

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Факультет (навчально-науковий інститут) Факультет радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

Кафедра фізичної і біомедичної електроніки та комплексних інформаційних технологій

До захисту допущено

Кафедрою фізичної і біомедичної електроніки та комплексних інформаційних технологій протокол № \_\_\_\_ від \_\_\_\_\_

В.о. завідувача кафедри \_\_\_\_\_

(підпис)

Сергій БЕРДНИК

(ім'я, прізвище)

« \_\_\_\_ » грудня 2025р.

Кваліфікаційна робота  
здобувача другого (магістерського) рівня вищої освіти  
(першого (бакалаврського) / другого (магістерського))

ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВОСТІ ПЛАНАРНИХ ДІОДІВ НА ОСНОВІ GAN  
(назва роботи)

Спеціальність (спеціалізація) 105 Прикладна фізика та наноматеріали  
(код та найменування спеціальності; спеціалізації спеціальності - за наявності)

Освітня програма «Радіофізика, біофізика та комп'ютерні системи»  
(назва освітньої програми)

Виконавець \_\_\_\_\_

(підпис)

Борис ЛИТОЧКІН

(ім'я, прізвище)

Науковий керівник \_\_\_\_\_

(підпис)

Олег БОЦУЛА

(ім'я, прізвище)

## МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна

Факультет Радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем  
Кафедра фізичної і біомедичної електроніки та комплексних інформаційних технологій

Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріалиОсвітньо-професійна програма Радіофізика та електронікаРівень вищої освіти другий (магістерський)**ЗАТВЕРДЖУЮ****Завідувач кафедри**

\_\_\_\_\_ Сергій БЕРДНИК  
підпис ініціали, прізвище

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2025 року

**З А В Д А Н Н Я  
НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ**ЛИТОЧКІН БОРИС ІГОРОВИЧ**(прізвище, ім'я, по батькові студента)**1. Тема роботи Теплові властивості планарних діодів на основі GaN

керівник роботи Боцула Олег Вікторович, кандидат фіз. – мат. наук, доцент,  
( прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від від “24” жовтня 2025 року № 1401-5/3957

2. Строк подання студентом роботи 10 грудня 2025 р

3. Перелік питань, які потрібно розробити:

3.1. Аналіз науково-технічної інформації щодо процесів генерації тепла в GaN-структурах

3.2. Проведення числового моделювання та аналіз отриманих температурних та електричних характеристик діодів, інтегрованих з одношаровим h-BN, порівняння з базовими GaN-діодами

#### 4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Робота з науковою літературою за темою дипломної роботи.
2	Формування огляду наукових публікацій щодо фізичних принципів роботи, фізичних процесів генерації та самонагрівання в планарному GaN-діоді.
3	Моделювання фізичних процесів генерації та самонагрівання в планарному GaN-діоді.
4	Дослідження ефективності тепловідводу та оцінка впливу одношарового h-BN на температурний режим діода.
5	Аналіз та обробка отриманих результатів
6	Оформлення дипломної роботи

5. Дата видачі завдання 9 вересня 2025 року

**Студент** \_\_\_\_\_

підпис

Б.І. Литочкін

ініціали, прізвище

**Керівник роботи** \_\_\_\_\_

підпис

О.В. Боцула

ініціали, прізвище

## АНОТАЦІЯ

Литочкін Б.І. Теплові властивості планарних діодів на основі GaN.  
Дипломна робота магістра. Харківський національний університет імені В. Н.  
Каразіна, Харків, 2025. 55 с., 9 рис., 46 джерел.

Об'єкт дослідження: планарний GaN-діод довжиною 1 мкм.  
Предмет дослідження: процеси генерації високочастотних коливань у GaN-діоді під впливом ударної іонізації та самонагрівання.  
Мета роботи: оцінити можливість отримання високої частоти генерації в GaN-структурах, проаналізувати вплив температурних ефектів та ударної іонізації на електричні характеристики діода, а також запропонувати метод зниження температури активної області.

Методи дослідження: метод Монте-Карло для моделювання динаміки носіїв заряду та 2D-моделювання режимів постійного й змінного струму.  
Результати дослідження: досліджено генераційні властивості планарного GaN-діода, наведено залежності щільності струму та ефективності коливань від зміщення. Проаналізовано вплив самонагрівання та ударної іонізації на параметри діода. Визначено максимальну температуру в активній області та запропоновано використання одношарового h-BN як теплорозподільника на верхній поверхні діода. Показано, що застосування SL h-BN дозволяє знизити температуру приблизно на 150 К.

Практичне значення: отримані результати можуть бути використані для оптимізації GaN-діодів субмікронного масштабу та покращення їх теплових характеристик у високочастотних застосуваннях.

Ключові слова — температура, мольна частка, ударна іонізація, розсіювання, самонагрівання, одношаровий, GaN, напруженість електричного поля, теплопровідність, тепловий опір межі.

## ABSTRACT

Lytochkin B.I. Thermal properties of planar diodes based on GaN. Master Thesis. V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, 2025. P. 55, Fig. 9, Ref. 46.

Object of study: planar GaN diode with a length of 1  $\mu\text{m}$ .

Subject of study: processes of high-frequency oscillation generation in a GaN diode under the influence of impact ionization and self-heating.

Purpose of the work: to evaluate the possibility of obtaining high generation frequencies in GaN structures, to analyze the influence of temperature effects and impact ionization on the electrical characteristics of the diode, and to propose a method for reducing the temperature of the active region.

Research methods: Monte Carlo method for modeling charge carrier dynamics and 2D modeling of direct and alternating current modes.

Research results: the generation properties of a planar GaN diode were studied, and the dependencies of current density and oscillation efficiency on displacement were presented. The influence of self-heating and impact ionization on the diode parameters is analyzed. The maximum temperature in the active region is determined, and the use of single-layer h-BN as a heat spreader on the upper surface of the diode is proposed. It is shown that the use of SL h-BN allows the temperature to be reduced by approximately 150 K.

Practical significance: the results obtained can be used to optimize submicron GaN diodes and improve their thermal characteristics in high-frequency applications.

Keywords: temperature, mole fraction, impact ionization, scattering, self-heating, single-layer, GaN, electric field strength, thermal conductivity, thermal resistance of the boundary.

## ЗМІСТ

Перелік скорочень, умовних познач, одиниць і термінів.....	7
Вступ.....	8
1 Властивості двовимірного нітриду бору.....	10
1.1 Загальна характеристика шарів hBN.....	10
1.2 Технологія отримання шарів h-BN.....	12
1.3 Електронні та діелектричні властивості 2DhBN.....	23
1.4 Пасиваційний та захисний шар на основі 2D-hBN.....	26
2. Моделювання GaN діодів з шарами h-BN.....	28
2.1 Метод Монте- Карло.....	28
2.2 Процедура моделювання методом Монте-Карло.....	35
2.3 Модель гібридної 2D-3D гетероструктури GaN-h-BN осциляторному діоді.....	42
2.4 Характеристики діода по постійному струму та частоті.....	44
Висновки.....	51
Список використаних джерел ... ..	52

## ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ, УМОВНИХ ПОЗНАК, ОДИНИЦЬ І ТЕРМІНІВ

GaN - нітрид галію

hBN - гексагональний нітрид бору

ХГФ - хімічне гравіювання фотошару

ТЕМ - трансмісійна електронна мікроскопія

SiO<sub>2</sub> - діоксид кремнію

PVD - фізичне осадження з парової фази

ХГЕ - хімічне гравіювання елементів

FET - транзистор на польовому ефекті

П - ударна іонізація

SL – моношар

## ВСТУП

Для отримання високих частот у твердотільних активних елементах, включаючи терагерцовий діапазон, ми шукали можливі способи підвищення їх частотної чутливості. Ця проблема вирішується як шляхом природного зменшення розмірів елементів і, отже, скорочення часу польоту носіїв заряду, так і шляхом використання ефективних механізмів підвищення їх функціональності. Наприклад, у трансферних електронних діодах (TED) основною проблемою є скорочення часу переходу електронів із супутньої долини зони провідності до найнижчої центральної долини в зоні провідності (зворотні переходи). Цей час зазвичай перевищує час прямого переходу. Практично єдиним способом вирішення цієї проблеми є пошук відповідних матеріалів з невеликим часом переходу. Бінарні сполуки III-нітриду, такі як GaN, InN і AlN, а також їхні потрібні сполуки разом із четвертинними, вважаються одними з найбільш можливих матеріалів для розробки високошвидкісної електроніки, включаючи пристрої генерації терагерцових частот. Час зворотного переходу в GaN, як відомо, становить близько  $10^{-13}$  с. Це на порядок менше, ніж у GaAs, який традиційно використовується для діодів Ганна. Більш того, він має високу швидкість насичення для електронів (більше  $2 \times 10^7$  см/с) і, завдяки широкій енергетичній забороненій зоні, є також чудовим кандидатом для роботи пристроїв при високих температурах.

Теоретичні оцінки частотних властивостей GaN та інших III-нітридів, ефективності коливань демонструють можливість отримання генерації до 1 ТГц і потужності до 10 мВт. Наприклад, перевага GaN як діода Ганна над діодами на основі таких матеріалів, як GaAs та InP, була продемонстрована в [1,2]. Енергетичні характеристики як діодів GaN, так і їхніх трикомпонентних аналогів, включаючи діоди з градуйованою шириною забороненої зони, були проаналізовані в [3].

Однак до недавнього часу виготовлення діодів Ганна на основі GaN залишалося складним завданням. Типовими проблемами є високий послідовний опір, що призводить до великих втрат постійного струму, ефекти самонагрівання та мала теплопровідність підкладок [1], [4]. Генерація основної частоти в діапазоні 0,3–0,4 ТГц діодом на основі GaN була експериментально отримана в [5]. Повідомляється про виготовлення джерел Ганна на основі GaN, що представляють активну мезоструктуру на підкладці GaN. На думку авторів, це стало можливим завдяки стабільним бічним контактам, хорошій пасивації активної мезоструктури та хорошому тепловідводу.

Метою дослідження є 2-D моделювання планарного діода на основі GaN на сапфіровій підкладці для аналізу генерації електромагнітних коливань з урахуванням ефектів сильних електричних полів, включаючи нагрівання та ударну іонізацію. Таким чином, структура діода та підкладка були використані для отримання максимального ефекту нагрівання. Розглядається гексагональний нітрид бору (h-BN) як фактор, що запобігає утворенню локального перегріву в гібридному 2D-3D гетероструктурному діоді.

## 1. ВЛАСТИВОСТІ ДВОВИМІРНОГО НІТРИДУ БОРУ

### 1.1 Загальна характеристика шарів h-BN

2D-hBN нанолісти, які є 2D-ізоляторами з гібридизацією  $sp^2$ , є структурними аналогами графена з підгратками, зайнятими рівною кількістю атомів бору та азоту, розташованих по черзі у вигляді сотової конфігурації. Гексагональна кристалічна структура hBN з кристалографічними параметрами  $a=0,250$  нм і  $c = 0,666$  нм та міжшаровим проміжком  $0,333$  нм забезпечує чудову взаємодію з графеном, а отже, має великий потенціал для різних застосувань у пристроях.

Подібно до графену, між різними площинами hBN, які мають ковалентні зв'язки в межах площини і є сильно поляризованими через високу асиметрію підграток, домінує слабка ван-дер-ваальсова взаємодія, що призводить до великої ширини забороненої зони (5–6 еВ). Оскільки взаємодія між шарами в hBN слабка, сили Ван-дер-Ваальса та електростатичні сили в значній мірі відповідають за закріплення відстані між шарами та визначення оптимальних режимів укладання.

На рис. 1.1a показано експериментальні структури валентної зони одношарового hBN, де енергії зв'язку вимірюються від еВ. Залежно від різних підкладок спостерігаються помітні відмінності в структурі зон. Дослідження за допомогою просвічувального електронного мікроскопа виявили впорядковані шари та атомні структури в нанолістах hBN з міжплощинною відстанню  $0,25$  нм, що відповідає площині (100) та еквівалентним площинам (див. рис. 1.1d та e). Чітко виражені дифракційні плями (100) на рис. 1.1b свідчать про ідеальну реєстрацію AA' в різних шарах, тоді як розсіяні плями разом із колом вказують на погіршення якості нанолістів hBN через обертання шару або безладне укладання шарів (рис. 1.1c). На додаток до загальноприйнятого укладання AA', в нанолістах hBN також було спостережено укладання AB, де процес

ультразвукової обробки має значний вплив на перехід від укладання AA' до укладання AB.

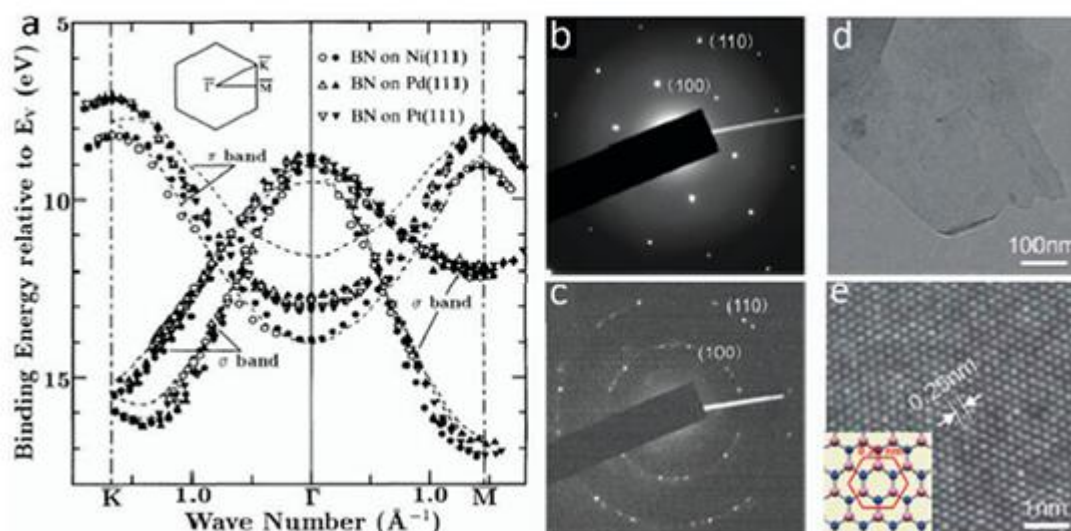


Рис. 1.1 Структури валентних зон одношарового hBN на різних підкладках.

Відкриті (суцільні) позначки позначають дані, отримані за допомогою резонансної лінії He I (He II). Перервана крива представляє теоретичну структуру зоноб'ємного hBN (b) SAED-діаграма листів BN, що демонструє ідеальну реєстрацію та високу кристалічність нанолістів hBN. (c) діаграма нанолістів BN з обертанням або безладною укладкою між шарами.

Завдяки атомно-ультрарівній поверхні, яка не має вільних зв'язків і має незначні дефекти, а також невеликі розбіжності постійної решітки ( $\sim 1,7\%$ ) з графеном, 2D-hBN досліджується як ідеальна платформа для майбутньої графенової електроніки з чудовими характеристиками та стабільністю. Характерна стійкість до окислення та корозії робить 2D-hBN підходящим кандидатом як діелектрик затвора та покривний шар для захисту активного матеріалу та пристрою від структурної деформації та хімічного руйнування. Крім того, завдяки електричній ізоляції з широкою забороненою зоною 5,97 eV та оптичній прозорості, 2D-hBN може застосовуватися як бар'єрний і активний шар для реалізації тунельних пристроїв і налаштування динаміки носіїв заряду

та оптичних властивостей. Його висока термічна стабільність (до 1000 °C у повітрі та 1400 °C у вакуумі), вищий коефіцієнт теплового розширення (1-шаровий, 2-шаровий та 9-шаровий відповідають  $-3.41 \times 10^{-2}$ ,  $-3.15 \times 10^{-2}$  та  $-3.78 \times 10^{-2} K^{-1}$  відповідно) та провідність ( $k = 484 \text{ Втм}^{-1} \text{ К}^{-1}$ ), а також відмінна механічна міцність (еластична константа 220–510 Н м<sup>-1</sup> та модуль Юнга 1,0 ТПа) надають 2D-hBN додаткові переваги в різних інших сферах застосування. Стабільність і продуктивність пристроїв на основі 2D-hBN, звичайно, сильно залежать від якості 2D-нанолистів, що, відповідно, вимагає ретельного контролю процесу синтезу. Це дійсно стимулювало нові стратегії та інновації в контролі процесів росту матеріалу та розумінні механізмів формування.

Незважаючи на значний прогрес, досягнутий на сьогоднішній день, сучасні дослідження 2D-hBN все ще стикаються з трьома основними викликами: (а) зростання великомасштабного hBN з контрольованою якістю шару та відповідною технікою перенесення, (b) інтеграція 2D-hBN в інші наноматеріали або нанопристрої, (c) ефективна модуляція електронних структур за допомогою інших стратегій (включаючи енергетичні смуги та носії заряду) в 2D-hBN.

## 1.2 Технологія отримання шарів h-BN

Технологія отримання шарів h-BN відіграє вирішальну роль у структурі, кристалічності та властивостях 2D-hBN нанолистів, а отже, і в їхній відповідній продуктивності в пристроях. Було розроблено різні стратегії обробки для виготовлення одно- та багат шарового hBN, спеціально спрямовані на отримання великого виходу високої якості та значного поперечного розміру.

Найбільш дослідженими є механічне відшарування, рідке відшарування, хімічне осадження з парової фази та епітаксія. Механічне відшарування є реалістичним процесом для розробки кристалічних структур hBN, якщо його проводити належним чином, проте отримані таким чином шари hBN часто мають випадковий розподіл, обмежений розмір пластівців та низький вихід. З

іншого боку, рідке відшарування є ефективним процесом для виробництва великої кількості нанолістів hBN за відносно низькою вартістю.

Однак неконтрольована кількість шарів і відносно невеликий розмір пластівців, а також ймовірне забруднення поверхні хімічними речовинами, що використовуються, можуть зробити цей метод складним варіантом для практичного виробництва у великих масштабах. У порівнянні з ексfolіацією, ХГФ та процес епітаксії з парової фази мають переваги з точки зору контролю кількості шарів та великомасштабного зростання атомно-тонких нанолістів hBN. Однак висока температура реакції, необхідна під час синтезу, та вплив різних газових атмосфер часто призводять до дефектів кристалічної структури, що призводить до значних відмінностей у властивостях матеріалу 2D-hBN, а отже, і в характеристиках пристроїв.

Механічне відшарування. Експериментальне дослідження нанолістів hBN на SiO<sub>2</sub> та вільних нанолістів було проведено з використанням метода ексfolіації (рис. 1. 2а та б).

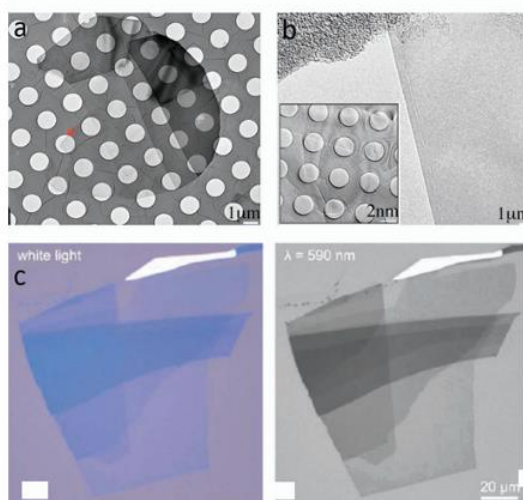


Рис. 1.2 Зображення TEM ексfolійованих вільних нанолістів hBN на SiO<sub>2</sub>. Складання позначено червоною стрілкою на загальному зображенні.

Встановили кристалічність і безперервність тонких нанолістів hBN розміром кілька мікрон і досягли впорядкованої гексагональної структури з товщиною листа від 3,5 нм до 80 нм. Завдяки цій стратегії виготовлення, зразки з одно- та малочаровим hBN були ексфолійовані для вивчення їх структурної організації, хімічної природи, побудови країв та динаміки дефектів протягом наступних кількох років. Однак загальні розміри нанолістів hBN, про які повідомлялося в цих дослідженнях, не перевищували декількох мікрометрів через обмеження розміру первинних порошків hBN. Відповідно, для ексфоліації використовували великі монокристали hBN, і розмір отриманих зразків hBN з декількома шарами міг перевищувати 100 нм, як показано на рис. 1.2 с. Окрім прямого механічного розщеплення, існують інші підходи, які використовують сили зсуву для ексфоліації об'ємного матеріалу hBN до нанолістів з декількома шарами, типовим прикладом чого є кульове подрібнення.

Помірний зсувний тиск, що виникає під час процесу подрібнення, практично не пошкоджувала площинну структуру, тому для досягнення ефективного механічного подрібнення було враховано деякі умови: (а) підходящим типом кульового млина є такий, що має контрольоване кочення, (б) для мінімізації пошкоджень і збільшення кількості дій краще використовувати дрібніші подрібнювальні тіла, (с) використання відповідного рідкого середовища може забезпечити змащення і запобігти ефекту зварювання під час процесу подрібнення. Дійсно, помірний вихід нанолістів hBN був отриманий з рідким середовищем бензилбензоату і NaClO, але ціною пошкодження структури і зменшення розміру пластівців. Для поліпшення виробництва нанолістів hBN було використано ефективний метод, що поєднує низькоенергетичне кульове подрібнення з процедурою ультразвукової обробки, шляхом подрібнення порошку hBN у різних поверхнево-активних речовинах за допомогою цирконієвих кульок з подальшою ультразвуковою обробкою низької потужності. Було досягнуто безпрецедентно високої концентрації нанолістів

hBN до 1,2 мг/мл з чудовою стабільністю та чудовими дисперсійними властивостями, що свідчить про потенціал високої ефективності виробництва, необхідної для практичного застосування.

Рідке відшарування одно- та малошарові нанолісти hBN, були вперше отримані у 2008 році, де 0,2 мг кристалів hBN було оброблено ультразвуком у 5 мл розчину 1,2-дихлоретану полі(м-феніленвінілен-ко-2,5-дитокси-п-феніленвінілену) для диспергування та руйнування сил Ван-дер-Ваальса між шарами hBN. Без використання будь-яких поверхнево-активних речовин або органічних розчинників нанолісти hBN були безпосередньо ексфолійовані у воді шляхом розрізання первинного hBN за допомогою ультразвукової обробки у ванні. Ефект полярності розчинника в поєднанні з ультразвуковою обробкою може призвести до повної ексфоліації hBN в моно- або кількшарові структури, утворюючи «чисті» водні дисперсії нанолістів hBN. Однак отримані таким чином пластівці hBN мають зменшені поперечні розміри через гідроліз за допомогою ультразвуку. Концентрація нанолістів hBN до 3 мг/мл<sup>-1</sup> була в кінцевому підсумку досягнута шляхом застосування метансульфонової кислоти, що не тільки покращило вихід продукції, але й посилило розчинення hBN у розчиннику.

В якості подальшої модифікації було продемонстровано стратегію використання змішаних розчинників на основі параметрів розчинності Гансена. Було обрано два «слабкі» розчинники, а саме етанол і воду. При співвідношенні етанол/вода 55% було розроблено «молочну» дисперсію нанолістів hBN з високою концентрацією  $0.075 \pm 0.003$  мг/мл<sup>-1</sup>.

Окрім описаних вище методів, існують інші стратегії, розроблені для ексфоліації нанолістів hBN у рідкій фазі, включаючи мікрофлюїдизацію під високим тиском у поєднанні зі змішаними розчинниками DMF/хлороформ, ексфоліацію в рідині за допомогою електричного поля, ексфоліацію за допомогою мікрохвильового опромінення, рідку ексфоліацію в поєднанні з

швидким гасінням, техніку ультразвукової обробки за допомогою магнітного перемішування та мікрохвильовий сольвотермічний процес, які в основному спрямовані на виробництво дисперсій нанолістів hBN у великих масштабах.

Хімічне осадження з парової фази. Епітаксійне зростання 2D-hBN на підкладках з переважною орієнтацією.

Перша робота з епітаксійного зростання моношару BN на металевих підкладках, в якому BN був вирощений на підкладках Pt(111) і Ru(001) шляхом адсорбції та розкладання боразину. Стехіометрія BN у боразині 1:1 запобігає складній хімії осадження. Були спостережені різні ефективні коефіцієнти покриття одношарового BN: 0,36 для Pt(111) і 0,15 для Ru(001) через різні ступені дисоціації на обох підкладках. Монокристалічний одношаровий hBN на підкладці Ni(111) з використанням боразину як попередника. Зріст другого або наступних шарів є досить складним і вимагає експозиції попередника, яка в 300 разів перевищує експозицію для формування першого шару. Крім того, поведінка росту та електронні властивості одношарового hBN майже не залежали від відмінностей у підкладках-носіях. Але невелика різниця в постійній решітці між поверхнею Ni(111) (2,49 Å) та об'ємним hBN (2,5 Å) робить фольгу Ni перспективною підкладкою для росту 2D-hBN. Елементне співвідношення B і N, а також токсичність і рідкий стан (температура плавлення  $-58\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) боразину при кімнатній температурі ускладнюють експеримент. Як альтернатива, було досліджено більш стабільний і простий у використанні прекурсор, B-трихлорборазин  $(\text{ClBNH})_3$ , для заміни боразину для росту одношарового hBN на Ni(111) та Pt(111). В одношаровій hBN/Pt(111) було виявлено системі як тип A (орієнтація підґраток B і N збігається з підкладкою Pt(111)), так і тип B (орієнтація підґраток B і N повернута на  $30^{\circ}$  відносно підкладки Pt(111)). Це продемонструвало значний вплив хімії прекурсорів і металів підкладки на формування, орієнтацію та електронну структуру

одношарового hBN. Деякі з цих експериментів були розроблені для перевірки розрахованих електронних і оптичних властивостей.

Синтез наноліста hBN у формі так званої наносітки на підкладці Rh(111) демонструє високий ступінь періодичності. Кристалічні структури, форма і розмір пор у наносітці значною мірою залежать від типу використовуваної підкладки. Наносітка може бути вирощена на Rh(111) і Ru(0001), тоді як плоский одношаровий hBN утворюється при використанні Pd(111), Pt(111), Cu(111), Mo(110), Cr(110), Fe(110) і Ni(111) як підкладки. Вважалося, що це пов'язано з різними особливостями міжфазного хімічного зв'язку та процесами адсорбції/розкладу прекурсорів під час процесу росту на цих підкладках. Зокрема, одношаровий та наносітчастий hBN співіснували, коли синтез проводився на Ir(111). Чотири конкретні етапи: (а) адсорбція боразину на поверхні підкладки, (b) розкладання попередника з утворенням рухомих поверхневих частинок, (c) дифузія та коалесценція частинок з утворенням острівців hBN, (d) з'єднання острівців hBN з утворенням компактної наносіткової структури мікроскопії в реальному часі, hBN, були запропоновані на основі проведення для вивчення утворення наносітки hBN на Rh(111), Ru(0001), та Ir(111), в яких температура, кондиціонування підкладки, тип і концентрація попередника, а також парціальний тиск могли відігравати певну роль.

Слід зазначити, що останнім часом було досягнуто значного прогресу в зростанні hBN на рівні пластин. Одношаровий hBN був сформований на 4-дюймовій підкладці Rh(111) у модифікованій ультрависоковакуумній камері за допомогою процесу самозавершення. На поверхні hBN були виявлені гофровані морфології, що пояснювалося складною геометрією підкладки Rh. Аналогічно, на епітаксціальних 2-дюймових шарах hBN також були виявлені зморшки, які ставали більш вираженими із збільшенням товщини. Однак за допомогою модифікованого методу низького тиску ХГФ було повідомлено про рівномірне

зростання декількох шарів сапфіру с-площини hBN без зморшок на 2-дюймовій підкладці з порядком укладання AA'. Ці нові прориви відкривають можливості для подальшого дослідження різноманітних властивостей нанолістів hBN та застосування нанометрового hBN у сферах мікро- та нанофабрикації. Крім того, для отримання нанолістів hBN також були досліджені епітаксійні стратегії, включаючи епітаксію Ван-дер-Ваальса, молекулярну епітаксію, та атомно-шарову епітаксію. Загальна якість вирощеного hBN варіюється від випадку до випадку, і параметри обробки потребують оптимізації, особливо для каталітичних підкладок та техніки перенесення.

Хімічне осадження з газової фази нанолістів hBN на полікристалічних або аморфних підкладках.

Хоча епітаксійні методи дозволяють отримувати одношаровий hBN з високою кристалічністю, вони, як правило, надзвичайно чутливі до підкладок, і більшість з них мають специфічну орієнтацію, що вимагає суворих обмежень попередньої обробки, що робить більшість з них досить складними та трудомісткими, а отже, важкими для інтеграції у великомасштабне практичне виробництво. Тому необхідно розробити нові прості стратегії, особливо для синтезу високоякісного 2D-hBN великої площі на звичайних підкладках, щоб задовольнити загальні вимоги та, бажано, забезпечити сумісність із процесами на основі кремнію. Загалом, будь-яку процедуру синтезу можна оптимізувати, щоб контролювати розмір, кількість шарів і кристалічну структуру, що робить процес виготовлення більш сумісним і маневреним для конкретних застосувань. Як підкладки каталітичного типу, для росту графена і 2D-hBN традиційно використовуються фольга Cu і Ni, завдяки їх низькій вартості і відмінним каталітичним властивостям. Для зручності наведено підсумок деяких типових процесів ХГФ для росту нанолістів hBN, в яких використовували боразин і аміак боран (боразан) з Cu, Ni, і Pt, як підкладки. Відпал при високій температурі призводить до рекристалізації підкладок з більшим розміром зерен,

що гарантує покриття синтезованого hBN в діапазоні від десятків мікронів до декількох сантиметрів. Морфологія та щільність нуклеації в значній мірі залежать від попередньої обробки підкладок та розкладу прекурсорів. hBN частіше утворюються при низькому тиску з чистими прекурсорами. Зокрема, з урахуванням домінуючої кристалічної орієнтації, було виготовлено одношаровий hBN на плавкій мідній фользі на опорній фользі з вольфраму з вирівнюванням зерен 75% і повним покриттям, що забезпечує всебічне дослідження вирівняного росту монокристалів hBN на великих площах. Сильне вирівнювання hBN призводить до їх збіжності до симетричних багатогранних форм (таких як «метелик» і «зірка з 6 вершинами»). Окрім звичайних підкладок, були також досліджені інші підкладки на основі каталізаторів. Наприклад, однорідний моношар hBN можна було синтезувати на гетероепітаксійній плівці Co, але основною проблемою є неповне покриття. Вибравши сплав Cu–Ni як підкладку, Lu та ін. розробили монокристалічні моношарові зерна hBN площею до  $7500 \mu\text{m}^2$  що приблизно на два порядки більше, ніж повідомлялося раніше. Введення Ni дозволило ефективно зменшити щільність зародження до 60 на  $\text{mm}^2$ , що призвело до утворення нанолістів hBN великих розмірів. Аналогічно, активну підкладку Fe, леговану Si, можна було б застосувати для ефективного регулювання щільності зародження hBN шляхом контролю кількості дифузії Si в тонкий шар Fe. Однак межа зерен між двома доменами hBN серйозно впливає на якість вирощених нанолістів, незважаючи на можливість контролю щільності зародження і навіть кількості шарів.

Багатошарові нанолісти hBN розміром з пластину можна було безпосередньо вирощувати на підкладках  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  у вакуумному середовищі з шорсткістю поверхні в нанометровому діапазоні, де одним з ключових параметрів був баланс між хімічним розкладом і кінетикою реакції. Хоча було реалізовано зростання декількох шарів hBN з великою площею, і багато зусиль знаходяться на стадії планування, виготовлення hBN розміром з пластину з

контрольованими шарами, а також високою кристалічною якістю все ще залишається складним завданням. Кристалічність і дефекти вибраних підкладок значно впливають на якість і товщину синтезованого 2D-hBN. За таких умов, необхідна належна обробка поверхні hBN, така як бомбардування киснем/аргоном і рекристалізація, що дозволяє певною мірою контролювати щільність зародження і площу hBN. Крім того, ретельно підбираючи прекурсори, такі як вид, кількість і співвідношення, можна контролювати розмір і кількість шарів.

Серед інших нових підходів до синтезу, виділяється ексfolіація за допомогою інтеркаляції іонів. Літєві іони є одними з найбільш широко використовуваних в електрохімічній ексfolіації 2D-шаруватих матеріалів. Завдяки оптимізації напруги відсічення та струму розряду можна було контролювати кількість інтеркальованих іонів літію, уникаючи розкладу інтеркальованих літєм сполук та деградації структури hBN. На основі подібних принципів кількшарові нанолісти hBN у розплавлених гідроксидах (NaOH/KOH) і розчині NaOH були ексfolійовані за допомогою іонів  $K^+$  / $Na^+$  і  $OH^-$ . Однак вихід продукції є низьким через nereакційні або негідроксильовані нанолісти hBN.

Фізичне осадження з парової фази (PVD) є поширеним процесом для нарощування плівки, який дозволяє уникнути складної взаємозалежності параметрів нарощування, що мають місце в процесі ХГФ. Одно- та малошаровий hBN в атмосфері надвисокого вакууму  $N_2/Ar$  шляхом радіочастотного (RF) магнетронного розпилення мішені В. Використання підкладки Ru (0001) забезпечує орієнтацію для В та N, що дозволяє їм об'єднуватися в упорядковану шарувату плівку hBN. Подібний підхід було застосовано для синтезу плівок hBN на підкладці Au (111) кутами повороту  $60^\circ$  hBN. між двома взаємопов'язаними трикутними доменами Спостережувані особливі морфології, включаючи метелика, діамант і шестикутну зірку,

вказували на значно відмінну взаємодію плівок hBN з підкладкою під час процесу росту. Інші стратегії на основі розпилення, такі як опромінення високоенергетичними електронами та розпилення іонним пучком, також були використані для отримання нанолістів hBN з контрольованою кількістю шарів. Безсумнівно, що ці методи PVD забезпечують інший підхід до високоякісного виготовлення 2D шаруватого hBN у масштабі пластин, хоча кристалічність отриманих таким чином нанолістів потребує оптимізації, як і типи підкладок, які можуть бути ефективно використані.

Поверхнева сегрегація відома як реалістична стратегія для виготовлення двовимірних шаруватих матеріалів великої площі і була вперше використана Ху для синтезу 2D-hBN. Електрополірований сплав Fe–Cl–Ni, легований B і N, був використаний для вирощування нанолістів hBN з декількома шарами шляхом термічної обробки в умовах надвисокого вакууму. На поверхні сплаву були виявлені трикутні домени hBN з пошаровим малюнком, незалежним від орієнтації кристалів сплаву, що свідчить про можливість контролю кількості шарів, морфології зерен та орієнтації структури. Було вирощено кількашарові тонкі плівки hBN шляхом відпалу структури Co(Ni)/аморфний hBN/SiO<sub>2</sub>, де hBN був вбудований між полікристалічним металом і підкладкою SiO<sub>2</sub>. Таким чином, плівка hBN утворилася на верхній поверхні з атомами B і N, що дифундували через металеві плівки. Було виявлено, що атоми N повністю нерозчинні в металах Co або Ni, тому було запропоновано механізм масового транспорту, спричинений дифузією на межі зерен. Високоякісні нанолісти hBN на 4-дюймовій підкладці були отримані за допомогою багатшарової структури з твердотільним шаром джерела BN між верхнім шаром Fe і нижнім шаром Ni

З метою зниження температури росту та отримання нанолістів hBN (B:N B 1:1) з хорошим стехіометричним співвідношення, було проведено імпульсне лазерне осадження, в результаті якого отримали надтонкий, висококристалічний hBN при 700°C з аморфної мішені BN. Тонкі плівки hBN були успішно

осаджено на мішені BN. Тонкі плівки hBN були успішно осаджено на високоорганізованому піролітичному графіті (HOPG) та сапфірових підкладках за допомогою 248-нм KrF-ексимерного лазера. Було підтверджено велику площу покриття плівки без розділення мікродоменів або будь-яких отворів. Взаємодія між декількашаровим hBN і підкладками Ag є відносно слабкою, що призводить до відшарування вирощених шарів hBN за допомогою клейкої стрічки. Тонкі плівки hBN, виготовлені цим методом, можуть бути використані для виробництва великих площ без границь зерен або деформацій, хоча кристалічність є відносно низькою в порівнянні з тією, що отримується за допомогою ХГФ або рідкого відшарування.

Розроблено процес піролізу для виготовлення нанолістів hBN. Борна кислота і сечовина з різними молярними співвідношеннями були змішані і розчинені в надчистій воді, після чого розчинник був випарений для перекристалізації. Висококристалічний одно- і малошаровий hBN з надзвичайно високою питомою поверхнею (SSA) BN  $1900 \text{ м}^2 \text{ г}^{-1}$  був отриманий шляхом піролізу продукту при високих температурах, які можна було регулювати, вибираючи різні види розчинників або змінюючи співвідношення. Орієнтацію кристалів отриманих нанолістів hBN також можна було контролювати, регулюючи швидкість росту кристалів під час процесу термічного випаровування. Ця розробка відкриває новий шлях для структурного контролю нанолістів hBN і вказує на новий шлях для великомасштабного та високоефективного виробничого процесу.

Використовуючи ідею розпакування вуглецевих нанотрубок, було створено одно- та кількашарові нанострічки hBN шляхом розпакування багатостінних нанотрубок BN за допомогою плазмового травлення Ag. Розгорнуті нанострічки hBN мали N-закінчені зигзагоподібні краї та низку вакансій на поверхні. Розроблено 2–10-шарові нанострічки hBN за допомогою методу, індукованого інтеркаляцією калію, для поздовжнього розщеплення

нанотрубок hBN. Були розроблені високоякісні нанострічки hBN з досить рівномірною шириною та мінімальною кількістю дефектів.

### 1.3 Електронні та діелектричні властивості 2D-hBN.

У порівнянні з традиційними підкладками, 2D-hBN вважається дуже перспективним для декількох типів функціональних матеріалів, особливо разом з такими 2D-матеріалами, як графен, завдяки мінімальному невідповідності решітки ( $\sim 1,7\%$ ) та майже атомно-рівній поверхні, яка може бути вільною від всяких зв'язків або поверхневих зарядових пасток. Крім того, велика ширина забороненої зони ( $\sim 5,9\text{--}6$  eV) і поверхневі оптичні фононні моди (з енергією, удвічі вищою за SiO<sub>2</sub>), діелектричні характеристики ( $\epsilon \sim 3\text{--}4$ ), високе поле пробую (В  $\sim 0,7$  В нм<sup>-1</sup>) та відмінна теплопровідність (у 600 разів вища, ніж у SiO<sub>2</sub>) роблять 2D-hBN придатним для 2D-електроніки.

Була продемонстрована рухливість  $60000\text{см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$ , що втричі перевищувала рухливість SiO<sub>2</sub>, головним чином завдяки зменшенню розсіювання домішкових зарядів. Перший hBN/графен/hBN-FET для радіочастотних застосувань створений завдяки двошаровому графену на підкладці hBN і продемонстровано рухливість Холла вище  $15000\text{ см}^2\text{ В}^{-1}\text{ с}^{-1}$  і дуже високу частоту відсічення струмового підсилення  $f_t = 33$  ГГц, що в 2,5–4 рази перевищувало показники, досягнуті на підкладках SiO<sub>2</sub> і діелектриках затвора Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (18 ГГц) у рази перевищували показники, досягнуті на підкладках SiO<sub>2</sub> і діелектриках затвора Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. З огляду на їх величезний потенціал, hBN і 2D матеріали, такі як графен, будуть далі розвиватися для впровадження в масштабах пластин. Дійсно, були сконструйовані графенові пристрої великої площі на основі високоякісних нанолістів hBN, які, як було показано, демонструють втричі вищу рухливість і коефіцієнт струму вмикання/вимикання, прокладаючи шлях для потенційних широкомасштабних застосувань hBN у 2D наноелектроніці та нових пристроях. [6-9] Більше того, було продемонстровано поліпшення потенційної неоднорідності в нанолістах

hBN з потенційними коливаннями на 1–2 порядки нижчими, ніж у SiO<sub>2</sub>, [10] що ще раз підтверджує унікальні властивості hBN. Подібні демонстрації були проведені з MoS<sub>2</sub>, який виявляє високу рухливість польового ефекту 45 см<sup>2</sup> В<sup>-1</sup> с<sup>-1</sup> і відсутність гістерезису транспорту. h-BN має стабільні діелектричні властивості, де уникнуто ефекту легування від звичайних підкладок.

Дослідження взаємодії та ефектів зв'язку між діелектричною підкладкою та графеном показало, що міжфазні пастки, домішки та поверхневі фонони сусіднього ізолятора значно погіршують транспорт носіїв заряду. Було продемонстровано прямий перенос нанолістів hBN, вирощених методом ХГЕ, на FET на основі графена в якості верхнього діелектрика затвора, що призвело до значного поліпшення рухливості дірок Холла завдяки зменшенню щільності уловленого заряду та розсіювання. [11,12,13] Інтегрували нанолісти hBN в метал/ізолятор/напівпровідникові транзистори з високою рухливістю електронів (MISHEMT) на основі AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> як діелектрики затвора, де продемонстровано бажаний контроль заряду затвора та характеристики (струм витoku нижче 20 пА мм<sup>-1</sup>, щільність міжфазного стану  $5 \times 10^{11}$  см<sup>-2</sup> eV<sup>-1</sup>, і шорсткість поверхні 0,4 нм), що доводить потенціал 2D-hBN у мікрохвильових силових пристроях на основі Ga<sub>N</sub>.

Високе співвідношення струму увімкнення/вимкнення та висока рухливість електронів були продемонстровані шляхом накладання hBN на MoS<sub>2</sub>, який є стабільним і не деградує при високих напругах затвора. На основі цього розуміння було застосовано гібридний діелектрик затвора, що складається з hBN і HfO<sub>2</sub>, для виготовлення MoS<sub>2</sub>-FET, в якому пригнічується розсіювання зарядових пасток і оптичних фононів та підвищується ефективна ємність затвора. Запропоновано нову схему, в якій hBN служить як підкладкою, так і діелектриком затвора, для вимірювання багатотермінальної рухливості Холла в MoS<sub>2</sub>, де було зафіксовано рекордно високу рухливість Холла 34000 см<sup>2</sup> В<sup>-1</sup> с<sup>-1</sup>

завдяки різкому зменшенню безладу і розсіювання від внутрішніх дефектів, а також зовнішніх впливів.

Немає сумнівів, що 2D-hBN сам по собі є видатним діелектриком з надзвичайними та однорідними характеристиками для застосування в пристроях. У графенових FET з атомно-тонким hBN, що діє як вертикальний транспортний бар'єр, було досягнуто коефіцієнт увімкнення/вимкнення  $\sim 50$  при кімнатній температурі. [14] З іншого боку, в нанолистах hBN було спостережено напруженість електричного поля  $\sim 12$  МВ/см<sup>-1</sup>, що є порівнянним з SiO<sub>2</sub> завдяки сильній ковалентній природі зв'язку. [15]

У порівнянні з традиційними оксидними діелектриками, такими як HfO<sub>2</sub> або SiO<sub>2</sub>, 2D-hBN є більш надійним, оскільки не відбувається утримання/вивільнення заряду та струму витоку, спричиненого напругою, що робить пристрої більш міцними та довговічними. Було досліджено діелектричні властивості нанолістів hBN на рівні пристрою, де було показано, що кількшаровий hBN є надзвичайно стабільним до напруги з досить рівномірними напругами початку.

Були сконструйовані паралельні пластинчасті конденсатори Au/hBN/Au з нанолистами hBN як гнучкими діелектриками.[46] Найкраща виміряна питома ємність  $6,8 \mu \text{ F cm}^{-2}$  була майже на порядок вищою за теоретично розраховане значення, що свідчить про великий потенціал для застосування в нано- та суперконденсаторах. Внутрішня поведінка 2D-hBN при переносі заряду в площині також була досліджена на основі напівпровідникової природи нанолістів hBN з широкою забороненою зоною. [16,17] Рухливість при кімнатній температурі  $0,01 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  була виміряна при електричних полях до  $100 \text{ kV cm}^{-1}$  за відсутності діелектричного пробоя. Тому було запропоновано механізм провідності, обмежений просторовим зарядом. Завдяки вертикальній структурі метал-ізолятор-метал (MIM) нанолісти hBN з декількома шарами мають резистивну комутаційну поведінку.[18] 3-нм hBN, вирощений методом

ХГЕ, розміщений між верхнім електродом Ag і нижнім електродом з фольги Cu/поліетилентерефталату (PET) для побудови резистивного запам'ятовуючого пристрою, який продемонстрував чудову витривалість із співвідношенням увімкнення/вимкнення  $\sim 100$  і тривалим часом збереження навіть в екстремальних умовах згинання.

#### 1.4 Пасиваційний та захисний шар на основі 2D-hBN.

Відмінні електроізоляційні властивості, висока термічна стабільність і хімічна інертність, а також контрольовані розміри роблять 2D-hBN одним з найбільш потенційно важливих кандидатів для пасиваційних застосувань, особливо в поєднанні з іншими 2D-матеріалами, такими як графен та інші наноматеріали з великою часткою атомів, що виходять на поверхню. Погіршення внутрішніх характеристик і зниження продуктивності пристрою можна ефективно придушити шляхом інкапсуляції hBN для покриття активних областей. Наприклад, інкапсульований таким чином графеновий FET продемонстрував балістичну відстань транспортування понад  $1 \mu\text{ м}$  (кімнатна температура-RT) і середню довжину вільного пробігу, що перевищує  $3 \mu\text{ м}$  (4K), з надзвичайно високою внутрішньою рухливістю носіїв заряду  $\mu \sim 500000 \text{ см}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,<sup>145</sup> що вказує на те, що інкапсуляція hBN робить графен високостійким до навколишнього середовища і ефективно захищає його від інших забруднень. Такі поліпшення також спостерігалися в транзисторах на основі  $\text{WSe}_2$  і  $\text{MoS}_2$ , інкапсульованих нанолістами hBN, де було досягнуто рекордної рухливості Холла ( $>600 \text{ см}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) і низького підпорогового коливання відповідно. Добре відомо, що чорний фосфор швидко розкладається під впливом атмосферних умов, утворюючи пастки заряду високої щільності. Однак можна створити надчистий інтерфейс, зберігши при цьому властивості чорного фосфору, шляхом введення капсулюючих шарів hBN, які забезпечують високу рухливість під дією поля та коефіцієнти вмикання/вимикання струму.

Відмінна непроникність, чудова стійкість до високих температур і хороші фрикційні характеристики роблять нанолісти hBN потенційним бар'єром для захисту металів та інших чутливих до повітря матеріалів від окислення та корозії.[19,20] Електрична ізоляція hBN не викликає гальванічної корозії металу, що лежить в основі, яка спостерігається в графені з утворенням гальванічних елементів. Одношаровий hBN демонструє високу стійкість до окислення, без утворення ямок від травлення до досягнення температури  $850^{\circ}\text{C}$ . Завдяки цій перевазі, кількешарові нанолісти hBN, як надтонкі покриття, можуть запобігати окисленню Ni і графену при температурах до  $1100^{\circ}\text{C}$  в атмосфері, багатій киснем, що головним чином пояснюється великим активаційним бар'єром в hBN в ландшафті вільної енергії, що виникає в результаті одночасного видалення атомів B і N під час процесу окислювальної реакції. Крім того, нанолісти hBN можуть зменшити швидкість окислення феромагнітних матеріалів, таких як Co і пермалої, що може допомогти гарантувати подальший процес інжекції електричного спіну. Як новий електрод, нанолісти hBN також використовуються для виготовлення літієво-іонних акумуляторів. Після реакції з ультратонким нанолістом hBN, який спочатку готується на поверхні Cu як ефективний захисний шар, було виготовлено багатешарову структуру hBN/Li/Cu, в якій ефективно пригнічується утворення дендритів на основі літію та мохоподібного літію. Таким чином, введений бар'єр hBN сприяє дифузії іонів літію для формування однорідного електрода, що призводить до зменшення реакції між електролітом і літієм, тим самим покращуючи ефективність циклу.

## 2 МОДЕЛЮВАННЯ GaN - ДІОДІВ З ШАРАМИ h-BN

### 2.1 Метод Монте-Карло

Мінімум зони провідності нітриду галію знаходиться в центрі зони Бріллюєна, а ефективна відносна маса на дні зони становить  $m^*/m_0 = 0,02$ . Ми вважатимемо, що долина є сферичною за всіх енергій, що нас цікавлять, але врахуємо непараболічність, пов'язавши енергію  $E$  з хвильовим вектором  $k$  за допомогою співвідношення

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = y(E) = E(1 + \alpha E) \quad (2.1)$$

де

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right)^2 \quad (2.2)$$

а  $E_g$  – енергетично заборонена зона. Використовуючи  $E_g = 3,42$  еВ [23],  $\alpha$  має значення  $0,576$  еВ<sup>-1</sup> в нітриді галію.

Дані щодо допоміжних долин у зоні провідності нітриду галію ще не дуже добре вивчені.

При кімнатній температурі та низьких напруженостях електричного поля розсіяння на полярних оптичних фонах домінує в долині (000). Для цього процесу швидкість переходу від хвильового вектора  $k$  до  $k'$  задається [24,25]:

$$S_0(k, k') = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) B_0(k, k') \times \left\{ \begin{array}{l} N_0 \delta[E(k') - E(k) - \hbar\omega_0] \text{ (поглинання)} \\ (N_0 + 1) \delta[E(k') - E(k) + \hbar\omega_0] \text{ (випромінювання)} \end{array} \right\} \quad (2.3)$$

де

$$B_0(k, k') = \left(\frac{2\pi e^2 \hbar \omega_0}{V |k - k'|^2}\right) \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right) G(k, k') \quad (2.4)$$

У цих виразах  $\omega_0$  — частота оптичного фонона,  $\varepsilon_\infty$  і  $\varepsilon_0$  — діелектричні сталі при високій і низькій частотах відповідно,  $V$  — об'єм,  $N_0$  — число заповнення оптичних фононів та  $T$  — температура ґратки.

$$N_0 = [\exp(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}) - 1]^{-1} \quad (2.5)$$

Функція

$$G(k, k') = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \mu'} \int dr u_{\mu k'}^*(r) u_{\mu k}(r) \quad (2.6)$$

є інтегралом перекриття між періодичними частинами функцій Блоха в точках  $k$  та  $k'$ , підсумованих за подвійно виродженими кінцевими спіновими станами, позначеними як  $\mu'$  та усередненими за початковими спіновими станами  $\mu$ . Для плоских хвиль вільних електронів або s-станів  $G(k, k') = 1$ . Однак при великих значеннях  $k$  відбувається домішка хвильових функцій валентної зони p-типу до станів зони провідності, і  $G(k, k')$  відрізняється від одиниці [24,25]. Для обчислення  $G(k, k')$  ми використаємо хвильові функції, задані Кейном для зони провідності, та спростимо їх, нехтуючи спін-орбітальним розщепленням валентної зони. Потім ми знаходимо, що з гарним наближенням .

$$G(k, k') = (a_k a_{k'} + c_k c_{k'} \cos \beta)^2 \quad (2.7)$$

де  $\beta$  - кут між  $k$  та  $k'$ . Величини  $a_k$  та  $c_k$  задані Кейном та у цьому випадку зводяться до простих виразів

$$a_k = \left[ \frac{1 + \alpha E(k)}{1 + 2\alpha E(k)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.8)$$

$$c_k = \left[ \frac{\alpha E(k)}{1 + 2\alpha E(k)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.9)$$

Для малих енергій ми бачимо, що  $a_k \rightarrow 1$  та  $c_k \rightarrow 0$ . Ми також зазначимо, що для відновлення звичайного результату, отриманого з плоскими хвилями або хвильовими функціями s-типу, ми просто покладаємо  $\alpha \rightarrow 0$ , тобто  $E_g \rightarrow \infty$ , в  $a_k$

та  $C_k$ , коли знову  $a_k \rightarrow 1$  та  $C_k \rightarrow 0$ . Результат (2.7) був отриманий на припущенні, що  $k$  розташовано вздовж головного напрямку кристала. Вилучення цього наближення призводить до некерованих формул, але оскільки це еквівалентно нехтування додатковою анізотропією в розсіюванні, спричиненій домішкою валентних хвильових функцій зони, і ця анізотропія мала в арсеніді галію, наближення є досить хорошим.

Варто зазначити, що хоча результати (2.1), (2.7), (2.8) та (2.9) були отримані на основі припущення, що спін-орбітальне розщеплення валентної зони незначне, наведені тут вирази все ще є хорошим наближенням, коли спін-орбітальне розщеплення велике.

Підставляючи (2.4) та (2.7) у (2.3), легко підсумувати по всіх  $k'$ , щоб знайти загальну швидкість розсіювання зі стану  $k$ , тобто ймовірність того, що електрон з хвильовим вектором  $k$  буде розсіяний; це необхідно для методу Монте-Карло, описаного в наступному розділі. Результат такий

$$\lambda_0(k) = \frac{em^* \omega_0}{\sqrt{2h}} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \frac{(1 + 2\alpha E')}{\gamma^{\frac{1}{2}}(E)} F_0(E, E') \times \left\{ \begin{array}{l} N_0(\text{поглинання}) \\ (N_0 + 1)(\text{випромінювання}) \end{array} \right\} \quad (2.10)$$

$$E' = \left\{ \begin{array}{l} E + \hbar\omega_0(\text{поглинання}) \\ E - \hbar\omega_0(\text{випромінювання}) \end{array} \right\} \quad (2.11)$$

та

$$F_0(E, E') = C^{-1} \left( A \ln \left| \frac{\gamma^{\frac{1}{2}}(E) + \gamma^{\frac{1}{2}}(E')}{\gamma^{\frac{1}{2}}(E) - \gamma^{\frac{1}{2}}(E')} \right| + B \right) \quad (2.12)$$

$$A = [2(1 + \alpha E)(1 + \alpha E') + \alpha\{\gamma(E) + \gamma(E')\}]^2 \quad (2.13)$$

$$B = -2\alpha\gamma^{\frac{1}{2}}(E)\gamma^{\frac{1}{2}}(E')[4(1 + \alpha E)(1 + \alpha E') + \alpha\{\gamma(E) + \gamma(E')\}] \quad (2.14)$$

$$C = 4(1 + \alpha E)(1 + \alpha E')(1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha E') \quad (2.15)$$

Також  $\gamma(E)$  визначається рівнянням (2.1). Щоб отримати результат, що відповідає непараболічним зонам, без урахування  $k$ -залежності станів Блоха, ми покладемо  $\alpha \rightarrow 0$  в  $A$ ,  $B$  та  $C$ , коли  $A=C=4$  та  $B=0$ . Щоб отримати параболічний результат, ми покладемо  $\alpha \rightarrow 0$  всюди.

Розсіювання акустичних фононів також присутнє в (000) долини. Хоча це не дуже важливий процес у цій долині, ми включаємо його для повноти, але припускаємо, що енергія акустичного фонона незначна порівняно з  $k_B T$ , і нехтуємо зміною енергії електронів під час розсіювання. Тоді, враховуючи як поглинання, так і випромінювання, маємо [26],

$$S_a(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} B_a(k, k') N_a \delta[E(k') - E(k)] \quad (2.16)$$

де

$$B_a(k, k') = 2 \cdot \frac{\hbar \Xi_a^2}{2\rho s V} |k - k'| G(k, k') \quad (2.17)$$

та

$$N_a = [\exp(\frac{\hbar s(k, k')}{K_B T}) - 1]^{-1} \approx \frac{K_B T}{\hbar s |k - k'|} \quad (2.18)$$

число заповненості фононів,  $\rho$  – густина,  $s$  – швидкість звуку, а  $\Xi_a$  – потенціал акустичної деформації. Цікаво відзначити, що зі збільшенням енергії електронів ефекти непараболічності стають важливими ще до того, як енергія акустичних фононів стане значною в арсеніді галію за кімнатної температури. Інтегруючи (2.16) по всіх  $k'$ , ми отримуємо швидкість розсіювання акустичної моди

$$\lambda_a(k) = \frac{(2m^*)^{\frac{3}{2}} k_B T \Xi_a^2}{2\pi \rho s^2 \hbar^4} \gamma^{\frac{1}{2}}(E) (1 + 2\alpha E) F_a \quad (2.19)$$

де

$$F_a(E) = \frac{(1 + 2\alpha E)^2 + \frac{1}{3}(\alpha E)^2}{(1 + 2\alpha E)^2} \quad (2.20)$$

Щоб отримати результат, що відповідає лише непараболічній смузі, ми встановлюємо  $\alpha = 0$  в  $F_a(E)$ .

У долинах (100) ми розглянемо полярне оптичне, акустичне та еквівалентне міждолинне розсіювання між долинами (100) [27,28]. Відповідно до нашої простої моделі для долин (100), ми будемо розглядати полярне та акустичне розсіювання за тими ж формулами, що й у долині (000), але з  $\alpha = 0$  всюди. Для еквівалентного міждолинне розсіювання між параболічними, сферичними долинами маємо

$$S_e(k, k') = \frac{2\pi}{h} B_e(k, k') \left\{ \begin{array}{l} N_e \delta[E(k') - E(k) - h\omega_e] \text{(поглинання)} \\ (N_e + 1) \delta[E(k') - E(k) + h\omega_e] \text{(випромінювання)} \end{array} \right\} \quad (2.21)$$

$$B_e(k, k') = (Z_e - 1) \frac{\hbar}{2\rho\omega_e V} \Xi_e^2 \quad (2.22)$$

а  $\omega_e$  – міждолинна частота фононів.  $\Xi_e$  – потенціал деформації, а  $Z_e$  – кількість еквівалентних долин. Якщо припустити, що долини (100) знаходяться на краю зони Бріллюена, тоді  $Z_e = 3$ .  $N_e$  – теплова рівноважна кількість фононів на моду, що визначається як

$$N_e = [\exp(\hbar\omega_e / k_B T) - 1]^{-1} \quad (2.23)$$

Інтегрування (2.21) по всіх  $k'$  для визначення повної швидкості розсіювання, зумовленої цим процесом, дає

$$\lambda_e(k) = (Z_e - 1) \frac{m^{*\frac{3}{2}} \Xi_e^2}{\sqrt{2\pi\rho\omega_e h^3}} E^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{array}{l} N_e \text{(поглинання)} \\ (N_e + 1) \text{(випромінювання)} \end{array} \right\} \quad (2.24)$$

де

$$E' = \begin{cases} E(k) + \hbar\omega_e \text{ (поглинання)} \\ E(k) - \hbar\omega_e \text{ (випромінювання)} \end{cases} \quad (2.25)$$

Щоб розрахувати швидкість переходу, зумовлену нееквівалентним інтервальним розсіюванням між долинами (000) та (100), зручно розрізнити ці два типи долин за допомогою достатніх значень  $i$  та  $j$ . Тоді за аналогією з (2.21) та (2.22) маємо для переходу від  $k$  у долині  $i$  до  $k'$  у долині  $j$

$$S_{ij}(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} B_{ij}(k, k') \begin{cases} N_{ij} \delta[E_j(k) - E_i(k) + \Delta_j - \Delta_i - \hbar\omega_{ij}] \text{ (поглинання)} \\ (N_{ij} + 1) \delta[E_j(k') - E_i(k) + \Delta_j - \Delta_i + \hbar\omega_{ij}] \text{ (випромінювання)} \end{cases}, \quad (2.26)$$

де

$$B_{ij}(k, k') = Z_j \frac{\hbar}{2\rho\omega_{ij}V} \Xi_{ij}^2 G_{ij}(k, k') \quad (2.27)$$

Відповідно до наших попередніх позначень,  $\omega_{ij}$  – міждолинна частота фононів,  $Z_j$  – кількість долин  $j$ -го типу,  $\Xi_{ij}$  – потенціал міждолинної деформації, а  $N_{ij}$  – число заповненості міждолинних фононів, що визначається як

$$N_{ij} = \left[ \exp\left(\frac{\hbar\omega_{ij}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (2.28)$$

З рівняння (2.26) зрозуміло, що енергія вимірюється від мінімуму долини, позначеного нижнім індексом; мінімуми знаходяться на рівнях енергій  $\Delta_i$ ,  $\Delta_j$  для долин  $i$ ,  $j$  відповідно. Функція  $G_{ij}(k, k')$  у (2.27) задається за аналогією з (2.7), але тепер ми встановлюємо  $s_k$  рівним нулю для долини (100), щоб вона відповідала нашій моделі цих долин. Отже, другий член у (2.7) завжди звертається до нуля, оскільки або  $k$ , або  $k'$  буде в долині (100). Ми тоді отримуємо, окрім мультиплікативного коефіцієнта, що представляє перекриття між хвильовою

функцією (100) та s-подібною частиною хвильової функції (000), яка може бути включена до потенціалу деформації,

$$G_{ij}(k, k') = \frac{[1 + \alpha_i E_i(k)][1 + \alpha_j E_j(k')]}{[1 + 2\alpha_i E_i(k)][1 + 2\alpha_j E_j(k')]} \quad (2.29)$$

де  $\alpha$  дорівнює нулю для долини (100). Зазначається, що  $S(k, k')$  вважається незалежним від  $|k - k'|$ , окрім через енергозберігаючу дельта-функцію. Це обґрунтовано тим, що зміна хвильового вектора є великою, знаходиться в порядку розділення мінімумів долини і не сильно змінюється з початковим та кінцевим станами всередині долин. Аналогічно, залежністю від хвильового вектора  $\Xi_{ij}$  та  $\omega_{ij}$  було знехтувано. Інтегруючи (2.26) по  $k'$ , отримуємо

$$\lambda_{ij}(k) = Z_j \frac{m_j^{*2} \Xi_{ij}^2}{\sqrt{2\pi\rho\omega_{ij}\hbar^3}} \gamma_j^{\frac{1}{2}}(E')(1 + 2\alpha_j E') F_{ij}(E, E') \left\{ \begin{array}{l} N_{ij}(\text{поглинання}) \\ (N_{ij} + 1)(\text{випромінювання}) \end{array} \right\}, \quad (2.30)$$

де  $F_{ij}(E, E') = G_{ij}(k, k')$ , та

$$E_j' = \left\{ \begin{array}{l} E_i - \Delta_j + \Delta_i + \hbar\omega_{ij} ](\text{поглинання}) \\ E_i - \Delta_j - \Delta_i - \hbar\omega_{ij} ](\text{випромінювання}) \end{array} \right\} \quad (2.31)$$

Як і раніше, функція  $F_{ij}(E, E')$  відображає ефект врахування домішки р-функцій у долині (000).

Нарешті, зазначимо, що ми повністю знехтували неполярним оптичним розсіюванням як у долинах (000), так і в (100). Для сферичної параболічної зони цей процес зникає. Отже, для непараболічної долини (000), що розглядається тут, очікується, що цей процес потрібно розглядати лише при високих енергіях, і при цих енергіях ймовірно, що розсіювання в долинах (100) домінує. У долинах (100), за аналогією з кремнієм, очікується, що еквівалентне міждолинне

розсіювання домінуватиме, і порівняно з цим процесом оптичне розсіювання очікується незначним. У будь-якому випадку, еквівалентне міждолинне розсіювання має ті ж характеристики, що й оптичне розсіювання, і за умови вибору сили першого процесу для забезпечення правильної рухливості для долин (100), нехтування оптичним розсіюванням не буде серйозним. Також ми не враховуємо домішкове розсіювання. Отже, результати, описані тут, всі з яких стосуються  $300^\circ\text{K}$ , застосовні лише до матеріалу з кількістю домішок менше приблизно  $10^{15}$  на  $\text{см}^3$  або до більш сильно легovanого матеріалу в електричних полях, що перевищують кілька тисяч В на см.

## 2.2 Процедура моделювання методом Монте-Карло

Принцип методу Монте-Карло, застосованого до визначення функцій розподілу, полягає в моделюванні руху одного електрона в імпульсному просторі. Цей рух складається з почергового дрейфу з постійною швидкістю в електричному полі та розсіювання на фононах. Час дрейфу електрона в електричному полі, тип процесу розсіювання та кінцевий стан є випадковими величинами з розподілами ймовірностей, які можна виразити через швидкості переходів, зумовлені різними процесами та силою електричного поля. Однак ці розподіли ймовірностей можуть бути досить складними, особливо для часу дрейфу, тоді як генерувати за допомогою комп'ютера випадкові числа з однаковою ймовірністю в деякому скінченному діапазоні просто. Як наслідок, потрібні методи для перетворення цього розподілу рівних ймовірностей у комплексні розподіли, необхідні тут.

Припустимо, що швидкість переходу між двома станами хвильового вектора  $k$  та  $k'$  дорівнює  $S_q(k,k')$ . Тут нижній індекс  $q$  позначає процес розсіювання і може приймати значення  $q = 1, 2, \dots, N$ , якщо існує  $N$  можливих процесів. Формули для  $S_q(k,k')$  були наведені в попередньому розділі. Ми не додали тут додаткового суфікса, щоб показати, що швидкості розсіювання та кількість можливих процесів залежать від долини, яку ми розглядаємо, але це

слід розуміти протягом усього цього розділу. Ймовірність за одиницю часу того, що електрон дрейфуватиме протягом часу  $t$  в електричному полі  $F$ , а потім розсіюється, визначається як загальна швидкість переходу зі стану  $k$  внаслідок  $q$ -го процесу.

$$P(t) = \lambda[k(t)] \exp\left\{-\int_0^t \lambda[k(t')] dt'\right\} \quad (2.32)$$

де

$$k(t) = k_0 + \frac{eFt}{\hbar}, \lambda(k) = \sum_{q=1}^N \lambda_q(k)$$

та

$$\lambda_q(k) = \int dk' S_q(k, k')$$

Також  $k_0$  — хвильовий вектор у точці  $t=0$  на початку прольоту, тобто кінцевий стан після попередньої події розсіювання.

Процедура, прийнята Куросавою [29] для генерації випадкових моментів часу з розподілу ймовірностей (2.32), полягала у використанні випадкових чисел  $r$ , згенерованих з однаковою ймовірністю між 0 та 1. Потім, використовуючи  $P(r)dr = P(t)dt$ , отримуємо

$$r = \int_0^t P(t') dt'$$

або

$$r = 1 - \exp\left\{-\int_0^t \lambda[k(t')] dt'\right\} \quad (2.33)$$

Для деяких процесів розсіювання інтеграл у (2.33) можна обчислити аналітично, а  $t$  визначити з випадкового числа  $r$  аналітично або чисельно. Однак складна форма  $S_q(k, k')$  для деяких розглянутих тут процесів розсіювання означає, що інтеграл не можна обчислити аналітично, і тоді  $t$  можна визначити з

г лише шляхом розв'язання інтегрального рівняння або інтерполяції в числовій таблиці а як функції від  $t$  та початкових компонент  $k$ .

Замість цих можливостей було використано альтернативний метод для генерації часів з розподілу (2.32). Припустимо, що на додаток до реальних процесів розсіювання, присутніх у напівпровіднику, ми включаємо фіктивний процес [24, 25], для якого

$$S_0(k, k') = \lambda_0(k) \delta(k - k') \quad (2.34)$$

Оскільки дельта-функція не дозволяє змінюватих хвильовий вектор електрона під час розсіювання, цей процес «саморозсіювання» немає фізичного значення, і тоді функція  $\lambda_0(k)$  є абсолютно довільною. Включення цього додаткового процесу в рівняння (2.32) призводить до

$$P(t) = \{\lambda_0[k(t)] + \lambda[k(t)]\} \times \exp\left\{-\int_0^t (\lambda_0[k(t')] + \lambda[k(t')]) dt'\right\} \quad (2.35)$$

і тепер ми можемо вибрати  $\lambda_0(k)$  таким чином, щоб експоненціальний множник став простим. Конкретний вибір, який був зроблений для  $\lambda_0(k)$  у цій роботі, такий:

$$\lambda_0(k) = \Gamma - \lambda(k) \quad (2.36)$$

де  $\Gamma$  — константа. Цей вибір для  $\lambda_0(k)$  хоча й не обов'язково є оптимальним виразом, має перевагу в тому, що (2.35) стає простим

$$P(t) = \Gamma e^{-\Gamma t} \quad (2.37)$$

і таким чином моделює рух електрона, який має енергетично незалежний час релаксації  $1/\Gamma$ . Константа  $\Gamma$  береться принаймні такою ж великою, як найбільше значення  $\lambda(k)$ , що нас цікавить, щоб уникнути від'ємних значень  $\lambda_0(k)$ .

Ефект включення процесу саморозсіювання полягає в тому, щоб поділити реальний рух електрона на коротші польоти тривалістю, що визначається розподілом ймовірностей (2.37). Це можна побачити повністю математичним способом, записавши початковий розподіл ймовірностей (2.32) у вигляді

$$P(t) = \lambda(t)e^{-\Gamma t} \exp \left\{ \int_0^t [\Gamma - \lambda(t')] dt' \right\} \quad (2.38)$$

де для простоти ми записали  $\lambda[k(t)]$  як  $\lambda(t)$ . Розкладаючи другий експоненціальний множник, отримуємо

$$\begin{aligned} P(t) &= \lambda(t)e^{-\Gamma t} \left\{ 1 + \int_0^t [\Gamma - \lambda(t')] dt' + \frac{1}{2!} \right. \\ &\times \left\{ \int_0^t [\Gamma - \lambda(t')] dt' \right\}^2 + \dots \left. \right\} = \lambda(t)e^{-\Gamma t} + \int_0^t dt' e^{-\Gamma t'} [\Gamma - \lambda(t')] e^{-\Gamma(t-t')} \lambda(t) \\ &+ \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{-\Gamma t'} [\Gamma - \lambda(t')] e^{-\Gamma(t-t')} \\ &\times [\Gamma - \lambda(t'')] e^{-\Gamma(t-t'')} \lambda(t) + \dots \end{aligned} \quad (2.39)$$

Різні члени розкладу (2.39) можна чітко ідентифікувати як імовірність того, що електрон зазнає 0, 1, 2, ... подій саморозсіювання під час свого реального польоту тривалістю  $t$ . Альтернативно, цей доказ показує, що введення саморозсіювання не змінює розподіл (2.32) часів польоту, обмежених реальним процесом розсіювання. Визначивши час вільного польоту, необхідно визначити процес розсіювання, відповідальний за завершення польоту. Оскільки ймовірність того, що електрон буде розсіяний процесом  $q$ , пропорційна  $\lambda_q(k)$ , і оскільки  $\sum_{q=0}^m \lambda_q = \Gamma$ , достатньо згенерувати випадкове число  $s$  між 0 і  $\Gamma$  та перевірити нерівність:

$$S < \sum_{q=0}^m \lambda_q(k) \quad (2.40)$$

для всіх  $m$ . Коли ця нерівність виконується, обирається процес розсіювання  $m$ . Саме на цьому етапі стає очевидним, що єдиний недолік використання простого розподілу (2.37) полягає в тому, що існує скінченна ймовірність вибору

саморозсіювання. Оскільки цей процес не змінює хвильовий вектор електрона, отже, не впливає на визначення функції розподілу. Очевидно, що вигідно зробити значення  $\Gamma$  якомога меншим, щоб мінімізувати кількість подій саморозсіювання. Незважаючи на цей недолік, все ж ефективніше враховувати саморозсіювання, ніж працювати безпосередньо з розподілом (2.32), особливо тому, що кінцевий стан після саморозсіювання вже відомий.

Для всіх реальних процесів необхідно згенерувати додаткові випадкові числа, щоб визначити кінцевий стан після розсіювання. Зручно розглядати поглинання та випромінювання фононів як окремі процеси, згідно з (2.40). Тоді енергія кінцевого стану також визначається цією нерівністю для всіх розглянутих процесів, оскільки зміна енергії або незалежна від зміни імпульсу як у випадках полярного та міждолинного розсіювання, або дорівнює нулю як у випадку акустичного розсіювання. Зазначимо, це не було б так, якби енергія акустичних фононів мала скінченне значення, тоді б знадобилась складніша процедура. Однак у даному випадку потрібно лише визначити компоненти вектора  $k$ , що відповідають цій енергії після розсіювання.

Процедура розрахунку компонентів хвильового вектора  $k'$  після розсіювання спрощується, якщо зазначити, що функція розподілу буде симетричною відносно заданого напрямку для розглянутої зонної структури. Отже, необхідні лише ті компоненти, паралельні та перпендикулярні електричному полю, які позначимо як  $k'_z$  та  $k'_\rho$  відповідно. Акустичне розсіювання в долині (100) та всі процеси міждолинного розсіювання є випадковими, тому після визначення енергії кінцевого стану всі стани на енергетичній поверхні є рівномірними кінцевими станами. Отже, ймовірність того, що кут між  $k'$  та напрямом поля  $z$  дорівнює деякому значенню  $\theta$ , пропорційна кількості станів на колі з радіусом  $|k'| \sin\theta$ . Таким чином, можна записати:  $P(\theta) = A \sin\theta$ , де  $A$  — це нормуюча константа. Якщо  $r$  — рівномірно розподілене випадкове число між 0 та 1, то маємо

$$r = \int_0^\theta P(\theta) d\theta = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \quad (2.41)$$

і тоді  $k'_\rho = |k'| \sin \theta, k'_z = |k'| \cos \theta$

Для полярного та акустичного розсіювання в долині (000) та полярного розсіювання в долинах (100) така проста процедура неможлива через складніший кутовий розподіл ймовірностей. У цих випадках зручніше спочатку визначити кут  $\beta$  між  $k$  та  $k'$ . Для полярного розсіювання в долинах (100) рівняння (2.35) з  $\alpha=0$  дає  $P(\beta)d\beta \sim [E + E' - 2(EE')^{\frac{1}{2}} \cos \beta]^{-2} \times \sin \beta d\beta$

Знову ж таки, використовуючи випадкові числа  $r$ , рівномірно розподілені між 0 та 1, отримуємо співвідношення

$$r = \int_0^\beta P(\beta) d\beta = \ln[1 + f(1 - \cos \beta)] / \ln[1 + 2f]$$

або розв'язання для  $\cos \beta$

$$\cos \beta = [(1 + f) - (1 + 2f)^r] / f, \quad (2.42)$$

де  $f = 2(EE')^{\frac{1}{2}}(E^{\frac{1}{2}} - E'^{\frac{1}{2}})^{-2}$ .

Коли  $\beta$  визначено з (2.42), подальше випадкове число між 0 та  $2\pi$  визначає азимутальний кут, і тоді  $k'$  повністю визначається.

Для полярного та акустичного розсіювання в долині (000) рівняння (2.4) та (2.16) дають відповідно

$$P(\beta)d\beta \approx \frac{[\gamma^{\frac{1}{2}}(E)\gamma^{\frac{1}{2}}(E') + \alpha EE' \cos \beta]^2}{[\gamma(E) + \gamma(E') - 2\gamma^{\frac{1}{2}}(E)\gamma^{\frac{1}{2}}(E') \cos \beta]} \sin \beta d\beta \quad (2.43)$$

та

$$P(\beta)d\beta \sim [1 + \alpha E(1 + \cos \beta)]^2 \sin \beta d\beta \quad (2.44)$$

відповідно. Для цих розподілів ймовірностей неможливо вивести вираз для  $\beta$  як явної функції рівномірно розподіленого випадкового числа. Тому ми використали метод фон Неймана для генерації випадкових чисел з розподілів (2.43) та (2.44). Зазначимо з цих рівнянь, що  $P(\cos\beta)=P(\beta)/\sin\beta$  є монотонно зростаючою функцією  $\cos\beta$  в діапазоні від -1 до 1 з максимальним значенням  $P(1)$  при  $\cos\beta = 1$ . Тому випадкові числа генерувалися парами, перше число  $r_1$  представляло  $\cos\beta$  в діапазоні від -1 до 1, а друге число  $r_2$  генерувалося між 0 та  $P(1)$ . Якщо  $r_2$  було менше за  $P(r_1)$ , то  $r_1$  приймалося як значення  $\cos\beta$ . Якщо  $r_2$  було більше за  $P(r_1)$ , генерувалася друга пара випадкових чисел, і процес повторювався. Зрозуміло, що прийняті значення  $r_1$  відповідають необхідному розподілу ймовірностей.

Для визначення функцій розподілу в долинах (000) та (100) у просторі  $(k_z, k_p)$  будуються гістограми, де  $k_z$  паралельне електричному полю. Під впливом електричного поля  $k_p$  залишається постійним, тоді як,  $k_z$  зростає відповідно до  $\frac{dk_z}{dt} = \frac{eF}{\hbar}$ . Потім під час вільного прольоту в електричному полі реєструються відліки, пропорційні часу, який електрон проводить у кожній комірці гістограми. Переходи між станами, зумовлені різними процесами розсіювання, звичайно, вважаються миттєвими. Окремі гістограми будуються для долин (000) та (100), і електрон перемикається з однієї гістограми на іншу, коли відбувається міждолинне розсіювання. Співвідношення часу, який електрон проводить у двох гістограмах, дорівнює співвідношенню електронних популяцій у двох долинах. Час, який електрон проводить у певній комірці, пропорційний функції розподілу в цій точці простору  $(k_z, k_p)$ .

Після обчислення функції розподілу, фізичні спостережувані величини, що нас цікавлять, такі як швидкість дрейфу, середня енергія тощо, в принципі можна отримати за допомогою числового інтегрування. Однак, щоб уникнути

необхідності використання дрібної гистограми для досягнення бажаної точності, зручніше обчислювати ці величини безпосередньо з початкової та кінцевої  $k$ -компонент кожного вільного польоту. Таким чином, швидкість дрейфу в долині  $j$ , наприклад, задається формулою

$$v_j = \frac{1}{K_j} \sum \int_{k_{zi}}^{k_{zf}} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} dk_z = \frac{1}{\hbar K_j} \sum (E_f - E_i) \quad (2.45)$$

де  $k_{zi}$  та  $k_{zf}$  – початкове та кінцеве значення  $k_z$  для конкретного польоту.  $K_j$  – це загальна довжина траєкторії  $k$ -простору в долині та пов'язана із загальним часом

$T_j$ , який електрон проводить у долині протягом  $T_j = \frac{\hbar K_j}{eF}$ . Підсумовування у

(2.45) проводиться по всіх вільних польотах електрона у долині.  $E_i$  та  $E_f$  – це початкова та кінцева енергії польоту. Величину  $1/K_j$  можна інтерпретувати як функцію розподілу на одиницю довжини траєкторії  $k$ -простору.

### 2.3 Модель гібридної 2D-3D гетероструктури GaN-h-BN осциляторному діоді

Поперечний переріз планарної структури на основі GaN, що розглядається в дослідженні, показаний на рис. 2.1. Фактично, це діод  $n^+ - n - n^+$  на сапфіровій підкладці, шириною 0,64 мкм і довжиною 1,28 мкм. Концентрація донорів в області  $n$ -типу відповідала критеріям Кремера для Ганна на основі GaN і була визначена в діапазоні від  $6 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$  до  $2 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . У контактних областях  $n^+$  - областей становить  $0,16 \text{ мкм} \times 0,32 \text{ мкм}$ , з концентрацією донорів  $1 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ . Таким чином, довжина активного діода становить близько 1 мкм.

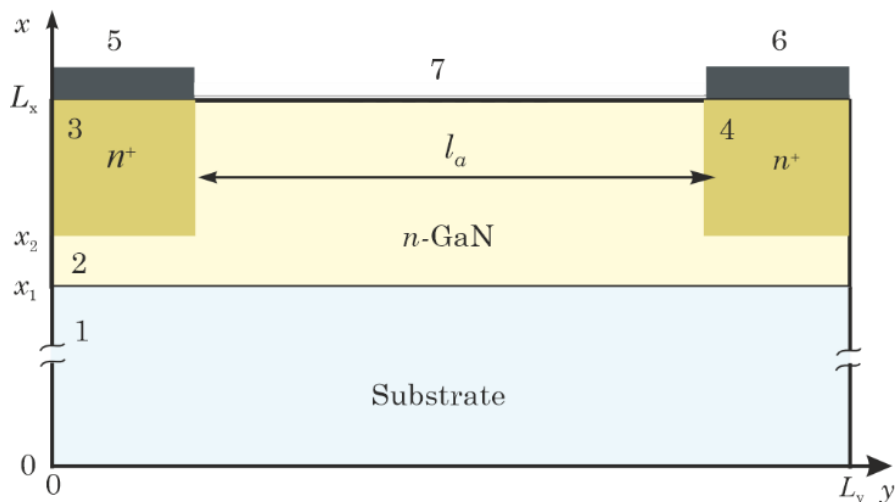


Рис. 2.1. Будова діода: підкладка з низькою провідністю (1), канал діода n-типу (2), високолегована контактна область (3, 4), металеві контакти (5, 6), шар h-BN (7)

Для точної оцінки нерівноважного транспорту електронів у діоді під час самонагрівання застосовується метод Монте-Карло, який самоузгоджено поєднується з рішенням рівняння Пуассона та синхронізується з рішенням рівняння теплопровідності. Часовий крок  $5 \times 10^{-16}$  с був обраний як компроміс для узгодження високої інтенсивності розсіювання носіїв у GaN та аналізу часу нагрівання діода. Згідно з [30,31], враховуються параметри зони та модель структури зон GaN, а також фактичні механізми розсіювання електронів і дірок.

Реалістичний підхід полягає у використанні підкладки скінченної товщини з фіксованою температурою на її нижній межі, яка в дослідженні прийнята за 300К. Товщина сапфірової підкладки прийнята за 1,28 мкм, а її довжина відповідає довжині діода. Адіабатичні теплові граничні умови застосовуються до боків діода при  $y = 0$  та  $y = L_y$ . Оцінка розподілу температури отримується шляхом розв'язання рівняння теплопровідності:

$$c \frac{\partial T(r,t)}{\partial t} = -\nabla[k(T)\nabla T(r,t)] + F(r,t) \quad (2.46)$$

де залежність  $k(T)$  і питома теплоємність були взяті відповідно до [32], а також теплопровідність між інтерфейсами (метал-GaN і GaN-сапфір). Тут омічний контакт пропонується зробити золотим з титановим адгезійним шаром, а ТВС на інтерфейсі метал-GaN становить  $2 \cdot 10^8$  Вт/(К·м<sup>2</sup>) [33]. Термопровідність на межі розділу між сапфіровою підкладкою і GaN становить  $10^7$  Вт/(К·м<sup>2</sup>) [29].

Функція  $F(r,t)$  у рівнянні (2.46) представляє розподіл внутрішніх джерел тепла:

$$F = F_0 \sum (\hbar\omega_{ems} - \hbar\omega_{abs} + \Delta E_{II}), \quad (2.47)$$

де  $\hbar\omega_{ems}$  та  $\hbar\omega_{abs}$  є енергіями випромінювання та поглинання фононів відповідно,  $\Delta E_{II}$  є енергією, поглинутою ґраткою внаслідок ударної іонізації, а  $F_0$  є постійним параметром чисельної моделі та легування пристрою. Підвищення температури ґратки внаслідок самонагрівання враховується в температурній залежності всіх розглянутих механізмів розсіювання та енергетичної щілини. Температурна залежність енергетичної щілини отримується за емпіричним співвідношенням Варшні. Для отримання рішення рівняння (2.46), а також рівняння Пуассона для електростатичного потенціалу, застосовується метод FMG.

#### 2.4 Характеристики діода по постійному струму та частоті

Оцінка частотних та енергетичних характеристик діода на основі GaN вказує на високий потенціал діода Ганна на основі GaN. [10,19,20]. Оцінка, проведена в дослідженні, була здійснена за умови роботи діода в одноконтурному резонаторі з відповідною напругою  $U(t)=U_0=U_1 \sin 2\pi ft$ , прикладеною до діода. Тут  $f$  – частота резонатора;  $U_1$  – амплітуда першої гармоніки напруги, визначена резонатором. Ефективність коливань визначається як відношення альтернативної потужності до постійної потужності  $\eta = P / P_0$ . Максимальне  $\eta$  значення визначається шляхом оптимізованого вибору  $U_0$  та  $U_1$ .

Частотні залежності оптимальної ефективності, отримані без урахування самонагрівання та ударної іонізації, показані на рис. 2.2 для різних концентрацій легування в активних довжинах діодів, що робиться в більшості публікацій [35,36].

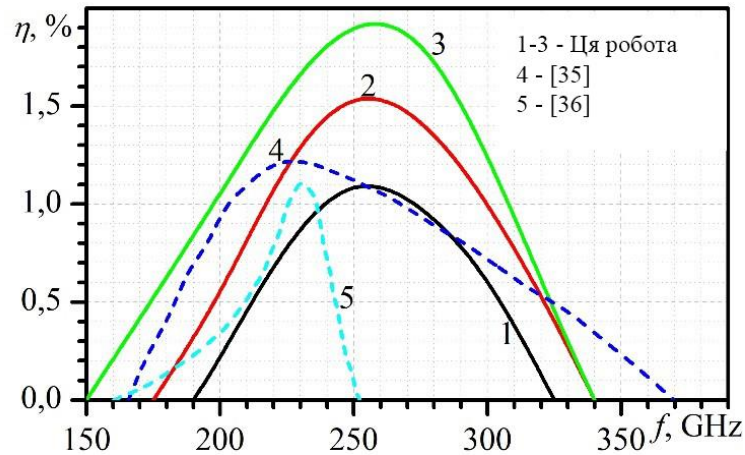


Рис. 2.2. Залежність максимальної ефективності генерації від частоти. Для діодів з різним легуванням: 1 – 1 -  $N_d=6 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ; 2 –  $10^{17} \text{ см}^{-3}$ ; 3 –  $2 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ .

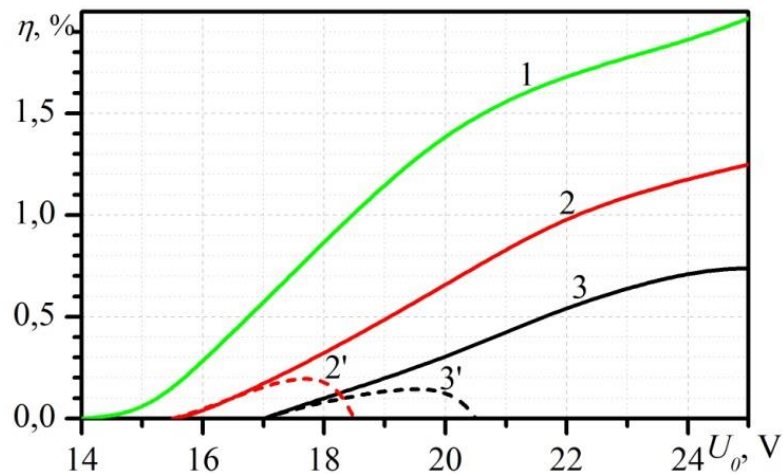


Рис. 2.3.  $j$ - $V$  характеристики діодів: 1, 1', 1'' –  $N_d=6 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , 2, 2', 2'' –  $N_d=10^{17} \text{ см}^{-3}$ , 3, 3', 3'' –  $N_d=2 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ : 1-3 – без II і без самонагрівання; 1'-3' – з II і без самонагрівання; 1''-3'' – з II, з самонагріванням.

Максимальна ефективність коливань становить близько 250 ГГц для всіх рівнів легування. Це відповідає  $U_I = 25$  В і  $U_I = 10$  В.

Результати моделювання ЕМС, отримані при нагріванні та ударній іонізації, показані на рис. 2.3.

Залежності демонструють вплив нагрівання та  $\Pi$  на роботу діода. По-перше, ми бачимо звуження області зміщення, доступної для отримання високої частоти, пов'язане з  $\Pi$  в сильному електричному полі на аноді, типовому для діода  $n^+ - n - n^+$ . З іншого боку, вплив ступеня  $\Pi$  призводить до самонагрівання. Однак нагрівання є довготривалим процесом, що має незначний вплив на формування динамічного негативного опору в діоді, показаного на рис. 2.2.

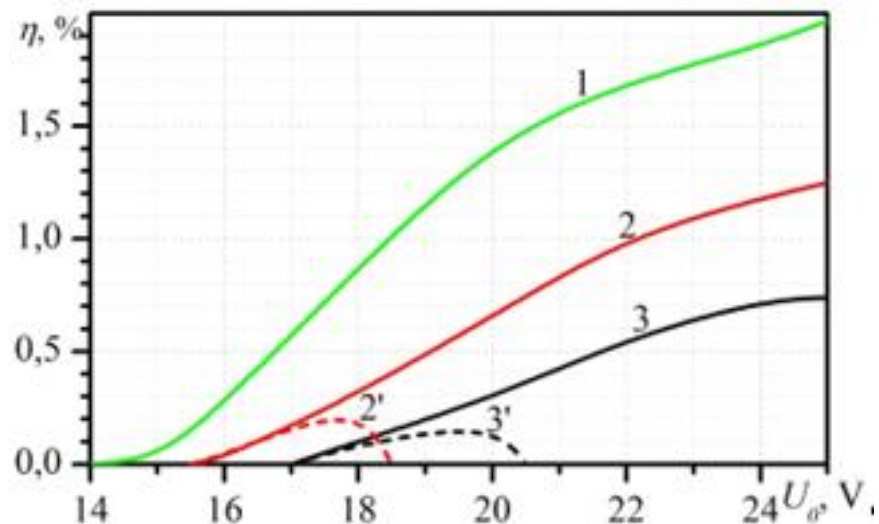


Рис. 2.4. Залежність оптимізованої ефективності генерації при  $f=250$  ГГц для різних напруг зміщення з різною концентрацією легування: 1 –  $N_d=2 \times 10^{17}$   $\text{cm}^{-3}$ ; 2, 2' –  $N_d=10^{17}$   $\text{cm}^{-3}$ ; 3, 3' –  $N_d=6 \times 10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$ ; 1-3 – без  $\Pi$  і самонагрівання; 2', 3' – з  $\Pi$  і самонагріванням.

Обмеження для генерації пов'язані скоріше з  $\Pi$ , ніж з нагріванням. З цієї причини генерація при  $2 \times 10^{17}$   $\text{cm}^{-3}$  не була виявлена. Негативним аспектом

нагрівання є значне підвищення температури в діодному каналі. Двовимірний графік температури показаний на рис. 2.3 для зміщення 22 В.

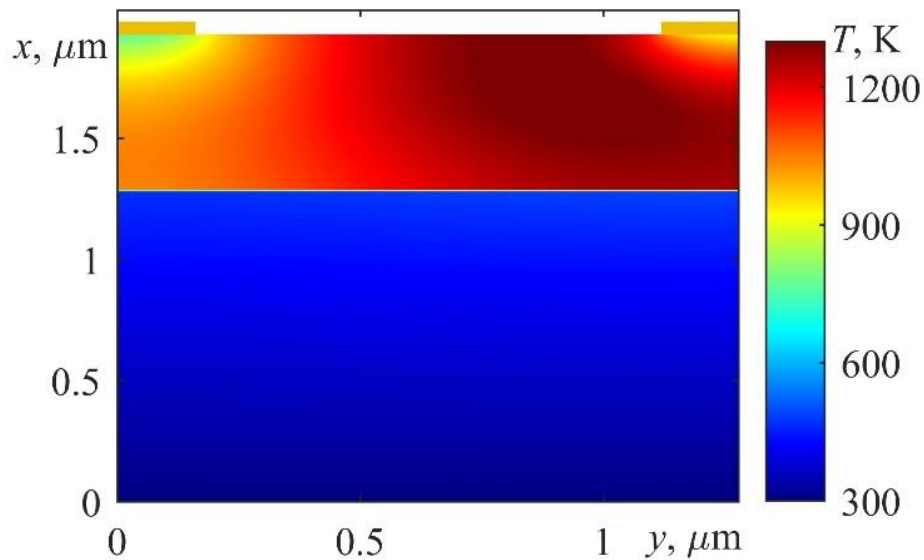


Рис. 2.5. Розподіл температури в діоді GaN при  $U=22$  В;  $t_{sim}=100$  нс

Як видно на рис. 2.5, максимальна температура значно перевищує 1200 К. Високе електричне поле на аноді діода GaN і нерівномірний розподіл розсіяної потужності призвели до утворення гарячих точок у каналі пристрою. Незважаючи на хороші теплові властивості GaN, це призводить до зниження рухливості та струму носіїв через діод, як показано на рис. 2.1. Однак основною проблемою є здатність відводити тепло з внутрішніх гарячих точок задніх контактів, що обмежує можливі режими роботи діода і може призвести до погіршення якості контакту.

Місцевий тепловий контроль пристрою можна істотно поліпшити за допомогою формування додаткових тепловідвідних теплорозподільників на верхній поверхні. Наприклад, було доведено, що плівки з декількох шарів графена (FLG) є ефективними теплорозподільниками порівняно зі звичайними металевими плівками [38]. Графен, що має високу теплопровідність, також розглядається для цієї мети [39]. Перевагою є відносно невеликий TBR між

інтерфейсом цих матеріалів і різними підкладками. Однак і Cr, і графен є матеріалами з високою теплопровідністю.

Атомно-тонкий h-BN, на відміну від графена з нульовою шириною забороненої зони, має широку заборонену зону і може вважатися найкращим кандидатом на роль діелектричного матеріалу для електронних пристроїв наступного покоління [40].

Теплопровідність в площині одного шару (1-L) h-BN була експериментально отримана в [41] при кімнатній температурі. Таким чином, теплопровідність 585 Вт/(м·К) була отримана в [42], а середня теплопровідність 751 Вт/м·К, визначена за допомогою методу Рамана, була отримана в [40]. Максимальне значення теплопровідності, вище 800 Вт/(м·К), наведено в [41]. Таким чином, тепло може швидко поширюватися в бічному напрямку по великій площі одного шару (1-L) h-BN, що дозволяє уникнути локального перегріву пристрою [42].

Очікується, що цей підхід буде ефективним у гетероструктурах, що складаються з різних 2D-матеріалів. Однак використання h-BN у поєднанні з 3D-матеріалами можливе в так званих гібридних гетероструктурах зі змішаними розмірами. Відомо, що такі 2D/3D-гетероструктури пропонуються і практично реалізуються, включаючи поєднання 3D GaN з h-BN.

У [43] було проведено моделювання планарного діода на основі GaN з урахуванням теплового транспорту між діодом, шаром 1L h-BN і підкладкою. У дослідженні застосовується запропонована чисельна тепла модель, заснована на багатосітковому алгоритмі.

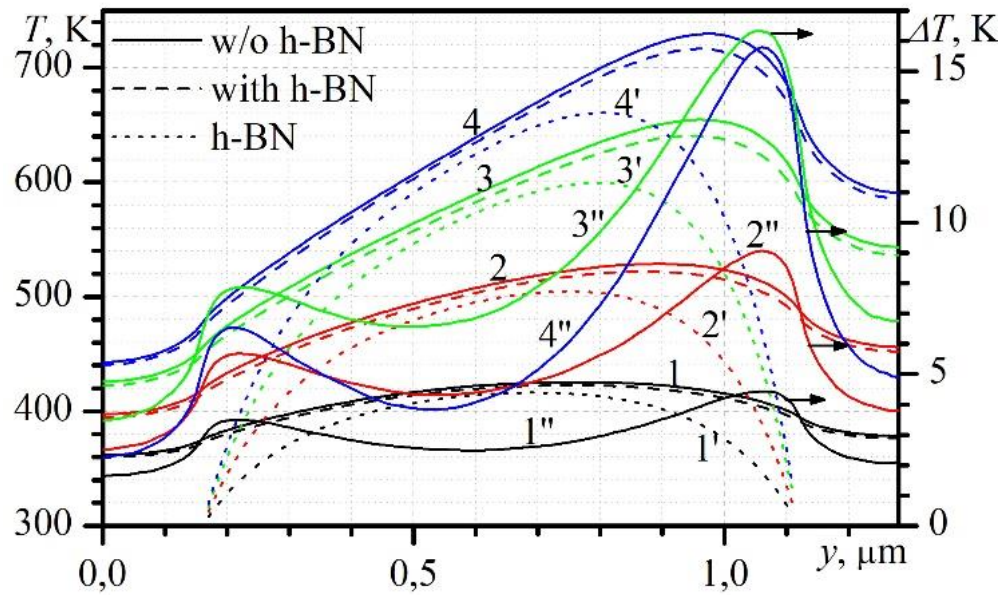


Рис. 2.6 – Розподіл температури у верхньому шарі діодів з  $N_d=10^{17}$   $\text{cm}^{-3}$  при різниці напруг (1-4 – канал GaN з SL h-BN і без нього; 1'-4' – SL h-BN; 1''-4'' – різниця температур): 1 –  $U_0=10$  В, 2 –  $U_0=15$  В; 3 –  $U_0=20$  В; 4 –  $U_0=22$  В.

Шар 1L h-BN розміщений на верхній частині діода, між металевими контактами, що з'єднуються між собою. ТБС на межі розділу GaN/1L h-BN становить  $3.5 \cdot 10^7$  Вт/(К · м<sup>2</sup>) [44]. Усі деталі, що стосуються моделювання моношару h-BN, такі як теплові властивості та теплове моделювання, розглянуто в [38].

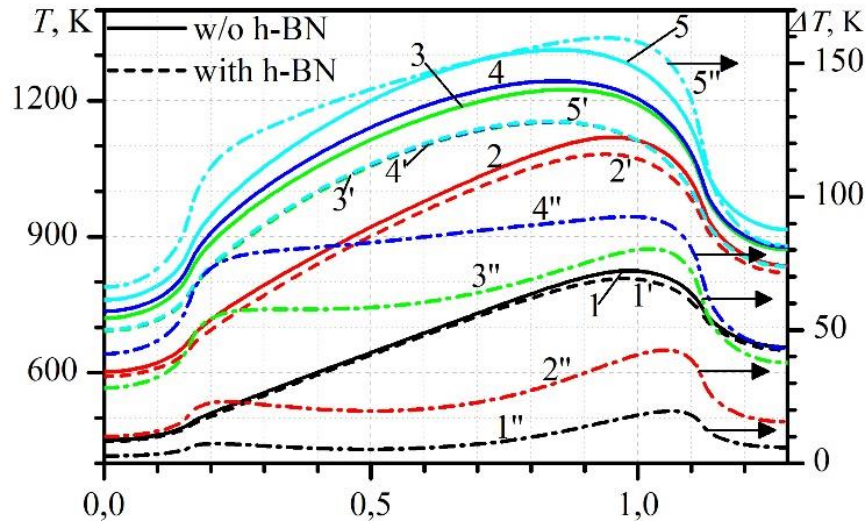


Рис. 2.7. Розподіл температури на верхньому каналі діода GaN при  $U=22$  В для різних проміжків часу: (1-5 - канал GaN без SL h-BN; 1'-5' - канал GaN з SL h-BN; 1''-5'' - різниця між температурою з SL h-BN і без нього) 1,1',1'' -  $t_{\text{sim}}=12.5$  нс; 2,2',2'' -  $t_{\text{sim}}=25$  нс; 3,3',3'' -  $t_{\text{sim}}=50$  нс; 4,4',4'' -  $t_{\text{sim}}=75$  нс; 5,5',5'' -  $t_{\text{sim}}=100$  нс.

Розподіл температури на верхній поверхні GaN, одношаровий h-BN, сформований за час моделювання ( $t_{\text{sim}}$ ) 12 нс, показано на рис. 2.6 при різній напрузі діода. Залежності відповідають як діодам з h-BN, так і діодам без одношарового покриття. Тут представлена різниця температур між поверхневою температурою для обох розглянутих випадків. Як видно з рис. 2.6 введення SL h-BN призводить до зниження температури. Ці зміни залежать від локальної температури кристала і є досить слабкими. Однак моделювання, проведене на більшому часовому масштабі, показує більш значне можливе підвищення температури, рис. 2.7. Ця температура може бути на 150 градусів нижчою в діодах з h-BN, ніж без нього. Однак це може бути важливим для контакту діода, особливо анодного. Наприклад, омичний контакт Ti/Au з GaN може бути стабільним під час короточасної термічної обробки при  $900^{\circ}\text{C}$  [45]. Більшість контактів погіршуються під час нагрівання при нижчих температурах. Температура на аноді становить  $683^{\circ}\text{C}$  в діоді з SL h-BN і  $803^{\circ}\text{C}$  без нього.

## ВИСНОВКИ

Дослідження показало, що проблема отримання високої частоти генерації в діоді GaN є досить складною. На це впливає ряд факторів. Найбільш значущим є фактор електричного поля. Підвищення температури внаслідок сильного електричного поля виникає через розсіювання носіїв на фононах, а також через ударну іонізацію. Температура також є причиною зниження негативного диференціального опору. Низька теплопровідність сапфіру ускладнює реалізацію тепловідводів. Це призводить до високих втрат постійного струму. Дослідження показали, що можливий діапазон напруги зміщення є набагато вузьким. Дослідження вказали на ефект зниження температури внаслідок застосування SL h-BN на верхній частині діода. Запропонований спосіб є найбільш ефективним, коли локалізація електричного поля всередині пристрою призводить до утворення великих гарячих точок поблизу поверхні пристрою.

Розглянута структура не є оптимальною для отримання генерації. Оптимізація параметрів діода можлива шляхом заміни сапфірових підкладок на підкладки SiC з вищою теплопровідністю  $100\text{--}350 \text{ Вт м}^{-1} \text{ К}^{-1}$ . Другий спосіб — формування високоомного катодного контакту для захисту формування сильного електричного поля анода. Кращим рішенням є використання контакту Шотткі, як катода, подібно до [45]. Використання планарного діода дозволяє вирішити проблему охолодження діода, в тому числі шляхом відведення тепла від верхньої поверхні теплорозподільників.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. H. Eisele and G. I. Haddad, "Two-terminal millimeter wave sources," *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 46, no. 6, p. 739–746, June 1998.
2. P. Shiktorov et al., "Monte Carlo Simulation of Electronic Noise in Semiconductor Materials and Devices Operating in Cyclostationary Conditions," *Journal of Computational Electronics*, 2, no. 2–4, p 455–458, December 2003.
3. I. Storozhenko and M. Kaidas, "Theoretical study of current oscillations in Gunn diodes based on graded III nitrides operating in the submillimeter range: frequency and power," 2020 IEEE Ukrainian Microwave Week (UkrMW), p 917–920, September 2020.
4. O. Yilmazoglu, K. Mutamba, D. Pavlidis, and T. Karaduman, "First observation of displacement oscillations in GaN-based Gunn diodes," *IEEE Transactions on Electron Devices*, 55, no. 6, p. 1563–1567, May 2008.
5. A. S. Hajo, O. Yilmazoglu, A. Dadgar, F. Koppers, and T. Kusserow, "Reliable GaN-based Gunn diodes with side contact and field plate technologies," *IEEE Access*, 8, 84, p. 116–122, Jan. 2020.
6. Zhu J., Kang J., Kang J., Jariwala D., Wood J. D., Seo J. W., Chen K. S., Marks T. J., Hersam M. C. Large-area synthesis and assembly of two-dimensional materials into functional devices. *Nano Letters*. 2015. 15. 7029–7036.
7. Bresnehan M. S., Hollander M. J., Wetherington M., Wang K., Miyagi T., Pastir G., Snyder D. W., Gengler J. J., Voevodin A. A., Mitchel W. C., Robinson J. A. Integration of hexagonal boron nitride thin films into graphene devices. *Journal of Materials Research*. 2013. 29. P. 459–471.
8. Xue J., Sanchez-Yamagishi J., Bulmash D., Jacquod P., Deshpande A., Watanabe K., Taniguchi T., Jarillo-Herrero P., LeRoy B. J. Scanning tunnelling microscopy of graphene on hexagonal boron nitride. *Nature Materials*. 2011. 10. P. 282–285.

9. Taychatanapat T., Watanabe K., Taniguchi T., Jarillo-Herrero P. Electronic transport in graphene heterostructures. *Nature Physics*. 2011. 7. P. 621–625.
10. Burson K. M., Cullen W. G., Adam S., Dean C. R., Watanabe K., Taniguchi T., Kim P., Fuhrer M. S. Quantifying graphene adhesion to silicon dioxide substrates. *Nano Letters*. 2013. 13. P. 3576–3580.
11. Wang L., Wu B., Chen J., Liu H., Hu P., Liu Y. Low-temperature and rapid synthesis of large-area h-BN layers. *Advanced Materials*. 2014. 26. P. 1559–1564.
12. Stolyarov M. A., Liu G., Romyantsev S. L., Shur M., Balandin A. A. Thermal conductivity of thin h-BN films. *Applied Physics Letters*. 2015. 107. .023106.
13. Gerbedoen J. C., Soltani A., Mattalah M., Moreau M., Thevenin P., De Jaeger J. C. Thermal analysis of GaN devices on diamond. *Diamond and Related Materials*. 2009. 18 P. 1039–1042.
14. Britnell L., Gorbachev R. V., Jalil R., Belle B. D., Schedin F., Mishchenko A., Georgiou T., Katsnelson M. I., Eaves L., Morozov S. V., Peres N. M. R., Leist J., Geim A. K., Novoselov K. S., Ponomarenko L. A. Field-effect tunneling transistor based on vertical graphene heterostructures. *Science*. 2012. 335. P. 947–950.
15. Hattori Y., Taniguchi T., Watanabe K., Nagashio K. Layered-material FETs with ultrathin h-BN gate dielectrics. *ACS Nano*. 2015. 9. P. 916–921.
16. Mahvash F., Paradis E., Drouin D., Szkopek T., Siaj M. Chemical vapor deposition of h-BN nanosheets. *Nano Letters*. 2015. 15. P. 2263–2268.
17. Doan T. C., Li J., Lin J. Y., Jiang H. X. Bandgap engineering of III-nitride materials. *AIP Advances*. 2014. P. 107126.
18. Qian K., Tay R. Y., Nguyen V. C., Wang J., Cai G., Chen T., Teo E. H. T., Lee P. S. Large-area growth of hexagonal boron nitride films. *Advanced Functional Materials*. 2016. 26. P. 2176–2184.
19. Li L. H., Xing T., Chen Y., Jones R. CVD growth mechanisms of h-BN. *Advanced Materials Interfaces*. 2014. 1. 1300132.

20. Li X., Yin J., Zhou J., Guo W. Strain engineering in h-BN nanomaterials. *Nanotechnology*. 2014. P. 105701.
21. Rees H. D. Hot electron effects in semiconductors. *Physics Letters A*. 1968. 26A. P. 416–418.
22. Rees H. D. Electric transport in semiconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1969. 30. P. 643–650.
23. Hilsum C. Velocity-field characteristics of semiconductors. *Progress in Semiconductors*. 1965. 9. P. 137–193.
24. Ehrenreich H. Electron transport in semiconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1957. P. 131–142.
25. Ehrenreich H. Hot electron theory. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1959. 9. P. 129–138.
26. Paige E. G. S. Transport phenomena in semiconductors. *Progress in Semiconductors*. 1964. 8. P. 62–115.
27. Butcher P. N. Noise in hot-electron systems. *Reports on Progress in Physics*. 1967. 30. P. 97–160.
28. Conwell E. M., Vassell M. O. High-field transport in semiconductors. *Physical Review*. 1968. 166. P. 797–808.
29. Kurosawa T. High-field effects in semiconductors. *Proc. Int. Conf. Phys. Semicond., Kyoto*. 1962.
30. Botsula O. V., Prykhodko K. H. Monte Carlo modeling of GaN devices. *UkrMW*. 2020. P. 925–928. doi:10.1109/ukrmw49653.2020.9252763.
31. Botsula O. V., Pryhodko K. H., Zozulia V. A. Modeling of planar GaN structures. *Telecommunications and Radio Engineering*. 2017. 76. P. 61–71.
32. Palankovski V., Quay R. *Analysis and Simulation of Heterostructure Devices*. 2004. doi:10.1007/978-3-7091-0560-3.
33. Donovan B. F., et al. Thermal measurements in GaN devices. *Applied Physics Letters*. 2014.105. P. 20–25.

34. Sarua A., et al. Thermal management in AlGaIn/GaN transistors. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2007. 54. P. 3152–3158.
35. Storozhenko I. P., Arkusha Yu. V. Monte Carlo simulation of GaN diodes. *Telecommunications and Radio Engineering*. 2012. 71. P. 717–727.
36. García S., Íñiguez-De-La-Torre I., Pérez S., Mateos J., González T. Hot electron dynamics in GaN. *Journal of Applied Physics*. 2013. 114. P. 7–15.
37. Giannazzo F., et al. Characterization of h-BN layers. *Physica Status Solidi A*. 2016. 214. 1600460.
38. Yan Z., Liu G., Khan J. M., Balandin A. A. Thermal properties of graphene laminates. *Nature Communications*. 2012. 3. P. 1828.
39. Cai Q., et al. Superlubricity in h-BN/graphene systems. *Science Advances*. 2019. 5. 0129.
40. Yuan C., et al. Thermal transport in 2D materials. *Communications Physics*. 2019. 2. P. 145.
41. Tang J., Zheng J., Song X., Cheng L., Guo R. Thermal analysis of GaN-based oscillators. *Journal of Applied Physics*. 2024. 135. P. 20–28.
42. Liu Z., et al. Thermal design of nanoscale devices. *Device*. 2024. 100520.
43. Zozulia V. O., Khodachok Y. S., Botsula O. V., Prykhodko K. H. Heat spreading in GaN devices. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2024. 16. 06034.
44. Foss C., Aksamija Z. Thermal modeling of 2D heterostructures. *Nanotechnology*. 2021. 32. .405206.
45. Dobos L., et al. CVD growth of BN films. *Applied Surface Science*. 2006. 253. P. 655–661.
46. Guo N., Wei J., Jia Y., Sun H., Wang Y., Zhao K., Shi X., Zhang L., Li X., Cao A., Zhu H., Wang K., Wu D. High-quality BN nanosheets. *Nano Research*. 2013. 6. P. 602–610.