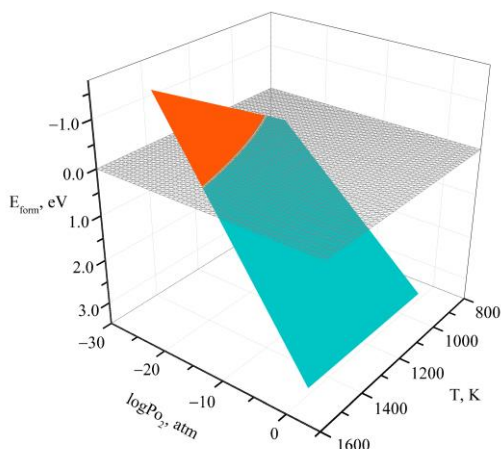


**ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ  
ПРИ ИЗУЧЕНИИ СЛОЖНООКСИДНЫХ СИСТЕМ:  
ВОЗМОЖНОСТИ И ПЕРСПЕКТИВЫ**

*Политов Б.В., Сунцов А.Ю., Жуков В.П., Кожевников В.Л.*

Институт химии твердого тела УрО РАН  
620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91

На сегодняшний день, методы расчета электронной структуры позволяют интерпретировать и предсказывать многочисленные свойства кристаллических тел без использования экспериментальных данных. В связи с этим, отдельный интерес для теоретических исследований представляют сложноксидные соединения с перовскитоподобной структурой, содержащие d-металлы. Данный класс оксидов обладает различными функциональными свойствами, которые открывают перспективы использования данных материалов в качестве активных компонентов высокотемпературных электрохимических устройств. Следует отметить, что по сравнению с большим объемом экспериментальных исследований, теоретические представления о свойствах сложных оксидов развиты слабо. Так, вопросы о природе носителей заряда, процессах дефектообразования, ионной проводимости, электронной и магнитной структуре остаются предметом активных дискуссий в настоящее время. В рамках настоящей работы были исследованы перовскитоподобные оксиды d-металлов (кобальтиты и молибдаты) методом теории функционала электронной плотности. Рассчитаны плотности электронных состояний и энергии образования различных дефектов (см. рисунок), а также барьеры миграции ионов кислорода. Полученные результаты сопоставлены с экспериментальными данными.



Энергия образования кислородной вакансии в молибдате  $\text{Sr}_2\text{MgMoO}_{6-\delta}$