

УДК 541.16

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ДВОЙНЫХ ПЕРОВСКИТОВ  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  ( $M = \text{Sc}, \text{Ti}, \dots, \text{Ni}, \text{Cu}$ ) ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ЗОННЫХ РАСЧЕТОВ FLAPW-GGA**© 2008 **В.В. Банников, И.Р. Шенн, В.Л. Кожевников, А.Л. Ивановский\****Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург**Статья поступила 12 февраля 2008 г.*

С использованием *ab initio* зонного метода FLAPW-GGA исследованы закономерности изменения электронной структуры и магнитных характеристик двойных перовскитов  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  в зависимости от типа катиона  $M = \text{Sc}, \text{Ti}, \dots, \text{Ni}, \text{Cu}$ .

**Ключевые слова:** двойные перовскиты  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , зонная структура, магнетизм, моделирование.

**ВВЕДЕНИЕ**

Феррит стронция  $\text{SrFeO}_3$  привлекает значительный интерес как базисная фаза при разработке новых материалов различного назначения. Среди них — керамики со смешанным ионно-электронным типом проводимости, перспективные катодные и мембранные материалы, материалы для кислородных сенсоров, так называемые магнитные полуметаллы (МПМ, *magnetic half-metals*) — материалы спиновой электроники (спинтроники) и т.д. [ 1—9 ].

Одним из основных приемов модификации свойств ферритов стронция является допирование Fe-подрешетки атомами *d*-металлов, в том числе скандием [ 10 ], титаном [ 11 ], хромом [ 12 ], марганцем [ 13 ], кобальтом [ 14 ], медью [ 3 ], рядом атомов 4*d*- и 5*d*-металлов (см., например, [ 15—18 ]). При этом концентрация допантов *M* в составе синтезируемых твердых растворов  $\text{SrFe}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$  может достигать весьма значительных величин, вплоть до  $x \geq 0,5$  [ 13, 15—18 ], что в ряде случаев приводит к образованию упорядоченных фаз типа  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , которые известны как "двойные перовскиты" (*double perovskites*).

Большое внимание уделяется также так называемому мультикатионному допированию, когда достигается одновременное замещение части узлов подрешетки стронция и железа на разные катионы (например, фазы типа  $\text{La}_{0,3}\text{Sr}_{0,7}\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{O}_{2,65+\delta}$  [ 19 ]), или узлы подрешетки железа замещаются двумя типами различных катионов (например,  $\text{Sr}_2\text{Fe}_{1-x}\text{M}_x\text{ReO}_6$ , где  $M = \text{Cr}$  или  $\text{Zn}$  [ 20 ]) и т.д.

Вместе с тем подавляющее большинство полученных к настоящему дню материалов на основе допированного  $\text{SrFeO}_3$  [ 1—20 ] имеют сложный переменный химический состав, кроме того, во многих случаях наблюдаются структурные искажения, а также нестехиометрия по кислородной подрешетке.

Такой значительный набор различных (и переменных) факторов, особенно при мультикатионном допировании феррита, существенно затрудняет анализ природы изменения магнитных и электронных свойств исходной матрицы ( $\text{SrFeO}_3$ ), ответственных за физические свойства материалов на ее основе.

Поэтому целью настоящей работы является изучение в **рамках единой модели** закономерностей изменения электронной структуры и магнитных свойств в ряду допированных пере-

---

\* E-mail: ivanovskii@ihim.uran.ru

ходными металлами перовскитоподобных фаз  $\text{SrFe}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$  в зависимости от типа  $3d$ -атома  $\text{M} = \text{Sc}, \text{Ti}, \dots, \text{Ni}, \text{Cu}$ .

### МОДЕЛЬ И МЕТОД РАСЧЕТА

Для изучения электронных и магнитных свойств перовскитоподобных фаз  $\text{SrFe}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$  в зависимости от типа  $3d$ -допантов использована модель двойного перовскита  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  (что соответствует формальной стехиометрии твердых растворов  $\text{SrFe}_{0,5}\text{M}_{0,5}\text{O}_3$ ) с ГЦК-ячейкой (пространственная группа  $Fm\bar{3}m$ ), где атомы-компоненты располагались в позициях:  $\text{M} (0, 0, 0)$ ,  $\text{Fe} (\frac{1}{2}, 0, 0)$ ,  $\text{Sr} (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  и  $\text{O} (\frac{1}{4}, 0, 0)$  (рис. 1). В качестве допирующих элементов  $\text{M}$  рассмотрены все металлы  $3d$ -ряда ( $\text{Sc}, \text{Ti}, \dots, \text{Ni}, \text{Cu}$ ). Для выявления зависимости изменения свойств феррита от типа  $3d$ -допантов полагали, что все моделируемые  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  фазы 1) сохраняют упорядоченную кубическую структуру; 2) кислородные вакансии отсутствуют; и 3) реализуется ферромагнитный (ФМ) тип спинового упорядочения.

Расчеты проведены полнопотенциальным методом присоединенных плоских волн (FLAPW код WIEN2k [21]) с обобщенной градиентной аппроксимацией (GGA) обменно-корреляционного потенциала в форме PBE [22]. Радиусы атомных *muffin-tin* (MT) сфер составляли: 2,00 (Sr), 2,00 (Fe), 1,60 (O), 1,70 ( $\text{M} = \text{Sc}—\text{Cr}$ ) и 1,84 ат. ед. ( $\text{M} = \text{Mn}—\text{Cu}$ ). Набор плоских волн  $K_{\text{max}}$  определялся как  $R_{\text{MT}} \cdot K_{\text{max}} = 7,0$ . Интегрирование по зоне Бриллюэна (ЗБ) проведено методом тетраэдров с использованием сетки  $10 \times 10 \times 10$  для 47  $k$ -точек в неприводимой части ЗБ  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ . Критерий сходимости (для полной энергии) составлял 0,0001 Ry.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

**Зонная структура и магнитные моменты перовскита  $\text{SrFeO}_3$ .** Полные и парциальные плотности состояний (ПС) кубической фазы  $\text{SrFeO}_3$  представлены на рис. 2. В согласии с предшествующими данными (см. обзор в [23]) наши расчеты показали, что для ФМ  $\text{SrFeO}_3$  наиболее важен эффект спиновой поляризации для  $\text{Fe}3d$ -зон, в результате  $d_{\uparrow}$ -зона понижает, а  $d_{\downarrow}$ -зона повышает свою энергию. Магнитные моменты (ММ) на атомах железа составляют 2,86  $\mu_B$ . Расщепление  $\text{Fe}3d$ -состояний на пространственные и спиновые компоненты приводит

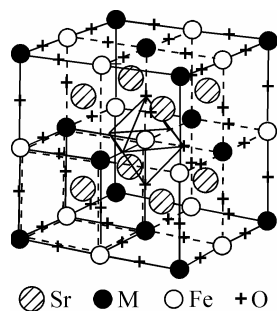
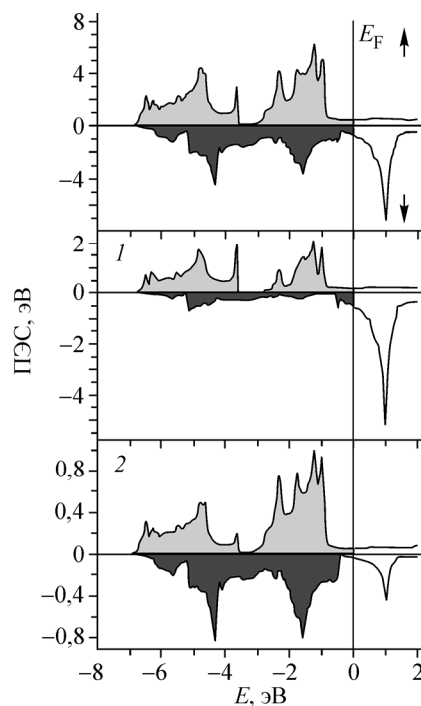


Рис. 1 (слева). Фрагмент кристаллической структуры двойного перовскита  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$

Рис. 2 (справа). Полная (вверху) и парциальные спиновые ПС кубического перовскитоподобного феррита стронция  $\text{SrFeO}_3$ . Приведены спиновые плотности: 1 —  $\text{Fe}3d$ - и 2 —  $\text{O}2p$ -состояний (в расчете на один атом)



Т а б л и ц а 1

Локальные магнитные моменты на атомах (ЛММ,  $\mu_B$ ) и полный магнитный момент ( $\mu_{tot}$ ,  $\mu_B$ /ячейка) для кубических перовскитоподобных фаз Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub>, где M = Sc, Ti, ..., Ni, Cu

Фаза	ЛММ *				Фаза	ЛММ *			
	M	Fe	O	$\mu_{tot}$ **		M	Fe	O	$\mu_{tot}$ **
Sr <sub>2</sub> FeScO <sub>6</sub>	-0,011	2,360	0,077	3,013	Sr <sub>2</sub> FeMnO <sub>6</sub>	3,108	2,656	0,107	6,998
Sr <sub>2</sub> FeTiO <sub>6</sub>	-0,040	1,661	0,050	2,017	Sr <sub>2</sub> FeCoO <sub>6</sub>	2,712	2,369	0,251	7,008
Sr <sub>2</sub> FeVO <sub>6</sub>	-0,157	2,929	0,068	3,251	Sr <sub>2</sub> FeNiO <sub>6</sub>	1,527	2,400	0,237	5,716
Sr <sub>2</sub> FeCrO <sub>6</sub>	1,518	3,128	0,064	5,473	Sr <sub>2</sub> FeCuO <sub>6</sub>	0,223	2,352	0,189	4,007

\* ЛММ стронция для всех фаз пренебрежимо мал ( $< 0,012 \mu_B$ ).

\*\* Полный магнитный момент в пересчете на ячейку.

к их гибридизации с  $2p$ -состояниями кислорода в интервале от  $-7$  эВ до  $E_F$  (см. рис. 2). В результате на атомах кислорода возникают незначительные индуцированные магнитные моменты ( $MM \sim 0,15 \mu_B$ ). Спиновые расщепления занятых состояний стронция практически отсутствуют (магнитный момент Sr  $\sim 0,01 \mu_B$ ). Вклады Sr $5s,5p$ -состояний в валентную область спектра крайне малы, т.е. стронций находится в катионной форме, близкой к Sr<sup>2+</sup>. В результате химическая связь в SrFeO<sub>3</sub> имеет комбинированный ковалентно-ионный тип, где связи Sr—O — ионные, а связи Fe—O имеют как ковалентную (за счет гибридизации Fe $3d$ —O $2p$ -орбиталей), так и ионную составляющие (за счет частичного переноса заряда в направлении Fe→O).

**Магнитные характеристики двойных перовскитов Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub> (M = Sc, Ti, ..., Ni, Cu).** Результаты расчета полных ( $\mu_{tot}$ , в расчете на элементарную ячейку) и локальных магнитных моментов (ЛММ) атомов компонентов в ряду двойных перовскитов Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub> (M = Sc, Ti, ..., Ni, Cu) представлены в табл. 1. Видно, что полный магнитный момент Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub> в зависимости от типа  $3d$ -металла M меняется немонотонно, достигая максимальной величины  $\mu_{tot} \sim 7,0 \mu_B$  для Sr<sub>2</sub>FeMnO<sub>6</sub> и Sr<sub>2</sub>FeCoO<sub>6</sub>. Для двойных перовскитов с участием металлов начала и конца  $3d$ -ряда  $\mu_{tot}$  оказывается существенно ниже, составляя около  $2,0 \mu_B$  (Sr<sub>2</sub>FeTiO<sub>6</sub>),  $3,0 \mu_B$  (Sr<sub>2</sub>FeScO<sub>6</sub>) и  $4,0 \mu_B$  (Sr<sub>2</sub>FeCuO<sub>6</sub>).

Происхождение указанной зависимости  $\mu_{tot}$  в ряду Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub> можно понять с учетом изменений ЛММ составляющих эти перовскиты атомов-компонентов. Из данных табл. 1 видно, что ЛММ стронция во всех фазах Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub> пренебрежимо малы, тогда как индуцированные ЛММ атомов кислорода меняются немонотонно, достигая максимальных значений для фаз с участием  $3d$ -металлов конца ряда. Однако их значения сравнительно невелики (не превосходят  $0,23$ — $0,25 \mu_B$ ) и мало влияют на общие изменения магнитных свойств в ряду перовскитов Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub>, определяемых, прежде всего, величинами ЛММ подрешеток, составленных атомами M и железа. Среди последних ЛММ атомов железа варьируются в интервале от  $1,66$  (Sr<sub>2</sub>FeTiO<sub>6</sub>) до  $3,12 \mu_B$  (Sr<sub>2</sub>FeCrO<sub>6</sub>), тогда как ЛММ атомов  $3d$ -металлов меняются от  $0,01$  до  $3,11 \mu_B$ . Так, для фаз Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub>, где M —  $3d$ -металлы начала ряда (Sc, Ti и V) или Cu, ЛММ этих M атомов малы и составляют  $0,01$ ,  $0,04$ ,  $0,16$  и  $0,22 \mu_B$  соответственно, причем для первых трех  $3d$ -металлов ЛММ ориентированы антипараллельно ЛММ атомов железа. Таким образом, общие магнитные свойства этих четырех перовскитов определяются магнетизмом подрешетки железа.

Для остальных фаз Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub>, где M = Cr, Mn, Co и Ni, ЛММ этих атомов ( $1,5$ — $3,1 \mu_B$ ) близки ЛММ атомов железа ( $2,4$ — $3,1 \mu_B$ ), и обе магнитные подрешетки (M и Fe) вносят сравнимые вклады в формирование общего  $\mu_{tot}$  фаз Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub>. При этом, если для Sr<sub>2</sub>FeCrO<sub>6</sub> и Sr<sub>2</sub>FeNiO<sub>6</sub> ЛММ (M) меньше, чем ЛММ (Fe), то для Sr<sub>2</sub>FeMnO<sub>6</sub> и Sr<sub>2</sub>FeCoO<sub>6</sub> ЛММ M-подрешеток оказываются больше, чем ЛММ подрешетки железа. Проанализировать указанные закономерности изменения магнитных характеристик в ряду двойных перовскитов Sr<sub>2</sub>FeMO<sub>6</sub> позволяют распределения их спиновых состояний, обсуждаемые далее.

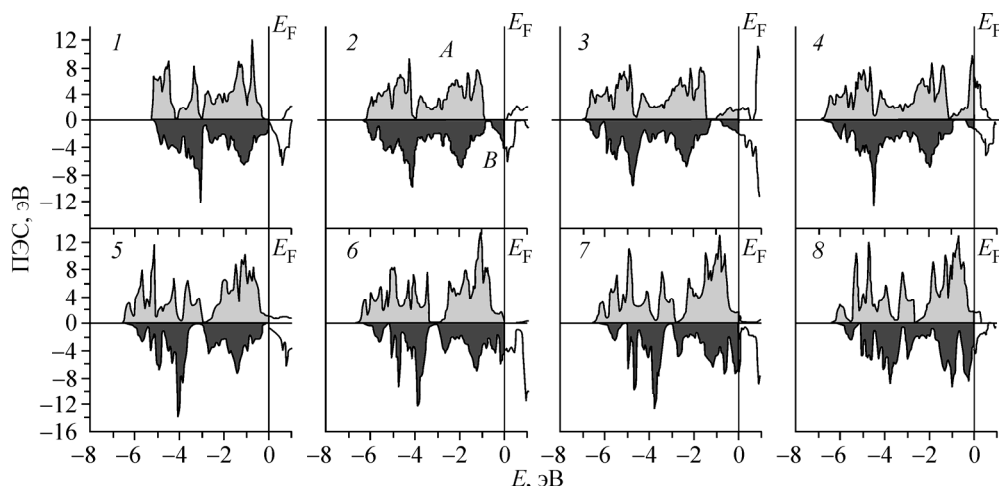


Рис. 3. Полные плотности спиновых состояний кубических перовскитоподобных фаз  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , где М: 1 — Sc, 2 — Ti, 3 — V, 4 — Cr, 5 — Mn, 6 — Co, 7 — Ni, 8 — Cu

**Электронная структура двойных перовскитов  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  ( $M = \text{Sc, Ti, \dots, Ni, Cu}$ ).** Результаты расчетов спиновых ПС перовскитов  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  приведены на рис. 3, величины ПС на уровне Ферми ( $N(E_F)$ ) — в табл. 2. При их обсуждении учтем, что весь ряд рассмотренных нами двойных перовскитов можно разделить (по отношению к исходной фазе  $\text{SrFeO}_3$ ) на две группы: 1) допированные дырками ( $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , где  $M = \text{Sc, Ti, \dots, Mn}$ ) или 2) допированные электронами ( $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , где  $M = \text{Co, Ni}$  и  $\text{Cu}$ ). Тогда, рассматривая весь ряд перовскитов  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  в рамках модели "жесткой зоны", можно утверждать, что для первой группы фаз за счет "дефицита" электронов (по отношению к концентрации валентных электронов (КВЭ) на ячейку исходного перовскита  $\text{SrFeO}_3$ ) будет происходить "опустошение" валентной полосы, тогда как для второй группы фаз, где КВЭ больше, чем для  $\text{SrFeO}_3$ , — дополнительное заполнение этой полосы. В рамках данной модели, исходя из вида электронного спектра  $\text{SrFeO}_3$  (см. рис. 1), следует ожидать, что все двойные перовскиты будут обладать металлоподобным типом спектра.

Численные расчеты FLAPW-GGA  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  обнаруживают более сложную картину (см. рис. 3). Как видно, в спектре  $\text{Sr}_2\text{FeScO}_6$  между полностью занятыми и свободными состояниями со спином "вверх" формируется значительная запрещенная щель (ЗЩ)  $\sim 1,0$  эВ, тогда как для состояний со спином "вниз" их плотность на уровне Ферми близка к нулю. Таким образом,  $\text{Sr}_2\text{FeScO}_6$  является бесщелевым магнитным полупроводником. Принципиально иную электронную структуру имеет  $\text{Sr}_2\text{FeTiO}_6$ , для которого полоса состояний со спином "вверх" (полоса А, см. рис. 3) полностью заполнена и имеет ЗЩ, тогда как для полосы со спином "вниз" с ростом КВЭ начинает заполняться ее верхний свободный (для  $\text{Sr}_2\text{FeScO}_6$ ) край (подполоса В, см. рис. 3). В результате спектр  $\text{Sr}_2\text{FeTiO}_6$  имеет металлический тип для одной спиновой подсистемы (плотность носителей на уровне Ферми  $N_{\downarrow}(E_F) > 0$ ), но содержит запрещенную щель

Т а б л и ц а 2

Полные плотности спиновых состояний на уровне Ферми ( $N_{\uparrow,\downarrow}(E_F)$ , в сост./эВ·ячейка) для кубических перовскитоподобных фаз  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , где  $M = \text{Sc, Ti, \dots, Ni, Cu}$

Фаза	$N_{\uparrow}(E_F)$	$N_{\downarrow}(E_F)$	Тип системы	Фаза	$N_{\uparrow}(E_F)$	$N_{\downarrow}(E_F)$	Тип системы
$\text{Sr}_2\text{FeScO}_6$	0	0,044	Магнитный полупроводник	$\text{Sr}_2\text{FeMnO}_6$	1,024	0,137	Магнитный металл
$\text{Sr}_2\text{FeTiO}_6$	0	4,325	Магнитный полуметалл	$\text{Sr}_2\text{FeCoO}_6$	0,047	4,536	То же
$\text{Sr}_2\text{FeVO}_6$	1,480	1,836	Магнитный металл	$\text{Sr}_2\text{FeNiO}_6$	1,630	7,553	»
$\text{Sr}_2\text{FeCrO}_6$	10,621	1,203	То же	$\text{Sr}_2\text{FeCuO}_6$	1,518	3,653	»

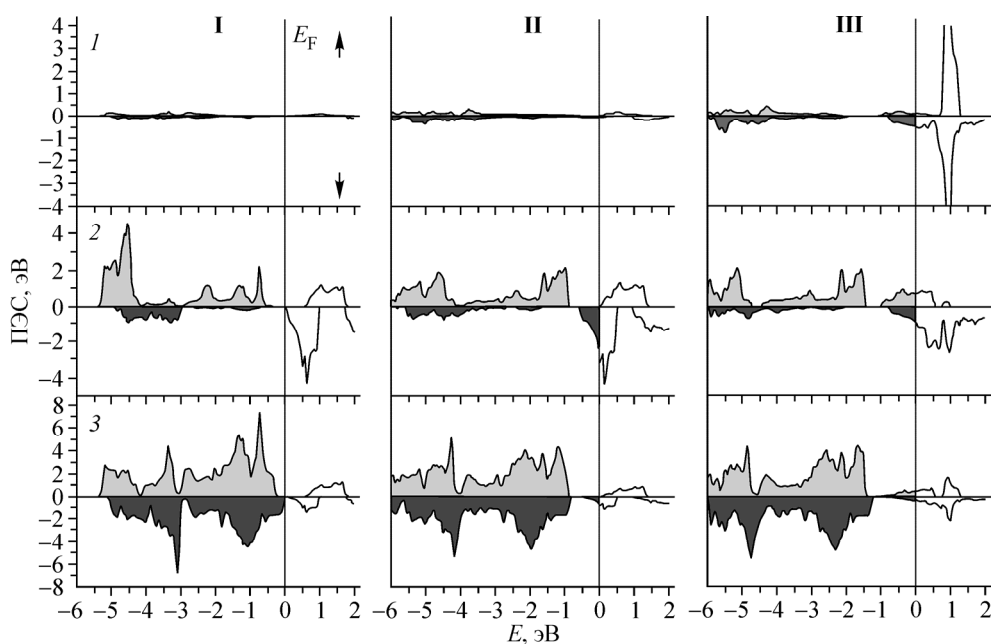


Рис. 4. Парциальные плотности спиновых состояний кубических перовскитоподобных фаз: I —  $\text{Sr}_2\text{ScFeO}_6$ ; II —  $\text{Sr}_2\text{TiFeO}_6$ ; III —  $\text{Sr}_2\text{VFeO}_6$ . Приведены спиновые плотности: 1 —  $(\text{Sc, Ti, V})3d$ , 2 —  $\text{Fe}3d$  и 3 — кислорода

для противоположной проекции спина ( $N_{\uparrow}(E_F) = 0$ ). Такие материалы со 100%-й спиновой поляризацией прифермиевских электронов известны как магнитные полуметаллы (обзор [9]). Все остальные перовскиты  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  имеют ненулевую плотность носителей на уровне Ферми для обеих спиновых подсистем ( $N_{\uparrow,\downarrow}(E_F) > 0$ , см. табл. 2), т.е. являются магнитными металлами.

Более детально формирование отмеченных трех типов магнетиков — магнитного полупроводника, полуметалла и металла — можно проследить на рис. 4, где приведены парциальные ПС двойных перовскитов с участием  $3d$ -металлов начала ряда:  $\text{Sr}_2\text{FeScO}_6$ ,  $\text{Sr}_2\text{FeTiO}_6$  и  $\text{Sr}_2\text{FeVO}_6$ . Видно, что для  $\text{Sr}_2\text{FeScO}_6$  вклад  $\text{Sc } 3d$ -состояний в область заполненной зоны мал, а валентная полоса формируется в основном за счет  $\text{Fe}3d_{\uparrow,\downarrow}$ - и  $\text{O}2p$ -состояний. Примечательно, что верхний край валентной зоны этой фазы составлен исключительно  $\text{O}2p_{\downarrow}$ , а нижний край зоны проводимости — смешанными  $\text{Fe}3d_{\downarrow}$ — $\text{O}2p_{\downarrow}$ -состояниями.

При переходе к  $\text{Sr}_2\text{FeTiO}_6$  примесь  $\text{Ti}3d$ -состояний к валентной полосе остается незначительной, а рост КВЭ приводит к отмеченному ранее заполнению нижней части  $\text{Fe}3d_{\downarrow}$ — $\text{O}2p_{\downarrow}$ -полосы. Спектр электронных состояний этой фазы приобретает полуметаллический тип:  $N_{\downarrow}(E_F) > 0$  и  $N_{\uparrow}(E_F) = 0$ .

Начиная со  $\text{Sr}_2\text{FeVO}_6$  дальнейшая эволюция спектра двойных перовскитов определяется двумя основными факторами: ростом КВЭ, т.е. прогрессирующим заполнением валентной полосы, и существенными вкладами в валентную полосу  $\text{M}3d_{\uparrow,\downarrow}$ -состояний. Из рис. 3 и 4 видно, что для  $\text{Sr}_2\text{FeVO}_6$  пик плотности  $\text{V}3d_{\uparrow,\downarrow}$ -состояний расположен на  $\sim 1$  эВ выше  $E_F$ , тогда как для  $\text{Sr}_2\text{FeCrO}_6$  пик плотности состояний хрома находится непосредственно в области  $E_F$ , внося максимальный вклад в  $N_{\uparrow}(E_F)$  (см. табл. 2). По мере роста порядкового номера  $3d$ -элементов их орбитальные энергии понижаются, т.е. плотность  $\text{M}3d_{\uparrow,\downarrow}$ -состояний сдвигается вглубь валентной зоны. При этом с увеличением КВЭ происходит последовательное заполнение сначала зоны  $\text{M}3d_{\uparrow}$ , затем  $\text{M}3d_{\downarrow}$ -состояний (см. рис. 3), что и определяет отмеченную ранее закономерность в изменении ЛММ в ряду фаз  $\text{Sr}_2\text{FeCrO}_6$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе с использованием *ab initio* зонного метода FLAPW-GGA проведен анализ закономерности изменения электронных и магнитных свойств кубических перовскито-подобных фаз  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , где  $M = \text{Sc}, \text{Ti}, \dots, \text{Ni}, \text{Cu}$ .

Найдено, что **в зависимости от типа 3d-атомов** фазы  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ :

1) могут проявлять свойства трех типов магнетиков — магнитного полупроводника, полуметалла и металла;

2) магнитные свойства фаз  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , где  $M = 3d$ -металлы начала ряда (Sc, Ti и V) или Cu, определяются магнетизмом подрешетки железа;

3) магнитные свойства фаз  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , где  $M = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Co}$  и  $\text{Ni}$ , определяются сравнимыми вкладами магнитных подрешеток атомов  $M$  и железа, причем локальные магнитные моменты атомов  $M$  могут быть как больше ( $\text{Sr}_2\text{FeMnO}_6$  и  $\text{Sr}_2\text{FeCoO}_6$ ), так и меньше ( $\text{Sr}_2\text{FeCrO}_6$  и  $\text{Sr}_2\text{FeNiO}_6$ ) магнитных моментов атомов железа;

4) закономерности формирования электронного спектра и магнитных характеристик фаз  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$  зависят от двух факторов: концентрации валентных электронов (на ячейку перовскита) и порядкового номера (орбитальной энергии 3d-состояний) атомов  $M$ . Первый фактор регулирует общую степень заполнения валентной полосы  $\text{Sr}_2\text{FeMO}_6$ , второй определяет степень примешивания  $M3d_{\uparrow, \downarrow}$ -состояний к валентной полосе феррита стронция.

Следующий этап нашей работы предусматривает выявление зависимости изменения свойств допированных ферритов от концентрации 3d-допантов и наличия кислородных вакансий, т.е. факторов, которые могут оказать существенное влияние на функциональные характеристики реально синтезируемых материалов.

Работа поддержана программой РАН "Водородная энергетика".

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Patrakeev M.V., Leonidov I.A., Kozhevnikov V.L., Kharton V.* // Solid State Sciences. – 2004. – **6**, N 9. – P. 907 – 913.
2. *Oleynikov N.N., Ketsko V.A.* // Russ. J. Inorg. Chem. – 2004. – **49**, Suppl. 1. – P. S1 – S21.
3. *Zhang X., Dong X.F., Lin W.M.* // J. Inorg. Mater. – 2007. – **22**, N 1. – P. 97 – 100.
4. *Rothschild A., Litzelman S.J., Tuller H.L. et al.* // Sensors Actuators. – 2005. – **108**, N 1-2. – P. 223 – 230.
5. *Carvajal E., Navarro O., Allub R. et al.* // Europ. Phys. J. – 2005. – **B48**, N 2. – P. 179 – 187.
6. *Шеин И.Р., Кожевников В.Л., Ивановский А.Л.* // Письма в ЖЭТФ. – 2005. – **82**, № 4. – С. 239 – 242.
7. *Шеин И.Р., Кожевников В.Л., Ивановский А.Л.* // Физ. тех. полупровод. – 2006. – **40**, № 11. – С. 1295 – 1299.
8. *Fisher B., Genossar J., Chashka K.B. et al.* // Curr. Appl. Phys. – 2007. – **7**, N 2. – P. 151 – 155.
9. *Ивановский А.Л.* // Успехи физ. наук. – 2007. – **177**, № 10. – С. 1083 – 1105.
10. *Markov A.A., Patrakeev M.V., Kharton V.V. et al.* // Chem. Mater. – 2007. – **19**, N 16. – P. 3980 – 3987.
11. *Tsipis E.V., Patrakeev M.V., Kharton V. et al.* // Solid State Sci. – 2005. – **7**, N 4. – P. 355 – 365.
12. *Ming Q., Hung J., Yang Y.L. et al.* // Combustion Sci. Technol. – 1998. – **138**, N 1-6. – P. 279 – 296.
13. *Lee H.J., Kim G., Kang J.S. et al.* // J. Appl. Phys. – 2007. – **101**, N 9. – art. 09G523.
14. *Munoz A., Alonso J.A., Martinez-Lope M. J. et al.* // J. Solid State Chem. – 2006. – **179**, N 11. – P. 3365 – 3370.
15. *Zhong W., Liu W., Wu X.L. et al.* // Solid State Comm. – 2004. – **132**, N 3-4. – P. 157 – 162.
16. *Herrero-Martin J., Garcia J., Subias G. et al.* // J. Phys.: Cond. Matter. – 2004. – **16**, N 39. – P. 6877 – 6890.
17. *Sher F., Venimadhav A., Blamire M.G. et al.* // Chem. Mater. – 2005. – **17**, N 1. – P. 176 – 180.
18. *Chan T.S., Liu R.S., Guo G.Y. et al.* // Solid State Comm. – 2005. – **133**, N 4. – P. 265 – 270.
19. *Patrakeev M.V., Mitberg E.B., Lakhtin A.A. et al.* // J. Solid State Chem. – 2002. – **167**, N 1. – P. 203 – 213.
20. *Jung A., Bonn I., Ksenofontov V. et al.* // J. Mater. Chem. – 2005. – **15**, N 17. – P. 1760 – 1768.
21. *Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H. et al.* In: WIEN2K, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties / Ed. K. Schwarz. – Techn. Universität Wien: Austria, 2001.
22. *Perdew J.P., Burke S., Ernzerhof M.* // Phys. Rev. Lett. – 1996. – **77**, N 18. – P. 3865 – 3868.
23. *Шеин И.Р., Шеин К.И., Кожевников В.Л., Ивановский А.Л.* // Физика твердого тела. – 2005. – **47**, № 11. – С. 1998 – 2003.