

Измерения и моделирование спектров оптического поглощения монокристаллического алмаза

Л.А. Кукушкина
Санкт-Петербургский
государственный

электротехнический университет
им. В.И. Ульянова (Ленина)
Санкт-Петербург, Россия
la.kukushkina@mail.ru

А.В. Соломникова
Санкт-Петербургский
государственный

электротехнический университет
им. В.И. Ульянова (Ленина)
Санкт-Петербург, Россия
zubann@yandex.ru

В.И. Зубков

Санкт-Петербургский
государственный

электротехнический университет
им. В.И. Ульянова (Ленина)
Санкт-Петербург, Россия
vzubkovspb@mail.ru

Аннотация—В работе изучается влияние легирования синтетического монокристаллического алмаза азотом и бором на край собственного оптического поглощения. Были проведены экспериментальные исследования набора образцов алмаза, для наглядного сравнения результатов экспериментов с литературными источниками был разработан виртуальный прибор, моделирующий спектры поглощения непрямозонного монокристаллического алмаза.

Ключевые слова— монокристаллический алмаз, оптическое поглощение, ширина запрещенной зоны, край поглощения, фононы, экситоны.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время интерес ученых связан с квантовыми вычислениями и квантовыми сетями. Первое значительно увеличит производительность компьютеров, второе, из-за «запутывания» фотонов, предоставит возможность абсолютно безопасной передачи информации. Ученые сделали существенный шаг вперед в разработке квантовых компьютеров и сетей с помощью исследования азотно-вакансионных (NV) и других центров окраски в алмазе, сформированных элементами IV группы [5]. Благодаря своим превосходным физическим свойствам полупроводниковый алмаз привлекает все больше внимания в современной опто- и СВЧ-электронике [3,4], но его новым применением является квантовый компьютеринг. Оптические свойства алмаза обоснованы шириной запрещенной зоны, соответствующей глубокому УФ-диапазону. Нелегированный бездефектный алмаз обладает широкой запрещенной зоной (5,45 эВ). Для применения в электронных приборах его часто легируют примесями. Из физики полупроводников известно, что при введении примеси зонная структура материала меняется из-за уменьшения ширины запрещенной зоны. Поэтому для оценки полупроводниковых свойств материала требуются оптические измерения края собственного поглощения, поскольку они дают информацию о ширине запрещенной зоны и особенностях легированного материала [1].

В данной работе изучались спектры оптического поглощения набора монокристаллических алмазных образцов с различными уровнями легирования, *n* и *p* типа. Экспериментально изучались их спектры поглощения, рассчитывались полученные данные сравнивались с данными моделирования.

2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Все образцы представляют пластины, вырезанные из кристаллов, выращенных методом высокого давления и высокой температуры (HPHT) при добавлении различных примесей в процессе роста. Перед проведением исследований оптического поглощения, концентрация примесей в образцах измерялась методом инфракрасной Фурье-спектроскопии (FTIR). Первый образец содержит азот в концентрации 10^{18} см^{-3} и имеет насыщенную желтую окраску, толщина образца 1,03 мм. Вторым образцом, толщина которого 1,03 мм, содержит азот с имплантированной в приповерхностную область примесью бора с концентрацией более 10^{18} см^{-3} . Третий – нелегированный монокристаллический алмаз типа Па. Это прозрачный образец, толщина которого составляет 0,49 мм. Четвертый образец легирован бором, цвет насыщенный синий, толщина 0,5 мм. Исследования проводились с помощью спектрофотометра СФ-56.

Спектр поглощения первого образца представлен на рис. 1(а). Экстраполируя к нулю прямолинейную область, значение энергии края поглощения составляет 2,3 эВ, что меньше ширины запрещенной зоны алмаза. Из-за наличия большой концентрации глубоких центров за счет азотных комплексов появляется большое количество возможных оптических переходов, что показано на энергетической диаграмме. Полученное значение энергии края поглощения соответствует началу широкой примесной зоны. Формулы для описания прямолинейной части зависимости показателя поглощения α от энергии $\hbar\omega$ приведены на графиках.

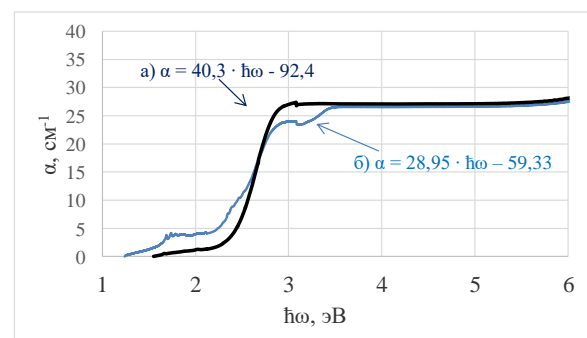


Рис. 1. Спектр показателя поглощения монокристаллического алмаза: а) с фоновой примесью азота (тип I); б) с примесью азота, имплантированной бором

Второй образец отличается от первого тем, что в него дополнительно имплантировали примесь бора, его спектр показателя поглощения представлена на рис. 1(б). В этом

случае, в запрещенной зоне расположены акцепторные уровни бора вблизи потолка валентной зоны, энергия активации которых составляет 0,37 эВ, а также глубокие примесные уровни азота с энергией активации 1,7 эВ, что иллюстрирует энергетическая диаграмма на рис. 2. Энергия края поглощения составила 2,05 эВ. Оптический край поглощения уменьшился по сравнению с первым образцом за счет наличия акцепторных уровней вблизи потолка валентной зоны.

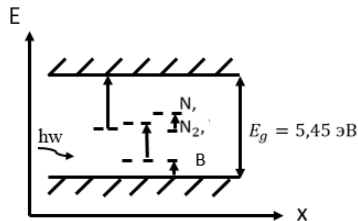


Рис. 2. Энергетическая диаграмма алмаза с примесью азота, имплантированный бором

Далее исследовались спектры пропускания и поглощения синтетического монокристаллического алмаза без внедренных примесей типа Па, рис.3а). Экспериментально полученная ширина запрещенной зоны составила 5,29 эВ, что несколько меньше ожидаемого теоретического значения 5,45 эВ. При энергии 5,29 эВ происходит возбуждение электронно-дырочной пары в экситонное состояние с поглощением фонона. По полученным результатам можно сделать вывод, что произошло взаимодействие с оптическим фононом с продольной поляризацией колебаний (LO), энергия которого составляет 156 мэВ [2].

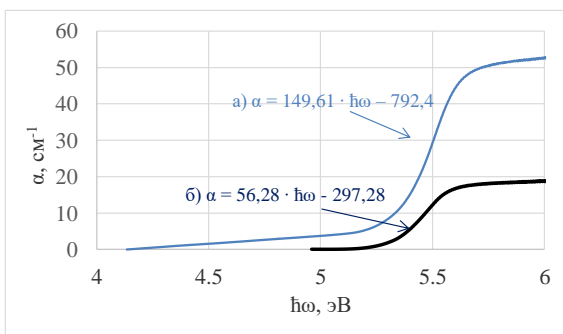


Рис. 3. Спектр показателя поглощения монокристаллического алмаза: а) нелегированного алмаза (тип Па); б) легированного бором (тип Пб)

Четвертый образец легирован бором, энергия активации которого 0,37 эВ. Введение бора в чистый, нелегированный монокристаллический алмаз дало меньшую энергию края собственного поглощения фотонов – 5,28 эВ, рис. 3б). Это связано с появлением в запрещенной зоне акцепторных уровней бора, рис. 4.

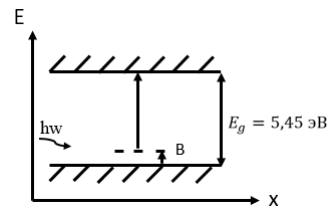


Рис. 4. Энергетическая диаграмма алмаза, легированного бором

Далее полученные экспериментальные данные сопоставлялись с результатами моделирования. Для моделирования был разработан виртуальный прибор в среде LabVIEW.

Задачей разработанного прибора являлось построение графика показателя поглощения от энергии падающего фотона, представленного в [6], а также расчет показателя поглощения монокристаллического алмаза, исследованного с помощью спектрофотометра СФ-56, исходя из коэффициента пропускания, толщины материала и коэффициента отражения. Дополнительные математические преобразования позволили оценить тонкую структуры спектра поглощения четвертого образца с теоретическими выкладками.

Исследование тонкой структуры третьего образца с помощью инструментов LabVIEW не помогло увидеть ожидаемых экситонных переходов при значениях 5,5 эВ – 5,9 эВ. Это может быть объяснено некачественной поверхностью образца. Также при проведении эксперимента образец мог быть закреплен на подложке неровно, что привело к переизлучению в образце и неоднородному уширению спектра.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Эксперимент показал явную зависимость ширины запрещенной зоны от степени легирования алмаза. Моделирование спектров позволило расширить возможности сравнительного анализа получаемых результатов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Пихтин, А.Н. Оптическая и квантовая электроника: учебник / А.Н. Пихтин. – М.: Высш.шк., 2001. – 573 с.
- [2] Walker, J. Optical absorption and luminescence in diamond / J. Walker. – The Institute of Physics, 1979. – 57 p.
- [3] Хмельницкий, Р.А. Синтетический алмаз для электроники и оптики / Р.А. Хмельницкий, Н.Х. Талипов, Г.В. Чучева. – ЗАО «Издательство ИКАР», 2017. – 244 с.
- [4] Yamasaki, S. Power electronics device applications of diamond semiconductors / S. Yamasaki, R.J. Nemanich. – Duxford: Woodhead Publishing, 2018. – 200 p.
- [5] Ruf, M. Quantum networks based on color centers in diamond / M. Ruf, N.H. Wan, H. Choi, D. Englund, R. Hanson // Journal of Applied Physics. – 2021. – Vol. 130(7). – P. 1-21.
- [6] Mildren, R.P. Mildren Intrinsic Optical Properties of Diamond / R.P. Mildren // Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. – 2013. – Vol. 1. – P. 1-34.