

Влияние кислорода на синтез и свойства легированных бором микро- и наноалмазов

Кондрина К.М.^{1,2}, Бражкин В.В.¹, Кондрин М.В.¹, Екимов Е.А.³

kondrina.km@phystech.edu

¹ Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, г. Троицк, 108840, г. Москва, Российская Федерация

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³ Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук

Недавнее сообщение о получении n-типа проводимости в алмазах, легированных бор-кислородными комплексами в металлическом растворителе [1], инициирует интерес к синтезу алмазов в гетероуглеводородных системах с кислородом и бором. Кислород в ростовой системе может присутствовать как неконтролируемая примесь при синтезе алмазов из боробигибрицированного димера $C_{16}H_{30}B_2$ (9BBN) или непосредственно входить в состав прекурсора, например, фенолборной кислоты $C_6H_5B(OH)_2$. Синтез образцов из этих двух прекурсоров осуществляли при давлениях 7-9 ГПа и температурах до 1600 С.

Сильнолегированные бором наноалмазы были получены только из 9BBN (концентрация $3 \cdot 10^{21}$). Из фенолборной кислоты получены микрокристаллы с концентрацией бора $1-4 \cdot 10^{20}$. Проводимость n-типа в алмазах, синтезированных из фенолборной кислоты и 9BBN не была обнаружена, но мы не исключаем возможность частичной компенсации примеси бора кислородом в алмазной решетке. Наше исследование показывает возможность снижения степени легирования алмаза бором в присутствии кислорода с высоким химическим сродством к бору.

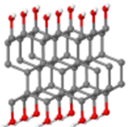
С использованием метода DFT была оценена стабильность алмазных частиц легированных бором с гидрированной и окисленной поверхностями. Показано, что OH функциональные группы стабилизируют частицу с примесью бора (таблица – Рис. 1а).

С другой стороны, расчет указывает на меньшую стойкость к окислению наночастиц с бором.

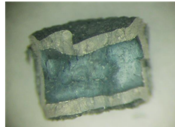
Представленное исследование было профинансировано РНФ, проект № 24-12-00037.

a)	Pure	B-doped	Difference
H-terminated	-8.2778	-7.0316	1.246
OH-terminated	-67.207	-67.147	0.060
Difference	-58.929	-60.116	


б)



в)



г)



Результаты. а) результаты расчета энергии, б) наноалмазная пленка, использованная для расчета, в) микрокристаллы, полученные из фенолборной кислоты, г) коллоид наноалмазов, синтезированных из 9bbn.

Ссылки

1. Liu, Xiaobing, et al. "Boron-oxygen complex yields n-type surface layer in semiconducting diamond." *Proceedings of the National Academy of Sciences* 116.16 (2019): 7703-7711. doi 10.1073/pnas.1821612116