

**ЗАТВЕРДЖУЮ**

Директор Інституту надтвердих матеріалів  
академік НАН України  
В. М. Бакуля  
В. З. Туркевич



**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**

**про виконану роботу у 2021 році в рамках реалізації проекту  
із виконання наукових досліджень і розробок**

«Розробка нових складів розчинників вуглецю для вирощування монокристалів алмазу в області термодинамічної стабільності з контрольованим вмістом домішок азоту і бору з метою створення концепційних конструкцій електронних приладів»  
(назва Проекту)

**Назва конкурсу:** «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

**Реєстраційний номер Проекту:** 2020.02/0160

**Підстава для реалізації Проекту з виконання наукових досліджень і розробок** (реєстраційний номер та назва Проекту) 2020.02/0160 «Розробка нових складів розчинників вуглецю для вирощування монокристалів алмазу в області термодинамічної стабільності з контрольованим вмістом домішок азоту і бору з метою створення концепційних конструкцій електронних приладів» Рішення Наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21.

**1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ**

Загальна тривалість виконання проекту 2020 рік – 2022 рік

Тривалість виконання Проекту у 2021 році

Початок – 30.04.2021 р.

(дата укладання Договору про виконання наукового дослідження і розробки)

Закінчення – 15.12.2021 р.

Загальна вартість Проекту, грн. 11745400 (одиннадцять мільйонів сімсот сорок п'ять тисяч чотириста грн. 00 коп.)

Вартість Проекту по роках, грн.:

1-й рік 2000000,00 грн. (два мільйони грн. 00 коп.)

2-й рік 4745400,00 грн. (чотири мільйони сімсот сорок п'ять тисяч чотириста грн. 00 коп.)

3-й рік 5000000,00 грн. (п'ять мільйонів грн. 00 коп.)

**2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ**

до виконання Проекту залучено 10 виконавців, з них:

доктори наук 2;

кандидати наук 3;

інші працівники:

молодший науковий співробітник 1;

аспірант 1.

та 3 асистенти з числа молодих вчених.

### **3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ**

#### **Інститут надтвердих матеріалів імені В.М. Бакуля**

*Організаційно-правова форма підприємства /установи/організації* Державна організація (установа, заклад, підприємство)

*Підпорядкованість підприємства/установи /організації* Національна академія наук України Код ЄДРПОУ 05417377

Код(и) КВЕД 72.19; 85.42

*Стратегічні напрями наукової діяльності:* Дослідження фізико-хімічних процесів одержання монокристалічних, дисперсних, плівкових, композитних структурованих надтвердих матеріалів у широкому діапазоні температур і тисків.

*ПІБ керівника підприємства/установи/організації* Туркевич Володимир Зіновійович *Юридична адреса підприємства/установи/організації* 04074, Київ-74, вул. Автозаводська, 2 *Поштова адреса* 04074, Київ-74, вул. Автозаводська, 2

*Фактична адреса* 04074, Київ-74, вул. Автозаводська, 2

Телефон +38(044)4688632

*Адреса електронної пошти* [secretar@ism.kiev.ua](mailto:secretar@ism.kiev.ua)

*Посилання на веб сторінку підприємства/установи/організації* <http://www.ism.kiev.ua>

#### **Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України (субвиконавець)**

*Організаційно-правова форма підприємства /установи/організації* Державна організація (установа, заклад, підприємство)

*Підпорядкованість підприємства/установи /організації* Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ 05416952

Код(и) КВЕД 74.90; 72.19

*Стратегічні напрями наукової діяльності:* Фізика напівпровідникових матеріалів і структур та їх діагностика; фізика поверхні, оптоелектроніка і фотоніка; ТГц- і ІЧ-функціональна напівпровідникова нанофотоелектроніка.

*ПІБ керівника підприємства/установи/організації* в.о. директора Мельник Віктор Павлович

*Юридична адреса підприємства/установи/організації* 03028, Україна, Київ, просп. Науки, 41

*Поштова адреса* 03028, Україна, Київ, просп. Науки, 41

*Фактична адреса* 03028, Україна, Київ, просп. Науки, 41

Телефон +38 (044) 525 40 20

*Адреса електронної пошти* [info@isp.kiev.ua](mailto:info@isp.kiev.ua)

*Посилання на веб сторінку підприємства/установи/організації* [www.isp.kiev.ua](http://www.isp.kiev.ua)

### **4. ОПИС ПРОЄКТУ**

**4.1. Мета Проєкту** Розробити методи вирощування структурно досконалих НТНР-монокристалів алмазу заданого дефектно-домішкового складу великого розміру з використанням нових розчинників вуглецю для застосування в електронних приладах і створити засади для розробки базових основ виробництва таких кристалів. Оптимізувати конструкції та створити лабораторні зразки силових випрямляючих діодів Шотткі і підкладок тепловідводів площею 50 – 150 мм<sup>2</sup>, дослідити їх робочі характеристики та вивчити взаємозв'язок з структурними властивостями матеріалу.

#### **4.2. Основні завдання Проєкту**

Науково обґрунтувати і оптимізувати склад розчинників вуглецю для вирощування монокристалів алмазу розміром до 10 – 15 мм та можливість керування рівнем входження домішок азоту та бору. Дослідити закономірності варіювання форми, габітусу і дефектно-домішкового складу різних типів алмазу. Розробити методи виготовлення зразків розміром 3–8 мм з односекторних частин

кристалів. Розробити конструкції силових випрямляючих діодів Шотткі на основі односекторних пластин НРНТ- алмазів легованих бором та дослідити їх оптичні і електрофізичні властивості.

#### **4.3. Детальний зміст Проекту:**

##### **- Сучасний стан проблеми**

У світових дослідницьких центрах розвивається ідея створення електронних приладів з активними алмазними елементами, у тому числі напівпровідниковими. Розробка концепції високотемпературних напівпровідників і прогрес в розвитку методів вирощування монокристалів алмазу дозволили впритул приблизитись до створення зразків таких елементів. Нові розчинники вуглецю для НРНТ-кристалізації відкривають перспективу їх використання для вивчення і розробки базових засад виробництва кристалів з однорідним дефектно-домішковим складом, необхідними характеристиками і стабільними властивостями для промислового застосування.

##### **- Новизна Проекту**

Вперше будуть використані нові нетрадиційні розчинники вуглецю для отримання великих повнограних кристалів кубооктаедричного габітусу масою 5 – 15 карат та односекторних (100) та (111) пластин алмазу, легованих бором, розміром до 3 – 8 мм. Будуть розроблені взаємодоповнюючі неруйнівні фізичні методи скануючої оптичної і провідної (ємнісної) АСМ спектроскопії для просторового картографування дефектно-домішкового складу, деформацій та теплофізичних властивостей повнограних кристалів кубооктаедричного габітусу та односекторних (100) та (111) пластин НРНТ-алмазів, активних елементів алмазних приладів при прикладанні електричних полів та струмів.

##### **- Методологія дослідження**

Вирощування монокристалів алмазу в ростових системах буде проводитись методом температурного градієнта із застосуванням шестипуансонного преса CS-VII. Монокристали буде досліджено методами мікро-раманівської спектроскопії, рентгенівської дифрактометрії (XRD), електронної мікроскопії, інфрачервоної (ІЧ) Фур'є спектроскопії, фотолюмінесцентної (ФЛ) спектроскопії, мас-спектрометрії вторинних іонів (SIMS) та рентгенівської фотоелектронної спектроскопії (EDS).

### **5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ в поточному році, зокрема:**

#### **5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проекту**

Створено узагальнену системи керування тепловим балансом ростового середовища з метою збереження необхідного розподілу температури у ростовому середовищі впродовж збільшення маси кристалу алмазу, який вирощується.

Визначено склади вихідних сплавів-розчинників на базі Fe-Co-Mg, Fe-Co-Ti(Zr), Fe-Al для забезпечення входження домішки бору в кількості до  $10^{20}$  см<sup>-3</sup> в кристали при P=6,2–6,5 ГПа, T=1300-1750 °C. Оптимізовано склади ростових систем для отримання монокристалів алмазу типу IIa з високою структурною досконалістю з вмістом азоту  $\leq 10^{17}$  см<sup>-3</sup> при використанні сплавів-розчинників на базі Fe-Co, легованих Ti та Zr; розроблено методи приготування сплавів-розчинників для проведення циклів вирощування з високою продуктивністю.

Випущено дослідні партії структурно досконалих монокристалів алмазу розміром типів IIa і IIb 5-15 мм, проведено 31 цикл вирощування, одержано 34 та 59 штук кристалів типу IIa і IIb, відповідно, масою від 1,65 до 15,18 каратів.

Розроблено та вдосконалено неруйнівні оптичні методи субмікронної діагностики структурної якості, дефектного та домішкового складу монокристалів та односекторних пластин НРНТ-алмазу методами конфокальної раманівської та ФЛ мікро-спектроскопії.

Комплексні дослідження методами скануючої зондової мікроскопії, мікро-ІЧ та мікро-раманівського 2D картографування застосовано для встановлення просторового розподілу якості кристалічної структури та дефектно-домішкового складу в багатосекторних {100}, {113}, {111}

пластинах алмазу типу  $IIb$ , вирізаних паралельно та перпендикулярно до вісі росту кристалу. Встановлено особливості секторального та зонального розподілу домішки бору та показано, що її концентрація зменшується у відповідності з наступною послідовністю ростових секторів  $\{111\} \rightarrow \{110\} \rightarrow \{113\} \rightarrow \{001\}$ .

Розроблений метод скануючої мікроскопії опору розтікання (СМОР) використано для 2D-3D картографування електричного опору та розподілу носіїв заряду в реальних пластинках алмазу типу  $IIb$ ; вивчено локальний розподіл концентрації вільних носіїв заряду в межах  $10^{14} - 10^{20}$  см<sup>-3</sup> із латеральною роздільною здатністю 3-7 нм, що не можна реалізувати іншими методами діагностики.

Розроблено новий метод цифрової мікро-фотограмметрії для сканування форми, індексування граней, аналізу, прогнозування і візуалізації секторальної структури НРНТ-алмазів. Запропоновано використання розробленого методу для прогнозування вибору напрямків розкרוу кристалів та локалізації односекторних областей з метою створення елементів електронних приладів.

Методом Кельвін-зондової мікроскопії отримано карти розподілу поверхневого електричного потенціалу і встановлено їх відмінності у величині потенціалу між різними секторами росту. Встановлено, що для діодів Шотткі, сформованих на пластинках вирощених монокристалів алмазу типу  $IIb$ , вольт-амперні характеристики вертикальних структур мають нелінійний випрямляючий характер. Виявлено ефекти пониження висоти потенціального бар'єру та зростання струмів витoku, обумовлені дефектами підготовки поверхні кристалів та формування омичних контактів; встановлено, що усунення вказаних дефектів необхідно виконувати шляхом покращення якості хімічно-механічної обробки поверхні кристалів.

Розроблено рекомендації для відбору серії одно- і багатосекторних пластин алмазу типу  $IIb$ , легованих бором для подальшого формування на них електричних омичних контактів з перспективою створення електронних алмазних компонентів приладів, зокрема силових діодів Шотткі.

Апробовано методичну послідовність виготовлення односекторних та багатосекторних пластин алмазу з монокристалів НРНТ-алмазу типу  $IIb$ , та оптимізовано процеси формування та виготовлення контактів для тестування їх електрофізичних параметрів.

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

Переваги у порівнянні з існуючими аналогами полягають у наступному:

- Отримання структурно досконалих монокристалів алмазу великого розміру з контрольованим дефектно-домішковим складом та необхідними електрофізичними властивостями, що є оригінальними у порівнянні з відомими даними.
- Можливість варіювання габітусної форми монокристалів шляхом визначеного складу розчинників та умов вирощування – даних в літературі немає.
- Розроблено вперше новий метод цифрової мікро-фотограмметрії для сканування форми і індексування граней НРНТ-алмазів.
- Отримання кристалів з розвинутими секторами росту (311) і (100) і розміром до 5 мм – публікацій немає.
- Використання односекторних зразків алмазу для виготовлення активних напівпровідникових елементів з метою забезпечення відтворюваності вольт-амперних характеристик та стабільності роботи – літературні дані відсутні.

## **5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства**

Практична цінність виконаних досліджень та отриманих результатів полягає в розробці робочої концепції створення напівпровідникових алмазних елементів та приладів на їх основі, яка передбачає послідовність необхідності наступних складових:

- Вирощування структурно досконалих монокристалів алмазу з масою, достатньою для одержання зразків розміром 3-5 мм, які локалізовані в межах тільки одного сектору росту  $\{111\}$ ,  $\{100\}$ ,  $\{311\}$ ,  $\{110\}$ ;
- можливість керування дефектно-домішковим складом зразків в процесі вирощування шляхом використання розчин-розплавних систем визначеного складу та задання умов кристалізації для забезпечення заданих електрофізичних властивостей;
- проведення паспортизації структурної якості, домішкового та дефектного складу, морфології та електрофізичних параметрів монокристалів алмазу з використанням сукупності експериментальних методів ІЧ Фур'є, раманівської та низькотемпературної ФЛ мікро-спектроскопії;
- прогнозування розкрою та напрямів лазерної та прецизійної обробки за допомогою мікрофотограмметрії; одержання достатньої шорсткості поверхонь для проведення металізації і створення омичних контактів з метою подальшого визначення вольт-амперних характеристик та застосування як напівпровідникових датчиків.

Усі перелічені вище складові реалізації Проекту сформульовано вперше і є оригінальним відносно алмазних напівпролвідників

#### **5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проекту в суспільній практиці.**

Встановлені закономірності формування дефектно-домішкового складу та габітусу монокристалів алмазу типів  $IIa$ ,  $IIb$  розміром 5-15 мм при вирощуванні повнограних форм кристалів з різним рівнем домішок N і B дають можливість виготовлення напівпровідникових пластин товщиною 0,5-1,5 мм, необхідних розмірів для використання в якості напівпровідникових компонентів електронних приладів, зокрема силових діодів Шотткі, які вибрані у якості модельних для виконання Проекту.

Отримані монокристали алмазу та методи їх вирощування можуть також бути застосовані в якості активних і пасивних елементів електронних приладів. Передбачено виготовлення напівпровідникових елементів для використання як активних елементів діодів Шотткі в рамках Проекту.

Примітка: Анотований звіт не містить відомостей, заборонених до відкритого опублікування

#### **Науковий керівник Проекту**

Головний науковий співробітник,  
чл.-кор. НАНУ, д.т.н., проф.

Сергій ІВАХНЕНКО

