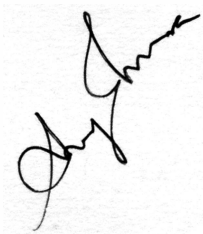
На правах рукописи

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 16^{00} 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.

НТБ МГТУ им. Н.Э. Баумана
1988092
Аунг Тураисследование влия

Ученый секретарь
диссертационного совета
кандидат технических наук, доцент С.А.Лоскутов

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 удается 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 моделирование 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 коплексно-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 «Наукоёмкие 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 $\boldsymbol{E}$, напряжения σ, температуры Т 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 $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{l}$. 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 <100>, <110>, <111>.

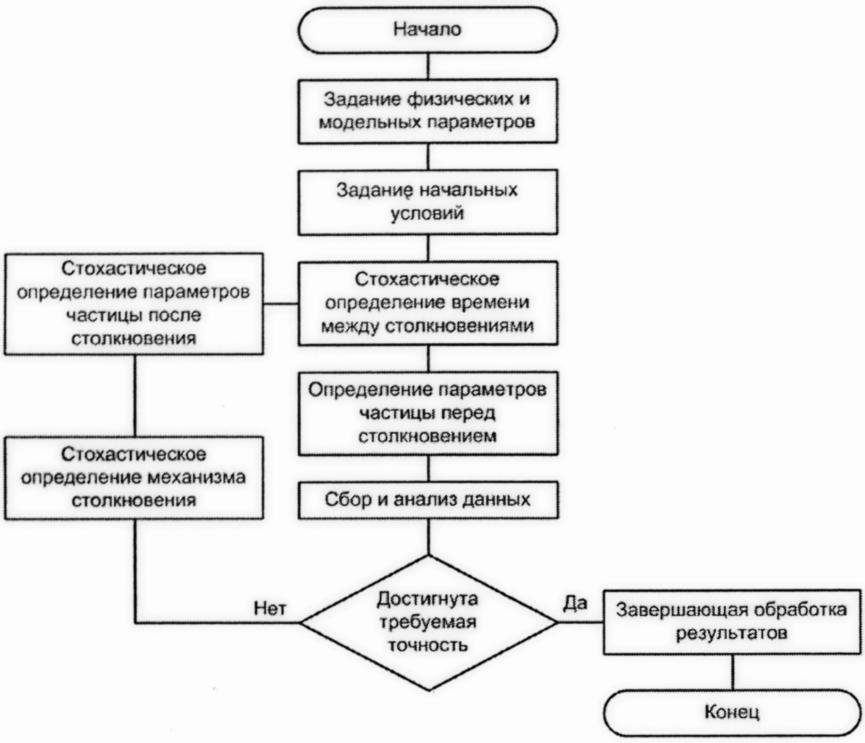


Рис.1. Укрупненная блок-схема метода

Типичные зависимости величины подвижности отрицательных носителей зарядов вдоль различных кристаллографических направлений, полученные по мере увеличения уровня внешнего напряжения, прикладываемого в направлении <100> 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 [$см^2 \cdot В^{-1} \cdot с^{-1}$].

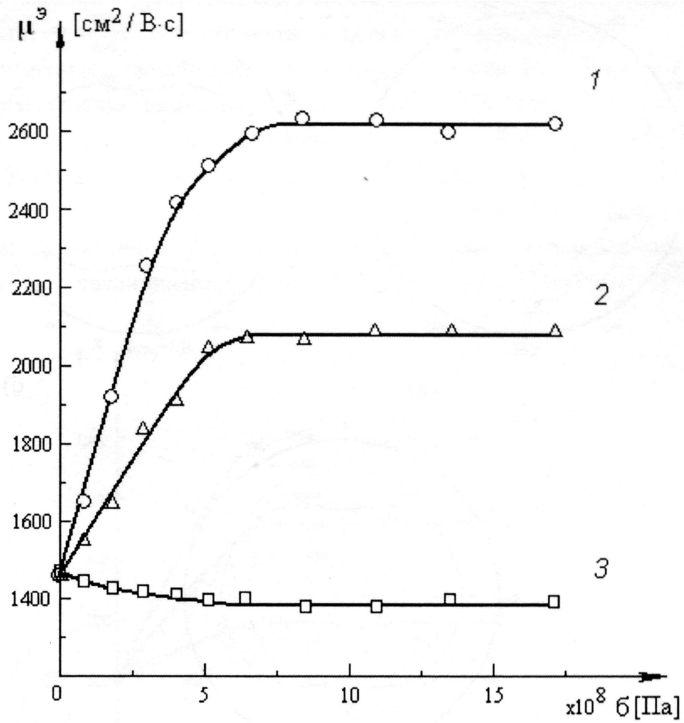


Рис.2. Подвижность отрицательных носителей зарядов при различном уровне внешнего напряжения для различных кристаллографических направлений: 1 - [100]; 2 - [110]; 3 - [010]

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

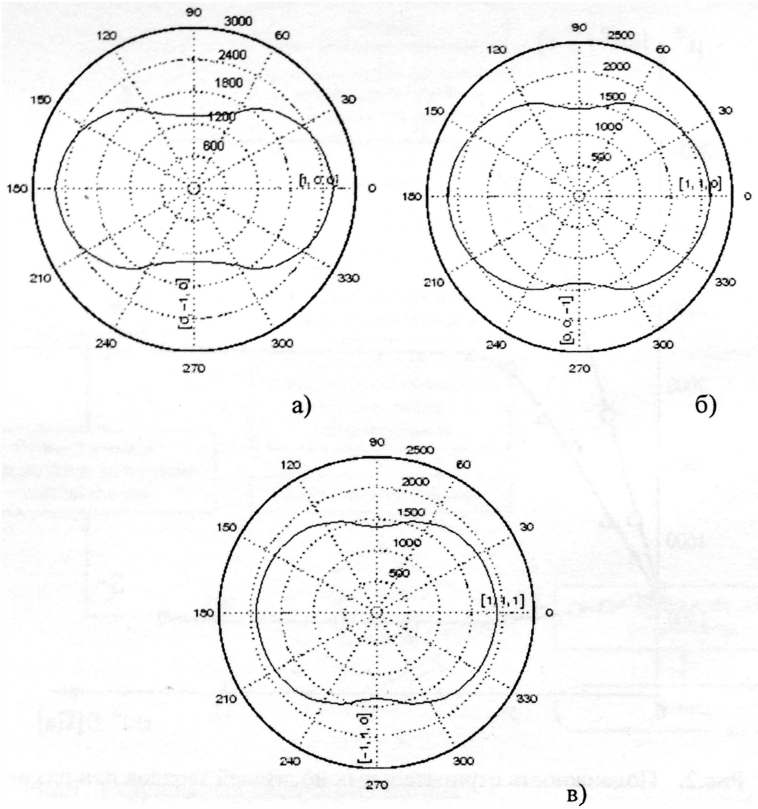


Рис.3. Угловые диаграммы подвижности отрицательных носителей зарядов вдоль различных кристаллографических направлений в плоскостях: а) - (001); б) - $(1\,\bar{1}\,0)$; в) - $(\bar{1}\,\bar{1}\,2)$

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 $1{,}2\cdot10^{9}$[Па]. Можно видеть, что супремальный эффект увеличения подвижности отрицательных носителей зарядов достигается в плоскости типа {001} в направлении <100> (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 <111> 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 [$см^2 \cdot В^{-1} \cdot с^{-1}$].

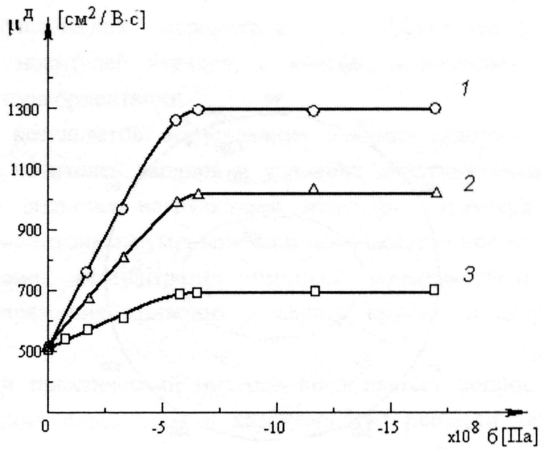


Рис.4. Подвижность положительных носителей зарядов при различном уровне внешнего напряжения для различных кристалллографических направлений: 1 - [111]; 2 - [021]; 3 - [$\bar{1}$10]

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 $-8 \cdot 10^8$[Па], представлены на рис.5. Можно видеть, что супремальный эффект увеличения подвижности положительных носителей зарядов достигается в плоскости типа {112} в направлении <111> (рис.4, кривая 1).

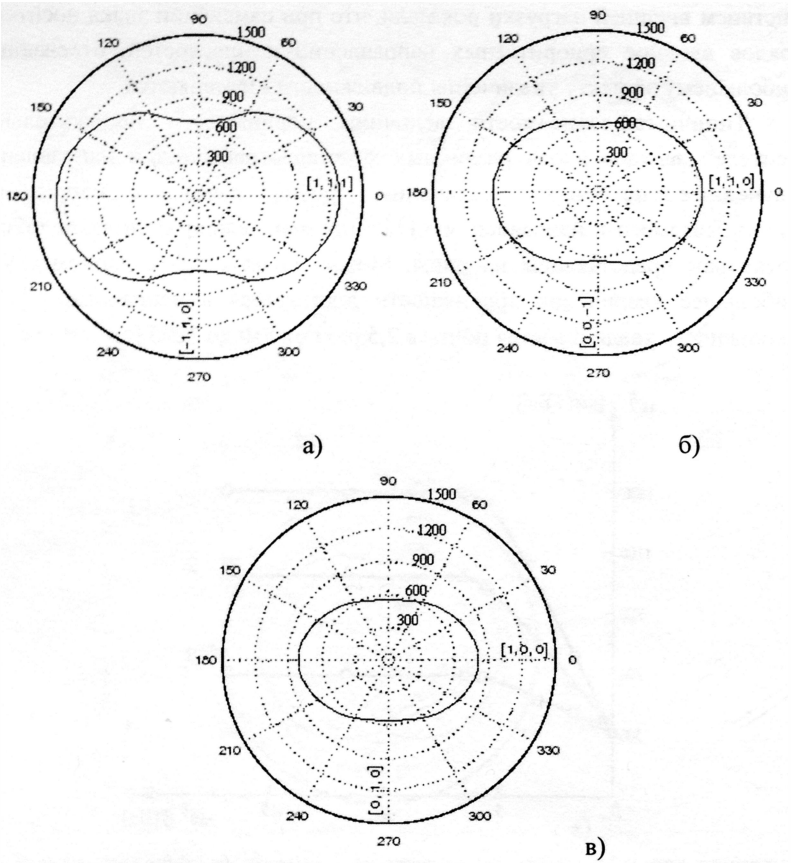


Рис.5. Угловые диаграммы подвижности положительных носителей зарядов вдоль различных кристаллографических направлений в плоскостях: а) - $(\bar{1}\,\bar{1}2)$; б) - $(1\,\bar{1}0)$; в) - (001)

Анализа совокупности полученных результатов, для положительных и отрицательных носителей зарядов, позволяет сделать введение дополнительной ориентационной характеристики – фактора ориентации $(f_{klij})^{n,p}$, 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 $\boldsymbol{l}$, $\boldsymbol{j}$ – коллинеарны, а вектора $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{i}$ ортогональны. При этом максимальное увеличение подвижности носителей положительных и отрицательных носителей зарядов достигается, когда скалярное произведение векторов $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{j}$ соответственно равно -1 и +1. Причем супремуму подвижности носителей зарядов в условиях воздействия внешней нагрузки соответствуют такие значения фактора ориентации $(f_{klij})^{n,p}$, при которых вектор $\boldsymbol{l}$ тензора $(\mu_{kl})^{n,p}$ совпадает для отрицательных носителей зарядов с кристаллографическим направлением <100>, а для положительных носителей зарядов с кристаллографическим направлением <111>.

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.

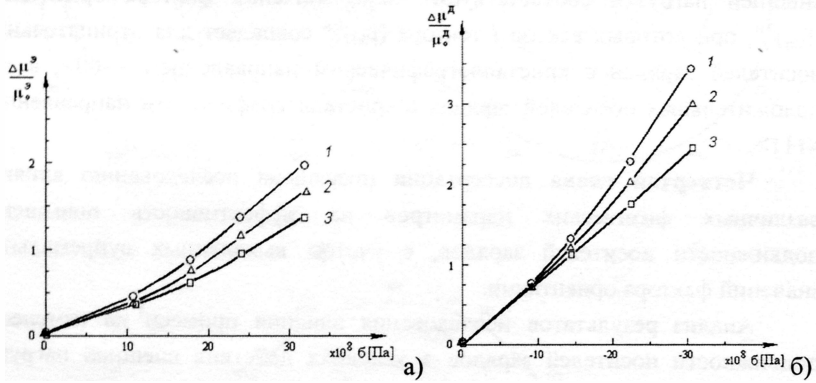


Рис.6. Зависимости от уровня внешнего напряжения относительной величин подвижности носителей зарядов (а) – электронов, (б) - дырок для различных значений параметра d =70 (О); 100(Δ); 140(□) нм. $\Delta\mu^i = (\mu^i - \mu^i_O)$, где μ^i_O , μ^i – подвижность носителей зарядов i-ого знака соответственно, 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 $(f_{klij})^{n,p}$, описывающий взаимную ориентацию компонент тензора подвижности $(\mu_{kl})^{n,p}$ и тензора внешнего нагружения σ_{ij}. Показано, что экстремальным значениям подвижности носителей зарядов соответствуют ориентации, при которых вектора $\boldsymbol{l}$, $\boldsymbol{j}$ – коллинеарны, а вектора $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{i}$ ортогональны. При этом максимальное увеличение подвижности носителей положительных и отрицательных носителей зарядов достигается, когда скалярное произведение векторов $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{j}$ 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 $(f_{klij})^{n,p}$, при которых вектор $\boldsymbol{l}$ тензора $(\mu_{kl})^{n,p}$ совпадает с кристаллографическим направлением <100> для отрицательных носителей

зарядов и с кристаллографическим направлением <111> 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 // Наукоемкие технологии. 2011. Т. 12, № 9. С. 58-60.
2. Аунг Тура. Влияние деформаций на смещение границ зоны проводимости в алмазоподобных кристаллах // Наукоемкие 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 // Наукоемкие 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 // Наукоемкие технологии в приборо- 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 // Наукоемкие технологии в приборо- 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 // Наукоемкие технологии в приборо- 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 // Наукоемкие технологии в приборо- 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 // Наукоемкие технологии в приборо- 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 60x84 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