

# Дослідження модульованих структур в напівпровідникових кристалах методом рентгенівської дифрактометрії (XRD)

## Постановка задачі дослідження:

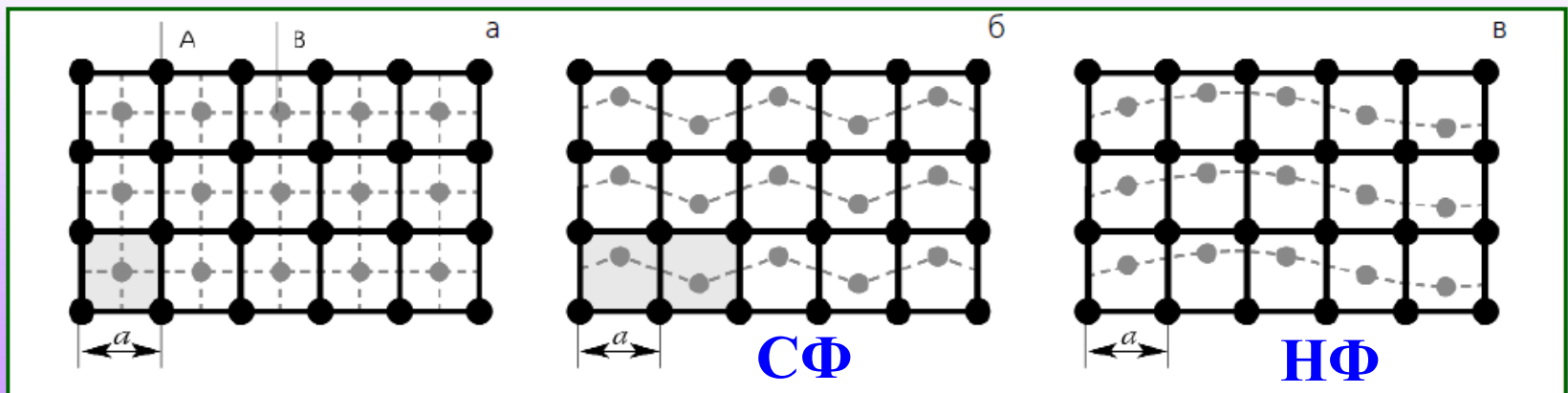
для широкого кола напівпровідників-сегнетоелектриків, які активно використовуються в мікро- та наноелектроніці, при певних температурах в інтервалі (90-300) К в кристалічній структурі виникають статичні зміщення атомів з рівноважних положень, які змінюються за періодичним законом в певних напрямках кристалічної ґратки. Такі статичні хвилі утворюють в кристалах модульовані структури.

Модульованій структурі відповідає співрозмірна фаза (СФ) – якщо довжина хвилі модуляції кратна цілій кількості елементарних трансляцій в даному напрямку. Якщо така кількість - число не ціле, а будь-яке раціональне - модульованій структурі відповідає неспіврозмірна фаза (НФ).

Наприклад,

$$a(x) = a + \delta \cos \frac{2\pi}{\lambda} x \quad \rightarrow \quad \lambda = na$$

$n$ -ціле **СФ**  
 $n$ -раціональне **НФ**



# Дослідження модульованих структур в напівпровідникових кристалах методом рентгенівської дифрактометрії (XRD)

**Об'єкти** – шаруваті напівпровідники-сегнетоелектрики  $\text{TlInS}_2$ ,  $\text{TlGaSe}_2$ ,  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{Se}$ ,  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$ , група  $\text{A}_2\text{BX}_4$ ;  $\text{A}=\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$ ;  $\text{B}=\text{NH}_4, \text{N}(\text{CH}_3)$ ;  $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{F}$



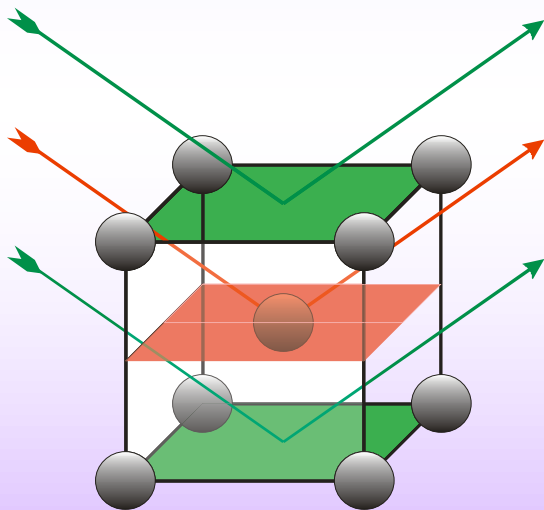
**Не з'ясовано** – для більшості з вказаних кристалів не визначено мікроскопічні механізми утворення модульованих структур, для встановлення яких є необхідною інформація про перебудову кристалічної ґратки при утворенні модуляційних структур



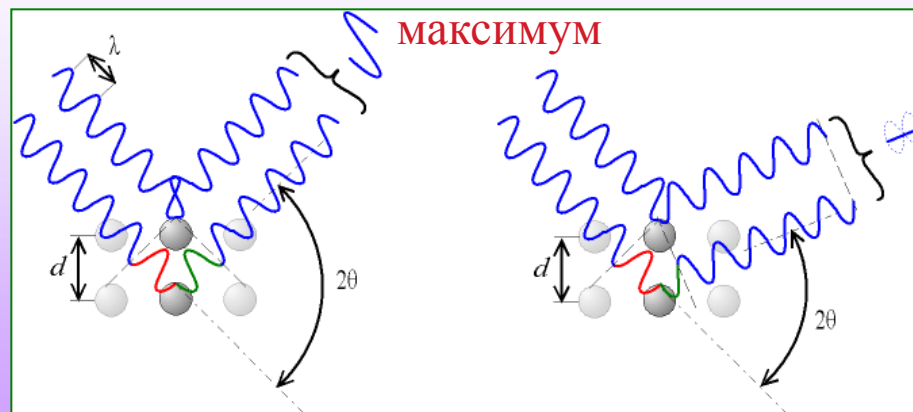
**Мета** – дослідження змін кристалічної структури при виникненні та розпаді довгоперіодичних модуляцій, визначення природи таких модуляційних хвиль

# Експериментальний метод - дослідження дифракції рентгенівських променів (XRD – X-Ray Diffraction)

**В основі методу** – дифракція рентгенівських променів певного діапазону (електромагнітних хвиль з довжинами 0,1-10 ангстремів) на тривимірній періодичній структурі – кристалічній ґратці, з характерними відстанями між атомами, які мають той же порядок величини, що і довжини хвиль рентгенівського випромінення



Когерентні рентгенівські хвилі при розсіюванні кристалом інакладаються, утворюючи інтерференційну картину з максимумами та мінімумами інтенсивності. За кутовим положенням максимумів можна визначити структурні параметри кристалу, наприклад, параметри елементарної комірки.



**Підхід Лауе** – кристал розглядається як сукупність періодично розташованих точкових розсіюючих центрів

**Підхід Бреггів** – кристал розглядається як сукупність атомних площин

## Умови максимумів інтерференції

Рівняння Лауе:

$$\begin{cases} \cos \varphi - \cos \varphi_0 = n\lambda \\ \cos \chi - \cos \chi_0 = m\lambda \\ \cos \psi - \cos \psi_0 = k\lambda \end{cases}$$



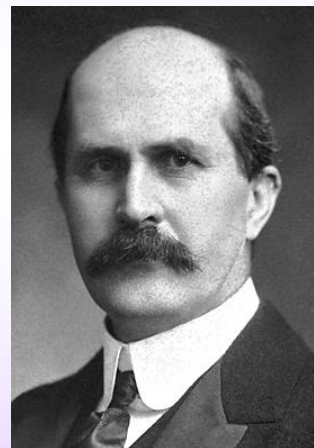
Макс фон Лауе (1879-1960)

Нобелівська премія 1914р: «за відкриття дифракції рентгенівських променів на кристалах»

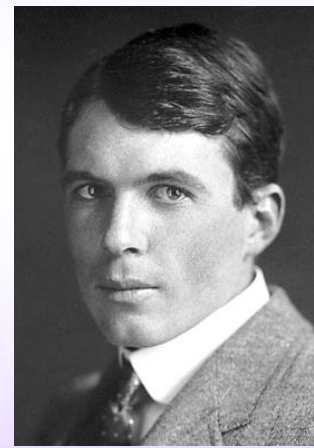
Рівняння Бреггів:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

$n, m, k$  - цілі



Генрі Лоренс Брегг (1862-1942)



Уільям Лоренс Брегг (1890 – 1971)

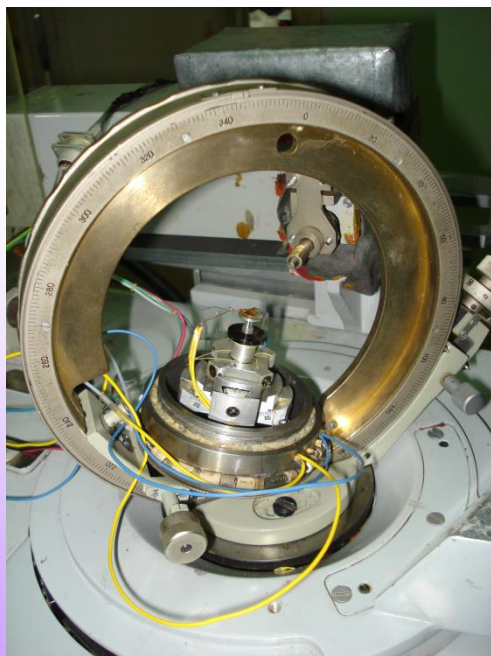
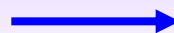
Нобелівська премія 1915р: «за заслуги в дослідженні структури кристалів за допомогою рентгенівських променів»

Експериментальний комплекс – рентгенівський дифрактометр ДРОН-4 + низькотемпературна камера (90 – 300)К для дослідження монокристалів

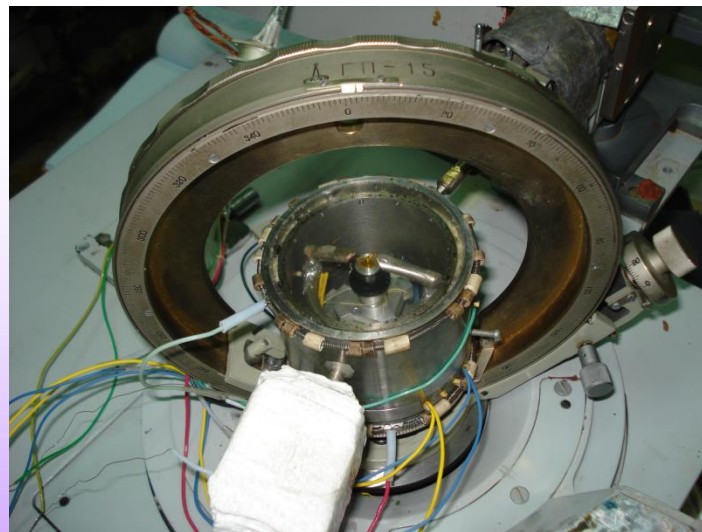
В лабораторії рентгеноструктурних досліджень кафедри загальної фізики створено низькотемпературну камеру, яка дозволяє спостерігати брегівське відбивання від **будь-якого сімейства атомних площин** (виводити на сферу Евальда довільний вузол оберненої гратки) методом чотириколової гоніометрії в діапазоні температур (90-300)К

Чотири кути – чотири кола:

$$\chi, \varphi, \omega, 2\theta$$



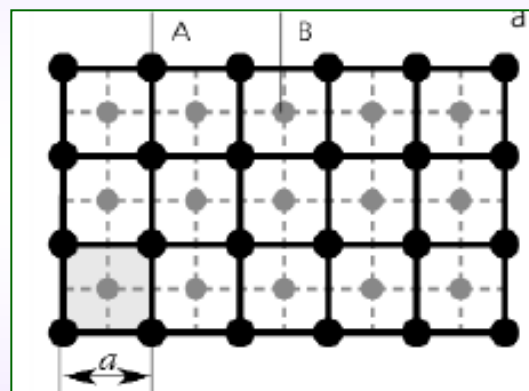
Чотириколовий гоніометр



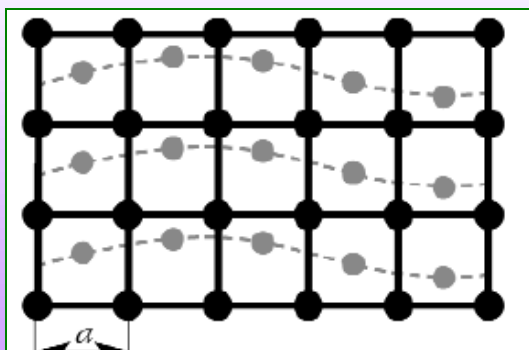
Чотириколовий гоніометр разом з системою охолодження та термостабілізації зразка

# Дослідження модульованих структур в напівпровідникових кристалах методом рентгенівської дифрактометрії (XRD)

Модульована структура в кристалі супроводжується появою так званих модуляційних сателітів - слабких максимумів інтенсивності, розташованих симетрично до головних максимумів. Кутове положення та інтенсивність таких сателітів несуть інформацію про параметри модуляційних структур. Це відкриває можливості рентгенодифрактометричних досліджень модуляційних хвиль у кристалах.



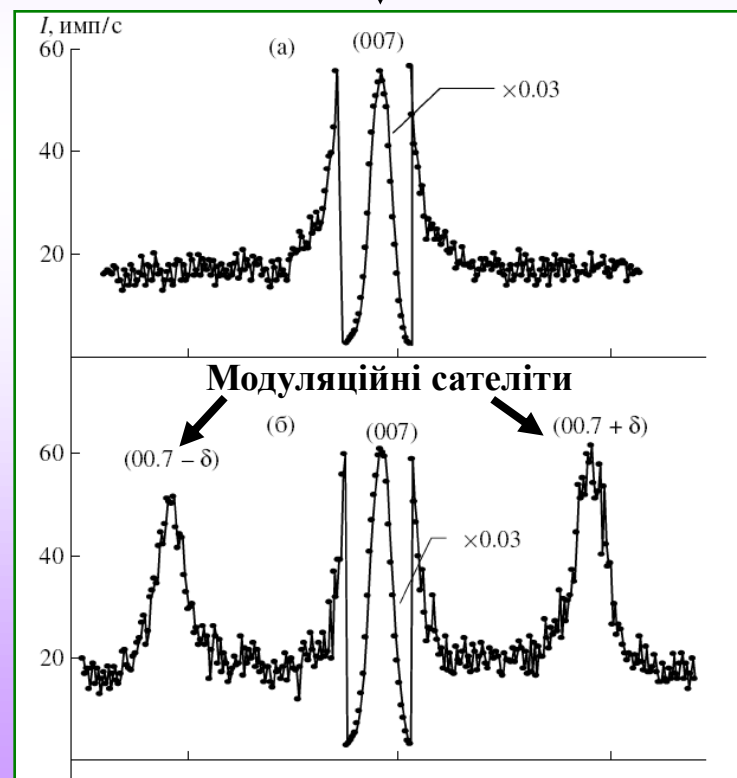
Тільки головні максимуми



Головні максимуми та сателіти



Головний структурний максимум

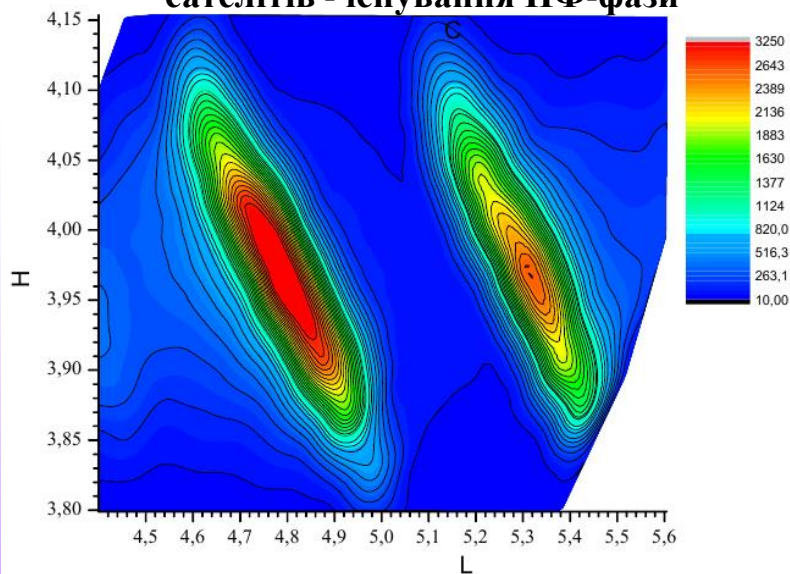


# Дослідження модульованих структур в напівпровідникових кристалах методом рентгенівської дифрактометрії (XRD)

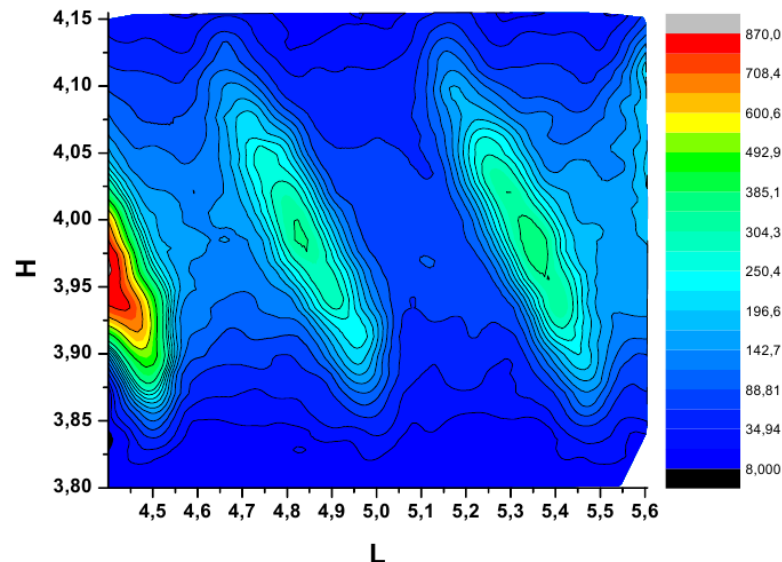
Метод низькотемпературної чотириколової дифрактометрії дозволяє досліджувати 2D- та 3D-розподіл інтенсивності рентгенівських променів, розсіяних кристалом при різних температурах. За такими експериментальними даними визначається динаміка виникнення та розпаду модуляцій, їх характеристики.

## 2D-зображення сателітів НС-фази у $\text{TlInS}_2$

**T=205 К – висока інтенсивність сателітів - існування НФ-фази**



**T=190 К – зменшення інтенсивності сателітів - розпад НФ-фази**



**Запрошуємо студентів 2 та 3 курсів до участі в  
рентгенівських дослідженнях  
структури кристалів!**