

## **ВИНИКНЕННЯ ТА ТРАНСФОРМАЦІЯ НЕРОЗМІРНО МОДУЛЬОВАНОЇ СТРУКТУРИ В ПОЛІТИПАХ НАПІВПРОВІДНИКІВ $TlInS_2$**

*Боровий М.О.*, доктор фізико-математичних наук, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

*Гололобов Ю.П.*, доктор фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, Київ, Україна

*Исаєнко Г.Л.*, кандидат фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, Київ, Україна

*Николаєнко А.В.*, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

## **THE APPEARANCE AND TRANSFORMATION OF AN INCOMMENSURATE MODULATED STRUCTURE IN THE POLYTYPES OF SEMICONDUCTORS $TlInS_2$**

*Borovoy N.A.*, doctor of sciences, associate professor, Taras Shevchenko Kyiv National University, Kyiv, Ukraine

*Gololobov Yu.P.*, doctor of sciences, professor, National Transport University, Kyiv, Ukraine

*Isaienko G.L.*, Ph.D., National Transport University, Kyiv, Ukraine

*Nikolaienko A.V.*, Taras Shevchenko Kyiv National University, Kyiv, Ukraine

## **ВОЗНИКНОВЕНИЕ И ТРАНСФОРМАЦИЯ НЕРАЗМЕРНО МОДУЛИРОВАННОЙ СТРУКТУРЫ В ПОЛИТИПАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ $TlInS_2$**

*Боровой Н.А.*, доктор физико-математических наук, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

*Гололобов Ю.П.*, доктор физико-математических наук, Национальный транспортный университет, Киев, Украина

*Исаенко Г.Л.*, кандидат физико-математических наук, Национальный транспортный университет, Киев, Украина

*Николаенко А.В.*, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

### **Постановка проблеми.**

Кристали  $\beta$ - $TlInS_2$  проявляють сегнетоелектричні і напівпровідникові властивості та при нормальних умовах відносяться до просторової групи симетрії  $C2/c$  моноклінної сингонії [1]. Можливе практичне використання кристалів  $TlInS_2$  в оптоелектроніці стимулювало численні дослідження їх діелектричних, оптичних і пружних властивостей. Різноманітні аномалії фотопровідності, діелектричної сприйнятливості, швидкості поширення ультразвуку хвиль, теплоємності, що спостерігаються в інтервалі температур  $T=180\div 300$  К, свідчать про існування в  $TlInS_2$  низки температурних фазових переходів (див., наприклад, огляд [2]). Особливістю таких перетворень в  $TlInS_2$  є формування співрозмірно та неспіврозмірно модульованих структур. Незважаючи на значну кількість досліджень, дані про механізми і температури переходів парафаза - неспіврозмірна фаза ( $T_i$ ) і неспіврозмірна - співрозмірна фаза ( $T_c$ ), досить суперечливі [2]. У той же час, прямі структурні дослідження перетворень нерозмірної фази (НСФ) за допомогою ядерно магнітного резонансу (ЯМР), рентгенівської та нейтронної дифракції є досить неоднозначними.

Так, вперше сателіти, які свідчать про виникнення НСФ, спостерігалися в інтервалі температур  $T=200\div 216$  К і характеризувались вектором модуляції  $q(\delta, \delta, 0, 25)$  ( $\delta = 0.012$ ) [3], але подальші дослідження з використанням методу дифракції рентгенівських променів показали, що НСФ в діапазоні температур  $T=194\div 214$  К характеризуються вектором  $q(\mp\delta, 0, \pm 0.25)$  ( $\delta = 0.04$ ) [4]. Також повідомлялося про існування в температурному діапазоні  $T=196\div 214$  К сателітів з  $q(0, 0, 0.25 \pm \delta)$ , де параметр  $\delta = 0.08 - 0.12$  [5]. Нещодавно співрозмірна фаза (СФ) була зареєстрована за допомогою ЯМР в області температур  $T=192\div 205$  К [6]. У нашій попередній роботі [7] було показано,

що такі розбіжності можуть виникнути у зв'язку з політипією кристалів  $TlInS_2$ , принаймні для політипів  $C$  і  $2C$  (подвоєний параметр  $c$  елементарної комірки) температурні залежності діелектричної проникності в температурній області існування НСФ суттєво відрізняються.

Отже, рентгенівські дослідження динаміки трансформації НСФ для різних політипів кристалів  $TlInS_2$  є досить актуальним. У даній роботі перетворення НСФ в зразках політипів  $C$ - і  $2C$ - $TlInS_2$  вивчалися методом монокристалічної чотири колової дифракції рентгенівських променів в діапазоні температур  $T=185\div 300$  К.

Монокристалічні зразки  $\beta$ - $TlInS_2$  досліджувалися за допомогою рентгенівського дифрактометра ДРОН-4-07 з чотирьохколовою гоніометричною приставкою ГП-15. Для виділення  $Co$  і  $Ni$   $K\alpha$ -ліній використовували піролітичний графітовий монохроматор. Режим рентгенівські трубки БСВ-29 ( $Co$  і  $Ni$ ): напруга 35 кВ, струм 30 мА. Зразки  $TlInS_2$  встановлювалися на голівці в низькотемпературній камері та охолоджувалися в потоці газоподібного азоту. Температура підтримувалася з точністю до  $\pm 0,5$  К (з урахуванням можливих температурних градієнтів вздовж зразка) за допомогою регулятора температури ВРТ-2 [8]. Кристали були вирощені методом Бріджмена, розмір типових зразків становив  $7\times 5\times 1$  мм<sup>3</sup>. Пучок рентгенівських променів був направлений вздовж площин  $(001)$ . Сканування проводили з кроком  $\Delta\chi = 0.05 - 0.10^\circ$ ,  $\Delta(2\theta) = 0,03^\circ - 0,08^\circ$  (в залежності від області зворотного простору), а час накопичення в точці становив  $3\div 10$  с. Рентгенівське сканування зразків політипів  $C$ - і  $2C$ - $TlInS_2$  проводили в площинах зворотного простору  $(00l)^*$ ,  $(h0l)^*$  та  $(hhl)^*$  при охолодженні і наступному нагріванні в інтервалі температур  $T=185\div 300$  К. Час сканування в кожній фіксованій температурній точці становив  $t=20\div 30$  хвилин, тому як охолодження, так і нагрівання можна розглядати як квазістатичні процеси. Характерною особливістю кристалів  $TlInS_2$  є їх шарувата структура, у якій паралельні шари укладаються вздовж напрямку  $[001]$ . Структурною одиницею кожного шару є багатогранник  $In_4S_{10}$ , що в свою чергу, утворює чотири тетраедри  $InS_4$ . Суміжні шари розвернуті один відносно одного на  $90^\circ$  і утворюють тригональні призматичні порожнечі, в яких іони  $Tl^+$  розташовані вздовж  $[110]$  і  $[1\bar{1}0]$  (Рис.1).

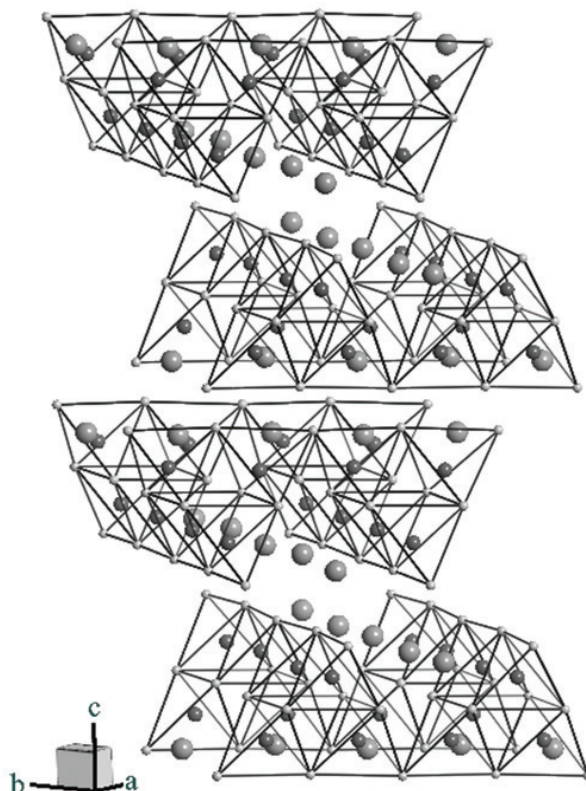


Рисунок 1 – Структура  $TlInS_2$ , атомні шари паралельні  $ab$  площині. Атоми зображено у вигляді кульок: найбільші –  $Tl$ , середні –  $In$ , найменші –  $S$

Ця особливість структури  $TlInS_2$  сприяє появі дефектів упаковки і двійників, що іноді може призвести до помилкової інтерпретації структурних даних [9]. Тому, при кімнатній температурі рентгеновське сканування проводилося для набору зразків  $TlInS_2$  в площинах зворотного простору  $(00l)^*$ ,  $(h0l)^*$  і  $(hhl)^*$ . Зразки були підібрані такі, що двійникування не спостерігалось. Досліджувалися кристали двох типів. Для першого (політипу С) спостерігалися сильні брегівські максимуми  $(0,0,l)$  і  $(h,0,l)$  з  $l=2n$ ,  $h=4n$  та  $(h,h,l)$  з  $h=2n$ ,  $l=n$ . Такі лінії характерні для політипу С з базоцентрованою елементарною коміркою з площиною ковзання  $c$  [10]. Інша картина спостерігалась для другої групи зразків  $TlInS_2$ , а саме, для всіх напрямків сканування на додаток до сильного відбивання, було зареєстровано інтенсивні сателіти з  $q(0,0,\pm 0.5)$ . Наприклад, на Рис.2 наведено 2D-розподіл інтенсивності для  $a^*-c^*$  площини зворотної решітки в області брегівських максимумів  $(4,0,4) - (4,0,6)$ , де сателіти добре видно. Наявність таких сателітів свідчить про подвоєння параметра елементарної комірки  $c$ , тобто, такі зразки належать до 2С-політипу  $TlInS_2$ . Параметр  $c$  елементарної комірки, отриманий з кутів максимуму типу  $(0,0,l)$ , становить  $c=15.16 \text{ \AA}$  (С-політип) і  $c=30.29 \text{ \AA}$  (2С-політип).

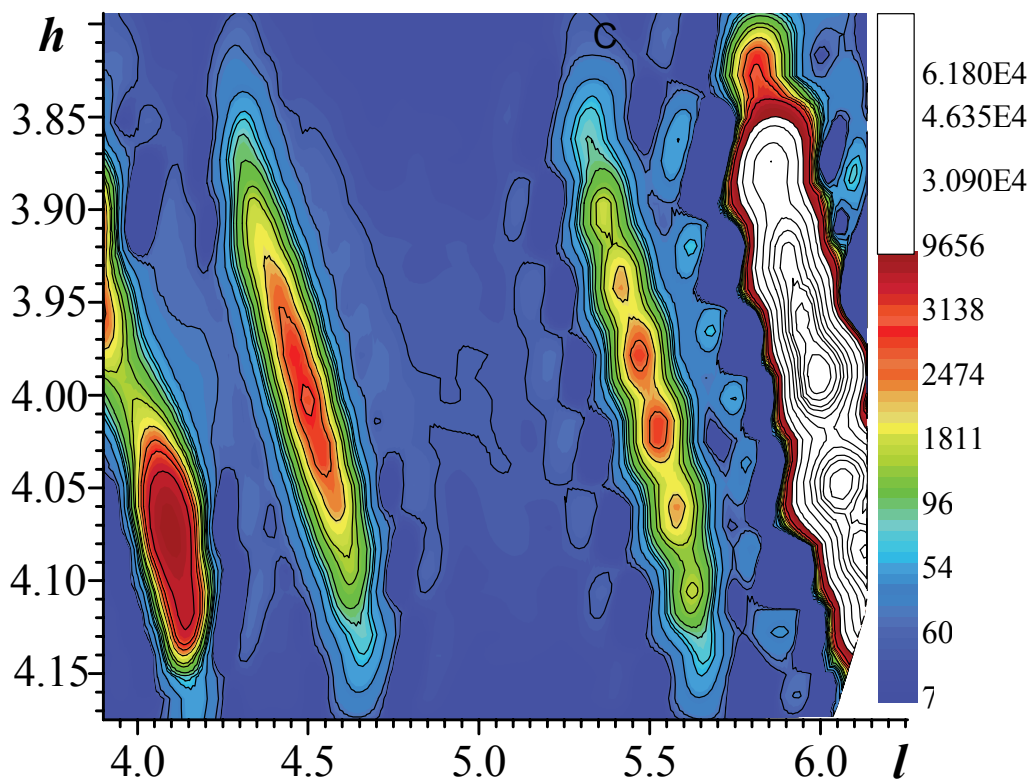


Рисунок 2 – 2D-розподіл інтенсивності для політипу 2С кристалу  $TlInS_2$  поблизу максимумів  $(4,0,4)$  та  $(4,0,6)$  при кімнатній температурі. Сателіти  $q(0,0,\pm 0.5)$  добре видно.

Було встановлено, що в площині  $(h0l)^*$  сателіти спостерігалися лише поблизу брегівських рефлексів з індексами  $h=4n$ ,  $l=2n+1$ . Сканування в площині  $(0kl)^*$  показало, що неспіврозмірні модуляції в напрямку  $b^*$  відсутні. В площинах  $(00l)^*$  та  $(hhl)^*$  сателіти СФ виявлено не було. При охолодженні зразків С-політипу  $TlInS_2$  сателіти НСФ виникають при температурі  $T_{il} \approx 238 \text{ K}$  в площині  $(h0l)^*$  як слабкі лінії з хвильовими векторами  $q(\mp \delta, 0, \pm 0.25)$  ( $\delta = 0.04$ ). На рис. За наведений типовий розподіл інтенсивності таких сателітів, що знімаються близько забороненого вузла  $(4,0,5)$ . Слід зазначити, що виміряні параметри сателітів НСФ в політипі С добре узгоджуються з даними [4].

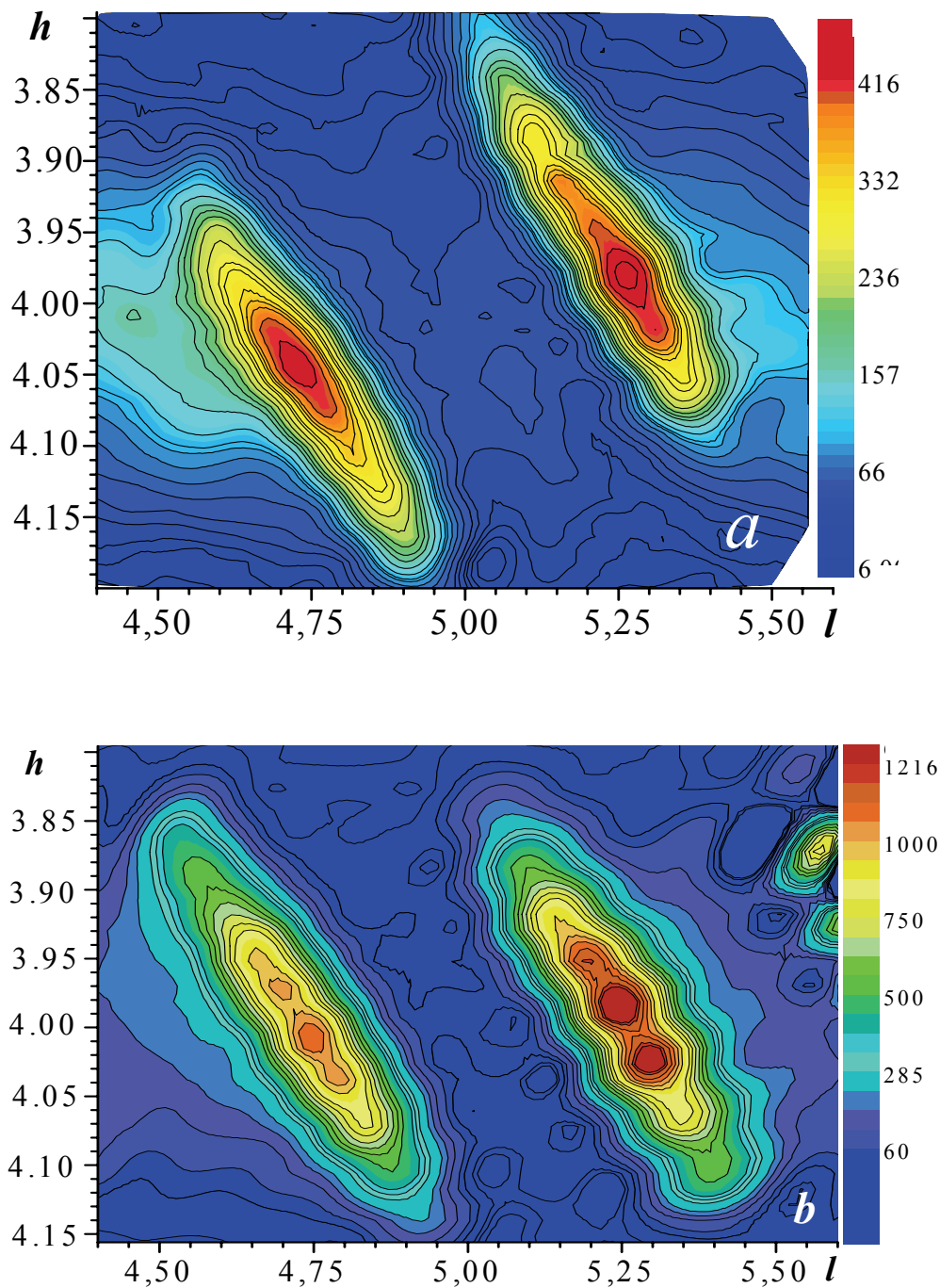


Рисунок 3 – 2D-розподіл інтенсивності для політупу C кристалу TIInS, близько вузла (4,0,5): а –  $T = 207$  K; б –  $T = 195$  K

Температурні залежності інтегральної інтенсивності  $I(T)$  сателіта з  $q(4 + \delta, 0, 4.75)$  наведено на рис. 4. Як видно, при охолодженні від температури  $T \approx 238$  K до  $T \approx 218$  K інтенсивність сателіта ( $I$ ) повільно зростає, в подальшому в діапазоні температур від  $T = 218 \div 213$  K збільшення  $I$  було значно вираженим, а при подальшому охолодженні нижче  $T \approx 213$  K інтенсивність різко зростає, а в інтервалі  $T = 185 \div 196$  K величина  $I$  залишається сталою. Суттєві зміни на температурних залежностях інтенсивності сателіта  $I(T)$  при температурах  $T \approx 213$  K і  $T \approx 196$  K узгоджуються з відомими даними про фазові переходи в TIInS<sub>2</sub>: парафаза - нерозмірна фаза при  $T_i = 214$  K і нерозмірна - співрозмірна фаза при  $T_c = 197$  K [4,7]. Слід зазначити, що при нагріванні на залежності  $I(T)$  в безпосередній близькості від температури  $T_c$  було виявлено незначний температурний гістерезис.

Цікавим, на наш погляд, є виявлення при температурах вищих за температуру фазового переходу парафаза - нерозмірна фаза ( $T_i=214$  К) сателітів НСФ, що свідчить про початок формування нерозмірної фази при значно вищій температурі  $T_{il} \approx 238$  К (див. вставку на Рис.4). Відомо, що перехід парафаза - неспіврозмірна фаза пов'язаний з "заморожуванням" м'якої моди, так що при  $T \rightarrow T_i$  частота м'якою моди ( $\omega_s$ ) різко знижується [11]. В  $\text{TlInS}_2$  зниження  $\omega_s$  в безпосередній близькості від  $T_i$  дуже чутливе до наявності домішок, зокрема, наявність 1% домішок Fe призводить до зміщення температури  $T_i$  на 9 К [12]. Ми припускаємо, що слабкі сателіти неспіврозмірної фази при температурах  $T_{il} > T_i$  також можуть бути пов'язані з перекручуванням м'якої моди в локальних областях кристала, які містять структурні дефекти (точкові дефекти, домішкові атоми, дефекти упаковки). Якщо це припущення вірне, отримані результати можуть свідчити про те, що типовий фазовий перехід типу зміщення в кристалах з дефектами може бути пов'язаний з механізмом фазового зародження і росту.

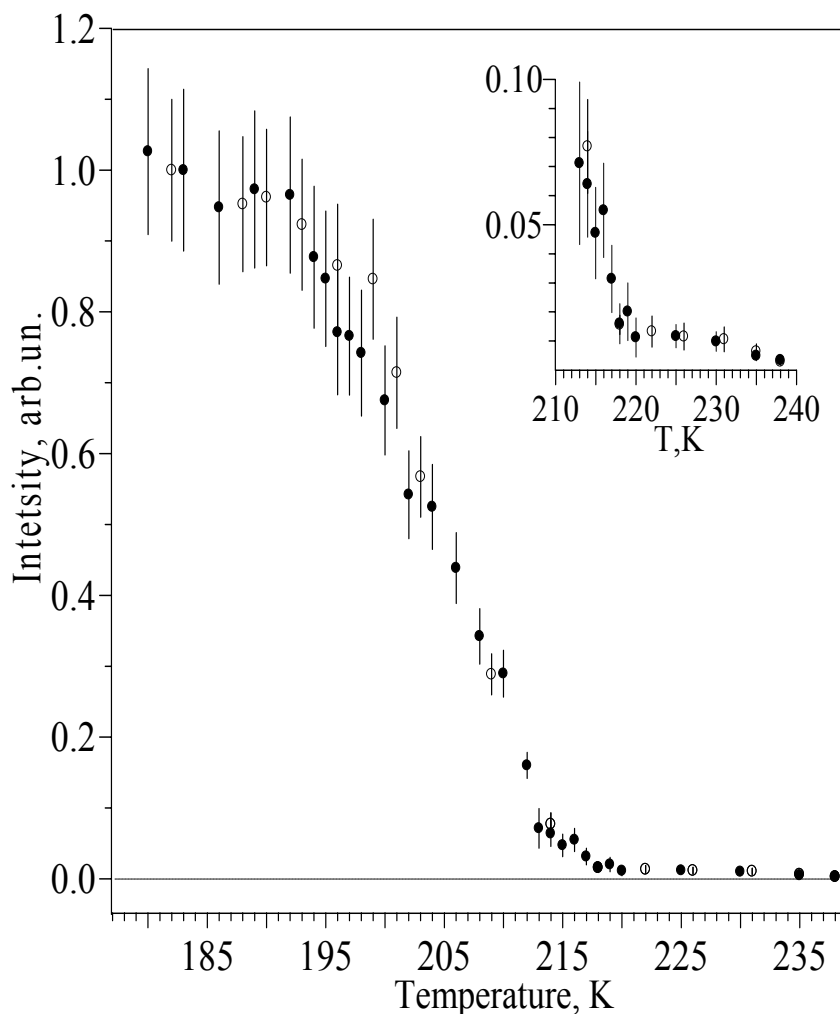


Рисунок 4 – Температурна залежність інтегральної інтенсивності сателіта з хвильовим вектором  $q(4 + \delta, 0, 4.75)$ : ● - охолодження; ○ - нагрівання

На Рис.5 для політипу С кристалів  $\text{TlInS}_2$  показана температурна залежність параметра неспівмірності  $\delta(T)$  при охолодженні і наступному нагріванні. Як видно, при охолодженні значення  $\delta$  в інтервалі температур  $T=204 \div 238$  К майже не залежить від температури, а при температурах  $T < 204$  К спостерігається значне монотонне зменшення величини параметра неспівмірності. При температурі  $T \approx 195$  К  $\delta \rightarrow 0$ , і виникає співрозмірна фаза з  $q(0, 0, \pm 0.25)$ . На рис. 3б наведено 2D-розподіл інтенсивності для політипу С кристалів  $\text{TlInS}_2$  близько вузла  $(4, 0, 5)$  при температурі  $T = 195$  К. Слід зазначити, що при нагріванні нерозмірна фаза з параметром  $\delta \approx 0.03$  з'являється стрибкоподібно при температурі  $T = 197$  К і при  $T > 206$  К величина  $\delta = (0.04 \pm 0.01)$  залишається постійною аж до повного зникнення фази при температурі  $T \approx 235$  К.

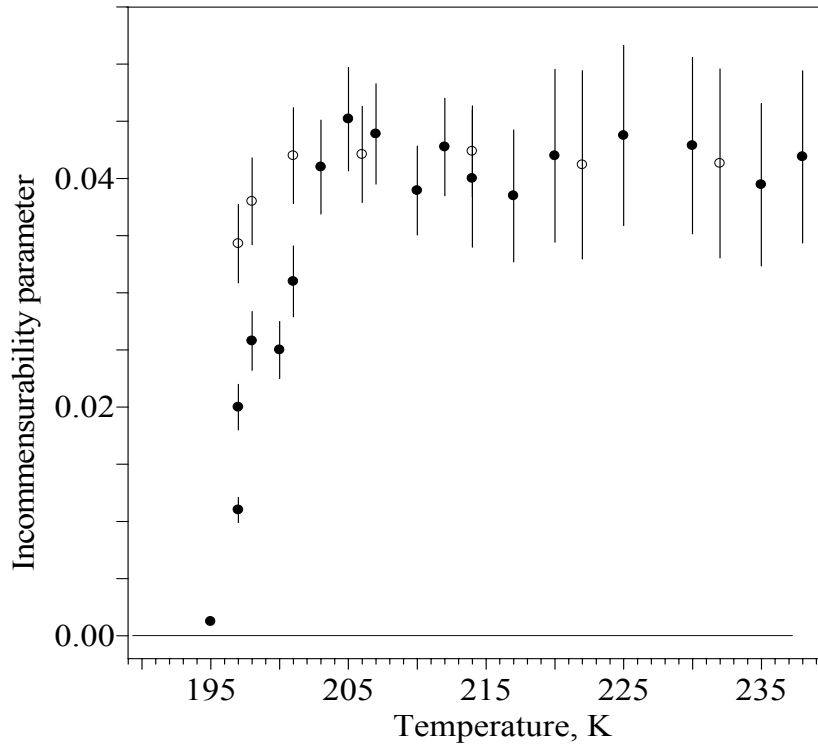


Рисунок 5 – Температурна залежність параметра неспіврозмірності  $\delta$ :  
 ● - охолодження; ○ - нагрівання

Характер температурної залежності параметра неспіврозмірності  $\delta(T)$  в інтервалі  $T=195\div 204$  К може вказувати на перехід при зниженні температури від синусоїдальної модуляції до "солітон"-режиму, при якому відстань між стінками доменів збільшується, що є характерним для фазових переходів неспіврозмірна – співрозмірна фаза типу I, тобто, невластних сегнетоелектриків з інваріантом Ліфшиця [13]. Тип такого переходу близький до фазового переходу другого роду. Тим не менше, раніше в кристалах  $TlInS_2$  С-політипу ми спостерігали стрибкоподібну зміну параметра комірки  $c$  при  $T\approx 197$  К, що є типовим для фазового переходу першого роду [14].

Що стосується політипу 2С кристалів  $TlInS_2$ , то існування в площинах  $(00l)^*$ ,  $(h0l)^*$  та  $(hhl)^*$  неспіврозмірних і співрозмірних модуляційних сателітів при температурах  $T=185\div 300$  К виявлено не було. Згідно з [15], виникнення політипів кристалів- $TlInS_2$  обумовлено зсувом шарів вздовж напрямків  $[110]$  і  $[1\bar{1}0]$ , отже необхідні подальші дослідження, щоб з'ясувати вплив зсуву шару на формування модульованих структур.

### Висновки.

Таким чином, виявлення в політипі С кристалу  $TlInS_2$  підчас охолодження слабких модуляційних сателітів при температурі  $T\approx 238$  К, свідчить про виникнення при зазначеній температурі нерозмірної фази, яка спостерігається до температури  $T\approx 195$  К, в безпосередній близькості якої нерозмірна фаза переходить в співрозмірну, що супроводжується збільшення учетверо параметру  $c$  елементарної комірки. В інтервалі температур  $T=204\div 238$  К величина параметру неспіврозмірності  $\delta = (0.04 \pm 0.01)$  майже не залежить від температури, а при температурах  $T < 204$  К спостерігається значне монотонне зменшення величини  $\delta$  до нуля при температурі  $T\approx 195$  К, що вказує на те, що політип С кристала  $TlInS_2$  належить до невластних сегнетоелектриків з неспіврозмірною фазою типу I. В політипі 2С кристалів  $TlInS_2$  сателіти, характерні для неспіврозмірної фази в інтервалі температур  $T=180\div 300$  К не спостерігалися.

## ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Allakhverdiev K. Lattice dynamics of Ferroelectric  $\text{TlInS}_2$  crystal / K. Allakhverdiev, F. Hashimzade, D. Huseinova, M. Nizametdinova, G. Orudzhev, A. Ulubey, M. Kir // *Can. J. Phys.* – 2012. – V. 90. – P. 407–412.
2. Panich. Electronic properties and phase transitions in low-dimensional semiconductors / Panich // *J. Phys. C.* – 2008. – V. 20. – P. 293202-293242.
3. Vakhrushev S. Incommensurate phase transition in  $\text{TlInS}_2$  crystal / S. Vakhrushev, V. Zhdanova, B. Kvyatkovskii, N. Okuneva, K. Allakhverdiev, R. Aliev, R. Sardarly // *JETF Lett.* – 1984. – T. 39. – C. 245-247.
4. Kashida S. X-ray study of the incommensurate phase of  $\text{TlInS}_2$  / S. Kashida, Y. Kobayashi // *J. Phys. C.* – 1999. – T. 11. – C. 1027-1035.
5. Plyushch O. Politypism and phase transitions in  $\text{TlInS}_2$   $\text{TlGaSe}_2$  crystals / O. Plyushch, A. Sheleg // *Sov. Kristallografiya.* – 1999. – T. 44. – C. 873–877.
6. Panich. Phase transitions and Incommensurability in the layered semiconductor  $\text{TlInS}_2$  - an NMR study / Panich, D. Mogilyansky, R. Sardarly // *J. Phys. C.* – 2012. – T.24. – C. 135901–135905.
7. Borovoy N. On the Ferroelectric Phase Transition in Polytypes of  $\beta$ - $\text{TlInS}_2$  Crystals / N. Borovoy, Yu. Gololobov, A. Gorb, G. Isaenko // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 2008. – V. 50. – P. 1946–1950.
8. Borovoi N. Effect of a periodic temperature variation on the properties of  $\text{TlGaSe}_2$  crystals / N. Borovoi, Yu. Gololobov // *Phys. Sol. State.* – 1997. – T. 39. – C. 1474–1475.
9. W. Henkel W. High-pressure Raman study of ternary chalcogenides  $\text{TlGaS}_2$ ,  $\text{TlGaSe}_2$ ,  $\text{TlInS}_2$  and  $\text{TlInSe}_2$  / W. Henkel, H. Hochheimer, C. Carlone, A. Werner, H. Schnering // *Phys. Rev. B.* – 1982. – T. 26. – C. 3211-3221.
10. T. Hanh: Space-group symmetry, International Tables For Crystallography A: Springer; 2005.
11. Aliev R. The ferroelectricity and the structural phase transitions in the  $\text{TlInS}_2$  type crystals / R. Aliev, K. Allakhverdiev, A. Baranov, N. Ivanov, R. Sardarly // *Phys. Sol. State.* – 1984. – T. 26. – C. 775-784.
12. Banys J. Pinning effect on microwave dielectric properties and soft mode in  $\text{TlInS}_2$  and  $\text{TlGaSe}_2$  ferroelectrics / J. Banys, A. Brilingas and J. Grigas // *Phase trans.* – 1990. – T. 20. – C. 211-229.
13. Bruce The theory of structurally incommensurate systems. II. Commensurate-incommensurate phase transitions / Bruce, R. Cowley, A. Murray // *J. Phys. C.* – 1978. – T. 11. – C. 3591-3655.
14. N. Borovoi N. Peculiarities of phase transitions in polytypes of monoclinic  $\text{TlInS}_2$  / N. Borovoi, Yu. Gololobov, G. Isaenko, N. Stepanishchev // *Inorganic Material.* – 2009. – T. 45. – C. 1-6.
15. Kashida S. Neutron Scattering Study of the Structural Phase Transition in  $\text{TlGaSe}_2$  / S. Kashida, Y. Kobayashi // *J. Korean phys. Soc.* – 1998. – T. 32. – C. 40-43.

## REFERENCES

1. Allakhverdiev K. Lattice dynamics of Ferroelectric  $\text{TlInS}_2$  crystal / K. Allakhverdiev, F. Hashimzade, D. Huseinova, M. Nizametdinova, G. Orudzhev, A. Ulubey, M. Kir // *Can. J. Phys.* – 2012. – V. 90. – P. 407–412.
2. Panich. Electronic properties and phase transitions in low-dimensional semiconductors / Panich // *J. Phys. C.* – 2008. – V. 20. – P. 293202-293242.
3. Vakhrushev S. Incommensurate phase transition in  $\text{TlInS}_2$  crystal / S. Vakhrushev, V. Zhdanova, B. Kvyatkovskii, N. Okuneva, K. Allakhverdiev, R. Aliev, R. Sardarly // *JETF Lett.* – 1984. – T. 39. – C. 245-247.
4. Kashida S. X-ray study of the incommensurate phase of  $\text{TlInS}_2$  / S. Kashida, Y. Kobayashi // *J. Phys. C.* – 1999. – T. 11. – C. 1027-1035.
5. Plyushch O. Politypism and phase transitions in  $\text{TlInS}_2$   $\text{TlGaSe}_2$  crystals / O. Plyushch, A. Sheleg // *Sov. Kristallografiya.* – 1999. – T. 44. – C. 873–877.
6. Panich. Phase transitions and Incommensurability in the layered semiconductor  $\text{TlInS}_2$  - an NMR study / Panich, D. Mogilyansky, R. Sardarly // *J. Phys. C.* – 2012. – T.24. – C. 135901–135905.

7. Borovoy N. On the Ferroelectric Phase Transition in Polytypes of  $\beta$ -TlInS<sub>2</sub> Crystals / N. Borovoy, Yu. Gololobov, A. Gorb, G. Isaenko // J. Phys. C: Solid State Phys. – 2008. – V. 50. – P. 1946–1950.
8. Borovoi N. Effect of a periodic temperature variation on the properties of TlGaSe<sub>2</sub> crystals / N. Borovoi, Yu. Gololobov // Phys. Sol. State. – 1997. – T. 39. – C. 1474–1475.
9. W. Henkel W. High-pressure Raman study of ternary chalcogenides TlGaS<sub>2</sub>, TlGaSe<sub>2</sub>, TlInS<sub>2</sub> and TlInSe<sub>2</sub> / W. Henkel, H. Hochheimer, C. Carlone, A. Werner, H. Schnering // Phys. Rev. B. – 1982. – T. 26. – C. 3211-3221.
10. T. Hanh: Space-group symmetry, International Tables For Crystallography A: Springer; 2005.
11. Aliev R. The ferroelectricity and the structural phase transitions in the TlInS<sub>2</sub> type crystals / R. Aliev, K. Allakhverdiev, A. Baranov, N. Ivanov, R. Sardarly // Phys. Sol. State. – 1984. – T. 26. – C. 775-784.
12. Banys J. Pinning effect on microwave dielectric properties and soft mode in TlInS<sub>2</sub> and TlGaSe<sub>2</sub> ferroelectrics / J. Banys, A. Brilingas and J. Grigas // Phase trans. – 1990. – T. 20. – C. 211-229.
13. Bruce The theory of structurally incommensurate systems. II. Commensurate-incommensurate phase transitions / Bruce, R. Cowley, A. Murray // J. Phys. C. – 1978. – T. 11. – C. 3591-3655.
14. N. Borovoi N. Peculiarities of phase transitions in polytypes of monoclinic TlInS<sub>2</sub> / N. Borovoi, Yu. Gololobov, G. Isaenko, N. Stepanishchev // Inorganic Material. – 2009. – T. 45. – C. 1-6.
15. Kashida S. Neutron Scattering Study of the Structural Phase Transition in TlGaSe<sub>2</sub> / S. Kashida, Y. Kobayashi // J. Korean phys. Soc. – 1998. – T. 32. – C. 40-43.

#### РЕФЕРАТ

Боровий М.О. Виникнення та трансформація нерозмірно модульованої структури в політипах напівпровідників TlInS<sub>2</sub> / М.О. Боровий, Ю.П. Гололобов, Г.Л. Ісаєнко, А.В. Ніколаєнко // Вісник Національного транспортного університету. Серія «Технічні науки». Науково-технічний збірник. – К. : НТУ, 2016. – Вип. 1 (34).

Методом рентгенівської дифрактометрії досліджено особливості кристалічної структури політипів С і 2С напівпровідникових кристалів TlInS<sub>2</sub> в діапазоні температур T=185÷300 К.

Об'єкт дослідження – напівпровідникові кристали TlInS<sub>2</sub>.

Мета роботи – виявлення особливостей виникнення та трансформації нерозмірно модульованої структури в політипах напівпровідників TlInS<sub>2</sub>

Метод дослідження – дифракція рентгенівських променів.

В діапазоні температур T=185÷300 К методом дифракції рентгенівських променів було досліджено особливості кристалічної структури політипів С і 2С напівпровідникових кристалів TlInS<sub>2</sub>. В політипі С при охолодженні поява нерозмірної фази з вектором модуляції  $q(\mp 0.04, 0, \pm 0.25)$  спостерігалася при температурі T≈238 К, існування зазначеної нерозмірної фази виявлено до температури T≈213 К. При подальшому зменшенні температури параметр неспіврозмірності  $\delta$  монотонно прямує до нуля при T≈195 К. Для політипу 2С кристалів TlInS<sub>2</sub> модульовані сателіти для нерозмірної і співрозмірної фаз в дослідженому інтервалі температур не спостерігалися.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** НЕРОЗМІРНА ФАЗА, ПАРАМЕТРИ ЕЛЕМЕНТАРНОЇ КОМІРКИ, ФАЗОВИЙ ПЕРЕХІД, ПАРАМЕТР НЕСПІВРОЗМІРНОСТІ.

#### ABSTRACT

Borovoy N.A., Gololobov Yu.P., Isaenko G.L., Nikolaienko A.V. The appearance and transformation of an incommensurate modulated structure in the polytypes of semiconductors TlInS<sub>2</sub>. Visnyk National Transport University. Series «Technical sciences». Scientific and Technical Collection. – Kyiv: National Transport University, 2016. – Issue 1 (34).

The features of C and 2C polytypes semiconductor crystals TlInS<sub>2</sub> crystalline structure are investigated in the temperature range T=185÷300 K by the x-rays diffraction method.

Object of the study - semiconductors TlInS<sub>2</sub>.



Purpose of the study - to determine the appearance and transformation of an incommensurate modulated structure in the polytypes of semiconductors TlInS<sub>2</sub>.

Method of the study - the x-rays diffraction method.

The features *c*- and *2c*-polytypes semiconductors TlInS<sub>2</sub> crystalline structure were investigated in the temperature interval  $T=185\div 300$  K by the method of diffraction of x-rays. The appearance of an incommensurate phase with the  $q(\mp 0.04, 0, \pm 0.25)$  vector modulation was observed in samples of *c*-polytype at the temperature  $T\approx 238$  K, such modulated phase existence was founded out to the temperature  $T\approx 213$  K. The incommensurate parameter  $\delta$  monotonously directs to the zero if temperature decrease further. The modulated incommensurate satellites of commensurate and incommensurate phases were not observed for *2c*-polytype of TlInS<sub>2</sub> crystals in the investigated temperatures interval.

KEY WORDS: INCOMMENSURATE PHASE, UNIT CELL PARAMETERS, PHASE TRANSITION, INCOMMENSURATE PARAMETER.

### РЕФЕРАТ

Боровой Н.А. Возникновение и трансформация неразмержено модулированной структуры в политапах полупроводников TlInS<sub>2</sub> / Н.А. Боровой, Ю.П. Гололобов, Г.Л. Исаенко, А.В. Николаенко // Вестник Национального транспортного университета. Серия «Технические науки». Научно-технический сборник. – К. : НТУ, 2016. – Вып. 1 (34).

Методом рентгеновской дифрактометрии исследованы особенности кристаллической структуры политипов С и 2С полупроводниковых кристаллов TlInS<sub>2</sub> в диапазоне температур  $T=185\div 300$  К.

Объект исследования - кристаллы полупроводников TlInS<sub>2</sub>.

Цель работы - определение возникновения и трансформации неразмержено модулированной структуры в политапах полупроводников TlInS<sub>2</sub>.

Метод исследования - метод рентгеновской дифрактометрии.

В диапазоне температур  $T=185\div 300$  К методом дифракции рентгеновских лучей были исследованы особенности кристаллической структуры политипов С и 2С полупроводниковых кристаллов TlInS<sub>2</sub>. В политапах С при охлаждении появление неразмерженой фазы с вектором модуляции  $q(\mp 0.04, 0, \pm 0.25)$  наблюдалась при температуре  $T\approx 238$  К, существование указанной неразмерженой фазы обнаружено до температуры  $T\approx 213$  К. При дальнейшем уменьшении температуры параметр несозмерженности  $\delta$  монотонно стремится к нулю при  $T\approx 195$  К. Для политипа 2С кристаллов TlInS<sub>2</sub> модулированные сателлиты для несозмерженой и созмерженой фаз в исследованном интервале температур не наблюдалось.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: НЕРАЗМЕРНАЯ ФАЗА, ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ, ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД, ПАРАМЕТР НЕСОРАЗМЕРНОСТИ.

### АВТОРИ:

Боровий Микола Олександрович, доктор фізико-математичних наук, професор, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, завідувач кафедри загальної фізики, e-mail: [borovoy@univ.kiev.ua](mailto:borovoy@univ.kiev.ua), тел. +380445262288, Україна, 03680, м. Київ, просп. Акад. Глушкова 2, корпус №1, к. 225.

Гололобов Юрій Павлович, доктор фізико-математичних наук, професор, Національний транспортний університет, завідувач кафедри фізики, e-mail: "Yuriy Gololobov" <[gololo@ukr.net](mailto:gololo@ukr.net)>, тел. +380442846709, Україна, 01103, м. Київ, вул. Кіквідзе, 42, к. 406.

Исаенко Галина Леонідівна, кандидат фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, доцент кафедри фізики, e-mail: [gl\\_isayenko@ukr.net](mailto:gl_isayenko@ukr.net), тел. +380442846709, +380973387759, Україна, 01103, м. Київ, вул. Кіквідзе, 42, к. 410.

Ніколаенко А.В., Київський національний університет імені Тараса Шевченка, аспірант кафедри загальної фізики, e-mail: [alina.salnik@gmail.com](mailto:alina.salnik@gmail.com), тел. +380969512897, Україна, 03680, м. Київ, просп. Акад. Глушкова 2, корпус №1, к. 225.

**AUTHOR:**

Borovoy Mikola O., doctor of sciences, associate professor, Kyiv Taras Shevchenko National University, head department of general physics, e-mail: [borovoy@univ.kiev.ua](mailto:borovoy@univ.kiev.ua), tel. +380445262288, Ukraine, 03680, Kyiv, Acad. Glushkova Prosp.2, build. 1, of. 225.

Gololobov Yurii P., doctor of sciences, professor, National Transport University, head department of physics, Kyiv, e-mail: "[Yuriy Gololobov](mailto:Yuriy Gololobov)" <[gololo@ukr.net](mailto:gololo@ukr.net)>, tel. +380442846709, Ukraine, 01103, Kyiv, Kikvidze str. 42, of. 406.

Isaienko Galina L., Ph. D., National Transport University, associate professor department of physics, e-mail: [gl\\_isayenko@ukr.net](mailto:gl_isayenko@ukr.net), tel. +380442846709, +380973387759, Ukraine, 01103, Kyiv, Kikvidze str. 42, of. 410.

Nikolaienko Alina V., Taras Shevchenko Kyiv National University, postgraduate, department of general physics, e-mail: [alina.salnik@gmail.com](mailto:alina.salnik@gmail.com), tel. +380969512897, Ukraine, 03680, Kyiv, Acad. Glushkova Prosp.2, build. 1, of. 225.

**АВТОРЫ:**

Боровой Николай Александрович, доктор физико-математических наук, доцент, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, заведующий кафедры общей физики, e-mail: [borovoy@univ.kiev.ua](mailto:borovoy@univ.kiev.ua), тел. +380445262288, Украина, 03680, г. Киев, просп. Акад. Глушкова 2, корпус №1, к. 225.

Гололобов Юрий Павлович, доктор физико-математических наук, профессор, Национальный транспортный университет, заведующий кафедры физики, e-mail: "[Yuriy Gololobov](mailto:Yuriy Gololobov)" <[gololo@ukr.net](mailto:gololo@ukr.net)>, тел. +380442846709, Украина, 01103, г. Киев, ул. Киквидзе, 42, к. 406.

Исаенко Галина Леонидовна, кандидат физико-математических наук, Национальный транспортный университет, доцент кафедры физики, e-mail: [gl\\_isayenko@ukr.net](mailto:gl_isayenko@ukr.net), тел. +380442846709, +380973387759, Украина, 01103, г. Киев, ул. Киквидзе, 42, к. 410.

Николаенко Алина Владимировна, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, аспирант кафедры общей физики, e-mail: [alina.salnik@gmail.com](mailto:alina.salnik@gmail.com), тел. +380969512897, Украина, 03680, г. Киев, просп. Акад. Глушкова 2, корпус №1, к. 225.

**РЕЦЕНЗЕНТИ:**

Гуляев В.І., доктор технічних наук, професор, Національний транспортний університет, завідувач кафедри математики, Київ, Україна.

Годлевська О. О., кандидат фізико-математичних наук, доцент, Національний університет біоресурсів і природокористування України, доцент кафедри фізики, Київ, Україна.

**REVIEWER:**

Gulyayev V.I., Engineering (Dr.), professor, National Transport University, head department of mathematics, Kyiv, Ukraine.

Godlevska O.O., Ph. D., associate professor, National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine, associate professor department of physics, Kyiv, Ukraine.