

### ЗАКОНОМЕРНОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ В РЯДУ СОЕДИНЕНИЙ $\text{SrLnCuSe}_3$

*Останчук Е.А., Григорьев М.В., Кислицина А.А.,*

*Алексеева Н.А., Коровина Е.Е., Русейкина А.В.*

Тюменский государственный университет

625003, г. Тюмень, ул. Володарского, д. 6

В серии  $\text{SrLnCuSe}_3$  соединения кристаллизуются в двух пространственных группах *Pnma* ( $\text{Ln} = \text{La}–\text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}–\text{Dy}, \text{Y}$ ) и *Cmcm* ( $\text{Ln} = \text{Ho}–\text{Lu}, \text{Sc}$ ) и в трех структурных типах: структурный тип  $\text{Ba}_2\text{MnS}_3$  ( $\text{Ln} = \text{La}, \text{Ce}$ ), структурный тип  $\text{Eu}_2\text{CuS}_3$  ( $\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}–\text{Dy}, \text{Y}$ ), структурный тип  $\text{KZrCuS}_3$  ( $\text{Ln} = \text{Ho}–\text{Lu}, \text{Sc}$ ).

Спектры диффузного отражения соединений  $\text{SrLnCuSe}_3$  ( $\text{Ln} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Y}, \text{Er}, \text{Tm}, \text{Yb}, \text{Lu}$ ) регистрировали на спектрофотометре UV-2600, оснащенный приставкой ISR-2600Plus с фотоумножителем типа R-928 и InGaAs-детектором. Экспериментальные значения прямой запрещенной зоны для соединений  $\text{SrLnCuSe}_3$  были получены из модифицированной функции Кубелки – Мунка и представлены в таблице. Экспериментальные значения ширины запрещенной зоны соединений  $\text{SrLnCuSe}_3$  выше, чем у  $\text{EuLnCuSe}_3$  [1] (см. таблицу). Меньшие значения у  $\text{EuLnCuSe}_3$  обусловлены наличием перехода  $4f-5d$  в ионе  $\text{Eu}^{2+}$ . Самая узкая ширина запрещенной зоны 1.45 эВ характерна для соединения  $\text{SrYbCuSe}_3$ , что соответствует рекомендуемому оптимальному значению для фототальванических материалов, близкие значения наблюдались и у  $\text{EuYbCuSe}_3$  (1,38 эВ), см. таблицу. Ранее в работе [2] методом DFT с использованием функционала PBE была рассчитана ширина запрещенной зоны соединений  $\text{SrLnCuSe}_3$ , значения лежат в интервале 1,19–1,26 эВ. Расчетные значения оказались ниже, чем экспериментальные, что согласуется с данными о том, что расчет с негибридным функционалом PBE занижает величину щели [1].

**Расчетные и экспериментальные значения ширины  
запрещенной зоны соединений  $\text{SrLnCuSe}_3$  и  $\text{EuLnCuSe}_3$**

| BG, eV                                          | Nd   | Sm   | Gd   | Tb   | Dy   | Ho   | Y    | Er   | Tm   | Yb   | Lu   |
|-------------------------------------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| BG <sub>расч.</sub> ( $\text{SrLnCuSe}_3$ ) [2] | 1,26 | 1,19 | 1,19 | 1,19 | 1,19 | 1,19 | 1,22 | 1,19 | 1,19 | -    | 1,20 |
| BG <sub>эксп.</sub> ( $\text{SrLnCuSe}_3$ )     | 1,90 | 2,01 | 2,13 | 2,17 | 2,20 | 2,21 | 2,28 | 2,15 | 2,03 | 1,45 | 2,15 |
| BG <sub>эксп.</sub> ( $\text{EuLnCuSe}_3$ ) [1] | -    | 1,95 | 2,01 | 1,97 | 1,87 | 2,05 | 1,19 | -    | 2,06 | 1,38 | 2,09 |

1. Grigoriev M. V., Solovyov L. A., Ruseikina A. V. et al. // Int. J. Mol. Sci. 2022. Vol. 23. P. 1503.

2. Pal K., Xia Y., Shen J., He J. et al. // Comput. Mater. 2021. Vol. 7. P. 82.

*Измерения проводили на оборудовании ЦКП ТюмГУ «Рациональное природопользование и физико-химические исследования».*