



АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту
з виконання наукових досліджень і розробок
МОНОКРИСТАЛИ НІТРИДУ ГАЛІЮ GaN: ОТРИМАННЯ ПІД ВИСОКИМ ТИСКОМ,
СТРУКТУРА, ВЛАСТИВОСТІ
(назва Проєкту)

Назва конкурсу: Підтримка досліджень провідних та молодих учених
Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0078

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок (реєстраційний номер та назва Проєкту) 2020.02/0078 «Монокристали нітриду галію GaN: отримання під високим тиском, структура, властивості»

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» (назва конкурсу) протокол від «16–17» вересня 2020 року № 21

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту

Початок – 06.11.2020 дата укладання Договору про виконання наукових досліджень і розробок;

Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проєкту, грн 12 000 000,00

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 2 000 000,00

2-й рік 5 000 000,00

3-й рік 5 000 000,00

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту буде залучено 9 виконавців, з них:

доктори наук 2;

кандидати наук 2;

інші працівники 5.

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(І) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Інститут надтвердих матеріалів ім. В. М. Бакуля Національної академії наук України, 04074, м.Київ-74, вул. Автозаводська, 2, р/р №UA 768201720313291001201005279 Держказначейська служба України в УДКС України в Оболонському р-ні м. Києва, МФО 820172, ЄДРПОУ 05417377

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)

Застосування методу НРНТ для вирощування монокристалів GaN з використанням сплавів-розчинників на основі металів групи заліза, оптимізація технологічних параметрів процесу, отримання структурно досконалих монокристалів GaN.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)

Підібрати нові сплави-розчинники на основі металів групи заліза, які дозволять знизити температуру та тиск отримання монокристалів GaN.

Оптимізувати конструкцію комірки високого тиску шляхом комп'ютерного моделювання.

Встановити інтервали ефективної кристалізації GaN та оптимізувати кінетичні та термодинамічні параметри вирощування.

Встановити області p - T , де єдиною стабільною твердою фазою є GaN в технічно доступному діапазоні тиску та температури.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

На сьогодні існують 2 основних методи вирощування крупних монокристалів алмазу – CVD (вирощування з газової фази) та методи кристалізації з розчину за умов високого тиску і температури (НРНТ). В ІНМ НАНУ активно проводять дослідження поведінки металів групи заліза та їх сплавів, що застосовують для вирощування монокристалів алмазу методом температурного градієнта. Такий досвід пропонується реалізувати для “алмазоподібного вирощування монокристалів GaN”.

Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Запропонований підхід до кристалізації GaN методом температурного градієнта за умов високих тиску (4–6 ГПа) і температури (1400–1600 °С) не має аналогів у світі. Слабка досліджуваність багатокомпонентних систем, що містять Ga, N та перехідні метали, в умовах високих тисків та температур підтверджує новаторський характер цієї фундаментальної роботи та вказує на перспективність застосування високих тисків для одержання інших напівпровідникових матеріалів.

Методологія дослідження (до 400 знаків)

Запропоновано методологію досліджень, яка дозволить максимально ефективно оптимізувати параметри отримання, визначити фундаментальні властивості системи Fe–Ga–N з метою одержання високоякісних монокристалів та мінімізувати кількість експериментів та затрат на матеріали (завдяки оптимізації технологічних параметрів та складу сплаву-розчинника). Послідовність методології відображено в основних завданнях проєкту.

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

Проведено аналіз літературних даних з електро- і теплофізичних властивостей матеріалів, що використовують в АВТ в термобаричних експериментах з нітридом галію, який засвідчив їх суттєву температурну залежність. Розроблено математичну модель резистивного нагрівання АВТ, що дає можливість моделювати тепловий стан комірки з урахуванням температурних залежностей провідних властивостей і їх ефективних значень для композиційних матеріалів. Програмне забезпечення, що використане, дозволяє проводити сумісний розрахунок полів електропотенціалу, густини джерел джоулевого тепла і температури в складних конструкціях АВТ.

Змодельовано тепловий стан комірки АВТ, що використовують для визначення розчинності нітриду галію у залізі. Результати розрахунків представлені температурними полями в різних елементах АВТ. Отримано, що при температурі в контрольній точці комірки в 1800 °С максимальний її перепад в об'ємі досліджуваних зразків нітриду галію і заліза становить 25 °С, що є прийнятним для експериментальних досліджень розчинності GaN в контакті із Fe в умовах високих тисків і температур.

Здійснено літературний пошук експериментальних та теоретичних даних з фазових рівноваг та термодинамічних властивостей фаз, що існують в системі Fe–N за нормальних умов та за високих тисків і температур. Встановлено оптимальні параметри стабільності та взаємодії, рівняння стану EOS, які у подальшому використані для термодинамічного розрахунку діаграми стану подвійної системи Fe–N під атмосферним тиском та при тисках 2,5; 4,0 і 6,0 ГПа.

Показано, що за високих тисків в рівновазі з рідкою фазою знаходяться ГЦК та ОЦК тверді розчини азоту у залізі. Температури плавлення розчинів поступово підвищуються з тиском із швидкістю біля 35 К/ГПа, що відповідає кривій плавлення чистого заліза.

Одержані експериментальні дані для всіх систем констатують сам факт розчинення GaN у металевих розплавах та його рівень в залежності від параметрів p, T, t -дії. Відзначимо, що температура плавлення Fe при тиску 6,8 і 8,3 ГПа становить відповідно 1785 і 1827 °С. Плавлення Fe_xN при 8,3 ГПа, як оцінено в роботі, спостерігається, починаючи з температури 1520 °С. Таким чином, розчинення GaN у зразках при більш низьких температурах пов'язане з ефектами контактного евтектичного плавлення.

Одержані при вивченні розчинності результати експериментів свідчать про те, що при тиску 8,3 ГПа розчинення нітриду галію відбувається в усьому дослідженому діапазоні температур. Фактичні дані базувались як на другорядних якісних ознаках (для систем GaN–Fe і GaN– Fe_xN – прогресуюча зміна форми зразків при збільшенні температури), так і в кількісному вираженні (за зміною маси зразків в залежності від температури). Констатовано, що для всіх систем і температур, крім першої точки з $T = 1696$ °С у системі GaN–Fe, розчинення GaN відбувається при температурах, що перевищують температури безконтактного плавлення другого компоненту.

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

Вперше запропоновано методику комп'ютерного моделювання електрорезистивного нагрівання комірки високого тиску в термобаричних експериментах з визначення розчинності галію у залізі. Встановлено ефективні умови, за яких має місце порівняно однорідний розподіл температури в оброблювальному зразку. Вперше проведено експерименти з визначення розчинності галію у контакті з залізом і нітридом залізу в умовах НРНТ.

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)


Проєкт є фундаментальним, тому, відповідно до положення НФДУ, не потребує обґрунтування практичної цінності.

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

Напівпровідники на основі GaN більш ефективні у порівнянні з кремнієвими напівпровідниками за рахунок більшої ширини забороненої зони, менших тепловтрат, що повинно призвести до зменшення розмірів пристроїв на зменшення вартості обслуговування таких пристроїв. Більш високі частоти перемикання таких пристроїв та вищі робочі температури (у порівнянні з кремнієвими пристроями) зумовлюють зниження необхідності охолодження таких пристроїв та застосування вентиляторів та тепловідводів. А підвищення частоти перемикання також дозволяє прямо пропорційно зменшити індуктивність та ємність конденсаторів у силових ланцюгах, що може призвести до значного зниження ваги, об'єму та вартості електронних пристроїв на основі GaN. Крім того, збільшення частоти повинно призвести до зниження рівня акустичного шуму приладів та двигунів на основі GaN. Отже, у випадку успішного отримання високоякісних монокристалів GaN, очікується, що подальше застосування вирощених монокристалів в електроніці призведе до зменшення пристроїв у порівнянні з традиційними елементами, вартості їх обслуговування, підвищенню продуктивності роботи та зменшенню рівню шуму, що дозволить зекономити приблизно 10–20% на виробництво та обслуговування таких пристроїв.

Примітка: Анотований звіт не повинен містити відомостей, заборонених до відкритого опублікування

Науковий керівник Проєкту,
директор Ін-ту надтвердих матеріалів
ім. В. М. Бакуля НАН України,
академік НАН України
В. З Туркевич


(підпис)