

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

目的

SiCおよびGa₂O₃中の有望なスピン色中心の理論予測

内容

本研究では、ワイドギャップ半導体において高効率なスピン量子光源として機能し得る新規色中心の理論探索を実施している。特に、HSE 汎関数を用いて母材のバンドギャップを高精度に再現する計算条件を整え、その上で欠陥の安定性やエネルギー構造、発光特性などの欠陥物性を評価している。

結果

SiC の色中心について、安定性に加えて輻射・非輻射過程を詳細に評価することで、昨年度よりスクリーニング手法を改良した。その結果、実験的に実証されている N_CV_{Si}に加え、複数の不純物-空孔ペアにおいて有望な欠陥候補を予測できた。さらに、今年度からは Ga₂O₃半導体における新規色中心の理論予測にも着手し、新たなスピン欠陥候補を提示した。

利用した計算機 SQUID・汎用CPUノード群