

4H-SiC 酸化によるアモルファス構造が表面単一光子光源に与える影響の理論的分析

Theoretical analysis of the effects of amorphous structures by oxidation of 4H-SiC on the surface single-photon sources

○東大院工¹, 埼玉大院理工², 量研³

○古川頼誉¹, 土方泰斗², 大島武³, 松下雄一郎¹

The Univ. of Tokyo¹, Saitama Univ.², QST³

○Y. Furukawa¹, Y. Hijikata², T. Ohshima³, Y.-i. Matsushita¹

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

SiC に内在する欠陥には単一光子光源 (SPS) として振る舞うものが存在することが知られており、実用的な SPS 向けの材料の候補として近年注目されている。ごく短時間の熱酸化処理を施すと SiC の表面に SPS (表面 SPS) が生成することが報告されているが[1]、その欠陥種は未特定であるほか、発光波長ピークが個々の表面 SPS によってばらつくという、これまでの SPS には無かった特徴が存在する。SiC 表面は熱処理の結果酸素が吸着することでアモルファス化した構造をなしていると考えられ、表面 SPS の考察の際にはこの点を考慮することが必要である。そこで本研究では、そのアモルファス化した表面構造が表面 SPS の電子状態にどう影響するかを明らかにするため、密度汎関数理論に基づいた第一原理計算を用い、SiC 表面上に存在する酸素関連の欠陥に関する電子状態を調べた。

全ての計算は一般化勾配近似 (GGA) のもと、 $3 \times 3 \times 1$ スーパーセルの 4H-SiC スラブモデルを用い、Si 面上の表面 SPS を調べることにした。複数の異なる表面構造を作成し、それぞれの構造に対して、表面に現れた欠陥を考察した。その結果、ギャップ中に現れる欠陥準位の位置に欠陥構造の位置依存性があり、表面構造ごとにばらつくことが分かった。例として図 1 に最表面の O_{Si} 欠陥 (Si 原子が O 原子に置換された構造) を考えた場合の構造と、ギャップ中の欠陥準位の位置のばらつきを示す。基底状態ではギャップ中の majority spin が 1 個占有されている (図 1 赤矢印) ため、図中の橙色で示された準位間での光学遷移が考えられるが、そのエネルギー差は表面構造によって 0.3 eV 程度の分布となっていることを明らかにした。この差は実験で観測されている値と同程度であることも分かった[2]。発表では他種の欠陥についての計算結果も報告し、より詳細な議論を行う。

[1] A. Lohrmann et al, Nature Communications **6**, 7783 (2015).

[2] 常見 他、応物秋季講演会発表 6p-A201-17 (2017).

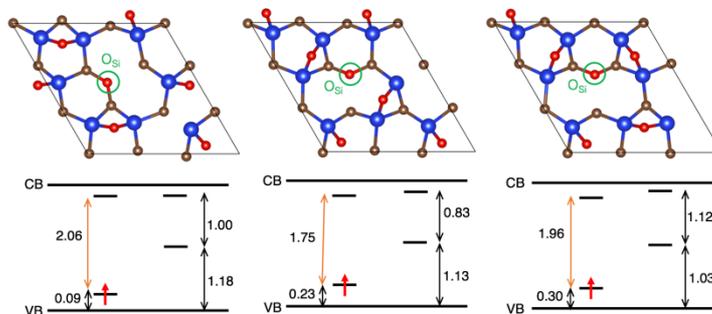


図 1 異なる表面酸化構造に O_{Si} 欠陥を挿入した際の構造とギャップ内準位。上図が表面の構造、下図が各構造に対応する準位 (左側が majority spin、右側が minority spin) を示す (単位: eV)。