

Науковий напрямок

”Рентгеноструктурні та рентгеноспектральні дослідження твердих тіл”

1. Рентгеноструктурні дослідження фазових перетворень у шаруватих напівпровідниках

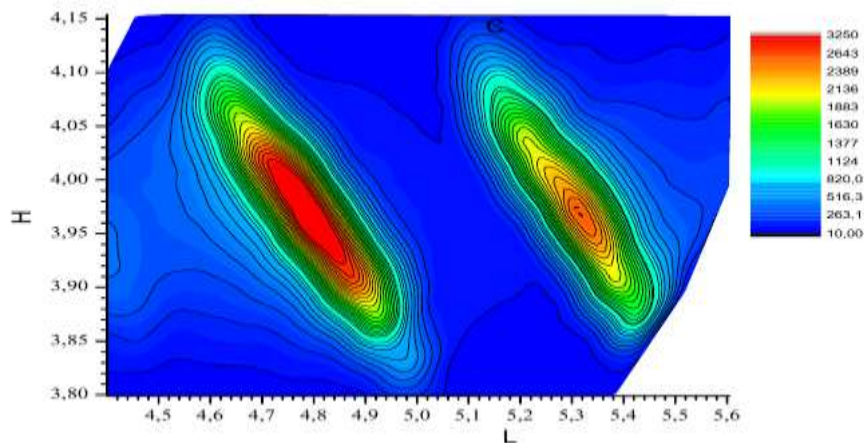
Протягом останніх 5 років на кафедрі загальної фізики інтенсивно розвиваються експериментальні дослідження динаміки фазових переходів у шаруватих напівпровідниках-сегнетоелектриках TlGaSe_2 та TlInS_2 . Важлива особливість таких фазових переходів пов'язана з тим, що вони супроводжуються утворення та розпадом довгоперіодичних модульованих структур (співрозмірних та неспіврозмірних фаз) різного типу та напрямку в кристалічній ґратці.

Для виконання досліджень створено автоматизований експериментальний комплекс “рентгенівський дифрактометр ДРОН-4 – низькотемпературні рентгенівські камери на базі приставок УНРТ-180 та ГП-15”.

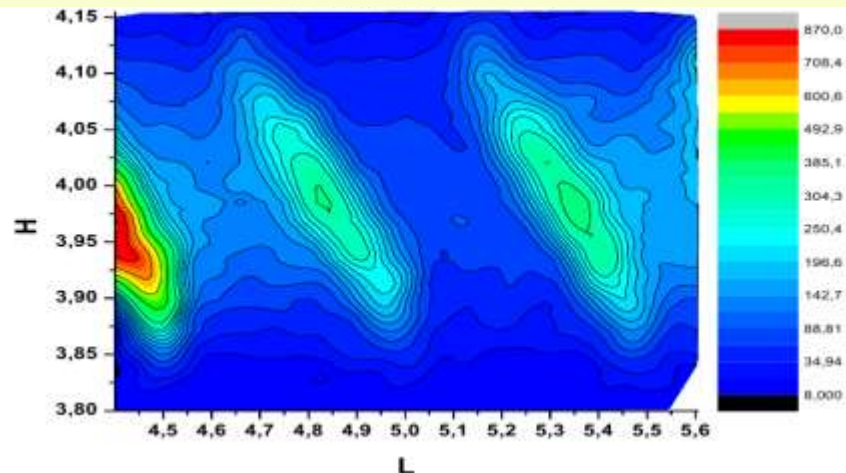
Серед отриманих за цей час результатів **найвагомішими є наступні:**

Розроблено та відпрацьовано методику чотирикової низькотемпературної рентгенівської дифрактометрії, яка дозволяє виконувати 3D-сканування оберненого простору при температурах монокристалічних зразків (90–300) К. Методика відкриває можливості дослідження динаміки виникнення та розпаду модульованих структур за змінами розподілу інтенсивності модуляційних сателітів в оберненому просторі.

T=205 K – висока інтенсивність сателітів - існування НФ-фази



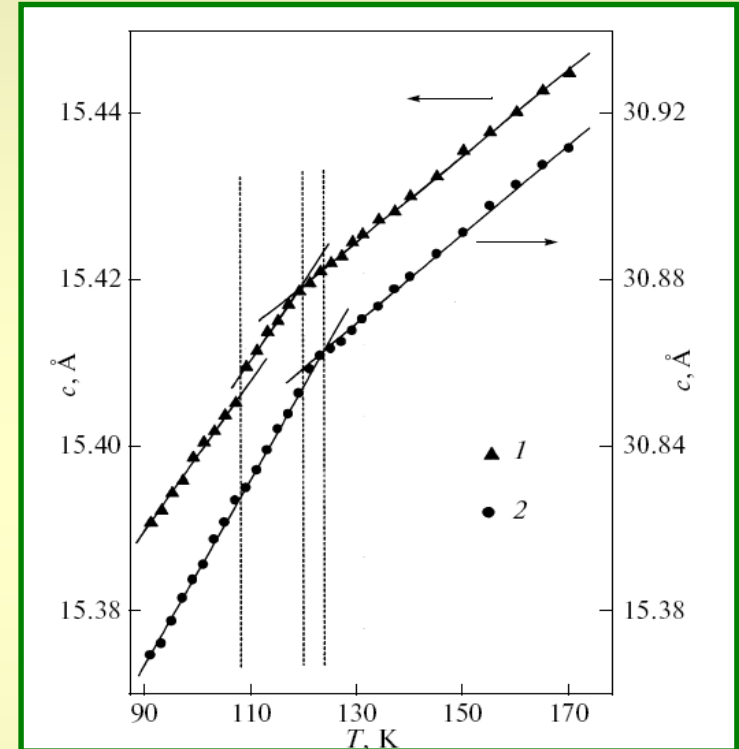
T=190 K – зменшення інтенсивності сателітів - розпад НФ-фази



Рентгеноструктурні дослідження фазових перетворень у шаруватих напівпровідниках

Виконано комплекс рентгенографічних досліджень кристалів TlInS_2 та TlGaSe_2 в інтервалі температур $T=90\div 300\text{K}$. Виявлено існування у таких кристалах двох політипів, які характеризуються різними значеннями параметра c елементарної комірки, а саме, c та $2c$.

Встановлено існування суттєвих відмінностей динаміки кристалічної ґратки у вказаних політипах TlInS_2 . Зокрема, у зразках політипу C зареєстровано два ФП: при $T=215\text{K}$ ФП II роду із парафази в неспівмірну фазу та при $T=197\text{K}$ сегнетоелектричний ФП I роду, який супроводжується збільшенням у чотири рази параметра c . В той же час, у кристалах політипу $2C$ ФП, що супроводжується мультиплікацією елементарної комірки, не спостерігається, а при температурах $T = 180\div 230\text{K}$ зареєстровано ефект глобального температурного гистерезису



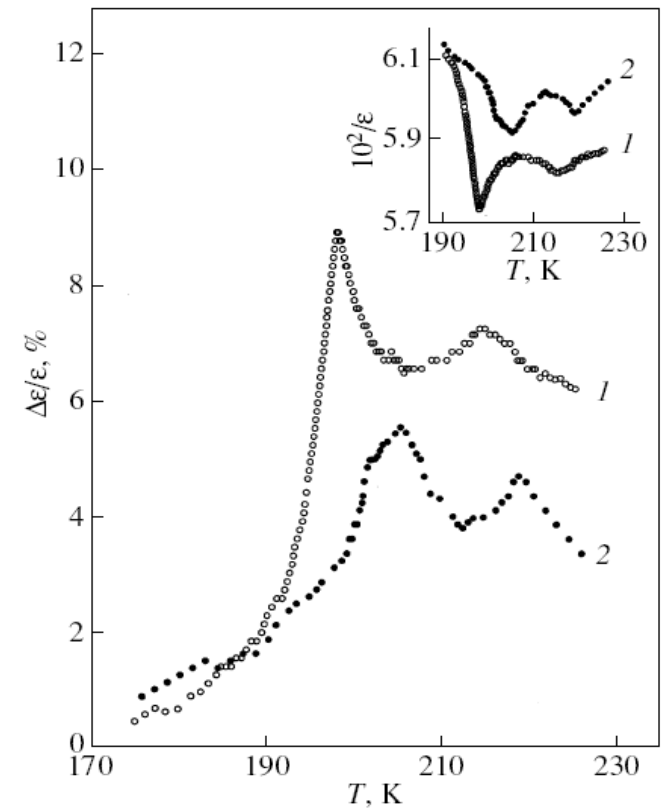
Залежність параметру c елементарної комірки кристалів TlGaSe_2 : 1 – політип C ; 2 – політип $2C$

Рентгеноструктурні дослідження фазових перетворень у шаруватих напівпровідниках

Виявлено істотний вплив політипії на зміни з температурою структури кристалічної ґратки напівпровідника-сегнетоелектрика TlGaSe_2 . Зокрема, встановлено, що у С-політипі кристалів TlGaSe_2 спостерігається два фазових переходи: перший при температурі $T=108\text{K}$, який є слабо вираженим фазовим переходом I роду, і другий при температурі $T=119\text{K}$ – фазовий перехід II роду.

За результатами досліджень діелектричної проникності встановлено, що кристали С-політипу $\beta\text{-TlInS}_2$ належать до невластних сегнетоелектриків з неспіврозмірною фазою, у яких сегнетоелектричний фазовий перехід першого роду відбувається при температурі $T=197\text{K}$ і супроводжується збільшенням елементарної комірки у чотири рази вздовж осі С, тоді як у кристалах 2С-політипу $\beta\text{-TlInS}_2$ сегнетоелектричний фазовий перехід відбувається при температурі $T=202\text{K}$ і не супроводжується мультиплікацією елементарної комірки вздовж осі С. Для кристалів цього політипу окрім фазового переходу до неспіврозмірної фази при температурі $T=219\text{K}$ зареєстровано додатковий фазовий перехід при температурі $T=206\text{K}$.

У кристалах TlGaSe_2 виявлено вплив політипії не тільки на температурне положення сегнетоелектричного ФП, але й на механізм виникнення полярного стану, а саме – у політипі С- TlGaSe_2 сегнетоелектричний ФП є невластним і відбувається при температурі $T_c=108\text{K}$, а в кристалах 2С- TlGaSe_2 такий ФП є власним і відбувається при більш високій температурі $T_c=111\text{K}$.



Температурна залежність діелектричної проникності кристалів TlInS_2 : 1 – політип С; 2 – політип 2С

Рентгеноструктурні дослідження фазових перетворень у шаруватих напівпровідниках

Дослідження за даною тематикою виконуються у співдружності з викладачами кафедри фізики Національного транспортного університету професором, д. ф.-м. н. Гололобовим Ю.П. доц. Іщенко Р.М. та доц. Ісаєнко Г.Л. Серед публікацій можна відзначити наступні:

- Borovoi N. A., Gololobov Yu. P., Nikolaienko A.V., Zloi O.S., Isaiev M. V. The effect of X-ray irradiation on formation and decay of the incommensurate phase in TlInS₂ crystals. // *Physica Status Solidi basic res.*, 2017, vol. 254, № 4, P.1600340 (1-5).
- Боровий М.О., Николаєнко А.В., Гололобов Ю.П. Рентгенівська дилатометрія С та 2С політипів сегнетоелектрика TlInS₂ в діапазоні температур 180 К – 300 К. // *Вісник Київського національного. Серія фізико-математичні науки*, 2017, вип. 1, с. 137-140.
- Borovoi N. A., Gololobov Yu. P., Salnic A.V. The incommensurate phase transformation in TlInS₂ ferroelectric. // *Ferroelectrics*, 2015, vol. 484, p. 62–68.
- N.Borovoy, Yu. N. Borovoy, Yu. Gololobov, G. Isaenko, A. Salnic. On features of crystal structure of semiconductor-ferroelectric Ag₃AsS₃. // *Semiconductor physics, quantum electronics and optoelectronics*. – 2013. - V. 13, № 3, pp. 292 – 295 .
- Borovoi N. A., Gololobov Yu. P., A.N. Gorb, Isaenko G. L. Specific features of the formation of the ferroelectric phase in polytypes of TlGaSe₂ crystals. // *Physics of the Solid State*. – 2010. – Vol. 21, №8. – P. 1731–1735
- Gololobov Yu. P., Borovoy N. A., Isayenko G. L., Polovina A. I. Ferroelectric phases in the polytypes of TlInS₂ ternary compound // *Phys. Status Solidi* – 2009. – Vol.C 6, №5. – P. 989–992.
- Borovoi N. A., Gololobov Yu. P., Isaenko G. L., Stepanishchev N. B. Influence of Polytypism on Structural Phase Transformations in TlGaSe₂ Crystals // *Physics of the Solid State*. – 2009. – Vol.51, №11. – P. 2367–2370.
- Н.А.Боровой, Ю.П.Гололобов, А.Н.Горб, Г.Л.Исаенко. О сегнетоэлектрическом фазовом переходе в поли типах кристаллов β-TlInS₂. // *Физика твердого тела*. – 2008. – Т.50, вып.10. – С.1866 – 1870.
- Н.А.Боровой, Ю.П.Гололобов, Г.Л.Исаенко, Н.Б.Степанищев. Особенности фазовых превращений поли типов моноклинной модификации TlInS₂. // *Неорганические материалы*. – 2008. – Т.44, №12. – С.1-6.

Захищено дисертації на здобуття вченого ступеню кандидата фізико-математичних наук: Николаєнко А.В. Вплив опромінення на трансформацію модульованих структур у потрійних халькогенідних сегнетоелектриках", 2018, науковий керівник – проф. Боровий М.О., Ісаєнко Г.Л. Фазові перетворення в політипах халькогенідних сегнетоелектриків-напівпровідників з неспівмірними фазами, 2012, наукові керівники – проф. Боровий М.О., проф. Гололобов Ю.П.

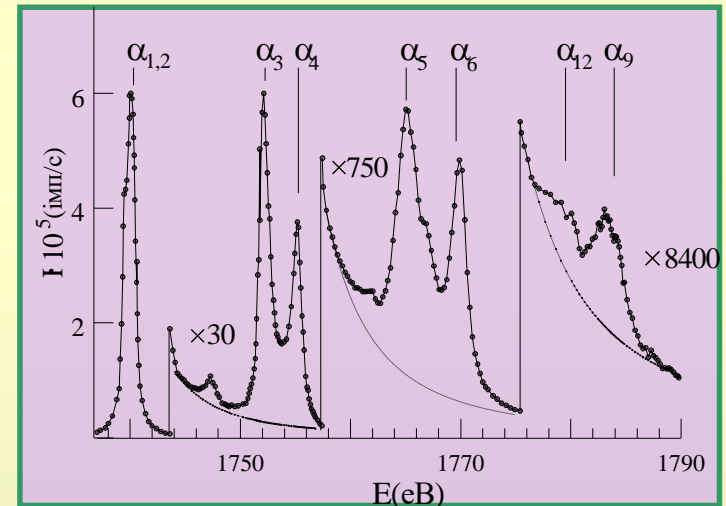
2. Рентгенівська емісійна спектроскопія кратноіонізованих атомів у твердих тілах

Рентгеноспектральні дослідження на кафедрі загальної фізики були започатковані на початку 60-х років минулого сторіччя у роботах доктора фіз.-мат. наук, професора Жмудського О.З. В той період основна увага була сконцентрована на експериментальних дослідженнях процесів кратної іонізації глибоких електронних оболонок атомів 3p та 3d-елементів за умови електронного бомбардування та при фотопоглинанні. У роботах 70-80х років минулого сторіччя було встановлено ряд фундаментальних закономірностей процесів кратної іонізації атома, зокрема:

Основним механізмом двократної KL-іонізації атома є процес “shake-off” – викид L електрона при швидкій зміні самоузгодженого поля атома (Суржко В.Ф., Жмудський А.З., Шияновський В.І.,)

Біляпорогова KL-фотоіонізація атома біля енергетичного порогу є суттєво багатоелектронним процесом, при якому визначальну роль відіграє перебудова електронних оболонок у полі утворених внутрішніх вакансій (Шияновський В.І., Суржко В.Ф., Боровий М.О.,)

Відносна інтенсивність рентгенівських емісійних $K\alpha_{3,4}$ -сателітів 3p-елементів суттєво залежить від ефективного заряду атома у твердому тілі, що дозволило створити дієву рентгеноспектральну методику визначення такого параметру (Жмудський А.З., Шияновський В.І., Суржко В.Ф., Боровий М.О.,)



Рентгенівський емісійний $K\alpha$ -спектр Si:

$K\alpha_{1,2}$ – переходи $K - L_{2,3}$; $K\alpha_{3,4}$ – переходи $KL_{2,3} - L_{2,3}^2$
 $K\alpha_{5-8}$ – переходи $KL_{2,3}^2 - L_{2,3}^3$; $K\alpha_{9-12}$ – переходи $KL_{2,3}^3 - L_{2,3}^4$

Рентгенівська емісійна спектроскопія кратноіонізованих атомів у твердих тілах

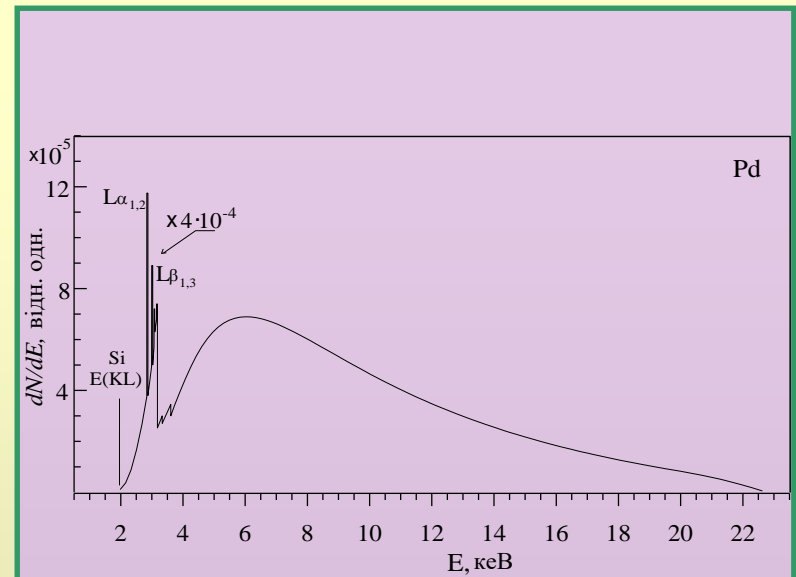
У подальшому було виконано цикл експериментальних та теоретичних досліджень параметрів рентгенівської L-емісії 4d-металів Y, Zr, Mb, Mo, Pd, Ro, Ag, Sn. Встановлено, що за відносними інтенсивностями ліній L-спектру можна визначати ряд важливих характерних параметрів атома: перерізи іонізації електронних оболонок, ширини рівнів, імовірності безрадіаційних переходів тощо (Жмудський А.З., Шияновський В.І., Мусатенко Л.А., Боровий М.О.)

Рентгеноспектральні дослідження процесів кратної іонізації атомів активно виконуються на кафедрі протягом останніх 10 років. За цей час:

Для практичного використання у рентгенівському аналізі запропоновано метод розрахунку спектральних розподілів характеристичного та гальмівного випромінювання на виході основних типів рентгенівських трубок (Боровий М.О., Шияновський В.І.)

Виконано цикл експериментальних досліджень KL-іонізації атомів Zr та 3d-елементів при біляпороговій іонізації електронним ударом. Виявлено принципову відмінність характеру процесів KL-іонізації біля порогу при фотопоглинанні та електронному ударі, зумовлену значним внеском електронного обміну при іонізації електронами (Боровий М.О., Шияновський В.І.).

Розвинуто методику порівняльної електрон-фотонної рентгенівської емісійної спектроскопії біляпорогової кратної іонізації атомів (Шияновський В.І., Боровий М.О.,)



Функція розподілу фотонів за енергіями змішаного рентгенівського випромінювання на виході віконця трубки БХВ-12, анод, напруга 23 кВ

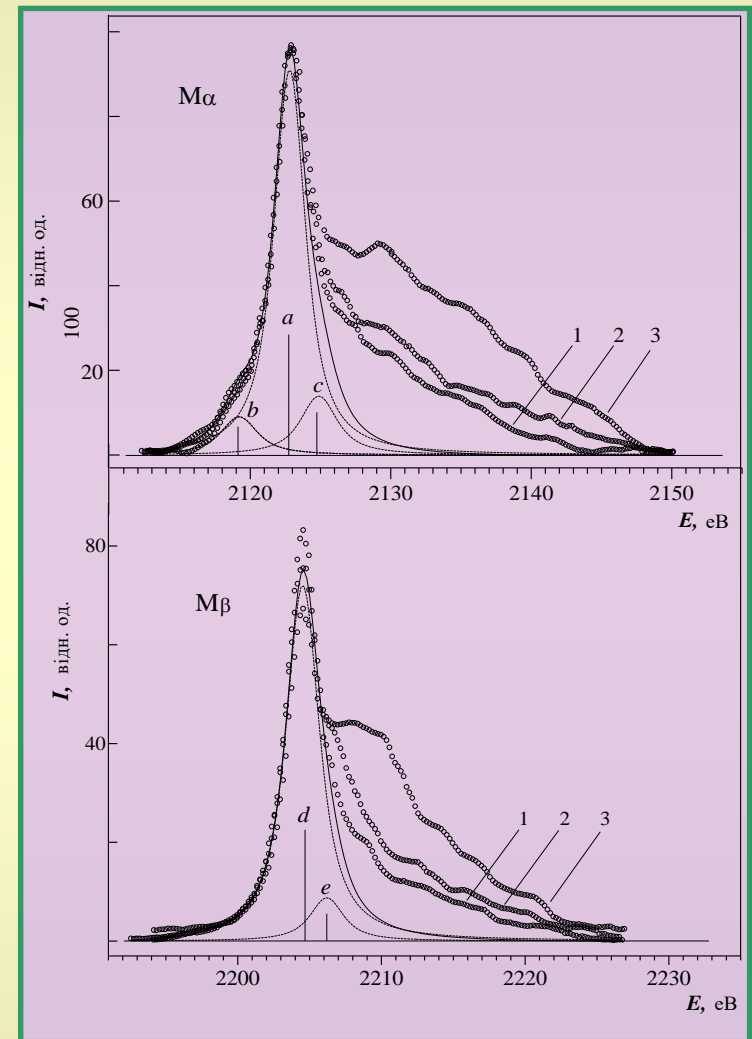
Рентгенівська емісійна спектроскопія кратноіонізованих атомів у твердих тілах

Розроблено теоретичну модель рентгенівської L та M-емісії важких металів $Z > 70$, яка враховує каскадний характер міграції вакансій у глибоких електронних оболонках атомів за рахунок процесів “shake-off”, Оже та Костера-Кроніга (Боровий М.О., Шияновський В.І., Іщенко Р.М.)

Запропоновано рентгеноспектральний метод визначення перерізів іонізації L-під-оболонки атомів важких елементів $Z > 70$ електронним ударом (Боровий М.О., Іщенко Р.М.)

Виконано цикл рентгеноспектральних досліджень радіаційного Оже-ефекту (RAE) K-LL, K-LM та K-MM типів у металах Cr, Fe, Co, Ni та Cu. Встановлено спектральне положення та відносну інтенсивність основних компонентів RAE-спектрів, з'ясовано механізм RAE (Іщенко Р.М., Боровий М.О.)

Рентгеноспектральні дослідження процесів кратноїонізації внутрішніх електронних оболонок дають важливу інформацію про характер багатоелектронних процесів в атомі при взаємодії з іонізуючими частинками (фотонами, електронами), яка є необхідною для подальшого розвитку сучасної теорії багаточастинкових процесів.



$M\alpha$ та $M\beta$ -спектри Au при збудженні $K\alpha$ -випроміненням: 1 – Cr; 2 – Cu; 3 – Mo

Рентгенівська емісійна спектроскопія кратноіонізованих атомів у твердих тілах

У практичному плані такі рентгеноспектральні дослідження накопичують та систематизують значний експериментальний матеріал про параметри чисельних недіаграмних ліній рентгенівських спектрів, необхідний для підвищення точності рентгенівського елементного аналізу і створення нових методів дослідження електронної структури твердих тіл.

Основні результати досліджень опубліковано більш ніж у 80 статтях у провідних вітчизняних та закордонних наукових журналах, по ним зроблено понад 100 доповідей на Всесоюзних (за часів СРСР) та міжнародних наукових конференціях. Зокрема:

- ❖ M.O. Borovyi, Yu.P. Gololobov. The near-threshold KL-ionization of Al metal atoms under electron bombardment.// *Metallophysics and Advanced Technologies*. – 2019. – Vol.41, №11. – P. 1407–1416.
- ❖ Боровий М.О., Аль-Омари М. А. М. Вплив зарядового стану атома на інтенсивність рентгенівської $K\alpha L^1$ - емісії Ti та Cr.// *Металлофизика. Новейшие технологии*. 2018, т. 40, № 3, с. 281—289.
- ❖ N. Borovoy, R.M. Ishchenko. Ionization of *M* subshells of Pb atoms by electron impact in an energy range of 5–30 keV.// *Optics and Spectroscopy*. – 2013. - V. 114, N1, pp. 1-6.
- ❖ N. Borovoy, R.M. Ishchenko. Cascade model of X-ray M emission for the atoms of heavy metals.// *Function Materials*. – 2012. - V.19, N1, pp.102 – 107.
- ❖ Borovoy N. A. $M\alpha$ and $M\beta$ X-Ray Emission Spectra of Au Atoms upon Photoionization of L Subshells // *Optics and Spectroscopy*. – 2009. – Vol.107, №1. – P.
- ❖ Н.А.Боровой. Рентгеновские эмиссионные $M\alpha$ - и $M\beta$ - спектры высокого разрешения атомов Bi. // *Оптика и спектроскопия*. – 2008. – Т. 104, №5. – С.777– 783.
- ❖ Шияновский В.И. Встряска и прямые соударения в атомах при фотоионизации β -распаде и ионизации электронным ударом // *ЖЭТФ*. – 1989 – Т. 95, №2, - С. 467 - 474.
- ❖ Боровой Н.А., Жмудский А.З., Мусатенко Л.А., Шияновский В.И. Определение сечений фотоионизаций L-подоболочек олова и палладия // *Оптика и спектроскопия*. – 1981., – Т. 51, Вып. 3, С. 428 - 432.