

Рамановская спектроскопия природного алмаза после термообработки в атмосфере Si/SiH₄: удаление азотных примесей

Осипов А.В.¹, Гращенко А.С.¹, Спицын А.Б.², Спицын Б.В.², Кукушкин С.А.¹

asgrashchenko@bk.ru

¹ ИПМаш РАН, Санкт-Петербург, Россия

² ИФХЭ РАН, Москва, Россия

Алмазы содержат высокие концентрации азота, образующего различные дефекты [1]. Эти дефекты ухудшают оптические и электронные свойства кристаллов, ограничивая их применение в электронике и квантовых технологиях. Разработка эффективных методов очистки от азота является актуальной задачей материаловедения.

Природный алмаз подвергнут многоступенчатому отжигу до 1350°C в вакуумной печи в присутствии монокристаллического кремния и газообразного SiH₄. Рамановские спектры исходного и обработанного образцов сравнивались с DFT-моделированием (пакет Medea-Vasp [2], функционал PBE, мета-функционал MBJLDA). В спектре исходного алмаза (рис. 1а) помимо пика алмаза 1333 см⁻¹ присутствуют дополнительные полосы 500–850 см⁻¹, идентифицированные с помощью расчетов как колебания C-N в А-центрах (пары азота, ~710 см⁻¹) и В-центрах (N₄V, ~640 см⁻¹) [3]. После обработки амплитуда этих пиков уменьшилась на 40–60% (рис. 1б), что свидетельствует о снижении концентрации азотных дефектов. Моделирование подтверждает, что исчезновение сигналов связано с трансформацией азотных центров под действием диффундирующих атомов кремния.

Таким образом, предложенный метод термохимической обработки обеспечивает эффективное удаление азотных примесей из приповерхностного слоя природного алмаза, что открывает возможности для создания высокочистых алмазных подложек.

Работа выполнена в рамках госзадания ФГУП ИПМаш РАН № FFNF-2026-0002 на уникальной научной установке «Физика, химия и механика кристаллов и тонких пленок».

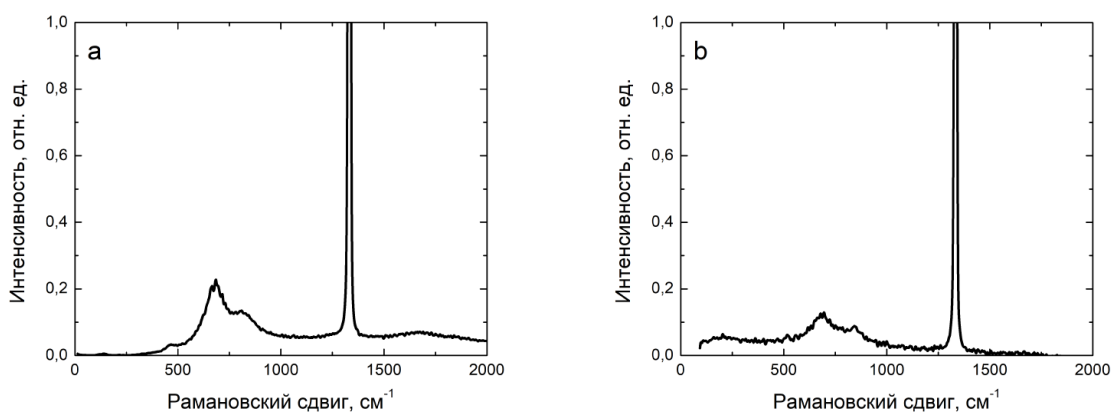


Рис. 1. Рамановские спектры: (а) – исходный алмаз, (б) – алмаз после обработки.

Ссылки

1. M.N.R. Ashfold, J.P. Goss, B.L. Green, P.W. May, M.E. Newton, C.V. Peaker, Chem. Rev. (2020), **120**, 5745.
2. G. Kresse, J. Furthmüller, Phys. Rev. B (1996), **54**, 11169.
3. G. Davies, J. Phys. C: Solid State Phys. (1976), **9**, L537.