

18a-D1-8

ボロンドープダイヤモンドの不純物バンドの成長過程

Evolution from impurity band to diamond-like valence band in boron doped diamond

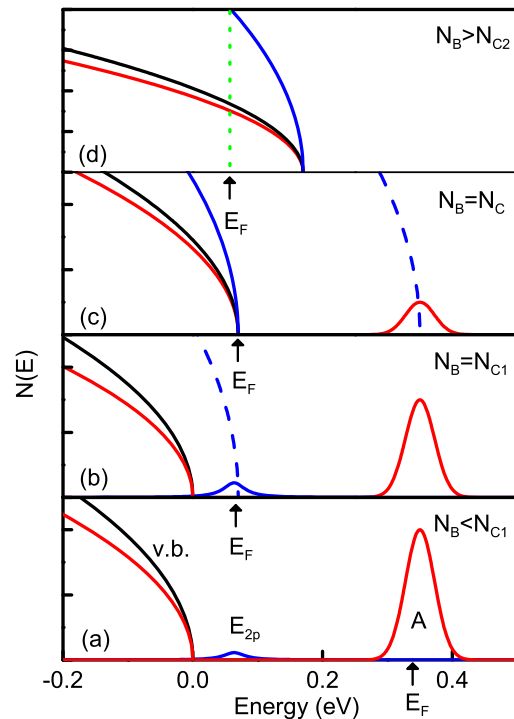
東海大工 ○犬島 喬, 太田優一

Tokai Univ. ○Takashi Inushima and Yuichi Ota

E-mail: inushima@keyaki.cc.u-tokai.ac.jp

ボロンを大量にドーピングするとダイヤモンドは金属的になり超伝導を示す。この場合ドーピングされたボロンが低濃度状態で形成された不純物バンドの位置に留まり、価電子帯に正孔を供給するのみで、ボロンそのものは超伝導に寄与しない、とする提案がある。一方で、炭素原子とボロンは超格子を形成し、その強い電子-格子相互作用により超伝導を発生させる、とする提案があり、議論が続いている。

今回不純物バンドが発生しているダイヤモンドの光学定数と、1.5%ボロンを含む超格子ダイヤモンドの第一原理計算から求めた光学定数の計算結果の比較検討を行い、低濃度状態から超伝導状態までの不純物バンドの成長モデルを作成した。



右図はボロン濃度(N_B)の増加に伴うバンド構造の変化を示したもので、横軸をエネルギー、縦軸を電子状態密度にして表現する。(a)は低濃度の電子状態で、バンドAはボロンの1s状態であり、 E_{2p} はその2p励起状態である。(b)はこれまで報告[1]してきた、電子濃度から見積もったボロン濃度 $N_{C1}=4\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ で、 E_{2p} 位置に不純物バンドが発生すると同時に、フェルミレベルが E_{2p} 位置に移動することで、このバンドは一部分波数ベクトル k 依存性を持つことを示す。(c)はモット転移のボロン濃度 $N_C=2\times 10^{20}\text{cm}^{-3}$ の時のバンドの様子で、 E_{2p} 状態の k 依存性を持った不純物バンドが母体の価電子帯の頂上のバンドに組み込まれる様子を示す。フェルミ準位は価電子帯の頂上に一致し、且つ、ボロンの1s状態が、一部 k 依存性を持ち始めることを示す。(d)はボロンが1.5%含まれたダイヤモンド・ボロンの $C_{63}B$ の超格子構造の電子状態である。フェルミ準位は価電子帯の頂上から 0.18 eV 下にあり、超伝導を示す金属状態である。価電子帯頂上の3本のバンドは Γ 点で3重に縮退しており、このバンド間光学遷移により価電子帯の上 0.5 eV を中心に孤立吸収を示す。

今回提案の不純物バンド成長モデルは、不純物バンドが発生したダイヤモンドと、 $C_{63}B$ の光学定数には本質的な差異が無いことに基づいている。

[1] T. Inushima et al., Phys. Rev. B79, 045210 (2009).