

# ВАКАНСИИ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ КАК ПРЕДПОСЫЛКА СОЗДАНИЯ ТЕХНОЛОГИИ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

*А.А. Мамалуй, Т.Н. Шелест, О.Н. Андреева  
НТУ «ХПИ», Харьков, Украина*

Создание надежных систем хранения и транспортировки водорода является одной из ключевых проблем развития водородной энергетики. Известно, что низкоразмерные системы (НРС), к числу которых относятся халькогениды переходных металлов, могут быть интеркалированы водородом. Рассматриваемое в настоящей работе соединение диселенида ниобия  $NbSe_2$  обладает сильной анизотропией физических свойств, являющееся следствием слоистой структуры. Внедрение в межслойное пространство атомов и молекул (интеркалирование) открывает широкие перспективы для целенаправленного изменения их свойств.

Известно, что водород в  $NbSe_2$  может занимать две неэквивалентные позиции, отличающиеся как положением в решетке, так и энергией внедрения и диффузии. Концентрация внутрислойного водорода значительно выше, чем межслойного, а энергия связи выше для внутрислойного. Введение водорода может существенно влиять на зонную структуру в результате переноса заряда от водорода в зону проводимости матрицы. При заполнении междоузлий атомами водорода возникают новые центры рассеяния, что ведет к возрастанию электросопротивления [1]. Температура ВЗП-перехода слабо падает с увеличением содержания водорода.

Интересной является перспектива интеркалирования водородом квазидвумерных монокристаллов  $NbSe_2$  с вакансиями, так как в этом случае может быть интеркалирована большая концентрация водорода. Основными методами создания сравнительно заметной концентрации точечных дефектов (вакансий) являются облучение и высокотемпературный нагрев. Эти методы существенно отличаются.

Ранее авторами [2] изучено влияние вакансий селена на свойства  $NbSe_2$ . Создание вакансий в монокристаллах  $NbSe_2$  осуществлялось с помощью дегазации атомов селена при изотермической выдержке образцов в области повышенных температур. Установлено, что создание вакансий существенно влияет на электросопротивление. При образовании вакансий селена происходит перераспределение носителей заряда по мере увеличения концентрации вакансий и, как следствие, ослабление связей Nb-Se и усиление связей Nb-Nb. Кроме того, образование значительной концентрации вакансий может приводить к фазовому переходу  $2H-NbSe_2 - 4H-NbSe_2$  [3].

Список литературы:

1. Экспериментальное исследование системы  $NbSe_2$  – водород: Препринт-277 / А.М. Оболенский, Х.Б. Чашка, В.И. Белецкий, А.В. Бастеев. – Харьков: ИПМаш АН УССР. – 1988. – 48 с.
2. Mamalui A.A., Shelest T.N., Fatyanova N.B., Sirenko V.A. The influence of point defects on the temperature dependence of quasi-two-dimensional  $2H-NbSe_2$  resistivity // *Functional Materials*. – 2005. – V.12, №3. – С.521-525.
3. Андреева О.Н., Брауде И.С., Мамалуй А.А. Вакансии селена и их влияние на тонкую структуру квазидвумерного монокристалла  $NbSe_2$  // *Физика металлов и металловедение*, 2012, т. 113, № 9. с. 1 – 6;