

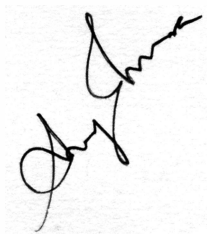
На правах рукописи

Аунг Тура

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АНИЗОТРОПИИ НА ПОДВИЖНОСТЬ
НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДОВ В АЛМАЗОПОДОБНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



Москва – 2012

Работа выполнена в Калужском филиале федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э.Баумана»

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
доцент **Рыбкин Сергей Владимирович**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор **Горбунов Александр**
Константинович
кандидат химических наук,
Серебряков Юрий Алексеевич

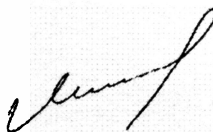
Ведущая организация: ЗАО НПФ «Сигма», г.Калуга

Защита состоится «15» февраля 2012 г. в 16⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 212.141.17 при ФГБОУ ВПО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана» по адресу: 248600, г. Калуга, ул. Баженова, д. 2, МГТУ им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Баумана по адресу: г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5.

Автореферат разослан «13» января 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
кандидат технических наук, доцент



С.А.Лоскутов

НТБ МГТУ им. Н.Э.Баумана



1988092

Аунг ТураИсследование влияния

13-20

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы работы. Разработка методов и технологий повышения производительности вычислительной техники является высоко востребованной. Решение данного вопроса ведется по нескольким направлениям, среди которых следует выделить следующие четыре: 1) уменьшение размеров базовых элементов микросхем; 2) разработка многопроцессорной и мультиядерной вычислительной техники; 3) разработка микросхем на основе новых материалов, обладающих полупроводниковыми свойствами и лучшими по сравнению с имеющимися материалами характеристиками; 4) создание технологий повышения подвижности носителей зарядов.

Возможности первого направления лимитируются ограничениями промышленной литографии, которая сегодня, к сожалению, уже достигает своих технологических и физических пределов. Решение вопроса в свете второго направления не является универсальным, поскольку не для всех вычислительных задач оказывается эффективным распараллеливание вычислительных процессов. Поиски новой элементной базы в настоящее время ведутся активно и успешно, однако, даже полученные многообещающие решения, такие, например, как полупроводниковые нанотрубки или полупроводниковые алмазы, пока, все еще не удастся воплотить в рентабельные технологии массового производства. В ближайшее десятилетие успехи практического решения проблемы, по-видимому, следует связывать с четвертым направлением, поскольку в настоящее время уже получены положительные экспериментальные результаты значительного повышения подвижности носителей зарядов на основе так называемого подхода «напряженный кристалл», который реально и рентабельно может быть воплощен в массовое производство.

К сожалению, экспериментальный поиск оптимальных решений повышения подвижности носителей зарядов, требует больших материальных и временных ресурсов и затрат. Решение задачи аналитическими методами также сталкивается с большими трудностями, обусловленными очевидными сложностями задачи, что вынуждает исследователей прибегать к значительному числу серьезных упрощений, в результате чего получаемые результаты оказываются не в полной мере

адекватными. В этой связи наиболее перспективными методами для проведения систематических исследований представляются методы компьютерного моделирования, которые позволяют не только наиболее точно и полно воспроизводить реальные ситуации исследуемых физических процессов, но и дают уникальную возможность проведения гипотетических экспериментов для исследования роли и степени выявления отдельных факторов на изучаемые процессы, что невозможно сделать никакими другими средствами.

Таким образом, разработка новых подходов для исследования и установления новых возможностей повышения подвижности носителей зарядов, является высоко востребованной и актуальной задачей физики конденсированного состояния.

Цели и задачи работы

Целью работы является исследование влияния анизотропии на подвижность носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах.

Для достижения поставленной цели необходимо решение следующих задач:

- разработка математических моделей и методов моделирования подвижности носителей зарядов в условиях воздействия внешней нагрузки с учетом анизотропии;
- исследование средствами компьютерного моделирования влияния анизотропии на подвижность носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах в условиях действия внешней нагрузки;
- определение роли и степени влияния различных физических и геометрических параметров и характеристик на увеличение подвижности носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах.

Научная новизна работы состоит в том, что в ней впервые:

- разработана математическая модель и методика моделирования для исследования широкого круга вопросов, связанных с подвижностью носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах с учетом анизотропии в условиях действия внешней нагрузки;
- проведены систематические исследования особенностей проявления анизотропии на подвижность носителей зарядов алмазоподобных кристаллов в условиях действия внешней нагрузки;

- исследованы закономерности влияния физических параметров и характеристик алмазоподобных кристаллов на изменение подвижности носителей зарядов в условиях воздействия внешней нагрузки;
- проведен всесторонний анализ влияния концентрации примеси на изменение подвижности носителей зарядов в условиях воздействия внешней нагрузки;
- получены основные статистические характеристики подвижности носителей зарядов в условиях действия внешней нагрузки и проведен анализ их зависимости от комплексно-ориентационных параметров;
- установлены оптимальные комплексно-ориентационные параметры, обеспечивающие максимальное увеличение подвижности носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах в условиях действия внешней нагрузки;
- применительно к нитевидным кристаллам с алмазоподобной структурой проведено исследование влияния величины поперечного сечения на изменение подвижности носителей зарядов в условиях действия внешней нагрузки;

Теоретическая и практическая ценность работы заключается в том, что развитые в работе методы моделирования могут быть использованы для решения широкого круга задач, связанных с особенностями влияния различных факторов на изменение подвижности носителей зарядов в кристаллах с алмазоподобной структурой; установленные закономерности проявления физических и геометрических параметров и характеристик алмазоподобных структур и определенные соотношения комплексно-ориентационных параметров, позволяют прогнозировать оптимальные условия увеличения подвижности носителей зарядов в условиях действия нагрузки.

На защиту выносятся следующие положения:

- математическая модель и методика моделирования для исследования закономерностей и особенностей подвижности носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах в условиях действия внешней нагрузки;
- результаты исследования влияния физических, геометрических и комплексно-ориентационных параметров и характеристик на

изменение подвижности носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах в условиях действия внешней нагрузки;

- установленные соотношения комплексно-ориентационных параметров, обеспечивающие максимальное увеличение подвижности носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах в условиях действия внешней нагрузки.

Достоверность полученных результатов обусловлена корректной постановкой задачи, применением математически обоснованных методов ее решения, согласием результатов с имеющимися экспериментальными данными.

Апробация результатов. Результаты диссертационной работы докладывались на конференциях:

1. Региональных научно-технических конференциях «Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Калуга, 2009, 2010, 2011);
2. Всероссийских научно-технических конференциях «Наукоемкие технологии, в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва, 2009, 2010, 2011).

Публикации. Тема диссертации отражена в 9 научных работах, в том числе 1 статья в журнале из Перечня ВАК РФ.

Объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, выводов и списка литературы. Она изложена на 117 страницах текста, содержит 38 рисунков, 5 таблиц, 114 библиографических названий.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертации, ее практическое значение, формулируются основные цели исследования и основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава диссертации посвящена обзору литературы. В ней проводится рассмотрение и анализ известных экспериментальных и теоретических результатов исследования по теме диссертации.

Вторая глава диссертации посвящена описанию разработанных и использованных моделей.

Моделирование подвижности носителей зарядов проводилось на основе вероятностно – стохастических методов. На рис.1 представлена укрупненная блок схема разработанного метода. Начальные, физические и модельные условия и параметры модели определялись целью рассматриваемых задач. Допускалось изменение физических и геометрических параметров кристаллической решетки, параметрическое задание электрического поля E , напряжения σ , температуры T и целого ряда других параметров и характеристик, представляющих интерес для исследования. Стохастическое определение времени между столкновениями, механизмов столкновения, и параметров частицы после столкновения определялось в соответствии с золотым правилом Ферми на основе расчетных вероятностей перехода носителей заряда из состояния с волновым вектором k в состояние с волновым вектором k' , которые вычислялись квантово-механическими методами теории возмущения и определялись матричными элементами возмущенного Гамильтониана в представлении, согласно теореме Блоха, собственных функций и соответствующих собственных значений энергии по векторам обратной решетки из первой зоны Бриллюэна. Производился учет рассеяния электронов на оптических фононах, акустических фононах и на примесных ионах.

В отдельных случаях проводился дополнительный анализ, связанный с расчетом функций распределения электронов в пространстве импульсов на основе интегро-дифференциального уравнения Больцмана на основе итерационных процедур.

В третьей главе диссертации проведено исследование влияния анизотропии на подвижность носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах при различных видах нагружения. Для выявления плоскостей и направлений приложения внешней нагрузки σ_{ij} , обеспечивающих наибольшее увеличение подвижности носителей зарядов в определенных плоскостях и направлениях $(\mu_{kl})^{n,p}$ были рассмотрены различные варианты сочетаний векторов i, j, k, l . Предварительный анализ показал, что с учетом симметрии решетки алмазоподобных кристаллов, наибольший интерес для исследования возможностей увеличения подвижности носителей зарядов за счет воздействия внешней нагрузки представляют комбинации систем плоскостей и направлений, образованных различными сочетаниями базовых векторов решетки $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$.

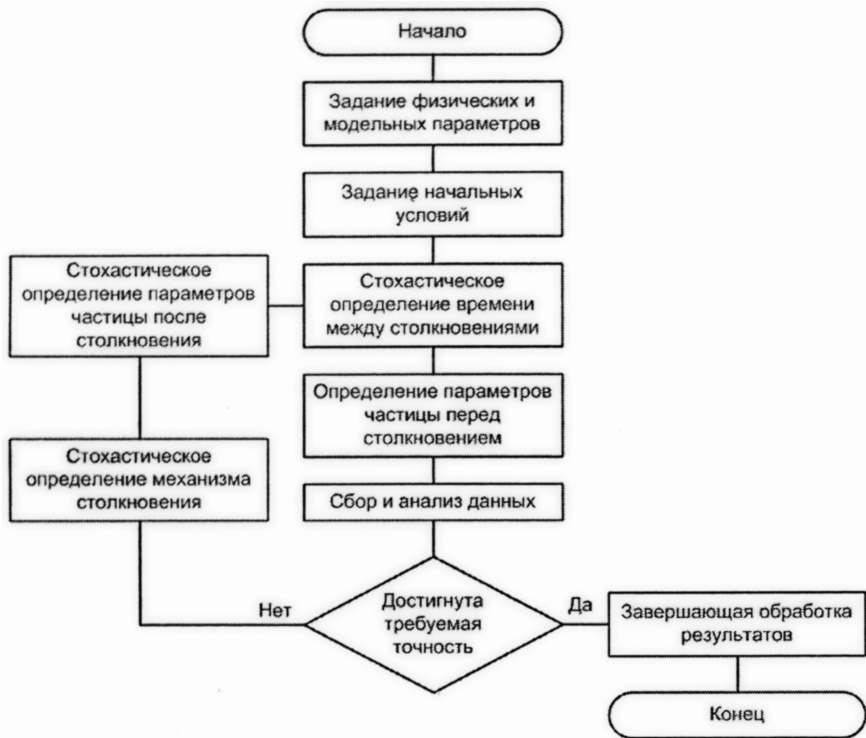


Рис.1. Укрупненная блок-схема метода

Типичные зависимости величины подвижности отрицательных носителей зарядов вдоль различных кристаллографических направлений, полученные по мере увеличения уровня внешнего напряжения, прикладываемого в направлении $\langle 100 \rangle$ применительно к алмазоподобным структурам представлены на рис.2. Можно видеть, что увеличение уровня внешнего напряжения по-разному изменяет подвижность отрицательных носителей зарядов вдоль различных кристаллографических направлений. Наибольшему, почти двух кратному увеличению подвижности соответствует направление $[100]$, в этом случае величина подвижности возрастает почти на 78,8% от 1460 до 2610 $[\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}]$.

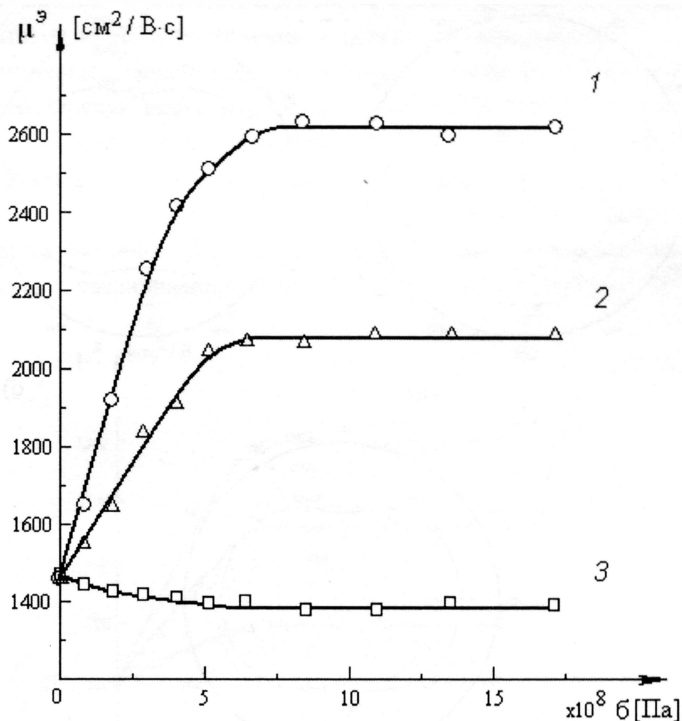


Рис.2. Подвижность отрицательных носителей зарядов при различном уровне внешнего напряжения для различных кристаллографических направлений: 1 - [100]; 2 - [110]; 3 - [010]

Полученные результаты позволили установить, что при изменении направления приложения внешней нагрузки эффект увеличения подвижности ослабевает. Например, в случае приложения внешней нагрузки вдоль направления $\langle 110 \rangle$, наибольшее увеличение подвижности отрицательных носителей зарядов, от 1460 до 2240 [$\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$], то есть на 53,4 %, реализуется вдоль направления [110], а в случае приложения внешней нагрузки вдоль направления $\langle 111 \rangle$ наибольшее увеличение подвижности электронов наблюдается в плоскостях типа {112}, при этом уровень увеличения составляет всего 38,4% от 1460 до 2020 [$\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$].

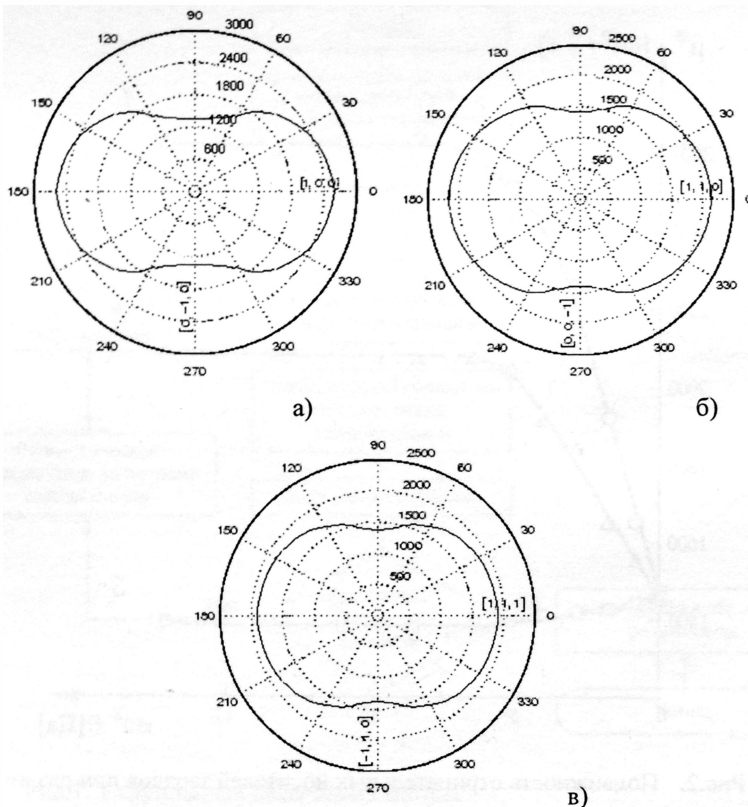


Рис.3. Угловые диаграммы подвижности отрицательных носителей зарядов вдоль различных кристаллографических направлений в плоскостях: а) - $\{001\}$; б) - $\{1\bar{1}0\}$; в) - $\{1\bar{1}2\}$

На рис.3. представлены угловые диаграммы подвижности отрицательных носителей зарядов в различных плоскостях, полученные применительно к алмазоподобным структурам с физическими параметрами кристаллов кремния при фиксированном уровне внешнего напряжения, величина которого составляла $1,2 \cdot 10^9$ [Па]. Можно видеть, что супремальный эффект увеличения подвижности отрицательных носителей зарядов достигается в плоскости типа $\{001\}$ в направлении $\langle 100 \rangle$ (рис.2, кривая 1).

Результаты анализа изменения подвижности носителей зарядов под действием внешней нагрузки показали, что при изменении знака носителей зарядов влияние приоритетных направлений и плоскостей, отвечающих наибольшему эффекту увеличения подвижности - изменяются.

Типичные зависимости величины подвижности положительных носителей зарядов вдоль различных кристаллографических направлений, полученные по мере увеличения уровня внешнего напряжения, прикладываемого в направлении $\langle 111 \rangle$ применительно к алмазоподобным структурам представлены на рис.4. Можно видеть, что в данном случае наибольшее увеличение подвижности достигается в направлении $[111]$. Подвижность увеличивается почти в 2,5 раза от 510 до 1295 $[\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}]$.

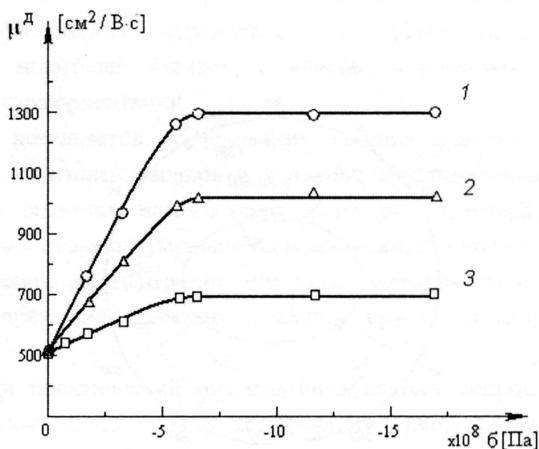


Рис.4. Подвижность положительных носителей зарядов при различном уровне внешнего напряжения для различных кристаллографических направлений: 1 - $[111]$; 2 - $[021]$; 3 - $[110]$

Угловые диаграммы подвижности положительных носителей зарядов в различных плоскостях, полученные применительно к алмазоподобным структурам с физическими параметрами кристаллов кремния при фиксированном уровне внешнего напряжения, величина которого составляла $-8 \cdot 10^8 [\text{Па}]$, представлены на рис.5. Можно видеть, что супремальный эффект увеличения подвижности положительных носителей зарядов достигается в плоскости типа $\{112\}$ в направлении $\langle 111 \rangle$ (рис.4, кривая 1).

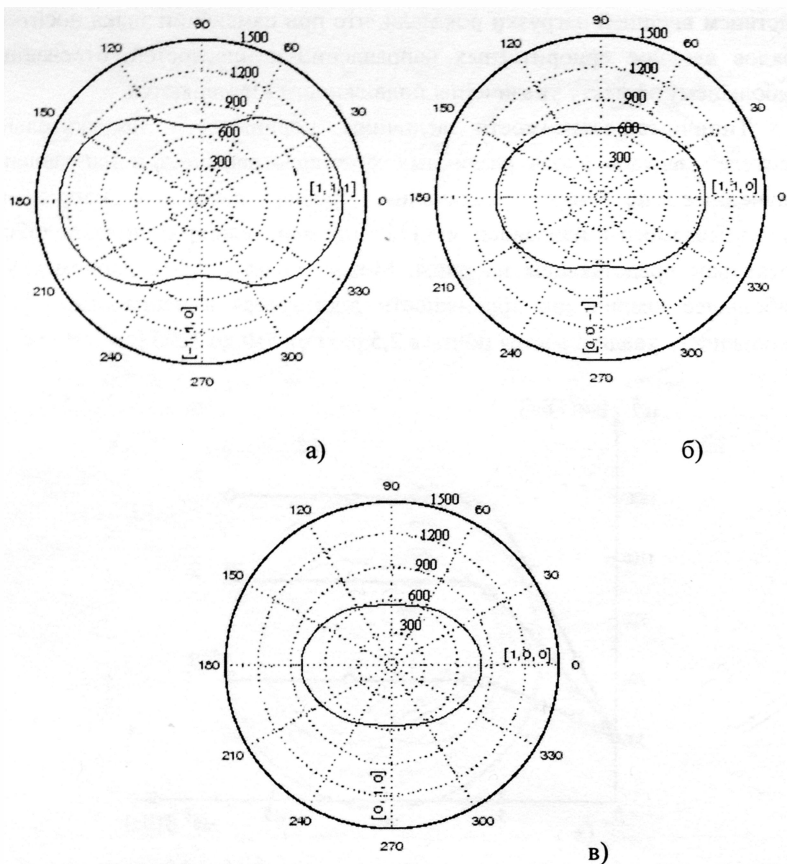


Рис.5. Угловые диаграммы подвижности положительных носителей зарядов вдоль различных кристаллографических направлений в плоскостях: а) - $(\bar{1}\bar{1}2)$; б) - $(\bar{1}\bar{1}0)$; в) - (001)

Анализа совокупности полученных результатов, для положительных и отрицательных носителей зарядов, позволяет сделать введение дополнительной ориентационной характеристики – фактора ориентации $(f_{klj})^{n,p}$, характеризующего взаимную ориентацию компонент тензора подвижности $(\mu_{kl})^{n,p}$ и тензора внешнего нагружения σ_{ij} . Полученные результаты позволили установить, что экстремальным значениям

подвижности носителей зарядов соответствуют ориентации, при которых вектора l , j – коллинеарны, а вектора k , i ортогональны. При этом максимальное увеличение подвижности носителей положительных и отрицательных носителей зарядов достигается, когда скалярное произведение векторов l и j соответственно равно -1 и +1. Причем супремуму подвижности носителей зарядов в условиях воздействия внешней нагрузки соответствуют такие значения фактора ориентации $(f_{klj})^{n,p}$, при которых вектор l тензора $(\mu_{kl})^{n,p}$ совпадает для отрицательных носителей зарядов с кристаллографическим направлением $\langle 100 \rangle$, а для положительных носителей зарядов с кристаллографическим направлением $\langle 111 \rangle$.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию влияния различных физических параметров на эффективность повышения подвижности носителей зарядов, с учетом выявленных супремальных значений фактора ориентации.

Анализ результатов исследования влияния примеси на изменение подвижности носителей зарядов в условиях действия внешней нагрузки показал, что внешняя нагрузка не изменяет характера зависимости, связанного с монотонным уменьшением подвижности носителей зарядов по мере увеличения концентрации примеси, однако увеличение уровня внешнего напряжения приводит к сдвигу кривых в сторону больших значений.

Большой практический интерес представляет вопрос установления роли физических параметров и характеристик решетки алмазоподобных кристаллов на изменение подвижности носителей зарядов в условиях воздействия внешней нагрузки. Анализ совокупности полученных результатов позволяет констатировать, что физические параметры и характеристики решетки, в качественном отношении не нарушают зависимости и закономерности изменения подвижности носителей зарядов в условиях действия внешней нагрузки от комплексно-ориентационных параметров, однако в количественном отношении их влияние может быть существенным. Проведенный сравнительный анализ показал, что если показатели увеличения подвижности носителей зарядов в условиях действия внешней нагрузки, полученные для кристаллов алмаза при условии супремальных значений фактора ориентации выбрать в качестве единицы, то для кристаллов кремния данные показатели принимают

значения 0,87 для отрицательных носителей зарядов и 0,80 для положительных, а для кристаллов германия данные показатели для отрицательных и положительных носителей зарядов соответственно равны 0,42 и 0,96.

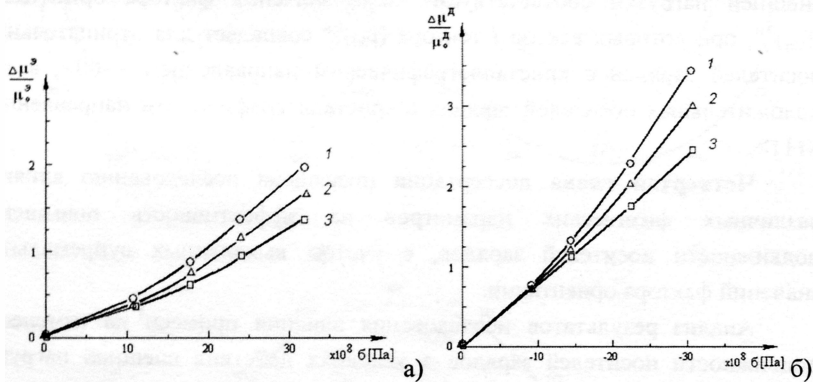


Рис.6. Зависимости от уровня внешнего напряжения относительной величин подвижности носителей зарядов (а) – электронов, (б) - дырок для различных значений параметра $d = 70$ (О); $100(\Delta)$; $140(\square)$ нм. $\Delta \mu^i = (\mu^i - \mu_0^i)$, где μ_0^i , μ^i – подвижность носителей зарядов i -ого знака соответственно, при нулевом и ненулевом уровне внешнего напряжения

С учетом современных тенденций разработки технологий получения монокристаллических нанопроводов, большой интерес представляют исследования влияния свободной поверхности на изменение подвижности носителей зарядов в условиях действия внешних нагрузок. Анализ данного вопроса проводился применительно к кристаллам алмаза в двумерном приближении, при котором моделирование проводилось в слое толщиной d . Избыточный поверхностный потенциал задавался в соответствии с имеющимися экспериментальными данными с учетом концентрации донорной или акцепторной примеси.

Зависимости относительных величин подвижности отрицательных и положительных носителей зарядов от уровня внешнего напряжения для

различных значений параметра d , полученные при супремальных значениях фактора ориентации представлены на рис.6.

Можно видеть, что во всех случаях по мере увеличения нагрузки и уменьшения толщины слоя d подвижность носителей зарядов возрастает. Причем для отрицательных носителей заряда, при уменьшении параметра d до 70 нм, подвижность возрастает в два раза, а для положительных носителей заряда возрастает практически в 3,5 раза.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана математическая модель, методика моделирования и программное обеспечение для изучения закономерностей влияния воздействия внешней нагрузки на подвижность носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах при строгом учете анизотропии, геометрических и физических параметров системы.

2. Методами компьютерного моделирования, проведены всесторонние исследования влияния внешней нагрузки на подвижность носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах. Получены и проанализированы важнейшие зависимости и характеристики процесса. Предложена новая характеристика – фактор ориентации $(f_{kij})^{n,p}$, описывающий взаимную ориентацию компонент тензора подвижности $(\mu_{ki})^{n,p}$ и тензора внешнего нагружения σ_{ij} . Показано, что экстремальным значениям подвижности носителей зарядов соответствуют ориентации, при которых вектора l, j – коллинеарны, а вектора k, i ортогональны. При этом максимальное увеличение подвижности носителей положительных и отрицательных носителей зарядов достигается, когда скалярное произведение векторов l и j соответственно равно -1 и $+1$.

3. Для алмазоподобных кристаллов характеризующихся различными физическими и структурными параметрами и для различных кристаллографических систем, получены угловые диаграммы подвижности носителей зарядов и зависимости подвижности от уровня внешней нагрузки. Установлено, что супремуму подвижности носителей зарядов в условиях воздействия внешней нагрузки соответствуют такие значения фактора ориентации $(f_{kij})^{n,p}$, при которых вектор l тензора $(\mu_{ki})^{n,p}$ совпадает с кристаллографическим направлением $\langle 100 \rangle$ для отрицательных носителей

зарядов и с кристаллографическим направлением $\langle 111 \rangle$ для положительных носителей зарядов.

4. Впервые, методами компьютерного моделирования, проведено исследование влияния концентрации примеси на изменение подвижности носителей зарядов в условиях воздействия внешней нагрузки. Установлено, что увеличение концентрации примеси приводит к монотонному снижению подвижности носителей зарядов, в то время как рост уровня внешней нагрузки при соответствующем выборе показателей фактора ориентации приводит к увеличению подвижности носителей зарядов независимо от их знака.

5. Впервые, применительно к нитевидным кристаллам с алмазоподобной структурой, проведено исследование влияния поперечного сечения нитевидного кристалла d на подвижность носителей зарядов в условиях воздействия внешней нагрузки. Установлено, что уменьшение значения параметра d до значения 70 нм приводит к двукратному увеличению супремального значения подвижности отрицательных носителей зарядов и более чем к трехкратному увеличению супремального значения подвижности положительных носителей зарядов.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Аунг Тура, Рыбкин С.В. Влияние смещения валентных зон на проявление тензорезистивного эффекта в алмазных структурах с р-проводимостью // Научные технологии. 2011. Т. 12, № 9. С. 58-60.
2. Аунг Тура. Влияние деформаций на смещение границ зоны проводимости в алмазоподобных кристаллах // Научные технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 15-20.
3. Аунг Тура. Математическая модель анализа влияния анизотропии на подвижность электронов при механическом нагружении // Научные технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 21-23.
4. Аунг Тура. Методические особенности моделирования влияния

анизотропии на подвижность электронов // Научные технологии в приборостроении и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 24-25.

5. Аунг Тура, Рыбкин С.В. Оценка влияния механического напряжения на подвижность носителей заряда в алмазоподобных кристаллах тензорезистивным методом // Труды МГТУ. Методы исследования и проектирования сложных технических систем. М., 2009. Т. 598. С. 213-221.
6. Аунг Тура. Особенности тензорезистивного эффекта в алмазоподобных кристаллах при статической и переменной деформации // Научные технологии в приборостроении и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т. 1. С. 158-159.
7. Аунг Тура. Деформационная зависимость подвижности и концентрации носителей заряда в алмазоподобных структурах // Научные технологии в приборостроении и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т. 1. С. 152-154.
8. Аунг Тура. Математическая модель процесса проводимости в алмазоподобных структурах при внешнем механическом воздействии // Научные технологии в приборостроении и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т. 1. С. 155-157.
9. Аунг Тура. Оценка влияния деформации на расщепление энергетических уровней в алмазоподобных кристаллах // Научные технологии в приборостроении и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2010. Т.2. С. 37-40.

Аунг Тура

Исследование влияния анизотропии на подвижность
носителей зарядов в алмазоподобных кристаллах

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 18.01.2012 г. Формат бумаги 60х84 1/16.
Бумага типографская № 2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Уч.-изд. л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ № 026-89-05.

КФ МГТУ им. Н.Э. Баумана
248600, г. Калуга, ул. Баженова, 2