

Математическое моделирование кристаллической структуры перовскитоподобных соединений

Сеченых П.А.

ФИЦ ИУ РАН, МАИ (НИУ)

Актуальность использования математического моделирования для прогнозирования свойств перовскитоподобных материалов обусловлена востребованностью таких соединений в микроэлектронике, в частности, при разработке солнечных батарей, оптоэлектронных приборов и фотоэлементов.

В данной работе рассматривались соединения с кубической кристаллической решеткой, реализуемые в следующих структурных типах:

- перовскит (пространственная группа симметрии  $Pm\bar{3}m$ , общая химическая формула  $ABO_3$ )
- двойной перовскит (пространственная группа симметрии  $Fm\bar{3}m$ , общая химическая формула  $A_2BB'O_6$ )

В работе требовалось определить метрические параметры кристаллохимического соединения, исходя из пространственной группы симметрии и химической формулы. К таким параметрам, в частности, относятся постоянные кристаллической решетки и координаты атомов, входящих в элементарную ячейку.

Для расчета метрических параметров и плотности упаковки соединений, реализуемых в рассматриваемых структурных типах, была применена модель ионно-атомных радиусов, подробно изложенная в [1]. При решении поставленной задачи в рамках данной модели была использована программная реализация алгоритма имитации отжига [2] на языке программирования C#, ранее подробно описанная в [3].

Радиусы атомов химических элементов были взяты из [4].

Основные результаты расчетов приведены в таблице 1. Полученные значения постоянных кристаллической решетки согласуются с экспериментальными данными [5,6].

Вычисленные значения постоянных решетки и координат атомов, входящих в элементарную ячейку, могут быть использованы в качестве входных данных при расчете электронных, магнитных, тепловых свойств перовскитоподобных соединений.

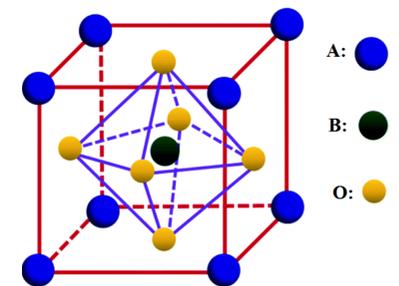


Рис. 1. Структура перовскита

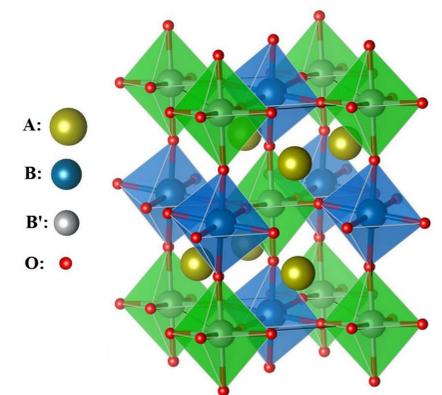


Рис. 2. Структура двойного перовскита

Таблица 1. Структурные характеристики

Формула	Группа симметрии	Плотность упаковки $\rho$	Постоянная решетки $a$ (выч.), $\text{Å}$	Постоянная решетки $a$ (таб.), $\text{Å}$ [5,6]	Относительная погрешность
$\text{SrTiO}_3$	$Pm\bar{3}m$	0.566	4.01	3.899	0.0285
$\text{BaTiO}_3$	$Pm\bar{3}m$	0.577	4.01	3.97	0.0101
$\text{CaTiO}_3$	$Pm\bar{3}m$	0.513	4.01	3.99	0.0050
$\text{LaAlO}_3$	$Pm\bar{3}m$	0.572	3.87	3.78	0.0238
$\text{LaFeO}_3$	$Pm\bar{3}m$	0.517	4.02	3.87	0.0388
$\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$	$Fm\bar{3}m$	0.593	7.880	7.899	0.0024
$\text{La}_2\text{CuTiO}_6$	$Fm\bar{3}m$	0.483	8.270	7.869	0.0509
$\text{Sr}_2\text{CoMoO}_6$	$Fm\bar{3}m$	0.555	8.080	7.918	0.0205
$\text{Ba}_2\text{CoWO}_6$	$Fm\bar{3}m$	0.566	8.100	8.103	0.0004

Литература

1. Абгарян К.К., Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения.- М.:МАКС Пресс, 2017. – 284с.
2. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method. Journal of the American Statistical Association, Vol. 44, No. 247 (Sep., 1949), pp. 335-341.
3. Сеченых П.А. Математическое моделирование перспективных структур оксидов металлов // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 268-271. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-268-271
4. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. – Пер. с англ./Под ред. Б.Д.Степина, Р.А.Лидина. – М.: Химия, 1987. –696с.
5. Crystallography Open Database [электронный ресурс]. URL: <http://www.crystallography.net/cod/> (дата обращения 10.09.2021)
6. Зиненко В.И., Павловский М.С., Шинкоренко А.С. Электронная структура, динамика решетки и магнитоэлектрические свойства двойного перовскита  $\text{La}_2\text{CuTiO}_6$  // Физика твердого тела, 2016, том 58, №11, С.2212-2217.