

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は優れた物性を有し、加工・プロセス技術が成熟していることから、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、SiCの電子物性を高精度に再現できるHSE06汎関数を用い、SiC中の不純物-空孔のペアに対する包括的調査を実施して、スピン量子光源として有望な点欠陥を調べた。

結果

既報告のNcVsiやOcVsiに加え、例えばAlsiVc, ScVsiが結合エネルギーの観点から安定に形成し、荷電状態によっては $S \geq 1$ の欠陥スピンを有することが判明した。これらを代表とする多数の欠陥を対象に光学特性・スピン物性の理論計算を実施し、スピン量子光源の有力候補探索に取り組んだ。

利用した計算機

SQUID・汎用CPUノード群 43711.5ポイント