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 боробициклононан димера $C_{16}H_{30}B_2$ (9BBN) или непосредственно входить в состав прекурсора, например, фенилборной 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 $3*10^{21}$). Из фенилборной кислоты получены микрокристаллы с концентрацией бора $1\text{-}4*10^{20}$. Проводимость n-типа в алмазах, синтезированных из фенилборной 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.

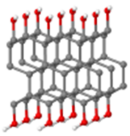
С использованием метода DFT была оценена стабильность алмазных частиц легированных бором с гидрогинезироанной и окисленной поверхностями. Показано, что OH функциональные группы стабилизируют частицу с примесью бора (таблица – Рис. 1а).

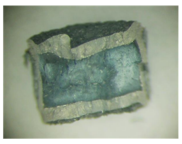
С другой стороны, расчет указывает на меньшую стойкость к окислению наночастиц с бором.

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

а)

	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 фенилборной кислоты, г) коллоид наноалмазов, синтезированных из 9bbn.

Ссылки

1. L iu, 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