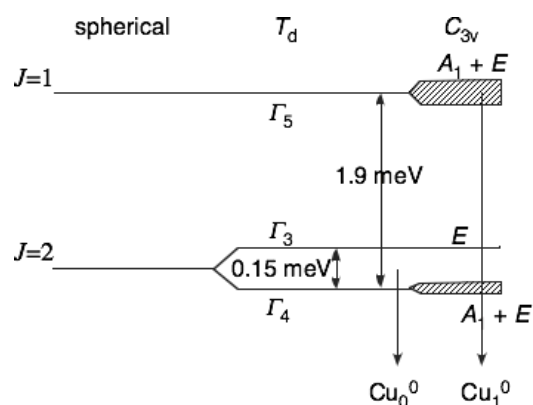
ISIR, Osaka Univ., °Koun Shirai and Takayoshi Fujimura

E-mail: koun@sanken.osaka-u.ac.jp

シリコン結晶中における銅関連の欠陥でCu-PLと呼ばれる欠陥がある[1]。最近同位体実験により、この欠陥は4つCu原子が集まった複合体であることがわかった[2]。理論計算により、その構造は置換位置に1つ格子間位置に3つCu原子が入ったCu_(s)Cu_{3(i)}であると考えられてきた[3,4]。これはC_{3v}の対称性を持ち、フォトルミネッセンスの圧力依存性から決定された局所対称性[4]と一致する。前回の発表で、我々は従来考えられてきたCu_(s)Cu_{3(i)}の構造より安定な構造があることを見出した。その構造はVacancyの周りに4つのCu原子が集まったCu₄=Cu_{4(i)}であり、その局所対称性はT_dであることがわかった。この構造モデルによりCu-PLの多くの振る舞いが合理的に説明できる。しかし大きな問題としては、局所対称性が実験と合わないことである。したがって対称性が実験となぜ異なるのか説明が求められる。

それに答えるにはこのCu複合体によるフォトルミネッセンスの発光特性まで遡らねばならない。図1に、Cu-PLの遷移の図式を示す。Cu-PLのいわゆるゼロフォノン線と呼ばれる発光はエキシトンの励起状態(Γ₃とΓ₄)からの遷移に依るものである[1]。この二つの遷移が同位体分裂を示す。Γ₃励起状態は5本の同位体分裂を示している。これは⁶³Cuと⁶⁵Cuの2種類の同位体の配分の仕方では4つの複合体には5つのパターンがあることから説明できる。しかしΓ₄のエキシトンは複雑な微細構造(1; 3; 5; 3; 1)を示しそれを説明する理論はない。我々はその分裂を説明することで対称性の不一致を合理的に説明することに成功した。いかにその機構を述べる。

基底状態ではCu₄はT_d対称配置を持つが、励起された状態はそれぞれ2重(Γ₃)、3重縮退(Γ₄)を持つ。縮退した状態を電子が一つ占有するとヤーン・テラー歪みを起す。Γ₃励起ではT_d対称配置は壊れず、ゼロフォノン線の分裂は5本だけになるが、Γ₄に対してはC_{3v}に対称性が落ち



(1; 3; 4; 3; 1)分裂が生じ、それとΓ₃による主分裂とが重なり(1; 3; 5; 3; 1)の微細構造が現れる。これが原子構造としてはT_d対称配置を持つが、発光特性としてはC_{3v}の振る舞いをしている機構である。

- [1] J. Weber, *et al.*, Phys. Rev. B **25**, 7688 (1982).
- [2] M. L. W. Thewalt, *et al.*, Physica B **401**, 587 (2007); M. Steger, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100** 177402 (2008)
- [3] K. Shirai, *et al.*, J. Phys.: CM, **21**, 064249 (2009).
- [4] A. Carvalho, *et al.*, Phys. Rev. B **84**, 155322 (2011).

図1 Cu-PLの電子遷移