**Звіт про науково-дослідну роботу: „ Вплив умов синтезу на наноструктуру та властивості плівок на основі тугоплавких боридів, силіцидів і оксидів”  (заключний)**

**Мета роботи** - вияснення впливу структури на властивості аокриттів на основі AlMgB14, B-C-N, Cr-B-C-N та Si-C-N залежно від умов осадження: 2) пояснення і передбачення стабільних кристалічних і аморфних структур цих систем в рамках першопринципних розрахунків; 3) встановлення закономірностей формування наноструктури гранульованих товстих плівок на основі тугоплавких оксидів та боридів кобальту і нікелю.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2015 р.

 закінчення IV кв. 2017 р.

 **Керівник роботи**: Іващенко Володимир Іванович, д.ф.-м.н.,( Email:petro@ipms.kiev.ua )

**Скорочений зміст висновків рецензентів.**

 В результаті виконаної теми були отримані важливі наукові результати і розроблені нові плівки, котрі можуть бути застосовані у виробництві. Поставлена мета досягнута.

Виконана робота заслуговує високої оцінки . Поставлені задачі виконані повністю. Рекомендовано роботу до затвердження.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

 Розроблені матеріали надтвердих магнетронних плівок можуть бути запропоновані для впровадження у машинобудуванні в якості зносостійких захисних покриттів.  Зважаючи на оптоелектронні властивості, низьку шорсткість, високу твердість та низький коефіцієнт тертя, аморфні Si-C-N плівки рекомендовано до застосування в напівпровідникових приладах та мікоелектромеханічних системах (МЕМС) і (НЕМС).       Товсті плівки  на основі нанодисперсного SnO2 та боридів кобальта, виготовлені шляхом трафаретного друку, можуть бути застосовані .для електроніки та приладобудування.

Теоретичні результати можуть бути використані: при розробці новітніх надтвердих тонких покриттів; для пояснення властивостей гетероструктур та інтерфейсів, із котрих формуються нанокомпозити.

 Дані про реєстрацію роботи: № 0115U002112

 **РЕФЕРАТ**

 **Об’єкт дослідження** – структура та властивості тонких і товстих плівок.

 **Мета роботи** – 1) вияснення впливу структури на властивості аокриттів на основі AlMgB14, B-C-N, Cr-B-C-N та Si-C-N залежно від умов осадження: 2) пояснення і передбачення стабільних кристалічних і аморфних структур цих систем в рамках першопринципних розрахунків; 3) встановлення закономірностей формування наноструктури гранульованих товстих плівок на основі тугоплавких оксидів та боридів кобальту і нікелю.

 **Методи дослідження**: установка для дуального магнетронного розпилення, плазмохімічна установка, обладнання для виготовлення товстих плівок. Для дослідження зразків використано: рентгеноструктурний аналіз, наноіндентування, трибологічні і адгезійні тести, оптичний профілометр, інфрачервона і рентгенелектронна спектроскопії, установки для дослідження оптоелектронних властивостей, атомний силовий мікроскоп, просвітлювальна електронна мікроскопія.

 Магнетронні покриття були отримані шляхом розпилення мішеней із AlMgB14, B4C, Cr в атмосфері азоту і аргону залежно від потужності розряду та швидкості потоку азоту. Плазмохімічні Si-C-N плівки отримані із використанням гексаметилдісилазану, як основного прекурсора. Всі покриття та плівки були аморфними. Покриття Al-Mg-B та Cr-B-C-N демонстрували твердість 15-20 ГПа. Покриття B-C-N та Al-Mg-B-С характеризуються підвищеною твердістю (біля 30 ГПа) та підвищеною зносостійкістю. Експериментальне і теоретичне дослідження показало, що зміцнення боро-містких покриттів пов’язане з формуванням фрагментів ікосаедрів в аморфній матриці. Cr-B-C-N покриття являють CrB, або CrN кристаліти (залежно від потоку азоту), вкраплені у аморфну BCN матрицю. Виявлено, що плазмохімічні Si-C-N плівки володіють високою твердість (понад 30 ГПа), високою фотоемісією в діапазоні 400-500 нм та енергетичною щілиною 1.5-4.5. Були виготовлені товсті плівки на основі нанодисперсного SnO2, Co3B і Ni3B шляхом трафаретного друку. Було вивчено вплив умов термообробки на структурні та електрофізичні властивості отриманих товстих плівок. Розроблені покриття можуть бути використані як зносостійкі та захисні шари, магнето-резистивгі плівки, а також можуть слугувати датчиками газів. Напівпровідникові плівки будуть ефективними в сонячних елементах та в приладах мікро-(нано)-електро-механічних системах.

 **Ключові слова**: АМОРФНІ ТВЕРДІ ПОКРИТТЯ, АМОРФНІ напівпровідникові ПЛІВКИ, Товсті гранульовані плівки, першопринципні розрахунки, стабільність фаз, структурА, механічні І оптоелектронні властивості.

 **Публікації**

Kozak A. O. , Ivashchenko V. I. , Porada O. K. , Ivashchenko L. A. , Sinelnichenko O. K. , Dub S. N. , Lytvyn O. S. , Tymofeeva I. I. , Tolmacheva G. N. , Effect of the nitrogen flow on the properties of Si-C-N amorphous thin films produced by magnetron sputtering, [Journal of Superhard Materials](http://link.springer.com/journal/11961). -  2015. – V. 37, [Issue 5](http://link.springer.com/journal/11961/37/5/page/1). – P. 300-309.

Ivashchenko V.I., Scrynskyy P.L., Dub S.N., Tomofeeva I.I., Butenko O.O., Kozak A.O., AlMgB14-Based Films Prepared by Magnetron Sputtering at Various Substrate Temperatures Proceedings of the International Conference “Nanomaterials: Applications and Properties”, Vol. 4, No.1, 01NTF07 (2pp.), Lviv, Ukraine, September 16-23. - 2015.

Porada O.K. , Kozak A.O. , Ivashchenko V.I. , Dub S.M , Pogrebnjak A.D.,

Hard Si-C-N chemical vapor deposited films, Proceedings of the International Conference “Nanomaterials: Applications and Properties”, Vol. 4, No.1, 01NTF09 (3pp.), Lviv, Ukraine, September 16-23. - 2015.

Козак А.О. , Іващенко В.І. , Порада О.К. , Іващенко Л.А. , Малахов В.Я. ,  Томіла Т.В. , Оптичні властивості плазмохімічних гідрогенізованих Si-C-N плівок//Ж. Нано- та Електронної Фізики – 2015. - Т. 7, No.3. - С. 03040-6.

June 23-26. - 2015.

Ivashchenko V.I., Scrynskyy P.L., Butenko O.O., Kozak A.O., Dub S.N., Timofeeva I.I., Characterization of Al-Mg-B films prepared by magnetron sputtering, Proceedings of the International Conference HighMat Tech-15, p 140, Kyiv, Ukraine, October 5-8. - 2015.

Козак А.А., Порада А.K., Иващенко В.И., Иващенко Л.A., Малахов В.Я., Томила Т.В., Характеристика плазмохимических a-SiCN:H пленок: Влияние температури положки, Proceedings of the International Conference HighMat Tech-15, p. , Kyiv, Ukraine, October 5-8. -  2015.

Ivashchenko V.I., Scrynskyy P.L., Dub S.N., Butenko O.O., Kozak A.O., Sinelnichenko O.K., Structural and mechanical properties of Al-Mg-B films: Experimental study and first-principles calculations // Thin Solid Films. -  2016. – V.599. -  P.72–77.

[Ivashchenko](http://scitation.aip.org/search?value1=V.+I.+Ivashchenko&option1=author&option912=resultCategory&value912=ResearchPublicationContent) V. I., [Turchi](http://scitation.aip.org/search?value1=P.+E.+A.+Turchi&option1=author&option912=resultCategory&value912=ResearchPublicationContent) P. E. A., [Veprek](http://scitation.aip.org/search?value1=S.+Veprek&option1=author&option912=resultCategory&value912=ResearchPublicationContent) S., [Shevchenko](http://scitation.aip.org/search?value1=V.+I.+Shevchenko&option1=author&option912=resultCategory&value912=ResearchPublicationContent) V. I., [Leszczynski](http://scitation.aip.org/search?value1=Jerzy+Leszczynski&option1=author&option912=resultCategory&value912=ResearchPublicationContent) J., [Gorb](http://scitation.aip.org/search?value1=Leonid+Gorb&option1=author&option912=resultCategory&value912=ResearchPublicationContent) L. and [Hill](http://scitation.aip.org/search?value1=Frances+Hill&option1=author&option912=resultCategory&value912=ResearchPublicationContent) F., First-principles study of crystalline and amorphous AlMgB14-based materials // J. Appl. Phys. - 2016. – V.119. – P.205105-205120.

O. K. Porada, A. O. Kozak, V. I. Ivashchenko, S. M. Dub, and G. M. Tolmacheva,  Hard Plasmachemical a-SiCN Coatings, J. Superhard Materials, 38 (2016) 263–270.

V.I. Ivashchenko, S.N. Dub, P.L. Scrynskyy, A.O. Kozak, Leonid Gorb, Frances Hill, Jerzy Leszczynski, Characterization of Al-Mg-B-C films based on experimental and first-principles investigations, [Surface and Coatings Technology](http://www.sciencedirect.com/science/journal/02578972), [309](http://www.sciencedirect.com/science/journal/02578972/300/supp/C) (2017) 164-171.

A.O. Kozak, O.K. Porada, V.I. Ivashchenko, L.A. Ivashchenko, P.L. Scrynskyy, T.V. Tomila, V.S. Manzhara, Comparative investigation of Si-C-N Films prepared by plasma enhanced chemical vapour deposition and magnetron sputtering, Applied Surface Science 425 (2017) 646–653.

A.O. Kozak, V.I. Ivaschenko, O.K. Porada, L.A. Ivashchenko Effect of Substrate Temperature on the Optoelectronic Properties of Si-C-N:H Films, Proceedings of the 2017 IEEE 7th International Conference on Nanomaterials: Applications & Properties, Part 1, p. 01PCS127 (pp. 5), Zatoka, Ukraine,September 10–15, 2017.

O.K. Porada, V.S. Manzhara, A.O. Kozak, V.I. Ivashchenko, L.A. Ivashchenko, Photoluminescence Properties of PECVD Si-C-N Films, J. Nano- Electron. Phys. 9, No 2 (2017) 02022-6.

Б. М. Рудь, Е. Я. Тельников, А. К. Марчук, И. И. Тимофеева, К. А Мелешевич, Л. И. Фиялка Влияние условий формирования гранулированных толстых пленок на основе дисперсного Со**3**B на их фазовый состав // Порошковая металлургия. – 2015. – № 3/4. – С. 106 - 108.

А. Г. Гончар, Б. М. Рудь, Н. И. Симан, Е. Я. Тельников, А. А. Рогозинская, Л. И. Фиялка, А. К. Марчук  Влияние материала токоподводящих контактов на электрические свойства толстых пленок на основе диоксида олова // Порошковая металлургия. – 2015. – № 3/4, – С. 96-105.(1).

Б. М. Рудь, В. Е. Шелудько. Определение размеров наноструктурныхэлементов в гранулированных композиционных плёнках проводник–диэлектрик: расчёт и атомная  силовая  микроскопия**//** Порошковая металургия . – 2015. – № 1/2. – С. 31-40.

А. В. Паустовский, Б. М. Рудь, В. Е. Шелудько, Е. Я. Тельников, Н. И. Симан, П. С. Смертенко, В. В. Кременицкий, Ю. И. Богомолов. Электропроводящие плёночные материалы на основе термостойкого фторсодержащего полиамида и борида никеля // Порошковая металлургия.– 2016.– № 7/8.– С. 73-82.

А. В. Паустовский, Б. М. Рудь, В. Е. Шелудько, Е. Я. Тельников, Н. И. Симан, П. С. Смертенко, В. В. Кременицкий, Ю. И. Богомолов. Электропроводящие композиционные материалы на основе термостойкого фторсодержащего полиамида и бинарного наполнителя // Порошковая металлургия.– 2016.– № 9/10.– С. 62-70.

А. Г. Гончар, В. Е. Шелудько, В. В. Кременицкий, Н. И. Симан,Л. И. Фиялка, Свойства толстых пленок на основе SnO2 при использовании контактов ,изготовленных из Ni3B. // Металлофизика и новые технологии.– 2017.– 39, № 2.– С. 177-188.