

アルカリハライド結晶中のオフセンター型格子欠陥

工学研究科 福光一真 (電子物性研究室)

工学部電子工学科 萬本義徳 河村実生

Keywords:核磁気共鳴(NMR)、スピン-格子緩和、トンネル運動、オフセンターメモリー

1. 研究目的

ムーアの法則で知られているように電子素子の小型化は日進月歩の速さであり、現在はマイクロデバイスからナノデバイスへの移行期と考えられる。微細化が進むとトランジスタ内で機能する電子数も減ってくる。最終的には1ビット当たり1個の電子という極限になるであろう。しかしそこに行き着くまでには長い年月と多くの基礎研究が必要である。我々はオフセンター型格子欠陥の単原子メモリーへの応用の可能性に着目し、NMRによりアルカリハライド結晶中のオフセンター型格子欠陥のダイナミクスを調べている。

2. 研究の概要

ある種の半導体やアルカリハライド結晶に不純物がドーピングされるとオフセンター型格子欠陥が形成される。我々はこの欠陥の振る舞いを、NaBr:F中のオフセンターについては核磁気二重共鳴(DNMR)により、またNaI:F中のオフセンターについてはNMRを用いて実験的に調べている。以下にこれらの概要について述べる。

(1) NaBr:F中のオフセンター

純粋なアルカリハライド結晶は立方晶で各イオンサイトには電場勾配は存在しない。NaBr中に不純物としてFをドーピングしたとき、Fイオンはオフセンターを形成し格子歪を通じて周囲に電場勾配を発生する。さらにこの電場勾配は四極子相互作用を通じてNMR共鳴線に分裂を誘起する。我々は液体窒素温度下で、Fイオンのまわりの最近接サイトのNaイオンの四極子分裂周波数をDNMRを用いて測定し、Fイオンは正規格子点のまわりの等価な12のオフセンターサイトを高速で運動していると仮定してオフセンター変位の大きさを0.45Åと決定した[1]。これはSangsterの理論値とよく一致している。一方O.Kanert達は1.4Kから室温までにわたってNMRで核スピン緩和率を測定し、70K以下ではFイオンは同一面内の4つのオフセンターサイトをトンネル運動により束縛回転し、70K以上では古典的な熱運動によりホッピングしながら移動していると推論している。液体窒素温度域ではホッピング運動のため不純物イオンが見掛け上膨張したように運動しているという我々の結果ともよく合っている。

(2) NaI:F中のオフセンター

NaI中のFイオンについては理論と実験は現在のところ相反する結論になっている。理論計算ではオフセンターと予測されているが、実験からは不純物イオンが格子点にあるオンセンターという結果が得られている。この系に関しては実験がほとんど行われておらず、最終的な結論は出ていない。我々はNMRを用いて核スピン緩和率の測定を行っており、現在室温から液体窒素温度までの測定を行ったが、これまでの結果からはどちらとも結論出来ない。これからヘリウム温度までの実験を行ってFイオンのダイナミクスを調べる予定である。

3. 応用の可能性

アルカリハライド結晶のみならず半導体中でも存在が確認されているオフセンター型格子欠陥は将来単原子メモリー、光検出用センサなどへの応用が期待される。

[1] Int.J.Quantum Chem.75(1999)961-965