

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ МОЛИБДАТОВ

Политов Б.В., Сунцов А.Ю., Кожевников В.Л.

*Институт химии твердого тела Уральского отделения РАН,
620990, Екатеринбург, улица Первомайская, 91,
e-mail: politoffboris@yandex.com*

На сегодняшний день отдельный интерес для теоретических исследований представляют сложнооксидные соединения, в частности, перовскитоподобные молибдаты Sr_2MMoO_6 , где М – Mg, Fe, Ni, Mn. Данный класс оксидов обладает интересными свойствами, которые открывают перспективы использования указанных материалов в качестве анодов топливных элементов, функциональных компонентов устройств для спинтроники и т.д. Следует отметить, что по сравнению с большим объемом экспериментальных исследований, теоретические представления о свойствах сложных оксидов недостаточно развиты. Так, вопросы о природе носителей заряда, процессах дефектообразования, ионной проводимости, электронной и магнитной структуре остаются предметом активных дискуссий. В рамках настоящей работы были исследованы молибдаты Sr_2MgMoO_6 методом теории функционала электронной плотности. Рассчитаны плотности электронных состояний и энергии образования различных дефектов (рис.1), а также барьеры миграции ионов кислорода. Полученные результаты сопоставлены с экспериментом.

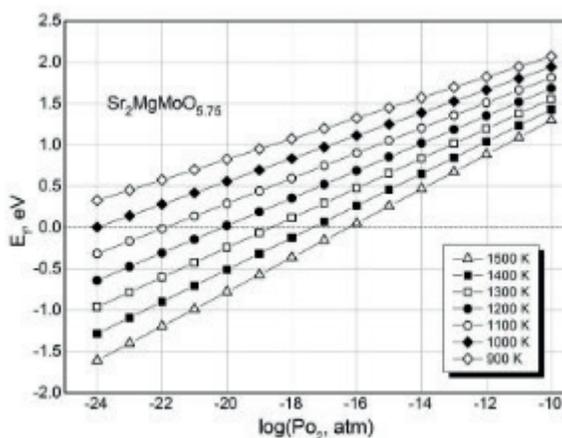


Рисунок 1. Энергия образования кислородной вакансии в молибдате Sr_2MgMoO_6