

Eu₅(BO₃)₄ – ein teilgeordnetes gemischtvalentes Borat

Henning A. Höpfe*, Christine Grumbt,
Michel Panzer, Karolina Kazmierczak

Institut für Anorganische und Analytische Chemie,
Albert-Ludwigs-Universität, Albertstr. 21, D-79104 Freiburg i. Br.
E-mail: henning.hoeppe@ac.uni-freiburg.de

Keywords: mixed valence, europium, crystal structure

Wir beschäftigen uns u. a. mit der systematischen Suche nach effizienten Leuchtstoffen für drei denkbare Anwendungen. Als Quantenteiler [1] in Xe-Leuchtstoffröhren und als Upconverter in Solarzellen [2] erscheinen beispielsweise die Seltenerdphosphosphate SE(PO₃)₃ [3] interessant, für weiße Leuchtdioden [4] besonders mit Europium(II) dotierte Strontiumverbindungen. Bei diesen wurden Quantenausbeuten bis nahe 100% gemessen [5]. Bei Untersuchungen mit dem Ziel neuer Mehrfarbenleuchtstoffe wie α-Sr(PO₃)₂:Eu,Mn [6,7] stießen wir auf ein gemischtvalentes Europiumborat: Eu₅(BO₃)₄ (**1**) kristallisiert in Form tiefgelber Plättchen in einer dreifachen Überstruktur von Sr₃Er₂(BO₃)₄ (**2**) [8] der Raumgruppe *Pnma* (*Z* = 12, *a* = 22.2523(14) Å, *b* = 15.9911(9) Å, *c* = 8.7631(7) Å, *wR2* = 0.117, *RI* = 0.050, 2118 Reflexe / 209 Parameter). In der Struktur von **1** liegen nebeneinander Eu²⁺ und Eu³⁺-Ionen vor, die von terminalen Sauerstoffatomen der Orthoborat-anionen koordiniert werden. Auf Basis von Bindungslängenbetrachtungen, die von *Bärnighausen* als sehr zuverlässiges Verfahren eingeführt wurden [9,10] und gitterenergetischen Rechnungen gelangten wir zu einem partiellen Ordnungsmodell zwei- und dreiwertigen Europiums. Unsere Verfeinerung von **2** ergab im Gegensatz zu den Literaturdaten [8] eine Mischbesetzung auf den Kationenlagen (*Pnma*, *Z* = 4, 7.3808(2)Å, 15.8894(4)Å, 8.6781(2)Å, *wR2* = 0.099, *RI* = 0.037).

[1] C. Ronda, *J. Luminesc.* **2002**, *100*, 301.

[2] A. Shalav, B. S. Richards, T. Trupke, K. W. Krämer, H. U. Güdel, *Appl. Phys. Lett.* **2005**, *86*, 13505.

[3] H. A. Höpfe, S. J. Sedlmaier, *Inorg. Chem.* **2007**, *46*, 3468.

[4] R. Müller-Mach, G. Müller, M. R. Krames, H. A. Höpfe, F. Stadler, W. Schnick, *Phys. Stat. Sol. A* **2005**, *202*, 1727.

[5] T. Jüstel, H. Nikol, C. Ronda, *Angew. Chem.* **1998**, *110*, 3250; *Angew. Chem. Int. Ed.* **1998**, *37*, 3084.

[6] H. A. Höpfe, *Solid State Sci.* **2005**, *7*, 1209.

[7] H. A. Höpfe, M. C. Bröhmer, M. Daub, *Chem. Mater.* **2007**, *19*, 6358.

[8] G. K. Abdullaev, C. Mamedov, *Zh. Strukt. Khimii* **1976**, *17*, 188.

[9] H. Bärnighausen, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1970**, *374*, 201.

[10] F. T. Lange, *Dissertation*, Universität Karlsruhe **1992**.