

четырёхзондовым методом на постоянном токе в ячейке специальной конструкции; исследование провели в температурном интервале 30-1100 °С в воздушной атмосфере.

Электрохимическое поведение композитных катодов на твердом электролите  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_2$  исследовали методом импедансной спектроскопии. Измерения осуществили на импедансметре «Элинс Z500-PX» на симметричных ячейках катодный материал | электролит | катодный материал в интервале частот от 10 Hz до 0.5 MHz и температурном интервале 550-750 °С с шагом 50 °С. В результате для катодов исследуемых составов получены температурные зависимости поляризационного сопротивления (ASR). Показано, что введение твердого электролита в катодный материал позволяет значительно снизить значение ASR, минимум которого приходится на содержание электролита в образце, равное 35 масс. %.

*Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 гг.»*

## **ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ОКСИАРСЕНИДА**

### **LaFeAs<sub>1-x</sub>O: РОЛЬ As ВАКАНСИЙ**

*Суетин Д.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.*

Институт химии твердого тела РАН

620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91

После обнаружения высокотемпературной сверхпроводимости в  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  значительное внимание уделяется получению новых сверхпроводников на основе базисных FeAs систем. Основными способами регулирования температуры сверхпроводящего перехода являются допирование по различным подрешеткам данных фаз, а также приложение внешнего давления. Вместе с тем, возможное влияние решеточных вакансий на свойства различных FeAs фаз до сих пор остается во многом не изученным. Недавно сообщалось о синтезе допированной фтором «1111» фазы с As вакансиями ( $x \sim 0.06$ ), были изучены также магнитные свойства полученных образцов [1].

В данной работе представлены результаты квантово-химического моделирования свойств базисной фазы  $\text{LaFeAsO}$ , а также фазы нестехиометрического состава  $\text{LaFeAs}_{0.875}\text{O}$  в немагнитном (NM) и двух антиферромагнитных (G-AFM и S-AFM) вариантах. Все вычисления проведены линейным методом присоединенных плоских волн (FLAPW) с обобщенной градиентной аппроксимацией (GGA) обменно-

корреляционного потенциала в форме PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof, 1996), код WIEN2k [2].

Для расчетов  $\text{LaFeAsO}$  и  $\text{LaFeAs}_{0.875}\text{O}$  были использованы экспериментальные параметры решетки  $a$  и  $c$ , далее оптимизировались атомные позиции. Полученные внутренние параметры  $z_{\text{La}}$  и  $z_{\text{As}}$  хорошо соотносятся с экспериментом.

Обнаружено, что эффект As нестехиометрии, означающий уменьшение концентрации валентных электронов, влияет главным образом на околофермиевские Fe 3d зоны, приводя к их расщеплению и изменению их дисперсии, а также степени заполнения. В результате уровень Ферми пересекает низкодисперсные зоны, что обеспечивает существенные изменения поверхности Ферми нестехиометрической фазы, которая имеет сложную морфологию с набором двумерных поверхностей, а также новых поверхностей (отсутствующих для  $\text{LaFeAsO}$ ) около боковых граней в зоне Бриллюэна.

Вследствие появления As вакансий в нестехиометрической фазе наблюдается смещение уровня Ферми и повышение значения плотности состояний на уровне Ферми ( $N(E_F)$ ) в 2.1 раза (относительно  $\text{LaFeAsO}$ ). Одновременно имеет место ослабление ковалентных связей Fe-As, связанное со смещением Fe атомов в сторону As вакансии.

Результаты расчетов полной энергии показали, что наиболее стабильна S-AFM конфигурация, что связано с эффективным уменьшением значения  $N(E_F)$ . Наиболее нестабильной является NM конфигурация. Энергетический выигрыш S-AFM, G-AFM типов магнитных упорядочений в  $\text{LaFeAs}_{0.875}\text{O}$  растет в сравнении с «чистым»  $\text{LaFeAsO}$ .

Также получено увеличение магнитных моментов (ММ) ближайших к вакансии атомов железа, в то время как ММ остальных Fe атомов понижаются (G-AFM, S-AFM). Данный эффект объясняется в рамках «вакансионных состояний», связанных с перестройкой Fe 3d состояний в окрестности As вакансии.

1. Grinenko V. et al. 2011. *Phys. Rev. B*. V. 84. № 134516.

2. Blaha P. et al. *WIEN2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*. Vienna University of Technology, Vienna, 2001.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-03-96008.*