

УДК 544.225.23

## ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ SrScCuS<sub>3</sub>

М.В. Григорьев<sup>1</sup>, В.А. Чернышев<sup>2</sup>, Н.П. Шестаков<sup>3</sup>, А.В. Русейкина<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

<sup>2</sup>Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

<sup>3</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

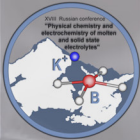
\*e-mail: adeschina@mail.ru

Инфракрасный спектр поглощения соединения SrScCuS<sub>3</sub> (рис.1) регистрировали в диапазоне 680–85 см<sup>-1</sup> с использованием спектрометра FTIR VERTEX 80V (BRUKER OPTIK GMBH), оснащенного ИК-датчиком RT-DTGS. Порошок исследуемого сульфида измельчали в агатовой ступке, а затем смешивали с полиэтиленом сверхвысокой молекулярной массы в соотношении 1:10 и прессовали в гранулы толщиной 0.26 мм.

Проведен *ab initio* расчет кристаллической структуры и фононного спектра SrScCuS<sub>3</sub> 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).

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

Тип колеб.	$\nu_{расч}, \text{см}^{-1}$	$I_{расч}, \text{км/моль}$	Ионы-участники
B <sub>1u</sub>	69	66	Sr <sup>S</sup> , Cu <sup>S</sup> , Sc <sup>S</sup> , S1 <sup>S</sup> , S2
B <sub>2u</sub>	119	3	Sr <sup>W</sup> , Cu <sup>S</sup> , Sc <sup>S</sup> , S1 <sup>S</sup> , S2
B <sub>2u</sub>	127	4	Sr <sup>S</sup> , Cu, Sc <sup>S</sup> , S1, S2 <sup>W</sup>
B <sub>3u</sub>	135	167	Sr <sup>S</sup> , Cu <sup>S</sup> , Sc, S1, S2 <sup>W</sup>
B <sub>1u</sub>	136	139	Sr, Cu, Sc <sup>S</sup> , S1 <sup>S</sup> , S2
B <sub>1u</sub>	154	150	Sr <sup>W</sup> , Cu <sup>S</sup> , Sc <sup>S</sup> , S1, S2 <sup>S</sup>
B <sub>3u</sub>	161	361	Sr <sup>S</sup> , Cu, Sc <sup>S</sup> , S1 <sup>S</sup> , S2 <sup>W</sup>
B <sub>2u</sub>	212	2097	Sr <sup>W</sup> , Cu <sup>W</sup> , Sc <sup>S</sup> , S1 <sup>S</sup> , S2 <sup>W</sup>
B <sub>3u</sub>	228	1	Cu <sup>W</sup> , Sc <sup>S</sup> , S1, S2
B <sub>1u</sub>	235	1771	Cu <sup>W</sup> , Sc <sup>S</sup> , S1, S2 <sup>S</sup>
B <sub>1u</sub>	280	13	Cu <sup>W</sup> , Sc <sup>S</sup> , S1, S2 <sup>S</sup>
B <sub>3u</sub>	302	120	Cu <sup>W</sup> , Sc <sup>W</sup> , S1, S2 <sup>S</sup>
B <sub>2u</sub>	311	176	Sr <sup>W</sup> , Cu, S1 <sup>W</sup> , S2 <sup>S</sup>
B <sub>3u</sub>	316	670	Sr <sup>W</sup> , Cu <sup>W</sup> , Sc <sup>S</sup> , S1, S2 <sup>W</sup>



Тип колеб.	$\nu_{расч.}, \text{см}^{-1}$	$I_{расч.}, \text{км/моль}$	Ионы-участники
$B_{1u}$	319	10	Cu, Sc, $S1^S$ , S2
$B_{3u}$	343	0,1	$Cu^W$ , Sc, $S1^S$ , S2

Обозначения: «s» означает сильное, а «w» - слабое смещение ионов в моде.

Экспериментальный спектр ИК поглощения хорошо согласуется с расчетным (рис. 1). В низкочастотных ИК модах участвуют все ионы – Sr, Sc, Cu, S.

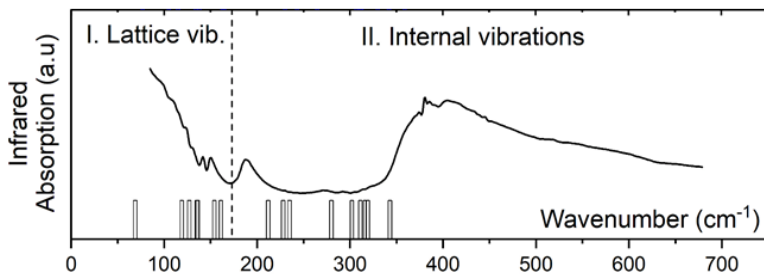


Рисунок 1. ИК спектр SrScCuS<sub>3</sub>.

Пропускание ИК-излучения в диапазоне 4000–400  $\text{см}^{-1}$  исследовали на ИК-Фурье-спектрометре ФСМ 1201. Для изучения пропускания в ИК-области спектра образец соединения SrScCuS<sub>3</sub> измельчался, перемешивался в агатовой ступке с порошком KBr до однородной массы и формовался (метод таблетирования). Смесь помещалась в пресс-форму ПФ13 и прессовалась в таблетку с помощью гидравлического пресса ППР-400 с усилием 21.3 МПа. На ИК-Фурье-спектре в области волновых чисел 3000–1800  $\text{см}^{-1}$  образец соединения является прозрачным для ИК-излучения, что подтверждается отсутствием полос поглощения излучения в этом диапазоне волновых чисел; в интервалах 3800–3000 и 1650–1400  $\text{см}^{-1}$  наблюдаются полосы поглощения, обусловленные валентными и деформационными колебаниями гидроксильных групп. Присутствие следовых количеств воды связано с тем, что соединение гигроскопично и в ходе приготовления таблетки имеет контакт с атмосферой.

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