

Национальный исследовательский Томский государственный университет

**Новые катализаторы и каталитические процессы для
решения задач экологически чистой и
ресурсосберегающей энергетики**

Сборник тезисов докладов научной школы молодых ученых

9 – 10 сентября 2021

Томск 2021

Квантово-химическое моделирование интерфейса γ - $\text{Bi}_2\text{O}_3/\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$

Е. А. Ковалева*, В. А. Светличный, О. В. Водянкина

Томский Государственный Университет, Томск, Россия

*kovaleva.evgeniya1991@mail.ru

При помощи теории функционала плотности исследована атомная и электронная структура поверхностей оксида висмута γ - Bi_2O_3 (001) и силленита $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ (001), а также интерфейса на их основе. Указанные соединения обладают сходной структурой и близкими параметрами кристаллической решетки, что позволяет рассматривать интерфейс между ними в качестве модели формирования границы раздела между оксидной и силикатной фазами при образовании Bi -содержащих композитов, обладающих фотокаталитической активностью.

Расчеты проводились в программном пакете VASP при помощи обменно-корреляционного функционала PBE в рамках обобщенно-градиентного приближения с использованием базиса плоских волн и PAW-метода. Для учета дисперсионных взаимодействий между поверхностями была использована коррекция D3-BJ.

На начальном этапе работы было проведено моделирование элементарных ячеек γ - Bi_2O_3 и $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$. Полученные в ходе расчетов параметры решетки и зонные структуры согласуются с имеющимися литературными данными. Далее была проведена оптимизация поверхностей (001), полученных путем среза вдоль соответствующей кристаллографической плоскости. На основе полученных пластин был сформирован интерфейс γ - $\text{Bi}_2\text{O}_3/\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$.

В работе обсуждены электронные свойства отдельных поверхностей и их изменения при образовании интерфейса, проанализированы ключевые особенности зонной структуры всех рассмотренных систем.

Работа была поддержана грантом РФФ №19-73-30026.