



5-та Міжнародна науково-технічна конференція

**“СЕНСОРНА ЕЛЕКТРОНІКА
ТА МІКРОСИСТЕМНІ ТЕХНОЛОГІЇ”
(SEMST-5)**

5th International Scientific and Technical Conference

**“SENSORS ELECTRONICS
AND MICROSYSTEMS TECHNOLOGY”
(SEMST-5)**

**ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ
BOOK OF ABSTRACTS**



Україна, Одеса, 4–8 червня 2012 р.

Ukraine, Odessa, June 4–8, 2012

ВПЛИВ 3d-ІНТЕРКАЛЯНТА НА ПОВЕДІНКУ ТЕРМОДИНАМІЧНОГО ПОТЕНЦІАЛА ІНТЕРКАЛАТА $Me_{3d}A^3B^6$

¹Д.С. Демків, ²Т.Д. Крушельницька, ³О.Ю. Микитюк, ¹Н.К. Товстюк

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, факультет електроніки,
вул. Драгоманова, 50, Львів, 79005, Україна

²Національний університет «Львівська політехніка», вул. Бандери, 12, Львів, 79012,
Україна

³Буковинський державний медичний університет, Чернівці, 58000, пл. Театральна, 2

Інтеркалювання шаруватих A^3B^6 кристалів, зокрема InSe, 3d-елементами (наприклад нікелем) дозволяє формувати у їх об'ємі плоскі наноструктур. При цьому пакети шарів шаруватого кристалу - господаря, забезпечуючи матричну ізоляцію гостей магнітоактивних включень сприяють уникненню коагуляції останніх. Введений у ван дер Ваальсову щілину InSe нікель може займати як октаедричні, так і тетраедричні міжвузлові порожнини (МП). Це супроводжується не тільки різними енергетично стабільними типами заповнень в залежності від вмісту інтеркалянта, що проявляється на кінетичних ефектах інтеркаляції у вигляді аномальної поведінки залежності концентрації носіїв і хімічного потенціалу від концентрації інтеркалянта, але й проявляється в особливостях поведінки термодинамічного потенціалу залежно від концентрації інтеркалянта і кулонівської взаємодії між електронами з протилежними спінами в різних МП.

Термодинамічний потенціал такої системи складається з електронної і йонної складової. Остання обмежується взаємодією між інтеркалянтами в найближчих МП і записується у наближенні середнього поля з врахуванням квадратичного по середній концентрації інтеркалянта доданком.

Для визначення електронної складової записано гамільтоніан електронної підсистеми у представленні вторинного квантування з допомогою операторної функції, яка є розкладом в базисі $\{\varphi_i, \lambda_{i1}, \lambda_{i2}\}$ де φ_i - вузлові функції матриці шаруватого кристалу, $\lambda_{i\alpha\sigma}$ ($\alpha = 1, 2$) - хвильові функції електрона, локалізованого в i -ій комірці на інтеркальованому атомі, який займає α -у МП, σ - спін електрона, $p_{i\alpha}$ дорівнює 1, якщо α -а міжвузлова пустота в i -ій комірці зайнята інтеркалянтом, і 0 в іншому випадку. Одноелектронний гамільтоніан записано з усередненим за домішковою підсистемою в наближенні віртуального кристалу, тобто зі значеннями $\langle p_{i\alpha} \rangle = x_{i\alpha} = x_\alpha$. Гамільтоніан даної задачі відрізняється від гамільтоніана без спінової задачі присутністю двох доданків, які після усереднення в наближенні молекулярного поля проявляються в перенормуванні енергетичних параметрів з E_1 і E_2 на $\tilde{E}_1 = E_1 + U_1 \bar{n}_{1\uparrow}, \bar{n}_{1\uparrow} + \bar{n}_{2\downarrow} = 1$ і $\tilde{E}_2 = E_2 + U_2 \bar{m}_{1\uparrow}, \bar{m}_{1\uparrow} + \bar{m}_{2\downarrow} = 1$, де U_1 і U_2 - кулонівські взаємодії між електронами з протилежними спінами в різних за симетрією МП.

Показано, що при певних значеннях U_1 і U_2 і великих концентраціях x термодинамічний потенціал втрачає вигляд асиметричного дзвону і пропадає критичне значення концентрації інтеркалянта при якому вигідне заповнення октаедричних або тетраедричних порожнин.