**ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ПРОЦЕССА СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСЕЙ НИКЕЛЯ В СТРУКТУРЕ LSNT ПЕРОВСКИТА**

*Фаттахов Азат Фарвазович, студент¹,*

[*fattahovazat@yandex.ru*](mailto:fattahovazat@yandex.ru)

*Бажанов Дмитрий Игоревич, к.ф.-м.н., доцент1,2,*

*dima@kintechlab.com*

*1МГУ имени М.В.Ломоносова, г. Москва*

*2ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация: В работе проведено исследование процесса сегрегации примесей никеля вблизи границ дефектов структуры перовскита *La*0.2*Sr*0.7*Ni*0.1*Ti*0.9*O*2.9 (LSNT) методом первопринципной молекулярной динамики. Процессы сегрегации и кластеризации рассматриваются вблизи TiO-терминированной поверхности (001), TiO-терминированной антифазной границы и ядра дислокации в соответствии с данными сканирующей электронной микроскопии. В результате расчетов обнаружена тенденция к сегрегации и кластеризации примесей никеля на границах структурных дефектов. Полученные результаты находятся в согласии с экспериментальными наблюдениями.

Ключевые слова: перовскит, LSNT, сегрегация, теория функционала плотности.

**Введение**

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 .

**Расчет энергий сегрегации**

Для исследования процесса сегрегации в направлении TiO-терминированной поверхности (001) , TiO-терминированной антифазной границы и к дислокационному ядру проводятся расчеты полной энергии моделируемых систем. Затем рассчитывается энергия сегрегации, которая определяется как:

,

где - полная энергия системы с примесным атомом на границе дефекта, - полная энергия системы с примесным атомом в кристаллическом объеме. Отрицательное значение энергии сегрегации свидетельствует о наличии тенденции к сегрегации. Расчет энергии системы в рамках теории функционала плотности проводится путем решения уравнений Кона – Шэма по формуле:

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 полной энергии 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.

**Выводы**

В результате проведенных расчетов была обнаружена тенденция к сегрегации и кластеризации примесей никеля на границах дефектов материала LSNT. Полученные результаты находятся в согласии с данными экспериментальных наблюдений.

# Список использованных источников

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. 141, 7509–7517, 2019.

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

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

FIRST-PRINCIPLES STUDY OF THE PROCESS OF SEGREGATION OF NICKEL IMPURITIES IN THE STRUCTURE OF LSNT PEROVSKITE

A.F. Fattakhov, D.I. Bazhanov

Abstract: The paper investigates the segregation of nickel impurities near the boundaries of defects in the structure of perovskite *La*0.2*Sr*0.7*Ni*0.1*Ti*0.9*O*2.9 (LSNT) by the method of ab initio molecular dynamics. The processes of segregation and clustering are considered near the TiO-terminated surface (001), the TiO-terminated antiphase boundary and the dislocation core in accordance with the data of scanning electron microscopy. As a result of calculations, a tendency to segregation and clustering of nickel impurities at the boundaries of structural defects was found. The results obtained are in agreement with experimental observations.

Keywords: perovskite, LSNT, segregation, density functional theory.