Сапова Мария Дмитриевна

Выпускница кафедры квантовой химии Института химии СПбГУ. Выпускная квалификационная работа «Квантовохимическое моделирование твердых растворов на основе галлата и алюмината лантана» была выполнена под руководством к.х.н., доцента кафедры квантовой химии Бандуры Андрея Виловича при сотрудничестве с кафедрой неогранической химии.

Экспериментально показано, что допирование железом в случае галлата, в отличие от алюмината, приводит к образованию кластеров железа и возникновению различий в магнитных свойствах. *Целью* работы являлось моделирование 50% твердых растворов и их свойств.

Было установлено, что спиновая поляризация электронных состояний Fe по-разному проявляется в алюминатах и галлатах. При фиксированном окружении для обоих систем энергия линейно уменьшается при увеличении количества троек Fe–O–Fe с суммарной нулевой проекцией спина, что указывает на однопараметрическую модель. Угол наклона прямой зависит от конкретного окружения, т.е. от общего числа троек каждого типа Fe–O–Fe, Fe–O–Ga(Al), Ga–O–Ga (Al–O–Al).

Расчеты показали, что для $LaGa_{0.5}Fe_{0.5}O_3$ характерна кластеризация атомов железа в структуре раствора в отличие от $LaAl_{0.5}Fe_{0.5}O_3$. Значение проекции магнитного момента при фиксированной температуре оказывается более высоким в случае алюмината лантана.

В магистратуре предполагается продолжение исследования твердых растворов с увеличением рассматриваемой ячейки. Интересным является построение модели на основе проведенных расчетов.