

СЕКЦІЯ 7. КОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ У ФІЗИКО – ТЕХНІЧНИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ

ФАЗОВИЙ ПЕРЕХОД, ЯК НАСЛІДОК ВПЛИВУ ВАКАНСІЙ В NbSe₂

Андрєєва О.М. *, Брауде І.С. **, Мамалуй А.О. *

* *Національний технічний університет*

«Харківський політехнічний інститут», м. Харків

** *Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН
України, м. Харків*

Роботу присвячено вивченню особливостей утворення і еволюції вакансій селену та більш детальному дослідженню впливу точкових дефектів на структуру НВС.

Об'єктом, що досліджується є квазідвовимірний монокристал 2H – NbSe₂ отриманий внаслідок хімічної газотранспортної реакції. Вихідна структура зразків має гексагональну симетрію, ґратка анізотропна з параметрами: $a = b = 3,445 \text{ \AA}$, $c = 12,54 \text{ \AA}$.

Зразки підлягали ступеневій послідовній термообробці за для утворення вакансій селену, потім проводилось відносно швидке гартування в спирт при кімнатній температурі, що дозволило зафіксувати розподіл вакансій.

Спираючись на данні по дослідженню величини полів напружень дефекту отриманих раніше виявлено наявність неоднорідності просторового розподілу вакансій по глибині кристалу.

Для детального вивчення особливостей розподілу вакансій за глибиною та вздовж шарів було створено програму, яка проводить розрахунку величини статичних зсувів атомів з своїх первинних положень.

Проведені розрахунки показали, що з ростом кількості вакансій величина статичних зсувів збільшується як вздовж так і поперек шарів. При цьому поперек шарів спостерігається анізотропія у розподілу вакансій. Припускається, що ця анізотропія призводить до перебудови кристалічної ґратки, з зміною політипу кристалу. Проведений раніше порівняльний аналіз структури елементарних комірок обох політипів 2H – NbSe₂ та 4H – NbSe_{2-x} показав, що 4H політипу притаманна орієнтація ніобієвих призм, котра повторюються через 2 шари, на відміну від 2H де призми ніобію повторюють свою орієнтацію через шар. Передбачається, що саме неоднорідний розподіл точкових дефектів вакансійного типу призводить до розвороту призм та утворенню нового політипу з поворотом призм та подвоєнням параметрів ґратки вздовж площини (ac).

Спираючись на отримані данні про особливості розподілу полів статичних зсувів атомів, та величини самих зсувів планується розробити модель фазового переходу.