

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0521U101946

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 08-10-2021

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Саріков Андрій Вікторович

2. Sarikov Andrey Victorovich

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., 01.04.07

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** доктор наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 01.04.07

**Назва наукової спеціальності:** Фізика твердого тіла

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 22-09-2021

**Спеціальність за освітою:** фізика і технологія матеріалів та компонентів електронної техніки

**Місце роботи здобувача:** Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416952

**Місцезнаходження:** проспект Науки, буд. 41, м. Київ, 03028, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 26.199.01

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416952

**Місцезнаходження:** проспект Науки, буд. 41, м. Київ, 03028, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416952

**Місцезнаходження:** проспект Науки, буд. 41, м. Київ, 03028, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.19, 29.19.15

**Тема дисертації:**

1. Структурно-фазові перетворення при формуванні плівок і нанокompозитів на основі Si та 3C-SiC
2. Structural and phase transformations during formation of Si and 3C-SiC based films and nanocomposites

**Реферат:**

1. Дисертаційну роботу присвячено з'ясуванню механізмів дії зовнішніх чинників на формування структури та фазового складу при отриманні плівок і нанокompозитів на основі кремнію та кубічного карбиду кремнію. Розроблено кінетичну модель процесу обміну шарами, індукованого алюмінієм, для вирощування плівок полікристалічного кремнію на сторонніх неорієнтованих підкладках. З'ясовано фізичні механізми, що визначають перебіг цього процесу, та їх залежність від характеристик вихідних структур і температури відпау. Також показано, що механізм метал-індукованої кристалізації, який лежить в основі обміну шарами, має істотне значення для пояснення особливостей каталізованого металами росту нитковидних кристалів кремнію у процесі пара-рідина-тверде тіло та споріднених йому. Розроблено термодинамічну теорію фазового розділення плівок SiO<sub>x</sub> (x < 2) при високотемпературних відпалах. Отримано вираз для вільної енергії оксиду кремнію як функцію його складу та температури. Теоретично обґрунтовано залежність

фазово-структурних характеристик наноккомпозитів Si/SiO<sub>x</sub>, отримуваних як результат фазового розділення, від початкової стехіометрії оксиду кремнію та температури відпалу. Теоретично обґрунтовано явище повного або часткового перемішування шарів у надґратках, що складаються з SiO<sub>x</sub> та SiO<sub>2</sub> нанометрових товщин, та його залежність від характеристик вихідних надґраток і температури відпалу. Методом молекулярної динаміки промодельовано еволюцію протяжних дефектів у плівках кубічного карбїду кремнію при вирощуванні на кремнієвих підкладках. Зокрема встановлено, що утворення стабільних комплексів часткових дислокацій Шоклі та анігіляція дефектів пакування у таких плівках обумовлені еволюцією напружень на різних стадіях стандартної двостадійної технології їх вирощування. Також з'ясовано, що експериментально спостережені часткові дислокації з видимими напрямками ліній <132> та <143> у кубічному карбїді кремнію складаються з сегментів стабільних ліній дислокацій <011> та <121>.

Запропоновано механізм, згідно з яким формування таких дислокацій обумовлено тенденцією до мінімізації їх енергії шляхом зменшення довжини лінії з одного боку та формуванням сегментів, що мають найменші значення енергії з іншого боку. Виявлено структуру типового протяжного дефекту у нитковидних кристалах GaP/Si гексагональної фази. Також встановлено існування критичного радіуса нитковидних кристалів кремнію, що дорівнює приблизно 7 нм, нижче за який більш стабільними є кристали з гексагональною структурою, а вище – з кубічною. Існування критичного радіуса обумовлено більшою поверхневою та меншою об'ємною енергією кубічної фази кремнію порівняно з гексагональною

2. The thesis is devoted to the elucidation of the mechanisms of external influences on the structure and phase composition of silicon and cubic silicon carbide (3C-SiC) based films and nanocomposites during their formation. A kinetic model of the aluminum induced layer exchange process for growing polycrystalline Si films on foreign non-orienting substrates is proposed. The physical mechanisms of this process as well as their dependence on the characteristics of initial structures and annealing temperature are revealed. Moreover, the metal-induced crystallization mechanism, underlying the layer exchange process, is proved essential to account for the peculiarities of the metal catalyzed growth of Si wire-like crystals in the vapor-liquid-solid and related processes. A thermodynamic theory of the phase separation of SiO<sub>x</sub> ( $x < 2$ ) films during high-temperature annealing is proposed. An expression for the free energy of Si oxide as a function of its composition and temperature is derived. The dependence of the phase and structural characteristics of phase separated Si/SiO<sub>x</sub> nanocomposites on the initial Si oxide stoichiometry and annealing temperature is theoretically grounded. The complete or partial layer intermixing in SiO<sub>x</sub>/SiO<sub>2</sub> superlattices with nanometer thick layers and its dependence on the characteristics of initial superlattices and annealing temperature are theoretically proved. Using molecular dynamics simulations, the evolution of extended defects in 3C-SiC films during growth on Si substrates is simulated. It is demonstrated that the formation of stable Shockley partial dislocation complexes as well as the annihilation of stacking faults in 3C-SiC films are determined by the stress evolution at different stages of the standard two-stage film growth technology. Moreover, the experimentally observed partial dislocations with visible <132> and <143> line directions are found to consist of the stable <011> and <121> line segments. A mechanism of the formation of such dislocation line directions is proposed based on the tendency of energy minimization by reducing dislocation length on the one hand and formation of the lowest-energy segments on the other hand. The structure of the typical extended defect in hexagonal GaP/Si wire-like crystals is revealed. Moreover, the existence of a critical radius of about 7 nm for transition of the stability of Si wire-like crystal structure from the hexagonal to the cubic one is established. The existence of critical radius is due to the larger surface and lower bulk energy of Si in the cubic phase as compared to the hexagonal one

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:**

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:**

**Підсумки дослідження:**

**Публікації:**

**Наукова (науково-технічна) продукція:**

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПІВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Євтух Анатолій Антонович

2. Yevtukh Anatolii A.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.10

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Євтух Анатолій Антонович

2. Yevtukh Anatolij Antonovych

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.10

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

### **Офіційні опоненти**

#### **Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Морозовська Ганна Миколаївна
2. Morozovska Anna M.

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.07

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

#### **Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Скришевський Валерій Антонович
2. Skryshevsky Valeriy A.

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.10

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

#### **Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Малик Орест Петрович
2. Malyk Orest P.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.10

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Рецензенти**

## **VIII. Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Беляев Олександр Євгенович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Беляев Олександр Євгенович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**



Юрченко Т.А.