

PCFC. This PCFC demonstrates relatively high electrochemical characteristics, indicating that BCZYFe0.6 might be a promising cathode material having high chemical compatibility due to the same basic structure with Ba(Ce,Zr)O<sub>3</sub> electrolytes and the same constituting ions.

This work was supported by the Grants of the President of the Russian Federation for young candidates (Grant, № МК-1654.2019.3).

### References

1. *Fabrizi E., Pergolesi D., Traversa E.* // Sci. Technol. Adv. Mater. 2010. V. 11. P. 044301.
2. *Zohourian R., Merkle R., Raimondi G., Maier J.* // Adv. Funct. Mater. 2018. V. 28. P. 1801241.
3. *Tao Z., Bi L., Zhu Z., Liu W.* // J. Power Sources. 2009. V. 194. P. 801–804.
4. *Wu Y., Hou J., Gong Z., Miao L., Tang H., Liu W.* // J. Alloys Compd. 2019. V. 790. P. 551–557.
5. *Wei K., Li N., Wu Y., Song W., Wang X., Guo L., Ling Y.* // Ceram. Int. 2019. V. 45. P. 18583.
6. *Wu Y., Li K., Yang Y., Song W., Ma Z., Chen H., Ling Y.* // J. Alloys Compd. 2020. V. 814. P. 152220.
7. *Yang L., Wang S., Lou X., Liu M.* // Int. J. Hydrogen Energy. 2011. V. 36. P. 2266–2270.
8. *Shimura T., Tanaka H., Matsumoto H., Yogo T.* // Solid State Ionics. 2005. V. 176. P. 2945–2950.

УДК 546.03

### ШИРИНА ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ СОЕДИНЕНИЙ SrScCuS<sub>3</sub> и EuScCuS<sub>3</sub>

А.С. Александровский<sup>1</sup>, М.В. Григорьев<sup>2</sup>, Н.Г. Максимов<sup>3</sup>,  
А.В. Русейкина<sup>2\*</sup>

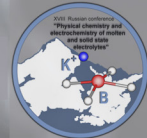
<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

<sup>3</sup>Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск, Россия

\*e-mail: [adeschina@mail.ru](mailto:adeschina@mail.ru)

Новые сложные сульфиды SrScCuS<sub>3</sub> и EuScCuS<sub>3</sub> относятся к ромбической сингонии, их кристаллы изоструктурны (пр. гр. Смет, структурный тип KZrCuS<sub>3</sub>), параметры э.я.: a = 3.83413(3) Å, b = 12.8625(1) Å, c = 9.72654(8) Å (SrScCuS<sub>3</sub>) and a = 3.83066(8) Å, b = 12.7721(3) Å, c = 9.7297(2) Å (EuScCuS<sub>3</sub>).



Спектр диффузного отражения соединений  $\text{AScCuS}_3$  ( $A = \text{Eu}, \text{Sc}$ ) измеряли с использованием спектрометра Shimadzu UV-3600. Спектры отражения  $\text{SrScCuS}_3$  и  $\text{EuScCuS}_3$  представлены на рис.1а. Соответствующие функции Кубелки-Мунка изображены на рис.1б.

Проводились теоретические расчёты электронной структуры для данных сложных сульфидов в рамках теории функционала плотности (DFT). Использовался обменно-корреляционный функционал B3LYP, который учитывает как локальные, так и нелокальные обмены Хартри-Фока. Расчеты проводились в программе CRYSTAL17.[1]

При изучении ИК спектров соединений обнаружена пониженная отражательная способность в ближней инфракрасной области спектра. Это подразумевает наличие поглощения в инфракрасном диапазоне, которое должно отсутствовать в соответствии с теоретическими расчётами зонной структуры у идеальных кристаллических структур. Дополнительное инфракрасное поглощение связано с дефектами кристаллической структуры, которые часто имеют место в сульфидах [2].

Из графиков Кубелки-Мунка оценены значения ширины запрещенной зоны, которые составили 2,24 эВ для  $\text{SrScCuS}_3$  и 1,63 эВ для  $\text{EuScCuS}_3$ , причем экспериментальное значение для  $\text{EuScCuS}_3$  довольно близко к оптимальному значению, рекомендованному для фотоэлектрических материалов.

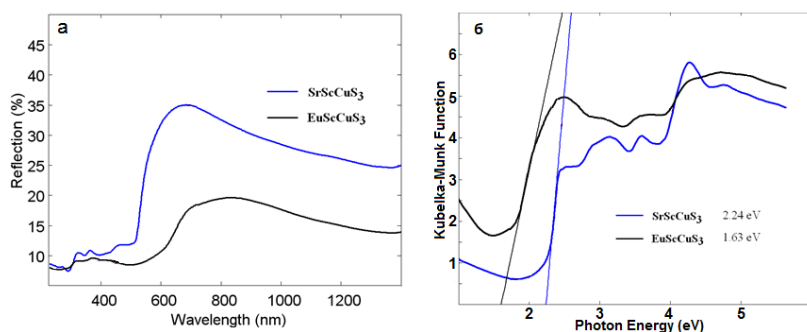


Рисунок 1. а) Спектры отражения  $\text{SrScCuS}_3$  и  $\text{EuScCuS}_3$ ; б) функции Кубелки-Мунка.

Зонная структура, полученная при расчетах в рамках DFT с функционалом B3LYP, показана на рис.2. Путь в зону Бриллюэна строился через наиболее высоко симметричные точки для ромбической решетки. Путь проложен через  $\Gamma$ -Y-T-Z-S-R- $\Gamma$ . Координаты точек:  $(0,0,0)$ ,  $(1/2,1/2,0)$ ,  $(1/2,1/2,1/2)$ ,  $(0,0,1/2)$ ,  $(0,1/2,0)$ ,  $(0,1/2,1/2)$ ,  $(0,0,0)$  соответственно. Рассчитанная ширина запрещенной зоны 2,38 эВ для  $\text{SrScCuS}_3$  и 2,78 эВ для  $\text{EuScCuS}_3$ . Ширина запрещенной зоны определялась как раз-



ность энергий между вершиной валентной зоны и нижней частью зоны проводимости («НОМО-LUMO»). Расчет проводился для идеальной кристаллической структуры. В этом случае f-орбитали редкоземельного иона были заменены псевдопотенциалом.

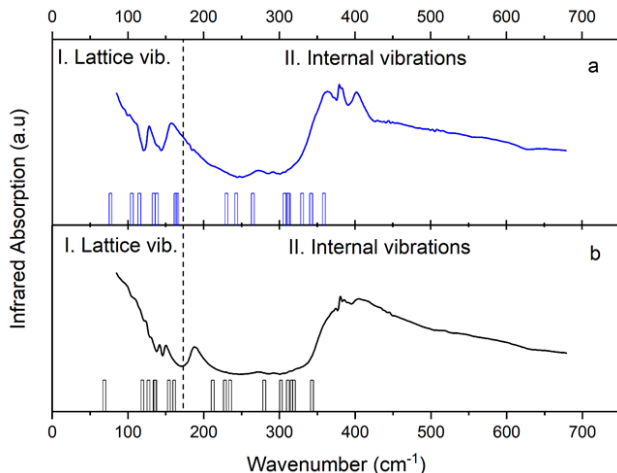


Рисунок 2. Рассчитанные инфракрасные спектры а)  $\text{EuScCuS}_3$ ; б)  $\text{SrScCuS}_3$

Научное исследование выполнено при поддержке программы «УМНИК» в рамках научного проекта № 14977ГУ / 2019.

#### Список литературы

1. Stephens P., Devlin F., Chabalowski C., Frisch M. // J. Phys. Chem. 1994. V. 98. P. 11623-11627.
2. Simons J., Steinberg S. // ACS Omega. 2019. V. 4(13). P. 15721-15728.

УДК 546.05

### ВЛИЯНИЕ ПРЕКУРСОРА И СОСТАВА РЕАКЦИОННОЙ СРЕДЫ НА СИНТЕЗ ТИТАНАТА КАЛЬЦИЯ В ХЛОРИДНЫХ РАСПЛАВАХ

К.О. Боброва\*, В.Н. Докутович, В.А. Хохлов

Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

\*e-mail: ksuybobrova@gmail.com

Титанат кальция со структурой перовскита, обладая диэлектрическими свойствами при низких температурах, и являясь нелинейным