

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ НА ТОНКУ СТРУКТУРУ КДС

Андрєєва О.М.¹, Брауде И.С.², Мамалуй А.О.¹

1. Національний технічний університет „Харківський політехнічний інститут”, м. Харків

2. Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна, м. Харків

Робота присвячена подальшим дослідженням впливу точкових дефектів на структуру квазідвовимірних монокристалів.

Об'єктом дослідження були квазідвовимірні монокристали $2H - NbSe_2$. Зразки підлягали ступеневій ізотермічній витримці в межах температур $T \leq 463$ К. При цьому у системі КДС відбувалась дегазація атомів селену. Котра призводить до значних зсувів атомів зі своїх первинних положень.

У ході рентгеноструктурних досліджень, а саме при порівнянні дифрактограмм від зразків після різних етапів термообробки було виявлено, що зі зміною температури змінюється положення дифракційних максимумів. Було проведено аналіз отриманих експериментальних даних з теоретичними який показав, що відпал при $T = 453$ К приводить до переходу $2H - NbSe_2$ в $4H - NbSe_2$ -х можливо через фазу $3R - NbSe_2$. При температурі 463 К через дефіцит селену фаза $4H - NbSe_2$ -х встановлюється остаточно. Отже в наслідок термообробки утворюється значна кількість точкових дефектів, які викликають зсув атомів зі своїх первинних положень, внаслідок чого відбувається перебудова елементарної ґратки та зміна політипу кристалу.

Для визначення величини статичних зсувів атомів була створена комп'ютерна модель, яка дозволяє визначати не лише величину самих зсувів, але й оцінити кількість одиночних дефектів за умови, що вони розташовуються рівномірно.

За результатами моделювання було встановлено, що для всіх досліджуваних зразків характерне зростання величини статичних зсувів атомів як уздовж, так і поперек шарів у міру збільшення концентрації вакансій. Також був проведено аналіз розподілу зсувів по глибині кристала. Встановлено, що величина статичних зсувів при поглибленні в кристал зменшується для двох етапів термообробки. Для третього етапу термообробки величина статичних зсувів збільшується при заглибленні в кристал. Передбачається, що дана аномалія може бути викликана перебудовою кристалічної структури, тобто зміною політипу кристала.

Вперше встановлено, що при тривалій високотемпературній обробці відбувається фазовий перехід: зміна політипу кристалу, що обумовлено наявністю значної кількості вакансій селену.