Osaka University Knowledge Archive

Title	Critical phenomena of the metal-insulator transition in doped semiconductors using density functional theory and local density approximation
Author(s)	Harashima, Yosuke
Citation	大阪大学, 2013, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/27467
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

Osaka University

【36】

氏　　名	原　嶋　庸　介（はら　しま　よう　すけ）
博士の専攻分野の名称	博　士（理学）
学　位　記　番　号	第　２５８１７　号
学位授与年月日	平成25年３月25日
学位授与の要件	学位規則第４条第１項該当 理学研究科物理学専攻
学　位　論　文　名	Critical phenomena of the metal-insulator transition in doped semiconductors using density functional theory and local density approximation （密度汎関数理論と局所密度近似を用いた半導体中での金属絶縁体転移の臨界現象に対する研究）
論　文　審　査　委　員	（主査） 教　授　小川　哲生 （副査） 教　授　小林　研介　　電気通信大学教授　黒木　和彦 准教授　キース　スレヴィン　　助　教　小倉　昌子

論　文　内　容　の　要　旨

半導体中で不純物濃度を増加させていった場合、絶対零度に外挿された電気伝導率が、ある濃度を境に有限の値を示すようになる。この時、不純物は乱雑に配置され、系が不規則性を持つことが考えられるが、この金属絶縁体転移に対しての実験と、不規則系に対しての数値計算とで、それらが示す臨界指数が一致しておらず、この相転移がどのユニバーサリティクラスに属するのか、ということに興味が持たれている。このずれは、不規則系の計算において、電子間相互作用を考慮していないことに起因していると予想できる。不規則系に電子間相互作用を取り込んだ場合は、不規則性が引き起こす Anderson 局在と、電子間相互作用、例えば、遮蔽の効果等が互いに影響を及ぼし合い、非自明な問題となっているため、非常に興味深い。

本研究は、不純物を注入された半導体中での金属絶縁体転移における不規則性と電子間相互作用の臨界現象に対する重要性を、数値計算を用いて調べたものである。

まず、半導体にドナー不純物が注入され、これらのドナー不純物が各々一個ずつ電子を与え、その不純物自身は+1 の電荷を持つことを考える。ここで半導体を有効媒質と見なし、その影響を電子の有効質量と誘電率を通じて考慮した。不純物はその有効媒質中で乱雑に配置され、それらの不純物によって不規則ポテンシャルが形成される。電子はその不規則ポテンシャルの中を運動しているが、さらにそれらの電子同士でも相互作用をする。以上の状況を考えることによって、この金属絶縁体転移の臨界現象について研究を行った。

不規則性と電子間相互作用の両方を考慮した Hamiltonian はそのままでは解くことが困難なため、本研究では密度汎関数理論を用いて、元の問題を Kohn-Sham 方程式を自己無撞着に解く問題に置き換えることを考えた。この時に現れる交換相関エネルギーは局所密度近似を用いて計算した。また、方程式を数値的に解くために 2 次の実空間差分近似を用いて離散化した。

本研究では計算を簡単にするために、Spin を一方向に固定した Spinless の場合を詳細に解析した。

金属絶縁体転移を定量的に評価するために、最高占有準位の Kohn-Sham 軌道に対して Multi-fractal finite-size-scaling を用いた。その結果、Spinless の場合には、臨界不純物濃度が $n_c=1.1\times10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$ という値が、また、臨界指数に対しては、$\nu=1.29(+0.08,\ -0.05)$という値が得られた。今回の計算で得られた値と、過去の実験から得られている値、電子間相互作用が考慮されていない不規則系の計算から得られている値を比較することで、不規則系での電子間相互作用の重要性を示した。

論文審査の結果の要旨

The thesis describes a numerical analysis of the metal insulator transition in a disordered interacting electron system. As a paradigm of such a system the author considers a doped semiconductor. The semiconductor is modeled as an effective medium, with appropriate dielectric constant and effective mass, in which there are donor impurities at random positions. To facilitate comparison with experiment values appropriate for silicon were used. Each donor impurity supplies a single electron. An important feature of this work is that the long-range Coulomb interaction between the electrons is fully taken into account. This is done using the Kohn-Sham formulation of density functional theory in the local density approximation. For reasons of numerical tractability the central results of the thesis concern spin-less electrons. An ensemble of systems of various sizes and with varying donor concentrations was simulated. The metal-insulator transition was analysed by applying multi-fractal finite size scaling analysis to the highest occupied Kohn-Sham orbital. The central results are as follows:

a) A value for the critical concentration at which the metal-insulator transition occurs was found that is in reasonable agreement with the experimentally measured value in phosphor doped silicon. This indicates that the model provides a faithful description of the metal-insulator transition in doped semiconductors.
b) Good agreement was found between the critical exponent obtained in the multifractal finite size scaling analysis and the measured value in phosphor doped silicon.
c) A clear difference was found between the critical exponent for this model and the well-established value for the disorder driven Anderson metal-insulator transition in systems of non-interacting electrons. This demonstrates that the long-range Coulomb interaction between the electrons changes the universality class of the transition.

This thesis breaks new ground by taking into account both disorder and the long-range Coulomb interaction between electrons on an equal footing. And it demonstrates that doing so permits a much better understanding of the physics of the metal-insulator transition in doped semiconductors. This thesis represents an important advance on previous work where the effects of disorder and Coulomb interactions were considered separately. For these reasons the thesis clearly merits the award of the Ph.D. degree.