

ТЕРМОДИНАМІЧНА ВИГІДНІСТЬ БІ-ІНТЕРКАЛЯЦІЇ В НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ $A^{III}B^{VI}$

Товстюк Н.К., д.-м.н., проф.; Крушельницька Т.Д., к.ф.-м.н., доц.;
Рибак О.В., к.ф.-м.н., доц.; Романюк М.М., к.ф.-м.н., доц.
Національний університет «Львівська політехніка», Львів

Перехід до нанорозмірних об'єктів – потужний інструмент цілеспрямованої зміни властивостей об'єктів. До таких матеріалів належать шаруваті кристали групи $A^{III}B^{VI}$ (InSe, GaSe) та дихалькогенідів перехідних металів. Шаруваті монокристали, інтеркальовані чужорідними атомами різної природи, дозволяють формувати наноструктуровані матеріали, так звані, бі інтеркалати [1], які активно досліджуються в якості матеріалів для електродів відновлювальних джерел енергії.

Тому актуальними є дослідження умов термодинамічної вигідності бі інтеркаляції, та кінетичних властивостей бі інтеркалатів. Останні, серед яких час релаксації, провідність, розсіювання і поляризаційні властивості в основному визначаються електронною густиною станів в околі енергії Фермі e_F . Отже, спосіб керування електронною густиною станів в околі e_F є дуже важливим, оскільки зміна термодинамічних параметрів дає нам розуміння умови коли бі інтеркаляція як результат є енергетично вигідною, і розуміння від яких мікроскопічних параметрів переважно залежить термодинамічна вигідність.

Термодинамічна вигідність за низьких температур досліджена через зміну вільної енергії ΔF ($\Delta F = F_2 - F_1$) взаємодіючої системи бі інтеркалата, F_2 , по відношенню до системи, яка складається з ізольованих систем кристалу і двох типів інтеркалянта F_1 [2] залежно від енергії Фермі за фіксованих середніх концентрацій інтеркалянта і мікроскопічних параметрів, таких як ступінь анізотропії відповідних енергетичних зон та енергії основного стану кожного з інтеркалянтів.

Результати розрахунків показали, що за умови бі інтеркаляції інтеркалянтом однакової природи, є певний інтервал енергії Фермі при якому бі інтеркаляція призводить до немонотонного зменшення DF з двома мінімумами. За умови бі інтеркаляції різної природи інтеркалянтом DF змінює свій знак в певному інтервалі енергії Фермі. Останнє свідчить про термодинамічну вигідність бі інтеркаляції. Встановлено, що знак зміни вільної енергії суттєво залежить від природи інтеркалянта: найбільша термодинамічна вигідність має місце у випадку бі інтеркаляції протилежними за своєю природою інтеркалянтами (інтеркалянтами з локалізованим і резонансним основним станом).

1. Zhiwei Chen et.al. Nanotechnological properties of Graphite Intercalation Compounds: AFM Studies, Scanning, P. 9438573, 2017. Doi.org/10.1155/2017/9438573.
2. Tovstyuk N.K., Krushelnytska T.D., Romanyuk M.M., Demkiv L.S. Biintercalation and electron energy spectrum in layer nanostructures, Proceed. of the Intern.Conf. NAP-2018 (Zatoka, Ukraine, September 9–14, 2018), Part 2, – P. 02PN30-1- 02PN30-3.