

Экспериментальное исследование и моделирование спектров края поглощения многосекторных алмазных пластин с бором

К. Е. Брусина[✉], А. В. Соломникова, Н. С. Телицын, Д. Д. Фирсов, В. И. Зубков

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

[✉] kebrusina@gmail.com

Аннотация. Монокристаллический алмаз, имея уникальное сочетание электрофизических свойств и оптическую прозрачность в широком спектральном диапазоне, рассматривается как перспективный материал для оптоэлектронных устройств. В данной статье исследуются оптические характеристики современных синтезированных алмазных пластин вблизи края фундаментального поглощения. Для детального анализа экспериментальных спектров поглощения алмаза в ультрафиолетовой области разработано специальное программное обеспечение в среде графического программирования LabVIEW. Проанализированы спектры УФ-поглощения алмазных пластин с широким диапазоном внедренной примеси бора. Определено, что при увеличении концентрации примеси возрастает вклад бесфононной составляющей поглощения, наибольшее влияние на форму спектров оказывают процессы поглощения LO- и TO-фононов.

Ключевые слова: монокристаллический синтезированный алмаз, спектры поглощения, фундаментальный край поглощения

Для цитирования: Экспериментальное исследование и моделирование спектров края поглощения многосекторных алмазных пластин с бором / К. Е. Брусина, А. В. Соломникова, Н. С. Телицын, Д. Д. Фирсов, В. И. Зубков // Изв. СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2026. Т. 19, № 4. С. 5–16. doi: 10.32603/2071-8985-2026-19-4-5-16.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Благодарность: Выражаем благодарность компании ООО «New Diamond Technology» (Санкт-Петербург) за предоставленные образцы.

Финансирование: Исследование проводилось в рамках проекта № FSEE-2025-0007 (государственное задание Минобрнауки России № 075-00003-25-00 от 25.12.2024).

Original article

Experimental Study and Modeling of Absorption Edge Spectra of Multisectoral Diamond Plates with Boron

K. E. Brusina[✉], A. V. Solomnikova, N. S. Telitsyn, D. D. Firsov, V. I. Zubkov

Saint Petersburg Electrotechnical University, Saint Petersburg, Russia

[✉] kebrusina@gmail.com

Abstract. Single-crystal diamond, with its unique combination of electrical properties and optical transparency over a wide spectral range, is considered a promising material for optoelectronic devices. This paper examines the optical characteristics of modern synthesized diamond plates near the fundamental absorption edge. Special software was developed in the LabVIEW graphical programming environment for a detailed analysis of ex-

perimental diamond absorption spectra in the ultraviolet region. UV absorption spectra of diamond plates having a wide range of boron doping are described. It was determined that with an increase in the impurity concentration, the phonon-free absorption component increases, and the absorption of LO- and TO-phonons has the greatest effect on the shape of the spectra.

Keywords: single-crystal synthetic diamond, absorption spectra, fundamental absorption edge

For citation: Experimental Study and Modeling of Absorption Edge Spectra of Multisectoral Diamond Plates with Boron / K. E. Brusina, A. V. Solomnikova, N. S. Telitsyn, D. D. Firsov, V. I. Zubkov // LETI Transactions on Electrical Engineering & Computer Science. 2026. Vol. 19, no. 4. P. 5–16. doi: 10.32603/2071-8985-2026-19-4-5-16.

Conflict of interests. The authors declare no conflicts of interests.

Acknowledgments: We would like to express our gratitude to New Diamond Technology LLC (St. Petersburg) for providing the samples.

Funding: The research was conducted as part of project no. FSEE-2025-0007 (state assignment of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation no. 075-00003-25-00 dated 25.12.2024).

Введение. Алмаз, объединяющий в себе рекордные физико-химические свойства, продолжает стимулировать прогресс в разработке устройств нового поколения благодаря активным исследованиям научных групп по всему миру. Существенное развитие методов синтеза алмаза – высоких давлений и высоких температур (high pressure high temperature, HPHT) для получения крупных монокристаллов [1] и химического осаждения из газовой фазы (chemical vapor deposition, CVD) для получения гетеро- и гомоэпитаксиальных структур [2] – сделало возможным получение структурно совершенных многослойных образцов с заданными характеристиками. Это открывает новые горизонты для применения алмаза в приборах микро- и нанoeлектроники, квантовых технологиях и нанофотонике [3].

Особый интерес в настоящее время представляют центры окраски, формируемые в решетке алмаза, в частности азот-вакансионные (NV) центры. Они используются для создания высокочувствительных сенсоров магнитных полей, температуры и электрических полей, а также рассматриваются как основа для квантовых компьютеров и систем обработки квантовой информации [4], [5].

Для обеспечения возможности применения алмаза в качестве компонента микро- и нанoeлектронной приборной базы в его структуру необходимо вводить акцепторную примесь бора (с энергией ионизации в слаболегированном материале 370 мэВ). Легированный бором алмаз – это современный полупроводниковый материал, ширина запрещенной зоны которого при комнатной температуре составляет 5.45 эВ [6]. Такая большая ширина запрещенной зоны и оптическая прозрачность в широком спектральном диапазоне делают алмаз перспективным материалом для

оптоэлектронных устройств [7]. В частности, не легированный и слаболегированный бором алмаз из-за его температурной и радиационной стабильности считается одним из самых перспективных материалов для формирования солнечно-слепых датчиков ультрафиолетового (УФ) излучения, которые обеспечивают надежность работы устройств в условиях повышенных температур и освещения высокоэнергичными фотонами [8].

Для успешной разработки УФ-датчиков необходимо детальное понимание особенностей поглощения алмаза вблизи его фундаментального края. В силу отсутствия до недавнего времени доступных крупных и высококачественных образцов алмаза, в особенности легированного бором, некоторые особенности оптического поглощения вблизи фундаментального края для таких алмазов до настоящего времени представлены в литературе ограниченно. В описываемой работе исследовались качественные алмазные пластины, выращенные методом HPHT, с широким диапазоном легирования бором от ведущего российского производителя. Особенностью таких пластин служит многосекторная структура с сильно различающимися концентрациями примеси в секторах. Несмотря на то, что методика определения ширины запрещенной зоны различных полупроводников посредством измерений фундаментального края поглощения уже давно отработана, для рассматриваемых алмазных пластин она существенно усложняется. Наличие достаточно мелких секторов с разной концентрацией бора обуславливает необходимость ограничения зондирующей площади исходного светового потока, понижая тем самым интенсивность и так слабого УФ-излучения. Последующая обработка и интерпретация экспериментальных спектров поглоще-

ния непрямозонного полупроводника с крайне большой шириной запрещенной зоны требует учета как экситонных, так и фононных эффектов, что представляет нетривиальную задачу.

Постановка задачи. Целью исследований, отраженных в статье, служит детальный анализ экспериментальных спектров поглощения ультраширокозонного полупроводника алмаза с широким диапазоном внедренной примеси бора вблизи фундаментального края с учетом процессов испускания и поглощения фононов.

Исследуемые алмазные образцы. Исследовались алмазные пластины, вырезанные из монокристаллов алмаза, синтезированных методом высоких давлений высоких температур с добавлением примеси бора в процессе роста. Рост алмаза осуществляется в специальных камерах типа Cubic при температуре порядка 1500 °С в ООО «New Diamond Technology» (Санкт-Петербург). Следует отметить, что эти температуры незначительно превышают, к примеру, температуру, при которой осуществляется синтез монокристаллического кремния методом Чохральского (1515 °С). При этом за счет обеспечения высокого давления порядка 5–6 ГПа технологический процесс HPHT-роста попадает в окно стабильного формирования монокристаллического алмаза в соответствии с фазовой диаграммой состояний углерода [9].

Принципиальное отличие HPHT-метода от стандартных методов роста монокристаллов, в которых наблюдается планарный рост материала в заданном кристаллографическом направлении, заключается в разращивании кристалла из затравки одновременно в нескольких направлениях, схема этого процесса представлена на рис. 1, а. В результате кристалл имеет секторальное строе-

ние, причем различные секторы в пределах одного кристалла характеризуются существенно различающимися электрофизическими и оптическими свойствами. Если в процессе роста происходит легирование примесями бора или азота, то секторы приобретают различную окраску, что связано с различной скоростью внедрения примеси в различные кристаллографические направления [10]. В настоящее время данным методом удается растить крупные бездефектные монокристаллы алмаза, фотография разрезанного на пластины образца представлена на рис. 1, б. Так, в 2024 г. российскими компаниями «New Diamond Technology» и НПК «Алмаз» методом HPHT был синтезирован рекордный безазотный кристалл алмаза электронного качества весом 70.72 карата.

Плоскопараллельные алмазные пластины, подходящие для исследований оптическими и электрическими методами, а также для создания активных областей приборов, получаются из объемных кристаллов с помощью резки высокомошным лазером. Это в основном многосекторные пластины. При этом в случае рассматриваемых в данной статье пластин с бором окраска различных секторов варьируется от темно-синего 1 до светло-голубого 2, что отчетливо видно на рис. 1, в. Размеры исследуемых образцов варьировались от 3 × 3 до 7 × 7 мм при толщине 0.3...0.5 мм, что в настоящее время представляет стандартные и предельные технологически возможные размеры для зарождающейся алмазной электроники.

Оборудование и методика проведения измерений. Ширина запрещенной зоны монокристаллического алмаза (5.45 эВ) соответствует длине волны порядка 227 нм. Поэтому для изме-

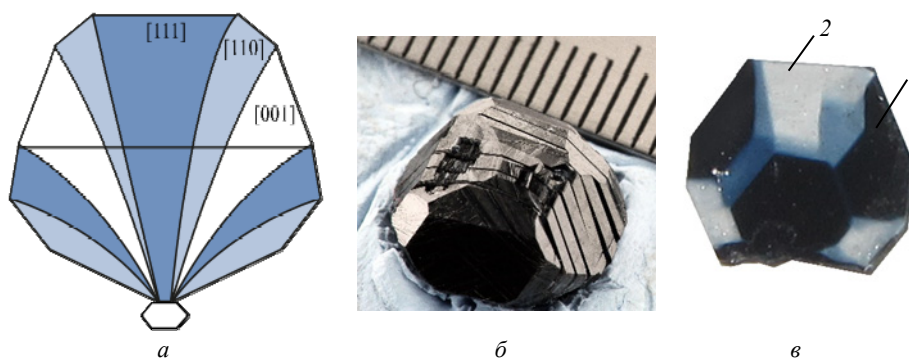


Рис. 1. HPHT-алмаз: а – схема роста многосекторного кристалла (в квадратных скобках указаны кристаллографические направления); б – фотография кристалла, разрезанного на пластины; в – фотография одной из исследуемых многосекторных пластин

Fig. 1. HPHT-diamond: a – a diagram of the growth of a multisectoral crystal (the crystallographic directions are indicated in square brackets); б – a photograph of a crystal cut into plates; в – a photograph of one of the studied multisectoral plates

рения спектров поглощения алмаза вблизи фундаментального края требуется использовать спектральные приборы (источник и приемник излучения, диспергирующее устройство, оптические элементы), которые должны обеспечивать работу в ультрафиолетовой области спектра. В нашей работе спектры пропускания образцов снимались на однолучевом спектрофотометре УФ- и видимого диапазонов СФ-56. Спектрофотометр позволяет проводить измерения спектральных характеристик (интенсивности, пропускания и оптической плотности) материала в диапазоне длин волн λ от 190 до 1100 нм и имеет достаточно высокое спектральное разрешение (от 0.3 нм). Прибор имеет компактные размеры благодаря специальной оптической схеме, которая позволила расположить сканирующий спектрофотометр с двойным монохроматором на обычном лабораторном столе. Для работы в области спектра от 190 до 340 нм используется дейтериевая лампа (ДДС-30), а в области от 340 до 1100 нм – галогенная лампа (КГМ 12-10). Регистрация сигнала осуществляется с помощью фотодиода с приемной площадкой размером 7×7 мм, который повернут на угол 19° для устранения многократных отражений от светочувствительной поверхности. В эксперименте коэффициент пропускания исследуемого образца T определяется как

$$T = \frac{I_T - I_{\text{темн}}}{I_0 - I_{\text{темн}}} \cdot 100 \%,$$

где I_0 – световой поток, падающий на образец; I_T – световой поток, прошедший через образец; $I_{\text{темн}}$ – темновой ток блока фотоприемного устройства.

Для реализации измерений при температуре 77 К использовался заливной азотный оптический криостат с двумя окнами из кварцевого стекла. Предварительно была произведена откачка данного криостата, чтобы при проведении исследования можно было охлаждать образец с помощью жидкого азота. Образец алмаза помещался между двумя окнами криостата и закреплялся в отверстии металлической пластинки. После этого конструкция устанавливалась в спектрофотометр, из которого заранее было убрано подвижное кюветное отделение для образцов.

Для получения экспериментальных спектров пропускания конкретного сектора многосекторной НРНТ-пластины с помощью лазерной резки были вырезаны специальные держатели из поливинилхлорида с отверстиями различных размеров

для прохождения излучения. В процессе измерений пластина фиксируется между двумя держателями с одинаковыми окошками заданного размера, которые позволяют изолировать конкретный сектор и рассматривать оптический отклик только от него. Использование этого же держателя в качестве эталона позволяет осуществлять автоматическое измерение спектров пропускания.

Теоретическое описание края поглощения непрямозонного полупроводника и его моделирование. Алмаз – это непрямозонный полупроводник, минимум зоны проводимости которого располагается в направлении $\langle 100 \rangle$ или Δ зоны Бриллюэна. Оптические переходы типа «зона–зона» в непрямозонных полупроводниках запрещены в первом порядке теории возмущений, так как для них не выполняется закон сохранения импульса, что обусловлено малыми значениями импульса поглощаемого фотона по сравнению с размерами зоны Бриллюэна. Во втором порядке теории возмущения собственное поглощение становится возможным за счет взаимодействия электрона с фононом, обладающим достаточным для рассеяния электрона в зону проводимости импульсом. В алмазе за счет взаимодействия с фононом возбужденный под действием УФ-излучения электрон приобретает импульс в одном из эквивалентных направлений Δ [11].

На дисперсионных кривых фононного спектра алмаза различимы 4 основные ветви фононных мод – акустическая поперечная и продольная (ТА и LA), оптическая поперечная и продольная (ТО и LO). Стоит отметить, что переходы с участием определенных фононов могут быть запрещены правилами отбора [12].

В таблице представлены энергии фононов, импульс которых соответствует дну зоны проводимости, находящемуся в точке $0.76X$ зоны Бриллюэна, эти энергии использовались для моделирования экспериментальных спектров.

Энергии фононов, волновые вектора которых соответствуют минимуму зоны проводимости [11]
Phonon energies, the wave vectors of which correspond to the minimum of the conduction band [11]

Тип фононной моды	Энергия фонона $\hbar\Omega$, эВ
LO	0.16
TO	0.14
LA	0.13
TA	0.09

Корректный анализ спектров вблизи фундаментального края поглощения требует перехода от классического одночастичного приближения

зонной структуры полупроводника к экситонной модели, учитывающей кулоновское взаимодействие между противоположно заряженными частицами – электроном и дыркой. Уравнение Шредингера, описывающее состояние квазичастицы экситона, аналогично уравнению Шредингера для атома водорода, при этом их энергетические спектры тоже аналогичны: в экситонном спектре есть как дискретная, так и непрерывная составляющие. Для математического описания коэффициента поглощения α в непрямозонных полупроводниках с учетом экситонных эффектов может быть использована сумма по всем дискретным состояниям экситона и интеграла по непрерывным состояниям [13]:

$$\alpha_{\pm}(\hbar\omega) \sim \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \left(\hbar\omega - E_g + \frac{R_{ex}}{n^2} \pm \hbar\Omega \right)^{1/2} + \frac{1}{2R_{ex}} \int_0^{\hbar\omega - E_g \pm \hbar\Omega} \frac{(\hbar\omega - E_g + \varepsilon \pm \hbar\Omega)^{1/2}}{1 - \exp\left(-2\pi\sqrt{\frac{R_{ex}}{\varepsilon}}\right)} d\varepsilon, \quad (1)$$

где E_g – ширина запрещенной зоны; R_{ex} – экситонная постоянная Ритберга и n – главное квантовое число, характеризующие дискретный спектр; ε – энергия экситона, характеризующая непрерывный спектр; $\hbar\omega$ – энергия падающего фотона; $\hbar\Omega$ – энергия фонона; знак «+» соответствует процессам с поглощением, а «–» – с испусканием фонона.

Экситонные эффекты приводят к незначительному уменьшению энергии, необходимой для перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости. При комнатной температуре поглощение в алмазе начинается на длине волны 236 нм, что соответствует энергии 5.26 эВ. При этом происходит возбуждение электрона, находящегося на верхнем уровне валентной зоны, в экситонное состояние, энергия которого находится ниже дна зоны проводимости.

Чтобы учитывать вероятность оптического перехода в определенное состояние с участием того или иного фонона при определенной температуре, используются коэффициенты B_+ и B_- :

$$B_+(\theta) = \frac{B}{\exp(\hbar\Omega/k\theta) - 1}, \quad (2)$$

$$B_-(\theta) = \frac{B}{1 - \exp(-\hbar\Omega/k\theta)},$$

где θ – температура; k – постоянная Больцмана. Константа B содержит в себе информацию как о самом оптическом переходе, в результате которо-

го образуется экситон, так и о характеристиках полупроводника. Распределение Бозе–Эйнштейна, в свою очередь, позволяет учитывать число являющихся бозонами фононов данного типа при определенной температуре.

В среде графического программирования LabVIEW разработано программное обеспечение, позволяющее осуществить математическое описание экспериментальных спектров поглощения с использованием формул (1) и (2). Программа позволяет промоделировать край поглощения любого непрямозонного полупроводника, для чего необходимо знать некоторые его энергетические характеристики – ширину запрещенной зоны, энергию связи экситона и энергии фотонов, импульс которых соответствует дну зоны проводимости полупроводника. Для моделирования пользователь вводит энергии как излучаемых, так и поглощаемых фононов и осуществляет подгонку интенсивностей каждого отдельного процесса с помощью коэффициентов B . Отметим, что программа позволяет ввести до пяти энергий квантов колебаний решетки. В процессе обработки спектров определено, что наилучшее соответствие экспериментальных и теоретических спектров наблюдается при использовании различных коэффициентов B для каждого фонона в процессах, идущих с их испусканием и поглощением.

Программа была апробирована на представленных в литературе высококачественных спектрах поглощения фосфида галлия GaP. Для этого полупроводника особенности фундаментального края поглощения, находящегося в инфракрасной области спектра, хорошо изучены. Результаты моделирования позволили с высокой точностью описать часть спектра, определяемую образованием экситонов с дискретными энергиями, с учетом процессов испускания и поглощения фононов.

Экспериментальное исследование спектров поглощения алмаза в ультрафиолетовой области и их анализ. Рассмотрим бесцветную пластину НЛ₁, которая была выращена без преднамеренного легирования примесями бора или азота. Для этого образца при комнатной температуре были измерены вольт-фарадные характеристики, которые показали, что в секторе {115} концентрация основных носителей имеет порядок 10^{15} см^{-3} и связана с наличием фоновой примеси бора. Для НРНТ монокристаллов алмаза такие значения фоновой примеси бора достаточно малы, при этом характерно также наличие некон-

тролируемых включений металлов (Fe, Ni, Al), используемых в качестве катализаторов. В ходе выполнения работы получены спектры пропускания рассматриваемой нелегированной пластины, они представлены на рис. 2, а. Измеренное пропускание T на длине волны $\lambda = 250$ нм составляет 66 %.

По закону Бугера–Ламберта–Бера с учетом однократного отражения R от поверхности пластины толщиной d интенсивность прошедшего излучения I_{T1} определяется как $I_{T1} = I_0 e^{-\alpha d} (1 - R)^2$. С учетом многократных отражений, схематически показанных на рис. 2, а, коэффициент пропускания излучения T через плоскопараллельный образец толщиной d описывается выражением

$$T = \frac{(1 - R)^2 \exp[-(\alpha d)]}{1 - R^2 \exp[-2(\alpha d)]}.$$

Экспериментально полученная величина T незначительно ниже теоретически максимального значения коэффициента пропускания в алмазе – 70 %, рассчитываемого из того факта, что в видимом диапазоне коэффициент отражения от границы раздела алмаз–воздух составляет 17 %, а с учетом многократных отражений от границ пластины полный коэффициент отражения равен

30 %. При увеличении длины волны на экспериментальном спектре наблюдается характерное для легированных бором образцов снижение пропускания до 60 %. Пересчет пропускания в оптическую плотность ad (безразмерная величина), в пренебрежении малым по сравнению с единицей знаменателем, выполнялся по формуле

$$ad(\lambda) = \ln \frac{(1 - R)^2}{T(\lambda)}. \quad (3)$$

Рассчитанная по формуле (3) спектральная зависимость оптической плотности для пластины НЛ₁ приведена на рис. 2, б.

Математическая обработка и моделирование экспериментального спектра проводились с помощью разработанного программного обеспечения. Вклад процессов поглощения и испускания фоонов в формирование спектра проявляется как непосредственно вблизи края поглощения, так и при больших энергиях, за что отвечает интеграл или квадратичная зависимость в (1). На рис. 3 представлены результаты математического моделирования спектров поглощения нелегированной пластины, построенные в различных координатах. Каждое из представлений позволяет получить определенную информацию о спектре.

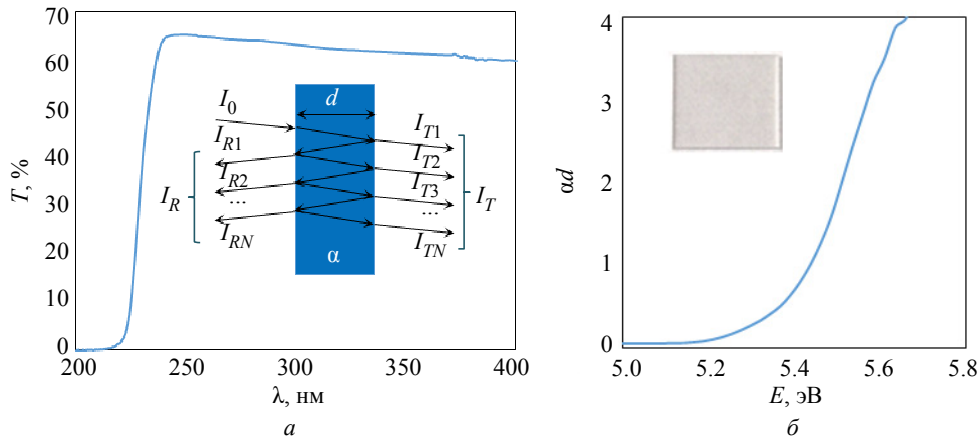


Рис. 2. Экспериментальные спектры оптического отклика нелегированной алмазной пластины НЛ₁: а – спектр пропускания, на вставке представлена схема прохождения излучения через пластину толщиной d , имеющую коэффициент поглощения α ; I_0 – падающее излучение; I_R – отраженное излучение ($I_{R1}, I_{R2}, \dots, I_{RN}$ – компоненты отраженного излучения после многократных отражений); I_T – прошедшее излучение ($I_{T1}, I_{T2}, I_{T3}, \dots, I_{TN}$ – компоненты прошедшего излучения после многократных отражений); б – спектр оптической плотности, на вставке представлена фотография образца НЛ₁

Fig. 2. Experimental optical response spectra of an undoped diamond plate NL₁: а – the transmission spectrum, the insert shows a scheme of radiation passing through a plate with a thickness d and an absorption coefficient of α ; I_0 is incident radiation; I_R is reflected radiation ($I_{R1}, I_{R2}, \dots, I_{RN}$ are components of reflected radiation after multiple reflections); I_T is transmitted radiation ($I_{T1}, I_{T2}, I_{T3}, \dots, I_{TN}$ are the components of the transmitted radiation after multiple reflections); б – the optical density spectrum, the insert shows a photograph of the NL₁ sample

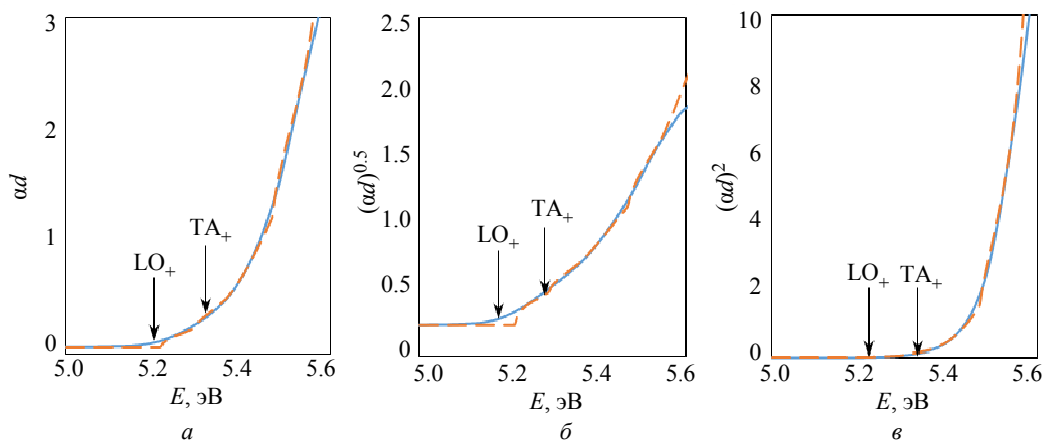


Рис. 3. Спектры оптической плотности образца НЛ₁ (сплошная линия) и их математическое описание (штриховая линия) в различных координатах: *a* – в координатах $ad(E)$; *б* – в координатах $(ad)^{0.5}(E)$; *в* – в координатах $(ad)^2(E)$

Fig. 3. Optical density spectra of the NL₁ sample (solid line) and their mathematical description (dashed line) in various units: *a* – in coordinates $(ad)(E)$; *б* – in coordinates $(ad)^{0.5}(E)$; *в* – in coordinates $(ad)^2(E)$

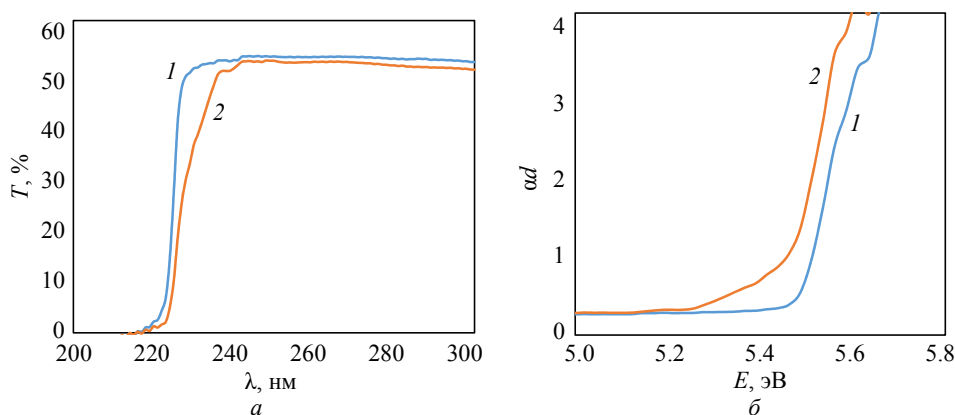


Рис. 4. Экспериментальные спектры оптического отклика нелегированной алмазной пластины НЛ₂ при разных температурах, К (1 – 90; 2 – 300):

a – спектр пропускания; *б* – спектр оптической плотности

Fig. 4. Experimental optical response spectra of an undoped NL₂ diamond plate at different temperatures, К (1 – 90; 2 – 300): *a* – transmission spectrum; *б* – optical density spectrum

Непосредственно вблизи края в алмазе доминирует поглощение с участием LO-фонона. Наилучшее соответствие экспериментальных и рассчитанных спектров получается при введении в математическую модель второго фонона ТА-моды. Спектр, построенный в координатах $(ad)^2(E)$, может быть использован для анализа корневой составляющей коэффициента поглощения, описываемой суммой в (1). Однако, поскольку измерения проводились при комнатной температуре, линейные участки на зависимости $(ad)^2(E)$ неразличимы (рис. 3, в).

Спектр, построенный в координатах $(ad)^{0.5}(E)$, (рис. 3, б), позволяет более подробно рассмотреть квадратичный участок зависимости коэффициента поглощения от энергии, определяемый непрерывным спектром энергии экситона. Моделиро-

вание позволяет наглядно показать, что на этот участок резкого роста коэффициента поглощения, как и на сам фундаментальный край, оказывают значительное влияние фоновые эффекты: за наклон зависимости $(ad)^{0.5}(E)$ отвечают процессы поглощения обоих фононов.

Для аналогичной нелегированной пластины НЛ₂ были получены экспериментальные спектры пропускания при комнатной (300 К – кривая 2) и пониженной (90 К – кривая 1) температурах, рис. 4, а. Рассчитанные по (3) спектральные зависимости показателя поглощения приведены на рис. 4, б.

В данном случае коэффициент пропускания ниже теоретически ожидаемого примерно на 5–10 %, что связано с потерями части излучения внутри кварцевых стекол криостата и на их гра-

ницах. При повышении температуры край поглощения алмаза ожидается сдвигается в длинноволновую область, так как происходит уменьшение ширины запрещенной зоны [14]. Также при увеличении температуры растет вероятность оптических переходов, идущих с поглощением фонона. Так, при 300 К поглощение фотонов с учетом экситонных эффектов и процесса испускания высокоэнергетического LO-фонона заметно начиная с энергии 5.2 эВ. При 90 К резкий рост оптической плотности происходит на энергии 5.45 эВ.

Исследовались также спектры пропускания легированного бором алмаза. Рассмотрим спектры поглощения и оптической плотности слаболегированного голубого сектора пластины ЛБ₁, представленные на рис. 5.

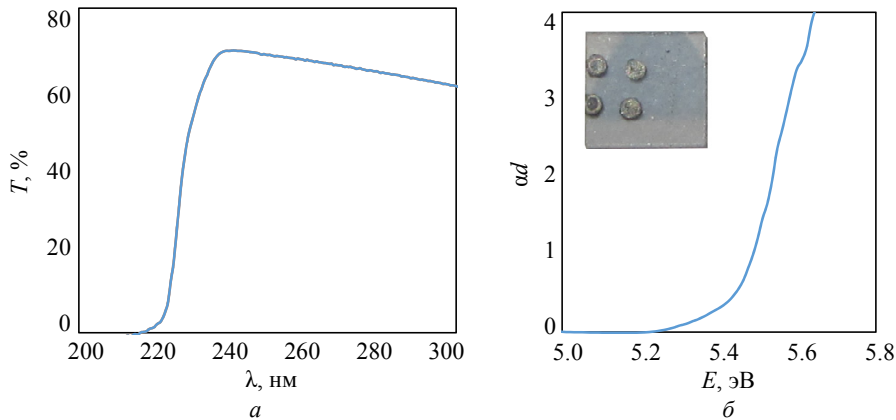


Рис. 5. Экспериментальные спектры оптического отклика легированной бором алмазной пластины ЛБ₁: а – спектр пропускания; б – спектр оптической плотности, на вставке представлена фотография образца ЛБ₁

Fig. 5. Experimental optical response spectra of boron-doped diamond plate LB₁: а – transmission spectrum; б – optical density spectrum, the inset shows a photograph of the LB₁ sample

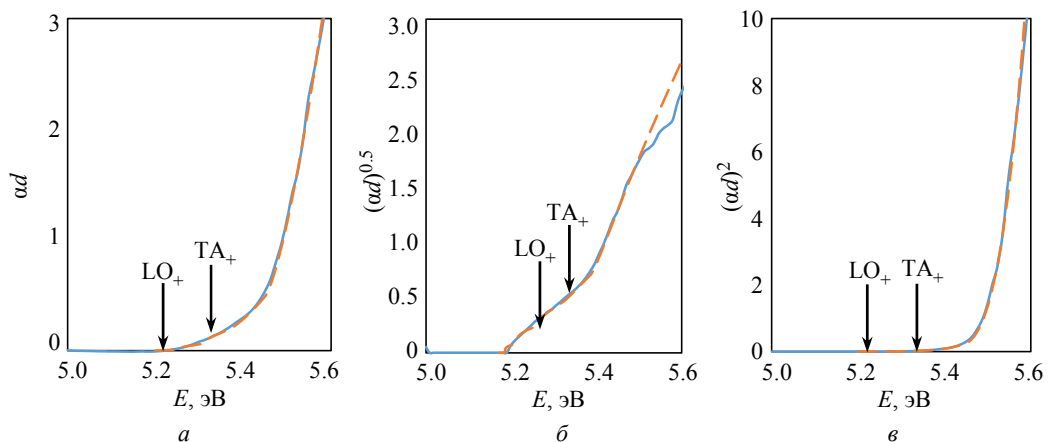


Рис. 6. Спектры оптической плотности образца ЛБ₁ (сплошная линия) и их математическое описание (штриховая линия) в различных координатах: а – в координатах $ad(E)$; б – в координатах $(ad)^{0.5}(E)$; в – в координатах $(ad)^2(E)$

Fig. 6. Optical density spectra of the LB₁ sample (solid line) and their mathematical description (dashed line) in various units: а – in coordinates $ad(E)$; б – in coordinates $(ad)^{0.5}(E)$; в – in coordinates $(ad)^2(E)$

Пропускание вблизи фундаментального края поглощения достигает 70 %, после чего наблюдается его снижение, характерное для слаболегированных бором образцов. На рис. 6 представлены промоделированные спектры.

Для описания фундаментального края в данном случае использованы все 4 фонона – LO, TO, LA и TA. Наклон зависимости $(ad)^{0.5}(E)$ в первую очередь определяется бесфононным поглощением, т. е. рассеяние электрона в данном случае происходит на точечных дефектах.

На рис. 7 представлены спектры пропускания и поглощения различных секторов пластины ЛБ₂ и сильнолегированного образца ЛБ₃. Уровень легирования образца ЛБ₃ составляет 10^{19} см^{-3} , темных секторов образца ЛБ₂ (сектора 2 и 3) – 10^{18} см^{-3} .

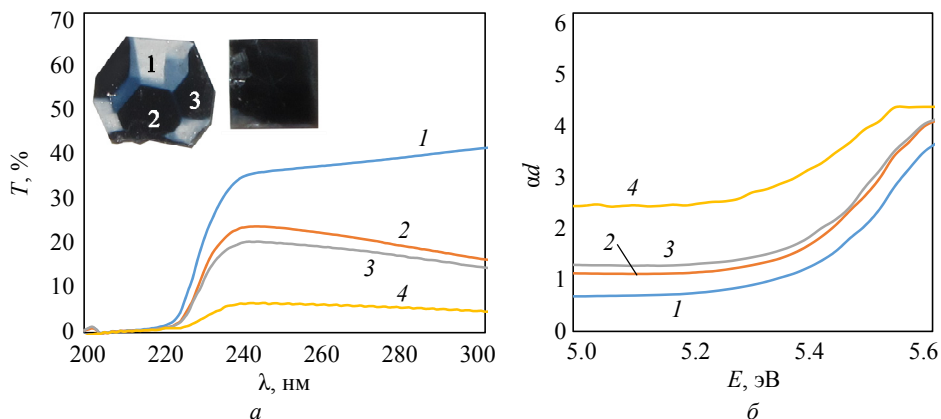


Рис. 7. Экспериментальные спектры оптического отклика легированных бором алмазных пластин ЛБ₂ и ЛБ₃: а – спектры пропускания, на вставке представлены фотографии образцов ЛБ₂ (1, 2, 3 – номера секторов) и ЛБ₃; б – спектры оптической плотности; 1 – сектор 1 ЛБ₂; 2 – сектор 2 ЛБ₂; 3 – сектор 3 ЛБ₂; 4 – ЛБ₃

Fig. 7. Experimental optical response spectra of boron-doped diamond plates LB₂ and LB₃: а – transmission spectra, the insert shows photographs of samples LB₂ (1, 2, 3 – sector numbers) and LB₃; б – optical density spectra; 1 – sector 1 of LB₂; 2 – sector 2 of LB₂; 3 – sector 3 of LB₂; 4 – LB₃

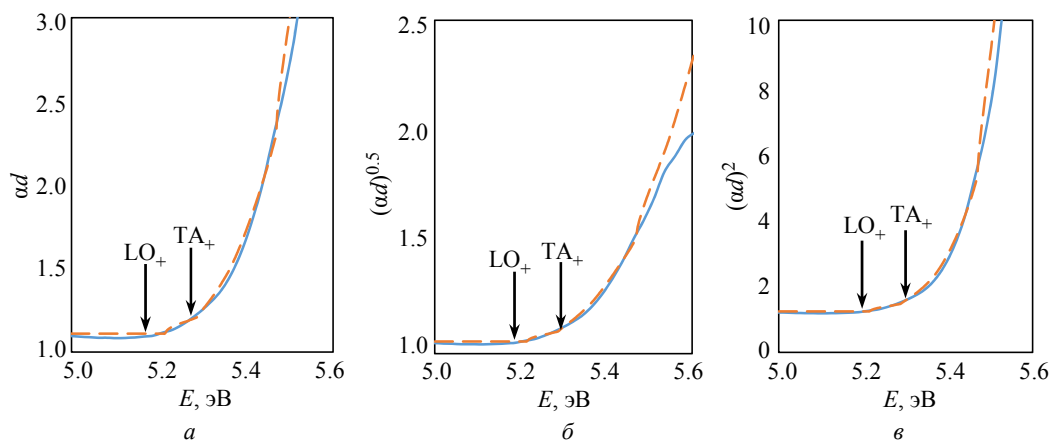


Рис. 8. Спектры оптической плотности сектора 2 образца ЛБ₂ (сплошная линия) и их математическое описание (штриховая линия) в различных координатах: а – в координатах $\alpha d(E)$; б – в координатах $(\alpha d)^{0.5}(E)$; в – в координатах $(\alpha d)^2(E)$

Fig. 8. Optical density spectra of sector 2 of the LB₂ sample (solid line) and their mathematical description (dashed line) in various units: а – in coordinates $\alpha d(E)$; б – in coordinates $(\alpha d)^{0.5}(E)$; в – in coordinates $(\alpha d)^2(E)$

На спектрах, полученных для образцов ЛБ₂ и ЛБ₃, видно, что при увеличении уровня легирования бором пропускание снижается вплоть до 5 %. Увеличение коэффициента поглощения объясняется увеличением числа акцепторных центров, ионизирующихся под действием излучения, т. е. за счет фотоионизации бора в широком диапазоне частот электромагнитного излучения.

На рис. 8 представлены результаты моделирования спектра поглощения в секторе 2 образца ЛБ₂. Для всех сильнолегированных образцов наблюдается значительное влияние бесфонного поглощения.

Энергия ионизации акцепторной примеси бора составляет 370 мэВ. В результате в алмазе типа Пб при комнатной температуре степень ионизации примеси составляет менее 1 % [15]. Поскольку на акцепторном уровне неионизованной примеси электрон отсутствует, сдвига края поглощения по энергии при комнатной и пониженной температуре в алмазе под действием бора не наблюдается.

Выводы и заключение. Были измерены спектры поглощения современных высококачественных монокристаллических пластин алмаза с различными концентрациями примеси бора. С помощью специально разработанного программного обеспечения обработки и моделирования

спектров рассмотрены различные формы представления зависимости коэффициента поглощения от энергии. Показано, что для детального анализа спектров поглощения наиболее информативно корневое представление $(\alpha d)^{0.5}(E)$. С одной стороны, оно позволяет более точно анализировать экситонную составляющую непосредственно вблизи фундаментального края поглощения, а с другой – квадратичная зависимость, описываемая интегралом в формуле (1), в координатах $(\alpha d)^{0.5}(E)$ становится линейной. Это позволяет по наклону и положению кривой определить, какие фононы вносят наибольший вклад в формирование участка спектра, на котором происходит резкий рост коэффициента поглощения.

Установлено, что форма края поглощения во всех исследованных образцах определяется процессами поглощения фононов ЛО с энергией 0.16 эВ и ТА, энергия которого составляет 0.09 эВ. Процесс моделирования спектров пока-

зал, что фононные процессы вносят значительный вклад в формирование формы квадратичного участка спектра.

Определено, что для достоверного описания экспериментальных зависимостей необходимо вводить различные подгоночные коэффициенты для процессов поглощения и испускания фононов, для описания суммы и интеграла, учитывающих образование экситона с дискретной или непрерывной энергией в формуле (1), а также для разных температур.

Сдвиг края поглощения под действием акцепторной примеси бора не наблюдается. Для описания влияния этой примеси на спектр необходимо осуществлять измерения при высокой температуре, когда наблюдается значительная ионизация акцепторных центров. Моделирование спектров различных легированных образцов показало, что при увеличении концентрации примеси возрастает влияние бесфононной составляющей поглощения.

Список литературы

1. Simulation of temperature and convection field of diamond large single crystal growth with different catalyst systems / F. Deng, Z. Liu, W. Deng, X. Chen, L. Huang, X. Xing, H. Chen, J. Yu, C. Li // *J. Cryst. Growth*. 2026. Vol. 674. P. 128419. doi: 10.1016/j.jcrysgr.2025.128419.
2. Nebel C. E. CVD diamond: a review on options and reality // *Funct. Diam.* 2023. Vol. 3, no. 1. P. 2201592. doi: 10.1080/26941112.2023.2201592.
3. Хмельницкий Р. А., Талипов Н. Х., Чучева Г. В. Синтетический алмаз для электроники и оптики М.: Изд-во ИКАР, 2017. 245 с.
4. Квантовый магнитометр на основе кросс-релаксационных резонансов в ансамбле NV-центров в алмазе / Р. А. Ахмеджанов, Л. А. Гуцин, И. В. Зеленский, А. В. Купаев, В. А. Низов, Н. А. Низов, Д. А. Собгайда // *Журн. техн. физики*. 2022. Т. 92, № 11. С. 1737–1744. doi: 10.21883/JTF.2022.11.53449.138-22.
5. NV-центры в алмазе и карбиде кремния как основа мазеров, работающих при комнатной температуре / Ю. А. Успенская, А. С. Гурин, М. В. Учаев, А. П. Бундакова, М. В. Музафарова, Е. Н. Мохов, С. С. Нагалюк, В. А. Солтамов, П. Г. Баранов, Р. А. Бабунц, С. Я. Килин // *Физика твердого тела*. 2025. Т. 67, № 9. С. 1647–1653. doi: 10.61011/FTT.2025.09.61616.233-25.
6. Thonke K. The boron acceptor in diamond // *Semiconductor Sci. and Technol.* 2003. Vol. 18, no. 3. P. S20–S26. doi: 10.1088/0268-1242/18/3/303.
7. Optical-grade diamond: characteristics, synthesis, and recent research progress / X. Chang, W. Gao, J. An, H. Chen, Z. Liu, Z. Qi, C. Li, J. Ding, W. Li, K. Wang, Y. Wang, Z. Lu, Z. Bai // *Functional Diamond*. 2025. Vol. 5, no. 1. doi: 10.1080/26941112.2025.2476690.
8. Ultrafast diamond photodiodes for vacuum ultraviolet imaging in space-based applications / L. Jia, S. Zhu, N. Zhang, Z. Lin, W. Cai, L. Cheng, X. Lu, W. Zheng // *Adv. Optical Mater.* 2025. Vol. 13, no. 7. Art. 2402601. P. 1–9. doi: 10.1002/adom.202402601.
9. Фазовая диаграмма углерода с областью метастабильных состояний жидкий углерод–алмаз / А. Ю. Башарин, В. С. Дождиков, А. В. Кириллин, М. А. Турчанинов, Л. Р. Фокин // *Письма в ЖТФ*. 2010. Т. 36, № 12. С. 39–47.
10. Analysis of doping anisotropy in multisectorial boron-doped HPHT diamonds / V. Zubkov, A. Solomnikova, A. Koliadin, J. E. Butler // *Materials Today Commun.* 2020. Vol. 24. P. 100995. doi: j.mtcomm.2020.100995.
11. Gonze X., Rignanese G. M., Caracas R. First-principle studies of the lattice dynamics of crystals, and related properties // *Zeitschrift Fur Krist.* 2005. Vol. 220, no. 5–6. P. 458–472. doi: 10.1524/zkri.220.5.458.65077.
12. Mildren R. P., Rabeau J. R. Optical engineering of diamond. Weinheim: Wiley, 2013. 446 p. doi: 10.1002/9783527648603.
13. Бассани Ф., Пастори-Паррavicчи Д. Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах. М.: Наука. 1982. 391 с.
14. Clark C. D., Dean P. J., Harris P. V. Intrinsic edge absorption in diamond // *Proc. R. Soc. London. Ser. A. Math. Phys. Sci.* 1964. Vol. 277(1370). P. 312–329. doi: 10.1098/rspa.1964.0025.
15. Характеризация электрофизическими методами монокристаллического алмаза, легированного бором (обзор) / В. И. Зубков, А. В. Соломникова, А. В. Соломонов, А. В. Колядин, J. E. Butler // *Журн. техн. физики*. 2023. Т. 93, вып. 1. С. 5–28. doi: 10.21883/JTF.2023.01.54059.110-22.

Информация об авторах

Брусина Ксения Ефимовна – аспирантка кафедры микро- и нанoeлектроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ».
E-mail: kebrusina@gmail.com
<https://orcid.org/0009-0006-0634-2329>

Соломникова Анна Васильевна – мл. науч. сотр. кафедры микро- и нанoeлектроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ».
E-mail: zubann@yandex.ru
<https://orcid.org/0000-0001-5677-3609>

Телицын Никита Сергеевич – студент гр. 0282. кафедры микро- и нанoeлектроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ».
E-mail: nikita-telicyn777@mail.ru
<https://orcid.org/0009-0005-8271-1272>

Фирсов Дмитрий Дмитриевич – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры микро- и нанoeлектроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ».
E-mail: d.d.firsov@gmail.com
<https://orcid.org/0000-0001-7608-9580>

Зубков Василий Иванович – д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры микро- и нанoeлектроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ».
E-mail: vzubkovspb@mail.ru
<https://orcid.org/0000-0001-6830-6899>

Вклад авторов:

Брусина К. Е. – проведение измерений, разработка программного обеспечения, моделирование спектров, написание исходного текста.
Соломникова А. В. – постановка задач, написание и редактирование исходного текста.
Телицын Н. С. – проведение измерений, написание исходного текста.
Фирсов Д. Д. – разработка и изготовление криостата для низкотемпературных измерений, формулирование методологии и проведение измерений.
Зубков В. И. – идея научного исследования, постановка задач, редактирование исходного текста.

References

1. Simulation of temperature and convection field of diamond large single crystal growth with different catalyst systems / F. Deng, Z. Liu, W. Deng, X. Chen, L. Huang, X. Xing, H. Chen, J. Yu, C. Li // *J. Cryst. Growth*. 2026. Vol. 674. P. 128419. doi: 10.1016/j.jcrysgro.2025.128419.
2. Nebel C. E. CVD diamond: a review on options and reality // *Funct. Diam.* 2023. Vol. 3, no. 1. P. 2201592. doi: 10.1080/26941112.2023.2201592.
3. Xmelnickij R. A., Talipov N. X., Chucheva G. V. Sinteticheskijalmaz dlja elektroniki i optiki M.: Izd-vo IKAR, 2017. 245 c. (In Russ.).
4. Kvantovij magnitometr na osnove kross-relaksacionnyh rezonansov v ansamble NV-centrov v almaze / R. A. Axmedzhanov, L. A. Gushhin, I. V. Zelenskij, A. V. Kupaev, V. A. Nizov, N. A. Nizov, D. A. Sobgajda // *Zhurn. tehn. fiziki*. 2022. T. 92, № 11. S. 1737–1744. doi: 10.21883/JTF.2022.11.53449.138-22. (In Russ.).
5. NV-centry v almaze i karbide kremnija kak osnova mazerov, rabotajushhix pri komnatnoj temperature / Ju. A. Uspenskaja, A. S. Gurin, M. V. Uchaev, A. P. Bundakova, M. V. Muzafarova, E. N. Moxov, S. S. Nagaljuk, V. A. Soltamov, P. G. Baranov, R. A. Babunc, S. JA. Kilin // *Fizika tverdogo tela*. 2025. T. 67, № 9. S. 1647–1653. doi: 10.61011/FTT.2025.09.61616.233-25. (In Russ.).
6. Thonke K. The boron acceptor in diamond // *Semiconductor Sci. and Technol.* 2003. Vol. 18, no. 3. P. S20–S26. doi: 10.1088/0268-1242/18/3/303.
7. Optical-grade diamond: characteristics, synthesis, and recent research progress / X. Chang, W. Gao, J. An, H. Chen, Z. Liu, Z. Qi, C. Li, J. Ding, W. Li, K. Wang, Y. Wang, Z. Lu, Z. Bai // *Functional Diamond*. 2025. Vol. 5, no. 1. doi: 10.1080/26941112.2025.2476690.
8. Ultrafast diamond photodiodes for vacuum ultraviolet imaging in space-based applications / L. Jia, S. Zhu, N. Zhang, Z. Lin, W. Cai, L. Cheng, X. Lu, W. Zheng // *Adv. Optical Mater.* 2025. Vol. 13, no. 7. Art. 2402601. P. 1–9. doi: 10.1002/adom.202402601.
9. Fazovaja diagramma ugljeroda s oblastju metastabilnyh sostojanij zhidkij ugljerod–almaz / A. Ju. Basharin, V. S. Dozhdikov, A. V. Kirillin, M. A. Turchaninov, L. R. Fokin // *Pisma v ZHTF*. 2010. T. 36, № 12. S. 39–47. (In Russ.).

10. Analysis of doping anisotropy in multisectorial boron-doped HPHT diamonds / V. Zubkov, A. Solomnikova, A. Koliadin, J. E. Butler // *Materials Today Commun.* 2020. Vol. 24. P. 100995. doi: j.mtcomm.2020.100995.

11. Gonze X., Rignanese G. M., Caracas R. First-principle studies of the lattice dynamics of crystals, and related properties // *Zeitschrift Fur Krist.* 2005. Vol. 220, no. 5–6. P. 458–472. doi: 10.1524/zkri.220.5.458.65077.

12. Mildren R. P., Rabeau J. R. *Optical engineering of diamond.* Weinheim: Wiley, 2013. 446 p. doi: 10.1002/9783527648603.

13. Bassani F. Pastori-Parravichi D. *Elektronnye sostojaniya i opticheskie perexody v tverdyx relax.* M.: Nauka. 1982. 391 c. (In Russ.).

14. Clark C. D., Dean P. J., Harris P. V. Intrinsic edge absorption in diamond // *Proc. R. Soc. London. Ser. A. Math. Phys. Sci.* 1964. Vol. 277(1370). P. 312–329. doi: 10.1098/rspa.1964.0025.

15. Xarakterizacija elektrofizicheskimi metodami monokristallicheskogo almaza, legirovannogo borom (obzor) / V. I. Zubkov, A. V. Solomnikova, A. V. Solomnov, A. V. Koljadin, J. E. Butler // *Zhurn. tehn. fiziki.* 2023. T. 93, vyp. 1. S. 5–28. doi: 10.21883/JTF.2023.01.54059.110-22. (In Russ.).

Information about the authors

Kseniya E. Brusina – postgraduate student of the Department of Micro- and Nanoelectronics, Saint Petersburg Electrotechnical University.

E-mail: kebrusina@gmail.com

<https://orcid.org/0009-0006-0634-2329>

Anna V. Solomnikova – Junior Researcher at the Department of Micro- and Nanoelectronics, Saint Petersburg Electrotechnical University.

E-mail: zubann@yandex.ru

<https://orcid.org/0000-0001-5677-3609>

Nikita S. Telitsyn – student gr. 0282 of the Department of Micro- and Nanoelectronics, Saint Petersburg Electrotechnical University.

E-mail: nikita-telicy777@mail.ru

<https://orcid.org/0009-0005-8271-1272>

Dmitry D. Firsov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Department of Micro- and Nanoelectronics, Saint Petersburg Electrotechnical University.

E-mail: d.d.firsov@gmail.com

<https://orcid.org/0000-0001-7608-9580>

Vasily I. Zubkov – Dr Sci. (Phys.-Math.), Professor of the Department of Micro- and Nanoelectronics, Saint Petersburg Electrotechnical University.

E-mail: vzubkovspb@mail.ru

<https://orcid.org/0000-0001-6830-6899>

Author contribution statement:

Brusina K. E. – carrying out measurements, software development, spectrum modeling, writing the draft.

Solomnikova A. V. – setting tasks, writing and editing the draft.

Telitsyn N. S. – carrying out measurements, writing the draft.

Firsov D. D. – development and manufacture of a cryostat for low-temperature measurements, formulation of methodology and carrying out measurements.

Zubkov V. I. – the idea of scientific research, setting tasks, editing the draft.

Статья поступила в редакцию 29.12.2025; принята к публикации после рецензирования 22.02.2026; опубликована онлайн 27.04.2026.

Submitted 29.12.2025; accepted 22.02.2026; published online 27.04.2026.
