

Si 結晶中の 10 原子空孔の特異な電子構造

Electronic Structures of V_{10} in Si Crystal

京都産業大学 神原大輝, 清水泰斗,[○]内田和之

Kyoto Sangyo Univ., Daiki Kamihara, Taito Shimizu,[○] Kazuyuki Uchida

E-mail: kazuyuki_uchida@cc.kyoto-su.ac.jp

半導体結晶中で、本来原子が存在するべき箇所から原子が抜け落ちて残された穴（原子空孔）が生じると、空孔周辺の原子は結合の相手を一部失うため、ダングリング・ボンド（余っている結合の手）が生じる。ダングリング・ボンドは、隣接するもの同士で再結合して消滅したり、比較的には離れたもの同士で相互作用して空孔特有の電子状態を作り出したりする。このような電子状態は、しばしば空孔周辺に局在し、半導体の電気伝導性や光学的な特性に決定的な悪影響を与えてしまう。その為、結晶成長中に意図せず生じてしまう単原子空孔 V_1 や、 V_1 が熱拡散して n 個集合した場合に生じる多原子空孔 V_n の「空孔周辺のナノスケール原子構造およびそれを反映して決まる電子構造」が、過去半世紀以上に渡って応用物理学の重要な研究対象であり続けて来た。

Si 結晶中の多原子空孔 V_n ($n>2$) の中で、特に $n=10$ の多原子空孔 V_{10} は、構造緩和後に残されるダングリング・ボンドの本数が特異的に少ない安定な空孔（魔法数空孔）と考えられており、古くからその存在が理論的に予測されてきた格子欠陥である^{1,2}。また多原子空孔 V_{10} には空孔配置の対称性が高いという特徴があり、その為ダングリング・ボンドはバンド・ギャップ中に縮退した電子状態を作り出すと考えられる。もしも縮退した電子状態が不完全占有された場合にはヤン・テラー機構によって原子構造の対称性低下がもたらされると予測されるなど理論的な観点からも、 V_{10} は長年、興味を持たれてきた。

本研究では、Si 結晶中の 10 原子空孔 V_{10} をスーパーセル法でモデル化し、第一原理計算で調べた。 V_{10} に対する第一原理計算は過去にも報告³されているが、空孔のサイズに比して用いられたスーパーセルのサイズが小さく、不十分なものに止まっていた。今回、最大で Si 原子 2000 個程度からなる大規模なスーパーセルを用いた結果、合計で 4 本のダングリング・ボンドがバンド・ギャップ中に作り出す 4 つの電子状態について、「”波動関数が節を持つ”ものの方が、”節を持たない”ものよりエネルギーが低い」という、教科書的な常識とは逆の結果を得た⁴。発表では、この一見は奇妙な電子構造が出現する物理的背景として、「価電子帯および伝導帯に埋もれて存在している再結合状態」と「バンド・ギャップ中の電子状態」の間での相互作用が本質的であるという解析結果を説明する。またこの電子構造を反映したヤン・テラー歪みについても、解説する。

[1] D. J. Chadi and K. J. Chang, Phys. Rev. B 38, 1523 (1988).

[2] T. Akiyama, A. Oshiyama, and O. Sugino, J. Phys. Soc. Jpn. 67, 4110 (1998). T. Akiyama and A. Oshiyama, J. Phys. Soc. Jpn. 70, 1627 (2001).

[3] K. Uchida and A. Oshiyama, J. Phys. Soc. Jpn. 79, 093711 (2010).

[4] D. Kamihara, T. Shimizu, and K. Uchida, J. Phys. Soc. Jpn., 91, 064709 (2022).