

СЕКЦИЯ 7. КОМПЬЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ У ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ

ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЯ СОБСТВЕННЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ NbSe₂

Андреева О.Н., Шелест Т.Н., Синельник А.В.

Национальный технический университет

«Харьковский политехнический институт», г. Харьков

В последнее время приоритетным направлением физики твердого тела являются исследования низкоразмерных систем. Это связано с интересом к фундаментальным свойствам электронных состояний с макроскопической когерентностью, таких как, например, сверхпроводимость и ВЗП, в этих материалах. Общеизвестно, что большинство свойств низкоразмерных систем определяются их структурой, в частности, особенностями распределения точечных дефектов. Поэтому детальное изучение особенностей распределения вакансий и их влияния на структуру, свойства, а также поверхность Ферми квазидвумерных монокристаллах 2H – NbSe₂ является актуальным.

Вакансии селена в монокристаллах 2H – NbSe₂ создавались с помощью дегазации атомов селена при изотермической выдержке в области повышенных температур ($T \geq 400$ К). Наличие вакансий приводит к отклонению от линейности температурных зависимостей сопротивления при $T \geq 400$ К. Детальный анализ особенностей влияния вакансий на структуру исследуемых монокристаллов NbSe₂ показал, что при концентрации вакансий более 5 ат. % (отжиг при $T_1 \geq 450$ К) происходит изменение структурного политипа исследуемого объекта. Необходимо отметить, что при повышении температуры отжига выше T_1 наблюдалось необратимое поведение температурной зависимости электросопротивления и нелинейный характер температурных зависимостей временной части электросопротивления. Наличие таких аномалий, может быть вызвано не только перестройкой структуры, но и согласно результатам анализа особенностей распределения вакансий по глубине кристалла, может быть связано с возможной коагуляцией собственных точечных дефектов на поверхности.

Известно, что поверхность Ферми для 2H-NbSe₂ характеризуется тремя зонами. С помощью численных исследований электронного энергетического спектра было установлено, что увеличение концентрации вакансий селена приводит к уменьшению размеров и последующему исчезновению дырочной зоны поверхности Ферми. Показано, что при концентрациях вакансий более 5 ат. % происходит электронный топологический переход 2,5 рода.