

シリコンナノドットの構造および オプトエレクトロニクス特性の酸素制御

MS Modeling のCASTEPを使用し、シリコンナノドットの構造およびオプトエレクトロニクス特性に対する酸素の役割についての研究が行われました。

このような知見により、これらの特性の制御が可能になり、ナノスケールの固体発光素子・・・主要なナノテクノロジーの商業利用対象・・・の実現につながります。

ナノドットは、量子ドットとも言われますが、数100-数千1000の無機半導体ナノ粒子原子で形成され、約10億分の1メートルの大きさです。1980年代のなかば、オプトエレクトロニクス工学のアプリケーションのために開発されましたが、構造的、電子的、光学的にみて非常に興味深い特性を持っています。例えばナノドットは近紫外域の光を吸収し、可視光を再放射しますが、これらの光は、ナノドットのサイズと表面化学によって、その色が決定されています。ナノドットのサイズは合成時にナノスケールの精度でコントロールできるので、光学的特性を操作することが可能です。さらに、ナノドットは有機蛍光体よりも寿命が長く、幅広い励起スペクトルを持っています。これらの要因が結びついて、発光蛍光体として量子ドットを利用することは、将来のナノテクノロジーの主要利用の第一候補になっています[1]。

特にシリコンナノドットは、半導体材料のサイズがナノメートルスケールにまで縮小することで物理的特性が劇的に変化するという事実により、この10年間のもっともホットな研究領域になりました。さらに、多孔性シリコンが光ルミネセンスの特性を示すという1990年の発見によって、シリコンナノ構造から作られる固体発光素子が商業的に実現可能な域に到達したため、研究活動は疾風のごとくになりました[2]。

多孔性シリコンは空気中で反応し、大きな構造変化（また、従って光学的特性の変化）を引き起こすため、酸化物層を用いた不動態物質の理論的役割（不動態化とは、例えば半導体の、コンタミネーション防御や電気的安定性を増大させるために行う、酸化物層コートのこと）を、完全に理解する必要があります。

二酸化ケイ素のなかに分散させたシリコンナノクリスタルが光学利得を示すという知見のもと[3]、Modena大学の研究グループとイタリアのRegio Emiliaは、MS ModelingのCASTEPを使用して、シリコンナノドットの構造特性およびオプトエレクトロニクス特性に対する不動態酸素の役割を研究しました[4,5,6]。

Marcello Luppi とStefano Ossicini は密度汎関数理論 (DFT) を用いて以下を研究しました：

- ・水素化シリコンナノクリスタルへの酸素吸収時のオプトエレクトロニクス特性変化
- ・単結合および二重結合シリコン-酸素結合の異なる役割
- ・二酸化ケイ素マトリクスのシリコンナノクリスタルの物理特性への影響

CASTEP を使用して、研究者達は以下を示しました：

- ・水素で覆われたシリコンナノクリスタルにおいて、単結合酸素原子は電子特性において僅かな変化をもたらすだけだが、構造においては大きな変化を示す。
- ・しかし、二重結合酸素原子は、小さな幾何学変化を起こすが大きなエネルギーギャップの減少を起こす。そのことは、酸素暴露後、高多孔性シリコン内部で観測される光ルミネセンスの大きなレッドシフトを説明する。

SiO₂マトリクスに組み込まれたシリコンナノクリスタルの研

Organization

University of Modena , Regio Emilia, Italy

Products

BIOVIA Materials Studio CASTEP

究は、以下のことを明らかにしています：

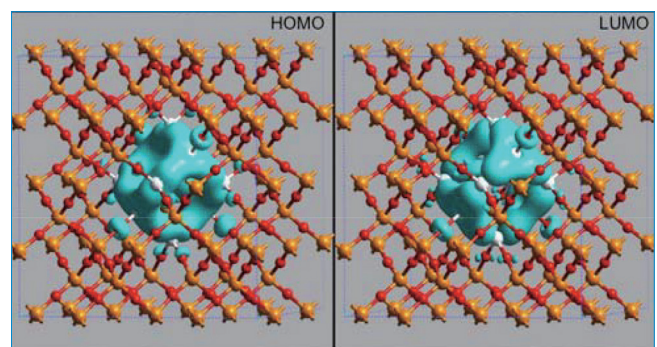
- ・ナノクリスタルの存在は、SiO₂のケージをわずかに変形する。そのケージはナノクリスタルとSiO₂のマトリクス間で応力を受けたSiO₂の界面領域の形成を決定している。
- ・新しい電子状態が、二酸化ケイ素のバンドギャップに生じる
- ・ナノクリスタルのシリコン原子と界面酸素原子は、ともに光学的特性に影響する

これらの発見によって実験的な光学特性観察結果を説明することができ、ナノドット光学特性の調整技術に導きます。それはナノドットテクノロジーによる固体発光素子の商業的実現への道を開くこととなります。

Marcello Luppi 博士は、次のような見解を述べています。「CASTEP を使用することによって、初めて全系が構造最適化された、絶縁体ホストマトリクスにエンベドされた半導体ナノドットの、最初の原理的研究が可能になりました。CASTEPコードのパフォーマンスのおかげで数百の原子を扱うことができ、系の電子特性、光学特性について非常に正確かつ効率よく研究を行うことができました。グラフィック・ユーザー・インターフェースは、私たちのモデルの描画および結果分析にとって完璧なツールでした。」

参考文献

1. www.sandia.gov/news-center/news-releases/2003/elect-semisensors/quantum.html を参照。
2. L. T. Canham, Appl. Phys. Lett. 57, 1046 (1990).
3. L. Pavesi, L. Dal Negro, C. Mazzoleni, G. Franzò, and F. Priolo, Nature 408,440 (2000).
4. M. I. Luppi and S. Ossicini, Physica Status Solidi (A) 197, 251 (2003).
5. N. Daldosso, M. Luppi, S. Ossicini et al., Phys. Rev. B. 68, 085327 (2003).
6. M. Luppi and S. Ossicini, J. Appl. Phys. 94, 2130 (2003).



HOMO とLUMO の一定値における等値面は、界面酸素原子上に幾分か分布しつつ、全体としてはSi NC 領域に限定されています。可視光線領域における強い吸収特性は、これらのドットによるものです。これらの特徴は全く新しく、二酸化ケイ素のケージに浸潤させたシリコンナノクリスタルの赤色光領域で観測されるフォトルミネセンスの発光の起源です。