



DFT исследование гибридной структуры $\text{BaTiO}_3/\text{g-C}_3\text{N}_4$

Байкадамова Л.С.¹, Каптагай Г.А.*¹, Копенбаева А.С.¹,
Далелханқызы А.¹, Койлык Н.О.², Сандибаева Н.А.¹, Муратбек Т.¹

¹ Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан

² Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан

E-mail: bajkadamovalaura@gmail.com, qaptagay.g@qzpu.edu.kz, kopenbaeva.a@qzpu.edu.kz,
dalelkhankyzy.d@gmail.com, nurgali.koilyk@mail.ru, nazirasandibaeva@gmail.com, muratbektursyngull@gmail

Аннотация. В последние десятилетия графитовый нитрид углерода ($\text{g-C}_3\text{N}_4$), являющийся биметаллическим полимерным органическим полупроводником с три-*s*-триазиновыми звеньями, за счет оптимальных фотокаталитических свойств и уникальных характеристик, таких как подходящая зонная структура, активность поглощения видимого света и высокая химическая и термическая стабильность, является перспективной темой для исследований. Однако фотокаталитическая эффективность чистого $\text{g-C}_3\text{N}_4$ из-за высокой скорости рекомбинации фотогенерированных зарядов, недостаточного поглощения света и малой удельной площади поверхности ограничивает его применение в фотокаталитических системах. Комбинация графитового нитрида углерода с перовскитами дает хорошую возможность скорректировать эти недостатки. В данном исследовании рассматривалось теоретическое моделирование гибридной структуры $\text{g-C}_3\text{N}_4/\text{BaTiO}_3$. Из кубической фазы титаната бария была создана (100) поверхность. Для (100) поверхностей BaTiO_3 было выявлено, что более термодинамически выгодным является TiO_2 -терминированная поверхность. Исследовался процесс релаксации гибридной структуры. Разработанный интерфейс является термодинамической стабильной, что дает предпосылки для дальнейшего его применения для фотогенерации энергии в различных процессах на основе окислительно-восстановительных реакций. Расчетами выявленная термодинамическую стабильность нанокompозита $\text{BaTiO}_3/\text{g-C}_3\text{N}_4$ можно объяснить взаимодействием наночастиц BaTiO_3 с $\text{g-C}_3\text{N}_4$ через связь Ti-N , уменьшением ширины запрещенной зоны за счет введения гибридных состояний, приводящих к увеличению поглощения в видимом диапазоне, и большой площадью поверхности, которая обеспечивает больше активных центров для эффективного поглощения света.

Ключевые слова: Графитовый нитрид углерода ($\text{g-C}_3\text{N}_4$), интерфейс, гибридная структура, низкоразмерная структура, гетероструктура, нанокompозит.

Поступила 28.05.2026. После доработки 8.06.2026. Принята к печати 9.06.2026. Доступно онлайн 30.06.2026.

*автор для корреспонденции

Введение

Графитовый нитрид углерода (g-C₃N₄), представляющий собой одноатомный слой атомов углерода и азота со структурой гексогональной решетки, продемонстрировал исключительные физические, химические, оптические и механические свойства. Кроме того, g-C₃N₄ состоит из распространенных в земле элементов углерода и азота, а дешевизна исходных прекурсоров делает его перспективным фотокаталитическим материалом для различных применений, таких как генерация энергии [1–3], сенсоры [4] и топливные элементы [5], а также для очистки окружающей среды [6]. Ширина запрещенной зоны g-C₃N₄ в пределах 2,4–2,8 эВ, и поэтому он способен поглощать излучение видимого света [7]. Однако фотокаталитическую эффективность чистого g-C₃N₄ ограничивает несколько факторов [8]. В связи с этим исследователи в последнее время предпринимали различные попытки устранить эти проблемы. Для повышения его фотокаталитической активности были применены различные стратегий, такие как синтез мезопористого g-C₃N₄ [9], синтез двумерных наноллистов [10], сочетание с проводящими материалами [11], формирование гетероструктур с другими полупроводниковыми материалами [12–13] и синтез материалов, подобных нитриду углерода [14].

За последнее десятилетие низкоразмерные нанокompозитные материалы, такие как нитрид углерода, графен и нитрид бора получили значительное развитие в исследованиях разложения загрязняющих веществ, расщепления воды, а также фотосинтеза [1,2]. Нитрид углерода в последние десятилетия стал предметом интенсивных исследований благодаря своей уникальной электронной структуре, которая важна для практического применения в нанoeлектронике.

g-C₃N₄ состоит из двумерных слоев с субъединицами три-*s*-триазина, соединенными через плоские третичные аминогруппы в слое. Важно отметить, что малая величина запрещенной зоны g-C₃N₄ является предпосылкой его применения в качестве фотокатализатора, активным в видимом свете, для фотохимических реакций и преобразования солнечной энергии [11], таких как расщепление воды [12,13], минерализация органических загрязнителей [14] и разложение CO₂. [15] Тем не менее, чистый g-C₃N₄ все еще не соответствует требованиям применения в реальных практических приложениях из-за высокой скорости рекомбинации фотогенерированных электронно-дырочных пар [16]. Было предпринято множество усилий для повышения фотокаталитической активности g-C₃N₄, таких как легирование металлами/неметаллами [17,18], наноструктурирование [19] и его комбинирование с другими материалами [20]. В качестве одной из эффективных стратегий повышения разделения и переноса фотогенерированных электронно-дырочных пар является комбинация полупроводником. Чжао и др. успешно получили композиты CdMoO₄/g-C₃N₄ [21], которые показали в 4,8 раза более высокую скорость преобразования CO₂, чем g-C₃N₄. Хе и др. синтезировали фотокатализатор ZnO/g-C₃N₄ [22], который показал в 4,9 раза более высокую скорость фотокаталитического восстановления CO₂, чем чистый g-C₃N₄. Ши и др. сообщили что в композитах с пористыми TiO₂/g-C₃N₄ [23] N-TiO₂ действует как ловушка для электронов, что приводит к более высокой фотокаталитической активности выделения H₂. Вышеприведенные результаты работ показывают, что сочетание полупроводников может быть подходящим вариантом для улучшения фотокаталитической активности g-C₃N₄. В последнее время, благодаря своим превосходным диэлектрическим, ферроэлектрическим и пьезоэлектрическим свойствам, титанат бария (BaTiO₃) признан перспективным материалом для использования в оптоэлектронных устройствах. Как ферроэлектрический материал, BaTiO₃ обладает спонтанной поляризацией благодаря асимметрии кристаллической решетки, что позволяет проявлять особые свойства в фотохимии. Было высказано предположение, что дипольный момент полярной молекулы будет взаимодействовать с поляризацией сегнетоэлектрических доменов, тем самым уменьшая энергию, необходимую для разрыва связи. Однако BaTiO₃ с шириной запрещенной зоны 3,0–3,3 эВ, как известно, недостаточно взаимодействует с видимым светом, что ограничивает его перспективные применения в фотокатализе. Все исследования сосредоточены на модификации энергетической зонной структуры, что должно способствовать явному красному сдвигу в сторону видимого света. Однако существует лишь несколько исследований о синтезе и применении нанокompозитов (100) BaTiO₃/g-C₃N₄.

Разработанная гибридная структура может решить проблемы, связанные с разделением и регенерацией носителей тока в процессе фотокатализа. Нанокompозиты на основе g-CN и различных перовскитов обладают рядом преимуществ для процессов разложения:

1. Повышенная фотокаталитическая активность. Нанокompозиты, состоящие из g-C₃N₄ и различных перовскитов демонстрируют значительно улучшенную фотокаталитическую активность по сравнению с его отдельными компонентами [23–25]. Повышение активности приводит к более эффективному разложению загрязняющих веществ и органических соединений.

2. Поглощение видимого света. Способность нанокмозитов на основе графитового нитрида углерода и различных перовскитов поглощать видимый свет, обусловленная присутствием $g\text{-C}_3\text{N}_4$, расширяет спектр света, доступного для разложения. Это преимущество особенно важно, поскольку видимый свет более распространен в солнечном свете, в отличие от ультрафиолетового излучения.

3. Стабильность и возможность повторного использования. Нанокмозиты демонстрируют замечательную стабильность и могут быть легко отделены от реакционной смеси после разложения. Эта характеристика позволяет использовать их повторно в последующих процессах разложения, тем самым снижая потребность в дополнительных катализаторах и минимизируя образование отходов.

Таким образом нанокмозиты $g\text{-C}_3\text{N}_4$ /перовскит могут эффективно использоваться в различных процессах разложения, таких как очистка сточных вод, очистка воздуха и рекультивация почвы [26,27]. Их универсальность делает их пригодными для широкого спектра экологических применений. В целом, нанокмозиты обладают рядом существенных преимуществ, включая повышенную фотокаталитическую активность, поглощение видимого света, синергетический эффект, стабильность, возможность многократного использования и широкую область применения. Таким образом прогнозируется что разработанный нанокмозит $g\text{-C}_3\text{N}_4$ /ВТО аналогично структурам C_3N_4 /перовскит [28-33] будет перспективным катализатором для широкого спектра процессов разложения.

Методы исследования

Все расчеты из первых принципов выполнены на основе DFT, реализованной в коде VASP.6.5.0 [34, 35]. Моделирование проводилось с использованием энергии отсечки 520 эВ. Разбиение обратного пространства, полученного с помощью схемы Монхорста-Пака [36] для $\text{BaTiO}_3/g\text{-C}_3\text{N}_4$ гибридной структуры суперячейки было выбрано в виде сетки $4 \times 2 \times 2$. Структурные релаксации проводились на основе функционала обменно-корреляционного взаимодействия Пердю-Берка-Эрнхофа (PBE) [37] в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) до тех пор, пока остаточные силы на всех атомах не стали меньше $0,01 \text{ эВ}/\text{Å}$. Для постобработки данных, рассчитанных с помощью пакета VASP.6.5.0, применялся программный код VASPKIT [38] и Vesta 3.5.5 [39]. Описание потенциалов примененных в работе приведена в таблице 1.

Таблица 1. Описание PAW потенциалов ионов.

Элемент	Ecut, эВ	Количество валентных электронов	конфигурация
Ba	187.210	10	$5s^2 6s^2 5p^6$
Ti_pv	222.335	12	$3p^6 4s^1 3d^6$
O	400	6	$2s^2 p^4$
C	350	4	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	305	5	$1s^2 2s^2 2p^3$

Результаты исследования и обсуждение

Для описания (100) поверхности была рассмотрена симметричная модель атомарной плиты конечной толщины по оси z и расширенной (6×2) по осям x и y и содержащая нечетное (5, 7, 9 и 11) количество атомарных слоев. Поверхности BaTiO_3 (100) моделировались симметричными относительно плоскости зеркала пластинами, состоящими из чередующихся слоев BaO и TiO_2 соответственно. Одна из этих пластин завершалась плоскостями TiO_2 для кристалла BaTiO_3 (см. рис. 1а). Вторая пластина завершалась пластинами BaO (см. рис. 1б). Эти плиты нестехиометричны и симметричны вдоль нормальной плоскости поверхности. Эти две терминции (BaO и TiO_2) являются единственными возможными плоскими и плотными поверхностями (100) для структуры решетки перовскита BaTiO_3 . При подборе оптимальной толщины пластины в качестве сравнительного критерия была выбрана поверхностная энергия. Для этой цели мы сравнивали результаты расчетов для пластин с различным количеством атомарных слоев. При изменении числа слоев от 5 к 6, разница в энергии поверхности составила менее $0.01 \text{ эВ}/\text{Å}^2$ (менее 1%), что послужило критерием для выбора 5-слойной пластины.

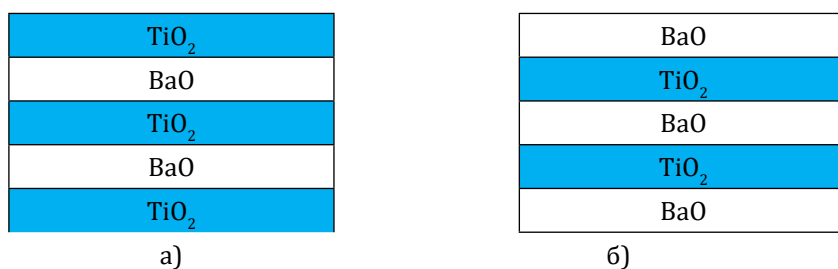


Рисунок 1. Изображение BaTiO₃ (100) пластины в виде чередования слоев TiO₂ и BaO: а- TiO₂-терминированная и б- BaO-терминированная поверхность.

(100) пластина титаната бария была сконструирована двумя способами в зависимости от терминирующего слоя на поверхностном слое, как указана на 1 рисунке. В соответствии содержанию ионов атомарные слои TiO₂ и BaO образуют TiO₂-терминированная (1,а-рисунок) и BaO-терминированная (1,б-рисунок) (100) плоскость BaTiO₃.

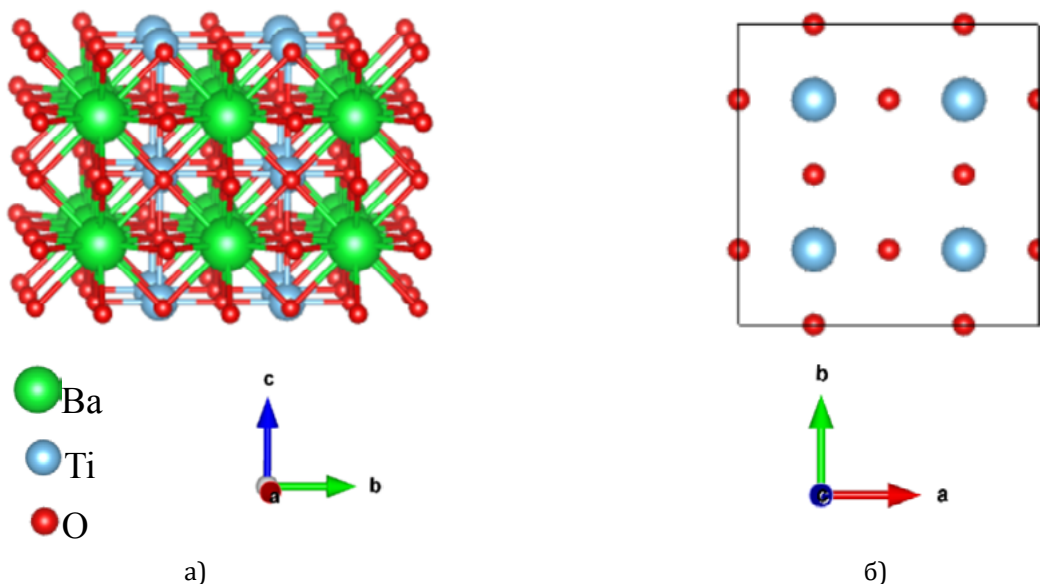
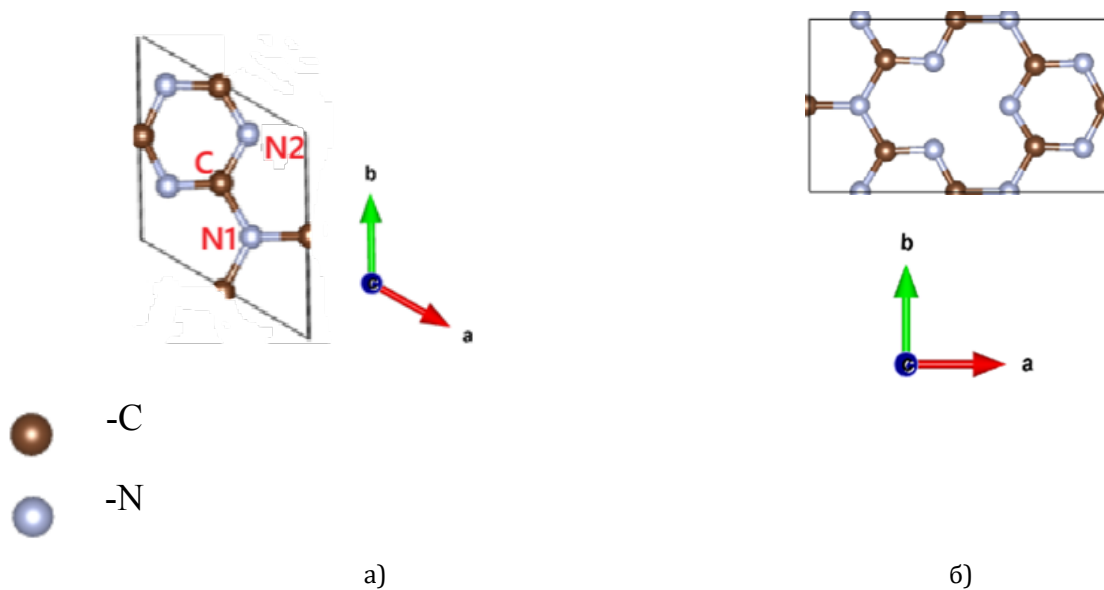


Рисунок 2. TiO₂-терминированная BaTiO₃ (100) пластина (а – вид сбоку; в - вид сверху)

Энергия образования TiO₂- и BaO-терминированной (100) плоскостей BaTiO₃ составила 1,12 эВ и 1,24 эВ, соответственно. Данные значения поверхностных энергий были чуть больше значений аналогичных величин из работы [40]. Для дальнейших расчетов была выбрана TiO₂-терминированная (100) плоскость BaTiO₃, которая является более стабильной (2 рисунок).

Во всех системах величина вакуумного промежутка составила 25 Å для предотвращения взаимодействия образов ячеек пластин, связанных с использованием периодических граничных условий. В g-C₃N₄ атом азота является не эквивалентным, атомы углерода эквивалентны. Существуют два типа этих атомов — N1 и N2. Как показано на рисунке 3, атомы N1 расположены в центре равносторонних треугольников, в вершинах которых расположены атомы углерода. Длина связи C-N1 1,46201 Å, C-N2 1,32712 Å. Атомы N2 не компланарны с тремя атомами, которые полностью их окружают, N1-N1 и N2-N2. Расстояние между ними составляет 2,46 и 2,69 Å, соответственно.

Для C_3N_4 на титанате бария выполнялась реконструкция $\sqrt{3} \times 5\sqrt{3}R30$ (3 рисунок), что соответствует 1×5 ячейкам нитрида углерода.



**Рисунок 3. $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30$ реконструкция C_3N_4 .
а-примитивная гексогональная ячейка; б-ортогональная ячейка.**

Для соответствия ячеек структур перовскита и нитрида углерода было выбрано 12 поверхностных ячеек титаната бария (2×6). Параметр ячейки ВТО $a=b=3,94513 \text{ \AA}$, параметр ячейки графитового нитрида углерода $a=8,28688 \text{ \AA}$, $b=4,78443 \text{ \AA}$. Таким образом, несоответствие постоянных решетки при использовании этой модели составляет порядка 2,5%. Гибридная структура образовалась из 296 атомов. Уменьшить напряжение в системе позволяет одновременное растяжение $g-C_3N_4$ и сжатие $BaTiO_3$.

Рассчитанная плотность состояний (100) $BaTiO_3$ представлена на рисунке 4.

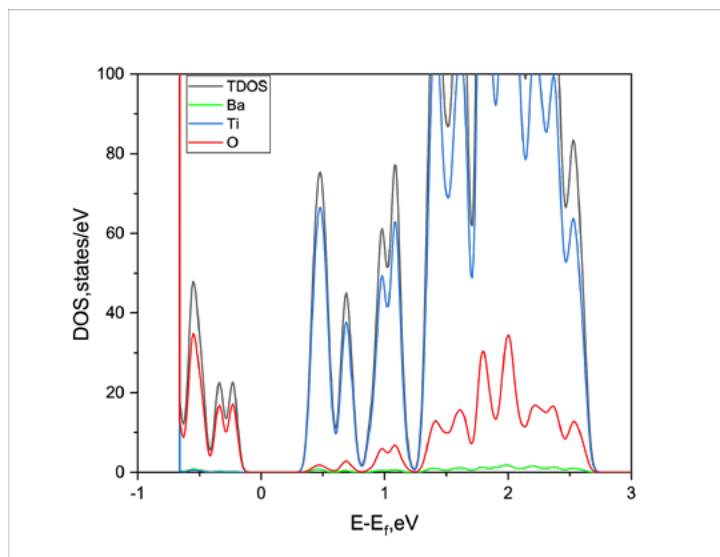


Рисунок 4. Электронный DOS (плотность состояний) (100) поверхности $BaTiO_3$. Уровень Ферми приведен к нулю

Как видно из рис.4, величина рассчитанной с функционалом PBE оптической ширины запрещенной зоны $BaTiO_3$ 2,5 эВ хорошо согласуется с результатами работы [28], в которой аналогичное значение составило 2,7 эВ. Далее была смоделирована интерфейс гибридной структуры ВТО/ C_3N_4 (смотрите 5 рисунок).

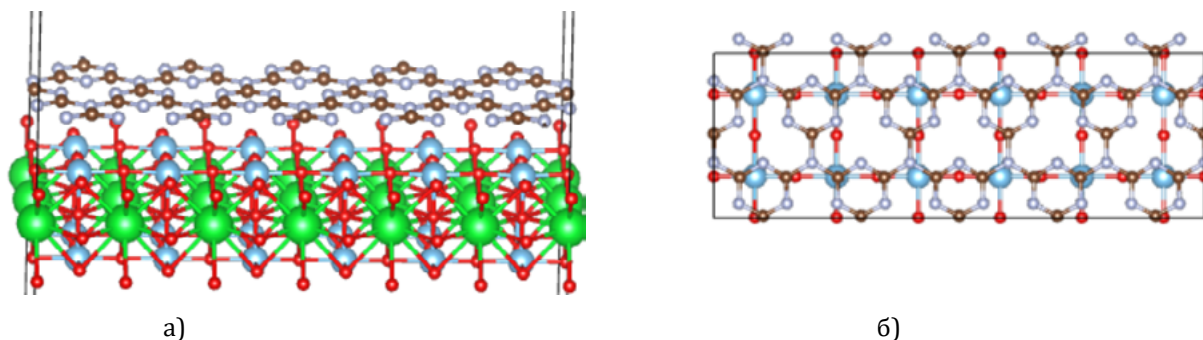


Рисунок 5. Смоделированный начальный интерфейс между графитовым нитридом углерода и BaTiO₃ (100) поверхностью. А - вид сбоку; б - вид сверху.

В таблице 2 приведены абсолютные смещения ионов по трем направлениям.

(Å) атомов 1-го и 2-го слоев (100) поверхности BaTiO₃ с C₃N₄ от начального положения, из которой видно, что атомы (100) BaTiO₃ релаксируют довольно слабо. Третий слой не релаксируется, оставаясь в начальном положении.

Таблица 2. Расчетная релаксация атомов верхних двух слоев TiO₂-терминированной (100) BaTiO₃ поверхности. Положительные (отрицательные) значения относятся к смещениям в направлении наружу (внутри) поверхности.

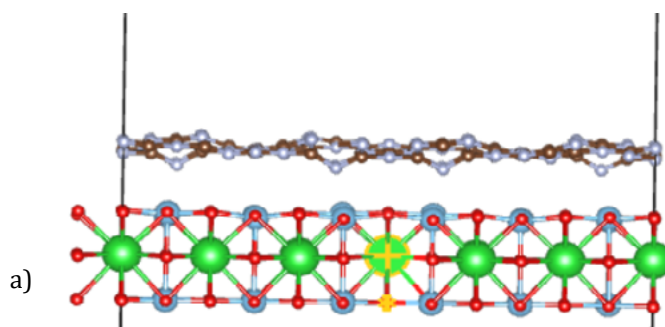
слой	ион	Абсолютные смещения, Å		
		Δx	Δy	Δz
1	Ti	0,01	0	-0,005
	O (1)	-0,01	0	-0,008
	O (2)	-0,008	0	-0,002
2	Ba	0,005	0	0,005
	O	0,005	0	-0,03

Из анализа релаксации геометрии атомарной структуры следует, что боковое смещение атомов Ti и O (1) решетки больше, чем вдоль (100) направления (вдоль оси с). Наиболее большие смещения наблюдаются для атомов Ti и O(1) первого слоя, которые равны 0,01 Å и -0,01 Å. Для всех атомов двух слоев по направлению оси у смещение не наблюдается.

Энергия адгезии интерфейса ВТО/С₃Н₄ была рассчитана по следующему выражению:

$$E_{ад} = E_{гетеро} - E_{нит.угл.} - E_{ВТО(100)} \quad (1)$$

где $E_{гетеро}$, $E_{нит.угл.}$, $E_{ВТО(100)}$ представляет полную энергию релаксированного ВТО/С₃Н₄ нанокompозита, чистой пленки g-C₃N₄ и BaTiO₃ (100) поверхности, соответственно. Энергия связи интерфейса на одну поверхностную ячейку графитового нитрида углерода составило ~1 эВ.



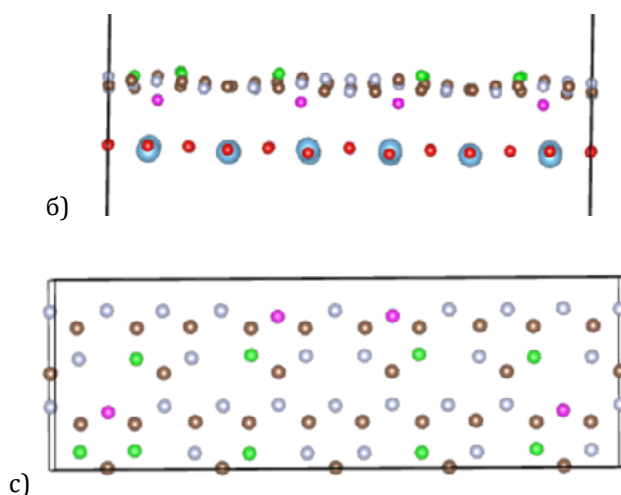


Рисунок 6. Релаксированный интерфейс между графитовым нитридом углерода и BaTiO₃ (100) поверхностью. А - вид сбоку (с связями); б - вид сбоку (без связи), с - вид сверху.

Ковалентно связанные атомы азота релаксируют по направлению к поверхности перовскита, образуя Ti-N связь в 2,35 Å. Сравнительный анализ смещения атомов на идеальной поверхности ВТО выявил, что вертикальные смещения атомов Ba, Ti и O первого слоя поверхности (100) BaTiO₃ при формировании интерфейса BaTiO₃/C₃N₄ составляют 0,01 Å в направлении наружу. Смещения в вертикальном направлении ионов следующего слоя не наблюдалось вообще. Ионы слоя C₃N при релаксации смещаются вертикально неоднозначно. Как указано на рисунке 6, ионы азота релаксируют внутрь (выделено розовым), а некоторые ионы смещаются в направлении наружу. При этом замечено, что направление смещения для ионов C в интерфейсном слое происходит к поверхности. За счет смещения ионов слоя C₃N в двух направлениях образуется волнистый слой. Было выявлено, что азоты образуют ковалентную связь с подложкой. Энергия связи компенсирует упругое напряжение на границе раздела, что делает ковалентный механизм превосходящим ван-дер-ваальсовскую связь. Предполагается, что связь с подложкой устраняет электронные особенности нитрида углеродного типа из энергетической области вокруг уровня Ферми.

Заключение

Образование связи Ti-N оказалось весьма выгодным для создания интерфейса BaTiO₃/C₃N₄. Тесный контакт или ковалентные связи между двумерными нанокompозитными материалами и полупроводниковыми наночастицами имеют решающее значение для достижения улучшенных фотокаталитических характеристик.

Анализ литературных данных показывает, что большинство исследователей приходит к пониманию того, что экономические характеристики катализаторов оказываются зачастую ключевыми при выборе таких систем. Поэтому дальнейшее исследование BaTiO₃/C₃N₄ как сравнительно доступный и экономичный материал для процессов на основе окислительно-восстановительных реакций и тестирование для подобных технологических процессов является весьма актуальным. Поскольку катализаторные материалы имеют большое значение для многих высокоэффективных способов преобразования энергии, разработка и создание стабильной гибридной структуры BaTiO₃/C₃N₄ делает хорошие предпосылки ее оптимального применения.

Вклад авторов

Байкадамова Л., Каптагай Г. – подготовка текста статьи и списка литературы, обработка расчетных данных.

Копенбаева А., Далелханқызы А. – руководство исследованием, утверждение окончательной версии статьи и согласование её публикации.

Сандибаева Н. – проведение исследований, подготовка входных данных для DFT расчетов, организация и контроль сбора данных в ходе исследований.

Койлык Н. – участие в разработке концепции исследования.

Муратбек Т. – выполнение расчетов, представленных в статье, получение результатов в виде выражений и формул, подготовка сопроводительного письма и направление его в редакцию.

Список литературы

1. Y. Zhang, J. Liu, G. Wu, W. Chen, Investigation of photo-electrochemical response of iron oxide/mixed-phase titanium oxide heterojunction toward possible solar energy conversion, *Nanoscale* 4, 5300-5303 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2NR30948C>
2. G. Zhang, Z.-A. Lan, X. Wang, Single-atom heterogeneous photocatalysts, *Chem. Sci.* 8, 5261-5274 (2017). <https://doi.org/10.1039/C7SC01747B>
3. F. Cheng, H. Yin, and Q. Xiang, Engineering of g-C₃N₄ for photocatalytic hydrogen production: A review, *Appl. Surf. Sci.* 391, 432-439 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.06.169>
4. S. Barman, M. Sadhukhan, Graphitic carbon nitride (g-C₃N₄) in photocatalytic hydrogen production, *J. Mater. Chem.* 22, 21832-21837 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2JM35501A>
5. Y. Zheng, J. Liu, J. Liang, M. Jaroniec, S. Z. Qiao, Efficient synthesis of monolayer carbon nitride 2D nanosheet with tunable concentration and enhanced visible-light photocatalytic activities, *Energy Environ. Sci.* 5, 6717-6731 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2EE03479D>
6. H. Wang, X. Yuan, Y. Wu, G. Zeng, X. Chen, L. Leng, H. Li, Synthesis and applications of novel graphitic carbon nitride/metal-organic frameworks mesoporous photocatalyst for dyes removal, *Applied Catalysis B: Environmental*, 174-175, pp. 445-454 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.03.037>
7. Z. Tong, D. Yang, J. Shi, Y. Nan, Y. Sun, Z. Jiang, Three-Dimensional Porous Aerogel Constructed by g-C₃N₄ and Graphene Oxide Nanosheets with Excellent Visible-Light Photocatalytic Performance, *ACS Applied Materials Interfaces*, 7, pp. 25693-25701 (2015). <https://doi.org/10.1021/acsami.5b09503>
8. S. Guo, Z. Deng, M. Li, B. Jiang, C. Tian, Q. Pan, H. Fu, Phosphorus-Doped Carbon Nitride Tubes with a Layered Micro-nanostructure for Enhanced Visible-Light Photocatalytic Hydrogen Evolution, *Angewandte Chemie International Edition*, 55, pp. 1830-1834 (2016). <https://doi.org/10.1002/anie.201508505>
9. L. Shi, L. Liang, F. Wang, M. Liu, S. Zhong, J. Sun, Tetraethylorthosilicate induced preparation of mesoporous graphitic carbon nitride with improved visible light photocatalytic activity, *Catalysis Communications*, 59, pp. 131-135 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2014.10.014>
10. Q. Lin, L. Li, S. Liang, M. Liu, J. Bi, L. Wu, Efficient synthesis of monolayer carbon nitride 2D nanosheet with tunable concentration and enhanced visible-light photocatalytic activities, *Applied Catalysis B: Environmental*, 163, pp. 135-142 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2014.07.053>
11. Q. Li, N. Zhang, Y. Yang, G. Wang, D. H. L. Ng, High efficiency photocatalysis for pollutant degradation with MoS₂/C₃N₄ heterostructures, *Langmuir*, vol. 30, pp. 8965-8972 (2014). <https://doi.org/10.1021/la502033t>
12. Y. Li, Z. Xia, Q. Yang, L. Wang, Y. Xing, Review on g-C₃N₄-based S-scheme heterojunction photocatalysts, *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 125, pp. 128-144 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2022.02.035>
13. Y. Li, J. Hou, T. Li, Y. Wang, C. Liu, T. Zhou, W. Jiang, D. Wang, G.-B. Che, Tremella-like integrated carbon nitride with polyvinylimine-doped for enhancing photocatalytic degradation and hydrogen evolution performances, *Separation and Purification Technology*, vol. 279, 119766 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.119766>
14. S. Patnaik, D. R. Sahoo, K. M. Parida, Recent advances in anion doped g-C₃N₄ photocatalysts: A review, *Carbon*, vol. 172, pp. 682-711 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.10.073>
15. P. Su, B. Tan, X. Ma, X. Zhang, C. Huang, P. Wang, Z. Tong, G. Li, A. Yadav, Z. Liu, Defective ultra-thin two-dimensional g-C₃N₄ photocatalyst for enhanced photocatalytic H₂ evolution activity, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 581, Pt A, pp. 159-166 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.07.119>
16. Y. Xing, X. Wang, S. Hao, X.-L. Zhang, X. Wang, W. Ma, G. Zhao, X.-J. Xu, Recent advances in the improvement of g-C₃N₄ based photocatalytic materials, *Chinese Chemical Letters*, vol. 32, no. 1, pp. 13-20 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ccllet.2020.11.011>
17. C. Zhu, W. Tian, W. Yang, L. Wang, M. Lu, Y. Yuan, L. Yin, L. Huang, Unravelling intramolecular charge transfer in donor-acceptor structured g-C₃N₄ for superior photocatalytic hydrogen evolution, *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 9, no. 2, pp. 1207-1212 (2021). <https://doi.org/10.1039/d0ta08609f>
18. R. Zhang, J. Wen, S. Zhang, Y. Zhai, Tremella-like porous carbon nitride co-doped with oxygen and carbon towards efficient visible-light-driven purification of wastewater, *Separation and Purification Technology*, vol. 257, 117984 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117984>
19. C. Q. Xu, W.-D. Zhang, K. Deguchi, S. Ohki, T. Shimizu, R. Ma, T. Sasaki, Construction of a push-pull system in g-C₃N₄ for efficient photocatalytic hydrogen evolution under visible light, *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 8, no. 26, pp. 13299-13310 (2020). <https://doi.org/10.1039/c9ta13513h>

20. H. Dong, X. Zhang, J. Li, P. Zhou, S. Yu, N. Song, C. Liu, G. Che, C. Li, Construction of morphology-controlled nonmetal 2D/3D homojunction towards enhancing photocatalytic activity and mechanism insight, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 263, 118270 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.118270>
21. Y. Huang, D. Li, Z. Fang, R. Chen, B. Luo, W. Shi, Controlling carbon self-doping site of g-C₃N₄ for highly enhanced visible-light-driven hydrogen evolution, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 254, pp. 128-134 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.04.082>
22. E. Grabowska, Selected perovskite oxides: Characterization, preparation and photocatalytic properties – A review, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 186, pp. 97-126 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.12.035>
23. S. Feng and F. Li, Photocatalytic dyes degradation on suspended and cement paste immobilized TiO₂/g-C₃N₄ under simulated solar light, *Journal of Environmental Chemical Engineering*, vol. 9, no. 4, 105488 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.105488>
24. M. Rakibuddin, H. Kim & M. E. Khan, Graphite-like carbon nitride (C₃N₄) modified N-doped LaTiO₃ nanocomposite for higher visible light photocatalytic and photo-electrochemical performance, *Appl. Surf. Sci.* 452, 400–412 (2018). https://ui.adsabs.harvard.edu/link_gateway/2018ApSS..452..400R/doi:10.1016/j.apsusc.2018.05.018
25. A.Kumar, C.Schuerings, S.Kumar, A.Kumar, V.Krishnan, Perovskite-structured CaTiO₃ coupled with g-C₃N₄ as a heterojunction photocatalyst for organic pollutant degradation, *Beilstein J. Nanotechnol.* 9, 671–685 (2018). <https://10.3762/bjnano.9.62>. eCollection 2018
26. S.Kumar, S. Tonda, A.Baruah, B. Kumar, V. Shanker, Synthesis of novel and stable gC₃N₄/N-doped SrTiO₃ hybrid nanocomposites with improved photocurrent and photocatalytic activity under visible light irradiation, *Dalton Trans.* 43, 16105–16114 (2014). <https://doi.org/10.1039/C4DT01076K>
27. P.-S. Konstas, I. Konstantinou, D. Petrakis, T. Albanis, Synthesis, characterization of g-C₃N₄/SrTiO₃ heterojunctions and photocatalytic activity for organic pollutants degradation, *Catalysts* 8, 554 (2018). <https://doi.org/10.3390/catal8110554>
28. R. Konta, R. Ishii, H.Kato, A. Kudo, Photocatalytic activities of noble metal ion doped SrTiO₃ under visible light irradiation, *J. Phys. Chem. B* 108, 8992–8995 (2004). <https://doi.org/10.1002/CHIN.200437021>
29. Y.-Q. Wang, Y. Liu, M.-X. Zhang, F.-F. Min, Electronic structure and visible-light absorption of transition metals (Tm = Cr, Mn, Fe, Co) and Zn-codoped SrTiO₃: A first-principles study, *Chin. Phys. Lett.* 35, 017101 (2018). <https://doi.org/10.1088/0256-307X/35/1/017101>
30. X. Chen et al., A green and facile strategy for preparation of novel and stable Cr-doped SrTiO₃/g-C₃N₄ hybrid nanocomposites with enhanced visible light photocatalytic activity, *J. Alloys Compd.* 647, 456–462 (2015). <https://doi.org/10.3390/catal8110554>
31. M. Ahmadi, M. S. Dorraji, M. H. Rasoulifard, A. R. Amani-Ghadim, The effective role of reduced-graphene oxide in visible light photocatalytic activity of wide band gap SrTiO₃ semiconductor, *Sep. Purif. Technol.* 228, 115771 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.115771>
32. T. S. Natarajan, J. Y. Lee, H. C. Bajaj, W.-K. Jo, R. J. Tayade, Synthesis of multiwall carbon nanotubes/TiO₂ nanotube composites with enhanced photocatalytic decomposition efficiency, *Catal. Today* 282, 13–23 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2016.03.018>
33. R. Hao et al., Template-free preparation of macro/mesoporous g-C₃N₄/TiO₂ heterojunction photocatalysts with enhanced visible light photocatalytic activity, *Appl. Catal. B Environ.* 187, 47–58 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2016.01.026>
34. G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, *Physical Review B*, Vol. 59, 1758-1775 (1999). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
35. G. Kresse, J. Furthmüller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Physical Review B*, Vol. 54, pp. 11169-11186 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
36. H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B*, Vol. 13, 5188-5192 (1976). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
37. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters*, Vol. 77, 3865-3868 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.386>
38. Manual of VaspKit. Доступно по адресу: <https://vaspkit.com/tutorials.html>
39. Manual of Vesta. Доступно по адресу: <http://jp-minerals.org/vesta/en/doc.html>
40. R.I.Eglitis and D.Vanderbilt, Ab initio calculations of BaTiO₃ and PbTiO₃ (001) and (011) surface structures, *PHYSICAL REVIEW B*, Vol. 76, pp.155439 (2007). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.155439>

Байкадамова Л.С.¹, Қаптағай Г.Ә.^{*1}, Көпенбаева А.С.¹,
Дәлелханқызы А.¹, Қойлық Н.О.², Сандибаева Н.А.¹, Мұратбек Т.¹

¹Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

²Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университет, Алматы, Қазақстан

(E-mail: bajkadamovalaura@gmail.com, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz,
kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, dalelkhankyzy.d@gmail.com,
nurgali.koilyk@mail.ru, nazirasandibaeva@gmail.com, muratbektursyngull@gmail)

BaTiO₃/g-C₃N₄ гибриді құрылымын DFT зерттеу

Аңдатпа. Соңғы онжылдықта үш-s-триазин бірлікті биметал полимер органикалық жартылай өткізгіш көміртекті графит нитриді (g-C₃N₄) оңтайлы фотокаталитикалық қасиеттер мен қолайлы аймақтық құрылым, көрінетін жарықты жұту белсенділігі және жоғары химиялық және термиялық тұрақтылық сияқты бірегей сипаттамалар арқылы зерттеу үшін перспективалы тақырып болып табылады. Алайда, таза g-C₃N₄ құрылымының фотокаталитикалық тиімділігі фотогенерацияланған зарядтардың жоғары рекомбинация жылдамдығына, жарықтың жеткіліксіз жұтылуына және бетінің аз меншікті аймағына байланысты оның фотокаталитикалық жүйелерде қолданылуына мүмкіндік бермейді. Графит көміртегі нитридінің перовскиттермен үйлесуі бұл кемшіліктерді түзетуге жақсы мүмкіндік береді. Бұл зерттеу g-C₃N₄/BaTiO₃ гибриді құрылымын теориялық модельдеуді қарастырды.

Барий титанатының кубтық фазасынан (100) беті жасалды. (100) BaTiO₃ беттері үшін TiO₂ –терминацияланған беті термодинамикалық тиімді екендігі анықталды. Гибриді құрылымның релаксация процесі зерттелді. Өзірленген интерфейс термодинамикалық орнықты болып табылады, бұл оны тотығу-тотықсыздану реакцияларына негізделген әртүрлі процестерде энергияны фотогенерациялау үшін одан әрі қолдануға алғышарт болады. BaTiO₃/g-C₃N₄ нанокөмірдің термодинамикалық орнықтылығын BaTiO₃ нанобөлшектерінің g-C₃N₄-пен Ti-N байланысы арқылы өзара әрекеттесуімен, көрінетін диапазонда жұтудың күшеюіне әкелетін гибриделген күйлерді енгізу арқылы жолақ енінің азаюымен және жарықты тиімді жұту үшін көбірек белсенді орталықтарды қамтамасыз ететін үлкен бетінің ауданымен түсіндіруге болады.

Түйін сөздер: Графитті көміртегі нитриді (g-C₃N₄), интерфейс, гибриді құрылым, төмен өлшемді құрылымдар, гетероқұрылым, нанокөмір

Baikadamova L.¹, Kaptagay G.^{*1}, Kopenbaeva A.¹, Dalelkhankyzy A.¹,
Koylyk N.², Sandibaeva N.¹, Muratbek T.¹

¹Kazakh National Women's Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan

²Abay Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan

(E-mail: bajkadamovalaura@gmail.com, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz,
kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, dalelkhankyzy.d@gmail.com,
nurgali.koilyk@mail.ru, nazirasandibaeva@gmail.com, muratbektursyngull@gmail)

DFT research hybrid structure BaTiO₃/g-C₃N₄

Abstract. In recent decades, carbon graphite nitride (g-C₃N₄), a bimetallic polymer organic semiconductor with tri-s-triazine units, has been a promising research topic due to its optimal photocatalytic properties and unique characteristics such as a suitable band structure, visible light absorption activity, and high chemical and thermal stability. However, the photocatalytic efficiency of pure g-C₃N₄ limits its use in photocatalytic systems due to the high recombination rate of photogenerated charges, insufficient light absorption, and small specific surface area. The combination of graphite carbon nitride with perovskites provides a good opportunity to correct these deficiencies. In this study, the theoretical modeling

of the $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{BaTiO}_3$ hybrid structure was considered. A (100) surface was created from the cubic phase of barium titanate. For (100) BaTiO_3 surfaces, it was found that a TiO_2 -terminated surface is more thermodynamically favorable. The relaxation process of the hybrid structure was investigated. The developed interface is thermodynamically stable, which provides prerequisites for its further application for the photogeneration of energy in various processes based on redox reactions. Thermodynamic stability of the $\text{BaTiO}_3/g\text{-C}_3\text{N}_4$ nanocomposite can be explained by the interaction of BaTiO_3 nanoparticles with $g\text{-C}_3\text{N}_4$ through the Ti-N bond, a decrease in the band gap due to the introduction of hybridized states leading to increased absorption in the visible range, and a large surface area that provides more active sites for effective light absorption.

Keywords: Graphitic carbon nitride ($g\text{-C}_3\text{N}_4$), interface, hybrid structure, low-dimensional structures, heterostructure, nanocomposite

References

1. Y. Zhang, J. Liu, G. Wu, W. Chen, Investigation of photo-electrochemical response of iron oxide/mixed-phase titanium oxide heterojunction toward possible solar energy conversion, *Nanoscale* 4, 5300-5303 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2NR30948C>
2. G. Zhang, Z.-A. Lan, X. Wang, Single-atom heterogeneous photocatalysts, *Chem. Sci.* 8, 5261-5274 (2017). <https://doi.org/10.1039/C7SC01747B>
3. F. Cheng, H. Yin, and Q. Xiang, Engineering of $g\text{-C}_3\text{N}_4$ for photocatalytic hydrogen production: A review, *Appl. Surf. Sci.* 391, 432-439 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.06.169>
4. S. Barman, M. Sadhukhan, Graphitic carbon nitride ($g\text{-C}_3\text{N}_4$) in photocatalytic hydrogen production, *J. Mater. Chem.* 22, 21832-21837 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2JM35501A>
5. Y. Zheng, J. Liu, J. Liang, M. Jaroniec, S. Z. Qiao, Efficient synthesis of monolayer carbon nitride 2D nanosheet with tunable concentration and enhanced visible-light photocatalytic activities, *Energy Environ. Sci.* 5, 6717-6731 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2EE03479D>
6. H. Wang, X. Yuan, Y. Wu, G. Zeng, X. Chen, L. Leng, H. Li, Synthesis and applications of novel graphitic carbon nitride/metal-organic frameworks mesoporous photocatalyst for dyes removal, *Applied Catalysis B: Environmental*, 174-175, pp. 445-454 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.03.037>
7. Z. Tong, D. Yang, J. Shi, Y. Nan, Y. Sun, Z. Jiang, Three-Dimensional Porous Aerogel Constructed by $g\text{-C}_3\text{N}_4$ and Graphene Oxide Nanosheets with Excellent Visible-Light Photocatalytic Performance, *ACS Applied Materials Interfaces*, 7, pp. 25693-25701 (2015). <https://doi.org/10.1021/acsami.5b09503>
8. S. Guo, Z. Deng, M. Li, B. Jiang, C. Tian, Q. Pan, H. Fu, Phosphorus-Doped Carbon Nitride Tubes with a Layered Micro-nanostructure for Enhanced Visible-Light Photocatalytic Hydrogen Evolution, *Angewandte Chemie International Edition*, 55, pp. 1830-1834 (2016). <https://doi.org/10.1002/anie.201508505>
9. L. Shi, L. Liang, F. Wang, M. Liu, S. Zhong, J. Sun, Tetraethylorthosilicate induced preparation of mesoporous graphitic carbon nitride with improved visible light photocatalytic activity, *Catalysis Communications*, 59, pp. 131-135 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2014.10.014>
10. Q. Lin, L. Li, S. Liang, M. Liu, J. Bi, L. Wu, Efficient synthesis of monolayer carbon nitride 2D nanosheet with tunable concentration and enhanced visible-light photocatalytic activities, *Applied Catalysis B: Environmental*, 163, pp. 135-142 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2014.07.053>
11. Q. Li, N. Zhang, Y. Yang, G. Wang, D. H. L. Ng, High efficiency photocatalysis for pollutant degradation with $\text{MoS}_2/\text{C}_3\text{N}_4$ heterostructures, *Langmuir*, vol. 30, pp. 8965-8972 (2014). <https://doi.org/10.1021/la502033t>
12. Y. Li, Z. Xia, Q. Yang, L. Wang, Y. Xing, Review on $g\text{-C}_3\text{N}_4$ -based S-scheme heterojunction photocatalysts, *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 125, pp. 128-144 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2022.02.035>
13. Y. Li, J. Hou, T. Li, Y. Wang, C. Liu, T. Zhou, W. Jiang, D. Wang, G.-B. Che, Tremella-like integrated carbon nitride with polyvinylimine-doped for enhancing photocatalytic degradation and hydrogen evolution performances, *Separation and Purification Technology*, vol. 279, 119766 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.119766>
14. S. Patnaik, D. R. Sahoo, K. M. Parida, Recent advances in anion doped $g\text{-C}_3\text{N}_4$ photocatalysts: A review, *Carbon*, vol. 172, pp. 682-711 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.10.073>
15. P. Su, B. Tan, X. Ma, X. Zhang, C. Huang, P. Wang, Z. Tong, G. Li, A. Yadav, Z. Liu, Defective ultra-thin two-dimensional $g\text{-C}_3\text{N}_4$ photocatalyst for enhanced photocatalytic H_2 evolution activity, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 581, Pt A, pp. 159-166 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.07.119>

16. Y. Xing, X. Wang, S. Hao, X.-L. Zhang, X. Wang, W. Ma, G. Zhao, X.-J. Xu, Recent advances in the improvement of g-C₃N₄ based photocatalytic materials, *Chinese Chemical Letters*, vol. 32, no. 1, pp. 13-20 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ccllet.2020.11.011>
17. C. Zhu, W. Tian, W. Yang, L. Wang, M. Lu, Y. Yuan, L. Yin, L. Huang, Unravelling intramolecular charge transfer in donor-acceptor structured g-C₃N₄ for superior photocatalytic hydrogen evolution, *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 9, no. 2, pp. 1207-1212 (2021). <https://doi.org/10.1039/d0ta08609f>
18. R. Zhang, J. Wen, S. Zhang, Y. Zhai, Tremella-like porous carbon nitride co-doped with oxygen and carbon towards efficient visible-light-driven purification of wastewater, *Separation and Purification Technology*, vol. 257, 117984 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117984>
19. C. Q. Xu, W.-D. Zhang, K. Deguchi, S. Ohki, T. Shimizu, R. Ma, T. Sasaki, Construction of a push-pull system in g-C₃N₄ for efficient photocatalytic hydrogen evolution under visible light, *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 8, no. 26, pp. 13299-13310 (2020). <https://doi.org/10.1039/c9ta13513h>
20. H. Dong, X. Zhang, J. Li, P. Zhou, S. Yu, N. Song, C. Liu, G. Che, C. Li, Construction of morphology-controlled nonmetal 2D/3D homojunction towards enhancing photocatalytic activity and mechanism insight, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 263, 118270 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.118270>
21. Y. Huang, D. Li, Z. Fang, R. Chen, B. Luo, W. Shi, Controlling carbon self-doping site of g-C₃N₄ for highly enhanced visible-light-driven hydrogen evolution, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 254, pp. 128-134 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.04.082>
22. E. Grabowska, Selected perovskite oxides: Characterization, preparation and photocatalytic properties – A review, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 186, pp. 97-126 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.12.035>
23. S. Feng and F. Li, Photocatalytic dyes degradation on suspended and cement paste immobilized TiO₂/g-C₃N₄ under simulated solar light, *Journal of Environmental Chemical Engineering*, vol. 9, no. 4, 105488 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.105488>
24. M. Rakibuddin, H. Kim & M. E. Khan, Graphite-like carbon nitride (C₃N₄) modified N-doped LaTiO₃ nanocomposite for higher visible light photocatalytic and photo-electrochemical performance, *Appl. Surf. Sci.* 452, 400–412 (2018). https://ui.adsabs.harvard.edu/link_gateway/2018ApSS..452..400R/doi:10.1016/j.apsusc.2018.05.018
25. A. Kumar, C. Schuerings, S. Kumar, A. Kumar, V. Krishnan, Perovskite-structured CaTiO₃ coupled with g-C₃N₄ as a heterojunction photocatalyst for organic pollutant degradation, *Beilstein J. Nanotechnol.* 9, 671–685 (2018). <https://10.3762/bjnano.9.62>. eCollection 2018
26. S. Kumar, S. Tonda, A. Baruah, B. Kumar, V. Shanker, Synthesis of novel and stable gC₃N₄/N-doped SrTiO₃ hybrid nanocomposites with improved photocurrent and photocatalytic activity under visible light irradiation, *Dalton Trans.* 43, 16105–16114 (2014). <https://doi.org/10.1039/C4DT01076K>
27. P.-S. Konstas, I. Konstantinou, D. Petrakis, T. Albanis, Synthesis, characterization of g-C₃N₄/SrTiO₃ heterojunctions and photocatalytic activity for organic pollutants degradation, *Catalysts* 8, 554 (2018). <https://doi.org/10.3390/catal8110554>
28. R. Konta, R. Ishii, H. Kato, A. Kudo, Photocatalytic activities of noble metal ion doped SrTiO₃ under visible light irradiation, *J. Phys. Chem. B* 108, 8992–8995 (2004). <https://doi.org/10.1002/CHIN.200437021>
29. Y.-Q. Wang, Y. Liu, M.-X. Zhang, F.-F. Min, Electronic structure and visible-light absorption of transition metals (Tm = Cr, Mn, Fe, Co) and Zn-codoped SrTiO₃: A first-principles study, *Chin. Phys. Lett.* 35, 017101 (2018). <https://doi.org/10.1088/0256-307X/35/1/017101>
30. X. Chen et al., A green and facile strategy for preparation of novel and stable Cr-doped SrTiO₃/g-C₃N₄ hybrid nanocomposites with enhanced visible light photocatalytic activity, *J. Alloys Compd.* 647, 456–462 (2015). <https://doi.org/10.3390/catal8110554>
31. M. Ahmadi, M. S. Dorraji, M. H. Rasoulifard, A. R. Amani-Ghadim, The effective role of reduced-graphene oxide in visible light photocatalytic activity of wide band gap SrTiO₃ semiconductor, *Sep. Purif. Technol.* 228, 115771 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.115771>
32. T. S. Natarajan, J. Y. Lee, H. C. Bajaj, W.-K. Jo, R. J. Tayade, Synthesis of multiwall carbon nanotubes/TiO₂ nanotube composites with enhanced photocatalytic decomposition efficiency, *Catal. Today* 282, 13–23 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2016.03.018>
33. R. Hao et al., Template-free preparation of macro/mesoporous g-C₃N₄/TiO₂ heterojunction photocatalysts with enhanced visible light photocatalytic activity, *Appl. Catal. B Environ.* 187, 47–58 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2016.01.026>

34. G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, *Physical Review B*, Vol. 59, pp. 1758-1775 (1999). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
35. G. Kresse, J. Furthmüller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Physical Review B*, Vol. 54, pp. 11169-11186 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
36. H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B*, Vol. 13, pp. 5188-5192 (1976). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
37. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters*, Vol. 77, pp. 3865-3868 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.386>
38. Manual of VaspKit. Available at: <https://vaspkit.com/tutorials.html>
39. Manual of Vesta. Available at: <http://jp-minerals.org/vesta/en/doc.html>
40. R.I.Eglitis and D.Vanderbilt, Ab initio calculations of BaTiO₃ and PbTiO₃ (001) and (011) surface structures, *PHYSICAL REVIEW B*, Vol. 76, pp.155439 (2007). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.155439>

Сведения об авторах:

Байкадамова Л.С. – PhD докторант 3 курса, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, bajkadamovalaura@gmail.com, +7707 151 7909

Қаптағай Г.Ә. – автор для корреспонденции, ассоциированный профессор, PhD, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz, +7778 7888739

Көпенбаева А.С. – старший преподаватель, PhD, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, +7 707 193 3667

Далелханқызы А. – ассоциированный профессор, PhD, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, dalelkhankyzy.d@gmail.com, +7 702 563 1383

Қойлық Н.О. – старший преподаватель, к.ф.-м.н., Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Достық, 13, 050000, Алматы, Казахстан, nurgali.koilyk@mail.ru, +77016557704

Сандибаева Н.А. – ассоциированный профессор, кандидат педагогических наук, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, nazirasandibaeva@gmail.com, +7 775 751 8654

Мұратбек Т. – магистрант 1 курса, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, muratbektursyngull@gmail.com, +7 705 257 3818

Байкадамова Л.С. – 3 курс докторанты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000, Алматы, Қазақстан, bajkadamovalaura@gmail.com, +7707 151 7909

Қаптағай Г.Ә. – хат-хабар авторы, PhD, қауымдастырылған профессор, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000 Алматы, Қазақстан, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz, +7778 7888739

Көпенбаева А.С. – аға оқытушы, PhD, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000 Алматы, Қазақстан, kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, +7 707 193 3667

Далелханқызы А. – PhD, қауымдастырылған профессор, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000, Алматы, Қазақстан, dalelkhankyzy.d@gmail.com, +7 702 563 1383

Қойлық Н.О. – ф.-м.ғ.к., аға оқытушы, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Достық 13, 050000 Алматы, Қазақстан, nurgali.koilyk@mail.ru, +77016557704

Сандибаева Н.А. – қауымдастырылған профессор, педагогикалық ғылымдар кандидаты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000, Алматы, Қазақстан, nazirasandibaeva@gmail.com, +7 775 751 8654

Мұратбек Т. – 1 курс магистранты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000, Алматы, Қазақстан, muratbektursyngull@gmail.com, +7 705 257 3818

Baikadamova L. – Doctoral student, Kazakh National Women's Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, bajkadamovalaura@gmail.com, +7707 151 7909

Qaptagay G. –corresponding author, PhD, Associate Professor, Kazakh National Women's Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz, +7778 7888739

Kopenbaeva A. – PhD, Senior Teacher, Kazakh National Women’s Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, +7 707 193 3667

Dalelkhankyzy A. – PhD, Associate Professor, Kazakh National Women’s Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, dalelkhankyzy.d@gmail.com, +7 702 563 1383

Koilyk N.O. – senior teacher, Candidate of Physics-Mathematics Science, Abay Kazakh National Pedagogical University, Dostyk 13, Almaty, Kazakhstan, nurgali.koilyk@mail.ru, +77016557704

Sandibayeva N. – Associate Professor, Candidate of Pedagogical Science, Kazakh National Women’s Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, nazirasandibaeva@gmail.com, +7 775 751 8654

Muratbek T. – Master student, Kazakh National Women’s Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, muratbektursyngull@gmail.com, +7 705 257 3818



Copyright: © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).