

ダイヤモンド中カラーセンターへの第一原理計算によるアプローチ

First-principles approach on color centers in diamond

産総研、○宮本 良之

AIST, ○Yoshiyuki Miyamoto

E-mail: yoshi-miyamoto@aist.go.jp

半導体中の欠陥の詳細な原子配置は、第一原理計算による内部エネルギー計算により決定することができる。一方、光励起による欠陥準位間の電子遷移の後、原子配置の変化(フランク-コンドン緩和)や励起電子状態の緩和過程をすべて計算だけで決定することは難しい。一般に欠陥に付随する準位が光励起後に輻射を伴わない過程で緩和する時間が短い場合には、その欠陥からの発光は期待できないと判定できる。しかし、その判定を広く普及された通常の第一原理計算の手法だけで行うのは難しく、電子のダイナミクスを扱う手法が必要となる。

本講演では、時間依存密度汎関数理論により電子と格子のダイナミクスを同時に扱う手法によるダイヤモンド欠陥における光励起後のダイナミクスの取り扱いについて紹介し、近年注目されているIV族-空孔中心の発光特性の説明を試みる。また、今回紹介する手法は広く普及している第一原理計算の手法と異なるので、その手法のあらままと、簡単な計算事例として孤立した分子をパルス光で励起した場合のコヒーレント時間の計算を、ベンゼン、ナフタレン、アントラセンを例に講演のイントロで紹介したい。