

меняется с активационного на металлический. Это хорошо согласуется с выводом о ковалентном характере химической связи меди с решёткой, сделанном на основе анализа кристаллической структуры. Так же полученная зависимость сопротивления для $ZrSe_2$ хорошо согласуется с литературой данными. [1]

Температурная зависимость магнитной восприимчивости всех составов Cu_xZrSe_2 описывается как восприимчивость паулевского типа, что позволяет рассчитать плотность состояний на уровне Ферми. Падение плотности состояний при интеркаляции меди может быть обеспечено только выходом уровня Ферми в области щели между $Se4p$ -валентной зоной и $Zr4d$ -зоной проводимости

При интеркаляции $ZrSe_2$ медью заполнение окта-позиций в области $0 < x < 0,2$ можно связать с термической активацией меди из тетра-позиций, где атом меди участвует в ковалентной связи с селеном, в окта-позиции, где его связь с решёткой имеет ионный характер. Подтверждением этому является практически линейный рост заполнения окта-позиций.

1. S.G. Patel, M.K. Agarwal, N.M. Batra, et al, Bull. Mater. Sci. 21 213–217 (1998).

УПРАВЛЕНИЕ ШИРИНОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ С ПОМОЩЬЮ ИНТЕРКАЛИРОВАНИЯ МЕДИ В $ZrSe_2$

Постников М.С.^{1,2*}, Шкварин А.С.², Меренцов А.И.¹, Титов А.А.²,
Шкварина Е.Г.², Ярмошенко Ю.М.², Титов А.Н.^{1,2}

¹Уральский федеральный университет. г. Екатеринбург, Россия

² Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: mithanya0403@gmail.com

CONTROL OF THE BAND GAP BY INTERCALATING COPPER IN $ZrSe_2$

Postnikov M.S.^{1,2*}, Shkvarin A.S.², Merentsov A.I.¹, Titov A.A.², Shkvarina E.G.²,
Yarmoshenko Yu.M.², Titov A.N.^{1,2}

¹Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²M.N. Miheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences,
Yekaterinburg, Russia

The Cu_xZrSe_2 intercalation single crystals have been synthesized and studied in a concentration range of $x = 0-0.3$, in which the semiconductor-metal transition was observed. The evolution of the electronic structure of Cu_xZrSe_2 as a function of the copper content has been studied experimentally using the XPS and XAS methods.

Кристаллическая структура $ZrSe_2$ образована последовательностью слоёв Se-Zr-Se, с сильной ковалентной связью между атомами. Между собой такие слои разделены щелью и связаны слабой связью типа ван-дер-Ваальсовой. $ZrSe_2$ является полупроводником с шириной щели около 0.8 эВ. Дополнительный интерес

к системе Cu_xZrSe_2 вызван тем, что медь очень подвижна, а это дает возможность производить интеркаляцию при температурах вплоть до комнатной, что невозможно для других систем. Интеркалирование меди выполнено путём твердофазного синтеза с использованием металлической дисперсной меди и предварительно приготовленного порошка ZrSe_2 .

Спектры остовных уровней (XPS) дают информацию о зарядовом состоянии атома, а также об изменении зарядового состояния в зависимости от количества интеркалированной меди[1]. Спектры XPS чувствительны к появлению дополнительных фаз или неэквивалентных кристаллографических положений. Из эксперимента видно, что значения энергии связи всех исследованных уровней ($\text{Se}3d$, $\text{Zr}3d$, $\text{Zr}3p$) а также спектров валентных полос возрастают одинаково по мере увеличения концентрации интеркалированных атомов меди. Энергия связей как функция X во всех случаях меняется одинаково для всех оболочек, это означает, что сдвигается уровень Ферми.

Первопринципные расчеты были выполнены с целью получить теоретическое описание плотности состояний вблизи уровня Ферми и подтвердить этот вывод[2]. Было показано, что ZrSe_2 является прямозонным полупроводником, причем интеркаляция меди, приводящая к уменьшению щели, оставляет прямозонный характер щели.

Интеркаляция атомов меди приводит к переходу полупроводник-металл вследствие уменьшения ширины запрещенной зоны $\text{Zr}4d / \text{Se}4p$. Возможность постепенного изменения ширины прямого зазора и управления переходом металл-полупроводник делает интеркалированный медью ZrSe_2 перспективным материалом для будущих электронных и оптических устройств.

1. M. Zangrando, M. Finazzi, G. Paolucci, et al, Rev. Sci. Instrum. 72 1313 (2001).
2. A.S.Shkvarin, A.I.Merentsov, Yu.M.Yarmoshenko, M.S.Postnikov, E.G.Shkvarina, A.A.Titov, I.Pis, S.Nappini, F.Bondino, A.N.Titov, J. Phys. Chem. C 123 410 (2019)