

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ СИЛЬНОЛЕГИРОВАННОГО АЛМАЗА МЕТОДОМ СТАЦИОНАРНОГО ГРИНОВСКОГО ОПЕРАТОРА

Студент

Жогаль Н.Н.

Руководитель

д.ф.-м.н., профессор

Алексеев Н.И.

Санкт-Петербург
2025

Актуальность. Полупроводниковый алмаз

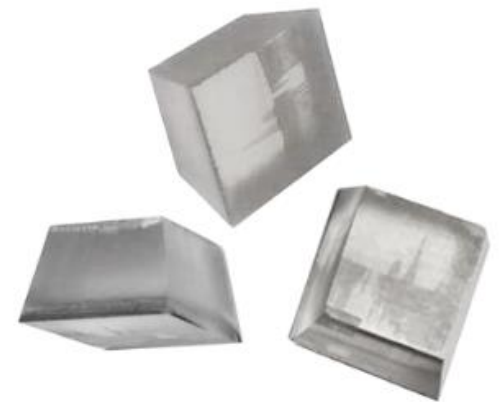
Параметр	Si	4H-SiC	β -Ga ₂ O ₃	Алмаз
Ширина запрещённой зоны, эВ	1.12	3.5	4.9	5.5
Теплопроводность, Вт·м ⁻¹ ·К ⁻¹	150	370	11 - 27	2290 - 3450
Поле пробоя, 10 ⁶ ·В/см	0.6	3	8	10



НРНТ
кристалл

Особенности алмаза:

- Выдающиеся электрофизические параметры даже среди широкозонных материалов
- Высокая химическая инертность
- Очень малая постоянная решётки → р-тип проводимости только за счёт легирования бором, n-тип только за счёт легирования азотом или фосфором



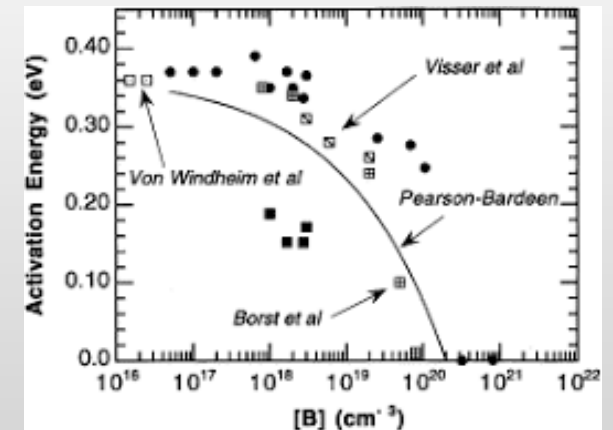
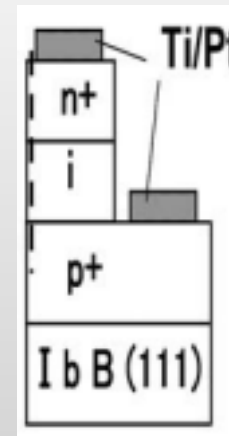
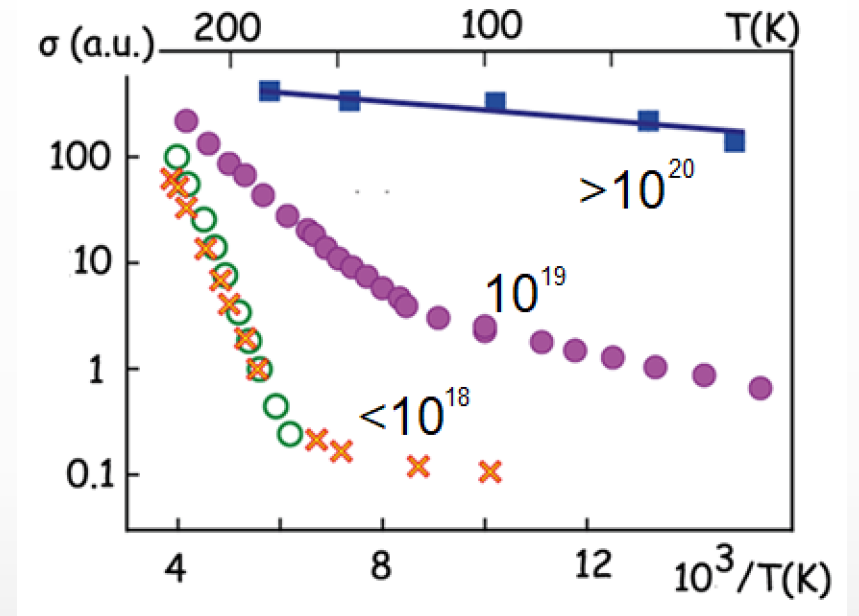
PE-CVD
эпитаксиальный слой

Актуальность. Сильнолегированный алмаз

С концентрации бора $p=10^{18}\text{cm}^{-3}$ энергия активации примеси E_a заметно падает

При концентрации бора $p=10^{19}\text{cm}^{-3}$ наблюдается излом на графике температурной зависимости проводимости $\lg(\sigma)(1/T)$ при температуре $T\sim 120\text{K}$

Особый интерес представляет возбуждённые состояния бора. В сильнолегированном алмазе они играют роль, близкую к компенсирующей примеси



[K. Oyama, High performance of diamond p + - i - n + junction diode. Applied Physics Letters 94, 152109, 2009]

[J.-P. Lagrange, DRM 1998] 3

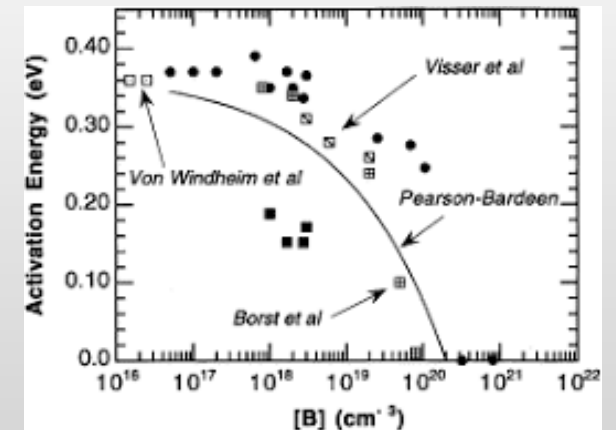
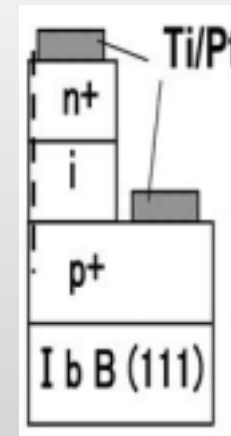
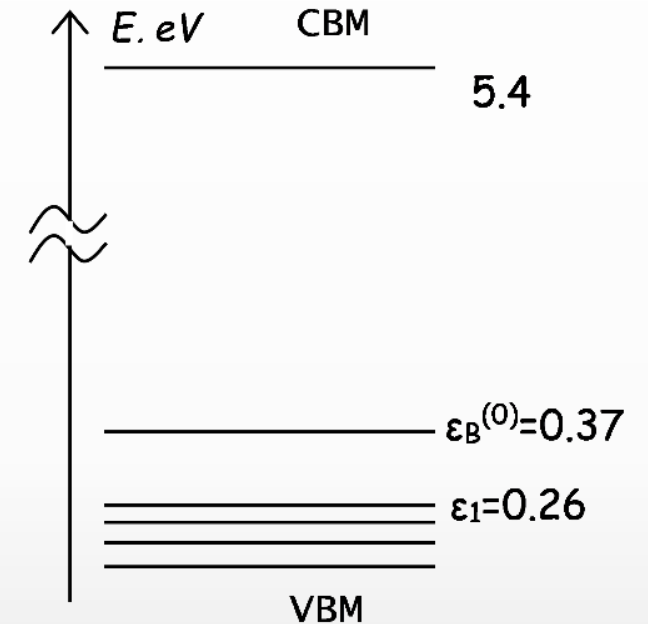
Актуальность. Сильнолегированный алмаз

С концентрации бора $p=10^{18}\text{cm}^{-3}$ энергия активации примеси E_a заметно падает

При концентрации бора $p=10^{19}\text{cm}^{-3}$ наблюдается излом на графике температурной зависимости проводимости $\lg(\sigma)(1/T)$ при температуре $T\sim 120\text{K}$

Особый интерес представляет возбуждённые состояния бора. В сильнолегированном алмазе они играют роль, близкую к компенсирующей примеси

[K. Oyama, High performance of diamond p + - i - n + junction diode. Applied Physics Letters 94, 152109, 2009]



[J.-P. Lagrange, DRM 1998] 4

Цель работы

Проведение моделирование проводящих свойств сильнолегированного алмаза в технике стационарного гриновского оператора.

Конкретные задачи:

- Расчет зонной структуры примеси в различных вариантах сверхрешётки
- Рассмотрение и анализ зависимостей зонной структуры примеси от отдельных параметров

Техника стационарного гриновского оператора

Формула Грина:

$$\langle k | \hat{G} | k' \rangle \sim G_{kk} \delta_{kk'}$$

Узельное представление ГО

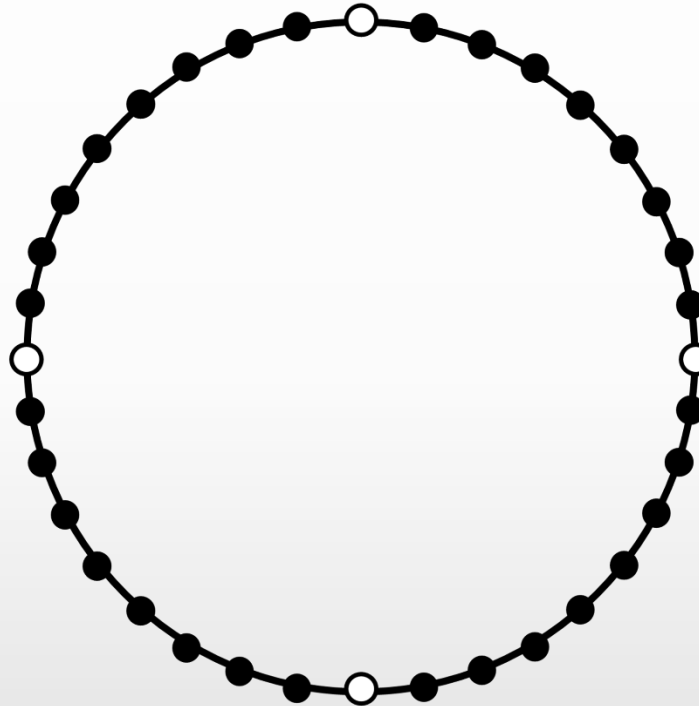
$$EG_{nn'} - \sum_{n''} \langle n | H | n'' \rangle G_{n''n'} = \delta_{nn'}$$

Уравнение Дайсона

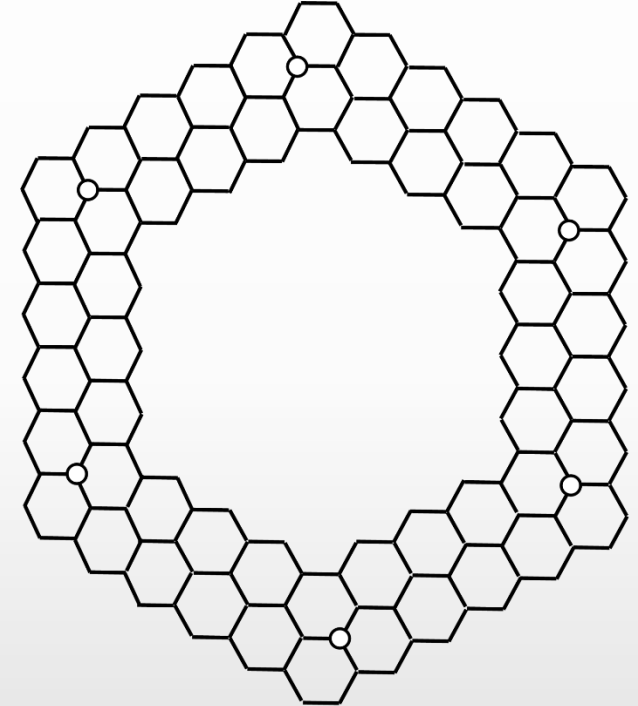
$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{V} \hat{G}$$

G – функция Грина, δ – дельта функция,
 H – Гамильтониан, V – интеграл
перекрытия, k – волновой вектор

Одномерная система



Двумерная сверхрешётка



Пример решения уравнения Дайсона

Система уравнений:

$$G_{00} = g_0 + g_0 V G_{10} - g_0 V G_{20} E_+$$

$$G_{10} = g_1 V G_{00} + g_1 U G_{20}$$

$$G_{20} = -g_1 V G_{00} E_- + g_1 U G_{10}$$

Матричный вид:

$$\begin{pmatrix} 1 & -g_0 V & +g_0 V E_+ \\ -g_1 V & 1 & -g_1 U \\ +g_1 V E_- & -g_1 U & 1 \end{pmatrix}$$

$$g_0 = \frac{1}{E - \varepsilon_B}$$

$$g_1 = \frac{1}{E - \varepsilon_C}$$

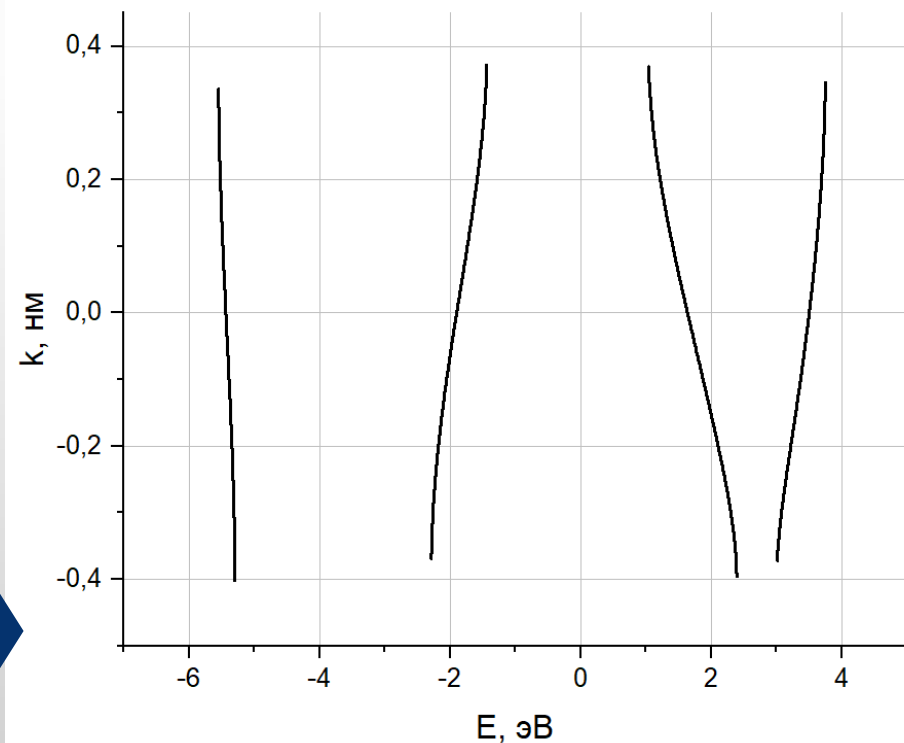
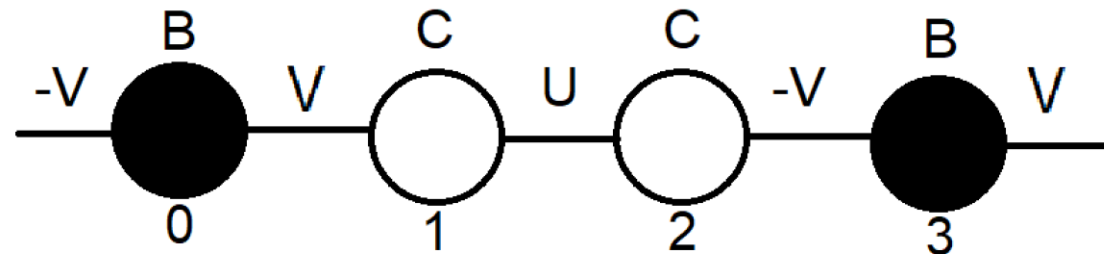
$$\Delta E_C = E - \varepsilon_C$$

$$E_+ = \exp(3ika)$$

$$E_- = \exp(-3ika)$$

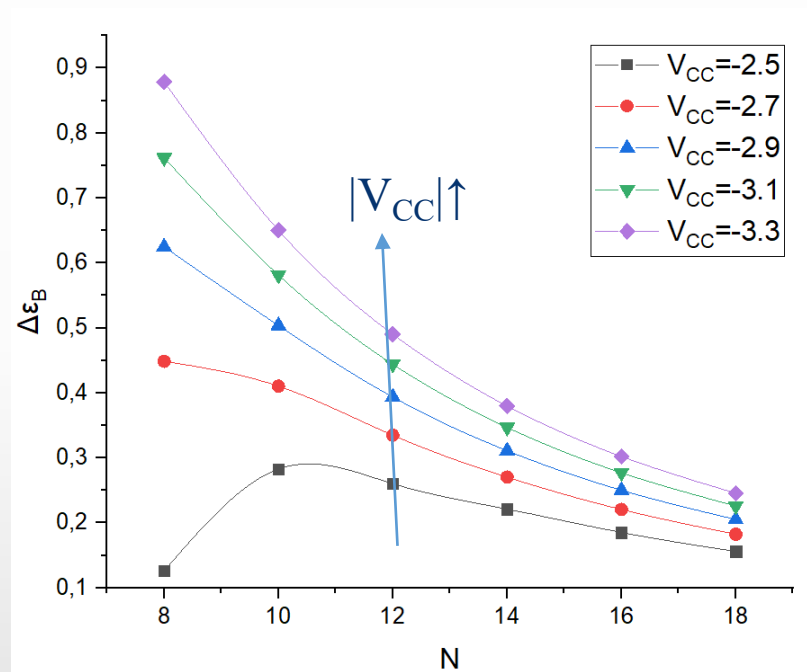
Расчёт зонной структуры:

$$\sin^2 \frac{3ka}{2} = \frac{(E - \varepsilon_B)(E - \varepsilon_C)^2 - V_{CC}^2}{(E - \varepsilon_C) 4V_{CC} V_{BC}} = \frac{(\Delta E_C - (\varepsilon_B - \varepsilon_C))(\Delta E_C)^2 - V_{CC}^2}{\Delta E_C 4V_{CC} V_{BC}}$$

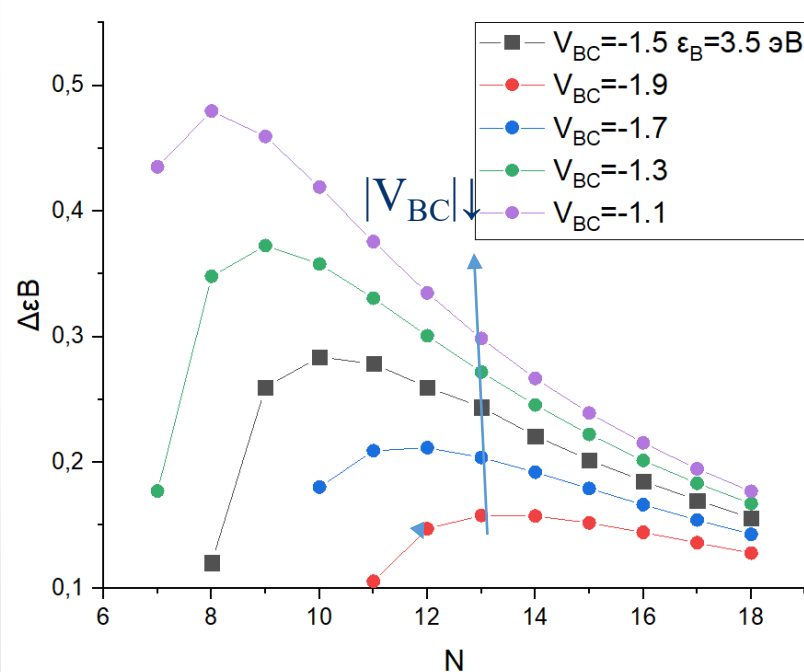


Зависимость ширина зоны $\Delta\varepsilon_B$ от концентрации

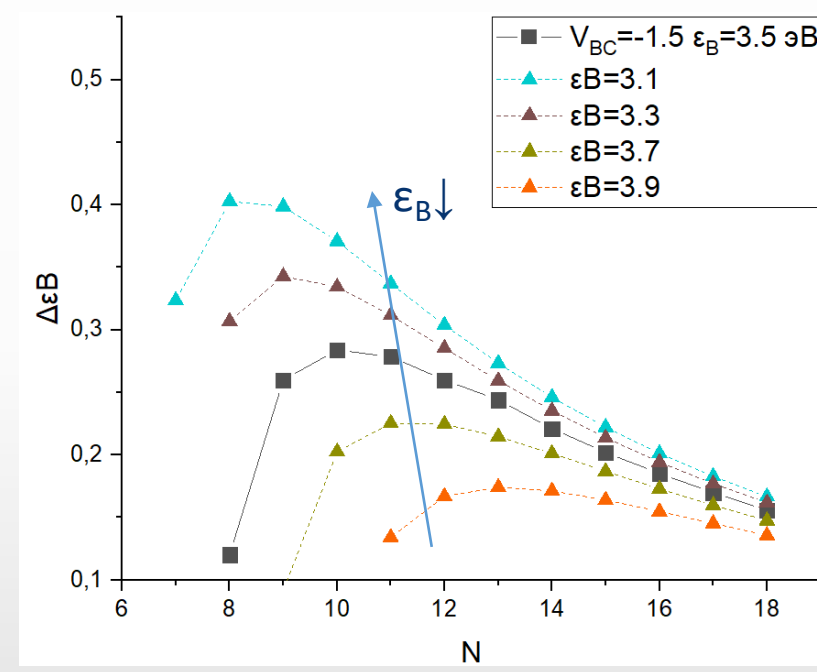
При различных значениях:



Интеграла перекрытия $|V_{CC}|$



Интеграла перекрытия $|V_{BC}|$

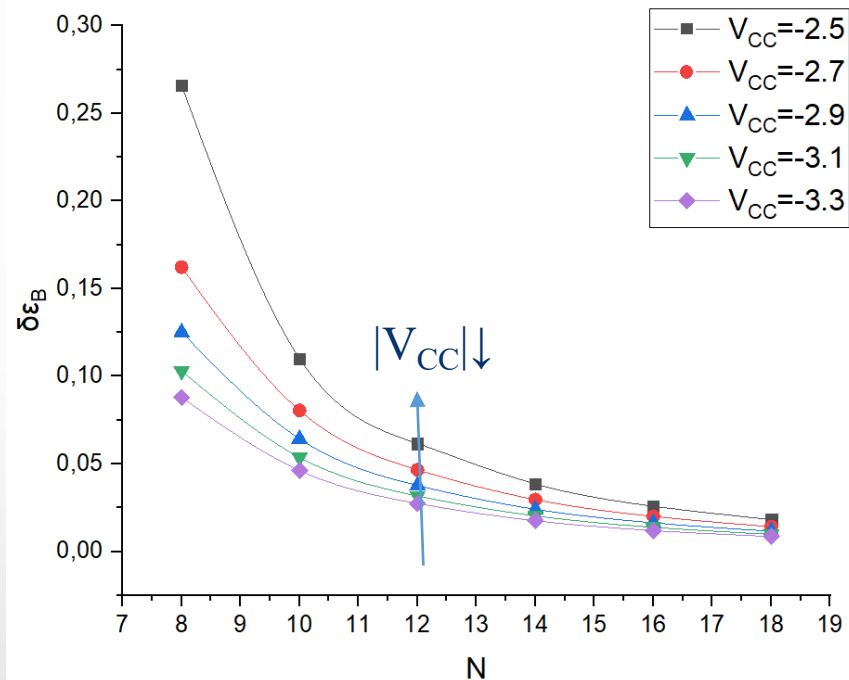


Положения примеси ε_B

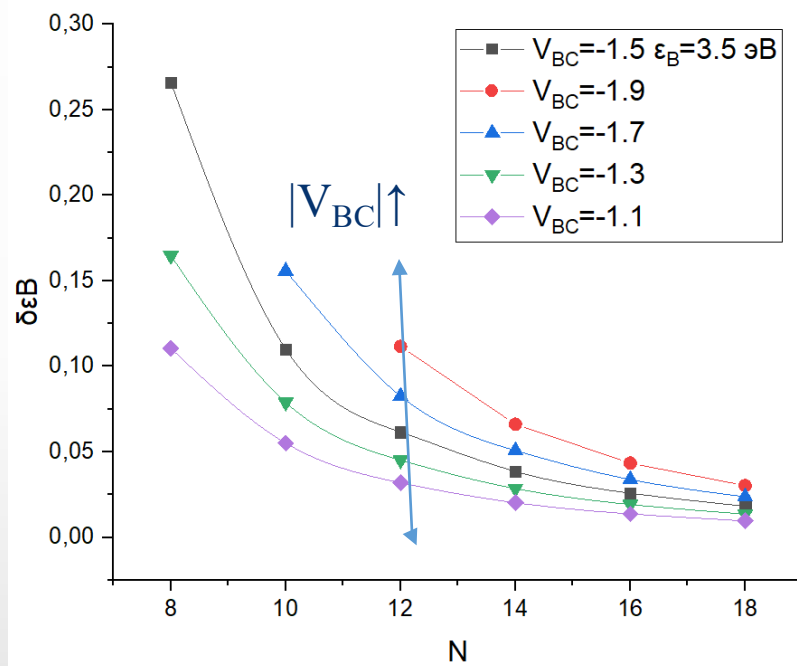
N – период появления атома примеси в одномерной системе, $\delta\varepsilon_B$ – ширина зоны примеси в системе, $\Delta\varepsilon_B$ – запрещённая зона между примесными зонами, $|V_{CC}|$ и $|V_{BC}|$ - Интеграл перекрытия между основными и основным и примесным атомами соответственно

Зависимость ширина зоны $\delta\varepsilon_B$ от концентрации

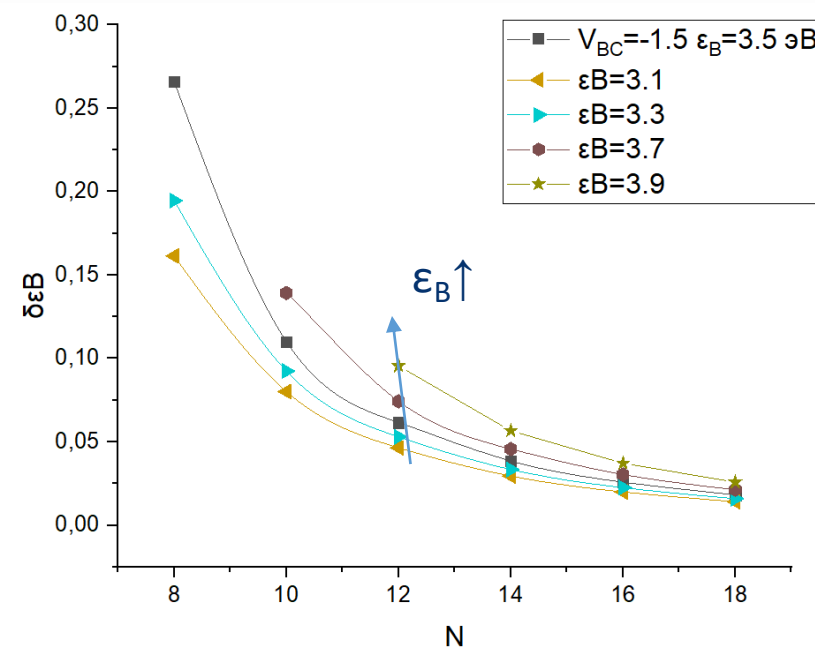
При различных значениях:



Интеграла перекрытия $|V_{CC}|$



Интеграла перекрытия $|V_{BC}|$



Положения примеси ε_B

N – период появления атома примеси в одномерной системе, $\delta\varepsilon_B$ – ширина зоны примеси в системе, $\Delta\varepsilon_B$ – запрещённая зона между примесными зонами, $|V_{CC}|$ и $|V_{BC}|$ – Интеграл перекрытия между основными и основным и примесным атомами соответственно

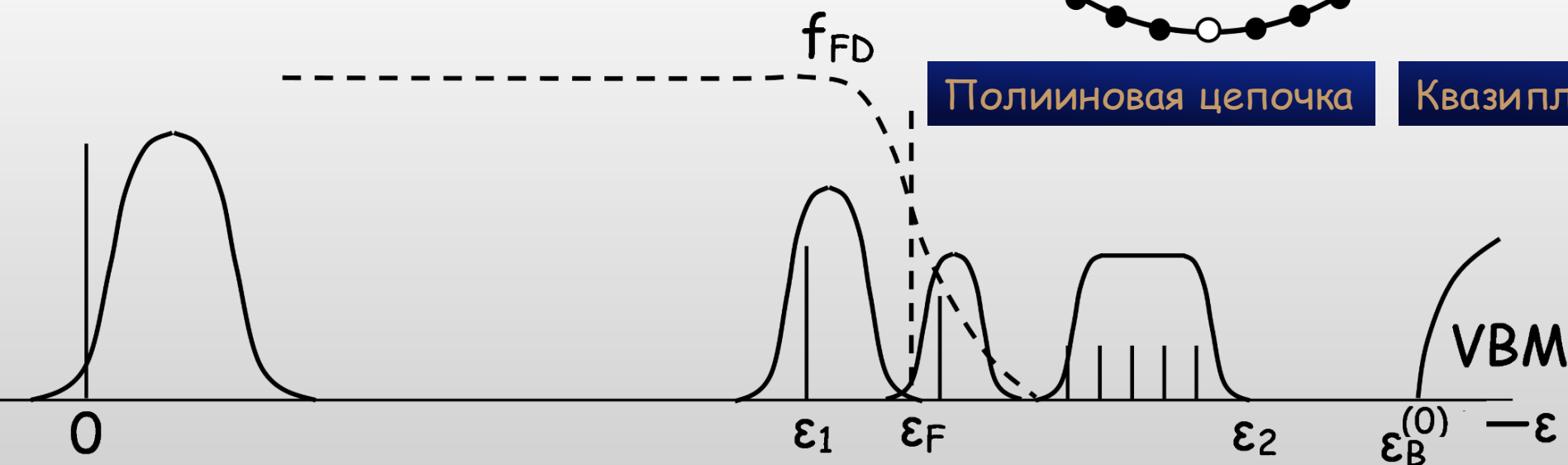
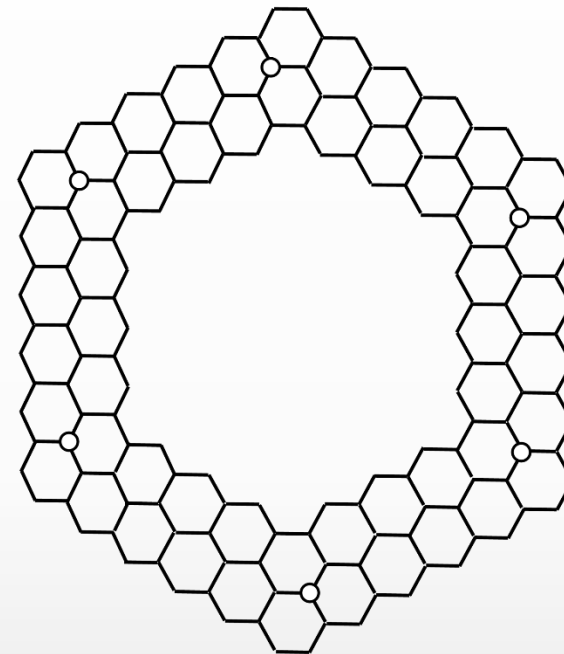
Анализ полуэмпирическими методами

В реальной задаче с ростом n_B :

- $|V_{BC}|$ падает
- $|V_{CC}|$ растёт

По данным анализа с ростом n_B :

- ε_B уменьшается
- $\delta\varepsilon_B$ увеличивается



Полииневая цепочка

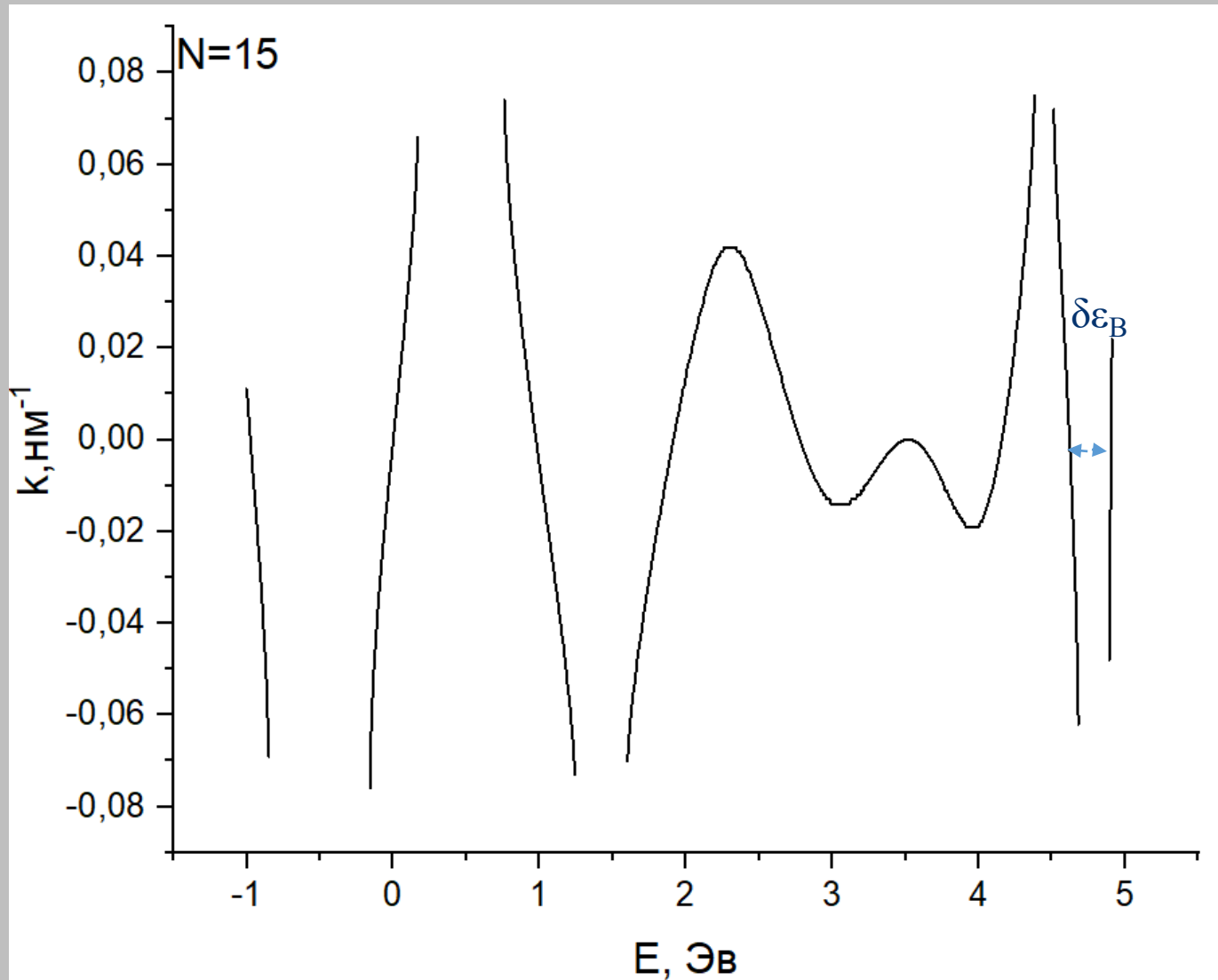
Квазиплоское графеновое кольцо

Заключение

- Рост значения $|V_{CC}|$ и уменьшения $|V_{BC}|$ и ε_B приводит к увеличению значения $\Delta\varepsilon_B$ и уменьшению $\delta\varepsilon_B$ в периодической системе в технике гриновского оператора
- Следствием роста $|V_{CC}|$ и уменьшения $|V_{BC}|$ является уменьшение ε_B и рост $\delta\varepsilon_B$ с ростом концентрации примеси.
- Уменьшение расстояния ε_B происходит главным образом за счёт основного состояния

Спасибо за внимание!

Зонная структура при $N=15$



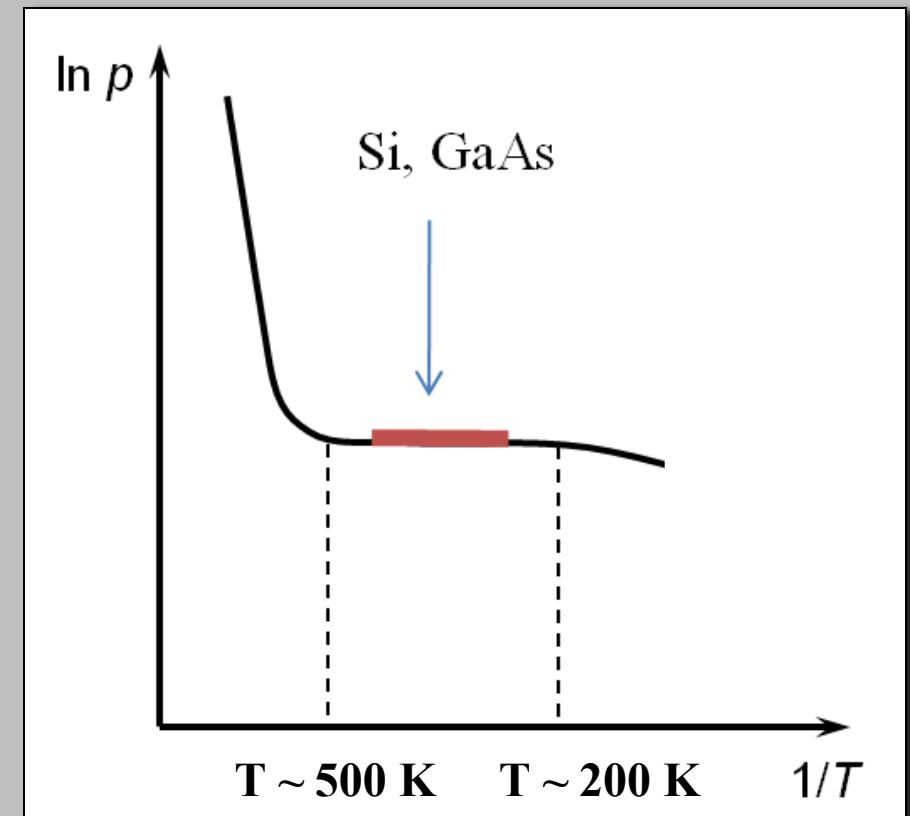
Особенности электрофизических измерений широкозонных полупроводников

Кремний:

- Рабочая температура $\sim -50\text{ C} - +150\text{ C}$
- Температура наступления собственной проводимости $\sim 500\text{ K}$

Алмаз:

- Большая энергия активация бора в алмазе (370 мэВ при 10^{16} см^{-3}) даёт степень ионизации примеси менее 1% при 295 K \longrightarrow
- При концентрации бора 10^{17} см^{-3} концентрация ОНЗ 10^{14} см^{-3}
- Рабочая температура до 400 C



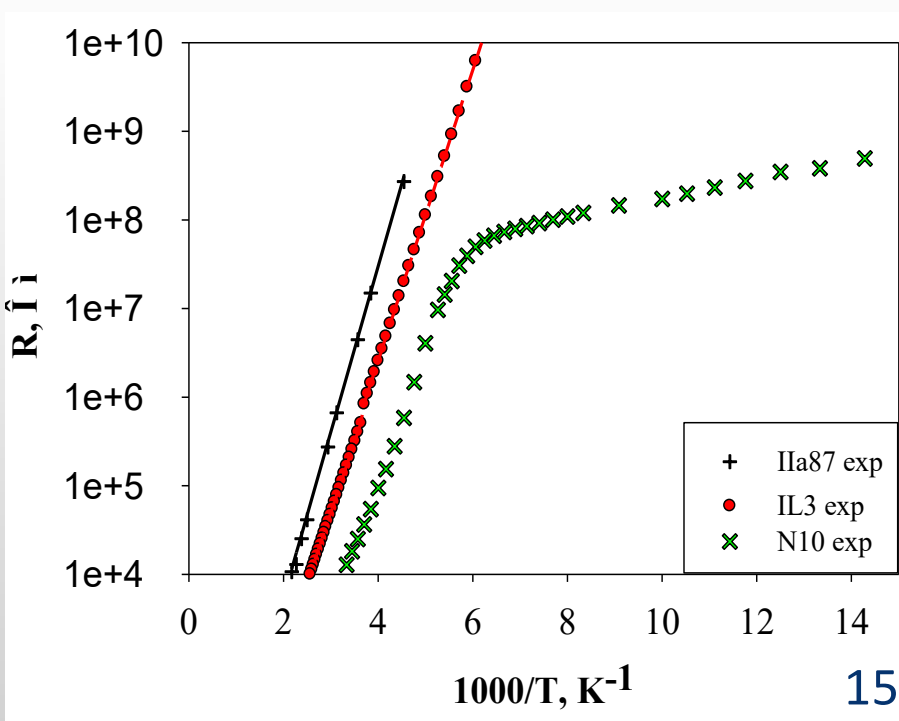
Сравнение полученных характеристик

Энергии активации E_A имеют различия из-за разной природы измеряемых токов:

- Постоянный ток (DC) – ток проводимости
- Переменный ток (AC) – ток смещения

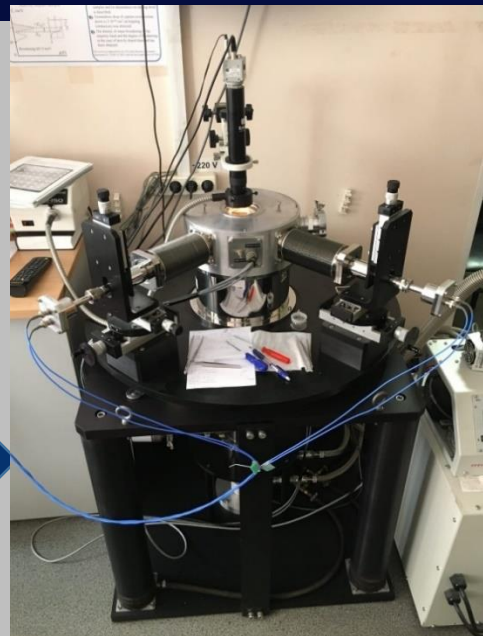
Полученные значения энергии активации глубокого центра бора имеют хорошее совпадение с теоретической зависимостью Пирсона-Бардина и результатами других работ

Образцы	Па87	IL3	N10
Концентрация примеси В	нелегир.	10^{18} см^{-3}	10^{19} см^{-3}
$p_{C-V}, \text{ см}^{-3}$	$4 \cdot 10^{15}$	$1,2 \cdot 10^{18}$	$8 \cdot 10^{18}$
E_A (DC, примесь-зона), мэВ	370 ± 4	320 ± 6	298 ± 4
E_A (DC, прыжковая), мэВ	-	-	22
E_A (AC), мэВ	-	$312 \pm 4,2$	229 ± 9
$G/\omega, \Phi$	-	$1,1 \cdot 10^{-12}$	$6,5 \cdot 10^{-11}$



Измерительный комплекс

Перед запуском криогенной установки в форвакуумная насосной станции Pfeiffer создаётся вакуум ниже 10^{-5} мбар



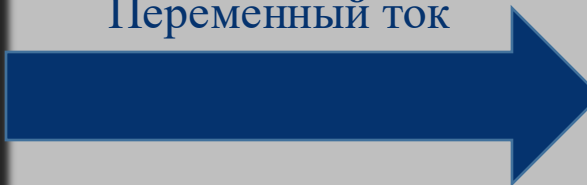
Зондовая станция JANIS CCR10

Температурные контроллеры:
LakeShore 331
LakeShore 336

Измерения проводятся в диапазоне температур от 24 до 475K



Переменный ток



LCR-метр Agilent E4980A



Измерения проводятся в диапазоне частот от 1кГц до 2МГц

Постоянный ток



Мультиметр Agilent 34410A



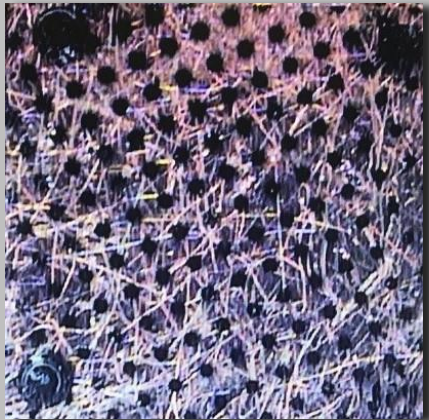
Параметрический анализатор B2901A (Keysight, США)

Позволяет регистрировать малые токи вплоть до 1 пА

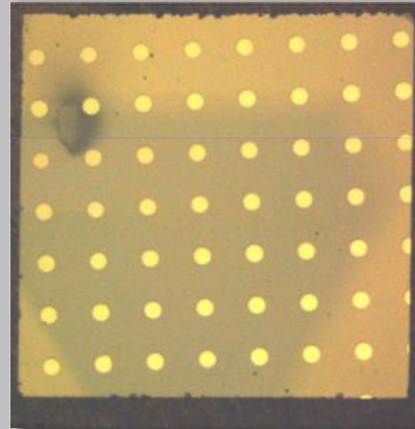


Исследуемые образцы алмаза с контактами

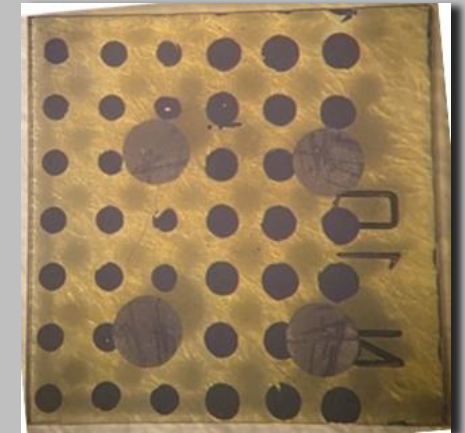
IIa87



IL3



N10



Образцы	IIa87	IL3	N10
Метод роста	HPHT	HPHT	CVD
Концентрация примеси В	нелегированный	10^{18} см^{-3}	10^{19} см^{-3}
Геометрические размеры	5 на 5 мм	3,5 на 3,5 мм	3,5 на 3,5 мм
Геометрия контактов	латеральная	вертикальная	латеральная

Зонная структура в области запрещённой зоны алмаза, легированного бором

