

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НОВЫХ Ni «42226» ФАЗ $Sr_4Sc_2Ni_2Pn_2O_6$ ( $Pn=P, As$ )

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

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

Открытие сверхпроводимости в слоистых пниктидах железа («122», «111» и «1111» фазы) и халькогенидах железа  $FeSe(Te)$  явилось основой для поиска новых сверхпроводящих материалов. Сравнительно недавно была синтезирована новая группа сложных пятикомпонентных фаз состава  $A_4M_2Fe_2Pn_2O_6$  («42226» фазы), где  $Pn$  – пниктоген, а  $A, M$  – атомы щелочноземельных и переходных металлов соответственно. Получено, что эти фазы являются сверхпроводниками ( $T_c$  до 17 К) даже в отсутствие допантов, а также внешнего давления, что не совпадает с результатами для базисных  $FeAs, FeSe(Te)$  фаз.

В настоящей работе представлены результаты систематического квантово-химического моделирования структурных, электронных свойств, поверхностей Ферми и межатомных взаимодействий новых никелевых сверхпроводников  $Sr_4Sc_2Ni_2As_2O_6, Sr_4Sc_2Ni_2P_2O_6$ , являющихся аналогами соответствующих  $Fe$  фаз. Все расчеты проведены с использованием зонного полно-потенциального метода присоединенных плоских волн (FLAPW, код WIEN2k) с обобщенной градиентной поправкой (GGA) обменно-корреляционного потенциала.

На первом шаге проведена структурная оптимизация по условиям минимума полной энергии системы и сил, действующих на атомы, получены равновесные параметры элементарной ячейки и атомные позиции. Показано, что происходит анизотропная деформация кристаллов при переходе от  $Fe$  фаз к  $Ni$  фазам.

На сегодняшний день установлены эмпирические корреляции, позволяющие связать определенные кристаллографические параметры и температуру сверхпроводящего перехода. Так, для  $Fe$  сверхпроводников наибольший эффект достигается в случае, когда углы связей  $Pn-Fe-Pn$   $\alpha, \beta=109.47^\circ$  (как для идеального тетраэдра), а анионная высота  $As$  плоскости над  $Fe$  плоскостью в  $FeAs$  слое  $\Delta z_a=1.38 \text{ \AA}$ . Результаты расчетов показывают, что эти параметры для низкотемпературных  $Ni$  сверхпроводников лежат вдали от этих оптимальных значений и удовлетворяют имеющемуся тренду.

Поверхности Ферми исследуемых фаз состоят из 5 цилиндрических поверхностей, три из которых электронного типа, ориентированных вдоль направления  $\Gamma-Z$  и две – дырочного относительно направления  $A-M$ . Данная топология существенно отличается от такой для  $Fe$

аналогов, но имеет сходство с другими Ni сверхпроводниками LaNiPO, LaNiBiO.

Основной вклад в прифермиевскую область для  $Sr_4Sc_2Ni_2Pn_2O_6$  вносят Ni 3d состояния при участии Pn p состояний. При этом все 5 орбиталей Ni 3d и 3 орбитали Pn p имеют ненулевой вклад на уровне Ферми, что не совпадает с результатами для Fe фаз. Полные плотности состояний на уровне Ферми  $N(E_F)$  сравнимы с такими для Fe фаз и составляют 3.13 и 3.85 сост./эВ/форм.ед. соответственно. Кроме того, установлено, что Ni фазы немагнитны.

Межатомные взаимодействия в Ni фазах носят комбинированный металлически-ионно-ковалентный тип. Взаимодействие между блоками  $Fe_2Pn_2$ ,  $Sr_4Sc_2O_6$  имеет ионный характер, соответствующий электронный перенос, как следует из вычислений атомных зарядов по схеме Бейдера, составляет около 0.6 е/форм.ед. В то же время внутри этих блоков реализуются все три составляющие химической связи.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты 09-03-00946 и 10-03-96008-Урал.*

## **СТРУКТУРНЫЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЛОЖНО-ЗАМЕЩЕННЫХ НИОБАТОВ ВИСМУТА**

*Тарасова О.А., Шатохина А.Н.*

Уральский государственный университет  
620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, д.51

Ниобаты висмута являются достаточно интересным классом соединений, физико-химические свойства которых изучаются большим количеством исследователей в различных научных центрах. Наибольшее внимание в системе оксид висмута - оксид ниобия в последние годы уделяется сложным оксидам из области, обогащенной оксидом висмута. Путем целенаправленного допирования проводится поиск фаз, обладающих максимальной кислородно-ионной проводимостью и устойчивостью в широком температурном интервале.

Настоящая работа посвящена изучению кристаллической структуры и физико-химических свойств допированных ниобатов висмута состава  $Bi_{6,95}Y_{0,05}Nb_{2-y}Me_yO_{15,5}$  где  $Me=Fe, Zr, V$ . Образцы были синтезированы по стандартной керамической технологии в интервале составов  $0.1 \leq y \leq 0.5$  с шагом 0.1. Конечная температура синтеза составила  $820^\circ C$ .

Фазовый состав и кристаллическую структуру определяли рентгенографически, размер зерен порошков – методом лазерной дифракции. По результатам рентгенографического анализа было установлено, что ниобаты, допированные Fe или Zr образуют твердые растворы во всем