

Visible Luminescence from Porous Silicon

Yasuhiko Takeda

最近、フッ酸溶液中での陽極化成処理により多孔質化したSiで、bulk Siでは有り得ないような可視域でのフォトルミネッセンスが見いだされた¹⁾。Fig.1は多孔質Siの発光の様子を示したもので、試料の作製条件によって赤から黄緑色（発光エネルギーで1.6~2.0 eV）の発光が得られている。

この高効率可視発光の原因としては、量子細線または微粒子が形成され、量子サイズ効果（バンドギャップの拡大と運動量の揺らぎ）により生じるとする考え方が当初からある。ところが、励起スペクトル（発光強度の励起エネルギー依存性）には、（発光スペクトルに見られるような）作製条件による違いは見られず²⁾、発光現象は単純な量子サイズ効果では説明できないことがわかってきた。Siなど間接遷移型物質の量子サイズ効果についてはまだまだ不明な点が多いのが現状である。

一方この発光現象には水素の存在が重要であることがわかり、Si-水素化合物の発光の可能性が指摘されるようになってきた。そこで幾つかのモデル化合物について励起・発光エネルギーの計算を行い、可視発光の可能性を検討した。計算には半経験的分子軌道法パッケージMOPAC (QCPE #581) を用い、PM3法により行った。

その結果、Fig.2に示す直鎖テトラシランの両端をSi微粒子で置き換えた構造について、励起エネルギー3.3eV、発光エネルギー

2.1eVという、実験値と良く一致する値を得た。また、直鎖が長くなると（作製条件の違いに相当）発光エネルギーは低下するが、励起エネルギーはほとんど変化しないことがわかった。更に、励起・発光は直鎖部分で生じ、その遷移確率は大きい（即ち発光効率が大きい）こと、及び光励起下でも構造が安定であることを見いだした。

尚、多孔質Si中にSi微粒子が存在することは透過電顕観察から、オリゴシランが存在することは赤外吸収の測定から確認されている。

参考文献

- 1) Canham, L. T. : Appl. Phys. Lett., 57 (1990), 1046
- 2) Motohiro, T., Kachi, T., Miura, F., Takeda, Y., Hyodo, S. and Noda, S. : Jpn. J. Appl. Phys., 31 (1992), L207

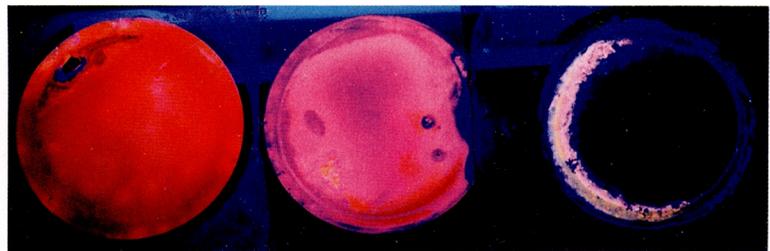


Fig.1 Photograph of three porous-Si samples illuminated by a 4-watt UV fluorescent lamp.

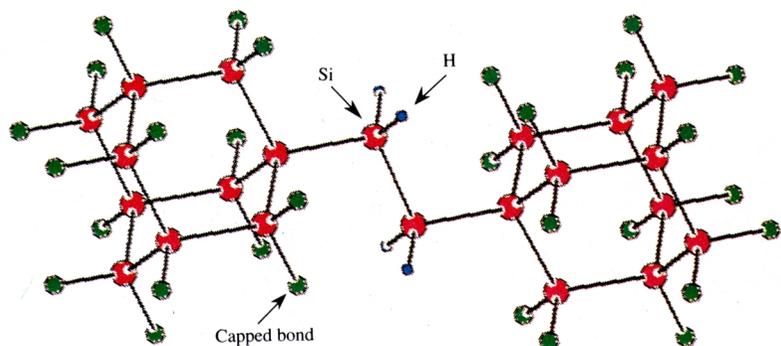


Fig.2 Model structure of "visible-luminescent Si".