**Экспериментальное изучение и квантово-химические расчеты слоистых перовскито-подобных ниобатов калия и рубидия**

***Новиков С.С.1,2, Эварестов Р.А.1*, *Зверева И.А.1,2***

*Студент, 4 курс бакалавриата*

*1Санкт-Петербургский государственный университет, Институт Химии, Российская Федерация, Санкт-Петербург.*

*2Институт Химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук, Российская Федерация, Гатчина*

*E-mail:* *silvestr-novikov@inbox.ru*

В наши дни остро стоит вопрос получения экологически чистых источников энергии. Одним из множества путей решения данной проблемы является разработка методик, включающих в себя применение фотохимических процессов. Среди многих особое внимание уделяется фотокатализаторам на основе слоистых перовскито-подобных оксидов, высокая активность которых объясняется как уникальностью их структуры перовскитного слоя, так и составляющими компонентами межслоевого пространства [1].

В рамках экспериментальной части данной работы путем керамического синтеза были получены слоистые перовскито-подобные оксиды состава ACa2Nb3O10 (A=Rb, K) [2], структура которых подтверждалась методом рентгенофазового анализа. Для данных кристаллов были определены ширина запрещённой зоны методом спектроскопии диффузного отражения, край валентной зоны методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, и зависимость теплоемкости от температуры для RbCa2Nb3O10 методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Значения ширины запрещенной зоны для указанных оксидов составили 3,5 eV (KCa2Nb3O10) и 3,47 eV (RbCa2Nb3O10), края валентной зоны -4,5 eV для обоих перовскитов. Результаты ДСК показали наличие фазовых переходов в RbCa2Nb3O10 при 272,68 ºК и 413,96 ºК.

В теоретической части данного исследования приводились расчеты электронных, структурных и фононных свойств в программном пакете CRYSTAL17, методом DFT, с использованием HSE06 функционала. Ввиду крайне малых литературных данных, касающихся расчетов указанных систем, для убеждения в качестве подобранной расчетной схемы сначала были исследованы не слоистые перовскиты KNbO3 и RbNbO3 во всех существующих фазах. Расчетная схема смогла грамотно воспроизвести значения ширины запрещенной зоны и структурных параметров, а также картину фазовых переходов данных кристаллов, что подтверждалось наличием мнимых частот в дисперсиях фононов в неустойчивых высокотемпературных фазах. При изучении слоистых перовскито-подобных ниобатов было определено, что функционал HSE06 в нужной степени воспроизводит поведение данных кристаллов. В частности, рассчитанная величина ширины запрещенной зоны находится в хорошем согласии с экспериментальными данными, также как положение краев энергетических зон. Данные расчеты позволяют объяснить причину значительно большей фотокаталитической активности KCa2Nb3O10, так как согласно зонным структурам, данное соединение представляет из себя прямозонный полупроводник. Из расчета дисперсионных кривых и частот в отдельных точках зоны Бриллюэна, было установлено, что обе исследуемые системы должны претерпевать фазовый переход при понижении температуры.

*Работа выполнена с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Рентгенодифракционные методы исследования», «Термогравиметрические и калориметрические методы исследования», «Физические методы исследования поверхности», при поддержке РНФ (проект №19-13-00184-П)*

**Литература**

1. Cieśla P. et al. Homogeneous photocatalysis by transition metal complexes in the environment / J Mol Catal. A Chem. 2004. Vol. 224, P. 17–33.

2. Fukuoka H., Isami T., Yamanaka S. Crystal structure of a layered perovskite niobate KCa2Nb3O10 / J Solid State Chem. Academic Press Inc., 2000. Vol. 151, P. 40–45.