**Исследование процесса образования наночастиц никеля в структуре LSNT перовскита**

***Фаттахов А.Ф.¹, Бажанов Д.И.2***

1*студент,* 2*старший преподаватель*

*1Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия*

*1,2Вычислительный центр имени А. А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН, Москва, Россия
E–mail*: *fattahovazat@yandex.ru*

В работе исследуется соединение на основе титаната стронция *La*0.2*Sr*0.7*Ni*0.1*Ti*0.9*O*2.9 (LSNT). Данный материал используется для изготовления электродов для твердооксидных топливных элементов и интересен тем, что в нем наблюдается сегрегация частиц никеля из кристаллического массива к поверхности электрода и формирование каталитических кластеров [1]. В результате возрастает интенсивность химических реакций окисления в топливном элементе. Предполагается, что процесс сегрегации обусловлен наличием структурных дефектов перовскита (кислородные вакансии, дислокации, антифазные границы и др.), которые приводят к активной кластеризации примесных атомов никеля вблизи границ дефектов структуры. Особое внимание в работе уделено ядру дислокации, модель которого была предложена на основе экспериментальных данных электронной микроскопии (STEM) [2]. Целью работы является исследование сегрегации примесей никеля вблизи данных 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 полной энергии структур. Затем рассчитывается энергия 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 выгодности процесса. 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 исследования сегрегации и кластеризации на ядре дислокации возникает необходимость использования большой модельной ячейки, что приводит к значительному увеличению времени расчетов в рамках теории функционала плотности. В связи с этим для ядра дислокации был применен метод классической молекулярной динамики. Были рассчитаны диффузионные пути примесных атомов при их сегрегации и кластеризации. Для этих целей использовался программный пакет LAMMPS [3] и потенциал, предложенный Pedone [4].

Таким образом, была проведена серия расчетов энергий структуры LSNT методами классической и первопринципной молекулярной динамики при различных конфигурациях примесей никеля. Полученные результаты свидетельствуют о том, что энергетически выгоден процесс сегрегации примесных атомов к поверхности, противофазной границе и ядру дислокации. Дополнительные расчеты с несколькими примесными атомами показывают, что также выгодна кластеризация примесей на границах дефектов. Кроме того, в ходе расчетов было установлено, что процесс сегрегации примесей тесно 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 согласуются с данными экспериментальных наблюдений.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-91-01012.

# 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. 141, 7509–7517, 2019.

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. URL: https://lammps.org

4. Pedone A. et al.A New Self-Consistent Empirical Interatomic Potential Model for Oxides, Silicates, and Silica-Based Glasses // J. Phys. Chem. B 2006, 110, 11780.