

Synthese, Kristallstruktur und Eigenschaften von $\text{Mn}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$ und $\text{Fe}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$

Patrick Pohla, Arno Pfitzner*

Institut für Anorganische Chemie, Universität Regensburg,
Universitätsstraße 31, D-93040 Regensburg
E-mail: arno.pfitzner@chemie.uni-regensburg.de

Keywords: luminescence; manganese; iron; antimony; iodine

Die Darstellung von $\text{Mn}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$ und $\text{Fe}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$ erfolgte durch Festkörpersynthese in evakuierten Quarzampullen. Das Metalloxid (MnO bzw. FeO), Sb_2O_3 und SbI_3 wurden im Verhältnis 3:2:1 eingewogen und zwei Wochen bei 650 °C getempert. Beide Verbindungen kristallisieren in der Raumgruppe $P\bar{1}$ (Nr. 2) mit den Gitterkonstanten $a = 8,213(3)\text{Å}$, $b = 12,423(3)\text{Å}$, $c = 8,789(2)\text{Å}$, $\alpha = 77,65(2)^\circ$, $\beta = 69,99(2)^\circ$, $\gamma = 84,34(2)^\circ$ ($\text{Mn}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$) bzw. $a = 8,212(3)\text{Å}$, $b = 12,163(3)\text{Å}$, $c = 8,845(3)\text{Å}$, $\alpha = 78,92(2)^\circ$, $\beta = 70,07(3)^\circ$, $\gamma = 84,45(2)^\circ$ ($\text{Fe}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$). Die Strukturverfeinerung konvergierte für $\text{Mn}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$ bei $R_1 = 0,055$ und $wR_2 = 0,064$ (181 Parameter und 9457 Reflexe). Für $\text{Fe}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$ war $R_1 = 0,035$ und $wR_2 = 0,058$ (181 Parameter und 10690 Reflexe). Die Verbindungen bilden Schichten senkrecht zur c -Achse aus, die jeweils von Iodatomen begrenzt werden.

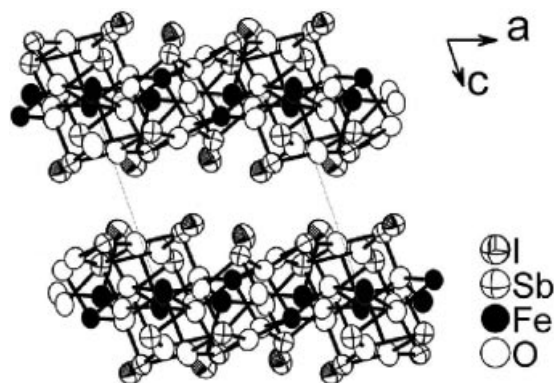


Abbildung 1 Ausschnitt aus der Struktur von $\text{Fe}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$ entlang $[010]$. Ellipsoide entsprechen 95% Aufenthaltswahrscheinlichkeit.

Zur Bestimmung der optischen Bandlücken wurden UV/vis-Spektren aufgenommen. Man erhält aus den Absorptionskanten eine optische Bandlücke von 3,09 eV für die Mn-Verbindung und 2,41 eV für die Fe-Verbindung.

$\text{Mn}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$ wurde auf Lumineszenz hin untersucht (Halbleiterslaser, Anregungswellenlänge 405 nm, Maximalleistung 50 mW). Das Lumineszenzmaximum bei 417 nm und zwei schwächere Peaks bei 380 nm und 550 nm deuten auf einen $d-d$ -Übergang am Mangan hin, der bereits beim Mn-dotierten Spinell $\text{Mn:MgAl}_2\text{O}_4$ beobachtet wurde [1]. Weitere Untersuchungen sollen klären, ob eine Anregung des Mn^{2+} über Antimon erfolgt oder direkt. Bei $\text{Fe}_3\text{Sb}_5\text{O}_9\text{I}_3$ wurde keine Lumineszenz beobachtet.

[1] A. Tomita, T. Sato, K. Tanaka, Y. Kawabe, M. Shirai, K. Tanaka, E. Hanamura, *J. Luminescence* **2004**, *109*, 19.