

氏 名 Jifeng Yu

学位（専攻分野） 博士（理学）

学位記番号 総研大甲第 1094 号

学位授与の日付 平成 19 年 9 月 28 日

学位授与の要件 高エネルギー加速器科学研究科 物質構造科学専攻
学位規則第 6 条第 1 項該当

学位論文題目 Photoemission Spectra Calculation of Boron-Doped
Diamond using Quantum Monte Carlo Method

論文審査委員 主 査 准教授 小出 常晴
教授 澤 博
准教授 小野 寛太
准教授 岩住 俊明
教授 那須 奎一郎
准教授 富田 憲一（山形大学）

論文内容の要旨

In this thesis, we apply a new path-integral theory to the many impurities Holstein model to calculate the photoemission spectra (PES) of a doped simple cubic lattice. We mean to investigate the two intrinsic attributes of electrons: itineracy and localization, which is able to clarify the co-existence of a Fermi edge and the step-like multi-phonon structure, observed recently in the PES experiment of the boron-doped diamond (BDD). Focusing on the area close to the Fermi level, a simple cubic lattice structure is adopted instead of the real diamond one to simulate the various valence band nature of BDD. This can simplify the problem without losing the key point.

For the phonon effect becomes significant just after the doping, we take into account the electron-phonon (e -ph) coupling only at the doped sites. However, the phonon effect is then not very noticeable after averaging all the sites, so we also calculate the spectrum of doped sites only, beside the whole system spectrum. From the classical Monte Carlo (MC) computation, the emergence of a clear Fermi edge is seen. Increasing the doping ratio, the impurity band expands upto the top of valence band, and fills the small semiconductor gap gradually. Thus, the sample undergoes a semiconductor-metal transition. Electrons can move freely from one impurity atom to another one through those intermediate carbon atoms. In quantum MC simulations, the lattice Green's function is calculated by the path-integral theory to reproduce the spectral function. From the whole system spectra, the phase transition is confirmed on the increase of the dopant concentration. The satellite structure is observed in the doped sites spectrum, even within lightly doped sample. This structure has not been found in classical MC cases, obviously coming from the phonon quantum character in the e -ph coupling. Increasing the coupling constant, a second phonon peak also presents corresponding to the double-phonon, even multi-phonon scattering process. Because of the stronger coupling, a clear Fermi edge also appears although the doping rate is low. The co-existence of a Fermi edge and the step-like multi-phonon satellite structure is reproduced completely, which can be interpreted from the two basic properties of electrons: itineracy and localization.

At the same time, our method, which can distinguish the spectra of different components in the material as we have done in calculating the spectra for the whole system and the doped sites only respectively, is very useful to study the doped systems, and to explain the resonant PES experiments.

論文の審査結果の要旨

ダイヤモンドは極め硬い物質で、且つ、5eV等の程の広いエネルギー間隙を有する安定な絶縁体である。又、強固な sp^3 結合に由来するその価電子帯は5eV程の広さを有し、強い遍歴電子系を構成している。従って、炭素を硼素でp型に置換し価電子帯中に正の自由キャリアーを発生させれば、この高い遍歴性を有する正孔は硬い格子振動（フォノン、160mev）と結合し、BCS型高温超伝導を容易に実現すると期待するのは、極めて自然な事である。しかし、硼素注入は局在性を助長させ電子・格子相互作用を増大させはするが、一方で、その代償として併進対称性を破り、遍歴性を損なわせる。従って、局在性と遍歴性との釣り合いの取れた共存が物性発現の鍵となる。

軟X線光電子分光のスペクトル形状論的観点に立てば、この遍歴性とは、スペクトルに明瞭なフェルミ端が現れる事であり、一方、局在性とは明瞭なフォノン（格子振動）構造が現れる事である。これに関連し、最近、石坂等は1%程度の低濃度硼素注入ダイヤモンドで、この（フェルミ端とフォノン構造の）共存が、従来からの常識である超伝導状態のギャップ関数中に於いてではなく、常伝導状態のスペクトルに於いて直接明瞭に実現している事を示唆する実験結果を発表している。

この特別に強い電子・格子相互作用を有する常伝導状態の出現に鑑み、余継峰君は、共存の問題を概念的に解明する事を主な目的と設定し、3-D立方格子中の多正孔系に多不純物ホルシュタイン・モデルを適応し、初めから暗に遍歴性を仮定してしまふCPA等の近似は一切用いず、フォノンを経路積分で扱い、厳密に、この光電子スペクトルの形状を理論的に計算する事に成功した。

得られたスペクトルのフェルミ準位近傍には、明瞭なステップ（フェルミ端）が現れ、一方、フェルミ準位より少し低（高束縛）エネルギー側には、局在フォノンとファノ効果による構造が順次明瞭に現れる。これは、ドーパされた正孔が硼素間をトンネル効果で強く遍歴しつつ、且つ、一方では、硼素近傍に局在し、フォノンと強く結合している事を示している。かくして、遍歴性と局在性の、エネルギー領域を分けた、量子力学的共存が理論的に立証され、その学術的意義は極めて大きい。

以上の理由から、本論文について審査員一致で理学博士の学位にふさわしい内容を持つとの結論に至った。