

«Исследование термоэлектрических свойств и электронной структуры монокристаллических образцов HfTe₂ и TiTe₂ при воздействии давления»

Цели и задачи проекта:

Цель данного проекта состоит в комплексном теоретическом и экспериментальном исследовании влияния высокого давления до 10 ГПа на термоэлектрические свойства и электронную структуру слоистых дихалькогенидов переходных металлов IV группы: MTe₂ (M=Hf, Ti). В рамках проекта планируется провести экспериментальное исследование транспортных свойств этих материалов под давлением в совокупности с теоретическими расчетами, что позволит получить новую информацию о зонной структуре материала. Электронные транспортные свойства в данном проекте будут исследоваться путем измерения термоЭДС (коэффициент Зеебека) при многократном циклическом воздействии давлением, а теоретическое исследование электронной структуры и топологических особенностей будут проведены на основе DFT+U(+SO) расчетов, учитывающих электронные корреляции. Сопоставление экспериментальных данных с результатами расчетов позволит установить взаимосвязь между давлением, электронной структурой и термоэлектрическими свойствами исследуемых соединений.

Для достижения поставленной цели необходимо решить **следующие задачи:**

1. Получение данные о характеристиках термоэлектрических свойств (термоЭДС и электросопротивления) монокристаллов HfTe₂ и TiTe₂ в условиях всестороннего сжатия под давлением до 10 ГПа при комнатной температуре. Выявление и анализ особенностей в поведении данных характеристик под давлением, вызванных изменениями в электронной и кристаллической структуре, определение структурной стабильности и возможности сохранения высокобарных фаз при обработке давлением.
2. Определение параметров кулоновского взаимодействия, самосогласованные DFT+U(+SO) расчеты электронной структуры HfTe₂ и TiTe₂ для экспериментальных данных монокристаллических образцов при нормальных условиях и в условиях всестороннего сжатия, построение и анализ полных и парциальных плотностей состояний и зонной структуры, определение особенностей зонной структуры, формирующих полуметаллическое состояние, сравнение с опубликованными литературными данными для исследуемых и близких по составу соединений, а также исследование топологических особенностей соединений в базисе функций Ванье.

Ожидаемые результаты:

В ходе проекта будут получены экспериментальные данные о влиянии высокого давления (до 10 ГПа) и многократного его воздействия на термоэлектрические свойства монокристаллов MTe₂. Будет получена новая информация об электронных и структурных переходах, индуцированных давлением. Будут получены полные и парциальные плотности состояний, рисунки зонных структур MTe₂ и влияние на них параметра U в методе DFT+U. Будет проведен анализ топологических особенностей MTe₂, включая влияние параметра U. Сопоставление полученных результатов с литературными данными позволит уточнить характер полуметаллического состояния и его эволюции под давлением. Результаты работы также позволят оценить перспективы использования данных материалов в новых технологиях для наноэлектроники, связанных с применением механических напряжений. Полученные результаты будут соответствовать мировому уровню и будут представлены в виде тезисов и научной статьи, опубликованной в журнале из «Белого списка».