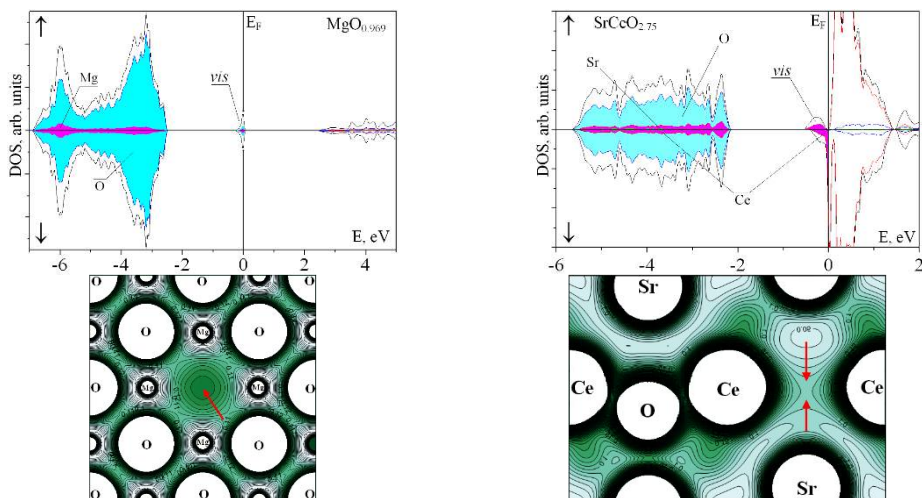


## ЗАКОНОМЕРНОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ШИРОКОЗОННЫХ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ОКСИДОВ: ОБОБЩЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ *AB INITIO* РАСЧЕТОВ И МОДЕЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ

Банников В.В.

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

Присутствие вакансий в кислородной подрешетке как бинарных, так и более сложных оксидов металлов может существенно сказываться на их транспортных, термодинамических, оптических, магнитных свойствах, на реакционной способности и т.д. Для репрезентативной выборки оксидов металлов с различной кристаллической структурой ( $\text{MgO}$ ,  $\text{TiO}_2$  (рутил),  $\text{ZnO}$ ,  $\text{Sr}(\text{Ba})\text{TiO}_3$ ,  $\text{La}_2\text{O}_3$ ,  $\text{LaZnAsO}$ ,  $\text{SrCeO}_3$  и т.д.), характеризующихся широкой запрещенной щелью, были выполнены *ab initio* расчеты их зонной структуры (метод FP-LAPW), на основании обобщения полученных результатов исследованы закономерности влияния кислородных вакансий на их зонный спектр и характер распределения зарядовой плотности в кристалле. В рамках упрощенной зонной модели на базе функций Ванье предложено наглядное квантовомеханическое описание механизма возникновения в спектре оксидов с дефицитом кислорода *вакансионно-индуцированных состояний* (см. рис.), позволяющее объяснить вариацию их положения в зависимости от параметров спектра исходной матрицы, а также различный характер локализации зарядовой плотности в позиции вакансий (причины “захвата электрона вакансией” или его отсутствия в различных матрицах).



Плотности электронных состояний (DOS) и распределение зарядовой плотности в соответствующих кристаллографических плоскостях нестехиометрических оксидов  $\text{MgO}_{0.969}$  и  $\text{SrCeO}_{2.75}$ . Позиции кислородных вакансий показаны стрелками, вакансионно-индуцированные состояния обозначены как *vis*