

Моделирование электронных свойств сложных оксидных РЗЭ как сенсорных наноматериалов

Мацук Н, магистрант БНТУ

Интерес к сложным оксидам редкоземельных элементов (РЗЭ) связан с различной гаммой обнаруженных свойств, которые позволяют использовать их в качестве термо- и химически стойких материалов во многих областях промышленности. Применение сложных оксидных РЗЭ в мире в настоящее время превосходит по общему объему применение самих редкоземельных металлов (РЗМ), поскольку они используются в вычислительной технике.

Задачей исследования является проектирование и моделирование атомно-структурных и электронных свойств сенсорных наноматериалов на основе сложных оксидных редкоземельных элементов. В качестве среды моделирования используется программный пакет VASP (Vienna Abinitio Simulation Package), позволяющий выполнить расчеты из первых принципов методами квантовой механики и молекулярной динамики. Для определения поведения твердых, аморфных, жидких тел VASP использует различные алгоритмы расчета основного электронного состояния.

Для моделирования выбраны сложные оксидные редкоземельные элементы, а именно: CeAlO_3 , LaAlO_3 . Эти материалы представляют большой интерес для применения в сенсорных наноматериалах. Ce - входит в цериевую подгруппу, элементы которой называются лёгкими, а La – входит в иттриевую группу, элементы которой также называются лёгкими.

Исследуемые сложные оксидные РЗЭ при комнатной температуре образуют кристаллические решетки двух типов – орторомбическую (определяется тремя базовыми векторами, все три вектора перпендикулярны друг другу, но не равны между собой), кубическую (определяется тремя базовыми векторами, все три вектора перпендикулярны друг другу, равными между собой).

Определяем электронную плотность сложных оксидных РЗЭ. Кристаллографическая структура показана на рис.1.

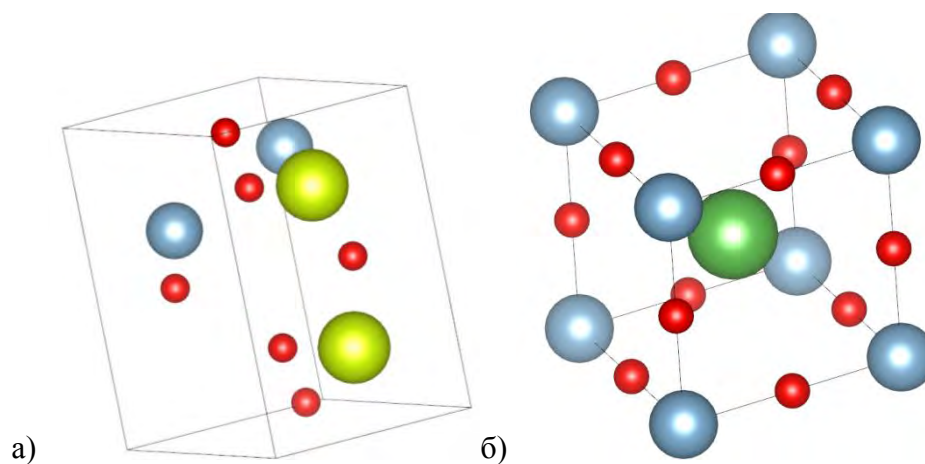


Рис. 1. Кристаллическая решетка : а - CeAlO_3 ,б - LaAlO_3

По результатам моделирования рассчитаны и построены электронная плотность соединений. Установлено, что уровень Ферми имеет значение: $E_f (\text{CeAlO}_3) = 4,2531$ эВ , $E_f (\text{LaAlO}_3) = 9,9106$ эВ. Полученные электронные плотности представлены на рисунке 2.

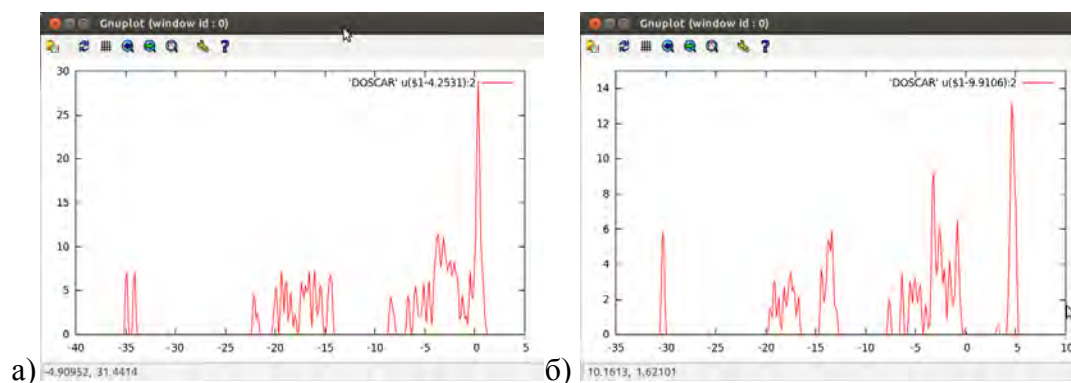


Рис.2. Электронная плотность : а - CeAlO_3 ,б - LaAlO_3