

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЛИНЕАРИЗОВАННЫХ  
ПЛОСКИХ ВОЛН ДЛЯ РАСЧЕТА  
ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ 2H-NbSe<sub>2</sub>**

**Мамалуй А.А., Синельник А.В.**

*Национальный технический университет  
"Харьковский политехнический институт", г. Харьков*

Исследования для энергетического спектра квазидвумерных кристаллических систем с заданными дефектами кристаллической решетки представляют значительный интерес.

Структурно эти соединения представляют собой «сэндвичи» из трех сильно связанных слоев  $T$ - $X$ - $T$ , которые, в свою очередь, объединены относительно слабыми силами Ван дер Ваальса. Внутри  $T$ - $X$ - $T$ -сэндвича в каждом из слоев  $T$  и  $X$  атомы образуют гексагональную решетку. В зависимости от смещения слоев друг относительно друга и порядка упаковки различают 6 типов структур:  $1T$ ,  $2H$ ,  $3R$ ,  $4Na$ ,  $4Nb$ ,  $6R$ .

Объектом настоящего исследования является соединение NbSe<sub>2</sub> со структурным типом  $2H$ . Для данного соединения были проведены вычисления электронной зонной структуры, выполнено построение поверхности Ферми. Проведено сравнение полученных результатов с результатами [1,2].

В качестве метода расчета был выбран метод известный под названием FP-LAPW, то есть метод линейризованных плоских волн с полным потенциалом. В основе данного метода лежат следующие положения. Пространство разбивается на две области: сферические области около ядер атомов и области вдали от него.

В области около ядра атома электроны ведут себя так, как если бы атом был свободен, здесь электроны описываются радиальными волновыми функциями. В области вдали от атомов электроны почти свободны; здесь они описываются плоскими волнами. Вышеуказанные функции сшиваются по условиям непрерывности и гладкости. Затем эти функции используются для решения уравнений теории функционала плотности.

Были выполнены расчеты зонной структуры  $2H$ -NbSe<sub>2</sub> и построение поверхности Ферми с помощью программного пакета Exciting. Полученные результаты были сравнены с результатами независимых исследований [1, 2]. Сравнение показало корректность проведенных расчетов.

1. L.F. Mattheiss. Band Structure of Transition-Metal-Dichalcogenide Layer Compounds. Phys. Rev. B 8, 3719 (1973).
2. Fermi Surface Nesting and the Origin of the Charge Density Wave in NbSe<sub>2</sub>. Phys. Rev. B 73, 205102 (2006).