

Высокая подвижность дырок в дельта-легированных бором слоях алмаза: почему она до сих пор не достигнута и как ее можно достичь

© В.А. Кукушкин

Институт прикладной физики Российской академии наук,
603950 Нижний Новгород, Россия
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия
E-mail: vakuk@ipfran.ru

Поступила в Редакцию 19 апреля 2022 г.

В окончательной редакции 28 сентября 2022 г.

Принята к публикации 25 октября 2022 г.

Рассчитаны параметры нанометровых δ -легированных бором слоев в алмазе, необходимые для достижения высоких проводимости и подвижности дырок. Концентрация бора в таких слоях должна быть достаточной для фазового перехода изолятор–металл, приводящего к металлическому типу проводимости. Показано, что учет сдвига энергии края валентной зоны из-за присутствия ионизованных атомов бора вызывает значительное углубление потенциальной ямы, образованной δ -легированным слоем для дырок. Это приводит к гораздо более сильному ограничению пространственного распределения последних, чем ожидалось ранее. В итоге предсказано, что значительное увеличение подвижности дырок, вызванное их делокализацией, может быть достигнуто, если толщина металлического δ -легированного слоя порядка и меньше 0.5 нм и степень компенсации не превышает 42%.

Ключевые слова: δ -легированные слои, наноструктуры, осажденные из газовой фазы алмазные пленки, подвижность дырок, фазовый переход изолятор–металл.

DOI: 10.21883/FTP.2022.10.53957.9872

1. Введение

Тонкие (толщиной порядка нескольких нанометров) легированные (обычно акцепторной примесью бора) слои (так называемые δ -легированные слои) в химически осажденном из газовой фазы (CVD) алмазе были получены во многих лабораториях (см., например, [1–10]). Эти слои рассматриваются как перспективный способ повышения подвижности носителей заряда для различных электронных приложений, например для создания высокочастотных полевых транзисторов на основе CVD алмаза [11,12]. Данное повышение достигается за счет частичного проникновения носителей заряда, заключенных в потенциальной яме, образованной в δ -легированном слое родительскими ионизованными атомами примеси, в окружающий нелегированный алмаз, т.е. их делокализации. В результате рассеяние носителей заряда на этих атомах уменьшается, а подвижность возрастает.

δ -легированные слои уже давно служат для увеличения подвижности носителей заряда в обычных полупроводниках [13]. Но, к сожалению, для δ -легированных бором слоев в CVD алмазе не наблюдалось увеличения подвижности дырок за счет их делокализации [14].

Настоящая статья предлагает возможный ответ на вопрос, почему вызываемое делокализацией увеличение подвижности дырок до сих пор не наблюдалось в δ -легированных слоях в CVD алмазе. В ней также предлагается возможный способ достижения этого

увеличения. С этой целью в следующем разделе обсуждаются результаты измерения подвижности дырок в δ -легированных бором слоях в CVD алмазе и предлагается возможная причина отсутствия увеличения этой подвижности за счет делокализации. В разд. 3 описан метод численного моделирования таких слоев. Его результаты приведены в разд. 4. В разд. 5 эти результаты подтверждаются сравнением с экспериментальными данными, имеющимися в литературе. Затем предлагается и подтверждается соответствующими расчетами возможный способ увеличения подвижности дырок за счет делокализации.

2. Почему вызываемое делокализацией увеличение подвижности дырок в металлических дельта-легированных бором слоях в CVD алмазе до сих пор не достигнуто?

Все описанные в литературе δ -легированные бором слои в CVD алмазе можно разделить на два типа: сравнительно слабо δ -легированные слои (с концентрацией атомов бора $N_B < 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$), в которых фазовый переход изолятор–металл [15–19] не происходит при комнатной температуре (неметаллические слои) и силь-

но δ -легированные слои ($N_B > 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$), в которых этот переход имеет место (металлические слои). У первых наблюдается сильное уменьшение проводимости при понижении температуры, тогда как проводимость вторых практически не зависит от температуры [14].

Неметаллические δ -легированные бором слои, как правило, не могут удовлетворить потребностям алмазной CVD электроники. Это связано с тем, что энергия ионизации отдельных атомов бора (наиболее мелкой из известных легирующих примесей в алмазе) составляет $\sim 370 \text{ мэВ}$ [20], т.е. намного больше, чем тепловая энергия при комнатной температуре. Поэтому для δ -легированных слоев с низким содержанием бора при комнатной и даже повышенной температуре ионизуется и поэтому поставляет дырки в валентную зону лишь относительно небольшая доля атомов бора ($\sim 20\%$ согласно расчетам в [21] для δ -легированного слоя толщиной 2 нм с концентрацией атомов бора $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, нагретого до 500 К). Несмотря на то что $\sim 95\%$ этих дырок находятся вне δ -легированного слоя и поэтому обладают высокой подвижностью [21], его небольшая толщина приводит к низкой концентрации дырок валентной зоны на единицу его площади, недостаточной для обеспечения высокой проводимости, необходимой для электронных приложений. При концентрации атомов бора в δ -легированном слое $> 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (но все еще ниже порога фазового перехода изолятор-металл $5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ при комнатной температуре) доминирующим механизмом проводимости являются прыжки дырок между локализованными состояниями в примесной зоне [22]. Такой механизм, очевидно, не может обеспечить высокую подвижность дырок, необходимую для высокочастотной электроники. Этот вывод подтверждается экспериментальными результатами работы [23], где была измерена подвижность дырок от 0.01 до $0.1 \text{ см}^2/(\text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1})$, и результатами работы [14], где для таких слоев были получены немного большие, но все же очень низкие подвижности дырок, $0.6\text{--}1 \text{ см}^2/(\text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1})$.

Металлические δ -легированные бором слои обеспечивают достаточную для электронных приложений проводимость и гораздо большую подвижность дырок, чем в прыжковом режиме. Это связано с тем, что все атомы бора в них ионизованы и, следовательно, подают дырки в валентную зону, где подвижность дырок намного больше, чем в примесной зоне. Этот вывод подтверждается экспериментальными результатами работы [14], где измерена подвижность дырок в металлических δ -легированных бором слоях, равная $3.6 \pm 0.85 \text{ см}^2/(\text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1})$, т.е. более чем в 3 раза большая, чем в неметаллических δ -легированных бором слоях в прыжковом режиме. Но эти значения все равно низкие. Они характерны для CVD алмаза, сильно и однородно легированного бором при концентрации последнего $5 \cdot 10^{20}\text{--}10^{21} \text{ см}^{-3}$ (т.е. когда фазовый переход изолятор-металл при комнатной температуре уже произошел) [24], и не увеличиваются с уменьшением толщины δ -легированного слоя вплоть до 2 нм, так что

вызываемого делокализацией увеличения подвижности дырок не наблюдается [14].

Возможная причина этого экспериментального факта заключается в том, что дырки ограничены потенциальной ямой, связанной с δ -легированным бором слоем, даже если его толщина составляет всего 2 нм. Это противоречит численному моделированию в [25], где для δ -легированного слоя с концентрацией атомов бора $5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и толщиной 2 нм было предсказано заметное проникновение дырок в окружающий слабо (непреднамеренно) легированный (с концентрацией атомов бора 10^{15} см^{-3}) CVD алмаз. Авторы данной работы подсчитали, что даже при нулевой температуре (когда эффект делокализации явно слабее, чем при конечной температуре) $\sim 50\%$ дырок находится вне такого δ -легированного слоя.

Причина расхождения между экспериментом и теорией, вероятно, заключается в том, что в работе [25] не учитывалась зависимость энергии края валентной зоны от концентрации ионизованных атомов бора. Между тем из формулы Пирсона-Бардина [26–28] следует, что присутствие ионизованных атомов бора увеличивает эту энергию (при фиксированной энергии края зоны проводимости, т.е. сужает ширину запрещенной зоны) на величину $\alpha N_B^{1/3}$, где N_B — концентрация ионизованных (отрицательно заряженных) атомов бора, $\alpha \approx \frac{3e^2}{\epsilon} = 7.6 \cdot 10^{-8} \text{ эВ} \cdot \text{см}$ — полуфеноменологическая постоянная, e — элементарный заряд, $\epsilon \approx 5.7$ — статическая диэлектрическая проницаемость алмаза [20]. Это увеличение энергии края валентной зоны можно рассматривать как уменьшение энергии ионизации атома бора за счет присутствия других ионизованных атомов бора по сравнению с приведенным выше ее значением 370 мэВ для изолированного атома бора.

Очевидно, что для слабо (непреднамеренно) легированного CVD алмаза, окружающего δ -легированный бором слой, эта поправка пренебрежимо мала (намного меньше тепловой энергии при комнатной температуре) из-за очень низкой концентрации атомов бора. Но в самом δ -легированном бором слое (где концентрация атомов бора $N_B = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, т.е. достаточно высокая, чтобы произошел фазовый переход изолятор-металл, и все атомы бора ионизованы, так что $N_{B-} = N_B$) эта поправка составляет $\sim 0.6 \text{ эВ}$ [29]. Эта величина более чем в 20 раз превышает тепловую энергию при комнатной температуре и поэтому очень значительна.

Фактически эта поправка приводит к существенному углублению потенциальной ямы, образованной δ -легированным бором слоем для дырок. Поэтому удержание дырок там гораздо сильнее, а их проникновение в окружающий слабо (непреднамеренно) легированный CVD алмаз намного слабее, чем предсказывалось в [25]. Это может быть причиной того, что в экспериментах [14] не было измерено вызванное делокализацией увеличение подвижности дырок для металлических δ -легированных бором слоев даже при их толщине 2 нм,

тогда как при численном моделировании, проведенном авторами [14,25], этот эффект был предсказан. Действительно, как показывают расчеты (см. следующие разделы), эта поправка приводит для δ -легированного слоя с концентрацией атомов бора $5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и толщиной 2 нм, встроенного в слабо (непреднамеренно) легированный CVD алмаз с концентрацией атомов бора 10^{15} см^{-3} , к тому, что при комнатной температуре вне δ -легированного слоя находятся только 7% дырок, в отличие от гораздо большего значения, 50%, предсказанного в [25].

3. Метод моделирования металлического дельта-легированного бором слоя в CVD алмазе

Для подтверждения данного ответа на вопрос, вынесенный в заголовок, разд. 2, проведено численное моделирование металлических δ -легированных слоев в CVD алмазе с учетом упомянутой выше поправки к энергии края валентной зоны за счет присутствия ионизованных атомов бора. Предполагается, что δ -легированные слои имеют бесконечно резкие границы раздела. Это приближение является хорошим для экспериментально достигнутой очень высокой резкости легирования бором CVD алмаза порядка или даже меньше 1 нм декада⁻¹ [3,8,9,30] и дополнительно подтверждается сравнением численных результатов, полученных на его основе, с экспериментальными данными (см. следующий раздел). δ -легированные слои внедрены в слабо (непреднамеренно) легированный CVD алмаз с низкой концентрацией атомов бора 10^{15} см^{-3} . Концентрация атомов бора внутри δ -легированных слоев составляет $N_B = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, т.е. выше пороговой для фазового перехода изолятор–металл при комнатной температуре. Поэтому все атомы бора там предполагаются ионизованными, т.е. $N_{B-} = N_B$. Компенсация считается отсутствующей во всем образце. Упомянутая выше поправка к энергии края валентной зоны из-за присутствия ионизованных атомов бора не учитывается в слабо (непреднамеренно) легированном CVD алмазе, окружающем δ -легированный слой, и принимается равной $\alpha N_B^{1/3}$ внутри слоя. Толщины δ -легированных слоев составляли 2, 1 и 0.5 нм.

Энергетический профиль края валентной зоны и распределение концентрации дырок были найдены с помощью теории среднего поля в приближении Хартри [31] путем самосогласованного решения системы уравнений Шредингера и Пуассона. Оно было найдено с помощью FreeWare программы „1D Poisson“, разработанной Г. Снайдером [32]. Ее работа подробно описана в руководстве, доступном на том же сайте [32], и проверена автором данной статьи путем сравнения ее результатов с известными примерами.

Учитывались три дважды вырожденные по спину дырочные подзоны: тяжелых дырок (эффективная масса $0.588m_e$, m_e — масса свободного электрона), легких дырок (эффективная масса $0.303m_e$) и спин-орбитально отщепленных дырок (эффективная масса $0.394m_e$) [33]. Энергия спин-орбитального расщепления была принята равной 6 мэВ [20].

Отметим также, что при рассматриваемой концентрации атомов бора внутри δ -легированных слоев $N_B = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и комнатной температуре увеличение постоянной кристаллической решетки алмаза вследствие легирования, согласно [34], составляет не более 0.05%. Поэтому влияние этого увеличения на зонную структуру легированного алмаза может не учитываться.

4. Результаты моделирования

Результаты описанного выше моделирования δ -легированных бором слоев в CVD алмазе представлены на рис. 1–3.

Чтобы интерпретировать эти результаты с точки зрения делокализации дырок, обозначим общую концентрацию дырок, когда δ -легированный слой вставлен в слабо (непреднамеренно) легированный CVD алмаз, через p , а общую концентрацию дырок, когда δ -легированный слой не введен в него, — через p_0 . Последняя однородна и равна $4.7 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ для $N_B = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, как следует из расчетов. Тогда степень проникновения дырок в слабо (непреднамеренно) легированный CVD алмаз, окружающий δ -легированный слой, будет отношением числа (на единицу площади) дырок валентной зоны, поставляемых атомами бора δ -легированного слоя и находящихся вне этого слоя, т.е. $\int (p - p_0) dx$, где интеграл берется по слабо (непреднамеренно) легированному CVD алмазу, окружающему δ -легированный слой, к общему числу (на единицу площади) дырок валентной зоны, поставляемых атомами бора δ -легированного слоя, т.е. к $\int (p - p_0) dx$, где интеграл берется по всей толщине образца, включая δ -легированный слой. Расчеты показывают, что для толщины δ -легированного слоя 2 нм это отношение составляет $\sim 7\%$, для 1 нм — 19% , а для 0.5 нм — 47% .

Согласно рис. 1–3, только δ -легированный бором слой толщиной 2 нм имеет возбужденные дырочные подзоны. Расчеты показывают, что их заселенности составляют $1.23 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ (1.2% от общего числа дырок валентной зоны, поставляемых атомами бора δ -легированного слоя, которое равно $\int (p - p_0) dx$, где интеграл берется по всей толщине образца, включая δ -легированный слой) для возбужденной подзоны тяжелых дырок, $2.06 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ (0.02%) для возбужденной подзоны спин-орбитально отщепленных дырок и $1.71 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$ (0.002%) для возбужденной подзоны легких дырок. Несмотря на то что волновые функции этих подзон имеют максимумы на границах δ -легированного слоя и тем самым обеспечивают высокую степень

проникновения дырок этих подзон в слабо (непреднамеренно) легированный CVD алмаз, окружающий δ -легированный слой, очень низкая доля дырок, содержащаяся в этих подзонах, делает их вклад в делокализацию пренебрежимо малым.

5. Обсуждение

Полученные выше результаты подтверждаются вольт-фарадными [13] измерениями [23,35] распределения концентрации дырок в металлических δ -легированных бором слоях со следующими параметрами: концентрация атомов бора в пике $N_B = 5 \cdot 10^{20} - 10^{21} \text{ см}^{-3}$, полная ширина на половине максимума профиля концентрации атомов бора 1 нм и его градиент $\sim 0.9 - 1.2 \text{ нм декада}^{-1}$ по обе стороны от пика. Эти измерения показывают, что практически все дырки заключены в δ -легированном слое. Это совпадает с результатами численного моделирования такого слоя, показывающими, что концентрация дырок на его границах падает более чем в 2 раза по сравнению с ее значением в центре слоя (см. рис. 2). Также это совпадение оправдывает использованное выше приближение бесконечно резких границ δ -легированного слоя для описания экспериментально

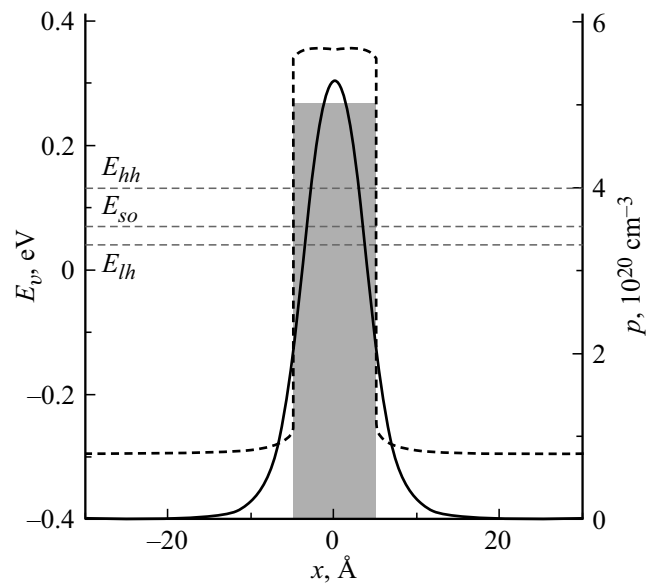


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для δ -легированного бором слоя толщиной 1 нм.

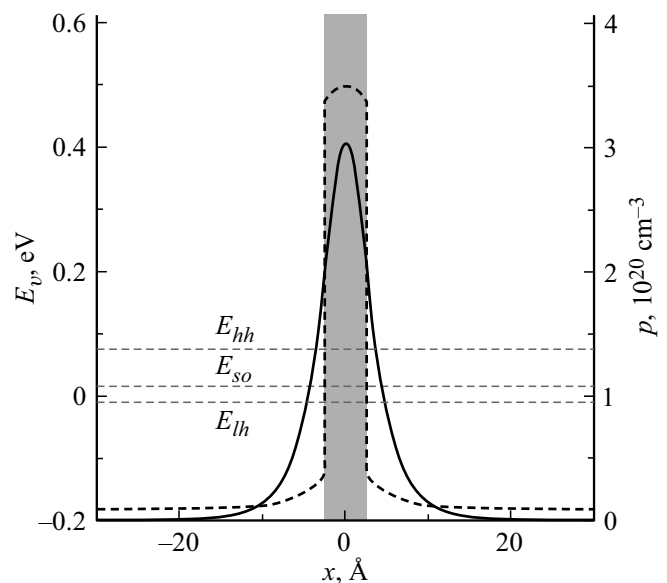


Рис. 3. То же, что и на рис. 1, но для δ -легированного бором слоя толщиной 0.5 нм.

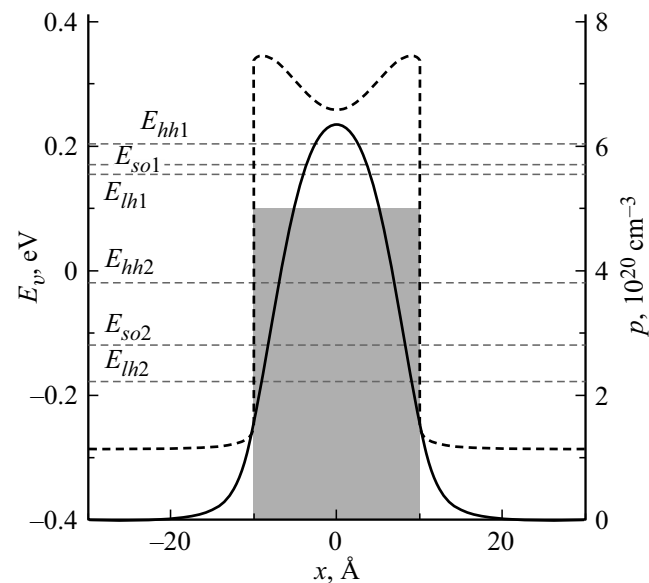


Рис. 1. Энергия края валентной зоны E_v (жирная пунктирная линия, левая шкала), энергии краев размерно-квантованных дырочных подзон тяжелых (hh), легких (lh) и спин-орбитально отщепленных (so) дырок (горизонтальные тонкие штриховые линии, левая шкала) и общая концентрация дырок p (жирная сплошная линия, правая шкала) для δ -легированного слоя толщиной 2 нм и концентрацией атомов бора $N_B = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (прямоугольник серого цвета), внедренного в слабо (непреднамеренно) легированный алмаз с $N_B = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, при комнатной температуре. Во всем образце компенсация предполагается отсутствующей. Все энергии отсчитываются от уровня химического потенциала.

достигнутых резкостей профилей легирования в таких слоях.

Значения делокализации дырок, рассчитанные в предыдущем разделе, 7% для слоя толщиной 2 нм, 19% для слоя толщиной 1 нм и 47% для слоя толщиной 0.5 нм на рис. 1–3, должны быть сопоставлены с результатами моделирования в работе [25], где, как было сказано ранее, не учитывалась зависимость энергии края валентной зоны от концентрации ионизованных атомов бора. Даже при нулевой температуре, когда, как было сказано выше, эффект делокализации явно слабее, чем при конечной температуре, авторы [25]

получили для δ -легированных слоев с теми же параметрами, что и на рис. 1–3, значительно большие значения: ~ 50 , 70 и 75% соответственно. Таким образом, пренебрежение зависимостью энергии края валентной зоны от концентрации ионизованных атомов бора и, как следствие, углубление потенциальной ямы, формируемой δ -легированным слоем для дырок, приводит к значительному завышению числа дырок, находящихся за пределами δ -легированного слоя.

Для выяснения влияния делокализации дырок в δ -легированных слоях на их подвижность последняя была рассчитана с учетом только вклада рассеяния на ионизованных атомах примеси. Для этого использовались формулы, полученные в [36] с учетом вырождения дырок и эффекта экранирования в приближении Линдхарда [31]. В предположении отсутствия компенсации это дает подвижности 33 , 36 и $58 \text{ см}^2/(\text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1})$ для δ -легированных слоев толщиной 2 , 1 и 0.5 нм соответственно. Для первых двух слоев эти значения близки к $\sim 30 \text{ см}^2/(\text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1})$ т.е. к определяемой рассеянием на ионизованных атомах примеси подвижности дырок в алмазе, однородно легированном бором при концентрации последнего $5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ без компенсации, рассчитанной по формуле Брукса–Херринга [37]. Таким образом, δ -легированные бором слои толщиной 2 и 1 нм не демонстрируют заметного роста подвижности дырок по сравнению с однородно легированным алмазом с той же концентрацией атомов бора. Причина этого ясна: как было показано выше, дырки сильно локализованы в этих слоях и поэтому их рассеяние на ионизованных атомах бора происходит так же, как и в случае однородного легирования. Напротив, для δ -легированного бором слоя толщиной 0.5 нм подвижность дырок в ~ 2 раза выше, чем в однородно легированном алмазе с той же концентрацией атомов бора. Таким образом, рассчитанная выше делокализация дырок в этом слое приводит к значительному подавлению их рассеяния на ионизованных атомах бора по сравнению со случаем однородного легирования.

Следует повторить, что во всех приведенных выше расчетах компенсация предполагалась отсутствующей. Этим объясняется то, что рассчитанная подвижность дырок при их однородной концентрации $5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ в ~ 10 раз превышает значение $3.6 \text{ см}^2/(\text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1})$, измеренное в [14]. Простой анализ с использованием формулы Брукса–Херринга показывает, что при однородной концентрации дырок $5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ экспериментально измеренная подвижность дырок [14] воспроизводится при степени компенсации 82% . Столь высокая компенсация, безусловно, уменьшает делокализацию дырок для δ -легированного слоя заданной толщины по следующей причине.

Для фиксированной концентрации дырок на единицу площади δ -легированного слоя, необходимой, например, для работы полевого транзистора на основе такого слоя, компенсация увеличивает концентрацию ионизованных

атомов бора. Это, согласно приведенной выше формуле Пирсона–Бардина, углубляет потенциальную яму, образованную слоем для дырок. В результате краевые энергии заселенных дырочных подзон удаляются от края ямы, и, следовательно, их волновые функции становятся более локализованными в δ -легированном слое. Таким образом, компенсация приводит к уменьшению делокализации дырок и, как следствие, к подавлению увеличения подвижности дырок в δ -легированном слое по сравнению со случаем однородного легирования. Оценки показывают, что вызванное компенсацией увеличение интервалов между краевыми энергиями, заселенных дырками подзон и краем потенциальной ямы значительно меньше, чем значения этих интервалов для некомпенсированных образцов при степени компенсации $< 42\%$. Таким образом, только при такой сравнительно слабой компенсации сохраняются рассчитанные выше значения делокализации дырок и, следовательно, увеличения их подвижности при уменьшении толщины δ -слоя.

6. Заключение

Таким образом, для достижения значительного увеличения подвижности дырок в δ -легированном бором слое с достаточно высокой концентрацией дырок на единицу площади слоя, подходящей для электронных применений при комнатной температуре, он должен иметь следующие параметры. Концентрация атомов бора в нем должна быть $> 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ для осуществления фазового перехода изолятор–металл, степень компенсации должна быть $< 42\%$, а его толщина должна быть $\lesssim 0.5 \text{ нм}$. Физические причины этого понятны: только для таких δ -слоев практически все дырки находятся в валентной зоне, где их подвижность значительно больше, чем в примесной зоне, и заметное их количество заселяет подзоны, расположенные по энергии вблизи края потенциальной ямы, образуемой δ -легированным слоем. Из-за слабой локализации волновых функций этих подзон дырки частично выходят из δ -легированного слоя, что и обеспечивает увеличение их подвижности. Насколько известно автору данной статьи, такие сверхтонкие металлические слабо компенсированные δ -легированные слои бора в CVD алмазе еще не созданы, но современные нанотехнологии близки к их реализации.

Благодарности

Автор выражает благодарность сотрудникам Лаборатории алмазной электроники ИПФ РАН за плодотворное обсуждение проблемы δ -легирования алмаза.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Федерального государственного бюджетного научного учреждения „Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук“ (проект № 0030-2021-0003).

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H. Shiomi, Y. Nishibayashi, N. Toda, S. Shikata. IEEE Electron Dev. Lett., **16** (1), 36 (1995).
- [2] A. Vescan, P. Gluche, W. Ebert, E. Kohn. IEEE Electron Dev. Lett., **18** (5), 222 (1997).
- [3] A. Fiori, T.N. Tran Thi, G. Chicot, F. Jomard, F. Omne's, E. Gheeraert, E. Bustarret. Diamond Relat. Mater., **24**, 175 (2012).
- [4] P.N. Volpe, N. Tranchant, J.C. Arnault, S. Saada, F. Jomard, P. Bergonzo. Phys. Status Solidi RRL, **6** (2), 59 (2012).
- [5] G. Chicot, T. Tran Thi, A. Fiori, F. Jomard, E. Gheeraert, E. Bustarret, J. Pernot. Appl. Phys. Lett., **101**, 162101 (2012).
- [6] R. Edgington, S. Sato, Y. Ishiyama, R. Morris, R.B. Jackman, H. Kwarada. J. Appl. Phys., **111**, 033710 (2012).
- [7] D. Araujo, M. P. Alegre, J.C. Pinero, A. Fiori, E. Bustarret, F. Jomard. Appl. Phys. Lett., **103** (4), 042104 (2013).
- [8] A. Fiori, F. Jomard, T. Teraji, S. Koizumi, J. Isoya, E. Gheeraert, E. Bustarret. Appl. Phys. Express, **6**, 045801 (2013).
- [9] A. Fiori, F. Jomard, T. Teraji, G. Chicot, E. Bustarret. Thin Sol. Films, **557**, 222 (2014).
- [10] J.E. Butler, A. Vikharev, A. Gorbachev, M. Lobaev, A. Muchnikov, D. Radishev, V. Isaev, V. Chernov, S. Bogdanov, M. Drozdov, E. Demidov, E. Surovegina, V. Shashkin, A. Davidov, H. Tan, L. Meshi, A.C. Pakpour-Tabrizi, M.-L. Hicks, R.B. Jackman. Phys. Status Solidi RRL, **11** (1), 1600329 (2017).
- [11] A. Aleksov, A. Vescan, M. Kunze, P. Gluche, W. Ebert, E. Kohn, A. Bergmaier, G. Dollinger. Diamond Relat. Mater., **8** (1–5), 941, (1999).
- [12] H. El-Hajj, A. Denisenko, A. Kaiser, R.S. Balmer, E. Kohn. Diamond Relat. Mater., **17** (7–10), 1259 (2008).
- [13] E.F. Schubert. *Doping in III-V Semiconductors* (Cambridge, UK, Cambridge University Press, 1993) chap. 11.
- [14] G. Chicot, A. Fiori, P.N. Volpe, T.N. Tran Thi, J.C. Gerbedoen, J. Bousquet, M.P. Alegre, J.C. Pinero, D. Araujo, F. Jomard, A. Soltani, J.C. De Jaeger, J. Morse, J. Hartwig, N. Tranchant, C. Mer-Calfati, J.C. Arnault, J. Delahaye, T. Grenet, D. Eon, F. Omnes, J. Pernot, E. Bustarret. J. Appl. Phys., **116** (8), 083702 (2014).
- [15] N.F. Mott. *Metal-Insulator Transitions* (London-N.Y., Taylor & Francis, 1990).
- [16] J.-P. Lagrange, A. Deneuve, E. Gheeraert. Carbon, **37** (5), 807 (1999).
- [17] T.H. Borst, O. Weis. Phys. Status Solidi A, **154** (1), 423 (1996).
- [18] T. Klein, P. Achatz, J. Kacmarcik, C. Marcenat, F. Gustafsson, J. Marcus, E. Bustarret, J. Pernot, F. Omnes, B.E. Sernelius, C. Persson, A. Ferreira da Silva, C. Cytermann. Phys. Rev. B, **75**, 165313 (2007).
- [19] J. Bousquet, T. Klein, M. Solana, L. Saminadayar, C. Marcenat, E. Bustarret. Phys. Rev. B, **95**, 161301 (2017).
- [20] O. Madelung. *Semiconductors: Data Handbook* (Berlin, Germany, Springer, 2004).
- [21] Y. Anda, T. Arik, T. Kobayashi. Jpn. J. Appl. Phys., **34** (pt 1, no. 8A), 3987 (1995).
- [22] S.J. Rashid, A. Tajani, D.J. Twitchen, L. Coulbeck, F. Udrea, T. Butler, N.L. Rupasinghe, M. Brezeanu, J. Isberg, A. Garraway, M. Dixon, R.S. Balmer, D. Chamund, P. Taylor, G.A.J. Amaratunga. IEEE Trans. Electron Dev., **55** (10), 2744 (2008).
- [23] J. Scharpf, A. Denisenko, C.I. Pakes, S. Rubanov, A. Bergmaier, G. Dollinger, C. Pietzka, E. Kohn. Phys. Status Solidi A, **210** (10), 2028 (2013).
- [24] R.S. Balmer, I. Friel, S. Hepplestone, J. Isberg, M.J. Uren, M.L. Markham, N.L. Palmer, J. Pilkington, P. Huggett, S. Majdi, R. Lang. J. Appl. Phys., **113**, 033702 (2013).
- [25] A. Fiori, J. Pernot, E. Gheeraert, E. Bustarret. Phys. Status Solidi A, **207** (9), 2084 (2010).
- [26] G.L. Pearson, J. Bardeen. Phys. Rev., **75**, 865 (1949).
- [27] W. Gajewski, P. Achatz, O.A. Williams, K. Haenen, E. Bustarret, M. Stutzmann, J.A. Garrido. Phys. Rev. B, **79**, 045206 (2009).
- [28] T.F. Lee, T.C. McGill. J. Appl. Phys., **46** (1), 373 (1975).
- [29] C. Mer-Calfati, N. Tranchant, P.N. Volpe, F. Jomard, S. Weber, P. Bergonzo, J.C. Arnault. Mater. Lett., **115**, 283 (2014).
- [30] V.A. Kukushkin. Phys. Status Solidi B, **257** (9), 1900748 (2020).
- [31] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. *Физика твердого тела* (М., Мир, 1979) т. 1, гл. 17. [Пер. с англ.: N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. *Solid State Physics* (N.Y., Holt, Rinehart and Winston, 1976) chap. 17].
- [32] <https://www3.nd.edu/~gsnider/>
- [33] J. Pernot, P.N. Volpe, F. Omnes, P. Muret, V. Mortet, K. Haenen, T. Teraji. Phys. Rev. B, **81**, 205203 (2010).
- [34] V.V. Brazhkin, E.A. Ekimov, A.G. Lyapin, S.V. Popova, A.V. Rakhmanina, S.M. Stishov, V.M. Lebedev, Y. Katayama, K. Kato. Phys. Rev. B, **74**, 140502(R) (2006).
- [35] H. El-Hajj, A. Denisenko, A. Bergmaier, G. Dollinger, M. Kubovic, E. Kohn. Diamond Relat. Mater., **17** (4–5), 409 (2008).
- [36] В.А. Кукушкин. ФТП, **53** (10), 1437 (2019). [V.A. Kukushkin. Semiconductors, **53** (10), 1398 (2019)].
- [37] K. Zeeger. *Physics of Semiconductors* (N.Y., Springer, 1973).

Редактор Г.А. Оганесян

High hole mobility in boron delta-doped layers in diamond: why it is not achieved as yet and how it can be achieved

V.A. Kukushkin

Institute of Applied Physics of
the Russian Academy of Science,
603950 Nizhny Novgorod, Russia
Nizhny Novgorod State University
named after N.I. Lobachevsky,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract The required parameters of nanometer boron δ -doped layers in diamond for achieving high conductivity and hole mobility are calculated. The boron concentration in such layers has to be sufficient to achieve the insulator–metal phase transition, i. e. metallic conductivity. Then, it is demonstrated that taking into account valence band edge energy shift due to the presence of ionized boron atoms leads to the significant deepening of the potential well formed by the δ -doped layer for holes. It results in much stronger hole confinement than it was expected before. Thus, it is predicted that a significant delocalization-induced increase of hole mobility can be achieved if metallic boron δ -doped layer thickness is of order and smaller than 0.5 nm and compensation ratio does not exceed 42%.