

ワイドギャップ半導体点欠陥・界面欠陥の理論研究

大阪大学大学院工学研究科 小林拓真、岩本蒼典

目的

SiC中の有望なスピン量子欠陥の理論予測

内容

SiCは物性・加工・デバイス技術が成熟しており、スピン量子光源のホスト材料として有望である。本研究では、HSE06汎関数を用いた第一原理計算によりSiC中の酸素関連欠陥を調査した。具体的には置換型酸素と空孔・アンチサイトが結合した欠陥の安定構造や形成エネルギー、電子準位を解明した。また、有望な欠陥に焦点を当て、スピン・光学特性の理論計算を実施した。

結果

SiC中の $O_C V_{Si}$ 欠陥が安定な欠陥の一つであることを示した。本欠陥は中性の荷電状態でスピン $S=1$ を有し、近赤外発光（1004 – 1117 nm）を示すことを明らかにした。さらに発光のデバイワラー因子は13.4%と高く、強いゼロフォノン発光を示すことを予言した。このように本欠陥がスピン量子光源として有望なシステムであることを理論的に解明した。

利用した計算機

SQUID・汎用CPUノード群 14,500ポイント, OCTOPUS・汎用CPUノード群 4,492ポイント