

Н.К. Товстюк^{1,2}, Т.Д. Крушельницька¹
¹Національний університет "Львівська політехніка",
²Львівський національний університет імені Івана Франка,
м. Львів, Україна

УМОВИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ В ПІДСИСТЕМІ ЛІТІЄВОГО ІНТЕРКАЛЯНТА В ШАРУВАТИХ КРИСТАЛАХ

Досить актуальними для технічного застосування залишаються останнім часом сильно анізотропні кристали, серед них і шаруваті. Особливості структури шаруватих кристалів дозволяють шляхом інтеркаляції формувати в їх Ван дер Ваальсових щілинах нанопрошарки. При цьому відбуваються зміни в структурі самої матриці кристалу, пов'язані як зі структурними переходами, так і з поступовою перебудовою ґраткової системи. Впроваджені в кристал іони літію можуть займати нееквівалентні положення, розташовуючись у порожнинах з різною геометрією оточення. Імовірність заповнення порожнин різного типу інтеркалянтом визначається статистичним розподілом і залежить від локальних енергій інтеркальованих частинок в порожнинах ($\varepsilon_A, \varepsilon_B$), а також від температури.

В даній роботі вивчено умови фазового переходу в підсистемі літійового інтеркалянта в шаруватих кристалах на прикладі Bi_2Se_3 та Bi_2Te_3 . Енергетичні параметри, які використовуються (хімічний потенціал, енергії $\varepsilon_A, \varepsilon_B$), оцінені за результатами вимірювань зміни положення рівня Фермі, яка визначалась електрохімічним аналогом методу Мотта-Шоткі [1], та розрахунками енергії основного стану літію [2].

На основі підходу, що ґрунтується на моделі ґраткового газу, встановлюється зв'язок між хімічним потенціалом μ і концентрацією інтеркалянта x . Показано, що різниця між заповненнями „гостьових” порожнин A і B є максимальною при низьких температурах ($T \rightarrow 0$) і зменшується при зростанні температури. В рамках даної моделі перерозподіл інтеркалянта між порожнинами різного типу є можливим при зміні локальних енергій ε_A та ε_B частинок у порожнинах як під впливом зовнішніх факторів (наприклад, тиску) так і за рахунок взаємодії між частинками інтеркалянта у кристалічній матриці. Показано, що така взаємодія призводить до того, що перерозподіл між різними позиціями може набути характеру фазового переходу першого роду, відбуваючись стрибкоподібно. Цей ефект має місце при температурах, нижчих за певне критичне значення, або ж при достатньо сильній взаємодії.

1. И. И. Григорчак, Б.А. Лукиянец, З.Д. Ковалюк и др., ФТП **23**,– 2083 (1989).
2. M.V. Kudriashova, N.M. Harrison, S.W. de Leeuw, Phys. Rev. Letters **86**, 1275 (2001).