

## Синтез, кристаллическая структура и электронное строение пентабората $\text{DyMgB}_5\text{O}_{10}$

Научный руководитель – Волкова Елена Александровна

*Котелевская Е.Ю.<sup>1</sup>, Кривчук В.О.<sup>2</sup>*

1 - Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия, *E-mail: katerina.kotelevska@mail.ru*; 2 - Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия, *E-mail: vasya-krivchuk@yandex.ru*

Бораты редкоземельных элементов (РЗЭ) привлекают внимание исследователей высокой термической стабильностью и превосходными люминесцентными свойствами. Магние-вые пентабораты  $\text{RMgB}_5\text{O}_{10}$  ( $\text{R} = \text{РЗЭ}$ ), впервые описанные в работе [2], являются весьма перспективными оптическими матрицами: особенности их полимерной структуры способствуют пространственному разделению ионов активатора и минимизируют концентрационное тушение люминесценции [1]. Цель настоящей работы — получение и комплексное исследование нового соединения  $\text{DyMgB}_5\text{O}_{10}$ .

Монокристаллы  $\text{DyMgB}_5\text{O}_{10}$  выращены спонтанной кристаллизацией из раствора-расплава на основе  $\text{K}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}$ . Выполнен рентгеноструктурный анализ монокристалла и методом ДСК изучено термическое поведение. Расчеты электронной структуры и плотности состояний проведены в рамках теории функционала плотности (DFT, функционал PBE) в пакете VASP. По данным РСА,  $\text{DyMgB}_5\text{O}_{10}$  кристаллизуется в моноклинной сингонии (пр. гр.  $P2_1/n$ ,  $a = 8.5473$ ,  $b = 7.5744$ ,  $c = 9.3598$  Å,  $\beta = 93.588^\circ$ ). Каркас структуры образован чередующимися анионными борокислородными слоями (из фундаментальных блоков  $[\text{B}_5\text{O}_{12}]^{3-}$ ) и катионными прослойками Dy–O–Mg. Ионы  $\text{Dy}^{3+}$  находятся в искаженных координационных полиэдрах  $\text{DyO}_{10}$ , которые формируют зигзагообразные цепочки вдоль оси b. Ионы  $\text{Mg}^{2+}$  локализованы в октаэдрах  $\text{MgO}_6$ , образующих изолированные димеры [3].

Методом ДСК установлено, что  $\text{DyMgB}_5\text{O}_{10}$  плавится инконгруэнтно при  $1072 \pm 5$  °С, что указывает на высокую термическую устойчивость кристаллической решетки.

Первопринципные расчеты показали, что соединение является широкозонным диэлектриком с непрямым оптическим переходом (ширина запрещенной зоны 4.9 эВ). Потолок валентной зоны сформирован преимущественно 2p-состояниями атомов кислорода и бора, тогда как дно зоны проводимости образовано 5d-состояниями ионов диспрозия.

Впервые получены кристаллы  $\text{DyMgB}_5\text{O}_{10}$  и расшифрована их структура. Установлено, что термическая стабильность и широкая запрещенная зона делают этот материал перспективной неорганической матрицей для создания новых люминесцентных материалов.

Выражаем благодарность Зубковой Н.В. за помощь в расшифровке кристаллической структуры  $\text{DyMgB}_5\text{O}_{10}$ .

### Источники и литература

- 1) Leonyuk N.I., Maltsev V.V., Volkova E.A. Crystal chemistry of high-temperature borates // *Molecules*. 2020. Vol. 25. P. 2450.
- 2) Saubat B., Vlasse M., Fouassier C. Synthesis and structural study of the new rare earth magnesium borates  $\text{LnMgB}_5\text{O}_{10}$  // *J. Solid State Chem.* 1980. Vol. 34. P. 271-277.
- 3) Volkova E.A. et al. The Synthesis, Structure, and Luminescent Properties of  $\text{TmMgB}_5\text{O}_{10}$  Crystals // *Materials*. 2023. Vol. 16. P. 6084.