

ТЕРМОДИНАМІКА ІНТЕРКАЛЯЦІЇ У ПРОСТІЙ КРИСТАЛІЧНІЙ ГРАТЦІ

Крушельницька Т.Д., Митошоп Е.

Національний університет «Львівська політехніка», Львів

Дослідження явища інтеркаляції та його опис є однією з важливих і актуальних проблем фізики твердого тіла у зв'язку із необхідністю створення акумуляторів нового покоління та накопичувачів електричного заряду з великою ємністю. Серед задач, які потрібно розв'язувати, є вивчення умов входження домішкових (інтеркальованих) атомів у кристалічні матриці. Зокрема, взаємодія між атомами різних сортів може сприяти або протидіяти процесу інтеркаляції, якщо йде мова про входження частинок двох різних типів (А і В). Слід враховувати, поряд з цим, відмінність між енергіями λ_A і λ_B при перебуванні частинок у локальних порожнинах в кристалі. В роботі розраховано термодинамічні функції (зокрема, термодинамічний потенціал Гіббса), що визначають рівноважні концентрації n_A і n_B при різних співвідношеннях між λ_A і λ_B та при різних температурах. Проаналізовано умови, при яких існує інтеркаляція або ж інтеркалюються атоми лише одного сорту.