УДК 538.971

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ИОНОВ ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ НА ГРАНИЦЕ МЕТАЛЛ - НЕПОЛЯРНАЯ ОРГАНИЧЕСКАЯ ЖИДКОСТЬ НА МЕЖФАЗНУЮ ЭНЕРГИЮ

А.М. Апеков¹, И.Г. Шебзухова²

¹НИИ «Институт прикладной математики и автоматизации» филиал ФГБНУ «ФНЦ «Кабардино-Балкарский научный иентр РАН» 360000, Россия, Нальчик, ул. Шортанова, 89а ²ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М Бербекова» 360004, Россия, Нальчик, ул. Чернышевского, 173 aslkbsu@yandex.ru, irina.shebzukhova@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.027

Аннотация: В рамках модифицированного варианта электронно-статистической теории получена поправка к межфазной энергии на границе металл – неполярная органическая жидкость на поляризацию металлических ионов переходного слоя в поле полубесконечного металла. Установлена зависимость поправки от макроскопической диэлектрической проницаемости жидкости и ориентации металлического кристалла. Ключевые слова: поляризационная межфазная поправка, энергия, электронно-статистический метод, щелочные металлы, неполярная органическая жидкость.

Успехи органических В выращивании тонких пленок И молекулярных кристаллов с низким содержанием примесей возродили интерес к органической электронике. Влияние поляризации на свойства металлоорганических структур исследовалось в работах [1-4]. Однако мало изучена межфазная энергия границы металл-диэлектрическая среда [5-11].

В настоящей работе мы хотим получить поправку к межфазной энергии грани металлического кристалла на границе с неполярной органической на поляризацию жидкостью металлических ионов переходного поле полубесконечного учетом слоя В металла С диэлектрической макроскопической проницаемости органической жидкости в рамках электронно-статистического метода [8-12].

В электронно-статистической теории межфазной энергии металлов на границе с неполярными органическими жидкостями [8-11] при оценке энергии металлической связи учитывается влияние электростатической энергии электронного газа, кинетической энергии (включая квантовую энергии поправку), обменно-корреляционной электронного газа, электростатической энергии взаимодействия электронного газа с ионами, обменно-корреляционной энергий перекрытия кинетической И газа электронов с электронным облаком иона, а также энергии колебательного движения ионов (включая поправку на ангармоничность колебаний) и энергии связанной с размытием уровня Ферми. Межфазная энергия гиббсовой определяется относительно поверхности раздела, ход

электронной плотности и потенциала на межфазной границе находятся из решения уравнения Томаса-Ферми (ТФ), физическая поверхность раздела проводится касательно поверхностным ионам металла [8-11].

При расчете поправки на поляризацию металлических ионов переходного слоя в межфазную энергию, деформационную энергию поляризации ионов металла в *j*-м слое запишем, как и в [13], в следующем виде

$$\Delta E_p^{(j)} = -\frac{\alpha}{2} E^2 \left(x_j \right), \tag{1}$$

где α – поляризуемость металла. Напряженность поля в *j* – м слое

$$E(x_{j}) = -\frac{dV(x)}{dx}\Big|_{x=x_{j}}$$
(2)

или, переходя к безразмерным величинам, учитывая зависимость от макроскопической диэлектрической проницаемости *є* жидкости запишем

$$E(x_j) = \frac{V_i}{s^*} \left(\frac{d\chi_i(\beta, \varepsilon)}{d\beta} \right)_{\beta = \beta_j},$$
(3)

где eV_i - энергия Ферми, $s^* = \lambda s$ (s – линейный параметр приводящий уравнение ТФ к безразмерному виду, λ – вариационный параметр, минимизирующий поверхностную энергию металла при учете обменной поправки. Таким образом,

$$\Delta E_p^{(j)} = -\frac{\alpha V_i^2}{2\lambda^2 s^2} \left(\frac{d\chi_i(\beta, \varepsilon)}{d\beta} \right)_{\beta=\beta_i}^2$$
(4)

и следовательно, поправка на поляризацию металлических ионов переходного слоя (внутренний вклад) к межфазной энергии грани (*hkl*) будет равна

$$f_{\omega 12}^{(pi)}(hkl) = -\frac{\alpha V_i^2}{2\lambda^2 s^2} \sum_{j=0}^{\infty} n_j(hkl) \left(\frac{d\chi_i(\beta,\varepsilon)}{d\beta}\right)_{\beta=\beta_j}^2.$$
 (5)

Здесь безразмерный потенциал $\chi_i(\beta, \varepsilon)$ для внутренней области системы металл-органическая жидкость [8-11]

$$\chi_i(\beta,\varepsilon) = 1 - \left(1 - \chi(0,\varepsilon)\right) / \left(1 - \frac{\beta}{b}\right)^n.$$
(6)

Имея в виду, что квадрат производной от безразмерного потенциала быстро убывает достаточно взять j = 0,1. Полагая, что число частиц на единице площади грани (*hkl*) в $j - \check{u}$ плоскости такое же как и в плоскости j = 0 ($n_j(hkl) = n(hkl)$) и ($s^*\beta_j$) = $r + x_r(\varepsilon) + j\delta(hkl)$, где $\delta(hkl)$ – межплоскостное расстояние, r – радиус металлического иона, $x_r(\varepsilon)$ – координата гиббсовой поверхности, а также, находя производную от безразмерного потенциала, окончательно будем иметь

$$f_{\omega12}^{(pi)}(hkl) = -\frac{\alpha V_i^2 n^2}{s^2 b^2} \frac{\left(1 - \chi(0,\varepsilon)\right)^2}{\lambda^2} \begin{bmatrix} \left(1 - \frac{r + x_{\Gamma}(\varepsilon)}{bs\lambda}\right)^{-2(n+1)} + \left(1 - \frac{r + x_{\Gamma}(\varepsilon) + \delta(hkl)}{bs\lambda}\right)^{-2(n+1)}\right] n(hkl). \quad (7)$$

$$f_{\omega12}^{(p0)}(hkl), \text{ M}\mbox{M}\mbox{M}^2 \qquad \qquad f_{\omega12}^{(p0)}(hkl), \text{ M}\mbox{M}\mbox{M}\mbox{M}^2 \ \qquad f_{\omega12}^{(p0)}(hkl), \text{ M}\mbox{M}\mbox{M}$$

Рис. 1. Зависимость поправки к межфазной энергии граней кристалла α – лития на поляризацию металлических ионов переходного слоя от диэлектрической проницаемости органической жидкости.



Рис. 3. Зависимость поправки к межфазной энергии граней кристалла калия на поляризацию металлических ионов переходного слоя от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

Рис. 2. Зависимость поправки к межфазной энергии граней кристалла α – натрия на поляризацию металлических ионов переходного слоя от диэлектрической проницаемости органической жидкости.



1,8 1,9 2,0 2,1 2,2 2,3 2,4 2,5 Є Рис. 4. Зависимость поправки к межфазной энергии граней кристалла рубидия на поляризацию металлических ионов переходного слоя от диэлектрической проницаемости органической жидкости.



Рис. 5. Зависимость поправки к межфазной энергии граней кристалла цезия на поляризацию металлических ионов переходного слоя от диэлектрической проницаемости органической жидкости.

Численная межфазной оценка поправки К энергии граней поляризацию на металлических ИОНОВ металлических кристаллов переходного слоя в поле полубесконечного металла по формуле (7) проведена для щелочных металлов на границе с 11 неполярными органическими жидкостями: пентаном ($\varepsilon = 1,843$), гексаном ($\varepsilon = 1,9$), гептаном ($\varepsilon = 1,927$), октаном ($\varepsilon = 1,946$), деканом ($\varepsilon = 1,956$), нонаном $(\varepsilon = 1,974), n$ -ксилолом $(\varepsilon = 2,265), \delta$ ензолом $(\varepsilon = 2,275), м$ -ксилолом $(\varepsilon = 2,368)$, толуолом ($\varepsilon = 2,378$), о-ксилолом ($\varepsilon = 2,510$) (см. рис. 1-5).

В заключении отметим, что полученные результаты показывают, что вклад связанный с поляризацией металлических ионов в переходном слое для граней щелочных металлов (см. рис. 1-5) практически линейно возрастает с увеличением макроскопической диэлектрической проницаемости жидкости и для плотноупакованных граней кристаллов α – лития, α – натрия, калия, рубидия и цезия соотносятся следующим образом $f_{\alpha 12}^{(pi)}(110) > f_{\alpha 12}^{(pi)}(100) > f_{\alpha 12}^{(pi)}(111)$. С увеличением атомного номера значения поправки по величине убывает.

Библиографический список:

^{1.} Schön, J.H. An organic solid state injection laser / J.H. Schön, C. Kloc, A. Dodabalapur, B. Batlogg // Science. – 2000. – V. 289. – I. 5479. – P. 599-601.

^{2.} Gutmann, F. Organic Semiconductors / F. Gutmann, L.E. Lyons. – New York: John Wiley and Sons, 1967. – 876 p.

^{3.} **Tsiper, E.V.** Charge redistribution and polarization energy of organic molecular crystals / E.V. Tsiper, Z.G. Soos // Physical Review B. – 2001. – V. 64. – I. 19. – P. 195124-1-195124-12.

4. **Di Sante, D.** Tuning the ferroelectric polarization in a multiferroic metal–organic framework / D. Di Sante, A. Stroppa, P. Jain, S. Picozzi // Journal of the American Chemical Society. – 2013. – V. 135 – I. 48. – P. 18126-18130.

5. Алчагиров, Б.Б. Влияние адсорбированных диэлектрических покрытий на межфазную энергию металлических сплавов / Б.Б. Алчагиров, В.А. Созаев, Х.Б. Хоконов // Журнал технической физики. – 1997. – Т. 67. – № 1. – С. 133-135.

6. **Созаев, В.А.** Влияние диэлектрических покрытий на межфазную энергию тонких пленок сплавов системы Al - Li / Созаев В.А., Чернышова Р.А. // Письма в журнал технической физики. – 2005. – Т. 31. – Вып. 10. – С. 1-4.

7. Созаев, В.А. Межфазная энергия и работа выхода на границах раздела «тонкие пленки сплавов щелочных металлов – диэлектрик» / В.А. Созаев, Р.А. Чернышова // Письма в журнал технической физики. – 2003. – Т. 29. – Вып. 2. – С. 62-69.

8. Шебзухова, И.Г. Межфазная энергия граней кристаллов кальция и бария на границе с органическими жидкостями / Шебзухова И.Г., Апеков А.М., Хоконов Х.Б. // Известия РАН. Серия физическая. – 2012. – Т. 76. – № 13. – С. 53-54.

9. Шебзухова, И.Г. Межфазная энергия на границе контакта полиморфных фаз щелочноземельных металлов с собственным расплавом и с органическими жидкостями / И.Г. Шебзухова, А.М. Апеков, Л.П. Арефьева // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова, – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2009. – Вып. 1. – С. 129-133.

10. Шебзухова, И.Г. Влияние органической жидкости на поверхностную энергию скандия и титана / И.Г. Шебзухова, А.М. Апеков, Х.Б. Хоконов // Известия РАН. Серия физическая. – 2014. – Т. 78. – № 8. – С. 1035-1037.

11. Шебзухова, И.Г. Анизотропия межфазной энергии *IA* и *IB* металлов на границе с органическими жидкостями / И.Г. Шебзухова, А.М. Апеков, Х.Б. Хоконов // Известия РАН. Серия физическая. – 2016. – Т. 80. – № 6. – С. 725-728.

12. Задумкин, С.Н. Межфазная поверхностная энергия металлов на границе с диэлектрическими жидкостями / С.Н. Задумкин, А.А. Карашаев // Физико-химическая механика материалов. – 1965. – № 2. – С. 139-141.

13. Задумкин, С.Н. Влияние дисперсионного взаимодействия *s* – сфер и поляризации ионов на поверхностную энергию металлов / С.Н. Задумкин, И.Г. Шебзухова, Р.М. Дигилов // В кн.: Физическая химия поверхностных явлений в расплавах. – Киев: Наукова думка. – 1971. – С. 32-36.