

Б. А. Лукіянець, Д. В. Матулка

Якісний аналіз відмінностей у фізичних властивостях кількашарових квазі-2D кристалів

Національний університет «Львівська політехніка», Львів, Україна; dariya.v.matulka@lpnu.ua

Квазі-2D кристали (графіт, шаруваті кристали A_3B_6 , перехідні метали тощо) мають низку унікальних властивостей, які можуть значно змінюватися під впливом зовнішніх факторів, інтеркаляції тощо. Це пояснює інтерес до таких кристалів як з точки зору фундаментальних досліджень, так і з точки зору практичного застосування. Технологічні можливості отримання кількешарових фрагментів квазі-2D кристалів стали ще одним способом досягнення властивостей, нехарактерних об'ємним матеріалам. У пропонованій роботі представлено узагальнену модель кількешарових фрагментів, яка якісно висвітлює фактори, що відповідають за відмінності між об'ємними квазі-2D зразками та їх кількешаровими аналогами. Висновки моделі якісно узгоджуються з експериментальними та теоретичними результатами, опублікованими іншими авторами. У роботі також розглядається вплив зовнішніх факторів на фізичні властивості зразків з різною товщиною шарів.

Ключові слова: квазі-2D кристали, енергетична щільність, електронний спектр, інтеркаляція.

Подано до редакції 18.11.2025; прийнято до друку 09.02.2026; опубліковано 27.03.2026.

Вступ

У природі існує понад п'ятсот кристалів, які можна класифікувати як квазі-2D. Хоча вони не є суто двовимірними, вони мають кілька спільних характеристик із справжніми 2D-матеріалами. У 2004 році Гейм і Новосолов отримали кристал, який є справді двовимірним, – графен [1], одношаровий вуглець, відокремлений від графіту. Початкові дослідження виявили його виняткову електро- та теплопровідність і підкреслили потенціал для численних застосувань [2-4]. Примітно, що графен, будучи атомної товщини, має максимальну питому поверхню приблизно $2630 \text{ м}^2/\text{г}$, тоді як аналогічні матеріали мають лише близько $100\text{--}1000 \text{ м}^2/\text{г}$. Отже, цей матеріал вважається перспективним кандидатом для застосування у високоемних пристроях для зберігання енергії та суперконденсаторах.

Відсутність забороненої зони в графені надає йому надзвичайно широку область пропускання з відбиванням менше 0,1%, тоді як він поглинає лише близько 2,3% білого світла, що робить його

високопрозорим матеріалом. Ця властивість у поєднанні з високою рухливістю носіїв заряду, що проявляється у графені, робить матеріал особливо придатним для застосування в сонячних елементах. З іншого боку, відсутність забороненої зони в графені означає, що в ньому дуже низька густина станів. Це створює проблеми для його використання в пристроях, що вимагають контролю потоку електронів.

Ще одна проблема стосується виникнення дефектів під час механічного або хімічного відшарування графена. Було виявлено, що цей процес знижує електропровідність матеріалу тощо. Щоб обійти ці та інші проблеми і глибше зрозуміти природу графена, популярними стають дослідження структур, що складаються з декількох шарів графена, відшарованого від графіту [5].

Було встановлено значні зміни фізичних характеристик залежно від його кількості в структурах. Добре відомо, що структуру зон графена можна описати рівнянням, аналогічним релятивістському рівнянню Дірака. Отриманий спектр, відомий як закон дисперсії Дірака,

відрізняється відсутністю забороненої зони в точках К першої зони Бріллюена [6]. Ці точки відомі як точки Дірака, де стикаються зони провідності та валентності. Дві важливі особливості закону дисперсії Дірака – це його лінійність і те, що ефективна маса носіїв дорівнює нулю. Встановлено, що в двошаровому графені дисперсійне співвідношення стає нелінійним, що призводить до появи забороненої зони та ненульової ефективної маси носіїв. Фізичні властивості кристалів з різною кількістю шарів значно відрізняються. Наприклад, ця поведінка відрізняється від поведінки одношарового та двошарового графена: ефективна маса носіїв збільшується із збільшенням товщини, а тришаровий графен демонструє нижчу рухливість, ніж одношаровий та двошаровий графен.

Очевидно, що надзвичайні властивості багатошарового графіту викликали відродження інтересу до багатошарових квазі-2D кристалів, які мають помітні схожості з графітом. Ми показуємо цю відповідність на прикладі квазі-2D кристалів; ці матеріали були в центрі уваги інтенсивних наукових досліджень і практичного застосування в спінтроніці, наноелектроніці, оптоелектроніці та пристроях для зберігання енергії [7]. Їх можна віднести до трьох великих класів: графіт, шаруваті кристали, що містять халькоген (S, Se, Te), зокрема кристали типу A_3B_6 , та ДПМ (дихалькогеніди перехідних металів), такі як Ti, Zr, Hf, Ta, V, Nb, Cr, W, Mo, Pd, Pt. Представники – MoS_2 (ДПМ), GaSe (A_3B_6) та графіт – показані на рис. 1.

Усіх їх можна розглядати як стопки («сендвічі») моноатомних площин – S-Mo-S, Se-Ga-Ga-Se та вуглецевої площини відповідно. У випадку цих сендвічів міжатомний зв'язок є ковалентним або частково іонно-ковалентним, тоді як сусідні сендвічі утримуються разом значно слабшими силами Ван-дер-Ваальса. Різний характер атомних взаємодій вздовж різних кристалографічних напрямків призводить до сильно анізотропних фізичних властивостей кристалів. Ця властивість є основною причиною їх класифікації як квазідвовимірних

кристалів.

Перша доповідь про синтез ДПМ з'явилася в середині 1980-х років [8], тоді як про монокристалічні зразки MoS_2 , що складаються з декількох шарів, повідомлялося ще раніше [9]. Інтеркаляція літію в MoS_2 дозволяє відшарувувати один або кілька шарів від об'ємного MoS_2 [10]. Цей процес аналогічний виробництву графена шляхом відшарування від графіту. Ранні дослідження кількох шарів квазідвовимірних (квазі-2D) кристалів показали, що відлущений MoS_2 має властивості, які суттєво відрізняються від властивостей його об'ємного аналога [11,12]. У той час як об'ємний MoS_2 поводить як напівпровідник з непрямою забороненою зоною з незначною фотолюмінесценцією, відлущені шари характеризуються прямою забороненою зоною та квантовою ефективністю люмінесценції, що перевищує об'ємну більш ніж на чотири порядки.

В інших дослідженнях було виявлено значні відмінності в ширині забороненої зони залежно від кількості шарів у зразку, як у ДПМ [13], так і в A_3B_6 [14]. Це схоже на те, що було раніше виявлено в багатошаровому графені [1].

З огляду на різний склад компонентів або розташування сендвічів (наприклад, у різних політипах) у різних квазі-2D кристалах, якісні результати їх досліджень будуть різними. Однак обов'язковою особливістю будь-якого квазі-2D кристала є наявність слабо взаємопов'язаних енергетично стабільних сендвічів. З огляду на цю особливість, можна створити узагальнену модель, здатну описувати довільний квазі-2D кристал на якісному рівні. Вона не може претендувати на опис кількісних характеристик конкретних квазі-2D кристалів, але здатна описувати, зокрема, характерні зміни в спектрі станів під час переходу від довільного об'ємного квазі-2D кристала до його фрагментів.

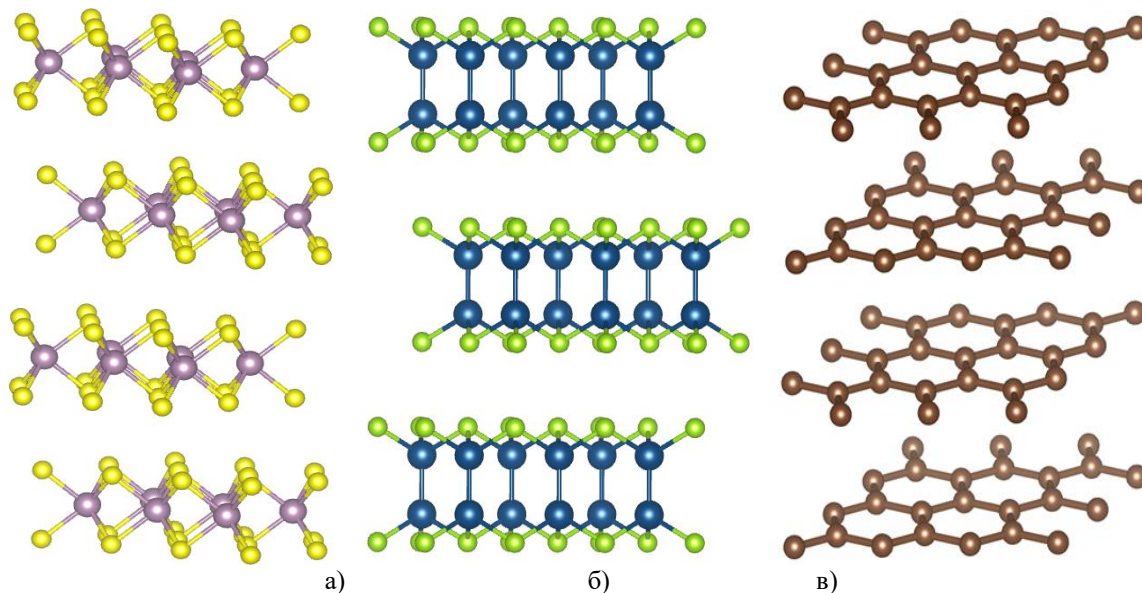


Рис. 1. Кристалічні структури (вид збоку) ДПМ типу MoS_2 (жовтий – S, фіолетовий – Mo) (а), β -GaSe (зелений – Se, синій – Ga) (б), графіт (коричневі кола – C) (в).

I. Модель і розрахунки

Будь-який квазі-2D кристал насправді є тривимірним. Якщо він має ортогональну симетрію, то його $U(x, y, z)$ потенціал можна представити так: $U(x, y, z) = U(x) + U(y, z)$. Тоді стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{xyz}^2 + U(x, y, z)\right)\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (1)$$

розділяється на два незалежних диференціальних рівняння:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{yz}^2 + U(y, z)\right)\phi(y, z) = E_1\phi(y, z) \quad (2)$$

і

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 + U(x)\right)\psi(x) = E_2\psi(x) \quad (3)$$

В (2) $\phi(y, z)$ є хвильовою функцією Блоха, яка описує енергетичний стан $E_1 = E(k_y, k_z) = \frac{\hbar^2(k_y^2 + k_z^2)}{2m^*}$ у випадку ізотропного кристала в площині ZOY (m^* – ефективна маса електрона).

Рівність (3) використовується для дослідження електронних станів в моно- та бішарових структурах, потенціали яких показані на рисунках 2(а) та 2(б) відповідно. Модель представлена у вигляді послідовності ям та бар'єрів (сендвічів), кожна з яких відповідає певній області потенціалу. У цій структурі U_0 позначає потенціал сендвіча, а a і b представляють ширину ями і сендвіча відповідно. Для моношару положення визначаються як $x_1 = \frac{a}{2}$ і $x_2 = \frac{a}{2} + b$. У випадку бішарової структури положення визначаються за формулою $x_1 = \frac{b}{2}$, $x_2 = \frac{b}{2} + a$, і $x_3 = a + \frac{3}{2}b$. Це спрощене представлення дозволяє чітко проаналізувати електронні стани як в моношарових, так і в бішарових структурах. Потенціал вважається таким, що $U(x) \rightarrow \infty$ для $|x| \geq x_2$ в моношаровій конфігурації та для $|x| \geq x_3$ у бішаровій структурі.

Запропоновані моделі є фрагментами потенціалу Кроніга-Пенні, який використовується для опису електронної структури квантових ям і надструктур на

основі наближення функції огинаючої [15]. Спрощена модель Кроніга-Пенні має широкий спектр застосування. Наприклад, вона успішно використовується для дослідження структур з багатошаровими квантовими ямами у освітлювальній промисловості та в сонячних елементах (див., наприклад, [16]). Такі теоретичні моделі забезпечують якісне розуміння електронної поведінки і узгоджуються з експериментальними даними.

Вибір моделі вздовж нормалі до шарів (осі c) визначається її відношенням до розмірного квантування, яке відіграє важливу роль у фізиці квазі-2D кристалів.

У рівнянні (3) хвильові функції в i -му діапазоні з постійними потенціалами [17].

$$\psi_i(x) = a_i \exp(k_i x) + b_i \exp(-k_i x) \quad (4)$$

Тут k_i розв'язки характеристичного рівняння (3).

Вони задаються як $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$ області сендвіча і $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$ в ямі. Індекс $i = 1$ відповідає області $x \in [0, x_1]$, тоді як $i = 2$ відповідає областям $x \in [x_1, x_2]$ і $x \in [x_2, x_3]$; див. рис. 2(а) і (б).

Розв'язки рівняння (1) як в моношаровому, так і в бішаровому шарі є симетричними, $\psi_i(x) = \psi_i(-x)$, і асиметричними, $\psi_i(x) = -\psi_i(-x)$. Зшивання хвильових функцій та їх перших похідних у точках, де потенціал створює систему лінійних рівнянь. Нетривіальний розв'язок можливий, якщо визначник, елементи якого є коефіцієнтами в a_i і b_i дорівнює нулю. Енергетичні стани, як буде показано нижче, є дискретними станами E_i . Таким чином, спектр квазі-2D кристала $E = E_i + \frac{\hbar^2(k_y^2 + k_z^2)}{2m^*}$ є набором підзон, тобто дискретних станів E_i , завантажених 2D зонами площини шару.

У випадку квазі-2D напівпровідників потенціал для дірок слід додати до потенціалу для електронів зони провідності. Як правило, такі потенціали є різними. Нижче ми вибрали такий потенціал, який є дзеркально симетричним до потенціалу електрона зони провідності. Тоді в напівпровіднику є дві зони, кожна з яких є набором ідентичних підзон, розділених забороненою зоною E_g .

В рамках якісного аналізу вибір дзеркально-

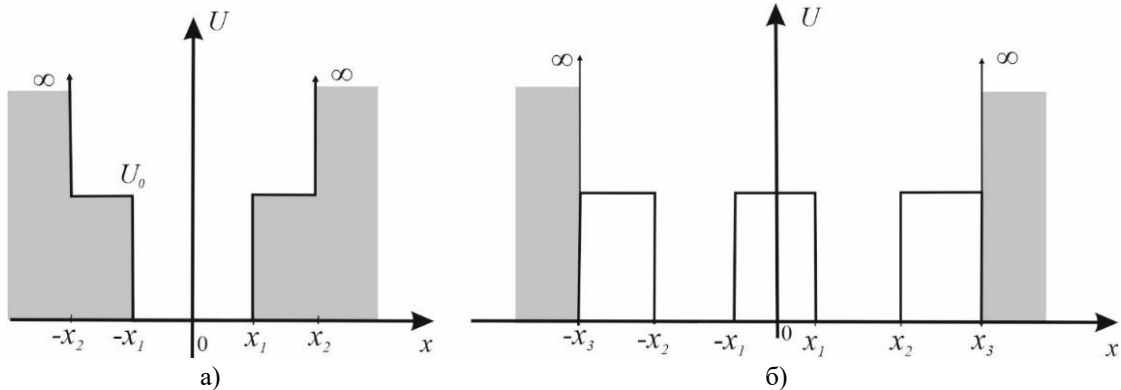


Рис. 2. Потенціал вздовж осі c одношарової (а) та двошарової (б) структур.

симетричного потенціалу не впливає на остаточні висновки роботи.

II. Результати і обговорення

Розглянемо рівняння (3). Його розв'язки будуть визначатися початковими точками для підзон. З параметрами $a = 0.8$ нм, $b = 0.8$ нм і $U_0 = 5$ еВ, ми отримуємо симетричні та антисиметричні розв'язки для моношарової (рис. 3а) та бішарової (рис. 3б) структур.

Вертикальні лінії, направлені вгору, відповідають симетричним станам, а ті, що направлені вниз, відповідають антисиметричним станам.

На рисунку 3 показано, що:

1. Густина станів у бішаровій структурі вища, ніж у моношаровій.

2. Основний стан бішарової структури ближчий до дна зони (0,06 еВ), ніж основний стан моношарової структури (0,40 еВ).

3. Отримані результати для квазі-2D напівпровідника з дзеркально-симетричними потенціалами дозволяють встановити таку важливу характеристику, як оптична ширина забороненої зони. Відомо, що така ширина є енергетичною забороненою зоною, яка визначає мінімальну енергію фотона, здатного перенести електрон з верхньої межі валентної зони в найнижчий стан зони провідності при $\frac{\hbar^2(k_y^2 + k_z^2)}{2m^*} = 0$. Якщо початок зони провідності вибрано в початку координат, то положення дискретних станів дірок, ідентичні положенням електронів, зміщених на $-E_g$.

Тоді в моношарі з урахуванням правил відбору перехід може відбуватися між найвищим симетричним рівнем валентної зони $-(E_g + 0.40)$ еВ і найнижчий асиметричний рівень у зоні провідності 1.54 еВ, тобто оптична заборонена зона $E_g + 1.94$ еВ. У двошаровій структурі відбувається подібний перехід між симетричним станом валентної зони $-(E_g + 0.06)$ еВ і найнижчий асиметричний стан.

У бішаровій структурі подібний перехід між симетричним станом валентної зони $-(E_g + 0.06)$ еВ а найнижчий асиметричний стан зони провідності 0,26 еВ визначає оптичну ширину забороненої зони $(E_g + 0.32)$ еВ.

Таким чином, в обох випадках оптична ширина забороненої зони більша, ніж у об'ємному кристалі; однак у моношарі це значення набагато більше, ніж у бішарі.

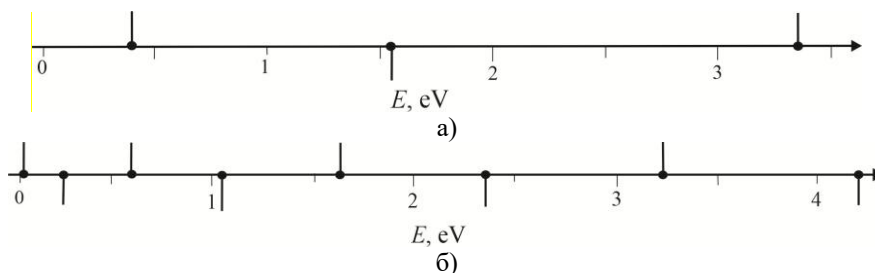


Рис. 3. Енергетичні підбар'єрні стани симетричного/асиметричного розв'язків у випадку моношару (а) і бішару (б).

Зміни в електронному спектрі при переході до декількох шарів викликані ефектами квантового обмеження, обумовленими зменшенням розмірності. Ці зміни якісно узгоджуються з рядом теоретичних і експериментальних досліджень конкретних квазі-2D кристалів з декількома шарами. Зокрема, помітні наслідки таких змін були спостережені в оптичному поглинанні GaSe за допомогою високочутливого диференціального вимірювання пропускання [18] або в оптичному поглинанні краю смуги GaSe під напругою [19]; в спостереженні за допомогою розрахунків спектру за першими принципами MoS₂, прототипного шаруватого дихалькогеніду перехідного металу та пов'язаного з ним TmS₂ (Tm = W, Nb, Re) [20]; у розрахунках функціоналу густини залежно від шару та ефект деформації в InSe [21]; в експериментальному дослідженні інтенсивності випромінюваного світла для зразків GaSe або спектру Рамана декількох шарів InSe, GaSe [22] тощо.

Кілька досліджень показали, що електронні властивості кількшарових квазі-2D кристалів зазнають значної реструктуризації під час механічної деформації [19,21].

Проаналізуємо залежність положень трьох найнижчих станів від потенціалу сендвіча та геометричних параметрів у двох таких випадках:

(а) залежність від ширина бар'єру b при фіксованих $U_0 = 5$ еВ та ширини ями $a = 0,8$ нм.

(б) залежність від ширина ями a при фіксованих $U_0 = 5$ еВ та ширині бар'єра $b = 0.8$ нм.

На рисунках 4 і 5 показано, що положення рівнів монотонно залежать від збільшення ширини сендвічів і ям, з різним ступенем зменшення. У лінійному наближенні кутові коефіцієнти, коли $b = 0.8$ нм і $U_0 = 5$ еВ з змінним a представлені в таблиці 1.

І у випадку $a = 0.8$ нм і $U_0 = 5$ еВ з змінною шириною сендвіча кутові коефіцієнти наведені в таблиці 2.

Зі порівняння таких таблиць можна відзначити наступні тенденції:

1. Стани як моношару, так і бішару змінюються із збільшенням ширини ями, але зміна значно більша в моношарі, аніж у бішарі.

2. Зі збільшенням ширини сендвіча b (для його реальних значень) стани в моношарі залишаються практично постійними, тоді як у бішарі ненульова реакція спостерігається тільки для збуджених станів, а основний стан залишається постійним.

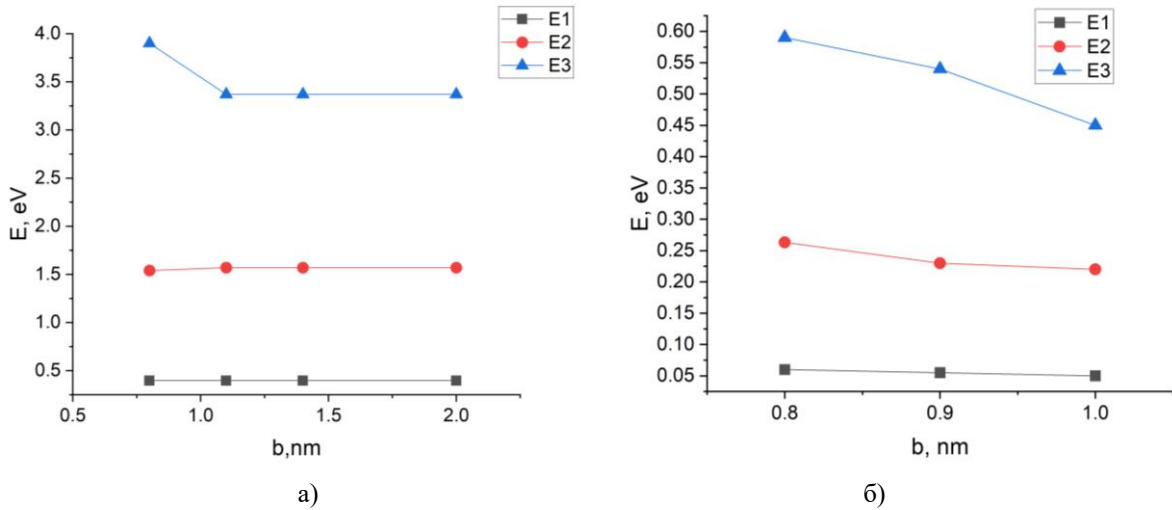


Рис. 4. Залежність положення трьох найнижчих станів від ширини бар'єру b для одношарової (ліворуч) і двошарової (праворуч) структур (б) залежність від ширини ями a при фіксованих $U_0 = 5$ еВ та ширині бар'єра $b=0.8$ нм.

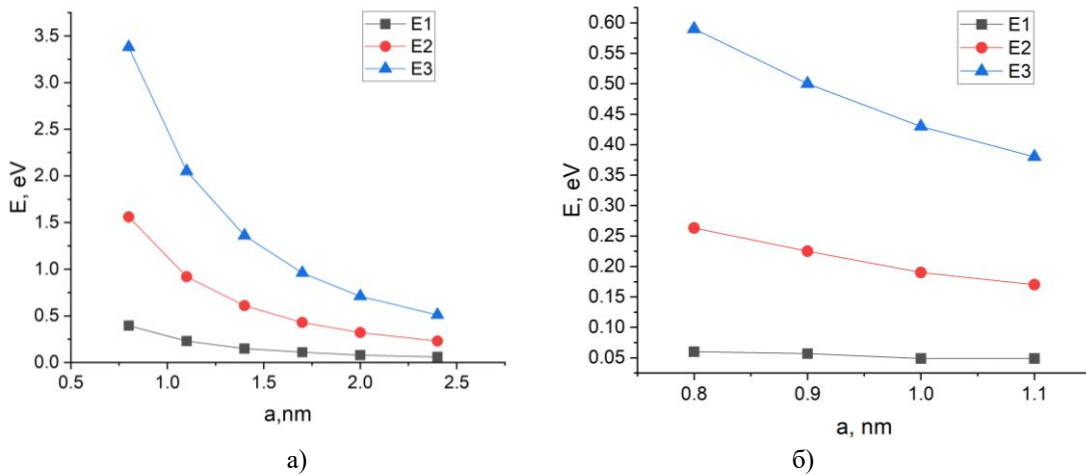


Рис. 5. Залежність положення трьох найнижчих станів від ширини ями для одношарової (а) та двошарової (б) структур.

Таблиця 1.

Лінійне наближення кутових коефіцієнтів, коли $b=0.8$ нм і $U_0=5$ еВ.

Моно- dE/da , еВ/нм	- 0.21	- 0.8	- 1.7
Бі- dE/da , еВ/нм	-0.03	- 0.3	-0.7

Таблиця 2.

Лінійне наближення кутових коефіцієнтів, коли $a=0.8$ нм і $U_0=5$ еВ.

Моно- dE/db , еВ/нм	0	0	0
Бі- dE/db , еВ/нм	0	-0.18	-0.40

Таким чином, зміна ширини ями є найефективнішим способом зміни властивостей моно- та бішарової структури. У контексті основного стану ефект зміни також очевидний у бішаровій структурі, хоча і в значно меншій мірі, ніж у моношаровій. Це відкриття вказує на те, що значення оптичної забороненої зони в області краю оптичних переходів в моношаровій структурі можна легше контролювати.

Існують значні відмінності в поведінці моно- та

бішарових структур за однакових параметрів. Більше того, ці відмінності можна зробити ще більш вираженими, застосовуючи низку факторів. Серед них:

- механічні навантаження [23, 24];
- гідростатичне або осьове стиснення вздовж осі c [23];
- інтеркаляція [25];
- лазерне та ультразвукове випромінювання [26].

Два наступні фактори будуть розглянуті більш детально: гідростатичне або осьове стиснення та інтеркаляція.

Перший фактор – стиск. Поведінку квазі-2D кристалів під тиском можна проілюструвати результатами роботи [23]. На основі вимірювань рентгенівської дифракції під високим тиском (0,30 ГПа) в ДПМ 3R-MoN₂ (аналог MoS₂) було виявлено значну різницю між осьовою стисливістю вздовж осі a та вздовж осі c . Стала ґратки $a_0=2.854\text{Å}$ при тиску $p = 20.4$ ГПа зменшується до $a = 2.776\text{Å}$, тобто $\frac{a_0}{a} = 1.03$, тоді як постійна решітки вздовж осі c зменшилася з $c_0 = 15.938\text{Å}$ до $c = 14.380\text{Å}$, тобто

$\frac{c_0}{c} = 1.12$. Це показує, що квазідвовимірні кристали набагато більш стисливі вздовж осі c , ніж у площині шару. В результаті зазначеної зміни тиску об'єм комірки змінився з $V_0 = 112.42 \text{ \AA}^3$ до $V = 95.968 \text{ \AA}^3$. (Зверніть увагу, що константа осі c включає щілину Ван-дер-Ваальса, яка відсутня в константі осі a .)

З огляду на низьку стисливість сендвіча, ми можемо зробити висновок, що звуження ван-дер-ваальсової щілини є визначальною причиною зміни об'єму. Наведемо ще один аргумент на підтримку цього твердження. У графіті модуль пружності у площині шарів становить $C_{11} = 106$ ГПа, тоді як модуль пружності вздовж осі c дорівнює $C_{33} = 38.5$ ГПа [27]. При такому співвідношенні модулів пружності під час стиску об'єм буде визначатися майже виключно зміною ширини ван-дер-ваальсової щілини.

З огляду на надзвичайний вплив ширини ван-дер-ваальсової щілини на властивості квазі-2D кристалів, слід згадати ще один фактор, що впливає на цю ширину – інтеркаляція. Це процес введення або видалення чужорідних атомів або молекул у ван-дер-ваальсу щілину, що призводить до зміни її ширини. Ці висновки були зроблені на початку досліджень інтеркаляції, про які повідомляється в [28]. У цій роботі представлені результати пошуку матеріалів з високими температурами переходу T_c до надпровідного стану. З цією метою 50 ДПМ були інтеркальовані всіма можливими неорганічними та органічними молекулами. Було виявлено, що інтеркаляція збільшує ширину кристалів вздовж осі c . Іноді, залежно від інтеркаляту, такі зміни можуть бути значними. Наприклад, при інтеркаляції TaS_2 стеарамідом ван-дер-ваальсова щілина збільшилася з 6 \AA до 57 \AA .

Вищезазначені оцінки стосуються квазі-2D кристалів. Для кристалів з декількома шарами вони можуть дещо відрізнятися, але не настільки, щоб змінити якісні результати.

Висновки

На основі запропонованої уніфікованої моделі квазі-2D кристала отримані результати якісно узгоджуються з результатами експериментальних і теоретичних досліджень інших авторів.

Розрахунки, виконані для моношарових і бішарових структур, показують, що густина станів у бішаровій структурі вища, ніж в моношаровій, а оптична ширина забороненої зони в моношаровій структурі значно перевищує її в двошаровій. Результати досліджень також показали, що зміна ширини ями є найефективнішим способом зміни властивостей будь-яких моно- і бішарових структур.

Спільність будь-яких квазідвовимірних кристалів у запропонованій моделі дозволяє бути впевненими, що висновки та прогнози моделі залишаться дійсними для якісного розуміння фізичних явищ у будь-яких квазідвовимірних кристалах, а її результати можуть бути використані для проектування та розробки шаруватих структур з індивідуальними властивостями для конкретних технологічних застосувань.

Лукіянець Б.А. – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри прикладної фізики та наноматеріалознавства;

Матулка Д.В. – кандидат технічних наук, доцент кафедри прикладної фізики та наноматеріалознавства.

- [1] A. K. Geim, K. S. Novoselov, *The rise of graphene*, Nature Materials, 6, 183 (2007); <https://doi.org/10.1038/nmat1849>.
- [2] P. Esquinazi, *Basic Physics of Functionalized Graphite*, Springer Series in Materials Science 244 (2016); <https://doi.org/10.1007/978-3-319-39355-1>.
- [3] S. K. Tiwari, S. Sahoo, N. Wang, A. Huczko, *Graphene research and their outputs: Status and prospect*, Journal of Science: Advanced Materials and Devices, 5, 10 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2020.01.006>.
- [4] C. N. R. Rao, K. Gopalakrishnan, A. Govindaraj, *Synthesis, properties and applications of graphene doped with boron, nitrogen and other elements*, Nano Today, 324 (2014); <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2014.04.010>.
- [5] V. Kumar, A. Kumar, D.-J. Lee, S.-S. Park, *Estimation of Number of Graphene Layers Using Different Methods*, Materials, 14, 4590 (2021); <https://doi.org/10.3390/ma14164590>.
- [6] G. W. Semenoff, *Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly*, Phys. Rev. Lett., 53, 2449 (1984); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.53.2449>.
- [7] X. Duan, H. Zhang, *Introduction: Two-Dimensional Layered Transition Metal Dichalcogenides*, Chemical Reviews, 124, 10619 (2024); <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00586>.
- [8] P. Joensen, R. Frindt, S. R. Morrison, *Single-layer MoS_2* , Mater. Res. Bull., 21, 457 (1986); [https://doi.org/10.1016/0025-5408\(86\)90011-5](https://doi.org/10.1016/0025-5408(86)90011-5).
- [9] R. Frindt, *Single crystals of MoS_2 several molecular layers thick*, J. Appl. Phys., 37, 1928– (1966); <https://doi.org/10.1063/1.1708627>.
- [10] W. Zhou et al., *Intrinsic Structural Defects in Monolayer Molybdenum Disulfide*, Nano Letters, 13, 2615 (2013); <https://doi.org/10.1021/nl4007479>.
- [11] A. Splendiani, L. Sun, Y. Zhang, T. Li, J. Kim, C.-Y. Chim, G. Gall, F. Wang, *Emerging Photoluminescence in Monolayer MoS_2* , Nano Letters, 15, 1271 (2010); <https://doi.org/10.1021/nl903868w>.
- [12] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, T. F. Heinz, *Atomically Thin MoS_2 : A new direct-gap semiconductor*, Phys. Rev. Lett., 105, 136805 (2010); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.136805>.

- [13] L. Zheng, X. Wang, H. Jiang, M. Xu, W. Huang, Z. Liu, *Recent progress of flexible electronics by 2D transition metal dichalcogenides*, Nano Research, 15, 2413 (2022); <https://doi.org/10.1007/s12274-021-3779-z>.
- [14] C. Song, S. Huang, C. Wang, J. Luo, H. Yan, *The optical properties of few-layer InSe*, J. Appl. Phys., 128, 060901 (2020); <https://doi.org/10.1063/5.0018480>.
- [15] J. Bastard, A. Brum, R. Ferreira, *Electronic states in semiconductor heterostructures*, Solid State Physics, 44, 230 (1991); [https://doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60092-2](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60092-2).
- [16] Y. Zhang, Y. Wang, *Energy band analysis of MQW structures in the Kronig–Penney model*, J. Modern Physics, N4, 568 (2013); <https://doi.org/10.4236/jmp.2013.47130>.
- [17] R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 4th ed., Addison-Wesley, Boston (2003).
- [18] A. Budweg, D. Yadav, A. Grupp et al., *Control of excitonic absorption by thickness variation in few-layer GaSe*, Phys. Rev. B, 100, 045404 (2019); <https://doi.org/10.48550/arXiv.1712.06330>.
- [19] D. Maeso, S. Pakdel, H. Santos, N. Agrait, J. J. Palacios, E. Prada, G. Rubio-Bollinger, *Strong modulation of optical properties in rippled 2D GaSe via strain engineering*, Nanotechnology, 30 (2019); <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab0bc1>.
- [20] A. Kuc, N. Zibouche, *Th. Heine, Influence of quantum confinement on the electronic structure of the transition metal sulfide TS₂*, Phys. Rev. B, 83, 245213 (2011); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.245213>.
- [21] D. Andres-Penares, A. Cros, J. P. Martinez-Pastor, J. F. Sanchez-Royo, *Quantum size confinement in gallium selenide nanosheets: band gap tunability versus stability limitation*, Nanotechnology, 28 (2017); <https://doi.org/10.1088/1361-6528/aa669e>.
- [22] M. Usman, S. Golovynskyi, D. Dong, Y. Lin, Z. Yue, M. Imran, B. Li, H. Wu, L. Wang, *Raman Scattering and Exciton Photoluminescence in Few-Layer GaSe: Thickness- and Temperature-Dependent Behaviors*, J. Phys. Chem. C, 126 (25), 10459 (2022); <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c02127>.
- [23] X. Zhou, M. Yan, M. Dong, D. Ma, X. Yu, J. Zhang, Y. Zhao, S. Wang, *Phase stability and compressibility of 3R-MoN₂ at high pressure*, Scientific Reports, 9, 10524 (2019); <https://doi.org/10.1038/s41598-019-46822>.
- [24] A. Segura, *Layered indium selenide under high pressure*, Crystals, 8, 206 (2018); <https://doi.org/10.3390/cryst8050206>.
- [25] S.A. Safran, *Stage Ordering in Intercalation Compounds*, Solid State Physics, 40, 183 (1987); [https://doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60692-X](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60692-X).
- [26] H. Wang, M. Xu, H. Ji, T. He, W. Li, L. Zheng, X. Wang, *Laser-assisted synthesis of two-dimensional transition metal dichalcogenides: a mini review*, Front. Chem., 11, 1195640 (2023); <https://doi.org/10.3389/fchem.2023.1195640>.
- [27] A. Bosak, M. Krisch, M. Mohr, J. Maultzsch, C. Thomsen, *Elasticity of single-crystalline graphite: Inelastic X-ray scattering study*, Phys. Rev. B, 75, 153408 (2007); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.153408>.
- [28] F. R. Gamble, J. H. Osiecki, M. Cais, R. Pisharody, F. J. DiSalvo, T. H. Geballe, *Intercalation Complexes of Lewis Bases and Layered Sulfides: A Large Class of New Superconductors*, Science, 174 (4008), 493–497 (1971); <https://doi.org/10.1126/science.174.4008.493>.

B.A. Lukiyanyets, D.V. Matulka

Qualitative analysis of differences in the physical properties of few-layer quasi-2D crystals

Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine; dariya.v.matulka@lpnu.ua

Quasi-2D crystals (graphite, layered crystals A₃B₆, transition metal, etc.) have a variety of unique properties that can vary widely by external factors, intercalation, etc. This explains the interest in such crystals both from the point of view of fundamental research and from that of practical use. The technological possibilities of obtaining few-layer fragments of quasi-2D crystals have become another way to achieve properties not inherent in bulk materials. This article presents a generalized model of few-layer fragments, which qualitatively highlights the factors responsible for the differences between bulk quasi-2D samples and their few-layer counterparts. The model's conclusions are in qualitative agreement with experimental and theoretical findings reported by other authors. This study also addresses the impact of external factors on the physical properties of samples with varying layer thicknesses.

Keywords: quasi-2D crystals; energy band gap; electronic spectrum; intercalation.