**Исследование из первых принципов процесса сегрегации примесей никеля в структуре LSNT перовскита**

***Фаттахов А.Ф.¹, Бажанов Д.И.2***

1*студент,* 2*доцент*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,   
физический факультет, Москва, Россия*

В настоящее время наблюдается большой интерес к соединениям со структурой перовскита. В частности, они используются для изготовления компонентов твердооксидных топливных элементов из-за своих электропроводных свойств. В данной работе исследуется соединение на основе титаната стронция *La*0.2*Sr*0.7*Ni*0.1*Ti*0.9*O*2.9 (LSNT), в котором наблюдается сегрегация частиц никеля из кристаллического массива к поверхности электрода и формирование каталитических кластеров [1]. Благодаря этому возрастает интенсивность химических реакций окисления в топливном элементе. Предполагается, что процесс сегрегации обусловлен наличием структурных дефектов перовскита (кислородные вакансии, антифазные границы и дислокации), которые приводят к активной кластеризации примесных атомов никеля вблизи границ дефектов структуры. Рассматриваемые модели антифазной границы и дислокационного ядра основаны на экспериментальных данных электронной микроскопии (STEM) [2]. Целью работы является исследование сегрегации примесей никеля вблизи структурных дефектов в соединении LSNT .

Процесс сегрегации рассматривается в направлении TiO-терминированной поверхности (001) , TiO-терминированной антифазной границы и к дислокационному ядру, формирование которых наблюдается в эксперименте [2]. Для исследования проводятся расчеты энергии сегрегации, которая определяется как:

|  | (1) |
| --- | --- |

где - полная энергия системы с примесным атомом на границе дефекта, - полная энергия системы с примесным атомом в объеме. По величине энергии сегрегации можно судить о том, какая конфигурация более стабильна. Расчет энергии системы в рамках теории функционала плотности проводится путем решения уравнений Кона – Шэма по формуле:

|  | (2) |
| --- | --- |

где — действительные собственные значения гамильтониана Кона — Шэма, — функциональная производная, – обменно-корреляционная энергия. Для расчетов полной энергии систем использовался программный пакет VASP [3]. В результате проведенных расчетов при различных конфигурациях примесей никеля в структуре LSNT было установлено, что энергетически выгоден процесс сегрегации примесных атомов к поверхности, противофазной границе и ядру дислокации. Дополнительные расчеты с двумя примесными атомами никеля показывают, что также выгодна димеризация примесных атомов на границах дефектов, что свидетельствует о наличии тенденции к началу кластеризации атомов никеля. Кроме того, в ходе расчетов было установлено, что процесс сегрегации примесей связан с перераспределением зарядов атомов вблизи дефектов структуры. Таким образом, обнаружена тенденция к сегрегации и кластеризации примесей никеля на границах дефектов исследуемой структуры. Полученные результаты находятся в согласии с данными экспериментальных наблюдений.

Исследование выполнено в рамках государственного заказа МГУ имени М.В. Ломоносова.

# Литература

1. Kim K. J., et al. Facet-dependent in situ growth of nanoparticles in epitaxial thin films: the role of interfacial energy // J. Am. Chem. Soc. 2019. V. 141. P. 7509–7517.

2. Han H., et al. Anti-phase boundary accelerated exsolution of nanoparticles in non-stoichiometric perovskite thin films // Nat. Commun. 2022. V. 13. P. 6682.

3. Kresse G., et al. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B 1996. V. 54. P. 11169–11186.