

## Autoreferat

Załącznik nr 2-PL

<b>Treść</b>	
<b>I.</b>	<b>Imię oraz Nazwisko.</b> <b>1</b>
<b>II.</b>	<b>Kariera akademicka oraz badawcza (krótka wersja).</b> <b>1</b>
<b>III</b>	<b>Bibliometryczne wskaźniki według bazy 'Web of Science'.</b> <b>1</b>
<b>IV.</b>	<b>Osiągnięcia będące podstawą ubiegania się o stopień doktora habilitowanego.</b> <b>2</b>
	<b>IV.I. Kontekst i tło naukowe badań.</b> <b>3</b>
	IV.I.1. <i>Wprowadzenie.</i> <b>3</b>
	IV.I.2. Zastosowanie spektroskopii promieniowania rentgenowskiego do systemów wysocie nieuporządkowanych. <b>5</b>
	IV.I.3. Interpretacja widma absorpcji promieniowania X powłoki L dla metali przejściowych. Podstawowe aspekty. <b>10</b>
	IV.I.4. Potencjał połączonych metod spektroskopii emisyjnej i absorpcyjnej miękkiego promieniowania rentgenowskiego w zastosowaniu do szacowania prostych i skośnych szerokości pasm wzbronionych w półprzewodnikach. <b>15</b>
	IV.I.5. Spektroskopia promieniowania X oraz obliczenia z pierwszych zasad użyte do interpretacji struktury elektronowej polikrystalicznego chlorku kadmu. <b>22</b>
	IV.I.6. Zjawisko kwantowego ograniczenia wymiarowości zaobserwowane w badaniach XANES na przykładzie koloidalnych kropek kwantowych. <b>23</b>
	IV.I.7. Badania EXAFS dla materiałów spintronicznych. <b>27</b>
	IV.II. <i>Podsumowanie pracy: wkład własny.</i> <b>30</b>
	<i>Literatura do rozdziału IV.</i> <b>33</b>
<b>V.</b>	<b>Dyskusja innej aktywności/działalności naukowej.</b> <b>35</b>
	V.1. Kariera akademicka oraz naukowa. <b>35</b>
	V.2. Publikacje naukowe w czasopismach znajdujących się w bazie JRC. <b>42</b>
	V.3. Monografie oraz publikacje naukowe w czasopismach międzynarodowych lub krajowych innych niż znajdujące się w bazie JRC. <b>46</b>
	V.4. Wystąpienia konferencyjne. <b>46</b>
	V.5. Działalność dydaktyczna i popularyzatorska. <b>54</b>
	V.6. Udział w projektach badawczych. <b>55</b>
	V.7. Działalność recenzencka. <b>56</b>

## I. Imię oraz Nazwisko.

Iraida N. Demchenko

## II. Kariera akademicka oraz badawcza (krótka wersja).

- Mgr: Doniecki Nacjonalny Uniwersytet, Donetsk, Ukraina, specjalizacja: Fizyka Ciała Stałego oraz Fizycznego Materiałoznawstwa, 1989-1994;
- Asystent: Doniecki Uniwersytet Techniczny, Donetsk, Ukraina, Departament Fizyki, 1994-1996;
- Asystent: Doniecki Nacjonalny Uniwersytet, Donetsk, Ukraina, Departament Fizyki Ciała Stałego oraz Fizycznego Materiałoznawstwa, 1996-1999;
- Studia doktoranckie: Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, Warszawa, Fizyka, SL1, 01.04.2000 -23/06/2005.
- Wizyta naukowa - Francja, ESRF (ang.: European Synchrotron Radiation Facility) synchrotron, tydzień, 2002.
- Wizyta naukowa - Francja, ILL (ang.: Institut Laue-Langevin), tydzień, 2002.
- Wizyta naukowa - Francja, Komisja Energii Atomowej, Centrum naukowe, tydzień, 2002.
- Wizyta naukowa - Hiszpania, Uniwersytet w Barcelonie, Departament Fizyki, dwa tygodnie, 2003.
- Wizyta naukowa – Hiszpania, Instytut Fizycznego Materiałoznawstwa w Madrycie, trzy dni, 2003.
- Wizyta naukowa – Stany Zjednoczone, Nacjonalne Laboratorium L. Berkeley (ang.: Lawrence Berkeley National Lab), ALS synchrotron (ang.: Advanced Light Source), trzy tygodnie, 2003.
- Wizyta naukowa – Belgia, Uniwersytet w Antwerpie, miesiąc, 2004.
- Staż podoktorski – Stany Zjednoczone, Uniwersytet w Newadzie oraz Nacjonalne Laboratorium L. Berkeley, 01.06.2007 - 01.10.2011.
- 2005 -2007, oraz 2011 – do chwili obecnej, Instytut Fizyki PAN, SL 1.2.

Udział w projektach naukowych (przeważnie jako kierownik) realizowanych w ośrodkach synchrotronowych takich jak: Doris (DESY) w Hamburgu oraz Bessy w Berlinie, Niemcy; ESRF w Grenoble oraz LURE w Paryżu, Francja; ALBA w Barcelonie, Hiszpania; LBNL, ALS w Berkeley, Stany Zjednoczone, gdzie przez 4 lata pracowałam jako opiekun stacji eksperymentalnej 9.3.1.

## III. Bibliometryczne wskaźniki według bazy ‘Web of Science’.

- sumaryczny *impact factor* publikacji naukowych według listy Journal Citation Reports (JCR), zgodnie z rokiem opublikowania (dla publikacji sprzed roku 2008 przyjęto IF2008, a dla publikacji z roku 2013 przyjęto IF2012) – **76,203**
- liczba cytowań publikacji według bazy Web of Science (WoS) – **201**  
(bez autocytowań – **186**)
- indeks Hirscha opublikowanych publikacji według bazy WoS – **9**

*Iraida Demchenko*

#### IV. Osiągnięcia będące podstawą ubiegania się o stopień doktora habilitowanego.

Jako osiągnięcie, w rozumieniu art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, wskazuję jednotematyczny cykl siedmiu publikacji zatytułowany:

##### **„Charakteryzacja elektronowych oraz strukturalnych właściwości materiałów o różnym stopniu uporządkowania i wymiarowości badanych dla wybranych pierwiastków oraz orbitali za pomocą spektroskopii promieni X”**

###### **H-1. “Highly mismatched crystalline and amorphous GaN<sub>1-x</sub>As<sub>x</sub> alloys in the whole composition range”**

By: Yu, K. M.; Novikov, S. V.; Broesler, R.; [Demchenko, I. N.](#), Denlinger, J. D., Liliental-Weber, Z., Luckert, F., Martin, R. W., Walukiewicz, W., Foxon, C. T.

JOURNAL OF APPLIED PHYSICS Volume: 106 Issue: 10 Article Number: 103709 Published: NOV 15 2009

###### **H-2. “An XANES and XES investigation of the electronic structure of indium rich In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N films”**

By: [Demchenko, I. N.](#); Chernyshova, M.; Piskorska-Hommel, E., Minikayev, R., Domagala, J.Z., Yamaguchi, T., Stolte, W.C., Lawniczak-Jablonska, K.

JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS Volume: 509 Issue: 39 Pages: 9528-9535 Published: SEP 29 2011

###### **H-3. “Full multiple scattering analysis of XANES at the Cd L<sub>3</sub> and O K edges in CdO films combined with a soft-x-ray emission investigation”**

[Demchenko, I. N.](#); Denlinger, J. D.; Chernyshova, M., Yu, K. M., Speaks, D. T., Olalde-Velasco, P., Hemmers, O., Walukiewicz, W., Derkachova, A., Lawniczak-Jablonska, K.

PHYSICAL REVIEW B Volume: 82 Issue: 7 Article Number: 075107 Published: AUG 5 2010

###### **H-4. “Electronic structure of polycrystalline cadmium dichloride studied by X-ray spectroscopies and *ab initio* calculations”**

By: [Demchenko, I. N.](#); Chernyshova, M.; Stolte, W. C., Speaks, D.T., Derkachova, A.

MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS Volume: 135 Issue: 2-3 Pages: 1036-1043 Published: AUG 15 2012

###### **H-5. “Synthesis and Transformation of Zn-Doped PbS Quantum Dots”**

By: He, X.; [Demchenko, I. N.](#); Stolte, W. C., van Buuren, A., Liang, H.

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C Volume: 116 Issue: 41 Pages: 22001-22008 Published: OCT 18 2012

###### **H-6. “XANES: observation of quantum confinement in the conduction band of colloidal PbS quantum dots”**

By: [Demchenko, I. N.](#); Chernyshova, M.; He, X.; Minikayev, R., Syryanyy, Y., Derkachova, A., Derkachov, G., Stolte, W.C., Piskorska-Hommel, E., Reszka, A., Liang, H.

JOURNAL OF PHYSICS Conf. Ser. Volume: 430 Article Number: UNSP 012030 Published: 2013

###### **H-7. “Modification of the local atomic structure around Mn atoms in (Ga, Mn) As layers by high temperature annealing”**

By: [Demchenko, I. N.](#); Lawniczak-Jablonska, K.; Story, T., Osinniy, V., Jakiela, R., Domagala, J.Z., Sadowski, J., Klepka, M., Wolska, A., Chernyshova, M.

JOURNAL OF PHYSICS - CONDENSED MATTER Volume: 19 Issue: 49 Article Number: 496205 Published: DEC 12 2007

*Iraida Demchenko*

## IV.I. Kontekst i tło naukowe badań.

### IV.I.1. Wprowadzenie.

Najciekawszym zagadnieniem w fizyce ciała stałego jest zrozumienie struktury oraz własności materii. Co sprawia, że metal ma właściwości metaliczne? Dlaczego krzemiany w szklach są przezroczyste dla światła widzialnego, ale w innych formach krzemianów nie? Co sprawia, że żelazo jest materiałem magnetycznym? Dlaczego diament jest twardy, ale bryła węgla pozostaje dość miękka? W końcu oba materiały są zbudowane z tych samych atomów. Lista podobnych zagadnień jest bardzo długa i łatwo jest zauważyć, że rozwiązanie każdego z nich jest jednocześnie fascynującym oraz wartym wysiłku przedsięwzięciem. Możliwość kontrolowania fizycznych właściwości nowoczesnych materiałów, poprzez kontrolowanie ich struktury krystalograficznej, ułożenia atomów w objętości próbki oraz na powierzchni, biorąc pod uwagę defekty punktowe, ma zasadnicze znaczenie, zarówno z punktu widzenia nauk podstawowych, jak i przyszłych zastosowań. Aby zrozumieć naturę materii musimy zwrócić uwagę z jakich atomów ta materia jest zbudowana. Atomy z kolei, składają się z jąder oraz elektronów tworzących strukturę elektronową. Struktura ta ostatecznie określa wszystkie właściwości materiału. Naturalnym więc jest oczekiwać, iż wiedza o strukturze elektronowej różnych systemów, wraz z możliwością opisu oraz przewidywania tej struktury dla nowych systemów, doprowadzi do znacznego postępu w dziedzinie nauki i technologii. Ze względu na możliwości dostarczenia szczegółowych informacji o strukturze elektronowej materiału, spektroskopia promieni rentgenowskich ma szczególne znaczenie w badaniu nowych materiałów, ponieważ umożliwia ona zbudowanie pomostu pomiędzy informacjami strukturalnymi oraz właściwościami szerokiej klasy nowoczesnych materiałów.

Prezentowana rozprawa habilitacyjna obejmuje ważne przykłady aplikacji metod spektroskopowych (XAFS<sup>1</sup>/XES<sup>2</sup>/RIXS<sup>3</sup>), które wykorzystują unikatowe cechy tak zwanych procesów foton „in/-out”, czyli procesów w których foton jest zarówno sondą jak i nośnikiem informacji. Rozprawa przedstawiona jest w sposób następujący. Po krótkim wstępie przedstawionym w tym rozdziale, rozdział IV.I.2 poświęcony został zastosowaniu miękkiej spektroskopii rentgenowskiej (zarówno XANES oraz XES) do systemów o wysokim stopniu nieuporządkowania strukturalnego, na przykładzie GaN<sub>1-x</sub>As<sub>x</sub> [H-1]. W rozdziale IV.I.3, na przykładzie systemów 3d metali przejściowych (In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N [H-2]) krawędzi L<sub>3</sub>

---

<sup>1</sup> XAFS (ang.: X-ray absorption fine structure) - Subtelna struktura widma absorpcji promieniowania rentgenowskiego. Struktura ta dzieli się na obszary: (i) XANES (ang.: X-ray absorption near edge structure) - Rentgenowska absorpcyjna struktura przykrawędziowa, oraz (ii) EXAFS (ang.: extended X-ray absorption fine structure) - Rentgenowska ponadkrawędziowa struktura subtelna widm absorpcji;

<sup>2</sup> XES (ang.: X-ray emission spectroscopy) – Spektroskopia emisji rentgenowskiej;

<sup>3</sup> RIXS (ang.: Resonant inelastic X-ray scattering) - Rezonansowe nieelastyczne rozpraszanie promieniowania rentgenowskiego.

metalu, przedstawiono wpływ uwzględnienia dziury rdzeniowej w trakcie interpretacji widm XANES. Efekt ten obliczono za pomocą funkcji Greena wykorzystując teorię wielokrotnych rozprośnień w przestrzeni rzeczywistej (pakiet numeryczny FEFF8) . W rozdziałach IV.1.4 i IV.1.5 opisano użyteczność stosowania kombinacji spektroskopii XANES, XES oraz RIXS do oszacowania prostej/skośnej przerwy energetycznej materiałów (na przykładach CdO [H-3] oraz CdCl<sub>2</sub> [H-4]). Skuteczność absorpcyjnej spektroskopii rentgenowskiej jako narzędzia do obserwacji efektu kwantowego w koloidalnych nano-cząstkach omówiona została w rozdziale IV.1.6 [H-5, H-6]. W rozdziale IV.1.7 przedstawiono z kolei przydatność spektroskopii EXAFS dla charakteryzacji materiałów spintronicznych na przykładzie systemu Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>As [H-7]. Uwzględniono możliwość istnienia defektów punktowych manganu zarówno podstawieniowych jak i międzywęzłowych, oraz tworzenia klastrów manganu. Omówiono również sprzężenia magnetyczne zachodzące w badanym układzie. Mój wkład do zagadnień naukowych, przedstawionych powyżej, omówiony został w rozdziale IV.II „Podsumowanie pracy: wkład własny”. Przykłady przedstawione w pracy habilitacyjnej wykazują skuteczność metod spektroskopii rentgenowskiej w uzyskaniu informacji na temat struktury elektronowej oraz uporządkowania atomowego dla szerokiej klasy materiałów oraz potwierdzają fakt, że techniki te są przydatne w wielu zagadnieniach naukowych związanych z inżynierią materiałową.

Zanim przejdę do opisu głównej części rozprawy, chciałabym podkreślić, że wszystkie aspekty przedstawianej pracy badawczej dotyczące spektroskopii rentgenowskiej zostały opracowane przeze mnie, tzn.: określenie celu badań, organizacja oraz realizacja pomiarów synchrotronowych; interpretacja uzyskanych danych doświadczalnych wspierana analizą teoretyczną, oraz przygotowanie publikacji. Prace moje przyczyniły się do postępu w dziedzinie spektroskopii rentgenowskiej oraz umożliwiły pozyskiwanie dofinansowania dla nowych tematów badawczych.

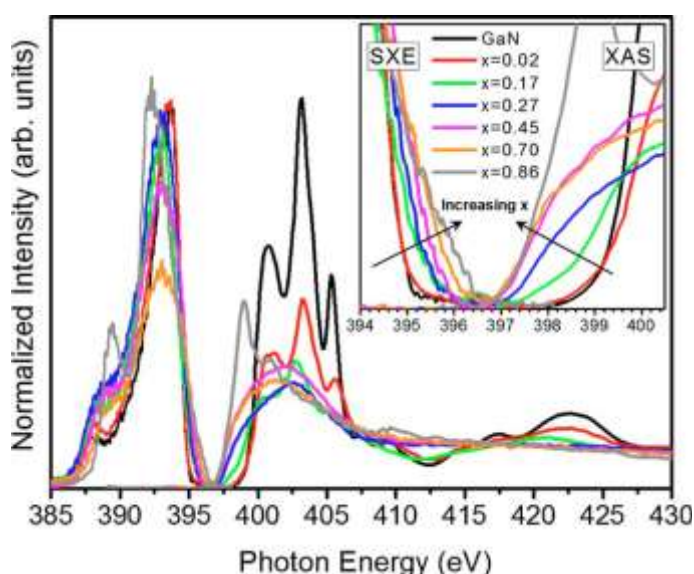
## IV.1.2. Zastosowanie spektroskopii promieniowania rentgenowskiego do systemów wysoce nieuporządkowanych. [H-1]

Mieszanie materiałów jest powszechnie przyjętą metodą w celach dostosowywania właściwości materiałów półprzewodnikowych dla konkretnych zastosowań. Jednak, tylko ograniczona liczba stopów półprzewodnikowych może być z łatwością syntezowana w pełnym zakresie koncentracji. Takie stopy są na ogół utworzone z elementów składowych, które są dobrze dopasowane pod względem jonowości, rozmiaru atomu, oraz elektroujemności. Istnieje ponadto szeroka grupa stopów półprzewodnikowych wykonanych z materiałów składowych o wyraźnie różnych właściwościach niż te wspomniane powyżej. W większości przypadków, te niedopasowane stopy nie mieszają się w normalnych warunkach wzrostu. W przeciwieństwie do bardzo intensywnie badanych stopów GaNAs bogatych w As, znacznie mniej prac poświęcono bardzo niedopasowanym stopom (ang.: highly mismatched alloys, HMAs) bogatym w azot. W badaniach prezentowanej pracy, wysoce niedopasowany system stopów  $\text{GaN}_{1-x}\text{As}_x$  został skutecznie zsyntezowany w całym zakresie koncentracji w warunkach wzrostu nierównowagowego przy niskiej temperaturze za pomocą metody epitaksji z wiązek molekularnych. W celu określenia zmian struktury elektronowej (wokół poziomu Fermiego) oraz struktury atomowej dla systemu  $\text{GaN}_{1-x}\text{As}_x$  zastosowano metodę spektroskopii promieniowania rentgenowskiego. Dla większości próbek wyznaczenie struktury krystalicznej za pomocą XRD było niemożliwym z powodu braku uporządkowania dalekiego zasięgu (struktura amorficzna). Obecność uporządkowania dalekiego zasięgu nie jest wymagana dla pomiarów spektroskopii promieniowania rentgenowskiego, co sprawia, że jest ona jedną z kilku technik strukturalnych dostępnych dla materiałów niekrystalicznych oraz o wysokim stopniu nieuporządkowania strukturalnego. Analiza wyników spektroskopii promieniowania rentgenowskiego wykazała, że w próbkach GaN o niewielkich stężeniach domieszek As, poziomy energetyczne domieszki wykazują charakterystyczną niebieską emisję w temperaturze pokojowej, w przeciwieństwie do próbek o większym stężeniu As, gdzie została zaobserwowana gwałtowna redukcja szerokości przerwy wzbronionej uzyskanych stopów  $\text{GaN}_{1-x}\text{As}_x$ . Podjęta w tej pracy tematyka naukowa pokazała nowatorskie zastosowanie technik spektroskopii rentgenowskiej. Wykazane niezwykle właściwości elektronowe tych materiałów oraz możliwość kontrolowania położenia krawędzi pasma przewodnictwa i pasma walencyjnego stwarzają możliwość efektywnego wykorzystania tych stopów w nowych urządzeniach do konwersji energii słonecznej.

### IV.1.2.1. Pasma wzbronione oraz struktura elektronowa $GaN_{1-x}As_x$ w całym zakresie koncentracji.

Badania dyfrakcyjne wykazały, że próbki  $GaN_{1-x}As_x$  w zakresie składu  $0.17 < x < 0.75$  są amorficzne, podczas gdy poza tym zakresem są krystaliczne (monokrystaliczne lub polikrystaliczne). Wielkość pasma wzbronionego w tych stopach została zmierzona za pomocą spektrometru LAMBDA-950 UV/vis/NIR w zakresie długości fali 190–3300 nm. Wielkość pasm wzbronionych stopów  $GaN_{1-x}As_x$  została oszacowana przez ekstrapolację części liniowej  $\alpha^2$  do osi energii [H-1, rys. 5]. We wszystkich badanych próbkach zaobserwowano zaskakująco ostrą krawędź absorpcji optycznej. Jest to szczególnie istotne dla warstw amorficznych, ponieważ sugeruje to, że gęstości stanów w pasmie wzbronionym (ang.: the densities of gap states) w warstwach amorficznych są znikome, zgodnie z przewidywaną niską liczbą wiązań homopolarnych w stopach na bazie azotku [1]. Drobne oscylacje poniżej pasma wzbronionego zostały przypisane do oscylacji Fabry–Perot wskazujących na jednolitą grubość warstw, ich gładką powierzchnię oraz ostry interfejs pomiędzy warstwą a podłożem. Ponieważ stopy krystaliczne i amorficzne  $GaN_{1-x}As_x$  mogą być materiałami o bardzo różnych właściwościach, podobnie jak krzem krystaliczny i amorficzny, bardzo ciekawe było bezpośrednie porównanie ich właściwości, zwłaszcza gdy bardzo niewiele wiadomo o amorficznych materiałach azotkowych. Pomimo przejść pomiędzy fazami krystalicznymi i amorficznymi, wyniki absorpcji optycznej wykazały ciągłe, monotoniczne zmniejszanie się szerokości przerwy energetycznej w miarę wzrostu zawartości As. Jest to dodatkowym potwierdzeniem tego, że warstwy są jednofazowe, czyli nie zawierają rozdzielania faz w stanie krystalicznym jak również niejednorodności składu w stanie amorficznym.

Zależność od składu energii pasma wzbronionego zarówno dla stopów krystalicznych jak i amorficznych  $GaN_{1-x}As_x$  została porównana bezpośrednio do obliczonej zależności szerokości pasma wzbronionego. Wykazano, że wartości szerokości pasma wzbronionego dla amorficznych stopów  $GaN_{1-x}As_x$  nie mogą być wyjaśnione poprzez teorię w przybliżeniu tzw. kryształu wirtualnego (ang.: virtual crystal approximation, VCA)



Rysunek 1

lub dopasowane krzywą z wykorzystaniem pojedynczego parametru wygięcia 16.2eV. Jednocześnie, zaobserwowano doskonałą zgodność

między wartościami pasma wzbronionego dla stopów krystalicznych oraz modelem krzyżowania się pasm (ang.: the band anticrossing, BAC) [2-4, H-1]. Odchylenie wyników doświadczalnych absorpcji optycznej od obliczeń BAC wykonanych dla stopów amorficznych nie było zaskakujące, ponieważ model ten był opracowany dla materiałów krystalicznych. Dodatkową niepewność wprowadza też fakt, że pasmo wzbronione zostało obliczone jako interpolacja kompozycji wagowej wyników modeli BAC. Założenie to jest mniej poprawne dla stopów w środkowym zakresie składu.

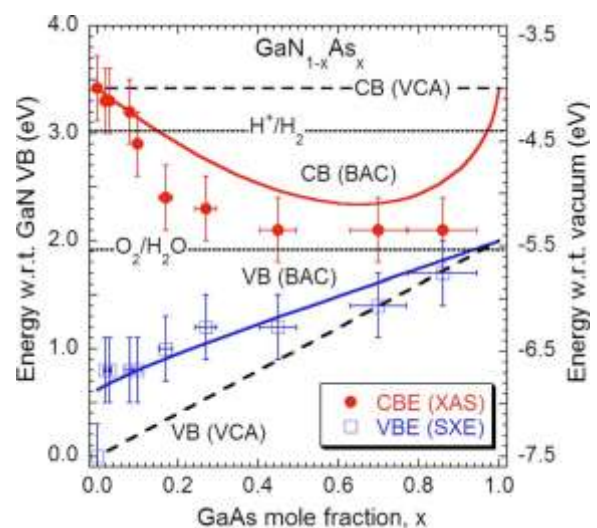
Według modelu BAC, zaobserwowane zmniejszenie pasma wzbronionego może być przypisane do przesunięcia krawędzi pasma walencyjnego w kierunku wyższych energii (ang.: valence band edge, VBE) w stopach bogatych w N oraz przesunięcia krawędzi pasma przewodnictwa (ang.: conductive band edge, CBE) w kierunku niższych energii, w stopach bogatych w As. Jednakże, z przeprowadzonych pomiarów optycznych nie można stwierdzić, które z pasm uległo przesunięciu. Mój wkład w rozwiązanie powyższego zagadnienia polegał na wyznaczeniu struktury elektronowej badanego układu wokół poziomu Fermiego poprzez połączenie emisji i absorpcji miękkiego promieniowania rentgenowskiego oraz interpretacji uzyskanych wyników. Z pomiarów XAS oraz XES uzyskuje się informacje o gęstości stanów (ang.: density of states, DOS) odpowiednio w paśmie przewodnictwa i paśmie walencyjnym [H-1]. Nakładające się widma XES oraz XAS w odniesieniu do poziomu podstawowego zapewniają bezpośredni pomiar energii stanów VB oraz CB w materiałach półprzewodnikowych. Krawędź K azotu (około 400 eV) została zmierzona w temperaturze pokojowej w ALS na linii eksperymentalnej 8.0.1. Pomiar XAS przeprowadzono za pomocą fluorescencyjnego modu detekcji z rozdzielczością energii około 0.2eV, a XES zostało zmierzone przy wykorzystaniu siatkowego spektrometru Tennessee/Tulane z całkowitą rozdzielczością energetyczną 0.6 eV.

Bezwzględne położenie krawędzi CB oraz VB zostało bezpośrednio zmierzone w funkcji składu ( $x$ ) w odniesieniu do poziomu  $1s$  azotu oraz porównane z wynikami konwencjonalnych pomiarów optycznych. Najistotniejsze zmiany zaobserwowane w widmach azotu to gwałtowne poszerzenie oraz zmniejszenie pierwotnie wyraźnych rezonansów XAS wraz ze wzrostem zawartości As (Rys. 1). Zaobserwowane w czystym GaN trzy wyraźne rezonanse dla stopów z niską zawartością As ( $x=0.02$ ) wykazują znacząco zredukowaną amplitudę oraz ich nieznaczne poszerzenie. Takie zachowanie jest zgodne z małym nieuporządkowaniem strukturalnym oraz utratą orientacji ziaren polikrystalicznych anizotropowych struktur wurcytu GaN. Potwierdza to zależność od polaryzacji promieniowania widm XAS dla tych próbek (dane nie są przedstawione). Wraz ze wzrostem zawartości As w próbce, widma XAS przekształcają się w bardzo spłaszczone gładkie profile dla  $x=0.17-0.70$ , co wskazuje na całkowitą utratę uporządkowania dalekiego zasięgu w stanie amorficznym. Ponadto, zaobserwowano bardzo różne kształty progów absorpcji widm XAS dla stopów krystalicznych oraz amorficznych. Dla GaN oraz warstw polikrystalicznych z niewielką zawartością As, obserwujemy powolny wzrost natężenia, który wynika z obecności pojedynczego odizolowanego pasma z lekką efektywną masą nośników. Pasma to



rozciga się w dół od głównego rezonansu CB DOS oraz wykazuje zbliżony do kwadratowego profil DOS, który jest związany z nie-paraboliczną dyspersją. Profile progu absorpcji widm XAS dla amorficznych próbek wykazują ponadto gwałtowne przesunięcie progu absorpcji ( $\sim 1\text{eV}$ ), w stronę niższych energii, ale z profilem DOS bardzo zbliżonym do liniowego. Wzrost nachylenia liniowego początku progu absorpcji dla próbek o zawartości As od  $x=0.17$  do  $x=0.45$ , a następnie stosunkowo stałe nachylenie dla stopów z  $x$  do  $\sim 0.70$  może być zinterpretowane jako rosnący sukcesywnie stopień hybrydyzacji stanów przewodnictwa N 2p ze stanami As. Stopień hybridzacji stanów azotu ze stanami najbliższych sąsiadów As osiąga maksimum przy 50% stechiometrii. Mimo dużych zmian w profilu XAS dla rozcieńczonego As ( $x=0.02$ ), energia progu absorpcji oraz łagodny początek jego profilu pozostają niezmienione. Stąd też CBE nie jest odpowiedzialne za dużą  $\sim 0.8\text{eV}$  redukcje optycznego pasma wzbronionego zaobserwowaną dla rozcieńczonej zawartości As. Zaobserwowano, natomiast, słaby wzrost stanów w rejonie progu XES, który przesuwają VBE. Obserwowana zmiana VB wskazuje na hybrydyzację stanów p N z poziomem domieszki As tuż przy maksimum pasma walencyjnego GaN (ang.: valence band maximum, VBM). Położenie tego maksimum jest podstawą dla modelu BAC przy interpretacji redukcji pasma wzbronionego w rozcieńczonym roztworze GaNAs. Dla zwiększającej się zawartości As w fazie amorficznej, energia stanów przy VBE tylko nieznacznie się zwiększa podczas gdy ich natężenie wzrasta systematycznie z powodu wzrostu liczby sąsiadujących atomów As, których stany elektronowe hybrydują ze stanami N p. W obszarze składu bogatym w As (próbki o składzie  $x=0.86$ ), zarówno profile XES jak i XAS wykazują dramatyczne zmiany. Widmo XES kubicznej fazy polikrystalicznej GaAs ponownie wykazuje DOS o wyraźnym dwupikowym profilu, natomiast kształt oraz położenie maksimum pików tego widma znacząco się różni od fazy polikrystalicznej heksagonalnego h-GaN z małą koncentracją As. Profil XAS dla stopu z  $x=0.86$  również wykazuje wyraźną strukturę tuż ponad progiem absorpcji. Zamiast wskazywać na zmianę strukturalną, ostry rezonans przyprogowy odzwierciedla istnienie zlokalizowanego stanu domieszki N ulokowanego tuż przy minimum GaAs CB. Ewolucja tego zlokalizowanego stanu w wąskie pasmo poprzez hybrydyzację ze stanami przewodnictwa GaAs jest źródłem gwałtownej redukcji szerokości pasma wzbronionego z czystego GaAs w modelu BAC.

Zależność od składu energii CBE oraz VBE od strony krawędzi azotu dla stopów  $\text{GaN}_{1-x}\text{As}_x$  zmierzona za pomocą XAS i SXE została zaprezentowana wraz z



Rysunek 2

przewidywanymi wartościami w modelu BAC (Rys. 2). Należy podkreślić, że obliczone przez interpolację modelu BAC przesunięcia pasma zostały przedstawione wyłącznie dla celów porównawczych. Przesunięcia pasma w stopach amorficznych mogą się bardzo różnić od stopów krystalicznych. Zarówno CBE jak i VBE ulegają przesunięciom wraz ze wzrostem  $x$ . Skokowy wzrost położenia VBE w kierunku wyższej energii dla małych zawartości As ( $x \sim 0.10$ ) w próbkach polikrystalicznych w porównaniu do GaN, został zaobserwowany zgodnie z modelem BAC. Drugi skok w kierunku niskiej energii został zaobserwowany w CBE po wejściu w fazę amorficzną ( $x \sim 0.17$ ). Wraz ze wzrostem  $x$  w fazie amorficznej, zarówno VBE jak i CBE jedynie słabo przesuwają się w kierunku, odpowiednio, wyższych i niższych energii. Kolejny skok w położeniu VBE zaobserwowano dla przejścia z fazy amorficznej do polikrystalicznej bogatej w As ( $x \sim 0.70$ ). Zgodnie z oczekiwaniami, ciągła interpolacja modelu BAC z rozcieńczonych rejonów polikrystalicznych dla fazy amorficznej nie wyjaśnia obserwowanych dla tej fazy nieciągłych skoków energii. Należy również podkreślić, że energie pasma wzbronionego zmierzone przez XAS oraz XES są niższe w porównaniu do wartości uzyskanych za pomocą absorpcji optycznej. Można to wyjaśnić istnieniem wiązania ekscytonowego między ekranowaną dziurą rdzeniową oraz elektronem przewodnictwa [5].

### **IV.1.3. Interpretacja widma absorpcji promieniowania X powłoki L dla metali przejściowych. Podstawowe aspekty. [H-2]**

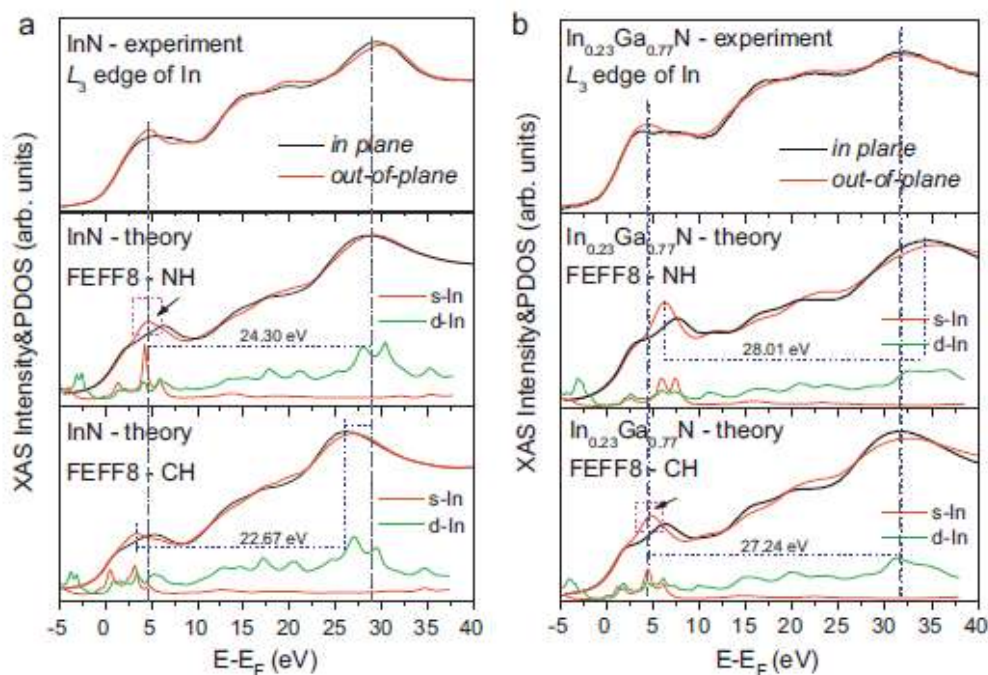
Technika XANES obecnie jest bardzo popularna w wielu dziedzinach nauki ze względu na jej wyjątkowy potencjał w dostarczaniu informacji o lokalnej strukturze chemicznej w złożonych oraz nieuporządkowanych materiałach. Niestety, symulacje widm XANES oraz ich interpretacja pozostają do chwili obecnej trudnym zagadnieniem. W tym celu, do przeprowadzenia symulacji widm XANES metali, często stosowane są metody struktury pasmowej [6, 7]. Chociaż obliczenia te są skuteczne w odtwarzaniu widm XANES, mają one ograniczone zastosowanie ze względu na warunek istnienia periodyczności sieci. Ponadto, obliczenia te często zaniedbują obecność dziury rdzeniowej (ang.: core hole, CH), jak również efekty samouzgodnienia energii (ang.: self-energy effects), a zatem nie pozwalają na bezpośrednie porównanie danych teoretycznych z eksperymentem. Problemy te zmotywowały mnie do zastosowania do symulacji widm XANES teorii wielokrotnych rozprożeń w przestrzeni rzeczywistej (ang.: real-space multiple-scattering, RSMS). Metoda ta nie wymaga istnienia symetrii w układzie lub periodyczności. Obliczenia takie zostały przeprowadzone dla układu InGaN [H-2]. Metoda RSMS częściowo unika trudności obliczeniowych dla dużych klastrów (> 1000 atomów) i pozwala na obliczenia odpowiednich wkładów do funkcji Greena bazując na obliczeniach przeprowadzanych dla klastra o znacznie mniejszym rozmiarze (zazwyczaj mniej niż 100 atomów). Rozwinięcie wielokrotnych rozprożeń do wyższego rzędu wykonywane jest tylko dla ważniejszych ścieżek rozpraszania, które wykraczają poza granice rozpatrywanego małego klastra. Prezentowaną szczegółową analizę XANES dla krawędzi  $L_3$  metalu przejściowego przeprowadzono przy użyciu relatywistycznego kodu numerycznego FEF8. Ponadto, przy obliczeniu widm XANES przetestowano kilka sposobów uwzględnienia dziury rdzeniowej. Stwierdzono, że dla absorpcji rentgenowskiej indu na krawędzi  $L_3$  we wzbogaconych indem warstwach InGaN, obliczenia dla stanu podstawowego rozsądnie opisują dane eksperymentalne tylko dla warstwy InN. Uwzględnienie stanów wzbudzonych (obecność dziury rdzeniowej) modyfikuje gęstości stanów elektronowych i daje lepszą zgodność z eksperymentem dla wszystkich stopów trójskładnikowych. Mój wkład w omawianą pracę obejmował zarówno przeprowadzenie pomiaru widm jak i symulacje numeryczne.

#### ***IV.1.3.1. Struktura elektronowa warstw $In_xGa_{1-x}N$ bogatych w In: badania XANES.***

Pomimo powszechnego stosowania stopów InGaN w urządzeniach optoelektronicznych oraz elektronicznych, takich jak diody emitujące białe oraz niebieskie światło, nadal istnieje wiele otwartych pytań dotyczących podstawowych właściwości azotków z grupy-III. Trójskładnikowe związki (In, Ga)N obejmują obszar spektralny od podczerwieni (InN z pasmem wzbronionym,  $E_g$ , około

0,7 eV) do bliskiego ultra-fioletu (GaN z  $E_g$  - 3,42 eV). Niestety, związek trójskładnikowy InGaN nie jest stabilny w całym zakresie składu. Obserwuje się rozkład bimodalny i spinodalny. Związki te wykazują stabilność tylko przy zawartościach indu mniejszych niż  $x=0.2$  lub większych niż  $x=0.8$ . Wykazano, że zakres niestabilności zależy od stanu naprężeń w warstwach epitaksjalnych. W celu uzyskania dalszych informacji dotyczących tego zakresu przeprowadzono badania warstw  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  z wysoką zawartością In metodą spektroskopii promieni X.

Fakt, że rozkład natężenia w widmie absorpcyjnym w pobliżu krawędzi absorpcji odzwierciedla strukturę elektronową odpowiadającą stanom końcowym w pasmie przewodnictwa, był znany od dawna. Tak zwane białe linie (ang.: white line peaks) w krawędziach  $L_{2,3}$  widm XANES po raz pierwszy zostały poprawnie zinterpretowane przez Motta [8] jako przejścia ze stanów  $2p$  do niezajętych stanów  $d$  w pobliżu poziomu Fermiego. Intensywność białej linii zależy od liczby stanów niezajętych w paśmie  $d$  metalu. Białe linie są dość intensywne dla metali przejściowych z tablicy Mendelejewa z mało wypełnioną powłoką  $d$ , natomiast mają bardzo niewielkie natężenie w przypadku metali z prawie całkowicie wypełnioną powłoką  $d$ , takich jak miedź lub ind. W większości przypadków, widma XANES dla krawędzi  $L_2$  oraz  $L_3$  mają bardzo podobne kształty. Dlatego w omawianej pracy ograniczyłam się do rozważenia wyłącznie krawędzi  $L_3$ . Na rysunku 3 przedstawiono porównanie obliczonych widm XANES dla krawędzi  $L_3$  z obliczonymi odpowiednimi cząstkowymi gęstościami stanów o symetrii  $d$  i  $s$  (PDOS) dla InN (Rys. 3a) oraz stopu  $\text{In}_{0,23}\text{Ga}_{0,77}\text{N}$  (Rys.3b). W górnym panelu pokazano widma eksperymentalne mierzone w dwóch kierunkach krystalograficznych. Dla obu próbek subtelna struktura widm absorpcyjnych ściśle koreluje z mieszaniną stanów  $d$  i  $s$ . Powszechnie zakłada się, że wkład do widm  $L$  przejść do stanów końcowych o symetrii  $s$  jest znikomy. Gęstość końcowych stanów o symetrii  $s$  jest stosunkowo niewielka i rozłożona w dużym zakresie energii. W rezultacie, radialny element macierzowy przejść dipolowych dla stanów  $s$  jest o około rząd wielkości mniejszy niż dla stanów  $d$ , a gęstość stanów końcowych  $d$  jest większa, oraz skupiona w niewielkim zakresie energii. W pracy [H-2] wykazano, że szacowany wkład stanów o symetrii  $s$  do widma InN jest około 30 razy mniejszy niż stanów  $d$ . Wynik ten jest w zgodzie z wynikami uzyskanymi w pracy [9] dla krawędzi  $L_3$  Re, gdzie obliczony stosunek przekrojów czynnych absorpcji stanów końcowych o symetrii  $d$  i  $s$  wynosi około 50:1. Należy jednak podkreślić, że w obszarze blisko minimum pasma przewodnictwa (ang.: conductive band minimum, CBM) metalu, orbitale o symetrii  $s$  są mocno zhybrydyzowane ze stanami  $2p$  azotu i nie mogą być zaniedbane przy obliczeniach, ponieważ wpływają na zmianę profilu subtelnej struktury w obszarze energetycznym blisko krawędzi  $L$ . Udział tych stanów potwierdziły również obliczenia *ab initio* (kod Wien2k) wykonane w celu wyjaśnienia właściwości elektronowych oraz optycznych InN w strukturze wurtzytu i strukturze kubicznej [10].



**Rysunek 3.**

W procesie emisji miękkich promieni X stan końcowy zawiera dziurę w paśmie walencyjnym, a nie na poziomie rdzeniowym, widma emisji odzwierciedlają PDOS stanu podstawowego, pod warunkiem, że spełniona jest reguła stanów końcowych. W przypadku procesu absorpcji promieniowania X, przy braku dziury rdzeniowej (tak zwana reguła stanu podstawowego; ang.: *the initial state rule*), zarówno stany początkowy jak i końcowy w kodzie FEFF8 reprezentowane są przez funkcję falową stanu podstawowego pojedynczego elektronu. Przejście elektronu z głębokiego poziomu rdzeniowego do niezajętych orbitali skutkuje tworzeniem dziury rdzeniowej podczas procesu absorpcji promieniowania X. Dlatego Hamiltoniany stanów podstawowego (ang.: *ground state*) oraz końcowego są różne. Ilościowe uwzględnienie efektu dziury rdzeniowej w widmie XANES nie jest jeszcze dobrze opracowane. W ramach niezależnego przybliżenia pojedynczej cząstki (ang.: *the independent particle approximation*) obliczenia zazwyczaj są przeprowadzane dla dwóch skrajnych przypadków, dla statycznych potencjałów stanów początkowych oraz końcowych. „Reguła stanów końcowych” (ang.: *final state rule*) mówi, że w przybliżeniu jednoelektronowym stany fotoelektronów muszą być obliczone w obecności dziury rdzeniowej. Natomiast, "reguła stanów początkowych" (ang.: *initial state rules*) zakłada, że obliczenia powinny być wykonane z w pełni ekranowaną dziurą rdzeniową (bez uwzględnienia dziury rdzeniowej; ang.: *no hole, NH*). W kodzie FEFF8 efekt dziury rdzeniowej może być uwzględniony przez wprowadzenie 'zamrożonej' dziury rdzeniowej (ang.: *a frozen core hole*) na określonym poziomie rdzeniowym. Procedura samouzgodnionego pola (ang.: *self-consistent field, SCF*) zatem automatycznie ekranuje dziurę rdzeniową. Takie podejście poprzez obliczenia SCF relaksacji dziury rdzeniowej jest podobne do przybliżenia 'Z +

1' używanego przez Zellera [11] wykorzystującego formalizm Korring-Kohna-Rostoker (KKR). Jako metodę pośrednią pomiędzy regułą stanów końcowych (cała dziura rdzeniowa) oraz regułą stanu początkowego (bez dziury rdzeniowej), można obliczyć stany fotoelektronów w potencjale, który ma, na przykład, połowę elektronu 'wyjętego' z poziomu rdzeniowego, tj. użyć tak zwanej reguły przejściowego stanu (ang.: transition state rule) zasugerowanego przez Slatera [12]. Można rozwinąć to podejście i rozważyć każdą frakcję elektronu usuniętego z poziomu podstawowego. Ponieważ wszystkie przypadki opisane powyżej są "specjalistyczne" dla konkretnego zagadnienia, wybór pomiędzy regułami stanów początkowym oraz końcowym jest nieco arbitralny i jest zazwyczaj wybierany przez porównanie wyników obliczeń z danymi doświadczalnymi. W wielu przypadkach, na przykład dla absorpcji krawędzi K izolatora BN [13], lub w półprzewodnikach [14] reguła stanów końcowych daje lepszą zgodność z eksperymentem. Jednak w przypadku absorpcji krawędzi L-dla metali przejściowych sytuacja może być odwrotna i wykorzystanie reguły stanu podstawowego może lepiej opisywać doświadczenie.

W celu oszacowania wpływu CH na profile widm XANES indu, obliczenia przeprowadzono również przy założeniu całkowicie zaekranowanej dziury rdzeniowej (NH). Ze szczegółowego porównania obliczeń z krzywą eksperymentalną widm  $L_3$  XANES, stwierdzono, że uwzględnienie CH daje lepszą zgodność z widmem doświadczalnym dla  $In_{0.23}Ga_{0.77}N$ , natomiast w przypadku próbki InN należy stosować przybliżenie NH. W widmie eksperymentalnym InN obserwowane jest niebieskie przesunięcie w stosunku do obliczonego widma z uwzględnieniem dziury rdzeniowej (uwzględnienie CH doprowadza do przesunięcia stanów  $d$  na skutek oddziaływania „elektron – dziura rdzeniowa”). Dla energii wokół 29,3 eV od krawędzi absorpcji widmo doświadczalne jest bardziej zbliżone do symulowanego, gdy przy warunku, że dziura rdzeniowa nie była brana pod uwagę. Odległość pomiędzy głównymi rezonansami dla przybliżenia 'NH' jest większe o 1,6 eV w porównaniu do modelu 'CH' i zgadza się dobrze z danymi doświadczalnymi dla InN. Dlatego też, dla InN 'CH potencjał' wydaje się być skutecznie ekranowany przez elektrony swobodne. Takiego efektu nie zaobserwowano w przypadku stopu  $In_{0.23}Ga_{0.77}N$  gdzie uwzględnienie CH zapewnia lepszą zgodność teorii z eksperymentem. Warto podkreślić, że widma L indu rejestrowano za pomocą modu detekcji czułego na stany powierzchniowe (ang.: total electron yeild, TEY). Tak więc, biorąc pod uwagę wyniki zaprezentowane w [15], gdzie istnienie akumulacyjnej warstwy elektronów (ang.: an electron accumulation layer) na powierzchni InN zostało ilościowo potwierdzone, możemy postawić hipotezę, że ekranowanie potencjału dziury rdzeniowej w InN jest bardzo skuteczne ze względu na dodatkowe swobodne powierzchniowe elektrony, które nie występują w przypadku  $In_{0.23}Ga_{0.77}N$ . Dodatkowo, w [16] zaobserwowano zauważalną różnicę między krawędzią absorpcji rentgenowskiej w widmach zebranych za pomocą powierzchniowego oraz objętościowego modu detekcji (ang.: total fluorescence yeild, TFY) dla warstwy InN na krawędzi azotu K. Stwierdzono, że krawędzie absorpcji

występują odpowiednio przy około 0,8 eV i 1,4 eV powyżej maksimum pasma walencyjnego. Autorzy wywnioskowali że przesunięcie progu absorpcji dla TEY XANES związane z 'wypchnięciem' poziomu Fermiego stanów powierzchniowych ponad minimum pasma przewodnictwa, ze względu na obecność powierzchniowej wewnętrznej akumulacji elektronów (ang.: the intrinsic electron accumulation). Wyniki te potwierdzają nasze założenia ekranowania dziury rdzeniowej dla krawędzi  $L_3$  indu w InN. Tak więc, wyniki prezentowane w [H-2] wskazują na to, że efekt dziury rdzeniowej przy obliczeniu widm XANES dla stopów indu jest istotny.

#### **IV.1.4. Potencjał połączonych metod spektroskopii emisyjnej i absorpcyjnej miękkiego promieniowania rentgenowskiego w zastosowaniu do szacowania prostych i skośnych szerokości pasm wzbronionych w półprzewodnikach. [H-3]**

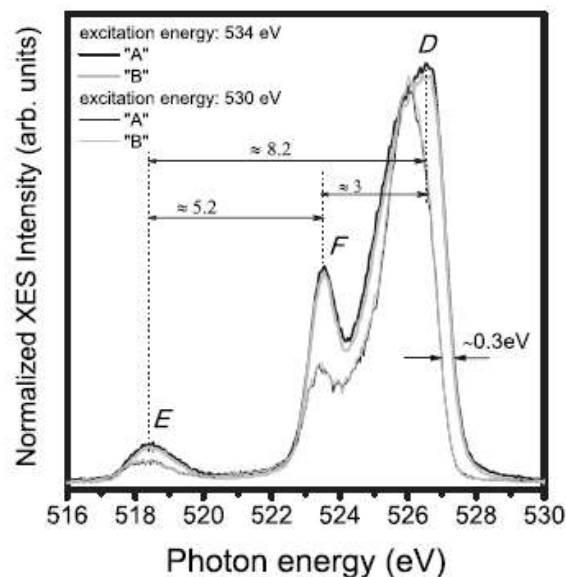
Wraz z pojawieniem się źródeł synchrotronowych trzeciej generacji o dużej intensywności, przed naukowcami otworzyły się nowe możliwości badania objętościowej struktury pasmowej przy użyciu metody rezonansowego nieelastycznego rozpraszania promieniowania rentgenowskiego (ang.: RIXS - Resonant inelastic X-ray scattering). W metodzie tej wykorzystywany jest proces rozpraszania ramanowskiego elektronów. W procesie tym elektron rdzeniowy jest w sposób rezonansowy wzbudzany do wolnego stanu o określonej wartości własnej  $k$ , z kolei mierzony jest rezonansowy zanik fluorescencyjny elektronu walencyjnego, o tej samej wartości  $k$ . Obserwowane widma RIXS zawierają więc informacje o nieobsadzonych i obsadzonych stanach elektronowych zależną od pędu. Widma te mogą być analizowane przy użyciu formalizmu Kramersa-Heisenberga [17]. Ponieważ osiągalna głębokość pozyskania informacji jest zazwyczaj rzędu kilkuset nanometrów, możliwe jest badanie układów o słabo określonych własnościach powierzchniowych lub z warstwami ochronnymi. Otrzymanie pierwszych rezonansowych widm emisyjnych za pomocą źródła promieniowania synchrotronowego otworzyło dyskusję dotyczącą efektów rezonansowych w RIXS. Obecnie, za oczywiste uznaje się, że zjawiska związane ze strukturą pasmową mogą być bez trudu obserwowane w widmach RIXS oraz, że to stwierdzenie jest prawdziwe również dla materiałów z rdzeniowymi ekscytonami. Celem badań przedstawionych w pracy [H-3] było wykazanie, że RIXS rzeczywiście idealnie opisuje pasmową strukturę półprzewodnika (na przykładzie CdO) oraz, że widma doświadczalne wykazują bardzo dobrą zgodność z obliczeniami *ab initio*, wykorzystującymi teorię funkcjonału gęstości (ang.: Density functional theory, DFT) z zastosowaniem różnych funkcjonałów.

##### ***IV.1.4.1. Analiza XANES dla krawędzi K tlenu warstw CdO w połączeniu z badaniami emisji miękkiego promieniowania rentgenowskiego.***

W celu zbadania rozkładu energetycznego zajętych stanów pasma walencyjnego w CdO zmierzono widma emisji rentgenowskiej atomów tlenu w reżimie energii wzbudzeń blisko-krawędziowych (energia wzbudzającego promieniowania była zmieniana wokół K krawędzi absorpcji tlenu). W materiałach półprzewodnikowych rodzaj przerwy energetycznej (prosta, skośna) może być określony dzięki obserwacjom widm emisyjnych w funkcji energii promieniowania wzbudzającego. W przypadku materiału charakteryzującego się prostą przerwą energetyczną, krawędź widma emisyjnego oczekiwana jest dla energii wzbudzenia bliskiej minimum pasma przewodnictwa. Wraz ze

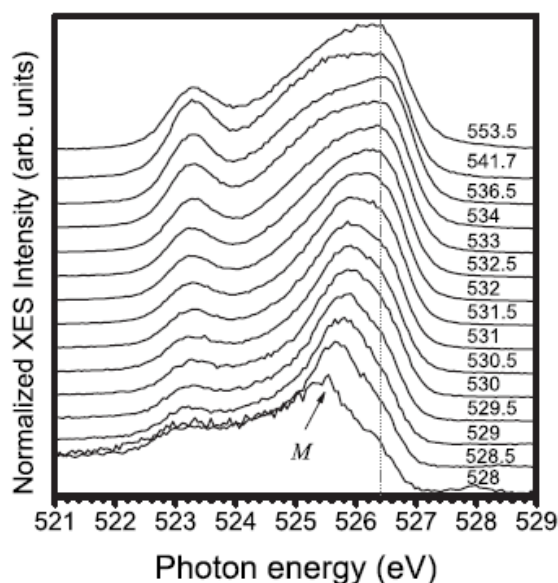


wzrostem energii wzbudzenia, krawędź widma emisyjnego powinna się przesuwać w kierunku niższych energii. Dla materiałów o skośnej przerwie energetycznej oczekiwane jest zachowanie odwrotne tj. przesunięcie krawędzi widma emisyjnego w kierunku energii wyższych wraz ze zwiększającą się energią wzbudzenia. Zaprezentowane dane XES/RIXS niewątpliwie wykazują tę tendencję [H-3]. Rys. 4 przedstawia widma emisyjne krawędzi K tlenu zarejestrowane dla dwóch różnych energii wzbudzenia, które wykazują, że zwiększanie energii wzbudzenia z 530 eV (energii wzbudzenia niewiele poniżej progu absorpcyjnego) do 534 eV (niewiele powyżej pierwszego rezonansu widma absorpcyjnego) powoduje przesunięcie krawędzi pasma walencyjnego o ok. 0,3 eV w kierunku wyższych energii.



Rysunek 4

Szerokość przerwy energetycznej W CdO była sprawą kontrowersyjną. Eksperymentalne wartości prostej przerwy energetycznej przyjęte w literaturze wynoszą ok. 2,3–2,4 eV. Z kolei wartości doświadczalne skośnej przerwy energetycznej obecne w literaturze wahają się od 0,55 i 0,84 eV [18-20] do wyższych równych ok. 1,2 i 1,9 eV [21-24]. Ten sam poziom niejednoznaczności jest obecny w danych dotyczących teoretycznego przewidywania wartości przerw skośnych, gdzie różne wartości są uzyskiwane przy wykorzystaniu różnych podejść, przybliżeń i metod: liniowej kombinacji orbitali atomowych (1,18 eV ( $\Gamma$ -L) i 1,12 eV ( $\Gamma$ - $\Sigma$ ); stowarzyszonej fali płaskiej (ang. Augmented plane wave) (0,8 eV ( $\Gamma$ -L) i 1,2 eV ( $\Gamma$ - $\Sigma$ ) oraz 1,11 eV ( $\Gamma$ -L) i 0,95 eV ( $\Gamma$ - $\Sigma$ ); przybliżenia lokalnej gęstości (1,7 eV); GGA+U+ $\Delta$  oraz HSE03+GW (0,68 eV). Według mojej wiedzy do opublikowania omawianego artykułu nie spotkałam się z żadnymi doniesieniami na temat bezpośredniej oceny wartości skośnej przerwy energetycznej dla CdO z wykorzystaniem połączonych spektroskopii emisji i absorpcji rentgenowskiej. Wyjątkami są pewne próby pośredniego szacowania tych wartości [25]. By wypełnić tę lukę przeprowadziłam pomiary RIXS w



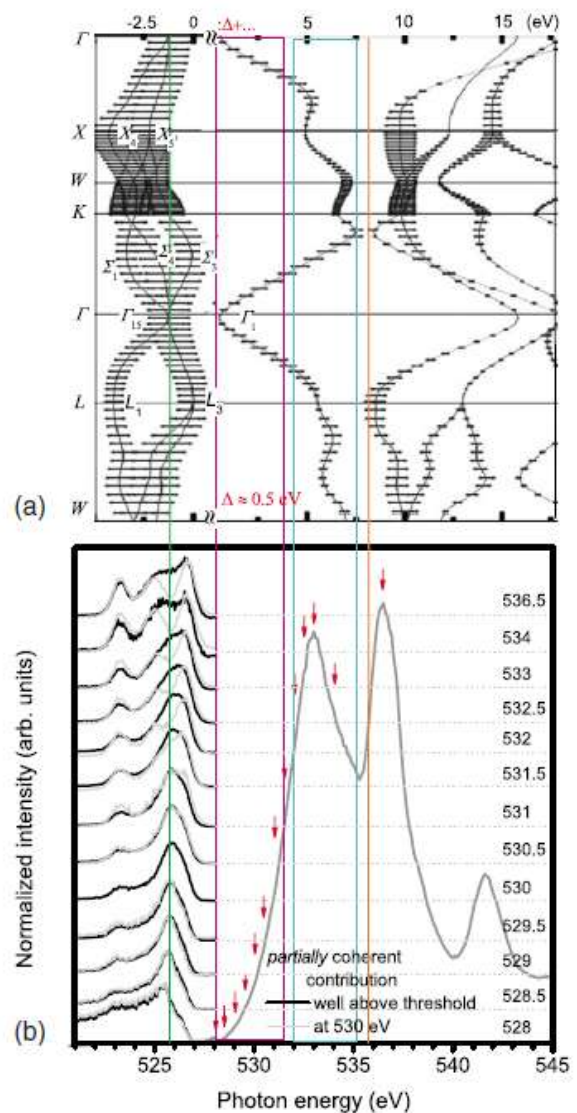
Rysunek 5

celu zbadania przejść w różnych punktach strefy Brillouina w warstwie CdO. Podczas wzbudzenia rezonansowego elektron rdzeniowy jest przerzucany do stanu związanego w paśmie przewodnictwa, więc wygenerowana przy okazji dziura rdzeniowa rekombinuje z elektronami z wyższego poziomu energetycznego (zgodnie z regułą wyboru dla przejścia dipolowego) powodując emisję fotonu o energii  $h\nu'$  mniejszej niż energia promieniowania padającego  $h\nu$ . Dla porównania, wzbudzenie

nierezonansowe ma miejsce, gdy energia promieniowania padającego jest wystarczająco duża aby przenieść elektron z poziomu rdzeniowego do kontinuum stanów przewodnictwa. Tak wygenerowana dziura rdzeniowa, może rekombinować przez jedną z kilku ścieżek zaniku poprzez przejście elektronu z niezajętych wysokoenergetycznych poziomów próbki. Takie procesy wzbudzenia oraz relaksacji muszą być traktowane jako osobne przejścia dipolowe. Inaczej jest w procesie RIXS, gdzie wydarzenia wzbudzenie i relaksacja są ze sobą związane i muszą być traktowane jako pojedynczy proces rozpraszania.

Widma RIXS (patrz rys 5) zostały zarejestrowane przy energii wzbudzenia zmienianej z krokiem 0,5 eV przez obszar krawędziowy K- krawędzi tlenu aż do pierwszego rezonansu (maksimum widma) przy ok. 533 eV, zgodnie ze wskazaniem strzałek na widmie XAS (patrz rys. 6(b)), a następnie dla rezonansów: 536,51, 541,7 i

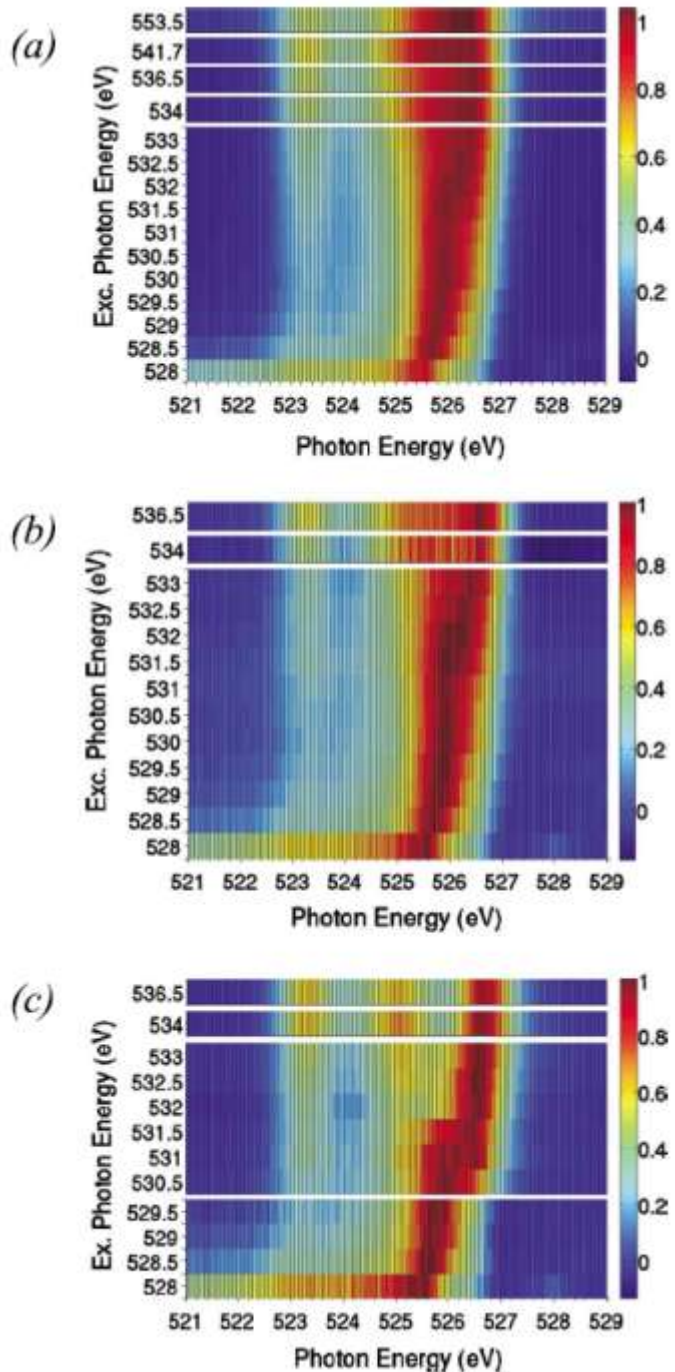
553,5 eV. Pik emisji elastycznej używany jest do ustalenia zgodności skali energii w trakcie pomiaru emisyjnego ze skalą energii fotonów w XAS. Najbardziej kluczową obserwacją wynikającą z przeprowadzonego eksperymentu jest względna utrata natężenia w pobliżu maksimum pasma walencyjnego i wyraźnie widoczne przesunięcie w kierunku niższych energii wraz ze zbliżaniem się energii wzbudzenia do minimum pasma przewodnictwa (przy ok. 528 eV). Nieliniowość maksimum



Rysunek 6

pasma walencyjnego (patrz okolice 525-527 eV) w porównaniu z pikiem umiejscowionym przy ok. 523,2 eV jest wyraźnie widoczna na wykresie natężenia (zob. rys. 7(a)).

By zrozumieć przesunięcia energii i zmiany kształtu linii RIXS, zaproponowano procedurę wyodrębniania „niekoherentnej” części składowej widma RIXS, która została wykorzystana do wzmocnienia widoczności efektów struktury pasmowej koherentnej części składowej [26]. Procedura ta wymaga użycia wysokoenergetycznie wzbudzonego widma z zakresu znacznie powyżej progu absorpcji jako reprezentanta niekoherentnej emisji promieniowania rentgenowskiego. To niekoherentne widmo jest następnie skalowane i wyodrębniane z widm wzbudzanych z energią bliższą progowi absorpcji, z zastrzeżeniem, że pozostałe natężenie musi być dodatnie. Taka procedura określana jest jako standardowa. Dla materiałów ze skośną przerwą energetyczną, takich jak krzem i BeTe procedura ta została zastosowana dając jasne i czytelne wyniki [27,28]. Jednakże, dla CdO główne przesunięcie energii maksimum pasma walencyjnego powyżej progu (zob. rys. 4) jest problematyczne jeśli chodzi o tę procedurę analizy danych.



Rysunek 7

Dla kilku pierwszych widm nawet po zastosowaniu różnego skalowania: (i) ujemne natężenie pojawia się powyżej maksimum pasma walencyjnego przy 527 eV; albo (ii) procedura odejmowania nie ma żadnego wpływu na kształt widma (niekoherentna część składowa jest ciągle obecna). Oznacza to, że w widmie emisyjnym dla energii ekscytacji 528 eV, pomiędzy 527 i 527,5 eV, wkład składowej niekoherentnej powinien wynosić 0%, natomiast ciągle jest on obecny (wyrazista struktura na widmie

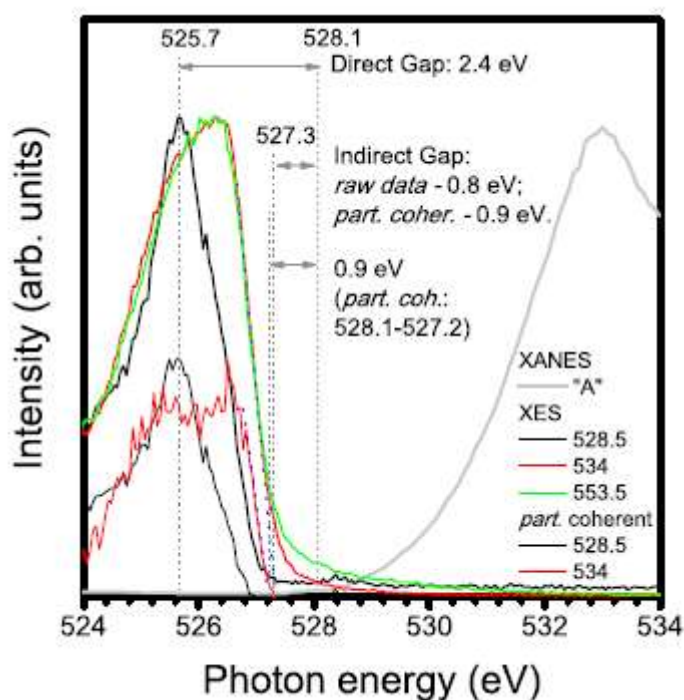
od 526,2-527 eV) niezależnie od zastosowanej procedury odejmowania składowej niekoherentnej. Z tego można wywnioskować, że widma RIXS dla CdO, w pobliżu progu absorpcji, wykazują częściowe przekrywanie się początkowych oraz końcowych stanów elektronowych o zbliżonych  $k$ , co prowadzi do wkładu od niekoherentnego kształtu widma emisyjnego nawet przy niskich energiach ekscytacji. Niemożność znalezienia jednego charakterystycznego kształtu niekoherentnej komponenty wynika ze zbyt uproszczonego przybliżenia, które najprawdopodobniej przestaje obowiązywać dla bardzo dużej (4 eV) dyspersji pasma przewodnictwa w CdO. Odejmowanie niekoherentnej frakcji reprezentowanej jednym widmem emisyjnym (o wysokiej energii ekscytacji) z widm RIXS funkcjonuje dobrze dla Si i BeTe. Dla tych materiałów dyspersja najniższej gałęzi pasma przewodnictwa jest mniejsza niż 1 eV (zob. [27, 28]). Standardowa procedura odejmowania niekoherentnej frakcji (opisana powyżej) nie pozwala więc na całkowite pozbycie się tej frakcji z widma RIXS dla CdO i nie może dać pełnego 'obrazu' struktury pasmowej, czyli uwidocznienie efekt rozszczepiania pasma walencyjnego wzdłuż ( $\Gamma_{15-L}$  i  $\Gamma_{15-\Sigma}$ ) (patrz rys. 6(a)). Podjęłam więc próbę opracowania alternatywnej procedury. Zaproponowałam mianowicie by arbitrazowo wzmocnić zmiany w kształcie widm o różnych energiach wzbudzenia, za pomocą odejmowania pośredniego widma XES, otrzymanego przy energii ekscytacji 530 eV. Na Rys. 6(b) przedstawiam powstałe, częściowo koherentne, widma emisyjne w zestawieniu ze strukturą pasmową (Rys. 6(a) z [29]). Udziały częściowo koherentne odpowiadające procedurze 'standardowej' są oznaczone liniami czarnymi, podczas gdy linie jasnszare odpowiadają odjęciu pośredniego widma XES przy energii wzbudzenia równej 530 eV. Na Rys. 7 zaprezentowane są mapy intensywności odpowiadające 'standardowej' (Rys. 7b) i 'pośredniej' (Rys. 7c) częściowo koherentnej frakcji emisji wraz z surowymi danymi RIXS (Rys. 7a) dla lepszego zobrazowania dyspersji gałęzi pasma od punktu ( $\Gamma_{15}$ ) (zob. rys. 6(a)). By dopasować obliczoną strukturę pasmową do danych doświadczalnych zestawiamy wysoko-symetryczny punkt  $\Gamma_{15}$  pasma walencyjnego z maksimum pasma walencyjnego pozyskanym z widma XES odpowiadającego energii wzbudzenia 528,5 eV. Z kolei, minimum pasma przewodnictwa zostało przesunięte z teoretycznej wartości równej 1,9 eV do wartości doświadczalnej otrzymanej z pomiarów absorpcji optycznej - 2,4 eV.

Jak wspomniano powyżej, oszacowana wartość prostej przerwy energetycznej dla warstw CdO, uzyskana z pomiarów absorpcji optycznej, w wyniku ekstrapolacji kwadratu współczynnika absorpcji, wynosi  $\sim 2,4$  eV. Jakościowo, dopasowana struktura pasmowa wykazuje dobrą zgodność z naszymi wynikami. Porównanie podkreśla nisko- i wysoko-energetyczne dyspersje natężenia pasma walencyjnego przy dużej zgodności z wysoko-symetrycznymi punktami X i L, które leżą na poziomie ok. 0,6 eV poniżej i ok. 1,0 eV powyżej energii  $\Gamma_{15}$  punktu  $\Gamma$ . Orbital Cd 5s o parzystej symetrii i orbital O 2p o symetrii nieparzystej nie mogą się nakładać w punkcie  $\Gamma$ , więc ograniczenia symetrii

translacyjnej są takie, że oddziaływanie Cd 5*p*-O 2*p* jest w pełni antywiązące. Porównując rozkład cząstkowej gęstości stanów (ang.: Partial density of states, PDOS) przedstawiony w [H-3] z zaprezentowaną strukturą pasmową (rys. 6(a)) byłam w stanie wywnioskować, że gałąź pasma przewodnictwa o najniższej energii ma charakter Cd 5*s*-O 2*p*  $\sigma^*$ . Wówczas, górne poziomy pasma przewodnictwa mają w przeważającej mierze charakter O 2*p*.

#### IV.1.4.2. Szacowanie wartości szerokości pasma wzbronionego.

Rys. 8 przedstawia superpozycje wybranych widm XES i XAS (o energiach wzbudzenia równych 528,5; 534 i 553,5 eV) w skali energii fotonu. W celu bardziej precyzyjnego oszacowania przerwy energetycznej do wykresu dodane są dwie krzywe odpowiadające częściowo koherentnej składowej ('standardowe') przy energii wzbudzenia 528,5 i 534 eV, krzywe o mniejszym natężeniu. Zaczynając od energii wzbudzenia równej 534 eV wierzchołek pasma walencyjnego pozostaje na tym samym poziomie energetycznym, a tylko ogon w wysokich energiach zwiększa



Rysunek 8

swoje natężenie. Zwracamy uwagę, że przesunięcie maksimum pasma walencyjnego (oznaczone jako „M” na Rys. 5) pojawia się bez stałej energii separacji od pozycji pików elastycznych przy wzroście energii wzbudzenia. Wskazuje to na fakt, że maksimum pasma walencyjnego dla energii wzbudzenia 528 eV nie może być kojarzone ze stałym (Ramanowskim) czynnikiem straty. By być w pełni przekonany co do tej sugestii, zakładamy, że widmo przy energii wzbudzenia równej 528,5 eV jest decydującym dla szacowanych wartości przerwy energetycznej. Biorąc pod uwagę, że minimum pasma przewodnictwa znajduje się w 528,1 eV (punkt, gdzie zaczyna się absorpcja, otrzymany dla niezerowych wartości pierwszej pochodnej widma XAS) i że maksimum widma XES o najniższej energii wzbudzenia (528,5 eV) znajduje się w 525,7 eV, możemy ocenić wartość pasma wzbronionego na 2,4 eV ( $\Gamma_1$ - $\Gamma_{15}$  przerwa w strukturze pasmowej). Daje to wynik zgodny z wartościami prostej przerwy energetycznej otrzymanymi z literatury, oraz z naszym wynikiem otrzymanym z pomiarów absorpcji optycznej.

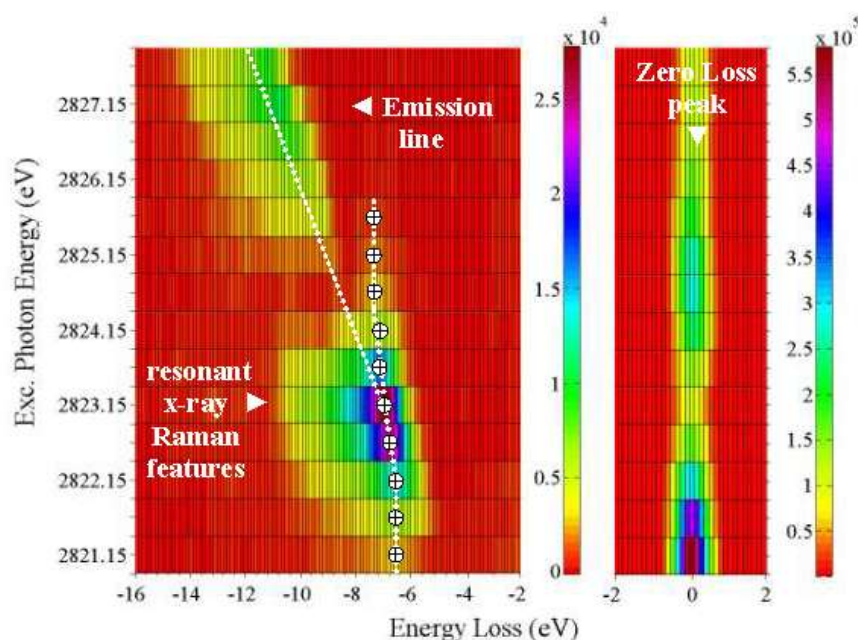
Następnie, różnica między minimum pasma przewodnictwa i wierzchołkiem pasma walencyjnego (przy ok. 527,2 eV w pobliżu punktu L) wynosi ok. 0,9 eV. Wynik ten daje całkiem dobrą zgodność z odnotowaną skośną przerwą energetyczną równą 0,84 eV. Dodatkowo, jak jest powszechnie wiadome, procedura szacowania wartości skośnej przerwy energetycznej w przypadku cienkich warstw CdO przy użyciu widm absorpcji optycznej napotyka na zasadnicze trudności z uwagi na słaby sygnał i wpływ oscylacji Fabry'ego-Pérot'a w okolicach przed i blisko krawędzi absorpcji. By w sposób bezpośredni zmierzyć skośną przerwę CdO za pomocą absorpcji optycznej, wyhodowaliśmy grubą warstwę CdO (0,6  $\mu\text{m}$ ) po to, by absorpcja na skośnej przerwie była bardziej wyraźna. Właściwości elektryczne takiej grubej warstwy CdO są porównywalne z cienką warstwą, która była przedmiotem niniejszego badania. Liniowa ekstrapolacja pierwiastka kwadratowego współczynnika absorpcji dała wartość skośnej przerwy energetycznej ok. 0,95 eV co dobrze się zgadza z naszymi wynikami opisanymi wyżej.

Zatem, zestawienie rys. 6 i 8 pozwala wnioskować, że dla badanej cienkiej warstwy CdO — (i) prosta przerwa energetyczna w punkcie  $\Gamma$  wynosi  $\approx 2,4$  eV, (ii) skośna przerwa energetyczna  $\approx 0,9$  eV, co wskazuje na dyspersję wzdłuż kierunków  $\Gamma$ -L i  $\Gamma$ -K, oraz (iii) dyspersja w zakresie mniejszych energii występuje wzdłuż  $\Gamma$ -X. Ponadto, teoretyczna szerokość pasma walencyjnego dobrze się zgadza z szerokością pasma mierzonego widma emisyjnego wynoszącą około 5 eV. Tak wyraźna i jednoznacznie określona skośna przerwa energetyczna oraz dyspersja pasma walencyjnego w CdO zostały po raz pierwszy zaobserwowane w widmach RIXS. Związane to jest z bardzo dobrą zdolnością rozdzielczą linii badawczej oraz z faktem że obszar wzbudzenia przykrawędziowego w dół od wartości 528 eV nie był do tej pory badany.

#### IV.1.5. Spektroskopia promieniowania X oraz obliczenia z pierwszych zasad użyte do interpretacji struktury elektronowej polikrystalicznego chlorku kadmu. [H-4]

Podobne podejście do przedstawionego w rozdz. IV.1.4., zostało użyte do analizy widm RIXS dwuchlorku kadmu zmierzonych wokół K krawędzi chloru [H-4]. Dwa dominujące wkłady w widmach RIXS zostały wyróżnione, a mianowicie, wkład rezonansowy oraz ekscytonowy. Wykazano, że zależność dyspersyjna poniżej progu absorpcji odpowiada regule Ramana Stokesa, podczas gdy dyspersja powyżej progu dzieli się na dwie jakościowo różne relacje. Tylko wysoko energetyczna krawędź widma (boczny pas częstotliwości), tzn. ekscytonowy, ma dyspersję liniową. Dyspersja ta jest przesunięta w stosunku do liniowej zależności Ramana Stokesa (poniżej progu absorpcji) na około 0,85 eV. Niezmiennie struktury poniżej progu absorpcji zostały przypisane do wzbudzenia elektronu walencyjnego do pasma przewodnictwa z energią  $6,6 \pm 0,15$  eV. Subtelna struktura Ramanowska powyżej progu absorpcji występuje prawdopodobnie z powodu nakładania się udziałów rdzeniowego oraz walencyjnego ekscytonów (patrz Rys. 9).

Wraz ze wzrostem energii wzbudzenia znacznie powyżej energii wiązania elektronu rdzeniowego, zaobserwowano nieliniowe efekty dyspersyjne. Określono doświadczalnie, że prosta przerwa energetyczna  $\text{CdCl}_2$  w wysoko symetrycznym punkcie  $\Gamma$  wynosi około  $5,7 \pm 0,05$  eV. Otrzymana wartość jest w dobrej zgodzie z szerokością przerwy energetycznej otrzymanej z badań optycznych. Otrzymano dobrą zgodność pomiędzy eksperymentalnymi widmami XES i XANES oraz obliczeniami z pierwszych zasad (z wykorzystaniem kodu numerycznego Wien2k). Badania te, były pierwszymi, w których RIXS został wykorzystywanych do interpretacji struktury pasmowej związku  $\text{CdCl}_2$ .



Rysunek 9.

#### **IV.1.6. Zjawisko kwantowego ograniczenia wymiarowości (ang.: Quantum confinement effect) zaobserwowane w badaniach XANES na przykładzie koloidalnych kropek kwantowych. [H-5, H-6]**

Wytworzenie półprzewodzących nanokryształów jako elementów kluczowych w nanotechnologii, otworzyło możliwość wykorzystywania ich w ogniwach słonecznych kolejnej generacji. Możliwość zmniejszenia rozmiarów nano-cząstek do rzędu nanometrów prowadzi do tak zwanych efektów kwantowych, przez co niektóre własności fizyczne (np. mechaniczne, elektryczne, optyczne itd.) ulegają zmianom w porównaniu z własnościami materiałów objętościowych. Na przykład, zjawisko kwantowego ograniczenia może być obserwowane gdy średnica nano-cząstki jest rzędu długości fali funkcji falowej elektronu. Wraz z coraz mniejszymi wymiarami nano-cząstek, poziomy energetyczne zmieniają się z ciągłych na dyskretne, co w efekcie doprowadza do poszerzenia przerwy energetycznej i jest m.in. widoczne jako przesunięcie ku wyższym energiom widm absorpcji i fotoluminescencji. W literaturze sugeruje się, że zjawisko to może być użyteczne dla zastosowań w fotowoltaice. Badania przedstawione w tej pracy wykorzystują rezultaty prac [H-5, H-6, A-1] i miały na celu wnieść wkład do rozwoju badań i postępu w zakresie poszukiwania alternatywnych źródeł energii, do których użycia nasza cywilizacja będzie zmuszona w najbliższej przyszłości. A mianowicie, w tej części prezentowane są wstępne badania struktury elektronowej nieobsadzonych stanów koloidalnych kropek kwantowych w funkcji ich rozmiarów, wsparte badaniami dyfrakcji rentgenowskiej oraz elektronowego mikroskopu transmisyjnego. Z tego co wiadomo, były to pierwsze badania z zastosowaniem absorpcji promieniowania rentgenowskiego, przeprowadzone dla tych materiałów. W wyniku tych badań wyznaczono lokalną strukturę elektronową kropek kwantowych i porównano ją ze strukturą materiałów objętościowych. Ten rodzaj dogłębnej wiedzy w zakresie właściwości takich materiałów ma duże znaczenie dla ich praktycznego zastosowania w ogniwach słonecznych.

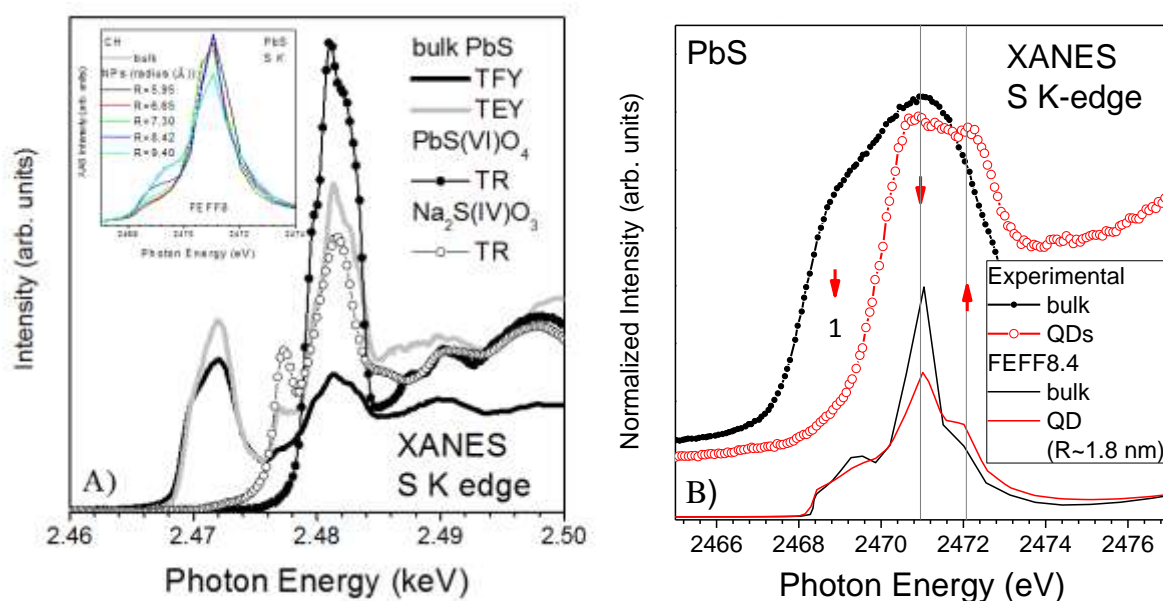
##### ***IV.1.6.1. Ograniczenie wymiarowości na przykładzie kropek kwantowych PbS.***

Zgodnie z procedurą opisaną w [H-5], zostały wyhodowane nano-struktury o różnych wymiarach, ~50 nm (nano-cząstki) i ~5 nm (kropki kwantowe), co uwidocznione zostało na zdjęciach TEM. Obserwowano mały rozrzut wielkości kropek kwantowych. Badania przy pomocy wysoko - rozdzielczej mikroskopii transmisyjnej, (HR)TEM, potwierdziły monokrystaliczny wzrost kropek kwantowych PbS. Synchrotronowe pomiary XRD przeprowadzone na próbkach w postaci cieczy, pozwoliły zidentyfikować trzy główne refleksy dyfrakcyjne odpowiadające strukturze fcc tj. 200, 111 i 220. Ilościowa analiza otrzymanych danych dla koloidalnych kropek kwantowych PbS potwierdziła ich



jedno-fazowy charakter o strukturze typu NaCl. Szczegóły obserwacji i analiz XRD oraz TEM przedstawione zostały w pracach [H-5, H-6, A-1].

W celu bezpośredniej oceny ewentualnych zmian struktury pasma przewodnictwa kropek kwantowych PbS w porównaniu do objętościowego siarczku ołowiu przeprowadzono pomiary widm XANES. Rysunek 10 ilustruje symetrię wiązania dla materiału objętościowego i kropek kwantowych PbS w zestawieniu z widmami XANES krawędzi K siarki wzorcowych próbek  $\text{PbS(VI)O}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{S(IV)O}_3$  zarejestrowanymi w trzech różnych modach detekcji: fluorescencyjnym (ang.: TFY, total fluorescence yield), elektronów wtórnych (ang.: TEY, total electron yield) oraz transmisji (ang.: TR, transmission). Mierzone widma związane są z przejściami elektronowymi ze stanu podstawowego  $1s$  siarki do nieobsadzonych antywiązących orbitali  $3p \sigma^* S$ .



**Rysunek 10**

Różnice w kształcie widm XANES dla objętościowego PbS zebrane w modach detekcji TFY i TEY wskazują na wpływ efektu samoabsorpcji [30, 31] (spadek natężenia pierwszego rezonansu, zob. Rys. 10 A). Natomiast, wzrost natężenia w obszarze wyższych energii, 2,476-2,486 keV, wskazuje na powierzchniowe utlenianie. Na podstawie porównania widm XANES dla PbS ze wzorcami  $\text{PbSO}_4$  i  $\text{Na}_2\text{SO}_3$  oraz danymi literaturowymi [32], fragment widma przy  $\sim 2,478$  keV może być przypisany do charakterystycznej absorpcji siarki w formie siarczynu ( $\text{S(IV)O}_3$ ) podczas, gdy drugi rezonans przy  $\sim 2,482$  keV przede wszystkim do formy siarczanu ( $\text{S(VI)O}_4$ ), Rys. 10 A).

Zaobserwowane dla kropek kwantowych PbS przesunięcie krawędzi absorpcji (mierzone jako pozycja pierwszej pochodnej) w stronę wyższych energii (ang.: blue shift) wynosi ok. 1,67 eV w porównaniu do materiału objętościowego. Wiąże się to ze zmniejszeniem udziału stanów  $p$ -siarki w minimum pasma przewodnictwa (antywiązącego orbitalu o symetrii  $t_{1u}$ , przy ok. 2,470 keV; oznaczono jako '1' na Rysunku 10 B)). Natomiast, jeżeli wyznaczyć położenie początku absorpcji (bezpośrednie minimum

pasma przewodnictwa) dla objętościowego PbS i kropek kwantowych wykorzystując metodę tzw. „arctangens subtraction” [33], to uzyskane przesunięcie jest mniejsze niż 1 eV.

Jak powszechnie wiadomo, przerwa energetyczna w półprzewodniku, jest charakterystyczną cechą półprzewodnika. W półprzewodnikach o makroskopowych rozmiarach, szerokość przerwy jest stałym parametrem. Ta sytuacja się zmienia dla cząstek półprzewodnikowych w skali ‘nano’, mniejszych niż ~10 nm. Dla tego zakresu rozmiarów obowiązują już zasady kwantowego ograniczenia wymiarowości, kiedy to przestrzenny zasięg funkcji falowej elektronu jest porównywalny do rozmiaru kropki kwantowej. W efekcie takich „geometrycznych” ograniczeń elektrony „odczuwają” obecność granic cząstki i odpowiadają na zmiany rozmiaru cząstki poprzez dopasowywanie energii. To zjawisko jest znane jako kwantowy efekt rozmiarowy i odgrywa ważną rolę w przypadku kropek kwantowych. Założono więc, że przesunięcie krawędzi absorpcji ku wyższym energiom (Rys. 10 B)) jest efektem kwantowego ograniczenia wymiarowości. Założenie to jest zgodne z faktem, że dla PbS promień Bohra ekscytonu jest duży, ~20 nm [34] w przeciwieństwie do promienia Bohra dla ekscytonu w Si, Cu<sub>2</sub>S, CuInS<sub>2</sub>, CuInGaSe<sub>2</sub> i CuZnInS<sub>2</sub>, który jest mały. Jest to główna przyczyna dlaczego kropki kwantowe z tych materiałów zachowują swoje objętościowe własności. Promień kropek kwantowych PbS badanych w tej pracy jest znacznie mniejszy niż promień Bohra ekscytonu objętościowego dla PbS. Zmieniając rozmiar kropek kwantowych PbS możemy więc zmieniać ich optyczne i elektronowe właściwości zmieniając szerokość przerwy energetycznej, która teoretycznie może osiągać wartości czerwonej krawędzi światła widzialnego. Wykazano, że początek optycznej absorpcji kropek kwantowych PbS może być dopasowywany w obszarze od 3000 nm do < 600 nm w funkcji rozmiaru kropek kwantowych [35]. Dokładna analiza danych z TEM przeprowadzona w [H-5] pokazała, że wymiary mniejszych kropek kwantowych PbS są rzędu 5 nm. Jeśli te kropki kwantowe są głównym składnikiem badanego materiału, to będą one odpowiedzialne za przesunięcie krawędzi XANES w kierunku wyższych energii (a więc przesunięcie minimum pasma przewodnictwa).

Nie zaobserwowano różnic między modami TFY i TEY dla widm XANES kropek kwantowych, poza małą rozbieżnością w natężeniach rezonansów (dane nie zostały zaprezentowane w niniejszej pracy). Wynik ten jest całkowicie zrozumiały dla 5 nm kropek kwantowych, ponieważ głębokości promieniowania uzyskania informacji dla modu TEY i TFY są odpowiednio rzędu 5 i 100 nm [37] a więc w obu modach informacja obejmuje cały obiekt.

Szczegółowa analiza XRD kropek kwantowych PbS nie ujawnia obecności innych faz niż regularna o strukturze soli kuchennej [38]. Analiza widm XANES nie pozwala wykluczyć możliwości utlenienia powierzchni kropek kwantowych PbS i utworzenia cienkiej warstwy, w której nie występuje uporządkowanie dalekiego zasięgu. Wyjaśnia to fakt, że nie została ona wykryta w badaniach XRD. Analiza jakościowa widm XANES kropek kwantowych PbS i tiosiarczanu [31] pozwala na wstępne konkluzje, że powierzchniowe atomy siarki w stanie tiosiarczanu mają niewielki udział w kształcie

widma w pobliżu minimum pasma przewodnictwa. Aby ostatecznie określić stopień utlenienia powierzchni i oszacować dokładnie jej ewentualny wpływ na obserwowane przesunięcie ku wyższym energiom w porównaniu do kwantowego efektu rozmiarowego, konieczne są dalsze szczegółowe badania.

#### ***IV.1.6.2. Zjawisko rozmiarowe w obliczeniach FEFF8.***

Przy użyciu programu FEFF8 przeprowadzono obliczenia dla klastra PbS zwiększając jego rozmiar poprzez dodawanie kolejnych powłok koordynacyjnych wokół centralnego atomu siarki do osiągnięcia promienia ( $R$ ) klastra wartości  $9,4 \text{ \AA}$  (wkładka na Rysunku 10 A)). Wykazano, że zwiększanie rozmiaru prowadzi do wzrostu liczby nieobsadzonych stanów  $p$  S co wzmacnia natężenie struktury przy krawędzi absorpcji (wkładka na Rys. 10 A)). Po osiągnięciu promienia klastra  $9,4 \text{ \AA}$  nie stwierdzono dalszej modyfikacji kształtu widma przykrawędziowego. Następnie, powtórzono obliczenia dla klastra o średnicy  $3,6 \text{ nm}$ , biorąc pod uwagę różną liczbę nierównoważnych pozycji atomów siarki w pobliżu obszaru powierzchniowego kropki, które mają różne otoczenie lokalne. Takie podejście zostało już wcześniej opisane szczegółowo w pracy [39]. Wyniki zaprezentowano w dolnej części Rysunku 10 B). Zaobserwowano znaczący efekt zmniejszenia natężenia pierwszego rezonansu i zwiększenia stanów wokół energii  $\sim 2472 \text{ eV}$  (oznaczone strzałkami na Rys. 10 B - dół) dla próbki z kropkami kwantowymi w porównaniu do nieobsadzonych stanów objętościowego PbS. Podobna zależność jest wyraźnie widoczna w doświadczalnych widmach XANES, dowodząc zatem, że elektronowa struktura nieobsadzonych stanów w pobliżu krawędzi absorpcji jest bardzo wrażliwa na efekt rozmiarowy i wkład atomów powierzchniowych do ostatecznego kształtu widma XANES.

### IV.1.7 Badania EXAFS dla materiałów spintronicznych. [H-7]

Obecnie obserwuje się gwałtowny rozwój w obszarze badań zwanych spintroniką, w którym wykorzystywany jest nie tylko ładunek elektronu, ale również jego spin. Dodanie dodatkowego stopnia swobody może potencjalnie prowadzić do stworzenia urządzeń elektronicznych, które poza tym, że będą znacznie szybsze i będą się charakteryzować znacznie mniejszym zużyciem energii, będą bardziej trwałe w porównaniu ze współczesnymi urządzeniami bazującymi na konwencjonalnych półprzewodnikach. Aby osiągnąć ten cel, konieczne jest opracowanie efektywnych metod 'wstrzykiwania' spolaryzowanych spinów do wybranej matrycy, sterowanie nimi oraz wykrywanie ich. Trzeba więc połączyć materiały magnetyczne z konwencjonalną technologią półprzewodnikową. Wszystko to wymaga wytwarzania odpowiednich materiałów o stosownych właściwościach w temperaturze pokojowej oraz opracowania niezawodnych, bazujących na wykorzystaniu spinu, urządzeń.

W rozdziale tym zaprezentowano wyniki badań warstw  $\text{Ga}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{As}$  przed i po wygrzewaniu w temperaturze  $600^\circ\text{C}$  [H-7]. Widma EXAFS analizowano w celu określenia uśrednionej lokalnej struktury atomowej wokół atomów manganu. Przeprowadzone badania były jednymi z pierwszych dla układu GaMnAs. Warto podkreślić iż metoda EXAFS jest czuła na lokalną strukturę wokół wybranego pierwiastka, co sprawia, że jest to skuteczne narzędzie do badań materiałów wieloskładnikowych. Metody SIMS oraz XRD zostały dodatkowo wykorzystane w celu oceny zawartości Mn i jakości wyhodowanych warstw. Przeprowadzono również pomiary momentu magnetycznego dla tych samych próbek, aby porównać własności strukturalne z własnościami magnetycznymi.

#### ***IV.1.7.1. Zmiany lokalnej struktury atomowej wokół atomów manganu w warstwach (Ga, Mn)As na skutek wygrzewania wysoko temperaturowego.***

Dla wszystkich badanych struktur dla warstw niepoddanych obróbce termicznej (ang.: as-grown), dane EXAFS wskazują, że atomy Mn zastępują atomy Ga w matrycy GaAs. Doniesienia literaturowe wskazują, że istotne zmiany strukturalne w GaMnAs zazwyczaj obserwowane są przy wysokich temperaturach wygrzewania (ok.  $450^\circ\text{C}$  i wyżej) n.p. [40]. Autorzy tej pracy jako pierwsi zasugerowali, że obserwowane zmiany najprawdopodobniej są rezultatem wstępnych etapów wytrącania fazy MnAs. By zweryfikować tę hipotezę przeprowadzono szczegółowe badania pojedynczych warstw  $\text{Ga}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{As}$  wygrzewanych przy temperaturze 500 and  $600^\circ\text{C}$ .

Jak wspomniano powyżej, wpływ wysokotemperaturowego wygrzewania na własności strukturalne i magnetyczne warstw GaMnAs wyhodowanych za pomocą metody epitaksji z wiązek molekularnych badano przy użyciu technik EXAFS, HRXRD oraz SQUID. Wykazano, że wygrzewanie warstwy w

temperaturze 500 °C wprowadza do struktury blendy cynkowej GaMnAs, o koncentracji Mn równej 0.05, duży nieporządek co powoduje relaksację naprężenia matrycy od dużego naprężenia ściskającego (dla próbki referencyjnej) do znikomo małego. Jednocześnie, struktura lokalna wokół atomów Mn staje się bardziej nieuporządkowana w porównaniu do próbki referencyjnej, a odległość między atomami Mn-As w pierwszej sferze koordynacyjnej zwiększa się i jest bliska wartości przewidzianej dla regularnej struktury kubicznego MnAs ( $\sim 2,55 \text{ \AA}$ ). Nie znaleziono dowodów na tworzenie się dimerów lub niewielkich klastrów Mn w badanej warstwie. Wygrzewanie w temperaturze 600 °C pozostawia niewielkie naprężenia rozciągające w matrycy GaAs i doprowadza do utworzenia się heksagonalnych wytrąceń MnAs. Wytrącenia te są ferromagnetyczne i charakteryzują się temperaturą Curie rzędu 300 K. Badania TEM przeprowadzone na tej samej próbce wykazały, że heksagonalne wytrącenia MnAs mają sferyczny kształt o średnicy ok. 20 nm. Większość wytrąceń MnAs jest koherentna z matrycą GaAs. Przeprowadzone badania wskazały na to, że wygrzewanie (Ga, Mn)As w wysokich temperaturach ( $\geq 600^\circ\text{C}$ ) jest metodą odpowiednią dla uzyskiwania niewielkich heksagonalnych wytrąceń MnAs w matrycy macierzystej GaAs, o ferromagnetycznych właściwościach w temperaturze pokojowej.

Magnetyczne właściwości próbek wyjściowych  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ , w szerokim zakresie  $x$ , były aktywnie badane np. [41]. Temperatura Curie dla warstwy  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$  o  $x=0,053$  została wyznaczona w pracy [42] na ok. 110 K. Zbadano magnetyczne właściwości wygrzewanych próbek i zaobserwowano wkład ferromagnetyczny potwierdzony pętlą histerezy namagnesowania. Dla próbki wygrzewanej przy najwyższej temperaturze stan ferromagnetyczny istnieje do temperatury pokojowej. Namagnesowanie nasycenia  $M_s$  wyznaczone doświadczalnie dla tej warstwy wynosi ok.  $20 \text{ emu cm}^{-3}$  w temperaturze  $T = 10 \text{ K}$ . Jest to w dobrej zgodności z wynikami wcześniejszych badań magnetycznych warstw  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$  wygrzewanych w wysokich temperaturach:  $M_s = 17 \text{ emu cm}^{-3}$  [43] dla warstwy z  $x=0,05$ , podczas gdy  $M_s = 40 \text{ emu cm}^{-3}$  w [44] dla warstwy z zawartością manganu na poziomie 6%. Zakładając, że oczekiwany moment magnetyczny wynosi 5 magnetonów Bohra na jon Mn i znając technologiczne dane dotyczące zawartości Mn i grubości warstwy badanej, można oszacować wartość namagnesowania nasycenia  $M_s = 50 \text{ emu cm}^{-3}$  dla idealnej ferromagnetycznej warstwy  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$  o  $x=0,05$ . Biorąc pod uwagę nieuniknioną redukcję namagnesowania, której spodziewamy się na skutek spinów niekolinearnych na powierzchni wytrąceń oraz efektu blokowania magnetycznego, można wnioskować, że duży wkład jonów Mn obecnych w warstwie pochodzi od fazy ferromagnetycznej wytrąceń. Potwierdza to w znacznym stopniu wnioski z analizy strukturalnej warstwy wygrzewanej przy  $600^\circ\text{C}$ , wykazującej obecność heksagonalnych wytrąceń MnAs, dla których oczekiwana jest wartość temperatury Curie o wysokości 310 K [45, 46]. Właściwości magnetyczne warstwy wygrzewanej w niższej temperaturze pokazują ok. 10 razy mniejszy udział fazy ferromagnetycznej ze znacznie mniejszym polem koercji. Bazując na wynikach badań EXAFS oraz XRD,

przypisujemy to zachowanie formowaniu się wzbogaconych w Mn obszarów o strukturze blendy cynkowej w warstwie GaMnAs, które wykazują silne magnetyczne nieuporządkowanie i szeroki obszar przemiany ferromagnetycznej. Większa część jonów Mn w warstwie GaMnAs wygrzewanej przy 500°C jest w stanie paramagnetycznym.

W rezultacie, badania EXAFS wykazały, że w wyniku termicznej obróbki zachodzą zmiany struktury lokalnej wokół atomów manganu – od chemicznie jednorodnej referencyjnej warstwy do chemicznie niejednorodnej (z regularnymi wytrąceniami Ga(Mn)As) i dalej do materiału z dobrze określonymi heksagonalnymi wytrąceniami MnAs [H-7]. Wskazuje to na fakt, że badany system jest jednoznacznie umiejscowiony w grupach opisanych w [47]. Warto podkreślić, że wysoka temperatura wygrzewania (600°C) jest powodem radykalnych zmian własności magnetycznych warstwy o temperaturze Curie rzędu ok. 300 K, która to temperatura ma kluczowe znaczenie jeśli chodzi o zastosowanie materiałów spintronicznych.

## IV.II. Podsumowanie pracy: wkład własny.

By zrozumieć mechanizm zmian właściwości materiałów, musimy zrozumieć lokalne otoczenie i strukturę elektronową badanych pierwiastków w skali atomowej. Teoretycznie, zmiany struktury elektronowej zachodzące na skutek obecności pierwiastków śladowych (domieszek), defektów punktowych, zjawisk kwantowych itd., są trudne do omówienia w ramach tradycyjnej fizyki ciała stałego nawet jakościowo, a co dopiero ilościowo. Sprawa ma się inaczej dla przypadku kryształów bez defektów. Istnieje zaledwie kilka doświadczalnych metod analizy lokalnego otoczenia atomów wraz ze zmianami ich struktury elektronowej. Pośród tych metod, spektroskopia promieniowania rentgenowskiego z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego, zajmuje ważne miejsce. Najbardziej znaczące osiągnięcia spośród reprezentatywnych przykładów prowadzonych przeze mnie badań wybrane do prezentowanej pracy habilitacyjnej przyczyniły się zarówno do pogłębienia zrozumienia procesów fizycznych samej techniki jak również do poszerzenia wiedzy naukowej na temat konkretnego układu badanego. Chcę podkreślić następujące osiągnięcia:

- Skuteczne wykorzystanie spektroskopii miękkiego promieniowania rentgenowskiego (XAS oraz XES) do badania materiałów o wysokim stopniu nieuporządkowania strukturalnego w celu określenia szerokości przerwy energetycznej poprzez wyznaczenie ruchu wierzchołka pasma walencyjnego i dna pasma przewodnictwa oraz porównanie uzyskanych danych z teoretycznymi modelami VAC i BAC [H-1]. Dla warstw  $Ga_{1-x}N_xAs$  w szerokim zakresie składu, wybranych jako przykład, zostało pokazane, że zmniejszenie przerwy energetycznej może być przypisane przesunięciu minimum pasma przewodnictwa w kierunku niższych energii dla stopów o składzie  $x > 0,2$ , oraz przesunięciu maksimum pasma walencyjnego w kierunku wyższych energii dla stopów o składzie  $x < 0,2$ . Niezwykła struktura elektronowa oraz możliwość kontrolowania lokalizacji krawędzi pasm przewodnictwa i walencyjnego oferują bezprecedensową możliwość wykorzystania badanych stopów w nowatorskich ogniwach słonecznych. Były to pierwsze badania z wykorzystaniem spektroskopii promieniowania rentgenowskiego dla tych materiałów.
- Wykazanie konieczności uwzględnienia dziury rdzeniowej podczas obliczeń widm XANES i porównanie teorii z eksperymentem. Obliczenia XANES często zaniedbują wpływ dziury rdzeniowej (ang.: core-hole effect) co niejednokrotnie uniemożliwia bezpośrednie porównanie danych teoretycznych z eksperymentem. Szczegółowa analiza XANES dla krawędzi  $In-L_3$  (na przykładzie warstw  $Ga_{1-x}In_xN$  w szerokim zakresie składu) została przeprowadzona z użyciem kodu numerycznego FEFF8 wykorzystującego relatywistyczną, samo-uzgodnioną funkcję Green'a w przestrzeni rzeczywistej [H-2]. Dla czystego  $InN$  podejście nieuwzględniające dziury rdzeniowej lepiej opisuje doświadczalne dane XANES. Jest to związane z obecnością warstwy akumulacyjnej (ang.: accumulation layer) zawierającej wyższe koncentracje wolnych nośników w warstwie

powierzchniowej w InN, które w pełni ekranują poziom rdzeniowy z dziurą. Dla wszystkich stopów trójskładnikowych podejście z uwzględnieniem dziury rdzeniowej lepiej odzwierciedla dane doświadczalne. Wyniki prezentowane w niniejszej pracy wskazują, że uwzględnienie dziury rdzeniowej jest istotne, przynajmniej dla materiałów zawierających metale przejściowe o prawie wypełnionym paśmie  $d$ .

- Pionierskie prace demonstrujące możliwość oszacowania wielkości prostej/skośnej przerwy energetycznej (oraz jej typu) dla materiałów półprzewodnikowych przy użyciu spektroskopii promieniowania rentgenowskiego [H-3]. Zaprezentowany zestaw danych RIXS wskazuje na częściową mieszaninę początkowych oraz końcowych stanów elektronowych w pobliżu krawędzi absorpcji w wyniku czego zaobserwowano niekoherentny wkład w widmach emisyjnych. Komplementarność widm XAS i widm RIXS umożliwia szacowanie zarówno prostej jak i skośnej przerwy energetycznej. Otrzymane wyniki są zgodne z wynikami teoretycznymi/doświadczalnymi występującymi w literaturze oraz z przeprowadzonymi na tych samych próbkach pomiarami absorpcji optycznej.

Pokazano ponadto, że położenie pasma RIXS w  $\text{CdCl}_2$  zmienia się zgodnie z prawem Ramana Stokes'a (ma liniową dyspersję), jeśli energia wzbudzenia jest dostrojona poniżej progu absorpcji [H-4]. Sytuacja się zmienia przy energii wzbudzeń powyżej progu fotoabsorpcji, gdzie relacja dyspersyjna rozdziela się na dwie gałęzie. Pozycja części rezonansowej nie zależy od energii wzbudzenia, wówczas ekscytonowe pasmo przesuwa się zgodnie z prawem Ramana Stokes'a. Połączone dane XANES i RIXS, porównane z obliczoną strukturą pasmową (z użyciem kodu Wien2k), umożliwiły wyznaczenie prostej przerwy energetycznej dla  $\text{CdCl}_2$ .

- Zaobserwowanie zjawiska kwantowego ograniczenia przy użyciu XANES [H-5, H-6]. W przypadku systemów PbS jest powszechnie przyjęte, że kwantowe ograniczenie wymiarowości spowodowane ograniczonym rozmiarem cząsteczek PbS o nanometrowej wielkości, jest kluczowe jeśli chodzi o właściwości optyczne. Zgodnie z przewidywaniami modelu kwantowego ograniczenia, energie krawędzi pasm walencyjnego i przewodnictwa są przesunięte w stosunku do pozycji pasm objętościowego PbS, co prowadzi do poszerzenia przerwy energetycznej. Do tej pory, zmiana krawędzi pasma walencyjnego i pasma przewodnictwa jako funkcja wielkości nanokryształu PbS nie została doświadczalnie udowodniona.

- Przeprowadzono jedne z pierwszych badań przy użyciu EXAFS zmian w strukturze lokalnej wokół atomów Mn w warstwach (Ga, Mn)As wywołanych wysokotemperaturowym wygrzewaniem oraz wyznaczono wpływ tych zmian na własności magnetyczne [H-7]. Badania jakościowe i ilościowe widm EXAFS dają jednoznaczne dowody na przejście od fazy regularnej do heksagonalnej wokół atomów Mn jako rezultat wygrzewania w temperaturach 500 i 600°C. Wykazano, że wygrzewanie (Ga, Mn)As w temperaturze 600°C jest odpowiednią metodą do uzyskiwania niewielkich



heksagonalnych wytrąceń MnAs w matrycy macierzystej GaAs, które przejawiają właściwości ferromagnetyczne w temperaturach pokojowych.

### **Podziękowania.**

Chciałbym wyrazić głęboką wdzięczność pracownikom synchrotronowego źródła promieniowania ALS (Berkeley, Stany Zjednoczone) za umożliwienie mi dostępu do urządzeń w celu wykonywania pomiarów XANES/XES/RIXS opisanych powyżej badań naukowych podczas mojego stażu podoktorskiego w ALS. Ponadto, jestem wdzięczna za przydzielony czas i dostęp do urządzeń w Hasylab (Hamburg, Niemcy), gdzie zrealizowane zostały pomiary EXAFS dla układu GaMnAs, wspierane finansowo projektem Europejskim „ELISA”. Również, chciałabym wyrazić moją wdzięczność twórcom kodów numerycznych FEFF, FDMNES oraz Wien2k, które zostały wykorzystane przeze mnie w celu interpretacji danych eksperymentalnych.

*Irada Demchenko*

## Literatura do Rozdziału IV:

- [1] P. Stumm et al, PRL 79, 677, 1997.
- [2] W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager III, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, and S. R. Kurtz, Phys. Rev. Lett. 82, 1221, 1999.
- [3] W. Walukiewicz, W. Shan, K. M. Yu, J. W. Ager III, E. E. Haller, I. Miotlowski, M. J. Seong, H. Alawadhi, and A. K. Ramdas, Phys. Rev. Lett. 85, 1552, 2000.
- [4] W. Walukiewicz, K. Alberi, J. Wu, W. Shan, K. M. Yu, and J. W. Ager III, in Physics of Dilute III-V Nitride Semiconductors and Material Systems: Physics and Technology, edited by A. Erol Springer-Verlag, Berlin, 2008, Chap. 3.
- [5] V.N. Strocov et al, PRB 72, 085221, 2005
- [6] J.E.Muller et al., Solid State Commun. 42, 365, 1982.
- [7] H. Ebert et al., Phys. Rev. B 53, 16067, 1996.
- [8] N.F. Mott. Proc. R. Soc. Lond., 62:416, 1949.
- [9] A. Kuzmin, J. Purans, M. Benfatto, C.R. Natoli, Phys. Rev. B 47, 2480, 1993.
- [10] T.K. Maurya et al, Optic. Comm. 283, 4655, 2010.
- [11] R. Zeller, Z. Phys. B, 72:79, 1988.
- [12] J.C. Slater et al, Quantum theory of Molecules and solids. McGraw Hill, 1974.
- [13] A.L. Ankudinov et al. PRB, 58:7565, 1998.
- [14] G. Duscher et al, Ultramicroscopy, 86:355, 2001.
- [15] I. Mahboob et al, PRB 69, 201307R, 2004.
- [16] L.F.J. Piper et al, PRB 76, 245204, 2007.
- [17] M. Rovezzi, P. Glatzel, Semicond. Sci. Technol., 29, 023002, 2014.
- [18] O. Madelung, M. Schulz, and H. Weiss, Semiconductors: Physics of II-VI and I-VII Compounds, Landolt-Bornstein, New Series, Group III Vol. 17b \_Springer, Berlin, 1982.
- [19] H. Köhler, Solid State Commun. 11, 1687, 1972.
- [20] F. P. Koffyberg, Phys. Rev. B 13, 4470, 1976.
- [21] M. Altwein, H. Finkenrath, C. Konak, J. Stuke, and G. Zimmerer, Phys. Status Solidi 29, 203, 1968.
- [22] J. Kocka and C. Konak, Phys. Status Solidi B 43, 731, 1971.
- [23] A. A. Dakhel and F. Z. Henari, Cryst. Res. Technol. 38, 979, 2003.
- [24] K. Maschke and U. Rössler, Phys. Status Solidi 28, 577, 1968.
- [25] C. McGuinness, C. B. Stagarescu, P. J. Ryan, J. E. Downes, D. Fu, K. E. Smith, and R. G. Egdell, Phys. Rev. B 68, 165104, 2003.
- [26] J. Lüning, J.-E. Rubensson, C. Ellmers, S. Eisebitt, and W. Eberhardt, Phys. Rev. B 56, 13147, 1997.
- [27] S. Eisebitt, J. Lüning, J.-E. Rubensson, A. Settels, P. H. Dederichs, W. Eberhardt, S. N. Patitsas, and T. Tiedje, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 93, 245, 1998.

- [28] D. Eich, O. Fuchs, U. Groh, L. Weinhardt, R. Fink, E. Umbach, C. Heske, A. Fleszar, W. Hanke, E. K. U. Gross, C. Bostedt, T. v. Buuren, N. Franco, L. J. Terminello, M. Keim, G. Reuscher, H. Lugauer, and A. Waag, *Phys. Rev. B* 73, 115212, 2006.
- [29] L. F. J. Piper, A. DeMasi, K. E. Smith, A. Schleife, F. Fuchs, F. Bechstedt, J. Zuniga-Perez, and V. Munoz-Sanjose, *Phys. Rev. B* 77, 125204, 2008.
- [30] Pfalzer P Urbach JP Klemm M Horn S denBoer ML, Frenkel A I Kirkland JP, *Phys. Rev. B* 60, 9335, 1999.
- [31] Tröger L Arvanitis D Baberschke K Michaelis H Grimm U Zschech E, *Phys. Rev. B* 46, 3283, 1992.
- [32] Fleet ME, *The Canad. Mineral.* 43, 1811, 2005.
- [33] Lee JR Meulenberg RW Hanif KM Mattoussi H Klepeis J E Terminello LJ van Buuren T, *Phys. Rev. Lett.* 98, 146803, 2007.
- [34] Wise FW, *Acc. Chem. Res.* 33, 773, 2000.
- [35] Hines MA Scholes GD, *Adv. Mater.* 15, 1844, 2003.
- [36] Tröger L Arvanitis D Baberschke K Michaelis H Grimm U Zschech E, *Phys. Rev. B* 46, 3283, 1992.
- [37] Troger L Arvanitis D Rabus H Wenzel L Baberschke K, *Phys. Rev. B* 41, 7297, 1990.
- [38] Demchenko IN Chernyshova M He X Minikayev R Syryanyy Y Derkachova A Derkachov G Stolte WC Liang H, *X-Ray Spectrometry*, 42(4), 2013.
- [39] Bazin D Sayers D Rehr JJ Mottet C, *J. Phys. Chem. B* 101, 5332, 1997.
- [40] Soo Y L, Wang S, Kim S, Kim G, Cheon M, Chen X, Luo H, Kao Y H, Sasaki Y, Liu X and Furdyna J K *Appl. Phys. Lett.* 83, 2354, 2003.
- [41] Oiwa A, Katsumoto S, Endo A, Hirasawa M, Iye Y, Ohno H, Matsukura F, Shen A and Sugawara Y *Solid State Commun.* 103, 209, 1997.
- [42] Ohno H and Matsukura F *Solid State Commun.* 117, 179, 2001.
- [43] Kwiatkowski A, Wasik D, Kamińska M, Bozek R, Szczytko J, Twardowski J A, Borysiuk J, Sadowski J and Gosk J, *J. Appl. Phys.* 101, 113912, 2007.
- [44] Moreno M, Trampert A, Jenichen B, Daweritz L and Ploog K H, *J. Appl. Phys.* 92, 4672, 2002.
- [45] Kwiatkowski A, Wasik D, Kamińska M, Bozek R, Szczytko J, Twardowski J A, Borysiuk J, Sadowski J and Gosk J, *J. Appl. Phys.* 101, 113912, 2007.
- [46] Moreno M, Trampert A, Jenichen B, Daweritz L and Ploog K H, *J. Appl. Phys.* 92, 4672, 2002.
- [47] Ohno H *Phys. Status Solidi c* 3 4057, 2006.

## **V. Dyskusja innej aktywności/działalności naukowej.**

### **V.1. Kariera akademicka oraz naukowa.**

*1989 – 1994:* studentka Narodowego Uniwersytetu w Donetsku (Ukraina), Wydział Fizyki;

*1994 – 1996:* wykładowca Fizyki na Uniwersytecie Technicznym w Donetsku (Ukraina).

Adiunkt katedry Fizyki. Praca, m.in., polegała na przeprowadzeniu zajęć praktycznych, laboratoryjnych, oraz wykładów dla studentów z fizyki (mechanika, fizyka molekularna, optyka, elektrostatyka, magnetyzm).

*1996 – 1999:* asystent katedry Fizyki Ciała Stałego oraz Materiałoznawstwa Uniwersytetu Narodowego w Donetsku (Ukraina).

Obszar badań w dziedzinie inżynierii materiałowej, a dokładniej, analiza natury fizycznej odwracalnej deformacji nieelastycznej i możliwości praktycznego zastosowania materiałów mających właściwości pamięci kształtu.

*1.04.2000 – 21.06.2007:* doktorantka Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie; po obronie pracy doktorskiej w 2005 - adiunkt.

Wybór przedmiotu pracy doktorskiej p.t. 'Wykorzystanie absorpcji rentgenowskiej do charakteryzacji niskowymiarowych struktur półprzewodnikowych na bazie Si/Ge/Si' był motywowany interesującymi własnościami samoorganizujących się kropek kwantowych/wysp GeSi, które mają perspektywy zastosowania w optoelektronice. Celem tej pracy było określenie kształtu, rozmiaru oraz składu struktur tworzonych w warstwie germanu (o różnych grubościach) zagrzebanej w matrycy krzemowej dla próbek hodowanych w szerokim zakresie temperatur wzrostu (210÷750°C). Jako metodę analityczną badania lokalnej struktury wokół atomu Ge zastosowano analizę rozciągniętej subtelnej struktury widma absorpcyjnego (ang.: EXAFS). Wnioski wynikające z przeprowadzonych badań EXAFS zostały poparte metodami komplementarnymi takimi jak HRTEM oraz PL. Wykazano, że lokalna struktura atomowa samoorganizujących wysp GeSi zagrzebanych w matrycy krzemowej ma silny wpływ na właściwości optyczne tych systemów. Uzyskane wyniki zostały wykorzystane do budowy schematycznego opisu modelu struktury pasmowej [A-18]. Ilościową analizę widm EXAFS wykonano dla trzech sfer koordynacyjnych wokół atomu absorbującego Ge z uwzględnieniem wielokrotnych rozprożeń [A-18, A-19, A-24, A-29, A-32, A-35, A-37]. Wykazano, że oszacowana liczba koordynacyjna dla poszczególnych sfer koordynacyjnych w stopie (zdefiniowana przez autora jako "stopień przemieszania") nie może być traktowana jako stężenie stopu, ale może być używana wraz z odpowiednim modelem komórki elementarnej do obliczenia realistycznego stężenia stopu SiGe. Oszacowana w taki sposób frakcja Ge w wyspach GeSi jest w dobrej zgodzie z wynikami analizy

HRTEM. Zaproponowany na tej podstawie model komórki elementarnej został zastosowany do obliczeń *ab initio* widm XANES. To podejście wykazało dobrą zgodność pomiędzy teorią a eksperymentem. Informacje uzyskane z analizy widm XAFS oraz HRTEM zostały następnie użyte do obliczeń diagramu struktury pasmowej, który z kolei był podstawą do porównania z eksperymentalnymi widmami fotoluminescencji. Dobra zgodność proponowanego przybliżenia z danymi doświadczalnymi pozwoliła wywnioskować, że technika XAFS jest doskonałym narzędziem do opisu właściwości optycznych systemów SiGe.

Ponadto, w trakcie studiów doktoranckich, zaraz po obronie pracy doktorskiej, ale przed wyjazdem na staż podoktorski, zapoznałam się z takimi technikami jak XPS, PL, HRTEM oraz EPMA oraz zastosowałam je do charakteryzacji szerokiej klasy materiałów, a mianowicie, ceramiki (TiN, TiC, Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub> [A-23, A-28, A-30, A-34], NaNbO<sub>3</sub> domieszkowanych Mn oraz jonami Bi [A-22, A-27]), roztworów (Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>), związków na bazie GaN [A-33], monokryształów (Ge, Si), struktur niskowymiarowych (z pojedynczymi warstwami oraz supersieciami Ge<sub>n</sub>/Si<sub>m</sub>) [A-37], półprzewodników magnetycznych (MnTe, EuS/PbS, (Eu,Gd)Te) [A-25, A-26, A-31], pigmentu malarij oraz jego substytutów z żelazem [A-21], materiałami wykorzystywanymi w produkcji barwników [A-39].

W celu popularyzacji technik absorpcji rentgenowskiej byłam współorganizatorem oraz prowadziłam serie wykładów na warsztatach p.t. "Zastosowanie Absorpcji Rentgenowskiej do Wyznaczania Lokalnej Struktury Atomowej Materiałów Elektronicznych" (13 - 15 listopada 2006, Warszawa). Wykłady te wyjaśniały eksperyment XAFS (możliwości, zalety, ograniczenia); teoretyczną/praktyczną interpretację danych eksperymentalnych EXAFS wykorzystując kod numeryczny FEFF8; oraz analizę/interpretację danych EXAFS na przykładzie systemów SiGe [C-4].

21.06.2007 – 01.10.2011: staż podoktorski w UNLV/ALS (Las Vegas/Berkeley, USA).

W trakcie tego stażu realizowałam prace związane z eksperymentami spektroskopii rentgenowskiej (XANES, XES, RIXS) dla szerokiej gamy materiałów: od fazy gazowej do stanu stałego na różnych stacjach eksperymentalnych w ALS. We współpracy z Uniwersytetem w Bremen, Uniwersytetem w Nottingham oraz LBNL, prowadziłam badania materiałów związanych z przemysłem ogniw słonecznych na różnych stacjach eksperymentalnych w ALS. Wyniki prowadzonych badań zostały zaprezentowane w publikacjach i prezentacjach konferencyjnych [A-5 - A-14, B-54, B-55, B-60 - B-74]. Duża część mojej pracy została poświęcona testom przeprowadzonym na stacji eksperymentalnej 9.3.1 należącej do UNLV wyposażonej w nowy sprzęt oraz elektronikę. Dodatkowo, moja praca była związana z chemicznymi projektami badawczymi UNLV, które dotyczyły efektów nie dipolowych, przenoszenia prądu (ang.: drag current) oraz spektroskopii masowej dla fazy gazowej.

Jestem współautorem rozdziału p.t. "Absorpcyjna spektroskopia rentgenowska" w przeglądowym skrypcie zatytułowanym "Spektroskopia promieniowania synchrotronowego oraz badania strukturalne" [A-47], pod redakcją BJ Kowalskiego, W. Paszkowicza, EA Görlicha. Głównym celem tego skryptu była popularyzacja technik synchrotronowych wśród polskich młodych naukowców i studentów. Działalność ta jest ważnym punktem w kontekście budowy Polskiego Synchrotronu Solaris.

*01.10.2011 – do dziś:*

Po powrocie ze stażu podoktorskiego w Stanach Zjednoczonych, zostałam kierownikiem grupy SL1.2 w IF PAN i sprawowałam tę funkcję do jesieni 2014 roku. Od roku 2012 do chwili obecnej jestem kierownikiem tematu statutowego p.t. "*Charakteryzacja nowych materiałów nieorganicznych i organicznych: uporządkowanie atomowe, wiązania chemiczne i skład pierwiastkowy*". Od 2012 roku jestem również opiekunem naukowy doktoranta SL1.2 P. Konstantynova [C-14]. Obecnie kontynuuję niektóre projekty naukowe, które są częścią habilitacji, z naciskiem na wykorzystanie spektroskopii rentgenowskiej jako dominującej techniki do badań innowacyjnych materiałów. Poniżej przedstawiam krótkie podsumowanie z niektórych projektów, które nie zostały wymienione powyżej.

*Lokalna atomowa oraz elektronowa struktura ferromagnetycznych warstw (Ga, Mn)N*

Stabilny feromagnetyzm w temperaturze pokojowej jest najbardziej pożądaną właściwością dla rozcieńczonych półprzewodników magnetycznych (ang.: DMS). Właściwość ta może być osiągnięta przez wzrost jednorodnych DMS materiałów o wysokiej jakości oraz wysokim stężeniu podstawieniowych jonów metali przejściowych w macierzystej matrycy, tutaj GaN. Badane jednorodne warstwy (Ga, Mn) N o wysokim stężeniu Mn wyhodowano w Instytucie Półprzewodników przy Bremeńskim Uniwersytecie (w Niemczech) metodą MBE. Do wstępnego opisu właściwości badanych próbek, użyto kilka metod komplementarnych – TEM, XRD, SIMS, oraz RBS. Badania TEM oraz XRD wykazały wysoką jakość wyhodowanych warstw oraz jednorodny rozkład jonów manganu w matrycy GaN. Pomiarzy RBS potwierdziły obecność jonów Mn w pozycjach Ga w matrycy GaN. W celu weryfikacji tych obserwacji oraz oszacowania wartościowości manganu w badanych warstwach przeprowadzone zostały pomiary XAFS na K krawędzi manganu. Ilościowa analiza otrzymanych widm, oraz obliczenia z pierwszych zasad (używając teorii DFT), potwierdziły iż mangan rzeczywiście lokuje się w sieci GaN w pozycjach podstawieniowych galu. Ponadto, wszystkie badane próbki (o zawartości Mn od 5 do 9 % at.) wykazują podobną wartościowość manganu, który ocenia się na poziomie pomiędzy 2+ oraz 3+ (bliżej 2+). Wyniki te, w połączeniu z danymi pomiarów magnetycznych zostały przyjęte do publikacji w Journal of Applied Physics pod koniec roku 2014 [A-46] oraz zaprezentowane na konferencji międzynarodowej [B-77].

*Zmiany lokalnego otoczenia domieszek manganu w matryce GaAs obserwowane na skutek wygrzewania poniżej 400°C.*

Zrozumienie ewolucji mikrostruktury materiałów podczas wzrostu i następnie po wygrzewaniu jest jednym z kluczowych zagadnień dotyczących materiałów spintronicznych o własnościach magnetycznych w temperaturze pokojowej. Procesy zachodzące w warstwach DMS podczas wygrzewania w wysokich temperaturach (powyżej 500 °C) są już dobrze zbadane i prowadzą do powstania wzbogaconych w mangan wytrąceń (Ga, Mn) As o kubicznej oraz/lub heksagonalnej strukturze z jednoczesną zmianą własności magnetycznych takich struktur. Prowadzone badania mają natomiast na celu poznanie procesów fizycznych zachodzących w warstwach (Ga,Mn) As na skutek wygrzewania w niższych temperaturach (250-450 °C). Badano mechanizm migracji jonów manganu w sieci GaAs do momentu uformowania wyrazistych wytrąceń obserwowalnych, na przykład, za pomocą TEM. Przeprowadzono również wstępne badania XAFS dla wybranych próbek w ośrodku synchrotronowym MaxLab (Szwecja) [A-45]. Niestety, widma XAFS zawierały sporą ilość niepożądanych pików dyfrakcyjnych pochodzących od masywnego podłoża GaAs, co uniemożliwiło wyodrębnienie poprawnej funkcji rozkładu radialnego wokół atomów manganu. Opracowana została więc metoda fizycznego odcięcia badanych warstw od podłoża (ang.: 'lift-off' procedure). Wstępne badania, przeprowadzone na synchrotronie ALBA na tak przygotowanych warstwach, wykazały, że próbki te pozwalają na prawidłową interpretację widm XAFS, gdyż otrzymany sygnał XAFS nie zawiera już niepożądanego rozpraszania elastycznego od podłoża.

Ponadto, przeprowadzono serie obliczeń teoretycznych, używając kodów numerycznych Quantum Espresso oraz Wien2k, bazujących na teorii funkcjonałów gęstości, w celu analizy wpływu różnych punktowych defektów (na przykład:  $Mn_{Ga}$ ,  $V_{As}$ ,  $Mn_{Ga}$ -As- $Mn_{Ga}$  i t.d.) na stabilność energetyczną oraz właściwości magnetyczne całego układu. Obliczenia te pozwoliły na zidentyfikowanie najbardziej stabilnych konfiguracji. Wykazano, że atomy Mn preferują łączenie się w klastry poprzez atomy arsenu. Dla wszystkich stabilnych konfiguracji zostały przeprowadzone obliczenia teoretyczne widm XANES które zostały porównane z widmami eksperymentalnymi. Dodatkowo, sprawdzono teoretycznie wpływ dziury rdzeniowej na kształt widm XANES w badanym układzie. Część uzyskanych wyników była prezentowana w postaci plakatu na konferencji ISSRNS [B-84]. Część danych została opisana w raporcie naukowym do MaxLab w Szwecji [A-45]. Aktualnie przygotowuje się publikacja do PRB.

*Wstępne badania: Krzem implantowany renem*

Domieszkowany renem krzem należy do powszechnie badanej klasy materiałów zwanych rozcieńczonymi półprzewodnikami magnetycznymi (DMS). Do tej klasy należą półprzewodniki z grup III-V, II-VI, oraz IV lub tlenki metali przejściowych. Zwykle domieszkami są pierwiastki 3d, z których

najczęściej używane są Mn, Fe, i Cr. Ren jest elementem z 5-ej grupy tabeli Mendelejewa, przewiduje się, że jego elektrony powinny tworzyć stany silnie hybrydyzowane ze stanami matrycy Si. Fakt ten do tej pory nie został zbadany eksperymentalnie, głównie ze względu na trudności z wprowadzeniem tej domieszki do matrycy Si. We współpracy z Instytutem Fizyki Plazmy i Laserowej Mikrosyntezy w Warszawie podjęto próbę implantacji renu do objętościowego krzemu. W celu określenia zasięgu dyfuzji Re w krzemie przeprowadzone zostały pomiary profili metodą SIMS. Analiza profili SIMS wykazuje wysoką zawartość Re w matrycy Si o stałej koncentracji na głębokości do co najmniej 7 mikronów (głębiej nie badano). Badanie próbek za pomocą mikroanalizatora poza renem wykazało istnienie w matrycy krzemowej miedzi oraz śladowych ilości chromu (oba pierwiastki obecne są w materiale komory układu do implantacji). Pomiary XRD pozwoliły wywnioskować, że po implantacji pierwotna struktura monokrystalicznego krzemu zmienia się głównie w fazę polikrystalicznego  $\text{ReSi}_2$ . Przeprowadzone badania za pomocą SQUID wykazały, że po implantacji próbki obserwowany jest słaby sygnał feromagnetyczny, natura którego jednak wymaga dalszych badań w celu określenia źródła tego sygnału (Cr czy Re). Obecnie przeprowadzane badania EPR mają na celu problem rozstrzygnąć tę wątpliwość.

#### *Badanie cienkich warstw Nb zagrzebanych w amorficznym krzemie*

Krzemki metali przejściowych są przedmiotem dużego zainteresowania głównie z powodu ich intensywnej eksploatacji w mikroelektronice. We współpracy z zespołem ON2.4 rozpoczęto badania warstw Nb o różnych grubościach zagrzebanych w amorficznej matrycy krzemowej. Badania wykorzystujące efekt Halla na warstwach Nb w funkcji ich grubości wykazują zmianę rodzaju nośników w próbkach o grubości warstwy Nb poniżej 1.6 nm. Przyczyna tych zmian nie jest znana. Przeprowadzono więc wstępne pomiary XPS dla wybranych próbek w IChF PAN w celu poznania struktury elektronowej tych warstw. Ponieważ poziomy elektrony Nb 4*d* i Si 3*p* odgrywają ważną rolę w wiązaniach chemicznych roztworów Si-Nb, użycie analizy XPS dla identyfikacji rodzaju wiązań (szczególnie na między-powierzchniach a-Si/Nb oraz Nb/a-Si) w badanych próbkach pozwoli na separację oraz identyfikację pasm pochodzących od odpowiednich wiązań. Otrzymane wyniki są w stadium przygotowania do publikacji.

#### *Pomiary XAFS dla super-wydajnych nano-cząstek $\text{Gd}_2\text{O}_3:\text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$ domieszkowanych $\text{Zn}^{2+}$*

Celem tego projektu badawczego jest zrozumienie mechanizmu zwiększenia wydajności luminescencji nano-cząstek  $\text{Gd}_2\text{O}_3:\text{Er}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$  domieszkowanych  $\text{Zn}^{2+}$  za pomocą spektroskopii rentgenowskiej. Materiał ten może być wykorzystany jako nowy czujnik biologiczny przydatny w aplikacjach biologicznych oraz medycynie. W ramach tego projektu, podjęta została próba wyjaśnienia obserwowanego zwiększenia wydajności luminescencji w funkcji zawartości Zn w przygotowanych w Laboratorium SL-4 nano-cząstkach. Przewiduje się iż ilościowa analiza widm XAFS



będzie pomocna w udowodnieniu bądź zaprzeczeniu wstępnych hipotez co do obserwowanego efektu eksperymentalnego: (i) tworzenie defektów tlenowych od strony jonów Zn ulokowanych w podstawieniowych pozycjach Gd, (ii) zmiany pola krystalicznego wokół jonów aktywatora  $\text{Er}^{3+}$  na skutek inkorporacji jonów  $\text{Zn}^{2+}$  do międzywęzłowych pozycji lub pozycji podstawieniowych w miejsca  $\text{Gd}^{3+}$ , oraz (iii) na skutek zwiększenia stężenia jonów  $\text{Zn}^{2+}$  w trakcie syntezy. W związku z powyższym, badania XAFS zostały przeprowadzone w ośrodku synchrotronowym MaxLab (Szwecja) dla K krawędzi Zn. Interpretacja danych, poparta badaniami XPS, jest aktualnie prowadzona.

#### *Pozostała aktywność*

Wśród innych moich działań należy wspomnieć, że brałam aktywny udział w przygotowaniu projektu Europejskiego EAgLE w ramach programu 7PR, który został przyjęty do realizacji w IF PAN (Warszawa) w latach 2013-2016. W chwili obecnej jestem kierowniczką kilku zadań (2.4, 3.2, oraz 3.9 [D-15]) które realizowane są w ramach tego projektu: (i) "Enhancing of human potential through exchange of know-how and twinning activities - ALBA- synchrotron light facility": podnoszenie kwalifikacji pracowników IF PAN oraz pracowników organizacji partnerskiej 'ALBA synchrotron' poprzez współpracę/wymianę naukową; (ii) "Enhancement of IP PAS human resources through recruitment of experienced researchers and trainings": organizacja oraz koordynowanie pracy teoretyka w dziedzinie fizyki kondensowanej; (iii) organizacja warsztatów naukowych związanych z kodem numerycznym Wien2k bazującym na teorii DFT. Ponadto jestem zastępcą kierownika pakietu zadaniowego 2 „Enhancing of human potential through exchange of know-how and twinning activities with partnering organisation”.

Dodatkowo aktywnie uczestniczę w realizacji zadań 4.1 oraz 4.2 (które są częścią pakietu zadaniowego 4 "Capacity building of the EAgLE laboratories through purchase and upgrading of research equipment") gdzie brałam udział w przygotowaniu specyfikacji dla procedury przetargowej dla spektrometru XPS/UPS, oraz, organizacji nowoczesnego laboratorium badań powierzchni w IF PAN.

Warto podkreślić iż w ramach realizacji projektu EAgLE zorganizowałam warsztaty naukowe p.t. „WIEN2K and SPECTROSCOPY: HANDS-ON WORKSHOP” [C-12] w Warszawie w terminie 29.09-02.10.2014. Szczegóły dotyczące warsztatów przedstawione są na stronie internetowej <http://www.eagle-regpot.eu/info/Wien2k/index.html>.

Jestem również członkiem zespołu naukowców, którzy pracują nad projektami budowy stacji eksperymentalnych dotyczących spektroskopii na synchrotronie Solaris w Polsce: (i) "RIXS station at the wiggler" - opracowany przez zespół specjalistów z Instytutu Chemii Fizycznej PAN oraz członków zespołu SL 1.2 w IF PAN (prof. dr. hab. K. Jabłońska, oraz habilitantka); (ii) "The bending magnet

beamline for X-ray absorption” - zaproponowany oraz opracowany przez specjalistów IF PAN SL 1.2, a mianowicie, prof. dr. hab. K. Jabłońska, habilitantka, dr M. Klepka, oraz dr. hab. A. Wolska.

Jestem członkiem Polskiego Towarzystwa promieniowania synchrotronowego oraz Międzynarodowego Towarzystwa Absorpcji Rentgenowskiej.

*Iraida Demchenko*

## V.2. Publikacje naukowe w czasopismach znajdujących się w bazie JRC.

[A-1] [Experimental observation of quantum confinement in the conduction band of PbS quantum dots](#)

By: Demchenko, I. N.; Chernyshova, M.; He, X.; et al.

X-RAY SPECTROMETRY Volume: 42 Issue: 4 Special Issue: SI Pages: 197-200

Published: JUL-AUG 2013

[A-2] [XANES: observation of quantum confinement in the conduction band of colloidal PbS quantum dots](#)

By: Demchenko, I. N.; Chernyshova, M.; He, X.; et al.

Journal of Physics Volume: 430 Article Number: UNSP 012030 Published: 2013

[A-3] [Synthesis and Transformation of Zn-Doped PbS Quantum Dots](#)

By: He, Xingliang; Demchenko, Iraida N.; Stolte, W. C.; et al.

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C Volume: 116 Issue: 41 Pages: 22001-22008

Published: OCT 18 2012

[A-4] [Electronic structure of polycrystalline cadmium dichloride studied by X-ray spectroscopies and ab initio calculations](#)

By: Demchenko, I. N.; Chernyshova, M.; Stolte, W. C.; et al.

MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS Volume: 135 Issue: 2-3 Pages: 1036-1043

Published: AUG 15 2012

[A-5] [An XANES and XES investigation of the electronic structure of indium rich  \$\text{In}\_x\text{Ga}\_{1-x}\text{N}\$  films](#)

By: Demchenko, I. N.; Chernyshova, M.; Piskorska-Hommel, E.; et al.

JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS Volume: 509 Issue: 39 Pages: 9528-9535

Published: SEP 29 2011

[A-6] [Growth by molecular beam epitaxy of amorphous and crystalline GaNAs alloys with band gaps from 3.4 to 0.8 eV for solar energy conversion devices](#)

By: Novikov, S. V.; Staddon, C. R.; Foxon, C. T.; Demchenko I.; et al.

JOURNAL OF CRYSTAL GROWTH Volume: 323 Issue: 1 Special Issue: SI Pages: 60-

63 Published: MAY 15 2011

[A-7] [Electronic structure of CdO studied by soft X-ray spectroscopy](#)

By: Demchenko, I. N.; Chernyshova, M.; Tyliszczak, T.; et al.

JOURNAL OF ELECTRON SPECTROSCOPY AND RELATED PHENOMENA Volume:

184 Issue: 3-6 Special Issue: SI Pages: 249-253 Published: APR 2011

[A-8] [X-ray absorption studies of chlorine valence and local environments in borosilicate waste glasses](#)

By: McKeown, David A.; Gan, Hao; Pegg, Ian L., Demchenko I.; et al.

JOURNAL OF NUCLEAR MATERIALS Volume: 408 Issue: 3 Pages: 236-245

Published: JAN 31 2011

[A-9] [Inner-shell photofragmentation of Cl-2](#)

By: Stolte, W. C.; Guillemin, R.; Demchenko, I. N.; et al.

JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS Volume:

43 Issue: 15 Special Issue: SI Article Number: 155202 Published: AUG 14 2010

[A-10] [Full multiple scattering analysis of XANES at the Cd L-3 and O K edges in CdO films combined with a soft-x-ray emission investigation](#)

By: Demchenko, I. N.; Denlinger, J. D.; Chernyshova, M.; et al.

PHYSICAL REVIEW B Volume: 82 Issue: 7 Article Number: 075107 Published: AUG 5 2010

[A-11] [Molecular beam epitaxy of GaNAs alloys with high As content for potential photoanode applications in hydrogen production](#)

By: Novikov, S. V.; Staddon, C. R.; Foxon, C. T., Demchenko I.; et al.

JOURNAL OF VACUUM SCIENCE & TECHNOLOGY B Volume: 28 Issue: 3  
Published: MAY 2010

[A-12] [Non-equilibrium GaNAs alloys with band gap ranging from 0.8-3.4 eV](#)

By: Yu, K. M.; Novikov, S. V.; Broesler, R., Demchenko I.; et al.

Book Author(s): Park, SJ

PHYSICA STATUS SOLIDI C: CURRENT TOPICS IN SOLID STATE PHYSICS, VOL 7, NO 7-8 Book Series: Physica Status Solidi C-Current Topics in Solid State Physics  
Volume: 7 Issue: 7-8 Published: 2010

[A-13] [Highly mismatched crystalline and amorphous GaN<sub>1-x</sub>As<sub>x</sub> alloys in the whole composition range](#)

By: Yu, K. M.; Novikov, S. V.; Broesler, R., Demchenko I.; et al.

JOURNAL OF APPLIED PHYSICS Volume: 106 Issue: 10 Article Number: 103709  
Published: NOV 15 2009

[A-14] [XANES studies of modified and newly synthesized nanostructured manganese oxides](#)

By: Demchenko, I. N.; Lawniczak-Jablonska, K.; Tyliczszak, T.; et al.

JOURNAL OF ELECTRON SPECTROSCOPY AND RELATED PHENOMENA Volume: 171 Issue: 1-3 Pages: 24-29 Published: APR 2009

[A-15] [XANES studies of Mn K and L\(3,2\) edges in the \(Ga,Mn\) As layers modified by high temperature annealing](#)

By: Wolska, A.; Lawniczak-Jablonska, K.; Klepka, M. T., Demchenko I.; et al.

ACTA PHYSICA POLONICA A Volume: 114 Issue: 2 Pages: 357-366 Published: AUG 2008

[A-16] [Local atomic structure and magnetic ordering of iron in Fe-chitosan complexes](#)

By: Klepka, Marcin T.; Nedelko, Nataliya; Greneche, Jean-Marc, Demchenko, Iraida; et al.

BIOMACROMOLECULES Volume: 9 Issue: 6 Pages: 1586-1594 Published: JUN 2008

[A-17] [Modification of the local atomic structure around Mn atoms in \(Ga, Mn\) As layers by high temperature annealing](#)

By: Demchenko, I. N.; Lawniczak-Jablonska, K.; Story, T.; et al.

JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER Volume: 19 Issue: 49 Article Number: 496205 Published: DEC 12 2007

[A-18] [The effect of local atomic structure on the optical properties of GeSi self-assembled islands buried in silicon matrix](#)

By: Demchenko, I. N.; Lawniczak-Jablonska, K.; Kret, S.; et al.

NANOTECHNOLOGY Volume: 18 Issue: 11 Article Number: 115711 Published: MAR 21 2007

[A-19] [Examination of local structure of composite and low dimension semiconductor with X-ray absorption spectroscopy](#)

By: Lawniczak-Jablonska, K.; Demchenko, I. N.; Piskorska, E.; et al.

JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS Volume: 352 Issue: 40-41 Pages: 4190-4199 Published: NOV 1 2006

[A-20] [Deposition of nanolayers by means of dense plasma focus](#)

By: Chernyshova, M.; Ivanova-Stanik, I.; Karpinski, L., Demchenko, I.; et al.

CZECHOSLOVAK JOURNAL OF PHYSICS Volume: 56 Supplement: B Pages: B237-B242 Part: 2 Published: 2006

[A-21] [Local environment of iron in malarial pigment and its substitute beta-hematin](#)

By: Walczak, M; Lawniczak-Jablonska, K; Sienkiewicz, A, Demchenko, I; et al.

NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS Volume: 238 Issue: 1-4 Pages: 32-38 Published: AUG 2005

[A-22] [XANES MnK edge in NaNbO<sub>3</sub> based ceramics doped with Mn and Bi ions](#)

By: Wolska, A.; Molak, A.; Lawniczak-Jablonska, K., Demchenko, I.; et al.

PHYSICA SCRIPTA Volume: T115 Pages: 989-991 Published: 2005

[A-23] [Characterization of the c-BN/TiC, Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub> systems by element selective spectroscopy](#)

By: Piskorska, E; Lawniczak-Jablonska, K; Demchenko, IN; et al.

JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS Volume: 382 Issue: 1-2 Pages: 187-194 Published: NOV 17 2004

[A-24] [Characterization of the local structure of Ge quantum dots by X-ray absorption](#)

By: Demchenko, IN; Lawniczak-Jablonska, K; Piskorska, E; et al.

JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS Volume: 382 Issue: 1-2 Pages: 206-210 Published: NOV 17 2004

[A-25] [\(Eu,Gd\)Te - MBE growth and characterization](#)

By: Dziawa, P; Taliashvili, B; Domuchowski, W, Demchenko, I; et al.

ACTA PHYSICA POLONICA A Volume: 106 Issue: 2 Pages: 215-221 Published: AUG 2004

[A-26] [Photoemission study of EuS layers buried in PbS](#)

By: Orłowski, BA; Mickevicius, S; Chernyshova, M, Demchenko, I; et al.

JOURNAL OF ELECTRON SPECTROSCOPY AND RELATED PHENOMENA Volume: 137 Special Issue: SI Pages: 763-767 Published: JUL 2004

[A-27] [Study on the chemistry and structure of \(Na\(1-x\)Bix\)\(Nb\(1-y\)Mny\)O-3 ceramics by XPS, AES and EPMA](#)

By: Lawniczak-Jablonska, K; Demchenko, IN; Piskorska, E; et al.

MICROCHIMICA ACTA Volume: 145 Issue: 1-4 Pages: 95-99 Published: APR 2004

[A-28] [Phase and element contents of the cBN based composites as estimated by XPS](#)

By: Piskorska, E; Lawniczak-Jablonska, K; Demchenko, IN; et al.

MICROCHIMICA ACTA Volume: 145 Issue: 1-4 Pages: 159-163 Published: APR 2004

[A-29] [Local microstructure of Ge layers buried in a silicon crystal studied by extended X-ray absorption fine structure](#)

By: Demchenko, IN; Lawniczak-Jablonska, K; Zhuravlev, KS; et al.

JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS Volume: 362 Issue: 1-2 Pages: 156-161  
Published: JAN 14 2004

[A-30] [X-ray absorption studies of phase formation in a Ti/TiN coating on cubic boron nitride](#)

By: Piskorska, E; Lawniczak-Jablonska, K; Demchenko, IN; et al.

JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS Volume: 362 Issue: 1-2 Pages: 171-177  
Published: JAN 14 2004

[A-31] [Photoemission study of EuS/PbS electronic structure](#)

By: Orłowski, BA; Guziewicz, E; Kowalski, BJ, Demchenko, IN; et al.

JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS Volume: 362 Issue: 1-2 Pages: 198-201  
Published: JAN 14 2004

[A-32] [X-ray absorption studies of Ge layers buried in silicon crystal](#)

By: Demchenko, IN; Lawniczak-Jablonska, K; Zhuravlev, KS; et al.

ACTA PHYSICA POLONICA A Volume: 101 Issue: 5 Pages: 709-717 Published: MAY 2002

[A-33] [Polarization dependent X-ray absorption studies of the chemical bonds anisotropy in wurtzite GaN grown at different conditions](#)

By: Lawniczak-Jablonska, K; Iwanowski, RJ; Demchenko, IN; et al.

JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS Volume: 328 Issue: 1-2 Pages: 77-83  
Published: OCT 4 2001

[A-34] [„X-ray absorption studies of the c-BN-Ti based composites”](#)

By: Piskorska E., Ławniczak-Jabłońska K., Benko E., Demchenko I., Benko A., Welter E., Barr T., HasyLab Annual Rep. vol. 2001, 347-348 (2002).

[A-35] [“X-ray absorption studies of Ge layers buried in silicon crystal”](#)

By: Demchenko I., Ławniczak-Jabłońska K., Zhuravlev K., Piskorska E., Nikifirov A., Welter E., HasyLab Annual Rep. vol. 2001, 345-346 (2002).

[A-36] [„EuS/PbS electronic structure in photoemission study”](#)

By: Orłowski B., Story T., Mickevicius S., Sipatov A.Y., Chernyshova M., Demchenko I., Medicherla R., Drube W., Johnson R.L., HasyLab Annual Report, v. 2002, 521 (2003), Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB am Deutschen Elektronen- Synchrotron DESY.

[A-37] [“Ge atom surrounding in Ge/Si heterostructures”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, M. Chernyshova, M. Klepka, E. Piskorska, M. Walczak and E. Welter, Annual Report, (2004), Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB am Deutschen Elektronen- Synchrotron DESY.

[A-38] [“EXAFS investigation of iron bond in malarial pigment and its substitute  \$\beta\$ -hematin”](#)

By: K. Lawniczak-Jablonska, M. Walczak, A. Sienkiewicz, M. Chernyshova, I.N. Demchenko, E. Piskorska, G. Chatain1 and D. S. Bohle, Annual Report, (2004), Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB am Deutschen Elektronen- Synchrotron DESY.

[A-39] [“Ionic states of Fe and Ti in the raw materials used in pigments production”](#)

By: K. Lawniczak-Jablonska, M. Klepka, M. Walczak, I.N. Demchenko, E. Piskorska, M. Jabłoński, Annual Report, (2004), Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB am Deutschen Elektronen- Synchrotron DESY.

[A-40] [„XAFS studies of the local structure of Mn doped dilute magnetic semiconductors”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, M. Klepka, A. Wolska and J. Sadowski, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB am Deutschen Elektronen- Synchrotron DESY (2006).

[A-41] [“Location of the implanted Mn<sup>+</sup> ions in Si crystals”](#)

By: A. Wolska, K. Lawniczak-Jablonska, I.N. Demchenko, M. Klepka, A. Misiuk, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB am Deutschen Elektronen- Synchrotron DESY, 603 (2006).

[A-42] [“The local environment around the In atoms in InGaN layers grown by MBE”](#)

By: I.N. Demchenko, W.C. Stolte, E. Piskorska-Hommel, D. Hommel, K. Lawniczak-Jablonska and O. Hemmers, *Advanced Light Source Annual Report* 2008.

[A-43] [“XANES studies of Mn positions in the MBE as grown \(Ga,Mn\)As layer”](#)

By: A. Wolska, K. Lawniczak-Jablonska, M.T. Klepka, J. Sadowski and I.N. Demchenko, *Hasylab Annual Report* 2007, 923-924.

[A-44] [“XAFS studies of the local structure of Mn doped dilute magnetic semiconductors”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, M. Klepka, A. Wolska and J. Sadowski, Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB am Deutschen Elektronen- Synchrotron DESY, Annual Report (2006) p 787.

[A-45] [„EXAFS investigations of local structural changes in \(Ga,Mn\)As thin layers at low temperature postgrowth annealing”](#)

By: I.N. Demchenko, M. Chernyshova, P. Konstantynov, J. Domagala, Y. Melikhov, J. Sadowski, MaxLab Annual Report (2013).

[A-46] [“The electronic structure of homogeneous ferromagnetic \(Ga, Mn\)N epitaxial films”](#)

By: E. Piskorska-Hommel, M. J. Winiarski, G. Kunert, I. N. Demchenko, O. D. Roshchupkina, J. Grenzer, J. Falta, D. Hommel, V. Holý, J. Appl. Phys. 117, 065702 (2015).

### **V.3. Monografie i publikacje naukowe w czasopismach międzynarodowych lub krajowych innych niż znajdujące się w bazie JRC**

[A-47] [“Promieniowanie synchrotronowe w spektroskopii i badaniach strukturalnych”](#)

By: pod redakcją B.J. Kowalskiego, W. Paszkowicza, E.A. Görlicha, Polskie Towarzystwo Promieniowania Synchrotronowego, Warszawa-Kraków (2011).

[A-48] [„Położenie atomów Mn w GaAs: Spektroskopia Absorpcji Rentgenowskiej”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Ławniczak-Jabłońska, R. Jakiela, J. Z. Domagała, M. Klepka, A. Wolska, E. Piskorska, J. Sadowski „Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society” 5, N 3 (2006).

[A-49] [„Zastosowanie Absorpcji Rentgenowskiej do wyznaczenia koordynacji żelaza w chitosanie”](#)

By: M. Klepka, K. Ławniczak-Jabłońska, I.N. Demchenko, N. Nedelko, A. Ślewska-Waniewska, C.A. Rodrigues, C. Bordini „Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society” 5, N 3 (2006).

### **V.4. Wystąpienia konferencyjne**

[B-1] [“Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub> activated c-BN composites studied by x-ray absorption spectroscopy”](#)

By: Piskorska E., Ławniczak-Jabłońska K., Benko E., Demchenko I., Klimczyk P., Welter E., Perera R.C., Nachimuthu P., Nordic Summer School in Synchrotron Radiation, Lund, Sweden, 23-05-2002.

[B-2] [“Use of x-ray absorption for estimation of internal strains inside the buried low dimensional structures”](#)

By: Ławniczak-Jabłońska K., Demchenko I., Synchrotron Radiation Natural Sci. vol. 2 (1), 32-34 (2003).

- [B-3] [„Investigation of Ge quantum dots buried in silicon matrix by x-ray absorption”](#)  
By: Demchenko I., Ławniczak-Jabłońska K., Zhuravlev K., Piskorska E., E-MRS 2003 Fall Meeting: Symposium B, Warszawa, Poland, 15-09-2003.
- [B-4] [„Characterization of the c-BN/ TiC, Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub>, TiN systems by element selective spectroscopy”](#)  
By: Piskorska E., Ławniczak-Jabłońska K., Benko E., Demchenko I., Klimczyk P., Minikayev R., E-MRS 2003 Fall Meeting: Symposium B, Warszawa, Poland, 15-09-2003.
- [B-5] [“The characterization of the local structure of the quantum dots by X-ray absorption”](#)  
By: Demchenko I., Ławniczak-Jabłońska K., Piskorska E., Zhuravlev K., Welter E., 12th Int. Conf. on X-ray Absorption Fine Structure (XAFS 12), XAFS 12 Conference : book of abstracts, Malmo, Sweden, June 23-28, p. 87, 2003.
- [B-6] [„Anisotropy of bonds at antiferromagnetic transition in MnTe-based low-dimensional structures”](#)  
By: Ławniczak-Jabłońska K., Szuszkiewicz W., Demchenko I., Piskorska E., Janik E., Traverse A., 12th Int. Conf. on X-ray Absorption Fine Structure (XAFS 12), XAFS 12 Conference : book of abstracts, Malmo, Sweden, June 23-28, p. 57, 2003.
- [B-7] [“XAFS as a Tool for Identification of the Ti Bonding Phases Formed in c-BN Composites”](#)  
By: E. Piskorska, K. Lawniczak-Jablonska, I.N. Demchenko, E. Benko, P. Klimczyk, E. Welter, XAFS 12 Conference : book of abstracts, Malmo, Sweden, June 23-28, p. 84, 2003.
- [B-8] [”Mn K edge in NaNbO<sub>3</sub> based ceramics”](#)  
By: A. Wolska, A. Molak, By: K. Lawniczak-Jablonska, J. Kachniarz, E. Piskorska, I. Demchenko, I. Gruszka and D. W. Lindle, 12th X-ray Absorption Fine Structure International Conference (XAFS12), Malmo/Lund, Sweden, June 23-28, p. 78, 2003.
- [B-9] [„Electronic structure of EuS layer buried in PbS studied by means of high energy photoemission spectroscopy”](#)  
By: Orłowski B., Mickevicius S., Story T., Sipatov A.Y., Chernyshova M., Demchenko I., Medicherla R., Drube W., XXXII Int. School on Physics of Semiconducting Compounds, Jaszowiec, Poland, 30-05-2003.
- [B-10] [“Study of the chemistry and structure of \(Na<sub>1-x</sub>Bix\)\(Nb<sub>1-x</sub>Mnx\)O<sub>3</sub> solid solution by XPS, AEM, EPMA”](#)  
By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jabłońska et al., 8th European Workshop on Modern Developments and Application in Microbeam Analysis, Bulletin of EMAS, p. 77, Chicland de la Frontera, Spain, 18-22 May, 2003.
- [B-11] [“Physical and mechanical properties of Ti composites based on the c-BN”](#)  
By: E. Piskorska, K. Lawniczak-Jablonska, E. Benko, I.N. Demchenko, P. Klimczyk, E. Welter, Synchrotron Radiation in Natural Science, Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society, Vol. 3, number 1- 2, p82, Zakopane, Poland, 8-13 June, 2004.
- [B-12] [“Studies of Ge/Si nanostructures: PL, EXAFS and TEM”](#)  
By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, Z. Liliental- Weber, M. Chernyshova, E. Piskorska, M. Walczak, V. Glukhanuyk, D. N. Zakharov, M. Klepka, K.S. Zhuravlev, E. Welter, Synchrotron Radiation in Natural Science, Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society, Vol. 3, number 1- 2, p59, Zakopane, Poland, 8-13 June, 2004.
- [B-13] [„X- ray absorption for characterizing local environment in malaria pigment”](#)  
By: K. Lawniczak-Jablonska, M. Walczak, A. Sienkiewicz, M. Chernyshova, I.N. Demchenko, E. Piskorska, D. S. Bohle, Synchrotron Radiation in Natural Science, Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society, Vol. 3, number 1- 2, p70, Zakopane, Poland, 8-13 June, 2004.
- [B-14] [„Mn K- edge XANES of \(Na<sub>1-x</sub>Bix\)\(MnyNb<sub>1-y</sub>\)O<sub>3-z</sub> compounds after oxygen reduction”](#)



By: A. Wolska, A. Molak, K. Lawniczak-Jablonska, E. Piskorska, I.N. Demchenko, I. Gruszka, D.W. Lindle, Synchrotron Radiation in Natural Science, Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society, Vol. 3, number 1-2, p101, Zakopane, Poland, 8- 13 June, 2004.

[B-15] [“Application of X- ray absorption for composites characterization”](#)

By: E. Piskorska, K. Lawniczak-Jablonska, E. Benko, I.N. Demchenko, P. Klimczyk, E. Welter, Synchrotron Radiation in Materials Science, SRMS- 4, Book of Abstracts, p174, Grenoble, France, 23-25 August, 2004.

[B-16] [“Local environment of iron in malaria pigments and diaminoacid derivatives of protoporphyrin IX”](#)

By: Lawniczak-Jablonska, M. Walczak, A. Sienkiewicz, M. Chernyshova, I.N. Demchenko, E. Piskorska, A. Grabczyk, G. Chatain, D. S. Bohl, synchrotron Radiation in Materials Science, SRMS- 4, Book of Abstracts p163, Grenoble, France, 23-25 August, 2004.

[B-17] [“X- ray absorption, optical and electron microscopy complementary studies of Ge/Si nanostructures”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, Z. Liliental- Weber, M. Chernyshova, E. Piskorska, M. Walczak, V. Glukhanuyk, D. N. Zakharov, M. Klepka, K.S. Zhuravlev, E. Welter, Synchrotron Radiation in Materials Science, SRMS- 4, Book of Abstracts p193, Grenoble, France, 23-25 August, 2004.

[B-18] [“Total electron yield X- ray absorption applied for hard materials studies”](#)

By: E. Piskorska, K. Lawniczak-Jablonska, E. Benko, I.N. Demchenko, P. Klimczyk, A. Wolska, E. Welter, Applications of Linear and Area Detectors for X-ray and Neutron Diffraction and Spectroscopy, E-MRS 2004 Fall Meeting, Book of Abstracts p128, Warsaw, Poland, 6- 10 September, 2004.

[B-19] [“X-ray fluorescence detection of iron in diaminoacid derivatives of protoporphyrin IX”](#)

By: M. Walczak, K. Lawniczak-Jablonska, A. Sienkiewicz, I.N. Demchenko, M. Klepka, E. Piskorska, A. Graczyk, S. Moss, Applications of Linear and Area Detectors for X-ray and Neutron Diffraction and Spectroscopy, E-MRS 2004 Fall Meeting, Book of Abstracts p 131, Warsaw, Poland, 6-10 September, 2004.

[B-20] [“Analysis of stress in buried Ge layers by means of X-Ray fluorescence”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, K.S. Zhuravlev, M. Chernyshova, E. Piskorska, M. Walczak, M. Klepka, Applications of Linear and Area Detectors for X-ray and Neutron Diffraction and Spectroscopy, E-MRS 2004 Fall Meeting, Book of Abstracts, p129, Warsaw, Poland, 6-10 September, 2004

[B-21] [“MBE growth and characteriyation of EuGdTe ferromagnetic semiconductor”](#)

By: P. Dziawa, B. Taliashvili, V. Domuchowski, E. Lusakowska, I. Demchenko, K. Dybko, M. Arciszewska, W. Dobrowolski, V. Osinniy, A. Nadolny, T. Story, The 20th General Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society, Prague, Czech Republic, July 19-23, 2004

[B-22] [“X-Ray diffraction studies of multilayered self-assembled ultra-small Ge quantum dots”](#)

By: Elżbieta Dynowska, I.N. Demchenko, R. Minikayev, J. Pełka, K. Ławniczak-Jabłońska, K.S. Zhuravlev, O. Seeck, Synchrotron Radiation in Natural Science, Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society, p90, Zakopane, Poland, 8-13 June, 2004.

[B-23] [“Superlattices of self-assembled ultra-small Ge quantum dots in the lighth of X-Ray diffraction studies”](#)

By: Elżbieta Dynowska, I.N. Demchenko, R. Minikayev, J. Pełka, K. Ławniczak-Jabłońska, K.S. Zhuravlev, O. Seeck, 7th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging, P-13, September 7–10, Průhonice, Prague, Czech Republic, 2004.

[B-24] [“Structure characterization of Ge layers buried in Si matrix by means of TEM”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, Y. Liliental-Weber, D.N. Zakharov, K.S. Zhuravlev, International Conference on Experimental and Computing Methods in High Resolution Diffraction Applied for Structure Characterization of Modern Materials, HREDAMM, Book of Abstract p34, Zakopane, Poland, 13- 17 June, 2004.

[B-25] [„Anisotropy of bonds at antiferromagnetic transition in MnTe-based layers”](#)

By: K. Lawniczak-Jablonska, I.N. Demchenko, W. Szuszkiewicz, E. Piskorska, E. Dynowska, E. Janik, A. Traverse, KSUPS 2005: Extended abstracts/ Synchrotron Radiation in Natural Science Vol. 4, No 1-2, 26, 2005.

[B-26] [„EXAFS as a tool for investigation of the local environment of Ge atoms in buried low-dimensional structures”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, Z. Liliental-Weber, D.N. Zakharov, K.S. Zhuravlev, KSUPS 2005: Extended abstracts/ Synchrotron Radiation in Natural Science Vol. 4, No 1-2, 20, 2005.

[B-27] [“X-Ray absorption for characterizing iron environment in malaria pigment and its synthetic substitute”](#)

By: M. Walczak, K. Lawniczak-Jablonska, A. Sienkiewicz, M. Chernyshova, I.N. Demchenko, E. Piskorska, D.S. Bohle, KSUPS 2005: Abstracts/ Synchrotron Radiation in Natural Science Vol. 4, No 1-2, 52, 2005.

[B-28] [“XAFS as a tool for identification of the phases formed in c-BN composites”](#)

By: E. Piskorska, K. Lawniczak-Jablonska, E. Benko, I.N. Demchenko, P. Klimczyk, E. Welter, KSUPS 2005: Abstracts/ Synchrotron Radiation in Natural Science Vol. 4, No 1-2, 57, 2005.

[B-29] [„EXAFS as a tool for investigation of the local environment of Ge atoms in buried low-dimensional structures”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, Z. Liliental-Weber, D.N. Zakharov, K.S. Zhuravlev, Workshop on Advanced Methods for Interpretation of TEM, X-Ray and SIMS Measurements in Nano and Atomic Scale, 48, 2005.

[B-30] [„Examination of the local structure in ceramics and low dimension semiconductors by X-ray Absorption Spectroscopy”](#)

By: K. Lawniczak-Jablonska, I.N. Demchenko, E. Piskorska, 3rd International Conference on Physics of Disordered Systems, Book of Abstract p.10, Gdańsk, Poland, 18- 21. 09, 2005.

[B-31] [„The distribution of Si inside the Ge QDs observed by x-ray absorption”](#)

By: K. Lawniczak-Jablonska, I.N. Demchenko, Z. Liliental-Weber, D.N. Zakharov, K.S. Zhuravlev, 10<sup>th</sup> Symposium on Surface Physics, Praga, Czechy, 11-07- 2005, Book of Abstract p 55.

[B-32] [“XAFS and HRTEM analysis applied for determination of optical properties of Ge-Si islands buried in silicon matrix”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, S. Kret, M. Zak, A. Novikov, 8<sup>th</sup> International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Sciences 5, 1-2, 56 (2006).

[B-33] [“Examination of the local structure of Mn doped magnetic semiconductors by X-ray absorption”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, J. Sadowski, M. Klepka, A. Wolska, 8<sup>th</sup> International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Sciences 5, 1-2, 57 (2006).

[B-34] [“X-ray absorption study of Fe ions in metal-chitosan complexes”](#)

By: M. Klepka, K. Lawniczak-Jablonska, I.N. Demchenko, N. Nedelko, A. Slawska-Waniewska, M. Walczak, C.A. Rodrigues, C. Bordini, 8<sup>th</sup> International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Sciences 5, 1-2, 65 (2006).

[B-35] [“XAFS studies of the local structure of Mn doped magnetic semiconductors”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, J. Sadowski, M. Klepka, A. Wolska, European Conference on X-Ray Spectrometry, Paris, France – June 19-23, 190 (2006).

[B-36] [“Determination of composition, size and orientation of Ge-Si islands buried in silicon matrix by XAFS and HRTEM analysis”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, S. Kret, M. Zak, A. Novikov, konserwatorium krystalograficzny, Wroclaw (2006).

[B-37] [„Deposition of nanolayers by means of dense plasma focus”](#)

By: M. Chernyshova, I. Ivanova-Stanik, L. Karpinski, M. Scholz, B. Ulejczyk, I.N. Demchenko, J.K. Lee, 22<sup>nd</sup> symposium on plasma physics and technology, 26-29 June, Prague, Czech Republic (2006).

[B-38] [“Thin layer deposition using plasma focus device”](#)

By: M. Chernyshova, L. Karpinski, M. Scholz, B. Ulejczyk, I.N. Demchenko, M. Klepka, J.K. Lee, 29-31 May, symposium on plasma physics, Gdańsk, Poland (2006).

[B-39] [“Influence of Mn nanoinclusions on magnetic properties of MBE grown GaMnAs”](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, J. Domagala, A. Wolska, M. Klepka, J. Sadowski, Workshop on Properties of Ultrathin Magnetic Films, 7-9 September, Białowieza, Poland (2006).

[B-40] [“XAS investigation of Fe in metal-chitosan complexes”](#)

By: M. Klepka, K. Lawniczak Jablonska, I.N. Demchenko, N. Nedelko, A. Slawska Waniewska, M. Walczak, C.A. Rodrigues, C. Bordini, European Conference on X-Ray Spectrometry (EXRS 2006), 19-23 June, Paris, France (2006).

[B-41] [“X-ray Absorption Study of Fe Ions in Metal-Chitosan Complexes”](#)

By: M. Klepka, K. Lawniczak Jablonska, I.N. Demchenko, N. Nedelko, A. Slawska Waniewska, M. Walczak, C.A. Rodrigues, C. Bordini, 8th International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Sciences (ISSRNS-8), 12-17 June, Zakopane, Poland (2006).

[B-42] [„Metody rejestracji widm absorpcyjnych”](#)

By: I.N. Demchenko, warsztaty p.t.: „Zastosowanie Absorpcji Rentgenowskiej do Określenia Lokalnej Struktury Atomowej i Elektronowej Materiałów” 13-15 of November, Warsaw, (2006).

[B-43] [„Demonstracja programów Athena i Atoms”](#)

By: I.N. Demchenko, warsztaty p.t.: „Zastosowanie Absorpcji Rentgenowskiej do Określenia Lokalnej Struktury Atomowej i Elektronowej Materiałów” 13-15 of November, Warsaw, (2006).

[B-44] [„Program FEFF – modelowanie widm EXAFS”](#)

By: I.N. Demchenko, warsztaty p.t.: „Zastosowanie Absorpcji Rentgenowskiej do Określenia Lokalnej Struktury Atomowej i Elektronowej Materiałów” 13-15 of November, Warsaw, (2006).

[B-45] [„Zastosowanie EXAFS do wyznaczenia składu atomowego w niskowymiarowych strukturach pod przykrywką na przykładzie Ge w Si”](#)

By: I.N. Demchenko, warsztaty p.t.: „Zastosowanie Absorpcji Rentgenowskiej do Określenia Lokalnej Struktury Atomowej i Elektronowej Materiałów” 13-15 of November, Warsaw, (2006).

[B-46] ["Influence of high temperature annealing on the local atomic structure around Mn atoms and magnetic properties of \(Ga,Mn\)As layers"](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, T. Story, V. Osinniy, R. Jakiela, J.Z. Domagala, J. Sadowski, M.T. Klepka, A. Wolska and M. Chernyshova Fall meeting of the European Materials Research Society (E-MRS 2007), Warsaw, Poland (17-21.09.2007) Book of Abstract p 232.

[B-47] ["High temperature annealing modification of the local atomic structure around Mn atoms in \(Ga,Mn\)As layers"](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, T. Story, V. Osinniy, R. Jakiela, J.Z. Domagala, J. Sadowski, M.T. Klepka, A. Wolska and M. Chernyshova 7<sup>th</sup> Polish Meeting of Synchrotron Radiation Users (KSUPS-7), Poznan, Poland (24-26.09.2007) Biuletyn PSRS, Vol 6 No1-2 p41

[B-48] ["X-ray absorption spectroscopy investigation of Fe in metal chitosan complex"](#)

By: Klepka M., Ławniczak-Jabłońska K., Demchenko I., Nedelko N., Rodrigues C.A., Bordini C., , 7 KSUPS, The 7th Polish Meeting of Synchrotron Radiation Users, Poznań, Polska, 24-26/09/2007, Biuletyn PSRS, Vol 6 No1-2 p 20.

[B-49] ["Atomic order of magnetic inclusion in semiconductors"](#)

By: K. Lawniczak-Jablonska, I.N. Demchenko, A. Wolska, J. Sadowski, M. Klepka 4th Int. Workshop on Functional and Nanostructured Materials and the 8th Conference on Intermolecular and Magnetic Interactions in Matter (FNMA'07), Gdansk, Poland (09/01/2007-09/06/2007), Book of abstract p 41.

[B-50] ["XANES studies of Mn K and L3/2 edges in the \(Ga,Mn\)As layers modified by high temperature annealing"](#)

By: A. Wolska, I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, M.T. Klepka, J. Sadowski, E. Holub-Krappe, A. Persson, D. Arvanitis 7<sup>th</sup> Polish Meeting of Synchrotron Radiation Users (KSUPS-7), Poznan, Poland (24-26.09.2007), Bulletin PSRS, Vol 6 No1-2 p79.

[B-51] ["Electronic structure of Mn atoms in \(Ga,Mn\)As layers modified by high temperature annealing"](#)

By: A. Wolska, I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, M. Klepka, J. Sadowski, E. Holub-Krappe, A. Persson, D. Arvanitis Fall meeting of the European Materials Research Society (E-MRS 2007), Warsaw, Poland (17-21.09.2007) Book of Abstract p 238.

[B-52] ["Identification of Mg based phases in ilmenites by x-ray absorption spectroscopy"](#)

By: Klepka M., Ławniczak-Jabłońska K., Demchenko I., Minikayev R., Jabłoński M., E-MRS 2007 Fall Meeting, Symposium I, Warszawa, Polska, 17-21/09/2007, Book of Abstracts p 234.

[B-53] ["XAS study of Mg based phases in ilmenites"](#)

By: Klepka M., Ławniczak-Jabłońska K., Demchenko I., Minikayev R., Jabłoński M., 7 KSUPS, The 7th Polish Meeting of Synchrotron Radiation Users, Poznań, Polska, 24-26/09/2007, Bulletin PSRS, Vol 6 No1-2 p 39

[B-54] ["The local environment around the In atoms in InGaN layers grown by MBE"](#)

By: I.N. Demchenko, W.C. Stolte, E. Piskorska-Hommel, D. Hommel, K. Lawniczak-Jablonska and O. Hemmers Advanced Light Source Users' Meeting, October 13-15, 2008, Berkeley, California.

[B-55] ["XANES studies of newly synthesized nanostructured manganese oxides"](#)

By: I.N. Demchenko, K. Lawniczak-Jablonska, T. Tyliczszak, N.R. Birkner, W.C. Stolte, M. Chernyshova, and O. Hemmers, , Advanced Light Source Users' Meeting, October 13-15 2008, Berkeley, California.

[B-56] ["Natural minerals - the major and minor elements chemical bonding"](#)

By: M.T. Klepka, R. Minikayev, K. Lawniczak-Jablonska, A. Wolska, I.N. Demchenko, M. Jablonski, 9th International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Sciences, 15-20 June 2008, Ameliówka, Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society, 7 (2008) 148.

[B-57] ["XAFS determination of local atomic arrangement of iron in Fe-chitosan complexes"](#)

By: M.T. Klepka, K. Lawniczak-Jablonska, I.N. Demchenko, , 9th International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Sciences, 15-20 June 2008, Ameliówka, Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society, 7 (2008) 94-95.

- [B-58] [“Local atomic structure of iron in Fe-chitosan complexes determined by XAFS”](#)  
By: M.T. Klepka, K. Lawniczak-Jablonska, I.N. Demchenko, , XXI Congress of the International Union of Crystallography, 23-31 August 2008, Osaka, Acta Cryst. (2008) A64, C204.
- [B-59] [“Phase composition of natura ilmenites used In white pigment production”](#)  
By: M. Jablonski, M.T. Klepka, R. Minikayev, K. Lawniczak-Jablonska, A. Wolska, I.N. Demchenko, , XXI Congress of the International Union of Crystallography, 23-31 August 2008, Osaka, Acta Cryst. (2008) A64, C502-503.
- [B-60] [“X-ray Absorption Studies on Cadmium Selenide Thin Films”](#)  
By: Selma Erat, Artur Braun, Hulya Metin, Iraida N. Demchenko, Wayne C. Stolte and Thomas Graule, MRS, Symposium M: Thin-Film Compound Semiconductor Photovoltaics, April 13 - 17, San Francisco, CA, USA - 2009.
- [B-61] [“The Effect of the Annealing Temperature on XANES of Cadmium Sulphide Thin Films”](#)  
By: Selma Erat, Artur Braun, Hulya Metin, Feride Sat, Iraida N. Demchenko, Wayne C. Stolte and Thomas Graule, MRS, Symposium O: Compound Semiconductors for Energy Applications and Environmental Sustainability, April 13 - 17, San Francisco, CA, USA - 2009.
- [B-62] [“Non-Equilibrium GaN<sub>1-x</sub>As<sub>x</sub> Alloys with Band Gap Ranging from 0.8-3.4 eV”](#)  
By: K. M. Yu, S. V. Novikov, R. Broesler, C. R. Staddon, M. Hawkrige, Z. Liliental-Weber, I.N. Demchenko, J.D. Denlinger, V. M. Kao, F. Luckert, R. W. Martin, W. Walukiewicz, and C. T. Foxon, 8th International Conference on Nitride Semiconductors, October 18 - 23, ICC Jeju, Korea - 2009.
- [B-63] [“Full multiple scattering analysis of X-ray absorption near edge structure at the O K- and Cd L<sub>3</sub>- edges in CdO thin layer combined with X-ray emission spectroscopy investigation”](#)  
By: I.N. Demchenko, ALS User's meeting, October 15-17, Berkeley, CA - 2009.
- [B-64] [“Soft X-ray Spectroscopy of GaN<sub>1-x</sub>As<sub>x</sub> in the Full Composition Range”](#)  
By: K. M. Yu, S. V. Novikov, R. Broesler, I.N. Demchenko, J.D. Denlinger, Z. Liliental-Weber, F. Luckert, R. W. Martin, W. Walukiewicz, and C. T. Foxon, ALS User's meeting, October 15-17, Berkeley, CA - 2009.
- [B-65] [“Polarization dependent studies of InGaN layers by means of XANES”](#)  
By: E. Piskorska-Hommel, I.N. Demchenko, T. Yamaguchi, W.C. Stolte, W. Yang, O. Hemmers, XAFS 14 Conference: Camerino (ITALY) July 26-31, 2009.
- [B-66] [“Nondipole photoemission from chiral enantiomers of camphor”](#)  
By: K.P. Bowen, W.C. Stolte, J.A. Young, I.N. Demchenko, R. Guillemin, O. Hemmers, M.N. Piancastelli, D.W. Lindle, The 37th International conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, University of British Columbia, Vancouver, Canada, July 11-16, 2010.
- [B-67] [“Electronic structure of CdO studied by soft X-ray spectroscopy”](#)  
By: I.N. Demchenko, J.D. Denlinger, M. Chernyshova, K.M. Yu, D. Speaks, P. Olalde-Velasco, W.C. Stolte, O. Hemmers, W. Walukiewicz, A. Derkachova, K. Lawniczak-Jablonska, The 37th International conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, University of British Columbia, Vancouver, Canada, July 11-16, 2010.
- [B-68] [“Full multiple scattering analyses of XANES and X-ray emission studies of AgCl near the Cl K-edge”](#)  
By: W.C. Stolte, I.N. Demchenko, O. Hemmers, The 37th International conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, University of British Columbia, Vancouver, Canada, July 11-16, 2010.
- [B-69] [“Polarization study of the electronic structure at the InGaN quantum dots”](#)

By: E. Piskorska-Hommel, I.N. Demchenko, T. Laurus, C. Tessarek, A. Wolska, W.C. Stolte, O. Hemmers, J. Falta, D. Hommel, The 7th International conference on Synchrotron Radiation in Materials Science, Oxford, UK, July 11-14, 2010.

[B-70] [“Modification of the local structure of oxygen in CdO under irradiation”](#)

By: I.N. Demchenko, T. Tyliczszak, M. Chernyshova, K.M. Yu, J.D. Denlinger, D. Speaks, P. Olalde-Velasco, O. Hemmers, W. Walukiewicz, G. Derkachov, K. Lawniczak-Jablonska, The 10th jubilee International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science, Szklarska Poreba, Poland, June 6-11, 2010.

[B-71] [“Cationic and anionic photodissociation of thionyl chloride following deep-core level excitation”](#)

By: A.F. Lago, J.Z. Dávalos, W.C. Stolte, I.N. Demchenko, The 37th International conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics, University of British Columbia, Vancouver, Canada, July 11-16, 2010.

[B-72] [“Electronic structure of polycrystalline cadmium dichloride”](#)

By: I.N. Demchenko, M. Chernyshova, W.C. Stolte, The International Workshop on Resonant Inelastic X-ray Scattering (RIXS), Las Vegas, Nevada, USA, May 25-27, 2011.

[B-73] [“Characterization of galena thin films deposited by PLD on different type of substrates”](#)

By: I.N. Demchenko, M. Chernyshova, W.C. Stolte, K.M. Yu, D.T. Speaks, W. Walukiewicz, The International Workshop on Resonant Inelastic X-ray Scattering (RIXS), Las Vegas, Nevada, USA, May 25-27, 2011.

[B-74] [“XAS/RIXS investigation of indium rich  \$\text{In}\_x\text{Ga}\_{1-x}\text{N}\$  films”](#)

By: I.N. Demchenko, M. Chernyshova, E. Piskorska-Hommel, R. Minikayev, J.Z. Domagala, T. Yamaguchi, W.C. Stolte, and K. Lawniczak-Jablonska, ALS user meeting, Berkeley, California, USA, October 3-5, 2011.

[B-75] [“Experimental observation of quantum confinement in the conduction band of PbS quantum dots”](#)

By: I.N. Demchenko, M. Chernyshova, R. Minikayev, A. Derkachova, G. Derkachov, O. Volnianska, H. Liang, European Conference on X-ray Spectrometry, oral presentation, Vienna, Austria, June 18-22, 2012.

[B-76] [“Electronic structure of irradiated CdO thin films”](#)

By: I.N. Demchenko, R. Minikayev, T. Tyliczszak, M. Chernyshova, K.M. Yu, J.D. Denlinger, D. Speaks, W. Walukiewicz, Synchr. Rad. in Nat. Scien., Cracow, Poland, May 20-25, 2012.

[B-77] [“XAFS analysis of \(Ga,Mn\)N layers”](#)

By: E. Piskorska-Hommel, G. Kunert, A. Wolska, I.N. Demchenko, T. Li, A. Bonnani, M.T. Klepka, J. Falta, D. Hommel, Intern. Worksh. on Nitr. Semicon., Sapporo, Japan, October 14-19, 2012.

[B-78] [“Investigation of PbS nanoparticles by XANES and RIXS”](#)

By: I.N. Demchenko, M. Chernyshova, X. He, R. Minikayev, G. Derkachov, O. Volnianska, A. Derkachova, E. Piskorska-Hommel, The 15th Intern. Conf. on X-ray Abs. Fine Struct., Beijing, China, July 22-28, 2012.

[B-79] [“Investigation of PbS nanoparticles by XANES and RIXS”](#)

By: Demchenko I., Konstantynov P., Chernyshova M., He X., Liang H., Minikayev R., Derkachov G., Derkachova A., Stolte W., XLVIII Zakopane School of Physics (Zakopane, Poland, 2013-05-20), p.50, 2013.

[B-80] [“Badania strukturalne i chemiczne katalizatorów dimetalocyjankowych”](#)

By: Dynowska E., Ławniczak-Jabłońska K., Demchenko I., Lisowski W., Sobczak J.W., Chruściel A., Janik J., 55 Konwersatorium Krystalograficzne (Wrocław, Poland, 2013-06-27), p.139, 2013.

[B-81] ["Badania strukturalnych uwarunkowań właściwości katalizatorów dimetalocyjankowych"](#)

By: Chruściel A., Dynowska E., Ławniczak-Jabłońska K., Reszka A., Demchenko I., Flisak Z., Czaja K., Janik J., Sacher-Majewska B., 55 Konferencja Krystalograficzna (Wrocław, Poland, 2013-06-27), p.32, 2013.

[B-82] ["Complementary studies of the structural properties of highly disordered materials by x-ray absorption and diffraction"](#)

By: Ławniczak-Jabłońska K., Demchenko I., Dynowska E., Chruściel A., Janik J., Synchrotron Radiation in Natural Science (Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society), vol.12, p.33, 2013.

[B-83] ["Photoelectron spectroscopy studies of double metal cyanide catalysts"](#)

By: Ławniczak-Jabłońska K., Lisowski W., Sobczak J.W., Demchenko I., Chruściel A., Janik J., Synchrotron Radiation in Natural Science (Bulletin of the Polish Synchrotron Radiation Society), vol.12, p.43, 2013.

[B-84] ["XAFS investigations of local structural changes in \(Ga,Mn\)As thin layers at low temperature postgrowth annealing"](#)

By: I.N. Demchenko, P. Konstantynov, M. Chernyshova, J. Domagala, Y. Melikhov, and J. Sadowski, 12th International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS), Book of abstracts, p. 81, June 15-20, Warsaw, Poland, 2014.

[B-85] ["Complementary XRD and XAS Studies of Double Metal Cyanides Catalysts"](#)

By: K. Ławniczak-Jabłońska, I.N. Demchenko, E. Dynowska, A. Chruściel, W. Hreczuch, International Union of Crystallography (IUCr) Congress and General Assembly, Montréal, Canada, August 5-12, 2014.

[B-86] ["Wyznaczenie lokalnego uporządkowania atomowego wokół centrum aktywnego w katalizatorach dimetalocyjankowych"](#)

By: K. Ławniczak-Jabłońska, I.N. Demchenko, E. Dynowska, A. Chruściel, oraz J. Janik, 56 Polish Crystallographic Meeting, Book of abstracts, p. 12, Wrocław, 26-28 June, Poland, 2014.

## **V.5. Działalność dydaktyczna i popularyzatorska**

[C-1] W latach 1994-96 prowadziłam zajęcia praktyczne, laboratoryjne, oraz wykłady dla studentów z fizyki podstawowej (mechanika, fizyka molekularna, optyka, elektrostatyka, oraz magnetyzm) na Uniwersytecie Technicznym w Donietcku (Ukraina).

[C-2] W roku szkolnym 1995 pracowałam jako nauczyciel fizyki w liceum ogólnokształcącym #59 w Doniecku.

[C-3] Udział w organizacji Festiwalu Naukowego: prezentacja zasad działania mikroanalizatora, 2004.

[C-4] Współorganizatorka oraz wiodący wykładowca warsztatów naukowych p.t. "Application of X-ray Absorption for Determination of the Local Atomic and Electronic Structure of Materials", 13-15 Listopada, Warszawa, (2006) na którym wygłosiłam następujące wykłady:

(a) ["Metody rejestracji widm absorpcyjnych"](#)

(b) ["Demonstracja programów Athena i Atoms"](#)

(c) ["Program FEFF – modelowanie widm EXAFS"](#)

(d) ["Zastosowanie EXAFS do wyznaczania składu atomowego w niskowymiarowych strukturach pod przykrywką na przykładzie Ge w Si"](#)

[C-5] Wygłoszono seminarium p.t.: "Określanie składu atomowego zagrzebanych kropek kwantowych – badania EXAFS", IF PAN, 08.02.2005.

[C-6] Wykład zaproszony p.t.: „EXAFS as a tool for investigation of the local environment of Ge atoms in buried low-dimensional structures”, Workshop on Advanced Methods for Interpretation of TEM, X-Ray and SIMS Measurements in Nano and Atomic Scale, IF PAN, 3.06.2005.

[C-7] Wykład zaproszony p.t.: „Complementary Studies of the Structural Properties of highly disordered materials by x-ray spectroscopy and diffraction”, The 2014 Workshops, Conference, and Exhibition, Książka abstraktów, str. 38, Perth, Australia, 9 - 13 Lutego 2014.

[C-8] Wykład zaproszony p.t.: “Experimental observation of quantum confinement in the conduction band of PbS quantum dots”, EXRS 2012, Książka abstraktów, str. 51, Vienna, Austria, 18-22 Czerwca 2012.

[C-9] Wygłoszono seminarium p.t.: “Investigation of electronic structure of materials by x-ray spectroscopies - część 1”, IF PAN, Warszawa, 10.01.2012.

[C-10] Wygłoszono seminarium p.t.: “Investigation of electronic structure of materials by x-ray spectroscopies - część 2”, IF PAN, Warszawa, 17.04.2012.

[C-11] Przygotowanie trzech komunikatów do „Synchrotron light news” str. 163-165, Bulletin ISSRNS, 2012.

[C-12] Kierowanie oraz organizacja warsztatów naukowych p.t.: ”Wien2k and spectroscopy: hands-on workshop”, IF PAN, Warszawa, 29/09-02/10/2014.

[C-13] Organizacja seminariów w SL-1: 2013/2014 rok akademicki.

[C-14] Opiekun naukowy doktoranta IF PAN P. Konstantynova (2012-do chwili obecnej).

## V.6. Udział w projektach badawczych

*Koszty wymienionych poniżej projektów synchrotronowych, na realizację których uzyskałam czas pomiarowy, są bardzo wysokie. Na przykład, 1 godzina czasu synchrotronowego kosztuje około 300 euro. Zazwyczaj projekt naukowy trwa minimum trzy dni co daje w sumie 21.600 euro (i to są opłaty wyłącznie za czas pomiarowy). Minimalne opłaty zakwaterowania, wyżywienia i podróży dla dwóch naukowców wynoszą około 2200 euro. W sumie na realizację jednego projektu synchrotronowego potrzebujemy około 23800 euro. Jest to suma niemożliwa do finansowania w ramach działalności statutowej. W celu realizacji każdego projektu synchrotronowego dodatkowo występowałam i uzyskiwałam dofinansowanie z projektów europejskich Calipso(FP7), Elisa (FP6)i IA-SFS (FP5) (w zależności od czasu realizacji projektu). Projekty synchrotronowe realizowane w ESRF finansowane były z tytułu działu Polski w Konsorcjum krajów europejskich tworzących ESRF. Polska jest członkiem ESRF od 2004 roku.*

- jako kierownik projektu

[D-1] Proposals ID: I-02-051 EC, I-02-052 EC - “Ge atoms buried in silicon matrix”, Hasylab, Hamburg, Germany, 2003- principal investigator (PI).

[D-2] Proposal ID: PS-050-03 EC - “Study of strains of Ge atoms bonds in  $Ge_n/Si_m$  superlattice by XAFS exploring polarization of SR”, Lure, Orsay, France, 2003- PI.

[D-3] Proposal ID: I-03-062 EC - “Ge atom surrounding in Ge/Si heterostructures”, Hasylab, Hamburg, Germany, 2004 - PI.

[D-4] Proposal ID: II-05-056 EC - “XAFS studies of the local structure of Mn doped dilute magnetic semiconductors”, Hasylab, Hamburg, Germany, 2004- PI.

[D-5] Proposal ID: HS-2973 - “Study of the stress field and structural defects in LT-MBE grown  $Si(n)/Ge(m)$  superlattices with ultra small quantum dots”, ESRF, Grenoble, France, 2005 - PI.

[D-6] Proposal ID: II-05-056 EC - “XAFS studies of the local structure of Mn doped dilute magnetic semiconductors”, Hasylab, Hamburg, Germany, 2006- PI.



[D-7] Nevada Renewable Energy Consortium (NVREC) - "*Synthesis and characterization of novel (IV,II)VI group materials for solar energy utilization*", UNLV, Nevada, USA - 2010/11 - PI.

[D-8] Proposal ID: 20130112 – „*New EXAFS investigations of local structural changes in (Ga,Mn)As thin layers at low temperature pos....*” MaxLab, Lund, Sweden, 2013 – PI.

[D-9] Proposal ID: 20140298 – „*XAS measurements of the ambient Zn ions in up-converting Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:Er<sup>3+</sup>, Yb<sup>3+</sup> nanoparticles doped by tran...*” MaxLab, Lund, Sweden, 2014 - PI.

[D-10] Proposal ID: 2013100637 - "*XAFS investigations of local structural changes in (Ga,Mn)As thin layers at low temperature postgrowth annealing*", ALBA, Barcelona, Spain, 2014-2015 - PI.

[D-11] Proposal ID: 20150152 – „*Zinc oxide films implanted with Rare Earth for optoelectronic applications*”, ELETTRA, Trieste, Italy, 2015 – PI.

- *jako współwykonawca*

[D-12] Proposal ID: ID.06.2.344 EC - “*XANES study of Mg based phases in ilmenites*”, BESSY, Berlin, Germany, 2006- co-PI.

[D-13] Proposal ID: ID.07.1.873 EC - “*XANES study of Mg based phases in ilmenites*” - continuation, BESSY, Berlin, Germany, 2007- co-PI.

[D-14] “An Approved Program” ALS2012-37 – „*Photon in/out spectroscopy for material Science*” accepted for realization in 2012-2014 at ALS (USA) – co-PI.

[D-15] Projekt: EAgLE (FP7-REGPOT-2012-2013-1), 2013-2016 – co-PI, Kierownik zadań 2.4, 3.2, 3.9, oraz zastępca kierownika pakietu zadaniowego 2.

- *jako główny wykonawca*

[D-16] Grant promotorski Nr 2 P03B 055 24 - "Rentgenowskie badania absorpcyjne niskowymiarowych struktur półprzewodnikowych ", KBN, realizacja w latach 2003-2006.

## **V.7. Działalność recenzencka**

Recenzowałam artykuły z następujących czasopism naukowych:

- The Journal of Physical Chemistry
- Journal of Physics B: Condensed matter
- Chemistry Central Journal
- Radiation Physics and Chemistry
- J. of Elect. Spect. And Rel. Phenom.
- Act. Phys. Pol.
- Phys. Rev. B
- J. of Alloys and Comp.

*Irada Demchenko*