

КОМБИНИРОВАННОЕ АБ ИНИТЮ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДОПИРОВАННОГО ЭЛЕМЕНТАМИ I–III ГРУПП ПИРОХЛОРА ТИТАНАТА ВИСМУТА

Краснов А.Г.,^а Пийр И.В.,^а Шеин И.Р.,^б Напалков М.С.,^{а,в} Власов М.И.^{г,д}

^аИнститут химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, 167000, Сыктывкар, ул. Первомайская 48,
e-mail: alexey-krasnov@rambler.ru

^бИнститут химии твердого тела УрО РАН, 620990, Екатеринбург, ул. Первомайская, 91
в ФГБОУ ВПО «Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина»,
167005, Сыктывкар, ул. Петрозаводская, 12

^вИВТЭ УрО РАН, 620137, Екатеринбург, ул. Академическая, 20

^гУральский федеральный университет, НОЦ НАНОТЕХ,
620002, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 7-а

Допированные титанаты висмута со структурой типа пирохлора могут быть интересны в качестве материалов с высокой диэлектрической проницаемостью, малым током утечки, как смешанные электронно-ионные (протонные) проводники, фотокаталитически активные системы в видимом свете. Элементы I–III групп (например, Li, Na, Mg, Ca, Zn, Al, Sc, In) имеют подходящие ионные радиусы и зарядовые состояния для допирования в структуру $\text{Bi}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ и образования новых термостабильных твердых растворов. Первопринципные расчеты были выполнены в рамках DFT методом PAW с использованием пакета VASP, учитывая обобщенную градиентную аппроксимацию обмен-корреляционного функционала в виде PBE. Допирование в структуре пирохлора моделировали путем замены одного атома Bi (Ti) на один атом допанта (Li, Na, Mg, Ca, Zn, Al, Sc, In) в ячейке $\text{Bi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{14}$, что соответствовало замещению 25 ат.%. Расчеты DOS, зонной структуры, диэлектрических и оптических параметров для рассматриваемых моделей пирохлора были выполнены после оптимизации геометрии ячеек. Результаты *ab initio* расчетов сопоставляются с данными о синтезе и исследовании свойств новых замещенных титанатов висмута. Рассматриваются области гомогенности твердых растворов, их термостабильность, исследование распределения атомов допанта по кристаллографическим позициям, оптические свойства, диэлектрическое поведение вблизи комнатной температуры.

Работа частично поддержана РФФИ (проект № 19-03-00642 А). Исследование проводилось с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Химия» Института химии Федерального научного центра Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук