

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

ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЯ ВАКАНСИЙ СЕЛЕНА НА СТРУКТУРУ КВАЗИДВУМЕРНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ $NbSe_2$

Андреева О.Н.* , Брауде И.С.** , Мамалуй А.А.*

* *Национальный технический университет*

«Харьковский политехнический институт»,

** *Физико-технический институт низких температур
им. Б.И. Веркина НАН Украины, г. Харьков*

Низкоразмерные системы являются модельными объектами для исследования явлений, присущих системам с пониженной размерностью, поскольку они обладают уникальными свойствами.

Известно, что существенное влияние на свойства НРС оказывают дефекты различного рода. Целью данной работы является детальное изучение особенностей образования, эволюции и поведения вакансий в НРС и их влияние на тонкую структуру исследуемых объектов.

Для прямого исследования точечных дефектов в квазидвумерных монокристаллах $NbSe_2$ в данной работе применялась методика измерения интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей. Установлено, что в результате высокотемпературной обработки в $NbSe_2$ образуются точечные дефекты вакансионного типа, которые располагаются по глубине кристалла неоднородно.

Анализ полей статических смещений показал, что ступенчатая термообработка приводит к трансформации дефектных состояний: моно и дивакансии селена группируются в коагуляты, причем, дефекты максимального размера наблюдаются, преимущественно, в глубине кристалла. Предполагается, что вакансии мигрируют как вдоль так и поперек слое. Сравнительный анализ дифрактограмм от образцов с различным дефектным состоянием, показал, что отжиг приводит к политипному превращению ($2H-NbSe_2$ переходит в $4H-NbSe_{2-x}$). В результате чего меняется элементарная ячейка кристалла за счет удвоения параметра решетки c и увеличения количества слоев.

В силу анизотропии кристаллической решетки, атомы поперек слоев смещаются более интенсивно, чем вдоль, что и приводит к неоднородным изменениям в кристаллической решетке в плоскостях (**ab**) и (**ac**).

Таким образом, анализ влияния отжига на тонкую структуру показал, что вакансии распределяются в кристалле не однородно, причем, значительная их концентрация ($C_v \sim 10\%$) приводит к фазовому переходу в $NbSe_2$.