

## ИК СПЕКТРОСКОПИЯ СОЕДИНЕНИЯ $\text{EuErCuS}_3$

Григорьев М.В.,<sup>a</sup> Русейкина А.В.,<sup>a</sup> Чернышев В.А.,<sup>b</sup> Пинигина А.И.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Институт химии, Тюменский государственный университет,  
625049, Тюмень, Семакова 10, e-mail: adeschina@mail.ru

<sup>b</sup>Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет,  
620002, Екатеринбург, Мира 19

Проведен ab initio расчет кристаллической структуры и фононного спектра  $\text{EuErCuS}_3$  в рамках МО ЛКАО подхода, теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP, определены частоты и типы фундаментальных мод, из анализа векторов смещений, определена степень участия ионов в ИК модах (табл. 1).

Тип колеб.	$\nu_{\text{расч.}}$ см <sup>-1</sup>	$I_{\text{расч.}}$ км/моль	Ионы-участники	Тип колеб.	$\nu_{\text{расч.}}$ см <sup>-1</sup>	$I_{\text{расч.}}$ км/моль	Ионы-участники
V <sub>3u</sub>	62	36,09	Eu, Er, Cu, S1, S2, S3	V <sub>2u</sub>	243	640,72	S1, S2 <sup>S</sup>
V <sub>1u</sub>	65	1,82	Eu <sup>S</sup> , S1, S2	V <sub>1u</sub>	245	69,05	S1 <sup>S</sup> , S2, S3
V <sub>2u</sub>	93	11,69	Eu <sup>S</sup> , Er <sup>S</sup> , Cu, S2 <sup>W</sup> , S3	V <sub>3u</sub>	258	506,11	S1, S2, S3 <sup>S</sup>
V <sub>3u</sub>	100	28,43	Eu, Er, Cu, S1, S2, S3	V <sub>1u</sub>	259	1447,84	Er <sup>W</sup> , Cu <sup>W</sup> , S1, S2, S3
V <sub>3u</sub>	105	62,48	Eu <sup>S</sup> , Er, Cu, S1, S2, S3	V <sub>3u</sub>	269	37,9	Cu, S1, S2, S3 <sup>S</sup>
V <sub>1u</sub>	112	25,84	Er, Cu, S1, S2, S3 <sup>W</sup>	V <sub>1u</sub>	279	106,85	Cu, S1, S2, S3 <sup>S</sup>
V <sub>1u</sub>	117,6	0,18	Eu, Er, Cu <sup>S</sup> , S1, S2	V <sub>3u</sub>	290	0,62	Cu, S1, S2 <sup>S</sup> , S3
V <sub>2u</sub>	118,1	47,99	Eu, Cu <sup>S</sup> , S3	V <sub>2u</sub>	294	251,33	Cu, S3 <sup>S</sup>
V <sub>3u</sub>	123,6	10,73	Eu, Cu, S1, S2	V <sub>1u</sub>	300	10,08	S1, S2 <sup>S</sup> , S3 <sup>S</sup>
V <sub>3u</sub>	129	148,97	Er, Cu <sup>S</sup> , S1, S2, S3	V <sub>1u</sub>	309	20,55	Cu <sup>W</sup> , S1 <sup>S</sup> , S2, S3
V <sub>1u</sub>	133	430,77	Eu <sup>S</sup> , Er, Cu, S1, S2	V <sub>3u</sub>	311	14,18	Cu <sup>W</sup> , S1, S2 <sup>S</sup> , S3
V <sub>1u</sub>	145	1,66	Er <sup>S</sup> , S1, S2, S3	V <sub>1u</sub>	320,5	12,41	S1, S2, S3 <sup>S</sup>
V <sub>2u</sub>	212,9	1950,47	Er <sup>W</sup> , S1, S2	V <sub>3u</sub>	324	0,16	S1 <sup>S</sup> , S2, S3 <sup>S</sup>
V <sub>3u</sub>	213,4	2113,62	Er <sup>W</sup> , Cu <sup>W</sup> , S1, S2, S3	где «S» – сильное, «W» – слабое смещение			

Таблица 1. Вычисленные значения частот колебаний и интенсивностей ИК спектра.

Экспериментальный спектр ИК поглощения хорошо согласуется с расчетным (рис., табл.). В низкочастотных ИК модах участвуют все ионы – Eu, Er, Cu, S. Наиболее интенсивные линии связаны с колебаниями S.

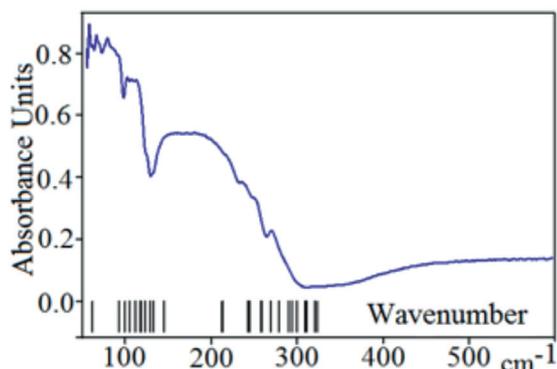


Рисунок 1. ИК спектр  $\text{EuErCuS}_3$  (вакуумный ИК Фурье спектрометре VERTEX 70V).

Расчеты позволили провести интерпретацию экспериментальных колебательных спектров, выявить молчащие моды, не проявляющиеся в спектрах, но влияющие на оптические свойства кристалла.