

[110]方向に応力がかかった Si 量子井戸における谷分離の第一原理計算

First-principal calculations on valley splitting in Si quantum wells stressed in the [110] direction

NTT 物性研¹, 島根大学² °林 稔晶¹, 影島 博之², 登坂 仁一郎¹, 西口 克彦¹

NTT BRL¹, Shimane Univ.², °Toshiaki Hayashi¹, Hiroyuki Kageshima², Jinichiro Noborisaka²,

Katsuhiko Nishiguchi²

E-mail: tshk.hayashi@ntt.com

Si 閉じ込め構造における谷分離の研究は量子ビットのデコヒーレンスを誘発する原因の一つとして近年注目を浴びている[1,2]。通常、Si-MOS や量子ドットデバイスにおける谷分離の大きさは 1meV 以下と小さい。それに対し、我々のグループは SIMOX 基板の Si/埋め込み酸化膜界面において約 23meV と非常に大きい谷分離を発見してきた[3]。これは Si ベース量子ビットのデコヒーレンス抑制につながるかもしれない。しかし、Si/埋め込み酸化膜界面で何が起きているかを実験的にアクセスすることが難しく、巨大谷分離の起源は長年謎のままだった。我々のデバイスは高温熱処理をおこなった特殊なものであるということを踏まえ、Si/埋め込み酸化膜界面に大きな歪が生じ、その結果として谷分離が増大するという仮説を立て、実験結果の再解釈を実施した[4]。

我々は実験と並行して Si 量子井戸の第一原理計算を実施している[5]。特に今回の発表では [110]方向に応力が印加された場合について議論する。プログラムは PHASE を用いている。計算モデルは (001)面に平行な Si スラブで、両面とも H 原子で終端してある。歪テンソルを用いて応力を歪に変換[6]し、 $[\bar{1}10]$ 、 $[110]$ 、 $[001]$ 方向にと

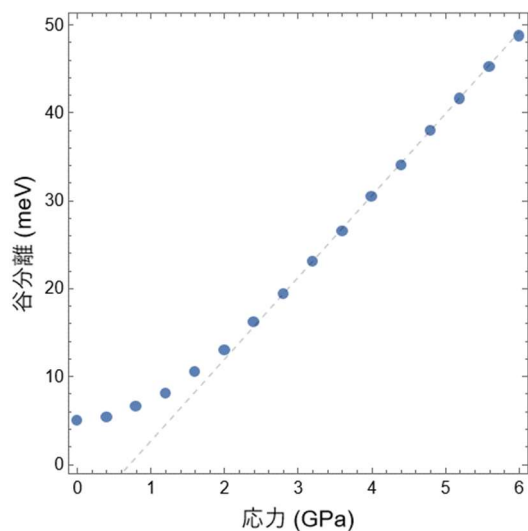


図 1. 谷分離の応力依存性

った基本格子ベクトルの長さを調節することによって歪んだ格子をモデル化した。図 1 は 21 原子層の Si スラブにおける谷分離を応力の関数としてプロットしている。低圧力では量子閉じ込めによる谷分離が支配的であるが、応力が強くなるにつれ谷分離はその強度に比例する。これは大川の kp 法による解析結果[7]を再現している。以上から、電界による閉じ込め効果[5]と歪の効果を組み合わせれば、我々が実験的に示した巨大谷分離を再現できる可能性を示せた。

[1] M. Lodari, et al., Phys. Rev. Lett. 128, 176603 (2022).

[2] G. Wang, et al., Phys. Rev. B 105, 165308 (2022).

[3] K. Takashina, et al., Phys. Rev. Lett. 96, 236801 (2006).

[4] J. Noborisaka, et al., J. Appl. Phys. 135, 204302 (2024).

[5] 林、影島、登坂、西口、第 84 回応用物理学会 秋季学術講演会 21a-A304-7.

[6] V. Sverdlov, “Strain-Induced Effects in Advanced MOSFETs”, Springer-Verlag (2011).

[7] F. J. Ohkawa and W. Uemura, J. Phys. Soc. Jpn. 43, 917 (1977).