

SIMOX 中の Si/SiO₂ 界面における巨大谷分離

Giant valley splitting at the Si/SiO₂ interface in SIMOX

林 稔晶

日本電信電話株式会社 NTT 物性科学基礎研究所

1. 研究目的

【背景】 p-Si/SiO₂ 界面の反転層では量子閉じ込めによって伝導帯に由来するサブバンドが生じる。このサブバンドは面内(x, y)方向と面直(z)方向の有効質量の違いによって四重縮退(+/-kx, +/-ky)と二重縮退(+/-kz)の二つの準位に分裂することが良く知られている。更に詳しい解析によると、基底状態(+/-kz)は縮退が解けて分離していることが分かった。これを谷分離と呼ぶ。谷分離は有効質量近似で説明することができない。これに対し、Ohkawa, Uemura(1977)と Sham, Nakayama(1978)が独立にモデルを提案し、それぞれ実験と比較的良好一致が得られている。谷分離は Si スピン量子ビットという観点から近年再注目されている。

一方、我々のグループでは埋め込み酸化膜(BOX)とその上の Si (SIMOX)との界面で z 方向に上記の理論予測よりも約一桁大きな谷分離が生じていることを実験的に発見した [Takashina(2006)]。これを我々は巨大谷分離と呼んでいる。また、巨大谷分離が生じる状況下で間接遷移型の発光とともに直接遷移の成分が大きくなることを発見した [Noborisaka(2014)]。しかし、巨大谷分離を生じさせる原因の特定に至っていない。

【目的】 我々のグループで実験的に確認された巨大谷分離は従来の理論で説明することができない。この起源を解明することがこのプロジェクトの究極の目的である。我々のデバイスの特徴は、Si 基板に酸素を打ち込んだ後、結晶性の回復と界面の平坦性を得るために 1350 °C という高温でアニールしていることである。この温度は Si の融点に非常に近い。このことを考慮して、SIMOX/BOX 界面で[110]方向に非常に大きなせん断応力が生じており、このせん断応力が Si のエネルギーバンドを大きく変形させ、巨大谷分離が生じるといふ仮説を我々は考えている。この仮説を検証するために第一原理計算を用いて歪 Si/SiO₂ 界面の電子状態について研究している。

2. 研究成果の内容

第一原理計算は PHASE を用いて実施した。第一原理計算に用いるモデルとして Si スラブを考える。単位ベクトルを[$\bar{1}10$], [110], [001]方向にとる。x-y 平面に平行な各 Si 層に Si 原子を一つずつ配置すると、それらは螺旋階段のように繋がっている。一番上と一番下の Si 原子はそれぞれ 2 つの H 原子で終端されている。z 方向に隣り合う Si スラブ間に相互作用が生じないように、Si スラブを真空層で挟んだ。交換相関エネルギーとして

LDA を用い、Si 原子と H 原子に対しノルム保存型の擬ポテンシャルを用いた。また、波動関数と電荷のカットオフエネルギーをそれぞれ 60 Rydberg、540 Rydberg とした。K ポイントサンプリングのメッシュは $6 \times 6 \times 1$ とした。

初めに第一原理計算で谷分離エネルギーが正しく見積もれるかどうかを検証した。Si スラブでは z 方向の閉じ込めのために k_z は良い量子数でなくなる。そのため、 Γ 点で量子化した準位の系列が観測される。それぞれの量子化準位が谷分離を生じるが、ここでは最低次の量子化準位の分離から谷分離エネルギーを見積もった。図は計算で見積もった谷分離エネルギー(点)を Si スラブの層数に対してプロットしたものである。

Ohkawa(1978)によると、Si 量子井戸の谷分離は膜厚 W に対して $\sin KW$ で振動しながら振幅は W^{-3} で減衰する(図の実線)。ここで K はバルク Si の伝導帯の底に相当する波数を表す。位相までは合わないが、理論予想通り、谷分離エネルギーは W^{-3} で減衰することがわかった。

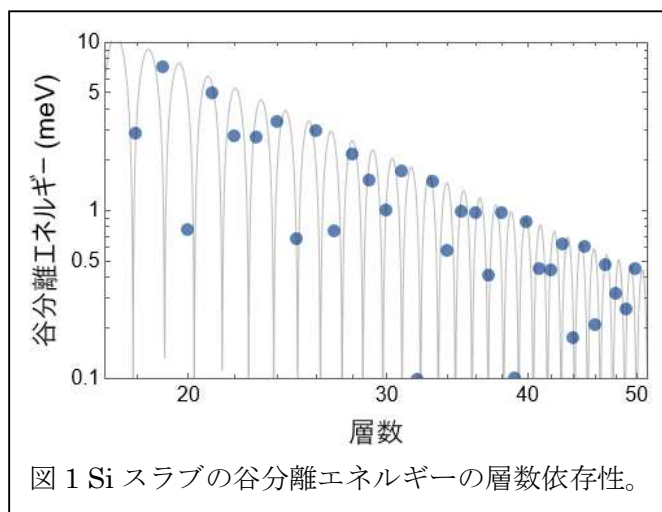


図 1 Si スラブの谷分離エネルギーの層数依存性。

次に谷分離エネルギーの電界依存性を見積もった。外部電界は閉じ込め方向に印加されているとする。低電界で谷分離エネルギーは量子井戸の膜厚依存性の影響を受ける。電界が強くなると実効的に三角ポテンシャルとなり、谷分離エネルギーは電界に比例する。その比例係数は 0.69 \AA であった。この値は Sham(1978)が理論的に見積もった比例係数 (0.43 \AA) に非常に近いことがわかった。

以上のことから、第一原理計算は谷分離の評価として非常に有用であることがわかった。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

本研究で谷分離エネルギーを見積もるためのパラメータとして、上記に示した Si スラブの層数 W 、電界強度の他に、 $[110]$ 方向の応力を考慮する必要がある。このように多くのパラメータがあるので、全体的な傾向を見るためにスーパーコンピュータによる計算が必要であった。

4. 今後の展望

現在、Si スラブに応力をかけて歪が入った構造の電子状態の研究をおこなっている。Ohkawa, Uemura(1977)で議論されているように、歪によって谷分離エネルギーが大きくな

ることが観測されている。この結果をどのように解釈すれば良いのかを考えるのが今後の課題である。

5. 成果発表

(1) 学術論文

(2) 学会発表

林 稔晶、影島 博之、登坂 仁一郎、藤原 聡、西口 克彦、21a-A304-7、応用物理学会 2023 年秋季大会

ICPS2024 に投稿中

(3) その他

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus			
Wisteria/BDEC-01	○	50,000	10,651.4
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			