

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		放射光X線を用いた熔融シリコンの電子運動量密度分布の決定—共有結合性の検証—			
研究テーマ (欧文) AZ		Inelastic x-ray scattering on molten silicon using synchrotron source			
研究氏 代表 者	カナガ CC	姓)オカダ	名)ジュンペイ	研究期間 B	2008 ~ 2009 年
	漢字 CB	岡田	純平	報告年度 YR	2010 年
	ローマ字 CZ	OKADA	JUNPEI	研究機関名	宇宙航空研究開発機構
研究代表者 CD 所属機関・職名		宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所・助教			
<p>概要 EA (600字~800字程度にまとめてください。)</p> <p>シリコンは融解すると金属になる。このとき電気伝導度は何桁も増大し、およそ $1.4 \times 10^4 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ まで上昇する。この値は、アルミニウムなどの自由電子近似が成り立つ通常の熔融金属のものほとんど変わらない。また、ホール係数や熱起電力も自由電子的値を示す。さらに、熔融シリコンの光電子分光スペクトルは、4個の価電子すべてが自由電子的であるとして説明できるとされている。このように、共有結合をもち典型的な半導体である結晶シリコンは、融解すると一転して単純な金属(等方的構造をもち価電子が自由電子として振る舞う)になる、そのように長い間考えられてきた。近年、熔融シリコンについて第一原理動力学シミュレーションが行われ、価電子状態についての詳しい情報が得られた。それによると、これまでの自由電子的描像に反して、熔融シリコン中にはフェムト秒で生成消滅を繰り返す共有結合が存在し、しかもそれが非常に多くの割合で存在する。このことが熔融シリコン中で実際に起きているとすると、固液界面での結晶成長についての描像が大きく変わり、より明確で自然なものになる。しかし、これまでの多くの試みにもかかわらず、共有結合の存在を直接観測することに成功した例はない。シリコンの融点は非常に高く(1412℃)、化学反応性が強い熔融シリコンをいかに安定に保持するか、また、高温試料の電子状態を直接観測するにはどのような測定法を用いるのが適切かといった克服すべき多くの課題があり、これらのことが実験的研究の障害となっていた。</p> <p>本研究では静電浮遊法を用いて、7×10^{-7} torr 真空雰囲気中で無容器保持した熔融シリコン球(2mmφ)について、116keVの入射X線を用いたコンプトン散乱測定を行った。116keVの硬X線を用いたコンプトン散乱はシリコンバルク状態の全電子運動量密度分布を精密に測定することが可能である。得られたコンプトンプロファイルについて、カー・パリネロ分子動力学計算(CPMD)法を用いて解析したところ、熔融シリコンに共有結合が存在することが明確になり、共有結合的な状態にある電子の割合が30~40%にのぼることが判明した。実験的に熔融シリコンの共有結合が直接観測されたのは初めてである。一方、自由電子的に振る舞う価電子の割合は10%以下であった。これまでの実験研究では4個の価電子すべてが自由電子的に振る舞うとされているが、電子物性はフェルミ準位近傍の電子挙動によって支配される。自由電子的な価電子の割合が10%以下であっても、熔融シリコンの自由電子的な電子物性を説明できる。</p> <p>ところで、大過冷却液体シリコンの液体-液体相転移の有無が液体物理分野における最近の話題である。基礎物理からの興味に加えて、相転移した相がどのような物性を示すかという応用上の興味から多くの研究者の興味を惹いている。相転移を予想する理論的な根拠の一つは熔融シリコン中の共有結合である。共有結合の存在が実験的に確かめられたことから、液体-液体相転移を観測するための実験研究が進展することが期待される。さらに本研究では、シリコンと同様に単純液体と異なる特異な物性を示すと考えられている熔融ボロンの粘性測定に成功し、熔融ボロン(融点 2633 度)の粘性が過冷却域においてアレニウス則から解離して急激に増加することを発見した。これは、熔融ボロンにおいても液体-液体相転移が存在する可能性を示唆する大変興味深い結果である。</p>					
キーワード FA	液体シリコン	コンプトン散乱	共有結合	静電浮遊法	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA						
研究機関番号 AC					シート番号						

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}	Viscosity of liquid boron							
	著者名 ^{GA}	J. T. Okada et al.	雑誌名 ^{GC}	Physical Review B					
	ページ ^{GF}	140201 (R) 1~4	発行年 ^{GE}	2	0	1	0	巻号 ^{GD}	81
雑誌	論文標題 ^{GB}	Covalency of Valence Electrons in Liquid Silicon: A Direct X-ray Compton Scattering Measurement							
	著者名 ^{GA}	J. T. Okada, et al.	雑誌名 ^{GC}	To be submitted					
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要 EZ

We have measured a Compton profile of liquid silicon with an electrostatic levitator and found that the Compton profile is much the same as that of solid silicon. Despite its metallic nature, the obtained Compton profile is largely different from that of an interacting free-electron gas with the same valence-electron density. Analysis of the Compton profile of liquid Si using Car-Parrinello Molecular Dynamics simulation shows the existence of covalent bonds in liquid silicon, which has been predicted by first-principles molecular dynamics simulation.