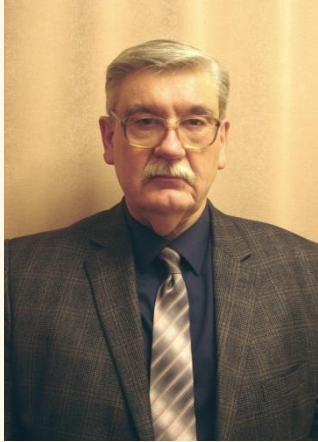


Фазові перетворення в шаруватих напівпровідниках-діелектриках



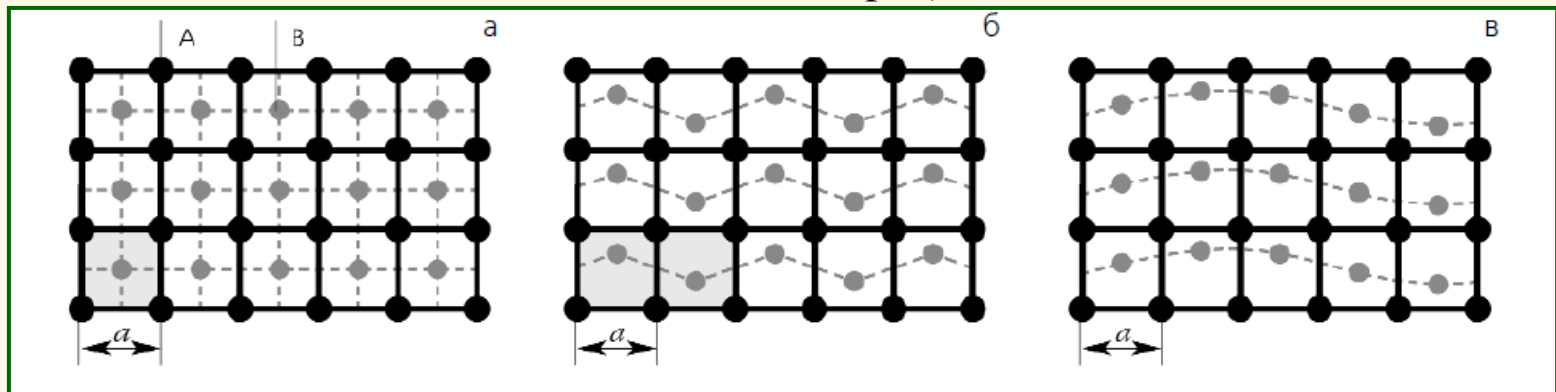
Боровий М.О., проф.,
науковий керівник

Об'єкти – шаруваті напівпровідники-сегнетоелектрики TlInS_2 , TlGaSe_2 , $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{Se}$, $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$, група A_2BX_4 ; $\text{A}=\text{KRbCs}$; $\text{B}=\text{NH}_4$, $\text{N}(\text{CH}_3)$; $\text{X}=\text{Cl}$, Br , F

Явище – виникнення і розпад модульованих структур в кристалах

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

n -раціональне **Співмірна фаза**
 n -іраціональне **Неспівмірна фаза**



СФ

НФ

Метод – дифракція рентгенівських променів

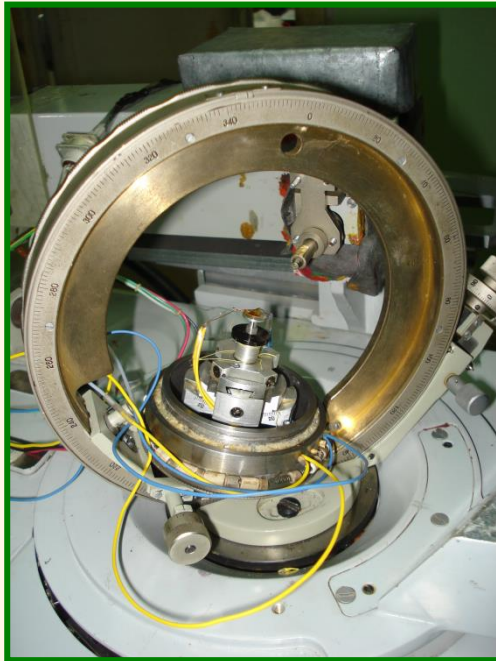
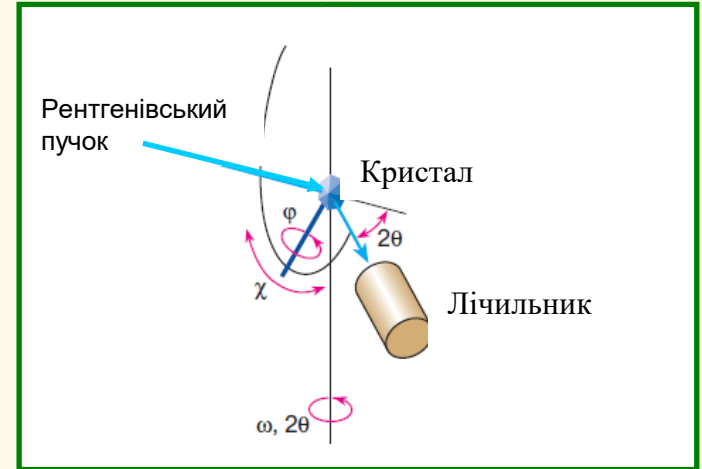
Умови максимумів інтерференції

Рівняння Лауе:

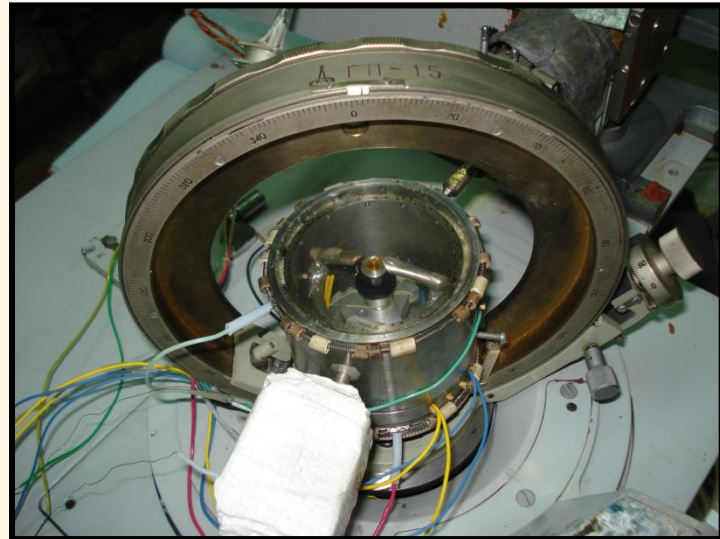
$$\begin{cases} \cos \varphi - \cos \varphi_0 = n\lambda \\ \cos \chi - \cos \chi_0 = m\lambda \\ \cos \psi - \cos \psi_0 = k\lambda \end{cases}$$

Рівняння Бреггів:

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

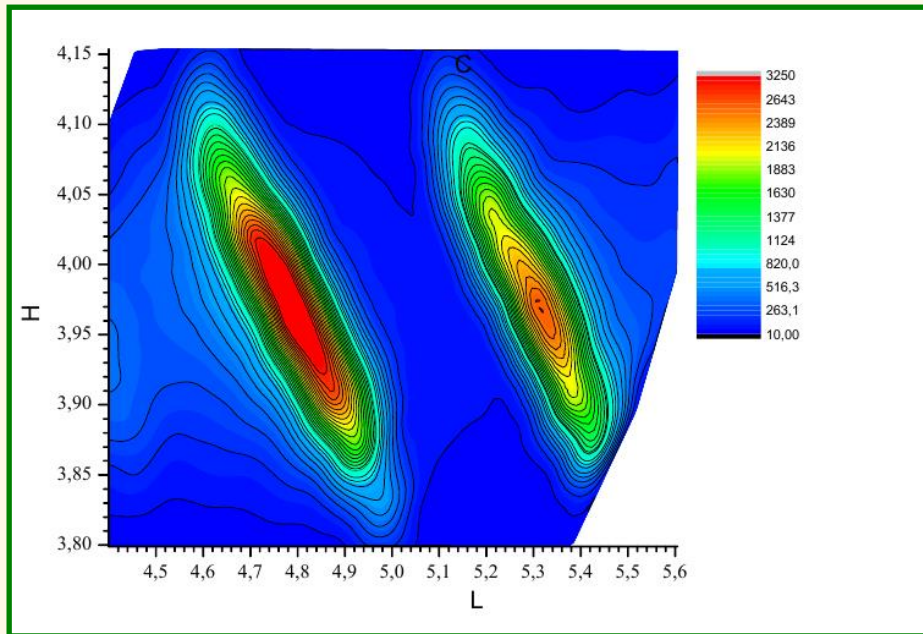


Чотириколовий гоніометр

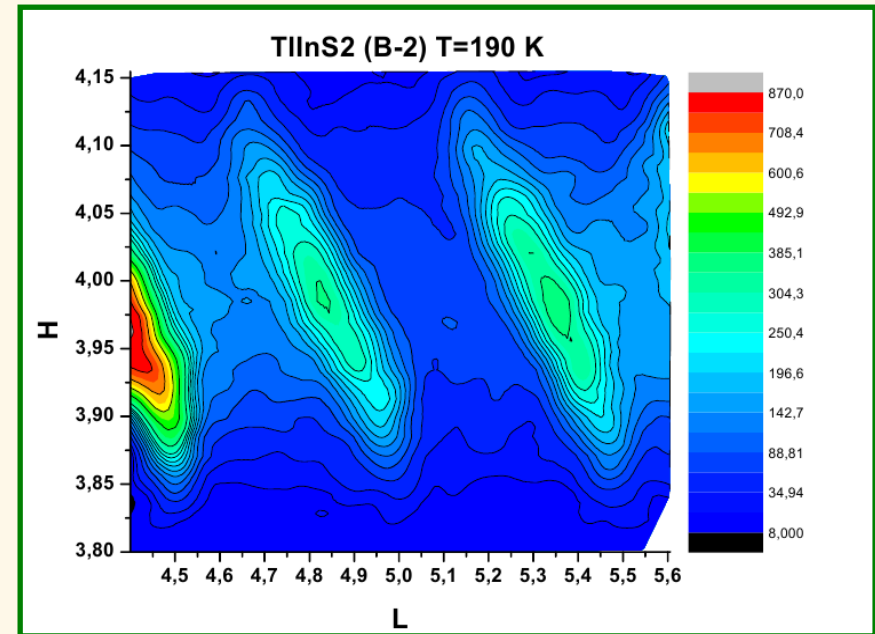


Чотириколовий гоніометр разом з системою охолодження та термостабілізації зразка

Рентгенівські сателіти неспівмірної фази у кристалах $TlInS_2$



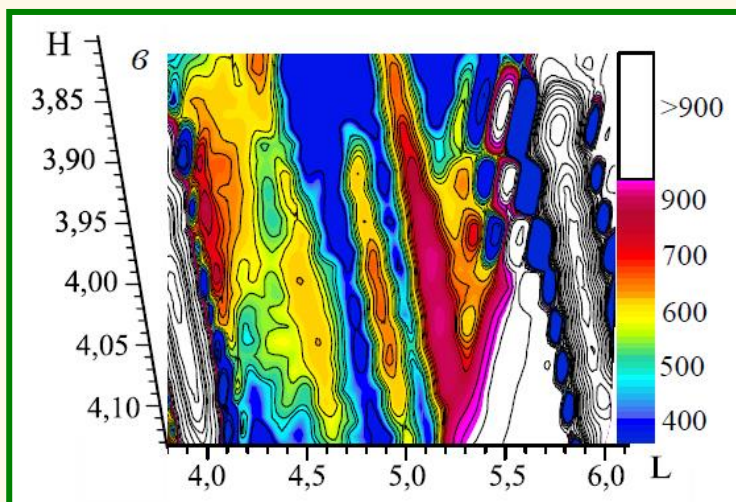
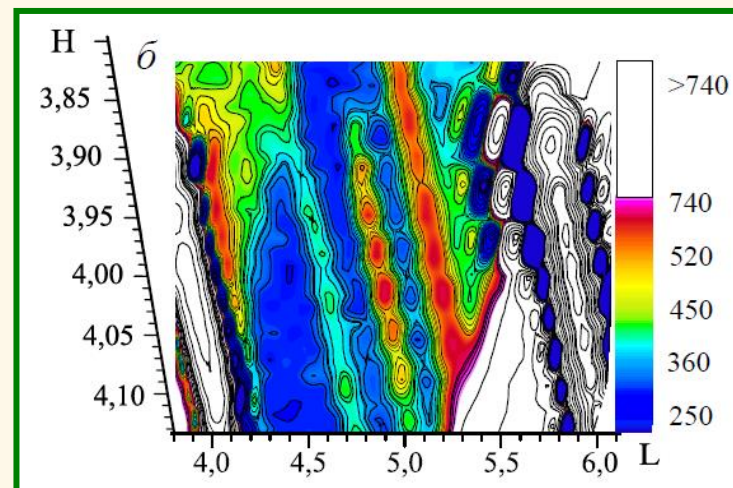
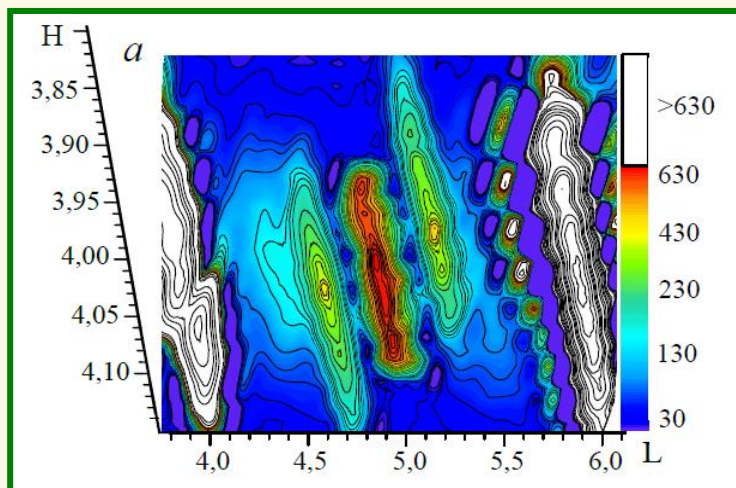
$T=205\text{ K}$ – висока інтенсивність сателітів - існування НФ-фази



$T=190\text{ K}$ – зменшення інтенсивності сателітів - розпад НФ-фази

Встановлено, що низькотемпературна рентгенівська дифракція дозволяє спостерігати та досліджувати особливі структурні максимуми, що відповідають модульованим структурам у кристалах $TlInS_2$

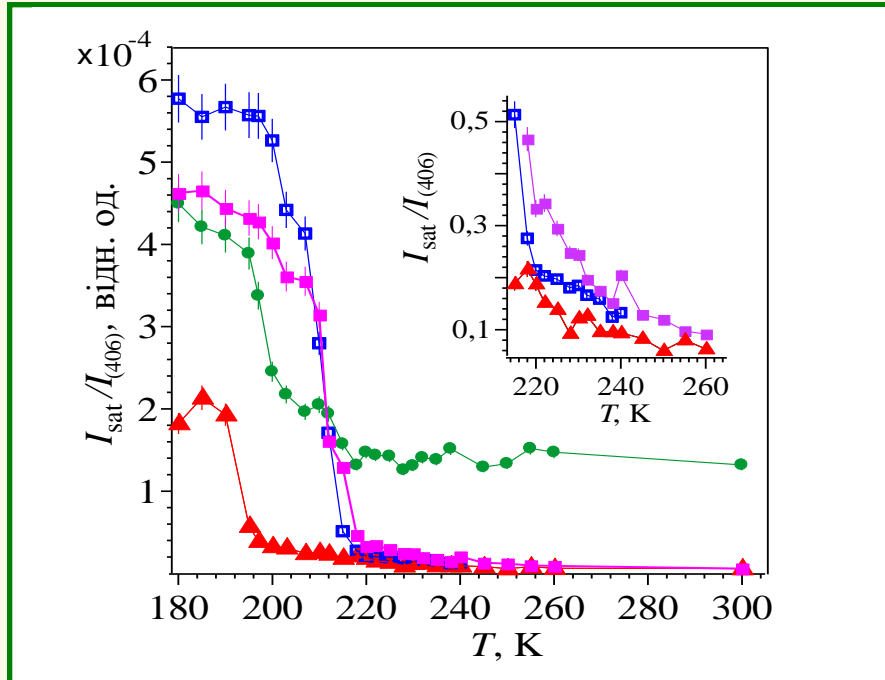
Вплив рентгенівського опромінення на характеристики модульованих структур у кристалах $TlInS_2$



- Показано, що рентгенівське опромінення суттєво впливає на форму та відносну інтенсивність модуляційних сателітів НФ у кристалах C політипу $TlInS_2$.
- Зроблено висновок, що зміни форми модуляційних сателітів відображують формування декількох хвиль статичних атомних зміщень з різними значеннями параметра неспівмірності у діапазоні $\delta = 0,02 - 0,17$.

2D-розподіли інтенсивності для $C-TlInS_2$ поблизу брегівських рефлексів 404, 405 та 406: *a* – неопромінений зразок при $T = 210$ К, *б* – опромінений зразок $D = 2,9$ кГр при $T = 300$ К, *в* – опромінений зразок $D = 2,9$ кГр при $T = 210$ К

Вплив рентгенівського опромінення на характеристики модульованих структур у кристалах TlInS_2

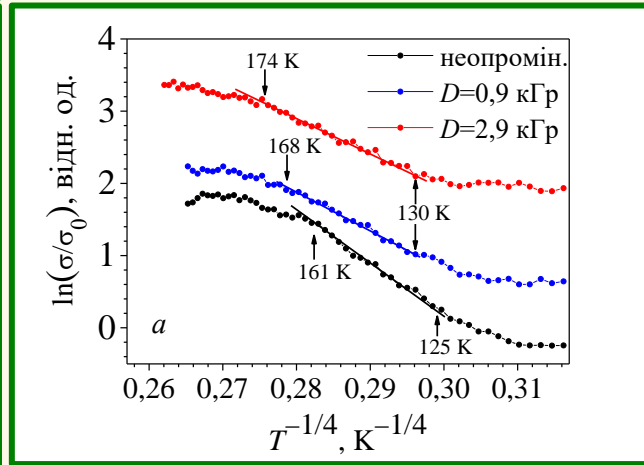
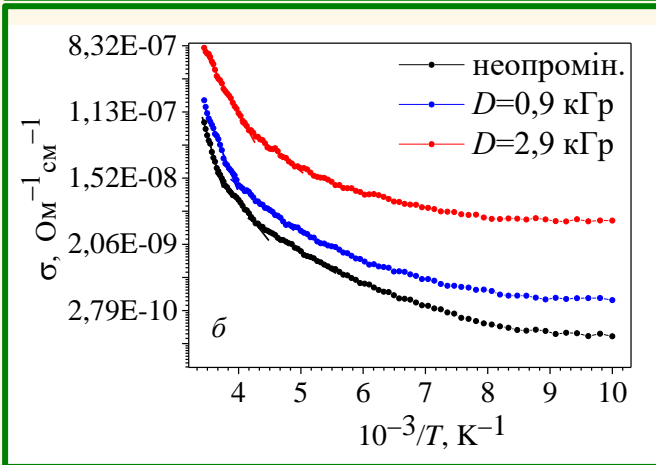
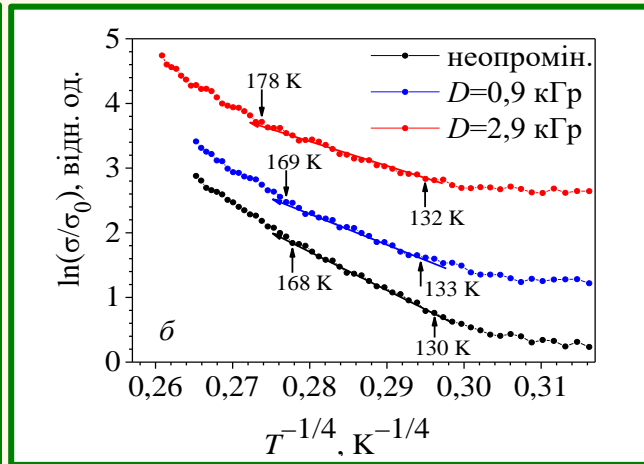
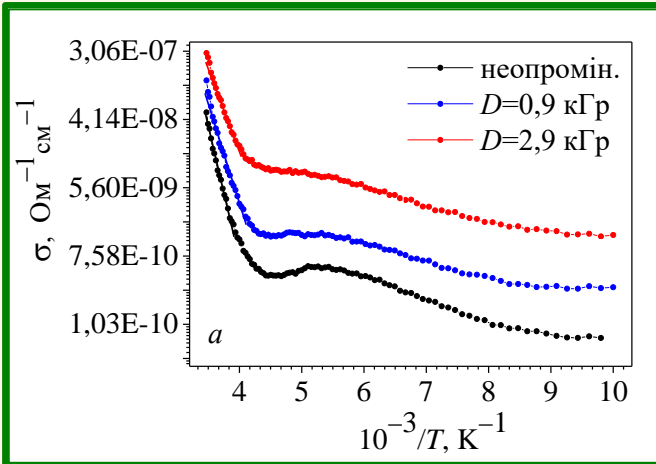


Температурна залежність відносної інтенсивності I_{sat}/I_{405} для політипу $C\text{-TlInS}_2$:

- неопромінений зразок;
- опроміненний зразок (0,9 кГр);
- опроміненний зразок (2,9 кГр);
- відпалений зразок

- Виявлено, що у температурній області існування СФ значення відносної інтенсивності $I_{\text{sat}}/I_{(406)}$ зменшується при збільшенні поглиненої дози.
- Встановлено, що ізотермічний відпал опромінених зразків при температурі 430 К протягом 10 годин спричиняє руйнування НФ, яка спостерігалася при кімнатній температурі. Це зумовлено розпадом комплексів та сегрегацій дефектів, а також частковою тепловою рекомбінацією точкових дефектів та виходом їх на стоки.
- Запропоновано модель формування НФ в опромінених кристалах C політипу TlInS_2 . Модель передбачає, що при певній критичній концентрації радіаційно-стимульованих дефектів відбувається утворення хвиль густини дефектів, які індукують хвилі зв'язаних з ними статичних атомних зміщень.

Вплив рентгенівського опромінення на провідність С- та 2С політипів TlInS_2



- Виявлено зростання електропровідності кристалів обох політипів при збільшенні поглиненої дози опромінення у порівнянні з неопроміненними зразками.

- Запропоновано модель аномального зростання провідності, яка враховує неспівмірне збурення кристалічного потенціалу при утворенні хвилі неспівмірних статичних атомних зміщень у НФ.

Температурна залежність електропровідності кристалів TlInS_2 в інтервалі температур 100 К – 300 К:
a – політип *C*, *б* – політип *2C*

Відносна електропровідність кристалів TlInS_2 як функція $T^{-1/4}$
a – політип *C*, *б* – політип *2C*

Деякі публікації за напрямом

- Mykola Borovyi, Yurii P. Gololobov, Karyna Isaieva, Mykola Isaiev. The Effect of X-Ray Irradiation on Conductivity of C and 2 C Polytype TlInS₂ Ferroelectrics. *Physica status solidi (b)*, 2021, 258(5), 202000556.
- 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 (b)*, 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 університету. 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. Isaienko, A. Salnik. On features of crystal structure of semiconductor-ferroelectric Ag₃AsS₃. // *Semiconductor physics, quantum electronics and optoelectronics*. – 2013. - V. 13, № 3, pp. 292 – 295 .