

# ТЕОРЕТИЧНА І ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ФІЗИКА

## МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОННОГО СПЕКТРУ ІНТЕРКАЛЬОВАНИХ ШАРУВАТИХ КРИСТАЛІВ

Матулка Дарія Василівна, к.т.н.

Національний університет «Львівська політехніка», Львів

Робота присвячена якісному опису явища інтеркаляції. Для цього ми використали одномірну модель шаруватого кристалу вздовж нормалі до шарів в рамках моделі Кроніґа-Пенні. При інтеркаляції атоми (молекули) заповнюють кожен ван-дер-ваальсову щілину і процес інтеркаляції супроводжується зміною розмірів кристалу. На основі моделі Кроніґа-Пенні, проведено розрахунки і проаналізовано енергетичний спектр при різних значеннях величини бар'єру та його товщини. Товщину шарів задали сталим значенням, яке характерне для ряду шаруватих кристалів, в процесі інтеркаляції вона не міняється.

Результати розрахунків двох заборонених ширин зон – між основною і першою збудженою зоною,  $E_{g1}$ , та двома найнижчими зонами дозволених значень,  $E_{g2}$ , представлені на рис.1.

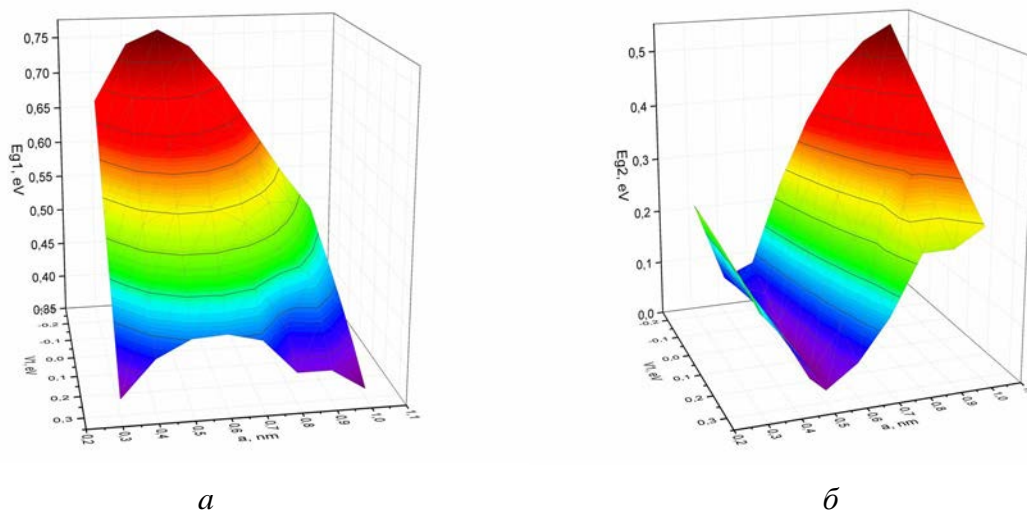


Рис 1. Залежності ширин забороненої зони  $E_{g1}$  (a) та  $E_{g2}$  (b) від ширини ями  $a$  та потенціалу  $V_1$  в ній.

Отримані результати встановили монотонно спадний характер ширин заборонених зон з ростом потенціалу ван-дер-ваальсової щілини при довільних значеннях її ширини. На противагу, залежності таких зон при різних фіксованих від ширини щілини має немонотонний характер.