

# Mu欠陥形成エネルギーダイアグラムの 読み方について

2022年12月26日

JAEA先端基礎研究センター  
伊藤 孝

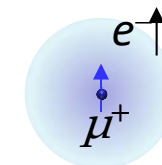
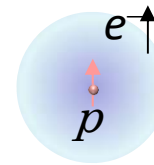
# MuとHの類似性

## 水素（擬）同位体

$0.11\text{ }^1_1\text{H}$ Mu	$^1_1\text{H}$ H	$^2_1\text{H}$ D	$^3_1\text{H}$ T
----------------------------------	---------------------	---------------------	---------------------

放射性擬同位体

水素原子      ミュオニウム (Mu)原子



静止質量

1 : 0.113

換算質量

1 : 0.996

束縛エネルギー

13.598 : 13.539 eV

ボーア半径

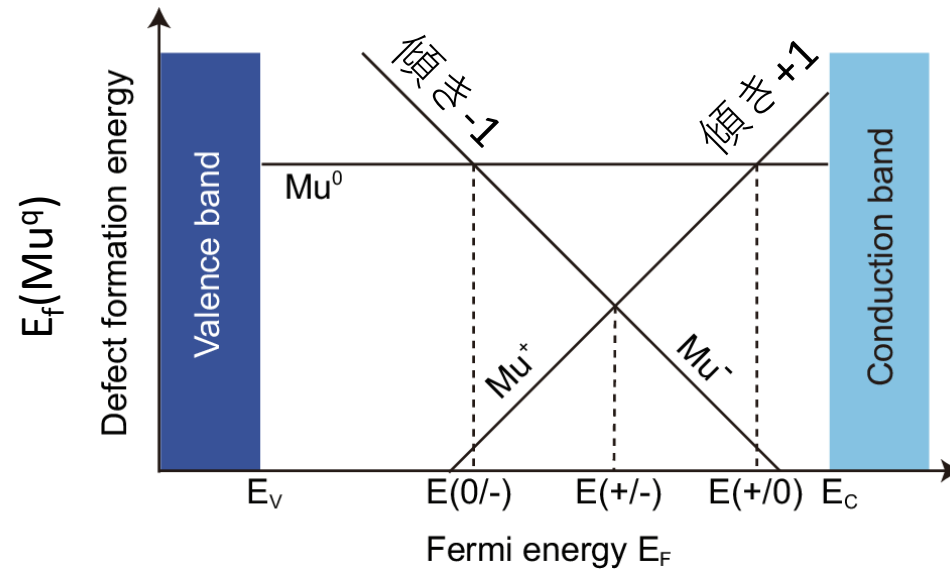
0.529 : 0.532 Å

物質中に打ち込まれたMuの電子状態 ~ 孤立水素欠陥の電子状態

希薄極限

(同位体効果を除いて)

# Mu欠陥形成エネルギーとは



$$E_f(\text{Mu}^q) = E_t(\text{Mu}^q) + qE_F + E_0$$

Mu欠陥を含む全電荷 $q^*$ の超格子を構造最適化した後の全エネルギー $E_t(\text{Mu}^q)$

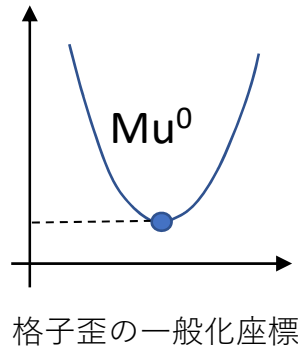
+  
熱浴に $-q$ の補償電荷を置くことによるエネルギー変化( $qE_F$ )

+  
定数項 $E_0$

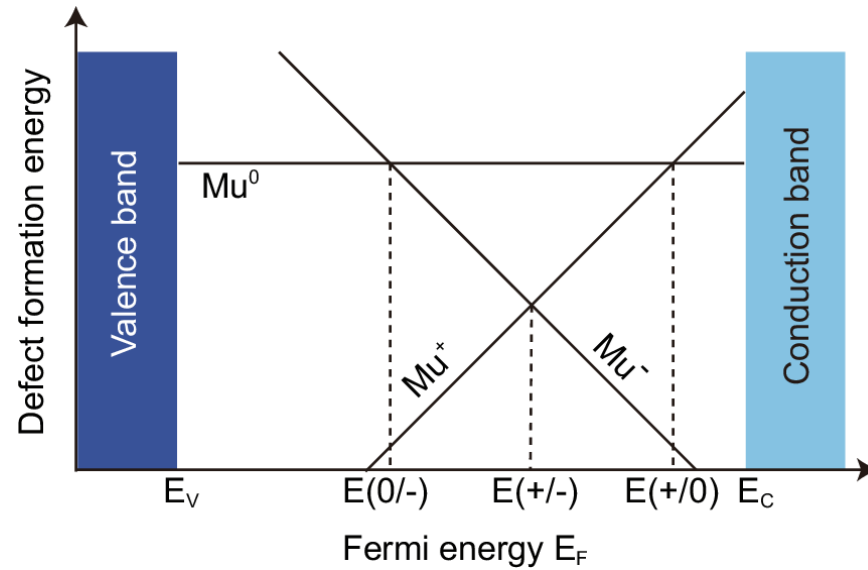
\* Mu欠陥そのものの電荷を指定しているわけではない

# Mu欠陥形成エネルギーとは

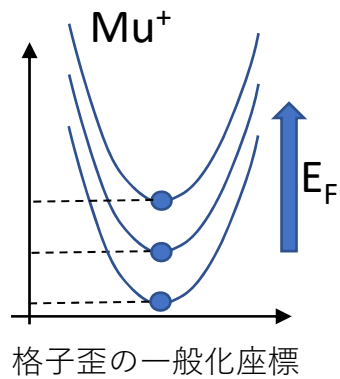
エネルギー (格子+電子系)



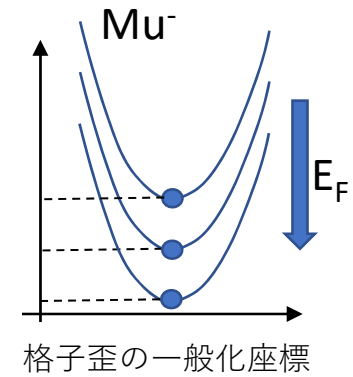
構造最適化後の格子+電子系のエネルギーを扱っていることに注意



エネルギー (格子+電子系+ $E_F$ )



エネルギー (格子+電子系- $E_F$ )

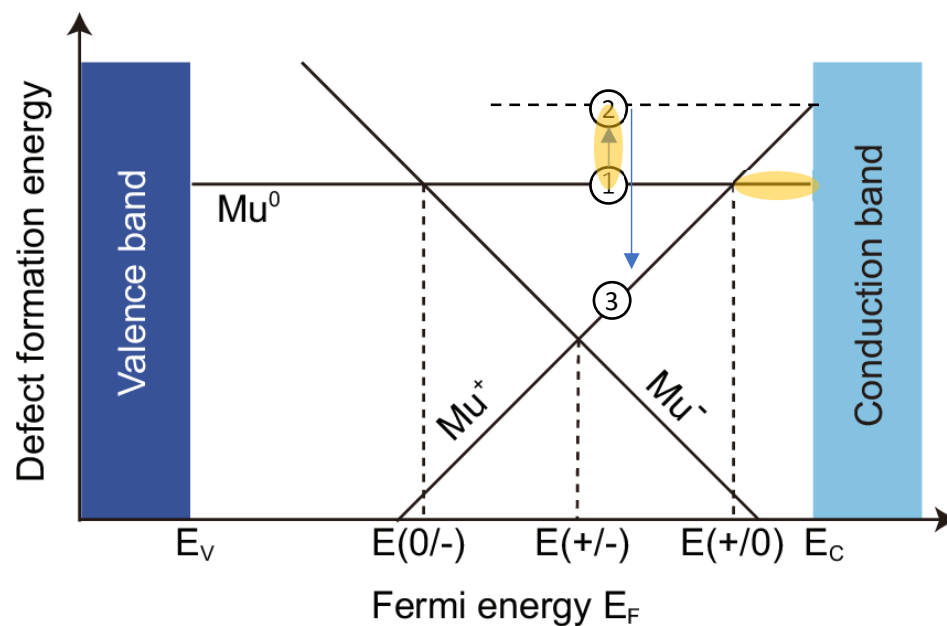


# MuSR実験からわかること

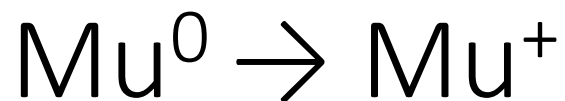
$E_F$ は試料の熱浴の状態を特徴づける量であり、一定とみなせる場合が多い



ある垂直線上のMuの状態変化をみることになる



温度変化等からドナー準位 $E(+/0)$ やアクセプター準位 $E(0/-)$ に関する情報が得られる



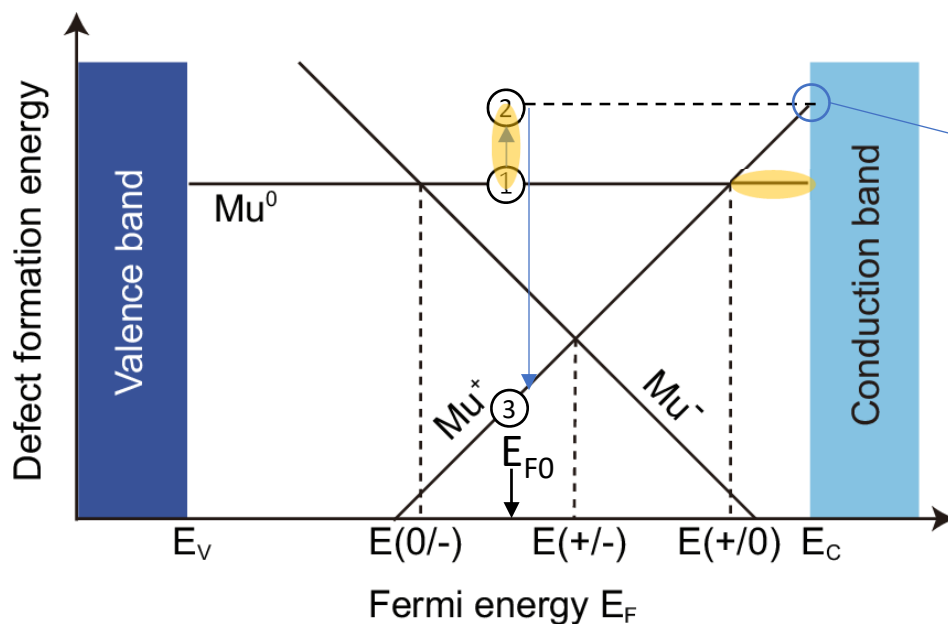
状態①:  $Mu^0(E_F=E_{F0})$ からスタート

$Mu^0$ の電子を近隣の原子の軌道から成る伝導帯に捨ててイオン化

熱浴の状態は変わらないので( $E_F=E_{F0}$ )、垂直に動いて状態②へ  
このとき必要になるエネルギーは $E_c - E(+/0)$

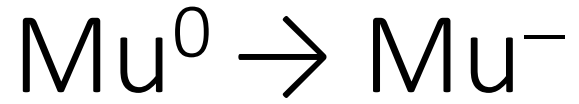
伝導帯に入った電子は最終的に熱浴へ移行

余分なエネルギーを放出して状態③:  $Mu^+(E_F=E_{F0})$ へ

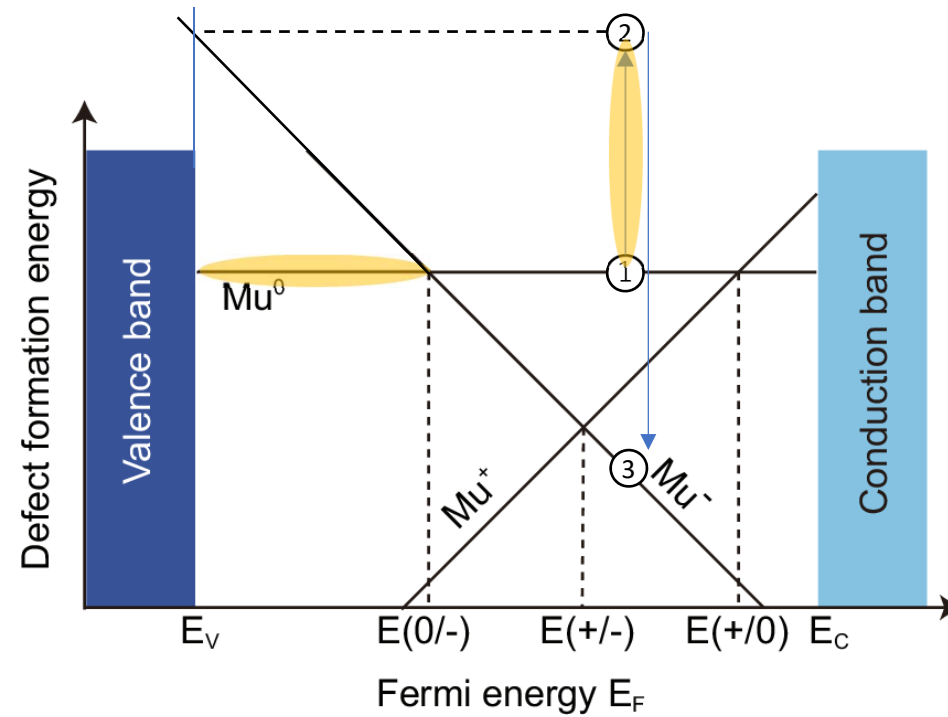


欠陥の状態が $Mu^+$ かつ伝導帯の底に電子が入った場合のエネルギー (状態②と等価)

$Mu$ 状態の温度変化からドナー準位 $E(+/0)$ がわかる

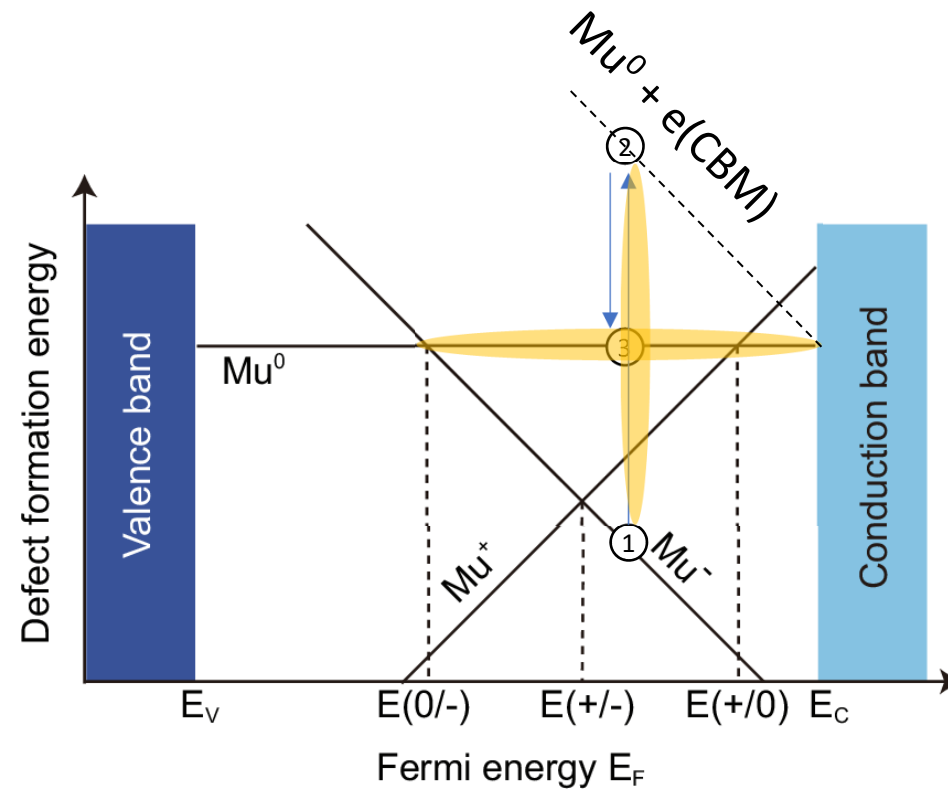


$\text{Mu}^0 \rightarrow \text{Mu}^+$ の場合と同じ考え方



Mu状態の温度変化からアクセプター準位 $E(0/-)$ がわかる

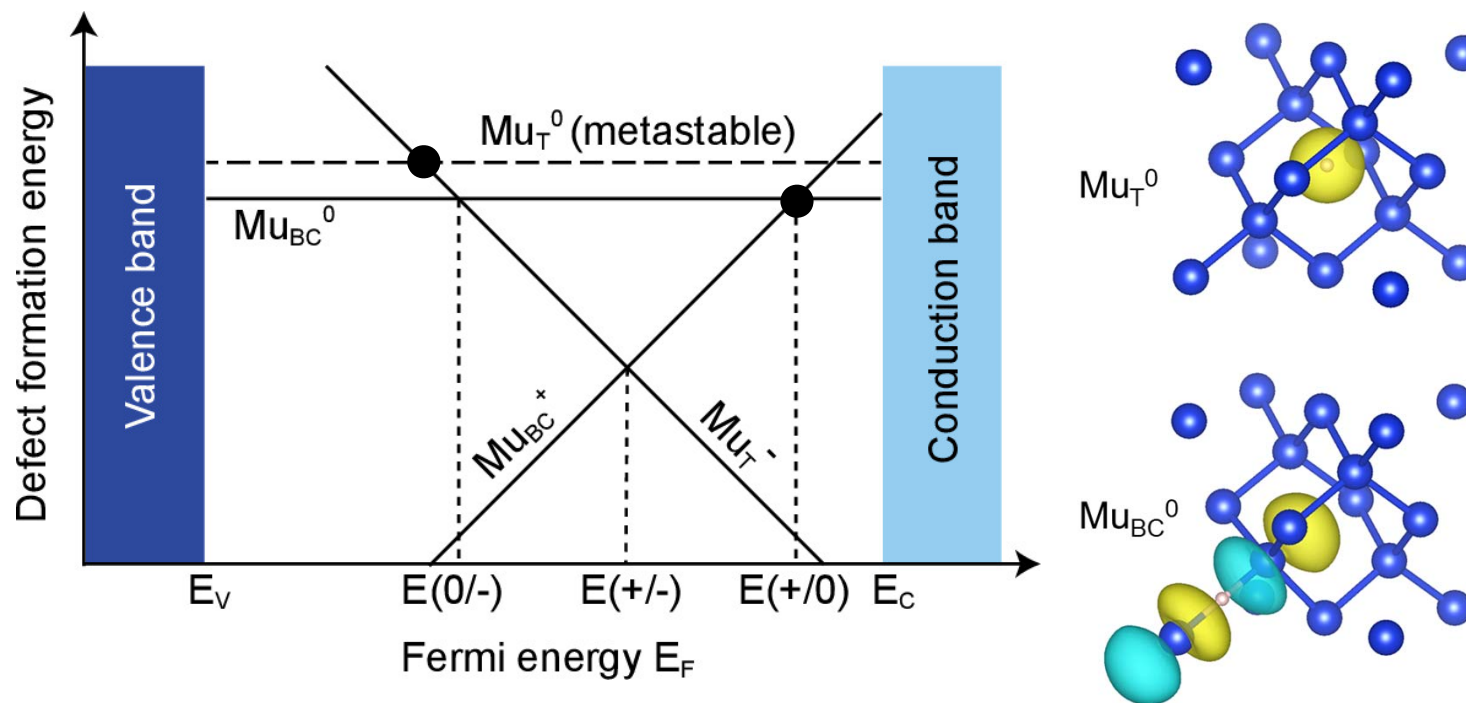
$\text{Mu}^- \rightarrow \text{Mu}^0$  (electron release)



Mu状態の温度変化からアクセプター準位 $E(0/-)$ がわかる



## 2種類の $\text{Mu}^0$ が関与する場合 (Si, GaAs等)



J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 051007 (2020).

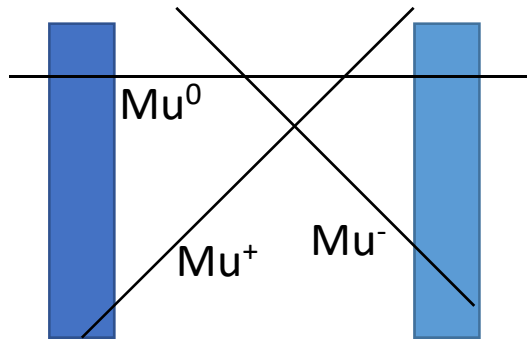
実験的には  $\text{Mu}_{\text{BC}}^0 \rightarrow \text{Mu}_{\text{BC}}^+$ ,  $\text{Mu}_{\text{T}}^0 \rightarrow \text{Mu}_{\text{T}}^-$ ,  $\text{Mu}_{\text{T}}^- \rightarrow \text{Mu}_{\text{T}}^0$  等の反応が観測され、そこから黒丸で示した準位に関する情報が得られている

# Mu<sup>0</sup>の意味

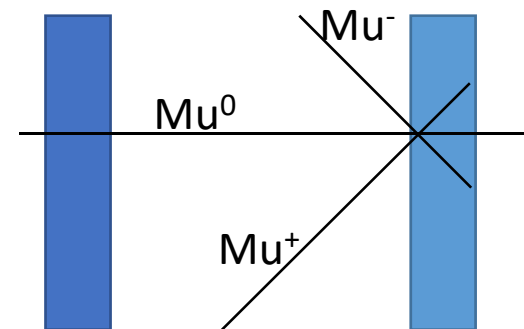
Mu欠陥を含む超格子の全電荷がゼロ  
(イオンコアの価数と平面波として扱う電子の個数が一致)

- ① Mu欠陥自体が中性(Mu<sup>0</sup>原子など)
- ② Mu欠陥自体はイオン化しており (Mu<sup>±</sup>)、  
余剰キャリアが伝導帯または価電子帯に遍歴的に入る

①の場合によくある形



②の場合によくある形



ここから読み取れるのは「この計算では電子局在解が見つからなかった」という事実のみである。  
電子局在解の存在を完全に否定するものではないことに注意(e-J. Surf. Sci. Nanotech. **20**, 128 (2022)).