**Одномерные наноленты Ta­2Pd3Se8: новые фазы и их свойства**

***Буйлова М.А.1,2, Ларионов К.В2.***

*Студентка, 3 курс бакалавриата*

*1Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия*

*2Лаборатория цифрового материаловедения, Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия*

*E-mail: builova.ma@phystech.edu*

Тема низкоразмерных материалов очень актуальна и активно изучается в связи с их удивительными структурными, физическими и химическими свойствами. Среди одномерных материалов есть интересный класс нанолент, примечательный в качестве перспективных полупроводниковых материалов для электронных и оптоэлектронных устройств. Представителями этого класса являются, например, тройные халькогениды переходных металлов вида M2X3Y8 (M = Ta, Nb; X = Ni, Pd, Pt; Y = S, Se) [1–2].

В работе теоретически изучены свойства нанолент состава Ta2Pd3Se8. Получены две новые стабильные фазы изолированных нанолент, отличающиеся от известных фаз 1T, 2H. Были рассчитаны плотности электронных состояний для каждой из фаз, также получены барьеры нуклеации. Анализ полученных результатов показал наличие металлических свойств у новых фаз.

*Работа выполнена в рамках реализации программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» и мероприятий, направленных на развитие и реализацию прорывных научных исследований и разработок, в том числе получение по итогам прикладных научных исследований и (или) экспериментальных разработок результатов интеллектуальной деятельности Грант K6-2022-041. Отдельная благодарность научному руководителю - Сорокину Павлу Борисовичу.*

**Литература**

1. K. H. Choi et al. Ta2Ni3Se8: 1D van der Waals Material with Ambipolar Behavior// Small 2021, 17, 2102602.

2. B. J. Jeong et al. Ternary Transition Metal Chalcogenide Nb2Pd3Se8: A New Candidate of 1D Van der Waals Materials for Field-Effect Transistors // Adv. Funct. Mater. 2022, 32, 2108104