

2010.g. uzdevums:

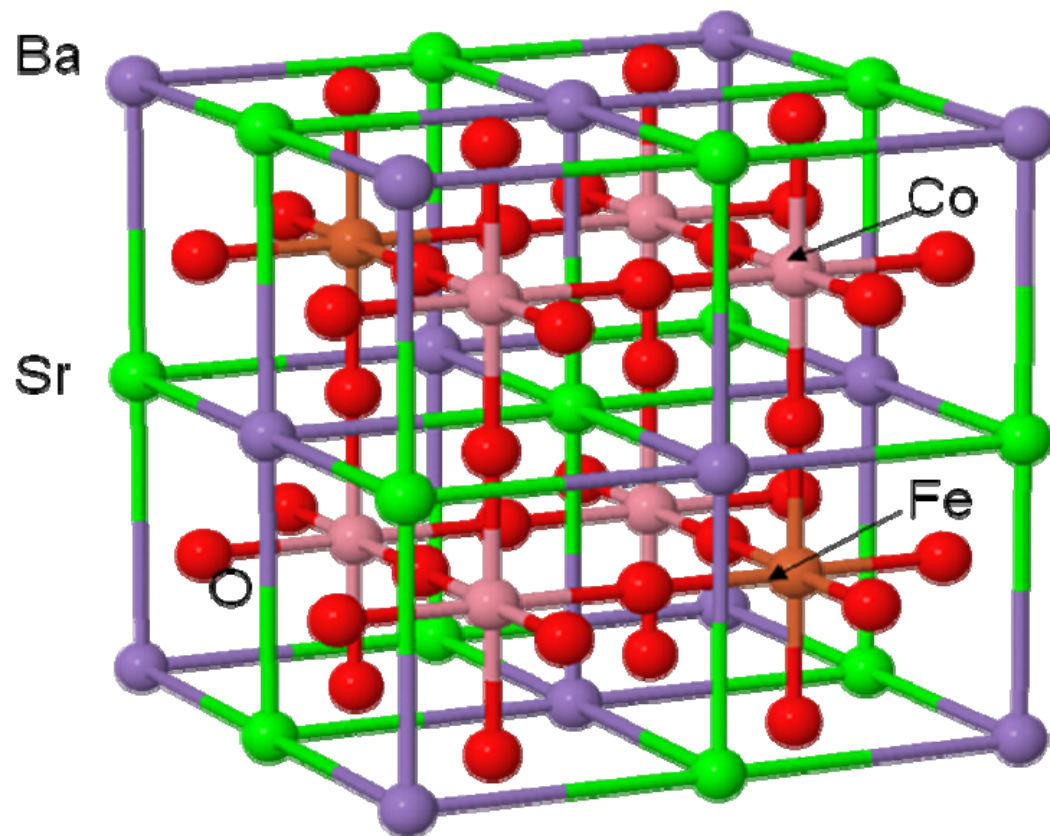
Aprēķināt no pirmiem principiem jauna keramiskas membrānas materiāla– kompleksa perovskita $(\text{Ba}, \text{Sr})(\text{Co}, \text{Fe})\text{O}_3$ [BSCF]-- atomāro un elektronisko struktūru un ka materiāla nestehiometrija (defektu koncentrācija) ietekmē materiāla transporta īpašības

Viena no 21. gadsimta fundamentālām problēmām ir CO₂ emisijas samazināšana enerģijas un elektrības radīšanas laikā.

Ogļu un citu līdzīgu staciju gadījumā to varētu sasniegt, izmantojot **keramiskas membrānas**, kas filtrē CO₂, bet skābekli izlaiž gaisā.

Viens no daudzsološākajām membrānu materiāliem ir multikomponentu perovskīti (BaSr)(CoFe)O₃ (**BSCF**) un (LaSr)(CoFe)O₃ (**LSCF**).

BSCF struktura



Galvenie rezultāti

- Atrasts, ka skābekļa vakanču formēšanās enerģijas BSCF materialā ir ievērojami mazākas kā citos ABO₃ magnētiskos perovskītos, piem.(La,Sr)MnO₃, kas izskaidro šī materiāla eksperimentāli novērojamās novirzes no stehiometrijas kā arī izskaidro BSCF membrānu augsto efektivitāti.
- Augsta O vakanču koncentrācija izraisa režģa konstantes palielināšanos (kristāla izplešanos), kas sakrīt ar eksperimentu.
- Skābekļa vakances inducē režģa lokālas deformācijas un lādiņa pārdalīšanos starp diviem tuvākajiem B-tipa katjoniem, saskaņā ar Rentgena absorbcijas eksperimentiem XANES enerģiju apgabalā.

Nobeigums.

Liela mēroga paralēli datoru aprēķini no pirmiem principiem apstiprina un izskaidro iepriekš zināmus eksperimentālus datus par daudzsoļu keramiskas membrānas materiālu (BSCF), **prognozē** labāko membrānas ķīmisko sastāvu (50-50-20-80%), un dot XANES eksperimentālo datu interpretāciju.

- **Publikācija**

Yu.A. Mastrikov, M.M. Kuklja, E.A. Kotomin, and J. Maier, First-principles modelling of complex perovskite

$(\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x)(\text{Co}_{1-y}\text{Fe}_y)\text{O}_3$ for solid oxide fuel cell and gas separation membrane applications. –

Energy & Environmental Science, 2010, **3**,
p. 1544–1550.