

УДК 621.315.592
UDC 621.315.592

ОСОБЛИВОСТІ ТЕПЛОГО РОЗШИРЕННЯ ПОЛІТИПІВ КРИСТАЛІВ $TlInS_2$ В ІНТЕРВАЛІ ТЕМПЕРАТУР $T=180 - 300$ К

Боровий М.О., доктор фізико-математичних наук, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна, borovoy@univ.kiev.ua, orcid.org/0000-0002-2435-2620

Гололобов Ю.П., доктор фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, Київ, Україна, "Yuriy Gololobov" <gololo@ukr.net>, orcid.org/0000-0003-3360-6669

Исаєнко Г.Л., кандидат фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, Київ, Україна, gl_isayenko@ukr.net, orcid.org/0000-0003-0479-9596

THE FEATURES OF TEMPERATURE EXPANSION $TlInS_2$ CRYSTALS POLYTYPES IN TEMPERATURE INTERVAL $T=180 - 300$ K

Borovoy N.A., doctor of sciences, Taras Shevchenko Kyiv National University, Kyiv, Ukraine, borovoy@univ.kiev.ua, orcid.org/0000-0002-2435-2620

Gololobov Yu.P., doctor of sciences, professor, National Transport University, Kyiv, Ukraine, "Yuriy Gololobov" <gololo@ukr.net>, orcid.org/0000-0003-3360-6669

Isaienko G.L., Ph.D., National Transport University, Kyiv, Ukraine, gl_isayenko@ukr.net, orcid.org/0000-0003-0479-9596

ОСОБЕННОСТИ ТЕПЛОГО РАСШИРЕНИЯ ПОЛИТИПОВ КРИСТАЛЛОВ $TlInS_2$ В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР $T=180 - 300$ К

Боровой Н.А., доктор физико-математических наук, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина, borovoy@univ.kiev.ua, orcid.org/0000-0002-2435-2620

Гололобов Ю.П., доктор физико-математических наук, Национальный транспортный университет, Киев, Украина, "Yuriy Gololobov" <gololo@ukr.net>, orcid.org/0000-0003-3360-6669

Исаенко Г.Л., кандидат физико-математических наук, Национальный транспортный университет, Киев, Украина, gl_isayenko@ukr.net, orcid.org/0000-0003-0479-9596

Постановка проблеми.

Кристали β - $TlInS_2$ за нормальних умов належать до просторової групи $C2/c$ моноклінної сингонії і мають шарувату будову, зумовлену упакуванням шарів вздовж напрямку $[00l]$. Моноклінна елементарна комірка C -політипу $TlInS_2$ містить 16 формульних одиниць та при температурі $T = 290$ К характеризується параметрами елементарної комірки $a = 10,90$ Å, $b = 10,94$ Å, $c = 15,18$ Å, $\beta = 100,21^\circ$ [1]. У $2C$ -політипі параметр c є подвоєним і в кристалах, що досліджувалися в представленій роботі, за кімнатної температури він складає $c = 30,32$ Å. Між властивостями C - та $2C$ -політипів кристалів $TlInS_2$ раніше виявлено принципову відмінність, яка полягає у відсутності модульованих структур у кристалах $2C$ -політипу у діапазоні температур $T = 180 - 300$ К [2].

Температурні залежності параметру c елементарної комірки для обох вказаних політипів досліджувалися методом рентгенівської дифрактометрії [3]. Для C політипу при температурі $T_i = 214$ К спостерігалася зміна кута нахилу залежності $c(T)$, а при температурі $T_c = 196$ К – стрибок $\Delta c = 0,004$ Å. Результати інших робіт вкрай суперечливі: зокрема, у [4] повідомлялося про стрибок $\Delta c = 0,002$ Å при температурі $T = 196$ К за злам при температурі $T = 214$ К, пізніше ті ж автори спостерігали зміну кутів нахилу залежності $c(T)$ при $T = 220$ К та $T = 200$ К [5]. Окрім того, автори стверджували, що зміна кута нахилу відбувається при температурі $T = 204$ К [6].

Щодо $2C$ -політипу, то відомі тільки результати роботи [3], згідно з якими в інтервалі температур $T = 180$ К – 230 К залежність $c(T)$ близька до лінійної і не містить аномалій. Стосовно залежностей $a(T)$, $b(T)$, то для C - так $2C$ -політипів у літературі такі дослідження не представлені. Отже, зважаючи на наявні літературні дані, можна констатувати, що температурні залежності параметрів елементарної комірки кристалів C - так $2C$ -політипів $TlInS_2$ експериментально досліджені недостатньо. Для з'ясування причин зазначених відмінностей та визначення характеру статичних

зміщень у неспіврозмірній фазі (НФ) C -політипу кристалів $TlInS_2$ [2] було проведено дослідження температурних залежностей коефіцієнтів лінійного теплового розширення $\alpha_x = (\partial x / \partial T) / x$ ($x = a, b, c$), визначених з експериментально вимірених температурних залежностей параметрів елементарної комірки $a(T)$, $b(T)$, $c(T)$ як для C -, так і $2C$ -політипу кристалів $TlInS_2$.

Дослідження структури кристалів $TlInS_2$ виконувалося з використанням рентгенівського дифрактометра ДРОН-4-07 з чотирикологою гоніометричною приставкою ГП-15. $K\alpha$ -лінії Co та Ni виділялися з первинного поліхроматичного випромінювання трубки БСВ-29 монохроматором на основі піролітичного графіту. Режим роботи трубки складав: напруга 30 кВ, сила струму 30 мА. Зразки розміщувалися в спеціально розробленій низькотемпературній камері і охолоджувалися потоками парів рідкого азоту. Типовий розмір зразків $7,0 \times 4,0 \times 0,5$ мм³. Температура зразків підтримувалася з точністю до 0,5 К (з урахування можливих температурних градієнтів у зразку) за допомогою температурного регулятора ВРТ-2. При юстуванні рентгенівський пучок був спрямований вздовж площини сколювання (00 l). Діаметр рентгенівського пучка на поверхні зразка не перевищував 1 мм. Сканування виконувалося у площині оберненої ґратки вздовж рядів, які розходилися з початку координат оберненого простору. Кроки сканування: $\Delta\chi = 0,05 - 0,10^\circ$, $\Delta(2\theta) = 0,03 - 0,08^\circ$, залежно від області оберненого простору, час накопичення сигналу 3 - 10 с.

При визначенні залежностей $a(T)$, $b(T)$ з використанням розробленої низькотемпературної камери було необхідно врахувати певні конструктивні обмеження зазначеної камери. Вони полягають у тому, що при орієнтації первинного пучка паралельно площинам (00 l) відсутня можливість реєстрації максимумів типу $H00$ та $0K0$, за кутовим положенням яких безпосередньо обчислюються значення параметрів a та b . Тому запропоновано методику отримання залежностей $a(T)$, $b(T)$ у два етапи. На першому необхідно визначити залежність $c(T)$ за кутовим положенням максимумів типу $00L$, а на другому – кутові положення максимумів типу $H0L$ та $0KL$, за якими з використанням значень $c(T)$ обрахувати параметри a та b .

На першому етапі роботи досліджувалася залежність $c(T)$. Для цього визначалося кутове положення рефлексу 00.14 (для $2C$ -політипу – 00.28) в діапазоні температур $T = 180 - 300$ К з кроком по температурі $\Delta T = 2$ К. Оскільки квадратична форма для моноклінної сингонії має вигляд

$$\frac{1}{d_{HKL}^2} = \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{H^2}{a^2} + \frac{L^2}{c^2} - \frac{2HL \cos \beta}{ac} \right) + \frac{K^2}{b^2} \quad (1)$$

(d_{HKL} - міжплощинна відстань), то для 00.14-рефлексу $c = 14d_{00.14} / \sin \beta$. Величина $d_{00.14}$ визначалася за кутовим положенням максимуму: $d_{00.14} = \lambda / 2 \sin \theta_{00.14}$ (λ – довжина хвиль $K\alpha_{1,2}$ - випромінювання).

Для визначення залежностей $a(T)$ та $b(T)$ вимірювалися кутові положення рефлексів 808 та 088, відповідно, оскільки, як зазначалось, конструктивні особливості температурної камери не дозволяли безпосередньо досліджувати рефлекси типу $H00$ та $0K0$. Тоді, для рефлексів $H0L$ параметр a визначається як корінь рівняння

$$\left(\frac{c^2 \sin^2 \beta}{d_{H0L}^2} - L^2 \right) a^2 - (2cHL \cos \beta) a - H^2 L^2 = 0, \quad (2)$$

а для $0KL$ параметр b дорівнює

$$b = K \left(d_{0KL}^{-2} - c^{-2} L^2 \sin^2 \beta \right)^{-1/2} \quad (3)$$

Таким чином, експериментально вимірювалися температурні залежності міжплощинних відстаней d_{808} та d_{088} і за формулами (2), (3) обчислювалися значення параметрів a, b . Необхідна для такого розрахунку залежність $c(T)$ була попередньо експериментально визначена. Відносна похибка визначення параметрів a, b, c складала відповідно $2,8 \cdot 10^{-4}$, $2,2 \cdot 10^{-4}$ та $1,8 \cdot 10^{-4}$ (при брегівському куті $\theta \cong 50^\circ$ та абсолютній похибці $\Delta\theta = 0,01^\circ$).

Температурні залежності коефіцієнтів лінійного теплового розширення $\alpha_x = (\partial x / \partial T) / x$ ($x = a, b, c$), було отримано чисельним диференціюванням попередньо згладжених залежностей $a(T)$,

$b(T)$, $c(T)$ (згладжування виконувалося FFT-методом).

На Рис. 1 наведено експериментально визначені залежності параметрів c елементарної комірки кристалів TlInS_2 C-політипу. Там же представлені температурні залежності коефіцієнта лінійного теплового розширення α_c . Температурна залежність параметру c практично збігається з отриманою раніше в роботі [3] для зразків інших технологічних партій та з використанням іншого обладнання. Характерною особливістю залежності $c(T)$ є зміна кута нахилу в околі температур $T=214 - 216$ К та стрибкоподібна зміна при $T \approx 196$ К, величина якої, проте, близька до абсолютної похибки $\Delta c \approx 0,003$ Å (Рис. 1). Як відомо, перший вид аномалій є характерним для фазового переходу (ФП) II роду, а другий для ФП I роду. Як видно з Рис.1, в околі температури $T=196$ К на залежності коефіцієнта лінійного теплового розширення $\alpha_c(T)$ спостерігається пікоподібний максимум, який відображує стрибок значень параметра c і відповідає фазовому переходу I роду.

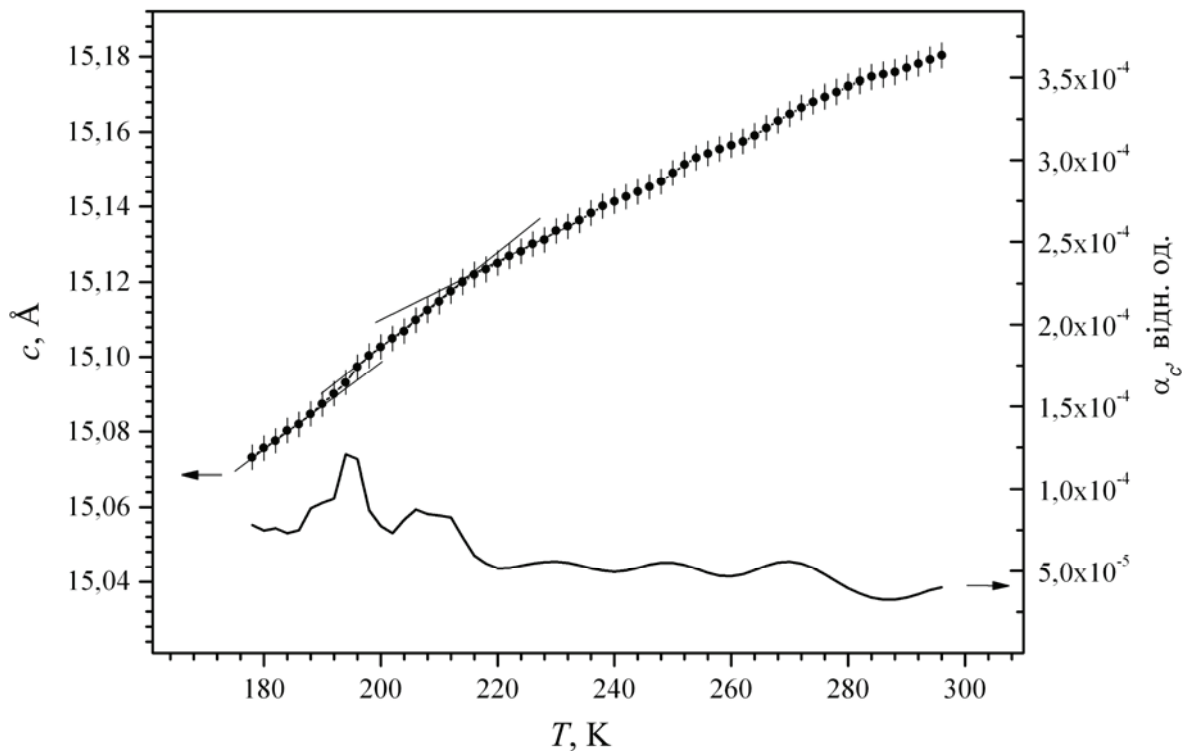


Рисунок 1 – Залежність параметра c елементарної комірки і коефіцієнта лінійного теплового розширення α_c для C-політипу кристалів TlInS_2

Figure 1 – The dependences of elementary cell c parameter and coefficient of linear thermal expansion α_c for TlInS_2 crystals C-politypes.

На Рис. 2 і Рис.3 відповідно наведено експериментально визначені залежності параметрів b та a елементарної комірки кристалів TlInS_2 C-політипу. Там же представлені температурні залежності коефіцієнтів лінійного теплового розширення $\alpha_x = (\partial x / \partial T) / x$ ($x = a, b$). Варто звернути увагу на істотну відмінність характеру температурних залежностей параметрів b і a від $c(T)$. Зокрема, параметр b в усьому розглянутому діапазоні температур в межах точності експериментальних даних залишається сталим (коефіцієнт α_b відхиляється від нуля не більше ніж на $\pm 6 \cdot 10^{-6}$), тоді як залежність $a(T)$ виявляє суттєво різний характер у різних температурних областях.

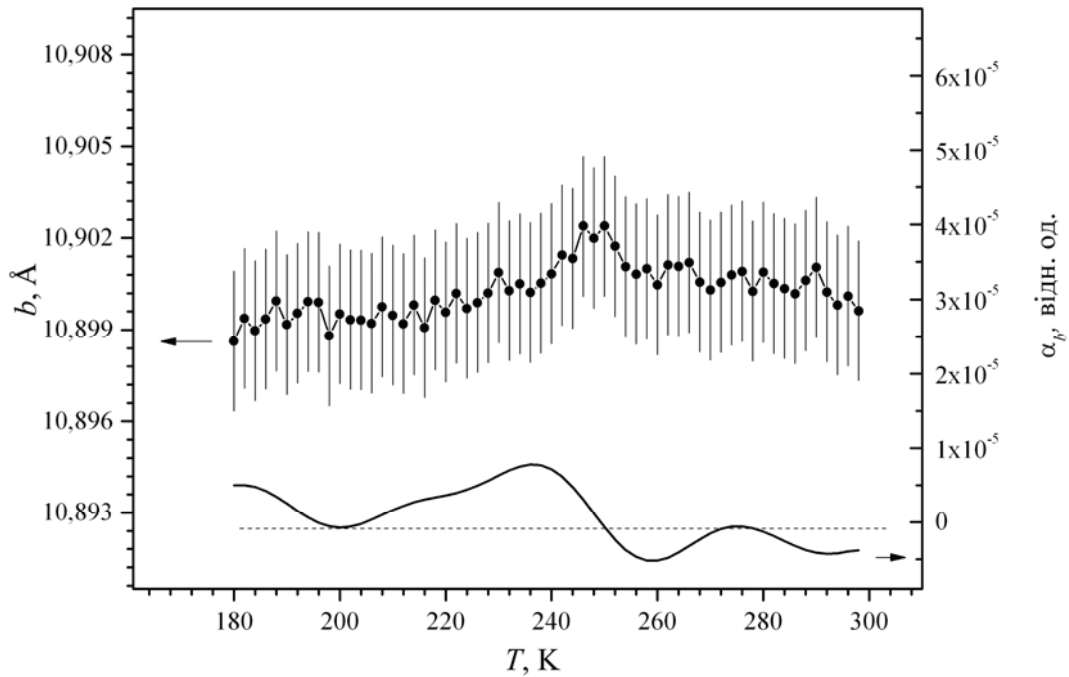


Рисунок 2 – Залежність параметра b елементарної комірки і коефіцієнта лінійного теплового розширення α_b для C -політипу кристалів TIInS_2

Figure 2 – The dependences of elementary cell b parameter and coefficient of linear thermal expansion α_b for TIInS_2 crystals C -polytypes.

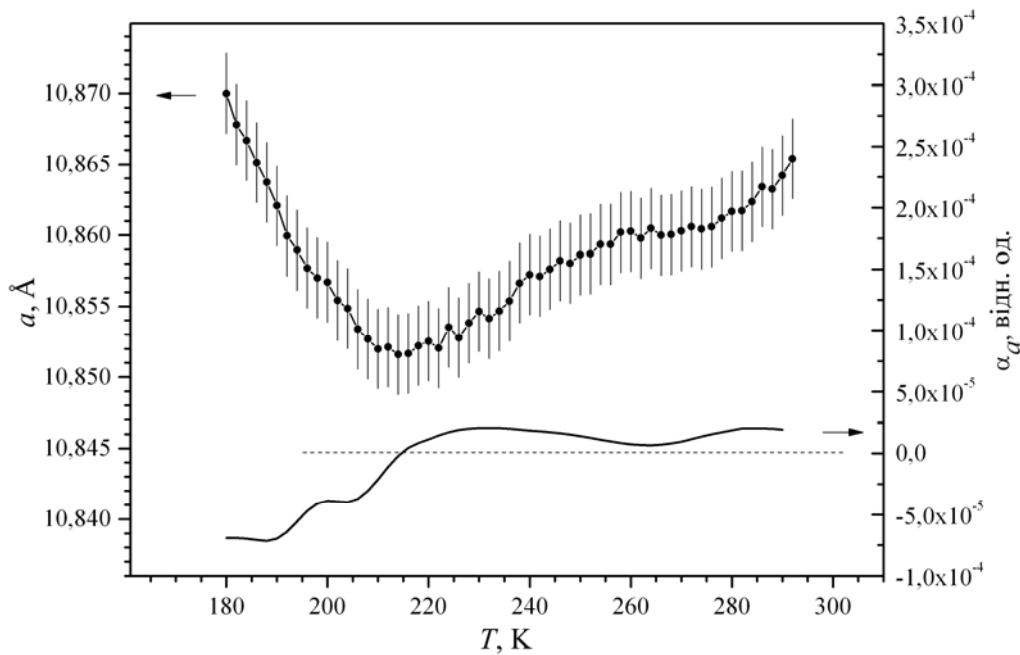


Рисунок 3 – Залежність параметра a елементарної комірки і коефіцієнта лінійного теплового розширення α_a для C -політипу кристалів TIInS_2 .

Figure 3 – The dependences of elementary cell a parameter and coefficient of linear thermal expansion α_a for TIInS_2 crystals C -polytypes.

Зокрема, при охолодженні в інтервалі температур $T=300\text{ K} - 217\text{ K}$ параметр a майже лінійно зменшується, так що коефіцієнт $\alpha_a \approx +2.0 \cdot 10^{-5}$; в області температур $T=217 - 214\text{ K}$ параметр a сталий (величина α_a спадає до нуля); при $T \approx 214\text{ K}$ параметр α_a змінює знак, досягаючи $\alpha_a = -$

$4,1 \cdot 10^{-5}$ при $T = 203$ К. В інтервалі температур $T=203 - 198$ К значення α_a зберігається сталим, а при подальшому охолодженні від $T \approx 198$ К знову зменшується. Таким чином, у кристалах $TlInS_2$ C -політипу спостерігається аномальна температурна поведінка параметра a , яка проявляється у зміні знаку коефіцієнта теплового розширення α_a в околі температур $T=214 - 216$ К. Раніше відзначалося, що при зазначеній температурі починається активне формування НФ в усьому об'ємі кристалу [2]. Отже, зміна знаку коефіцієнта α_a відображує певну перебудову елементарної комірки C -політипу $TlInS_2$ при утворенні НФ. Відомо, що статичні зсуви атомів при утворенні модульованих структур, як правило, призводять до аномалій у їх теплових зміщеннях, зокрема, до суттєвих змін форми еліпсоїдів теплових коливань атомів [7]. Тому виявлена зміна знаку коефіцієнта α_a в околі температури $T=214$ К відображує статичні зсуви атомів уздовж осі OX при формуванні НФ у кристалі.

Інша цікава особливість залежності $\alpha_a(T)$ у кристалах $TlInS_2$ C -політипу спостерігається в інтервалі температур $T=198 - 203$ К, в якому коефіцієнт α_a сталий. Раніше відзначалося, що при температурі $T=203$ К починається зменшення параметру неспіврозмірності δ , яке при $T < 200$ К стає стрімким, так що при $T = 197$ К $\delta \rightarrow 0$ [2]. Отже, таке зменшення супроводжується ще й аномальною температурною поведінкою параметра a , що разом свідчать на користь того, що в околі температури $T = 203$ К відбувається зміна характеру НФ.

На Рис. 4- Рис.6, відповідно, представлено експериментально визначені залежності $c(T)$, $b(T)$, $a(T)$ для кристалів $TlInS_2$ $2C$ -політипу, там же представлені температурні залежності коефіцієнтів лінійного теплового розширення α_c , α_b , α_a . Перш за все, для $2C$ -політипу звертає на себе увагу залежність $c(T)$, яка є практично лінійною і не містить особливостей, характерних для кристалів C -політипу (Рис. 1). В усьому дослідженому інтервалі температур коефіцієнт $\alpha_c = (5,7 \pm 1,0) \cdot 10^{-5}$, що досить близько до величини α_c кристалів C -політипу на ділянці температур $T=215 - 280$ К. Отже, теплове розширення кристалів $TlInS_2$ C - та $2C$ -політипів вздовж напрямку OZ при температурах $T > 215$ К є схожим, а відмінності виникають лише при появі НФ та при формуванні співрозмірної фази (СФ) (якщо $T < 197$ К) у кристалах C -політипу [8]. Необхідно відзначити, що у кристалах $2C$ -політипу, як і у кристалах C -політипу, температурна зміна параметру b майже відсутня – коефіцієнт α_b близький до нуля, досягаючи максимального значення (від'ємного) $\alpha_b = -7,1 \cdot 10^{-6}$ при температурі $T=280$ К (Рис. 5).

Натомість, залежності $a(T)$ для $2C$ - та C -політипів принципово відрізняються (порівняти Рис. 6 та Рис. 3). Для $2C$ -політипу параметр a в області температур $T < 230$ К при охолодженні слабко спадає, так що коефіцієнт $\alpha_a = 8,0 \cdot 10^{-6}$, а в інтервалі температур $230 < T < 280$ К параметр a є практично сталим ($\alpha_a \approx 0$). Навпаки, для C -політипу в області температур $T=219 - 214$ К коефіцієнт α_a змінює знак і при подальшому охолодженні стає від'ємним.

Відсутність будь-яких помітних аномалій на залежностях $\alpha_c(T)$, $\alpha_b(T)$, $\alpha_a(T)$ в інтервалі температур $T=180 - 300$ К для $2C$ -політипу $TlInS_2$ свідчить про те, що структурна перебудова кристалічної ґратки таких кристалів при зазначених температурах не відбувається. Отриманий результат корелює з виявленою відсутністю модульованих структур, як НФ, так і СФ, у кристалах цього політипу. Причину відсутності можна пояснити особливістю формування шарової структури $2C$ -політипу. Як відзначалося у роботі [9], подвоєння елементарної комірки у напрямку $[00l]$ зумовлено зсувом кожного четвертого шару, утвореного кутово-з'єднаними MX_4 тетраедрами, на половину довжини найменшої трансляції у напрямках $[110]$ та $[\bar{1}\bar{1}0]$. Відтак, у $2C$ -політипі фактично формується упакування типу АВАСАВАС..., на відміну від упакування АВАВ АВ... у C -політипі. Оскільки характерною ознакою як неспіврозмірної, так і співрозмірної модуляції є наявність співрозмірного компонента $\delta_c = 0,25$ хвильових векторів $q_i (\mp\delta, 0, \pm 0,25)$ та $q_c (0, 0, \pm 0,25)$, який відображує статичні зсуви атомів у кристалографічному напрямку OZ з просторовим періодом $\lambda_c = 4c$, то поява зміщених C -площин у $2C$ -політипі порушує АВАВ АВ періодичність і блокує виникнення довгопротяжної хвилі статичних атомних зміщень уздовж OZ . Фактично, можна

говорити про те, що перехід від АВВАВ... до АВАСАВАС... упакування призводить до нового типу дальнього порядку в напрямку $[00l]$, при якому хвиля статичних атомних зміщень при зміні температури не утворюється.

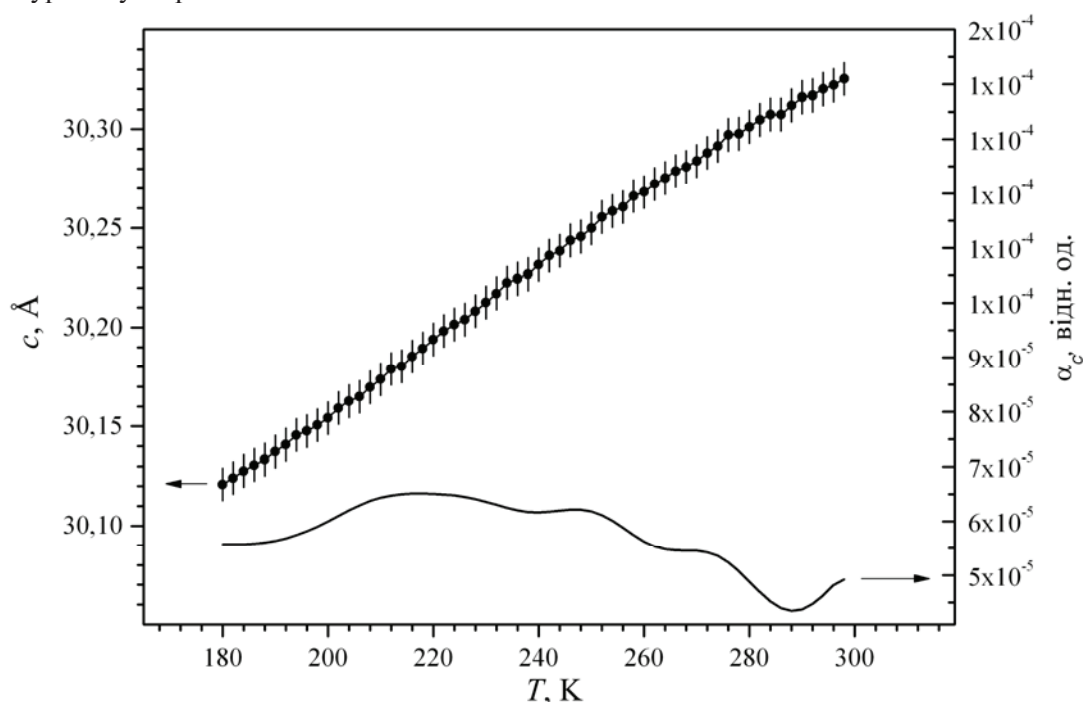


Рисунок 4 – Залежність параметра c елементарної комірки і коефіцієнта лінійного теплового розширення α_c для 2C-політипу кристалів TIInS_2

Figure 4 – The dependences of elementary cell c parameter and coefficient of linear thermal expansion α_c for TIInS_2 crystals 2C-politypes.

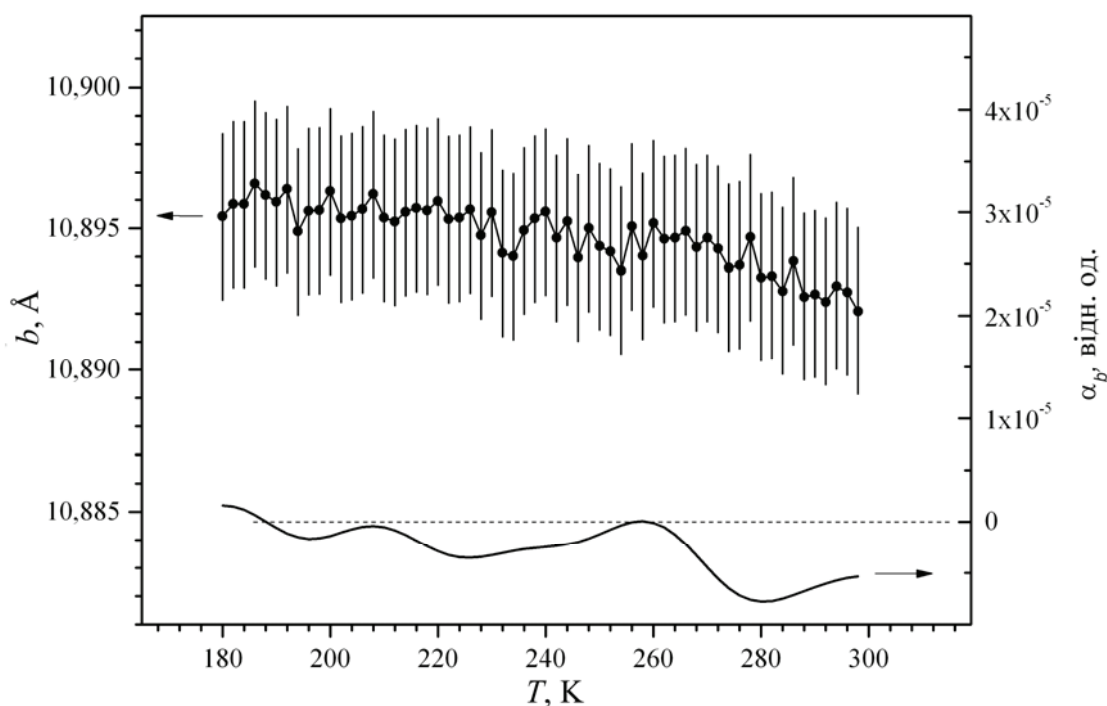


Рисунок 5 – Залежність параметра b елементарної комірки і коефіцієнта лінійного теплового розширення α_b для 2C-політипу кристалів TIInS_2

Figure 5 – The dependences of elementary cell b parameter and coefficient of linear thermal expansion α_b for TIInS_2 crystals 2C-politypes.

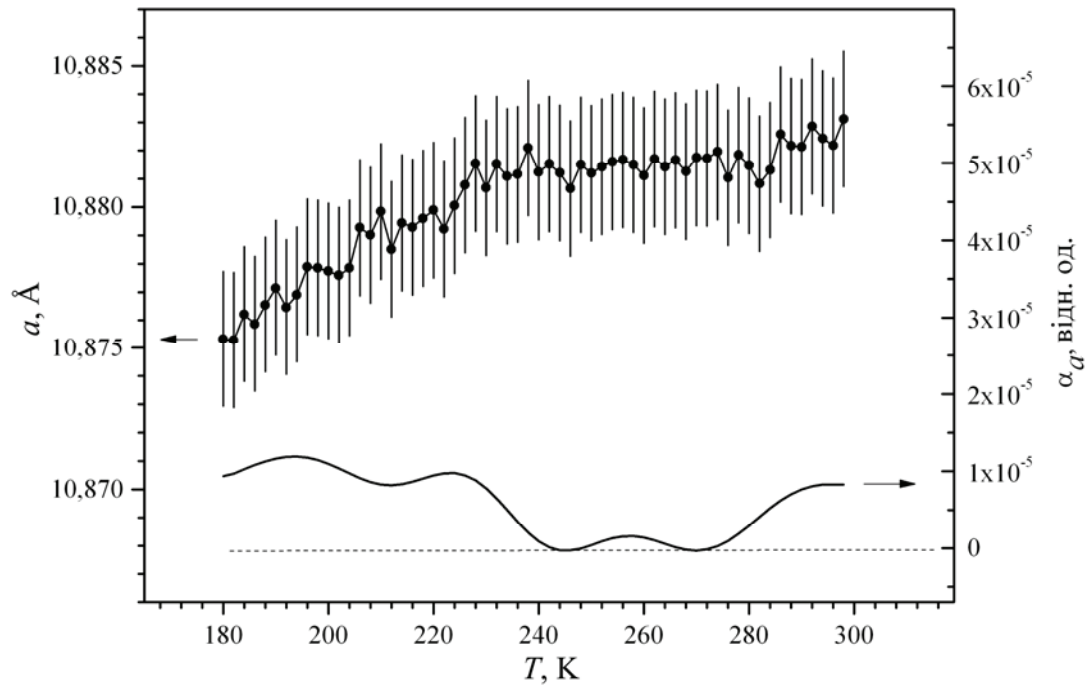


Рисунок 6 – Залежність параметра a елементарної комірки і коефіцієнта лінійного теплового розширення α_a для 2C-політипу кристалів TIInS_2

Figure 6 – The dependences of elementary cell a parameter and coefficient of linear thermal expansion α_a for TIInS_2 crystals 2C- polytypes.

Висновки.

У роботі експериментально виявлено аномалії на температурних залежностях коефіцієнтів лінійного теплового розширення і встановлено, що температурна поведінка параметра a елементарної комірки відображує перебудову кристалічної ґратки С-політипу TIInS_2 в околі температури $T=214$ К, в результаті якої змінюється характер теплового розширення кристалу. Оскільки температура $T=214$ К відповідає ФП "парафаза \leftrightarrow неспіврозмірна фаза", то поява неспіврозмірної хвилі модуляції впливає на силові константи кристалу таким чином, що змінює знак коефіцієнта α_a . Виявлені зміни залежностей $a(T)$ і $\alpha_a(T)$ при температурі $T=214$ К свідчить про те, що при утворенні неспіврозмірної фази статичні зсуви атомів відбуваються вздовж осі OX .

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- 1.Kashida S. X-ray study of the incommensurate phase of TIInS_2 / S. Kashida, Y. Kobayashi // J. Phys. C. – 1999. – V. 11. – P. 1027-1035.
- 2.Salnik A. The incommensurate phase transformation in TIInS_2 ferroelectric / A. Salnik, Yu. Gololobov, N. Borovoi // Ferroelectrics. – 2015. V. 484. – P. 62-68.
- 3.Borovoy N.A. On the ferroelectric phase transition in polytypes of $\beta\text{-TIInS}_2$ crystals / N.A. Borovoy, Yu.P. Gololobov, A.N. Gorb [et al.] // Physics of the Solid State. – 2008. – Vol. 50, №10. – P. 1946–1950.
- 4.Шелег А.У. Рентгенографические исследования несоизмеримой фазы в кристаллах TIInS_2 / А.У. Шелег, О.Б. Плющ, В.А. Алиев // Физика твердого тела. – 1994. – Т. 36, № 1. – С. 226–230.
- 5.Плющ О.Б. Политипизм и фазовые переходы в кристаллах TIInS_2 и TiGaSe_2 / О.Б. Плющ, А.У. Шелег // Кристаллография. – 1999. – Т. 44, № 5. – С. 873–877.
- 6.Sheleg A.U. Low-temperature X-ray studies of TIInS_2 , TiGaS_2 and TiGaSe_2 single crystals / A.U. Sheleg, V.V. Shautsova, V.G. Hurtavy [et al.] // Journal of Surface Investigation. X-ray, synchrotron and Neutron Techniques. – 2013. – Vol. 7, №6. – P. 1052–1055.
- 7.Bolotina N.B. X-Ray Diffraction Analysis of Modulated Crystals: Review / N.B. Bolotina // Crystallography Reports. – 2007. – V. 52, № 4. - P. 647–658.

8.Боровий М.О. Виникнення та трансформація нерозмірно модульованої структури в політипах напівпровідників $TlInS_2$ / М.О. Боровий, Ю.П. Гололобов, Г.Л. Ісаєнко, А.В. Ніколаєнко // Вісник Національного транспортного університету. – 2016. – №1(34). – С. 60-69.

9.Kashida S. Neutron scattering study of the structural phase transition in $TlGaSe_2$ / S. Kashida, Y. Kobayashi // Journal of Korean Physical Society. – 1998. – V. 32, № 1. – P. 40-43.

REFERENCES

1.Kashida, S., Kobayashi, Y. (1999). [X-ray study of the incommensurate phase of $TlInS_2$]. J. Phys. C, 11, 1027-1035.

2.Salnik, A., Gololobov, Yu., Borovoi, N. (2015). [The incommensurate phase transformation in $TlInS_2$ ferroelectric]. Ferroelectrics, 484, 62-68.

3.Borovoy, N.A., Gololobov, Yu.P., Gorb, A.N. (2008). [On the ferroelectric phase transition in polytypes of β - $TlInS_2$ crystals]. Physics of the Solid State, 50, 1946–1950.

4.Sheleg, A.U., Plusch, O.B., Aliev, V.A. (1994). Rentgenograficheskie issledovaniya nesoizmerimoy fazy v kristallax $TlInS_2$ [Sciagraphy researches of incommensurate phase are in the crystals of $TlInS_2$]. Physics of the Solid State, 36, 226-230 [in Ukrainian].

5.Plusch, O.B., Sheleg, A.U. (1999). Politipizm i fazovye perexody v kristallax $TlInS_2$ i $TlGaSe_2$ [Polytypes and phase passing to the crystals of $TlInS_2$ and $TlGaSe_2$]. Crystallography, 44, 873-877 [in Ukrainian].

6.Sheleg, A.U., Shautsova, V.V., Hurtavy, V.G. (2013). [Low-temperature X-ray studies of $TlInS_2$, $TlGaS_2$ and $TlGaSe_2$ single crystals]. Journal of Surface Investigation. X-ray, synchrotron and Neutron Techniques, 7, 1052–1055.

7.Bolotina, N.B. (2007). [X-Ray Diffraction Analysis of Modulated Crystals: Review]. Crystallography Reports, 52, 647–658.

8.Borovoy, N.A., Gololobov, Yu.P., Isaienko, G.L., Nikolaienko, A.V. (2016). Vynyknennya ta transformatsiya nerozmirno modulyovanoyi struktury v politypax napivprovodnykiv $TlInS_2$ [The appearance and transformation of an incommensurate modulated structure in the polytypes of semiconductors $TlInS_2$]. Visnyk National Transport University. Series «Technical sciences». Scientific and Technical Collection. – Kyiv: National Transport University, 1(34), 60-69 [in Ukrainian].

9.Kashida, S., Kobayashi, Y. (1998). [Neutron scattering study of the structural phase transition in $TlGaSe_2$]. Journal of Korean Physical Society, 32, 40-43.

РЕФЕРАТ

Боровий М.О. Особливості теплового розширення політипів кристалів $TlInS_2$ в інтервалі температур $T=180 - 300$ К / М.О. Боровий, Ю.П. Гололобов, Г.Л. Ісаєнко // Вісник Національного транспортного університету. Серія «Технічні науки». Науково-технічний збірник. – К. : НТУ, 2018. – Вип. 1 (40).

Досліджено вплив температури на коефіцієнти лінійного теплового розширення двох політипів кристалів $TlInS_2$.

Об'єкт дослідження – політипи кристалів $TlInS_2$.

Мета роботи – експериментальні дослідження температурних залежностей коефіцієнтів лінійного теплового розширення С- та 2С-політипів кристалів $TlInS_2$.

Метод дослідження – рентгенівська дифрактометрія.

Експериментально виявлено, що температурна поведінка параметра a відображує перебудову кристалічної ґратки С-політипу $TlInS_2$ в околі температури $T=214$ К, в результаті якої змінюється характер теплового розширення кристалу. Оскільки температура $T=214$ К відповідає ФП "парафаза - неспіврозмірна фаза", то поява неспіврозмірної хвилі модуляції впливає на силові константи кристалу таким чином, що змінює знак коефіцієнта α_a . Виявлена зміна залежності $a(T)$ при температурі $T=214$ К свідчить про те, що при утворенні неспіврозмірної фази статичні зсуви атомів відбуваються вздовж осі Ox .

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ПАРАМЕТРИ ЕЛЕМЕНТАРНОЇ КОМІРКИ, ТЕПЛОВЕ РОЗШИРЕННЯ, ПОЛІТИПИ, НЕСПІВРОЗМІРНА МОДУЛЯЦІЯ.

ABSTRACT

Borovoy N.A., Gololobov Yu.P., Isaienko G.L. The features of temperature expansion of $TlInS_2$ crystals polytypes in temperature range $T=180 - 300$ K. Visnyk National Transport University. Series «Technical sciences». Scientific and Technical Collection. – Kyiv: National Transport University, 2018. – Issue 1 (40).

It was investigated the influence of temperature on coefficient of linear expansion of crystals $TlInS_2$ polytypes.

Object of the study - polytypes of $TlInS_2$ crystals.

Purpose of the study is to investigate experimental temperature dependences of linear expansion of C- and 2C- polytypes of $TlInS_2$ crystals.

Method of the study – X-rays metod.

It was experimentally investigated that the temperature behavior of the parameter a reflects the restructuring of the crystalline lattice of the C-polytype $TlInS_2$ in the vicinity of the temperature $T = 214$ K, which results in a change in the nature of the thermal expansion of the crystal. Since the temperature $T = 214$ K corresponds to the AF of the "paraphase - incommensurate phase", the appearance of a incommensurate modulation wave affects the power constants of the crystal in such a way that changes the sign of the coefficient α_a . The change in the dependence of $a(T)$ at a temperature $T = 214$ K is shown that static shifts of atoms occur along the OX axis when the incommensurative phase is formed.

KEY WORDS: PARAMETERS OF ELEMENTARY CELL, THERMAL EXPANSION, POLYTYPES, INCOMMENSURATE MODULATION.

РЕФЕРАТ

Боровой Н.А. Особенности теплового расширения политипов кристаллов $TlInS_2$ в интервале температур $T=180 - 300$ К / Н.А. Боровой, Ю.П. Гололобов, Г.Л. Исаенко // Вестник Национального транспортного университета. Серия «Технические науки». Научно-технический сборник. – К.: НТУ, 2018. – Вып. 1 (40).

Исследовано влияние температуры на коэффициенты линейного теплового расширения двух политипов кристаллов $TlInS_2$.

Объект исследования – политипы кристаллов $TlInS_2$.

Цель работы - экспериментальные исследования температурных зависимостей коэффициентов линейного теплового расширения двух политипов кристаллов $TlInS_2$.

Метод исследования – рентгеновская дифрактометрия.

Экспериментально обнаружено, что температурное поведение параметра a отображает перестройку кристаллической решетки C-политипа $TlInS_2$ в окрестности температуры $T = 214$ К, в результате которой изменяется характер теплового расширения кристалла. Поскольку температура $T = 214$ К соответствует ФП "парафаза - несоизмерная фаза", то появление несоизмерной волны модуляции влияет на силовые константы кристалла таким образом, что меняет знак коэффициента α_a . Обнаружено изменение зависимости $a(T)$ при температуре $T = 214$ К, которое свидетельствует о том, что при образовании несоизмерной фазы статические смещения атомов происходят вдоль оси OX.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ, ТЕПЛОЕ РАСШИРЕНИЕ, ПОЛИТИПЫ, НЕСОРАЗМЕРНАЯ МОДУЛЯЦИЯ.

АВТОРИ:

Боровий Микола Олександрович, доктор фізико-математичних наук, доцент, Київський Національний університет імені Тараса Шевченка, завідувач кафедри загальної фізики, e-mail: borovoy@univ.kiev.ua, тел. +380445262288, Україна, 03680, м. Київ, просп. Акад. Глушкова 2, корпус №1, к. 225, orcid.org/0000-0002-2435-2620.

Гололобов Юрій Павлович, доктор фізико-математичних наук, професор, Національний транспортний університет, завідувач кафедри фізики, e-mail: gololo@ukr.net, тел. +380442846709, Україна, 01103, м. Київ, вул. М. Бойчука, 42, к. 406, orcid.org/0000-0003-3360-6669.

Ісаєнко Галина Леонідівна, кандидат фізико-математичних наук, доцент, Національний транспортний університет, доцент кафедри фізики, e-mail: gl_isayenko@ukr.net, тел. +380442846709, +380973387759, Україна, 01103, м. Київ, вул. М. Бойчука, 42, к. 410, orcid.org/0000-0003-0479-9596.

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, tel. +380445262288, Ukraine, 03680, Kyiv, Acad. Glushkova Prosp.2, build. 1, of. 225, orcid.org/0000-0002-2435-2620.

Gololobov Yurii P., doctor of sciences, professor, National Transport University, head department of physics, Kyiv, e-mail: gololo@ukr.net, tel. +380442846709, Ukraine, 01103, Kyiv, M. Boychuk str., 42, of. 406, orcid.org/0000-0003-3360-6669.

Isaienko Galina L., Ph. D., National Transport University, associate professor department of physics, e-mail: gl_isayenko@ukr.net, tel. +380442846709, +380973387759, Ukraine, 01103, Kyiv, M. Boychuk str., 42, of. 410, orcid.org/0000-0003-0479-9596.

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, тел. +380445262288, Украина, 03680, г. Киев, просп. Акад. Глушкова 2, корпус №1, к. 225, orcid.org/0000-0002-2435-2620.

Гололобов Юрий Павлович, доктор физико-математических наук, профессор, Национальный транспортный университет, заведующий кафедры физики, e-mail: gololo@ukr.net, тел. +380442846709, Украина, 01103, г. Киев, ул. М. Бойчука, 42, к. 406, orcid.org/0000-0003-3360-6669.

Исаенко Галина Леонидовна, кандидат физико-математических наук, доцент, Национальный транспортный университет, доцент кафедры физики, e-mail: gl_isayenko@ukr.net, тел. +380442846709, +380973387759, Украина, 01103, г. Киев, ул. М. Бойчука, 42, к. 410, orcid.org/0000-0003-0479-9596.

РЕЦЕНЗЕНТИ:

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

Ільїн П.П., 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.

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