

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ГРАФИТОПОДОБНОГО НИТРИДА УГЛЕРОДА С УЧЕТОМ ВАРЬИРОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

Ильяшенко И.Н.<sup>1</sup>, Мартемьянов Н.А.<sup>1</sup>, Ищенко А.В.<sup>1</sup>, Звонарев С.В.<sup>1,2</sup>,  
Вайнштейн И.А.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>) НОЦ НАНОТЕХ, Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>) Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", г. Москва,  
Россия

<sup>3</sup>) Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: i.n.ilyashenko@urfu.ru

## DFT-MODELLING OF G-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> ELECTRONIC STRUCTURE ALLOWING FOR POLYMERIZATION TEMPERATURE VARIATION

Ilyashenko I.N.<sup>1</sup>, Martemianov N.A.<sup>1</sup>, Ischenko A.V.<sup>1</sup>, Zvonarev S.V.<sup>1,2</sup>,  
Weinstein I.A.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>) NANOTECH Centre, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

<sup>2</sup>) National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

<sup>3</sup>) Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
Ekaterinburg, Russia

We have studied electronic band structure of g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> using DFT method. It is found that energies of both direct and indirect optical transitions are decreasing linearly for samples synthesized at different temperatures. The results obtained are consistent with the experimental estimations.

Графитоподобный нитрид углерода (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) привлекает внимание исследователей как перспективный материал для применений в фотокатализе, при производстве водорода в реакциях разложения воды, для создания эффективных устройств опто- и наноэлектроники. Понимание закономерностей формирования оптических и электронных свойств и их зависимости от условий синтеза позволит создавать функциональные среды на основе g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> с желаемыми характеристиками. В данной работе для образцов g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, синтезированных при разных температурах полимеризации Т<sub>р</sub>, выполнены расчеты особенностей электронного строения с использованием метода теории функционала плотности (DFT).

Ранее [1] с использованием рентгеновской дифракции было показано, что полимеризованные цепочки мелона являются основными структурными единицами для образцов g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, синтезированных путем термической поликонденсации мочевины при температурах Т<sub>р</sub> в диапазоне 450–600°C. Было показано, что с увеличением Т<sub>р</sub> указанные цепочки удаляются друг от друга, тогда как слои сближаются между собой.

С учетом вышеуказанного в данной работе построены модельные структуры на основе мелоновых цепочек в ортогональной решетке с варьируемыми параметрами ячейки  $a = 15.8\text{--}16.4$ ,  $b = 12.1$ ,  $c = 3.287\text{--}3.25$  Å, которые соответствуют различным значениям  $T_r$ . DFT-моделирование электронной структуры проведено в программном пакете с открытым исходным кодом Quantum ESPRESSO. Для расчетов использован гибридный функционал B3LYP, выбрана граничная энергия 60 Ry, методом Монкхорста-Пака задана сетка  $k$ -точек размерностью  $2 \times 2 \times 10$  для интегрирования по зоне Бриллюэна. Результаты моделирования проанализированы в рамках сравнения с экспериментальными данными нашей работы [2], в которой оценки ширины энергетической щели синтезированных структур  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  были выполнены с помощью спектроскопии диффузного отражения.

На основе моделирования электронных состояний в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна показано наличие непрямого перехода  $Z\text{--}\Gamma$ , ширина которого линейно снижается в диапазоне  $2.77\text{--}2.67$  эВ с ростом температурного параметра  $T_r$ . Установлено, что подобным образом изменяются энергии непрямых переходов  $X\text{--}\Gamma$  ( $4.19\text{--}4.16$ ),  $Y\text{--}\Gamma$  ( $4.51\text{--}4.49$ ) и прямого перехода  $\Gamma\text{--}\Gamma$  ( $4.18\text{--}4.16$  эВ), которые при этом значительно превосходят соответствующие экспериментальные оценки:  $2.84\text{--}2.72$  эВ для непрямых разрешенных переходов и  $3.07\text{--}3.01$  эВ для прямых разрешенных переходов [2].

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства "Приоритет-2030".*

1. Ильяшенко И. Н., Мартемьянов Н.А., Камалов Р.В., Вохминцев А.С., Ищенко А.В., Вайнштейн И.А., Физика. Технологии. Инновации: тезисы докладов XI Международной молодежной научной конференции, С. 194–195 (2022)
2. Мартемьянов Н.А., Ильяшенко И. Н., Камалов Р.В., Ищенко А.В., Вайнштейн И.А., Влияние температуры синтеза на собственную люминесценцию  $g\text{-C}_3\text{N}_4$ , Известия Российской академии наук. Серия физическая, Т. 86, С. 1435–1440 (2022)