The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	半導体中の深い不純物の電子構造 : 局在軌道による記述
Author(s)	星野, 敏春
Citation	大阪大学, 1978, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/32172
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【6】

氏名・(本籍)	星野敏春（ほしの としはる）
学位の種類	理学博士
学位記番号	第 4335 号
学位授与の日付	昭和53年6月13日
学位授与の要件	理学研究科 物理学専攻 学位規則第5条第1項該当
学位論文題目	**半導体中の深い不純物の電子構造 ——局在軌道による記述——**
論文審査委員	(主査) 教授 金森順次郎 教授 大塚 頴三　教授 山田 安定　助教授 鈴木 勝久 助教授 邑瀬 和生

論文内容の要旨

半導体（ケイ素，ゲルマニウムなど）中の深い不純物の電子構造を解明するために，新しい計算方法を提案した。それは，アンダーソンの化学擬ポテンシャル理論とクラスター・ベーテ格子法を結合したものである。前者によって，計算に必要なすべてのパラメーター，すなわち，母体原子間及び母体原子と不純物原子間の相互作用積分などが第1原理から計算できる。これにより，不純物原子の個性を取り入れることができる。後者によって不純物問題に必要な母体の電子構造を簡単に計算することができ，実験からわかっているバンドギャップなどを再現できる。我々は，この計算方法に基づいて，ケイ素中に入った周期表の第4行の不純物について定量的計算を行なった。まず，ガリウムと亜鉛の場合について，不純物原子と第1近接原子の領域の不純物ポテンシャルをセルフコンシステントに決定する計算を行なうことより，置換型不純物が元素の種類に従って，浅い準位を作るか深い準位を作るかの機構を明らかにした。ガリウム不純物の場合には，不純物原子とまわりの母体原子の領域に余分の電子がたまり，不純物とまわりの母体原子は，母体原子間と同様の安定な結合をする。そのとき，不純物原子から遠く離れた所には，空孔ができていて，その空孔は，不純物原子近傍にある余分の電子の作る長距離遮蔽クーロン力によって束縛される。これに対して，亜鉛不純物の場合には，不純物原子のポテンシャルが高いために，余分の電子が不純物原子の領域にたまることはできない。そこで，不純物とケイ素の自由原子のポテンシャル差は，結晶中でも残り，その短距離ポテンシャルによって深い準位が作られる。次に，遷移金属（クロム，マンガン，鉄）が母体ケイ素のT_d対称性を持つ格子間位置に入り，不純物原子の電子配置は$3d^n 4s^1$（nはクロム，マンガン，鉄に対してそれぞれ5，6，7，）であると仮定して，上に述べた計算を行なった結果，実験で知られている不純

物準位の傾向を説明できた。更に，我々が扱った不純物の3d軌道はまわりにある母体原子との相互作用が小さく，不純物準位の生成には，本質的役割を果たさないことがわかった。

論文の審査結果の要旨

Si, Geで代表される半導体においては，不純物がその特性を決定するものであることはよく知られている。とくにⅢ族およびⅤ族の不純物は価電子帯あるいは伝導電子帯に非常に接近したいわゆる浅い不純物準位を作り，p型あるいはn型という半導体の特性を決定する。一方Cu，Zn，AuおよびCr，Mn，Fe，等の遷移元素は，価電子帯，伝導電子帯からかなり離れた深い不純物準位を幾つか作り，それら準位はdonorあるいはacceptorとして働くことが知られている。 浅い不純物準位の起源については以前からよく研究され，その電子状態の定量的理解が得られているが，深い不純物準位の電子状態については未だにその物理像も確立していない。

星野君の研究は，最近発展した電子構造の計算法をこの問題に適用し，深い不純物準位の定量的な理論を建設することを目的としている。不純物原子としてはCu，ZnおよびCr，Mn，Feを例として取上げ，Siを母体とする場合を計算した。周囲のSi原子と不純物原子との化学結合が重要な因子であることから，局在原子軌道による記述を採用し，ハミルトニアンの行列要素の計算方法としてAndersonによって最近展開されたChemical pseudopotentialの理論を用いる。またCluster-Bethe格子近似と呼ばれる方法によって不純物原子から遠い格子点に波動関数が広がることを計算に取入れる。 これらの新しい武器によって， 原子ポテンシャルから出発し調節可能なパラメタを含まない計算を実行した結果，深い不純物準位について合理的な物理像を与えることに成功している。研究はとくに浅い不純物であるGaと深い不純物であるZnの両者について上記方法で詳細にその電子状態を計算し，上記の方法が浅い不純物の場合にも従来の結果とコンシステントであり，一方浅い場合と深い場合の相違がどのように起るかを明かにした。この場合には結晶中の電子分布もかなりセルフ・コンシステントに決定する計算まで行っている。また格子間位置に入る不純物である遷移元素の場合についても実験データの傾向をよく説明する結果を得た。

星野君の研究は深い不純物準位についての物理像の建設という目的に対して大きい進歩を遂げたものでありまた基礎理論としても他の場合に応用できる計算方法を確立したものであるので，理学博士の学位論文として十分な価値を有するものと認める。