

Трифонов Иван Олегович

«Взаимосвязь кулоновских корреляций, электронной структуры и решеточных свойств в серии соединений $\text{LiFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ »

Цели и задачи проекта:

Целью проекта является определение роли кулоновских корреляционных эффектов и влияния легирования медью на формирование электронной структуры и возможность реализации перехода металл–диэлектрик в системе $\text{LiFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ в диапазоне $0 \leq x \leq 0.5$.

Для достижения поставленной цели предполагается решение **следующих задач:**

1. Определить влияние параметра легирования x на энергетический спектр электронных состояний $\text{LiFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ в рамках модели сдвига уровня Ферми.
2. Выполнить расчёт структурных параметров гипотетического соединения $\text{LiFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$ методом минимизации полной энергии с учётом кулоновских корреляций.
3. Исследовать устойчивость соединения $\text{LiFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$ путём вычисления энергии образования.
4. Провести моделирование электронной структуры $\text{LiFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$ в рамках метода сверхъядеек и оценить влияние корреляционных эффектов на спектральные характеристики (характеристики энергетического спектра электронных состояний).
5. На основании полученных результатов сформулировать выводы о вкладе кулоновского взаимодействия в структурные и электронные свойства $\text{LiFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$.
6. Подготовка рукописи статьи на основании полученных данных, отправка в журнал, индексируемый в едином государственном перечне научных изданий — «Белый список», а также представление результатов работы на конференции и/или школе.

Ожидаемые результаты:

В результате выполнения проекта ожидается, что будут получены:

1. Закономерности эволюции спектральных свойств системы $\text{LiFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ в зависимости от концентрации меди x с учётом кулоновских корреляций.
2. Рассчитанные структурные параметры и оценённая энергия образования соединения $\text{LiFe}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}\text{As}$.
3. Новые теоретические данные, позволяющие выявить предпосылки реализации перехода металл–диэлектрик в системе $\text{LiFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ и определить природу корреляционных эффектов в железосодержащих сверхпроводниках.
4. Установленные общие закономерности формирования диэлектрического состояния в семействе сверхпроводников класса 111 на основе железа.
5. Выявленные сходства и различия в эволюции спектральных свойств системы $\text{LiFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$ при легировании по сравнению с опубликованными результатами для изоструктурного соединения $\text{NaFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{As}$.
6. Рукописи научных статей, подготовленные к публикации в рецензируемых журналах, а также материалы докладов для представления результатов проекта на конференциях и научных школах.