

動的平均場理論による B ドープダイヤモンドの電子状態

三本 啓輔

新潟大学大学院自然科学研究科物質構造科学専攻

KEYWORDS: d-p モデル、動的平均場理論、コヒーレント・ポテンシャル近似

ダイヤモンドはバンド絶縁体であるが、炭素をホウ素で置換するとホウ素がアクセプターとなり、ホウ素高濃度領域において金属-絶縁体転移を起こす。最近、さらにドーピングした高濃度 B ドープダイヤモンドが超伝導を示すことが Ekimov らにより報告され [1]、現在における最高の転移温度は 11K (オンセット) が観測されている [2]。ドーピング量の少ない B ドープダイヤモンドのホウ素のつくる不純物準位はダイヤモンドの準位よりもかなり高いが ($\Delta E = 0.37\text{eV}$)、ドーピング量の多い B ドープダイヤモンドの場合、ARPES の実験 [3] より価電子バンドはフェルミレベルを切るが $\epsilon_{FT} \sim 0.5$ であり、準粒子を定義できない。そこで、どのような電子状態が実現しているのか調べるために、ホウ素置換によるランダムネスと電子-フォノン強結合効果を同時に扱えるモデルを採用する。そのハミルトニアンは以下のように表される。

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= H_0 + \sum_{i\sigma} \sum_{m=a,b} \left[(1 - \xi_i) \Sigma_m^C + \xi_i (\Sigma_m^B + \Delta\epsilon_m) \right] c_{im\sigma}^\dagger c_{im\sigma} \\ H_{\text{CPA}} &= H_0 + \sum_{i\sigma} \sum_{m=a,b} S_m c_{im\sigma}^\dagger c_{im\sigma} \\ H_0 &= \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \sum_{m=a,b} t_m (c_{im\sigma}^\dagger c_{jm\sigma} + h.c.) + t_{ab} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{ia\sigma}^\dagger c_{jb\sigma} + h.c.) + \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \sum_{m=a,b} \epsilon_m c_{im\sigma}^\dagger c_{im\sigma} \\ &\quad + \sum_i \sum_{m=a,b} U_m n_{im\uparrow} n_{im\downarrow} + \sum_i \sum_{m=a,b} \omega_m b_{im}^\dagger b_{im} + \sum_{i\sigma} \sum_{m=a,b} g_m (b_{im}^\dagger + b_{im}) (n_{im\sigma} - \langle n_{im\sigma} \rangle) \\ \Delta\epsilon_m &= \epsilon_m^B - \epsilon_m^C \\ \xi_i &= \begin{cases} 0 & \text{for Carbon} \\ 1 & \text{for Boron} \end{cases} \end{aligned}$$

ここで、 $c_{im\sigma}$ 、 b_{im} はそれぞれ電子、フォノンの消滅演算子であり、電子の電荷密度 $n_{im\sigma}$ と振動数 ω_m のアインシュタイン・フォノンが結合定数 g で結合している。また、a と b は隣り合う炭素原子間の sp_3 混成軌道のペアを示し、 t_{ab} は混成共有エネルギー、 $\Sigma_m^{C,B}$ はそれぞれ、炭素、ホウ素の自己エネルギー、 S_m はコヒーレント・ポテンシャルである。これを動的平均場理論とコヒーレント・ポテンシャル近似を用いて解き、価電子バンドと不純物バンドにおける電子状態を議論する。

[1] E. A. Ekimov *et. al.*, Nature **428** (2004) 542.

[1] H. Umezawa *et. al.*, cond-mat/0503303.

[1] T. Yokoya *et. al.*, Nature **438** (2005) 647.