

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Васильович Стасюк
Олег Володимирович Величко

ОПИС ІНТЕРКАЛЬОВАНИХ ШАРУВАТИХ СТРУКТУР В ПІДХОДІ
ПЕРІОДИЧНОЇ МОДЕЛІ АНДЕРСОНА

Роботу отримано 29 грудня 2014 р.

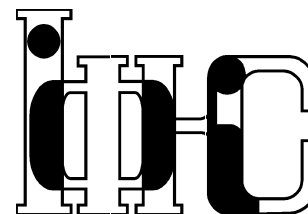
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-14-07U

І.В. Стасюк, О.В. Величко

ОПИС ІНТЕРКАЛЬОВАНИХ ШАРУВАТИХ СТРУКТУР
В ПІДХОДІ ПЕРІОДИЧНОЇ МОДЕЛІ АНДЕРСОНА

ЛЬВІВ

УДК: 536.763, 536.764, 537.9

PACS: 03.75.Nh, 03.75.Lm, 64.70.Tg

Опис інтеркальованих шаруватих структур в підході періодичної моделі Андерсона

I.V. Stasyuk, O.V. Velychko

Анотація. В рамках дослідження електронного спектру шаруваті наногібридної структури зі стадійним впорядкуванням зі збільшенням періоду ґратки у напрямку, перпендикулярному до шарів, за допомогою моделі типу періодичної моделі Андерсона досліджено вплив підсистеми інтеркальованих частинок на електронну зонну структуру кристалів типу GaSe. Проаналізовано зміни електронного спектру та густини електронних станів у таких стадійно впорядкованих шаруватих кристалах, що виникають при інтеркаляції між пакетами.

Description of intercalated layered structures in the approach of the periodic Anderson model

I.V. Stasyuk, O.V. Velychko

Abstract. The model like the periodic Anderson one is used for investigation of influence of the subsystem of intercalated particles on the electronic band structure of the GaSe-type crystals in the framework of the study of electron spectrum of the layered nanohybrid structure with a stage ordering. Changes of the electron spectrum and the density of electronic states caused by the interpackage intercalation are analysed for such stage ordered layered crystals.

1. Вступ

Шаруваті напівпровідники досліджуються уже на протязі багатьох років [1]. Селеніди галію та індію викликають значний інтерес через можливість потенційного застосування в приладах з нелінійною оптикою, сонячних батареях, високочутливих датчиках інфрачервоного випромінювання і тиску, у тензометрії, а також як твердотільні електрогенератори. Застосуванню у якості світлочутливих матеріалів сприяє відносно велика щільність у електронному спектрі, що добре відповідає видимому світловому діапазону. Віднедавна InSe розглядається як матеріал, придатний для катодів твердотільних мікровакуумляторів. Цьому сприяє особлива риса даних кристалів — легкість інтеркаляції атомів літію в простір між шарами без помітного збільшення об'єму. Хоча в цілому халькогеніди металів достатньо добре вивчені, процес інтеркаляції на мікроскопічному рівні все ще мало досліджений. Відомо, що при інтеркаляції відповідні атоми заходять у ван-дер-ваальсівські щілини між шарами. Інтеркальований бар'єр чи літієм селенід індію може застосовуватись як твердотільний електрод, особливо у випадках, коли інтеркаляція можлива у широкому стехіометричному діапазоні [2].

Існує методика стадійного впорядкування матеріалу-господаря (в даному випадку, монохалькогенідів індію та селену) з метою покращення входження іонів інтеркалянта в матрицю чи створення принципової можливості проникнення навіть великих молекулярних груп типу оліго-диметиламіно-метакрилату [3, 4]. Для цього монокристал інтеркалюють нітритом натрію, а потім деінтеркалюють його. В результаті настає стадійне впорядкування перпендикулярно до шарів зі значним збільшенням відстані між пакетами (у випадку, що був реалізований у [3], число шарів у пакеті в основному дорівнювало трьом).

Слід зауважити, що конфігурації пакетного типу, коли інтеркалянт входить лише між пакетами, складеними з певного числа шарів, мають всі ознаки надґраток. Якщо після деінтеркаляції відстань між пакетами, збільшена під впливом атомів-гостей, зберігається, то утворюється надґратка з чистої вихідної сполуки. Збільшений міжшаровий проміжок може відігравати у цьому випадку роль потенціального бар'єру. Як показали перші теоретичні роботи [5] з проходження струму в структурах з надґратками, провідність у них може визначатись тунелюванням крізь такі бар'єри. Для опису структури електронного спектру в напрямку, перпендикулярному до шарів, в роботах Есакі [6] спочатку використовувались одновимірні моде-

лі. Було показано, що має місце розщеплення енергетичної зони, яка існує в ідеальному шаруватому матеріалі, на міні-зони, розділені малими щілинами. Зона Бріллоєна визначається у цьому випадку періодом надґратки. Ця ідея дозволила інтерпретувати низку електронних процесів у надґратках та гетероструктурах (див. огляди [7, 8]) і дослідити явища, що відбуваються при накладанні зовнішнього електричного поля. Це відкрило шлях від опису основ фізики тунельних діодів до побудови теорії каскадних лазерів. Відзначимо при цьому, що перспективними матеріалами для створення останніх є, зокрема, гетероструктури на базі шаруватих кристалів, таких як GaAs [9].

Разом з тим, у шаруватих кристалах тривимірний закон дисперсії $\varepsilon(\mathbf{k})$ енергії електронів є більш складний і має суттєво анізотропний характер (відомим є т. зв. закон Фіваза [10, 11]). Розрахунки спектрів для реальних структур проводять різними методами – від більш простого наближення сильного зв'язку, що ґрунтується на використанні як базисних локалізованих атомних орбіталей (LCAO), до схем, які застосовують методіку функціоналу густини (DFT) та *ab initio* підходи. Як показують обчислення, виконані для напівпровідникових шаруватих систем [12, 13], метод LCAO засвідчує свою придатність і відтворює основні особливості електронного спектру, отримані в рамках схеми LMTO, яка є варіантом DFT у наближенні локальної густини. Незважаючи на свою простоту, підхід LCAO виявився успішним і при розрахунках електронного спектру дво-, три- (і більше) шарового графену [14].

У надґратках чи гетероструктурах енергетичні щілини, пов'язані з рухом перпендикулярно до шарів, можуть накладатися на неперервний спектр, що описує рух електронів у шарах. Такий ефект у випадку пакетного впорядкування не досліджувався, як і не аналізувалися особливості самого електронного спектра. Більш ґрунтовний його аналіз та дослідження змін у спектрі, які виникають під впливом різного типу впорядкувань, заслуговують окремої уваги.

У нашій попередній роботі [15] проведено розрахунок зонного електронного спектру стадійно впорядкованого шаруватого кристалу зі структурою, що отримана після деінтеркаляції (коли розширені проміжки між сусідніми пакетами залишаються незаповненими). При обчисленнях ми використовуємо підхід сильного зв'язку, який ґрунтується на схемі LCAO, вибираючи у ролі базисних невироджені електронні орбіталі, локалізовані на атомах окремих шарів. Крім зонного спектру, ми розраховуємо густини електронних станів і аналізуємо їх особливості при різних співвідношеннях між значеннями основних енергетичних параметрів моделі.

В даній роботі ми дослідимо зміни електронного спектру та густини електронних станів у такій системі, спричинені впливом частинок, інтеркальованих у проміжки між пакетами.

2. Модельний гамільтоніан типу періодичної моделі Андерсона та рівняння руху

Використаємо модель, схожу з періодичною моделлю Андерсона, яка описує електронні збудження в шаруватій матриці, інтеркальованій частинками (у загальному випадку, зі складним електронним спектром):

$$\hat{H} = \sum_k (\varepsilon_k - \mu) a_k^+ a_k + \sum_i \sum_p \lambda_p X_i^{pp} + \sum_i \sum_k (V_k e^{ikR_i} a_k^+ \xi_i + V_k^* e^{-ikR_i} \xi_i^+ a_k),$$

де перший доданок описує зонний спектр вихідної шаруватої структури (ε_k – енергія електронних збуджень з хвильовим вектором \mathbf{k} , μ – хімічний потенціал, a_k і a_k^+ – оператори знищення і народження електрона з відповідним хвильовим вектором), другий – структуру електронних рівнів інтеркальованих частинок (λ_p – енергія відповідного рівня, а X_i^{pp} – проєкційний оператор у цей рівень для i -ї частинки), а третій описує перенесення електрона через інтеркальовані частинки

$$\xi_i = \sum_{qq'} A_{qq'} X_i^{qq'}, \quad \xi_i^+ = \sum_{qq'} A_{qq'}^* X_i^{q'q} = \sum_{qq'} A_{q'q}^* X_i^{qq'}.$$

Оператори знищення та народження електрона на інтеркальованій частинці ξ_i і ξ_i^+ мають такі комутативні співвідношення

$$\begin{aligned} [X_i^{qq'}, \xi_j]_+ &= \sum_{pp'} A_{pp'} [X_i^{qq'}, X_j^{pp'}]_+ \\ &= \delta_{ij} \sum_{pp'} A_{pp'} (X_i^{qp'} \delta_{q'p} + X_i^{p'q} \delta_{p'q}) \\ &= \delta_{ij} \left(\sum_{p'} A_{q'p'} X_i^{qp'} + \sum_p A_{pq} X_i^{p'q} \right), \end{aligned}$$

звідки

$$\begin{aligned} \left[\sum_{qq'} A_{qq'} X_i^{qq'}, \xi_j \right]_+ &= \delta_{ij} \left(\sum_{qq'} \sum_{p'} A_{qq'} A_{q'p'} X_i^{qp'} - \sum_{qq'} \sum_p A_{qq'} A_{pq} X_i^{pq'} \right) \\ &= \delta_{ij} \left(\sum_{qp'} (A^2)_{qp'} X_i^{qp'} - \sum_{pq'} (A^2)_{pq'} X_i^{pq'} \right) = 0, \end{aligned}$$

що очевидно, оскільки $\sum_{qq'} A_{qq'} X_i^{qq'} \equiv \xi_i$. При розщепленні в рівняннях руху в дусі хаотичних фаз отримуємо

$$\begin{aligned} [X_i^{qq'}, \xi_j]_+ &\rightarrow \delta_{ij} \left(\sum_{p'} A_{q'p'} \langle X_i^{qq} \rangle \delta_{qp'} + \sum_p A_{pq} \langle X_i^{pp} \rangle \delta_{pq'} \right) \\ &= \delta_{ij} \left(A_{q'q} \langle X_i^{qq} \rangle + A_{q'q} \langle X_i^{q'q'} \rangle \right) \\ &= \delta_{ij} A_{q'q} \langle X_i^{qq} + X_i^{q'q'} \rangle. \end{aligned}$$

З іншого боку

$$[X_i^{qq'}, X_j^{pp}] = \delta_{ij} (X_i^{qp} \delta_{q'p} - X_i^{pq'} \delta_{pq}) = \delta_{ij} X_i^{qq'} (\delta_{q'p} - \delta_{pq}),$$

тобто

$$\left[X_i^{qq'}, \sum_j \sum_p \lambda_p X_j^{pp} \right] = \delta_{ij} (\lambda_{q'} - \lambda_q) X_i^{qq'}.$$

Таким чином, комутатор проекційного оператора Хаббарда з гамільтоніаном матиме вигляд

$$\begin{aligned} [X_i^{qq'}, \hat{H}] &= (\lambda_{q'} - \lambda_q) X_i^{qq'} + \sum_{jk} V_k^* e^{-ikR_j} [X_i^{qq'}, \xi_j^+]_+ a_k \\ &\quad - \sum_{jk} V_k e^{ikR_j} a_k^+ [X_i^{qq'}, \xi_j]_+ \\ &= (\lambda_{q'} - \lambda_q) X_i^{qq'} + \sum_{jk} V_k^* e^{-ikR_j} \left[X_i^{qq'}, \sum_{pp'} A_{p'p}^* X_j^{pp'} \right]_+ a_k \\ &\quad - \sum_{jk} V_k e^{ikR_j} a_k^+ \left[X_i^{qq'}, \sum_{pp'} A_{pp'} X_j^{pp'} \right]_+. \end{aligned}$$

На основі цих виразів для комутаторів можна отримати відповідні двочасові функції Гріна:

$$\langle \langle X_i^{qq'} | a_{k'}^+ \rangle \rangle = \sum_{k_1} V_{k_1}^* e^{-ik_1 R_i} A_{qq'}^* \frac{\langle X^{qq} + X^{q'q'} \rangle}{\hbar\omega - \lambda_{q'} + \lambda_q} \langle \langle a_k | a_{k'}^+ \rangle \rangle,$$

а також функції Гріна для оператора ξ

$$\begin{aligned} \langle \langle \xi_i | a_{k'}^+ \rangle \rangle &= \sum_{qq'} A_{qq'} \langle \langle X_i^{qq'} | a_{k'}^+ \rangle \rangle = \sum_{k_1} V_{k_1}^* e^{-ik_1 R_i} g_0(\omega) \langle \langle a_k | a_{k'}^+ \rangle \rangle, \\ g_0(\omega) &= \sum_{qq'} A_{qq'} A_{qq'}^* \frac{\langle X^{qq} + X^{q'q'} \rangle}{\hbar\omega - \lambda_{q'} + \lambda_q}, \end{aligned}$$

де локатор $g_0(\omega)$ описує електронні стани на домішкових частинках. Отже, рівняння для функції Гріна, що описує одноелектронні збудження, матиме вигляд:

$$\hbar\omega \langle \langle a_k | a_{k'}^+ \rangle \rangle = \frac{\hbar}{2\pi} \delta_{kk'} + \varepsilon_k \langle \langle a_k | a_{k'}^+ \rangle \rangle + \sum_i V_k e^{ikR_i} \langle \langle \xi_i | a_{k'}^+ \rangle \rangle.$$

Остаточно, отримуємо

$$\begin{aligned} \langle \langle a_k | a_{k'}^+ \rangle \rangle &= \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\delta_{kk'}}{\hbar\omega - \varepsilon_k - |\tilde{V}_k|^2 g_0(\omega)}, \\ |\tilde{V}_k|^2 &= N |V_k|^2 = \sum_i V_k e^{ikR_i} \sum_{k_1} V_{k_1}^* e^{-ik_1 R_i}. \end{aligned}$$

3. Густина станів для інтеркальованої системи

Якщо виділити дійсну й уявну частини, то у загальному випадку функція Гріна для операторів знищення і народження електрона виглядатиме так:

$$\langle \langle a_k | a_{k'}^+ \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \frac{\varepsilon_k}{\hbar} - \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0'(\omega) - i \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0''(\omega) + i\varepsilon}.$$

де

$$g_0(\omega + i\varepsilon) = g_0'(\omega) + ig_0''(\omega)$$

є одновузловою функцією Гріна (локатор) на інтеркальованій частинці. Таким чином, можна виділити два випадки.

1. В інтервалі частот, де $g_0''(\omega) \neq 0$, маємо:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \frac{\varepsilon_k}{\hbar} - \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0'(\omega) - i \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0''(\omega)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{\omega - \frac{\varepsilon_k}{\hbar} - \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0'(\omega) + i \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0''(\omega)}{\left[\omega - \frac{\varepsilon_k}{\hbar} - \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0'(\omega)\right]^2 + \left[\frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0''(\omega)\right]^2}. \end{aligned}$$

Відповідна уявна частина функції Гріна матиме вигляд

$$\text{Im} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} = \frac{1}{2\pi} \frac{i \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0''(\omega)}{\left[\omega - \frac{\varepsilon_k}{\hbar} - \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0'(\omega)\right]^2 + \left[\frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0''(\omega)\right]^2}.$$

2. Для інтервалу частот, де $g_0''(\omega) = 0$, отримаємо:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \frac{\varepsilon_k}{\hbar} - \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0'(\omega) + i\varepsilon}, \\ \text{Im} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} &= -\frac{1}{2} \delta \left[\omega - \frac{\varepsilon_k}{\hbar} - \frac{|\tilde{V}_k|^2}{\hbar} g_0'(\omega) \right]. \end{aligned}$$

Вибір вигляду модельної функції Гріна $g_0(\omega)$ є неоднозначною задачею і залежить від структури та розміру інтеркальованих частинок. Зараз обмежимося найпростішою системою з одним домішковим рівнем

$$g_0(\omega) = \frac{b}{\hbar\omega - \lambda_0},$$

оскільки такий підхід дозволяє виявити основні зміни характеристик системи під дією інтеркаляції з можливістю отримати необхідні формули аналітично, що значно полегшує дослідження впливу різних чинників на властивості системи.

Отримана в такому наближенні функція Гріна матиме вигляд

$$\begin{aligned} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle &= \frac{\hbar}{2\pi} \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_k - |\tilde{V}_k|^2 \frac{b}{\hbar\omega - \lambda_0}} \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{\omega - \lambda_0/\hbar}{(\omega - \varepsilon_k/\hbar)(\omega - \lambda_0/\hbar) - \tilde{b}}, \end{aligned}$$

звідки можна отримати спектр одноелектронних збуджень з двома гілками

$$\omega_{1,2} = \frac{\varepsilon_k + \lambda_0}{2\hbar} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_k - \lambda_0}{2\hbar}\right)^2 + \tilde{b}}, \quad \tilde{b} = \frac{|\tilde{V}_k|^2 b}{\hbar^2}.$$

Функцію Гріна теж зручно представити, явно виділивши вклади кожної гілки збуджень,

$$\begin{aligned} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\omega_1 - \varepsilon_k/\hbar}{\omega_1 - \omega_2} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_1} + \frac{\omega_2 - \varepsilon_k/\hbar}{\omega_2 - \omega_1} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_2} \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{A_1}{\omega - \omega_1} + \frac{A_2}{\omega - \omega_2} \right), \end{aligned}$$

де

$$A_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \frac{\varepsilon_k - \lambda_0}{4\hbar \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_k - \lambda_0}{2\hbar}\right)^2 + \tilde{b}}}.$$

Такий вигляд функції Гріна дає змогу легко розрахувати густину станів електронних збуджень

$$\begin{aligned} \rho(\omega) &= -\frac{2}{N} \sum_k \text{Im} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} \\ &= \frac{1}{N} \sum_k [A_1(k) \delta(\omega - \omega_{1k}) + A_2(k) \delta(\omega - \omega_{2k})]. \end{aligned}$$

Як і в попередній роботі [15], замінимо сумування за хвильовим вектором у зоні Бріллюена на інтегрування

$$\frac{1}{N} \sum_k A_\alpha(k) \delta(\omega - \omega_{\alpha k}) = \int dx \rho_0(x) A_\alpha(x) \delta(\omega - \omega_\alpha(x)), \quad \alpha = 1, 2,$$

де

$$\begin{aligned} A_{1,2}(x) &= \frac{1}{2} \pm \frac{x - \lambda_0}{2\sqrt{(x - \lambda_0)^2 + 4\hbar^2 \tilde{b}}}, \\ \omega_{1,2}(x) &= \frac{x + \lambda_0}{2\hbar} \pm \frac{1}{2\hbar} \sqrt{(x - \lambda_0)^2 + 4\hbar^2 \tilde{b}}. \end{aligned}$$

Вигляд дельта-функції можна спростити стандартним чином

$$\delta(f(x)) = \sum_i |f'(x_i)|^{-1} \delta(x - x_i), \quad f(x_i) = 0.$$

Відповідні величини мають такий вигляд

$$\begin{aligned} f'_{1,2}(x) &= -\frac{1}{2\hbar} \left(1 \pm \frac{x - \lambda_0}{2\sqrt{(x - \lambda_0)^2 + 4\hbar^2 \tilde{b}}} \right), \\ x_0 &= \frac{\omega^2 - \lambda_0 \omega - \hbar^2 \tilde{b}}{\omega - \lambda_0}. \end{aligned}$$

Таким чином, отримуємо вигляд густини електронних станів інтеркальованої системи,

$$\rho(\omega) = \rho_0(x_0) \sum_{\alpha} |f'_{\alpha}(x_0)|^{-1} A_{\alpha}(x_0), \quad x_0 \equiv x_0(\omega).$$

Аналітичний вигляд «незбуреної» густини станів $\rho_0(x)$ беремо з роботи [15] — це густина станів для шаруватої системи з пакетним впорядкуванням (по три шари в пакеті).

Очевидним наслідком інтеркаляції є поява додаткової домішкової гілки (точніше, трьох гілок для системи з трьома шарами в пакеті), як зображено на рис. 1. Залежно від розташування відносно основ-

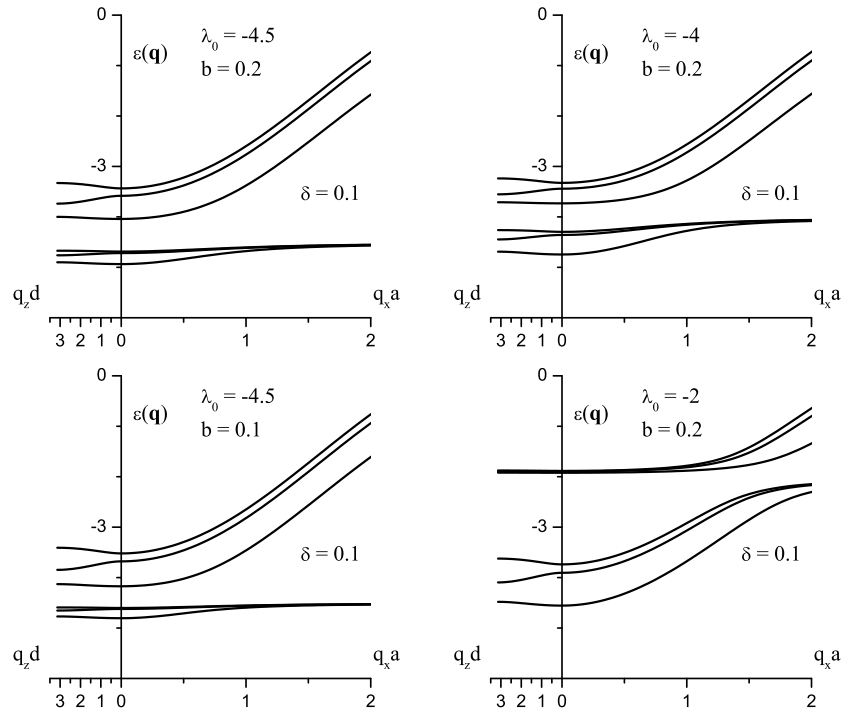


Рис. 1. Перебудова електронного спектру системи під впливом інтеркальованих частинок. Проілюстровано вплив розташування (λ_0) та ширини (b) домішкової підзони на загальний вигляд спектру. Всі модельні параметри з розмірністю енергії нормовані на t_{\perp} ($t = 0.3$, $t' = 0.1$).

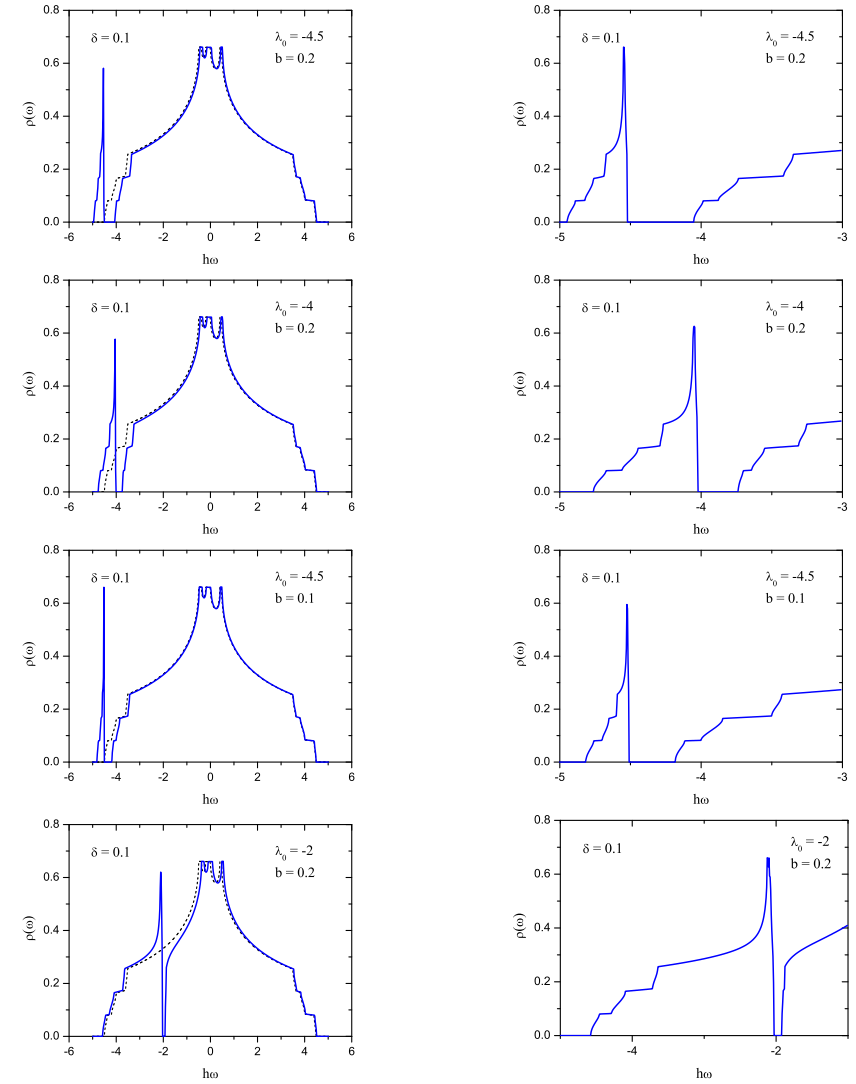


Рис. 2. Перебудова густини станів електронних збуджень під впливом інтеркальованих частинок. Проілюстровано вплив розташування (λ_0) та ширини (b) домішкової підзони на загальний вигляд спектру. Штрихована крива відповідає системі без інтеркальованих частинок. Всі модельні параметри з розмірністю енергії нормовані на t_{\perp} ($t = 0.3$, $t' = 0.1$).

ної зони, домішкова зона може як вироджуватися в домішковий рівень (при значній віддаленості від основної), так і розширюватися й практично гібридизуватися з основною (при зближенні). В даному наближенні щілина між зонами існує завжди.

Ще краще ілюструють перебудову системи під дією інтеркаляції зміни густини станів одноелектронних збуджень (рис. 2). Якщо енергія домішкових збуджень достатньо далека від енергії основних, домішкова зона є вузькою (домішковий рівень біля дна основної зони). На її ширину впливає також параметр b , пов'язаний з характеристиками інтеркальованих частинок. Зближення енергії домішкової зони з основною веде до їх гібридизації, однак щілина між зонами залишається (що може бути недоліком обраного наближення). Слід звернути увагу, що перебудовується лише край основної зони, що звернений до домішкової. Решта зони залишається практично незмінною.

4. Висновки

Не зважаючи на достатньо спрощений підхід, отриманий аналітичний опис інтеркальованої шаруватої системи з пакетним впорядкуванням дозволив дослідити найважливіші зміни її характеристик під дією інтеркаляції. Основна перебудова спектру одноелектронних збуджень та відповідної густини станів зводиться до появи домішкової зони біля дна основної. При достатній віддаленості від основної, домішкова зона вироджується у домішковий рівень, тоді як при зближенні відбувається гібридизація зон з перебудовою відповідного краю основної зони.

Вибрані наближення вельми спрощують внутрішню структуру інтеркальованих домішок, однак це дозволяє отримати аналітичні вирази для спектру збуджень та густини станів, а отримані результати дають добру якісну картину впливу інтеркаляції на електронні властивості вихідної матриці.

Література

1. E. Mooser, M. Schlüter, *Il Nuovo Cimento* **18B**, 164 (1973).
2. I.I. Grygorchak, Z.D. Kovalyuk, I.V. Mintyanskii, *Sov. Phys. Solid State*, **31**(2), 222 (1989).
3. I.I. Grygorchak, D.V. Matulka, F.O. Ivashchyn, O.S. Zaichenko, N.Ye. Mitina, M.M. Moskvina, *PSE* **10**(3), 256 (2012).
4. S.A. Safran, *Solid State Physics: Adv. Res. and Appl.* **40**, 246 (1987).

5. Р.Ф. Казаринов, Р.А. Сурис, *ФТП* **5**, 797 (1971); Р.Ф. Казаринов, Р.А. Сурис, *ФТП* **6**, 148 (1972); Р.Ф. Казаринов, Р.А. Сурис, *ФТП* **7**, 488 (1973).
6. L.L. Chang, L. Esaki, W.E. Howard, R. Ludeke, *J. Vac. Sci. Technol.* **10**, 11 (1973); L.L. Chang, L. Esaki, W.E. Howard, R. Ludeke, G. Schul, *J. Vac. Sci. Technol.* **10**, 655 (1973).
7. L. Esaki, *Journal de Physique Colloques* **45**(C5), C5-3 (1984).
8. Ж.И. Алфёров, *УФН* **172**, 1068 (2002).
9. T. Chung, G. Walter, N. Holonyak Jr., *Appl. Phys. Lett.* **79**, 4500 (2001).
10. R. Fivaz, E. Mooser, *Phys. Rev.* **136**, 833 (1964).
11. R. Fivaz, *J. Phys. Chem. Solids*. **28**, 839 (1967).
12. E. DiMasi, B. Foran, M.C. Aronson, S. Lee, *Phys. Rev. B* **54**, 13587 (1996).
13. K.Y. Shin, N. Ru, C.L. Condon, Y.Q. Wu, M.J. Kramer, M.F. Toney, I.R. Fisher, "Multiple charge density wave transitions in Gd_2Te_5 ", arXiv:0808.2106 [cond-mat.str-el] (2008).
14. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
15. І.В. Стасюк, О.В. Величко, *Журнал фізичних досліджень* **18**, 2002 (2014).

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN: Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences; ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services; INSPEC; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlady, *Ljubljana*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>