

Моделирование процессов переноса электронов в полупроводниковом приборе с использованием гексагонального нитрида бора

В.В. Муравьев, В.Н. Мищенко

Белорусский государственный университет информатики и
радиоэлектроники, Минск
E-mail: mishchenko@bsuir.by

Особый интерес в разработке полупроводниковых приборов связан с исследованием свойств и характеристик ряда двухмерных и трехмерных материалов, которые могут обеспечить технологическую совместимость с графеном и обеспечить наиболее эффективную реализацию его уникальных свойства. Большое внимание в этом направлении привлекает изучение свойств и характеристик гексагонального (пленочного) нитрида бора (hBN) - материала с большой шириной запрещенной зоны и сопоставимой по кристаллической решетке с графеном. Экспериментальные исследования показали, что использование графена на подложке из hBN позволяет получить более высокую подвижность электронов по сравнению с использованием в качестве подложки известных материалов – Si, Al_2O_3 , SiC и ряда других [1]. Поэтому исследование полупроводниковых структур с использованием материала hBN привлекает достаточно большое внимание.

Для изучения свойств и характеристик материала hBN был использован известный программный комплекс Quantum Espresso, построенный на методе моделирования из первых принципов [2]. С использованием этого программного комплекса было выполнено моделирование зонной диаграммы. Из анализа полученных данных следует, что для гексагонального нитрида бора характерна трехдолинная **К-М-Г** зонная диаграмма. Наинизшей долиной является долина **К**, которой соответствует наименьший энергетический зазор между зоной проводимости и валентной зоной. При моделировании электронных характеристик и параметров этого материала в области сильных электрических полей необходим учет перехода носителей заряда (электронов) в верхние боковые долины **М** и **Г** по отношению к долине **К**. Исходя из полученных при моделировании данных, впервые был выполнен расчет относительной массы электронов в долине **М**, значение которой составило 0,9051 и использовалось в последующем моделировании.

С использованием метода Монте-Карло была разработана программа моделирования процессов переноса носителей заряда при температуре $T = 300$ К [3, 4]. При моделировании слой графена толщиной $0,34 \cdot 10^{-9}$ м располагался на подложке из материала hBN . Выбирались следующие

общие размеры полупроводниковой структуры: высота равнялась величине $0.075 \cdot 10^{-6}$ м, ширина – значению $2 \cdot 10^{-6}$ м, а длина структуры – значению $5 \cdot 10^{-6}$ м. Для области, состоящей из материала BN, были учтены наиболее важные механизмы рассеяния электронов: на полярных оптических фононах, на примесях, на акустических фононах, междолинное рассеяние между неэквивалентными долинами. При моделировании были получены зависимости средней дрейфовой скорости (рис. а), подвижности электронов (рис. б), средней энергии, коэффициента диффузии от величины напряженности электрического поля.

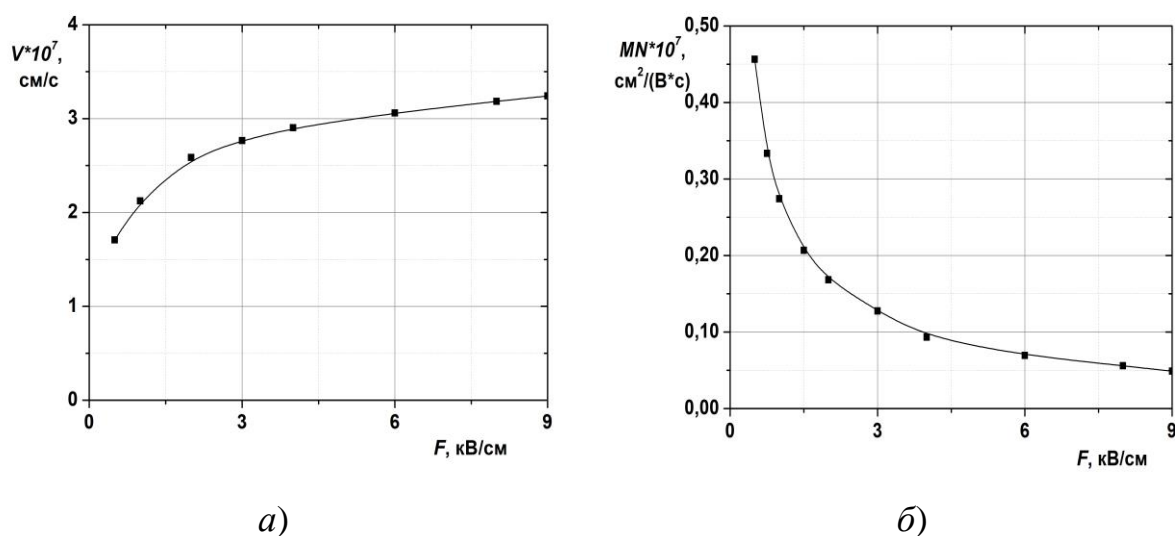


Рис. Зависимости средней дрейфовой скорости (а) и подвижности электронов (б) от напряженности электрического поля

Анализ этих зависимостей показывает, что с ростом напряженности электрического поля наблюдается монотонный рост средней дрейфовой скорости электронов, величина которой остается все время меньше скорости Ферми (величина приблизительно $1 \cdot 10^8$ см/с), а величина подвижности электронов – монотонно уменьшается. Поведение последней зависимости объясняется более значительным уменьшением напряженности электрического поля по отношению к росту средней дрейфовой скорости электронов. Достижение достаточно высоких значений средней дрейфовой скорости и подвижности электронов показывают на эффективность использования исследованной структуры для создания новых полупроводниковых приборов в диапазонах высоких частот.

1. Dean, C.R.; Young, A.F., Meric, I., et al. // Nat. Nanotechnol. 2010. 5. P. 722–726.
2. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. 21, 395502.
3. Муравьев В.В., Мищенко В.Н. // Доклады БГУИР. 2017. № 2 (104). С. 53–57.
4. Муравьев В.В., Мищенко В.Н. // Доклады БГУИР. 2017. № 6 (108). С. 42–47.