

ТРАНСФОРМАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА 2H-NbSe₂ С ВАКАНСИЯМИ Se

Мамалуй А.А., Синельник А.В., Андреева О.Н.

Национальный технический университет

«Харьковский политехнический институт», г. Харьков

В результате недавних исследований [1] было обнаружено, что при высокотемпературной выдержке кристалла 2H-NbSe₂ происходит структурный фазовый переход, приводящий к образованию решетки 4H-NbSe₂. Этот переход стимулируется образованием вакансий Se в исходном кристалле. Образование вакансий Se приводит к двум следствиям. Во-первых, при образовании вакансий в решетке возникают смещения атомов, распространяющиеся вплоть до поверхности кристалла. Во-вторых, поскольку связь Nb-Se является ковалентной, образование вакансий Se приводит к освобождению ~1 электрона/1 вакансию, то есть увеличению числа носителей в зоне проводимости 2H-NbSe₂. Оба эти следствия приводят к изменению электронного спектра. Представляет интерес, изучение изменений электронного спектра 2H-NbSe₂ при образовании вакансий Se. Целью данного исследования является расчет электронной структуры 2H-NbSe₂ с вакансиями.

Нами были проведены численные расчеты электронной зонной структуры, плотности состояний и построена поверхность Ферми 2H-NbSe₂. Были рассмотрены три случая: бездефектный кристалл, кристалл с измененным объемом элементарной ячейки и кристалл с увеличенной концентрацией носителей. Расчеты производились в модели линеаризованных присоединенных плоских волн (ППВ) с полным потенциалом. ППВ представляют набор базисных функций используемых для решения уравнения Кона-Шэма в теории функционала плотности [2].

Было выяснено, что при концентрациях вакансий, реально наблюдающихся в экспериментах, объем дырочной зоны Г поверхности Ферми имеет тенденцию уменьшаться с увеличением концентрации вакансий. Это уменьшение при постепенном увеличении концентрации вакансий происходит как при увеличении объема элементарной ячейки, так и при увеличении концентрации носителей. Суммарный эффект может приводить к полному исчезновению этой группы носителей, то есть к электронному топологическому переходу 2,5 рода [3]. Выявленное уменьшение или даже исчезновение зоны на поверхности Ферми коррелирует с экспериментально наблюдающимся фазовым переходом 2H→4H-NbSe₂ [1]: оба перехода, электронный и структурный, происходят примерно при одних и тех же концентрациях вакансий Se.

Литература:

1. O.N. Andreeva, I.S. Braude, A.A. Mamalui, The Physics of Metals and Metallography 113, 9 (2012)
2. A. Gulans, S. Kontur, C. Meisenbichler, D. Nabok, P. Pavone, S. Rigamonti, S. Sagmeister, U. Werner, and C. Draxl, J. Phys.: Condens. Matter 26, 363202 (2014)
3. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, Электронная теория металлов, М: Наука, 1971