

УДК 541.65/.654+541.17

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ С ОСНОВОЙ АЛЮМОИТТРИЕВОГО ГРАНАТА© 2024 г. С. Д. Плехович^{1, *}, А. Д. Плехович², А. М. Кутыин²,
Е. Е. Ростоккина², А. В. Будруев¹, Т. Ю. Бирюкова¹¹Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия.²Институт химии высококочистых веществ им. Г.Г. Десятых РАН, Нижний Новгород, Россия

*E-mail: plekhovich@ihps-nnov.ru

Поступила в редакцию 07.12.2023 г.

После доработки 04.04.2024 г.

Принята к публикации 04.04.2024 г.

Лазерный материал $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG), первоначально известный в форме монокристалла, свое распространение и широкую коммерческую реализацию получил в виде оптической керамики. Стремление к расширению функциональности материалов из нанокристаллов за счет размерного эффекта актуализирует изучение влияния их строения на оптические (колебательные и электронные) и другие свойства новых перспективных материалов с основой YAG, в том числе в составе стеклокерамики. В работе методами DFT/uPBE/PBE/SDD, DFT/uPBE/PBE/lanl2DZ и DFT/uB3PW91/SDD рассчитаны модели фрагментов кристаллического алюмоиттриевого граната. Произведен расчет ИК-спектров методом DFT/uPBE/PBE/lanl2DZ, а также выполнено соотнесение полос поглощения рассчитанных волновых чисел с измеренными. Методом DFT/RB3PW91/SDD рассчитан электронный спектр поглощения и энергии уровней.

Ключевые слова: алюмоиттриевый гранат, структурные фрагменты, ИК- и КР-спектры, электронный спектр

DOI: 10.31857/S0023119324040022 EDN: TQJCPG

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время прозрачная керамика на основе алюмоиттриевого граната находит широкое применение в качестве активных элементов лазеров [1, 2]. Керамика, в отличие от монокристаллических структур, обладает рядом неоспоримых преимуществ, включающих возможность менее затратного изготовления массивных образцов с введением в состав большего числа активных ионов, равномерно распределенных по всему образцу [3]. Керамические образцы оксида иттрия и YAG, как правило, имеют пористую структуру с пора́ми размером 1–500 нм, что способствует образованию собственных центров люминесценции, свойственных кристаллическим структурам. В этих структурах наблюдаются полосы люминесценции в области 320, 350, 490, 510, 600–730 нм, природа происхождения которых достаточно хорошо изучена в работах [4–6]. Кроме вышперечисленных полос, для керамического Се:YAG появляется дополнительная полоса при 360 нм, природа которой до конца не выяснена.

В работе [4] отмечено, что для номинально чистого образца YAG свойственны только две ярко выраженные полосы поглощения при длинах волн

255 и 340 нм, а также проявляется слабовыраженная полоса поглощения при 455 нм. При облучении, например Се:YAG, проявляется дополнительная ярко выраженная полоса поглощения при 300 нм.

Из ИК-спектров в работе [7] для отожженных при различных температурах образцов ксерогелей состава алюмоиттриевого граната отмечены: полоса 3380–3460 cm^{-1} (2959–2890 нм) валентных колебаний группы O–H; полоса при 1560 cm^{-1} симметричных валентных колебаний карбоксилатной группы O–C=O; а также ярко выраженные колебания при 800–400 cm^{-1} , относящиеся к колебаниям групп атомов Y–O, Al–O. В работе [4] измерены ИК-спектры для чистого образца YAG, спекание которого происходило при экстремальных давлениях от 1 до 8 ГПа. Отмечаются наиболее интенсивные полосы поглощения при значениях волновых чисел 430, 455, 475, 513, 567, 690, 729, 789 cm^{-1} .

С увеличением прикладываемого давления при спекании образцов наблюдается сдвиг и уширение полос поглощения от 1 до 4 cm^{-1} . Данное явление авторы объясняют частичной аморфизацией образцов при действующем давлении. Похожее явление наблюдалось и в Рамановском спектре для наблю-

даемых в измеренном диапазоне значений наиболее интенсивных волновых чисел: 160, 218, 259, 340, 371, 400, 729 и 781 см^{-1} и менее выраженных при 142, 294, 545, 689, 856 см^{-1} . Однако по сравнению с ИК-спектром наблюдалось значительное повышение интенсивности измеряемых пиков с повышением давления.

Компьютерный дизайн системы $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3$ и изучение влияния строения на оптические и электронные характеристики является актуальным направлением исследования, ввиду многообразия форм получения $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (YAG) в виде монокристалла, керамики, стекла, стеклокерамики и кристаллических волокон для создания оптических функциональных материалов. Поиск новых форм в работе [8] привел к получению при 1100°C керамического волокна диаметром 10 мкм из ультрамалых (23 нм) частиц, которое показало высокую прочность на разрыв.

Цель работы — методами квантовой химии установить структурно-геометрическую модель кристаллического кластера алюмоиттриевого граната ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$) по соответствию экспериментальному ИК-спектру с последующим расчетом волновых чисел. Соотнести наиболее интенсивные полосы поглощения с видом колебаний. Определить влияние строения различных групп атомов на колебания в ИК-спектре. Рассчитать электронный спектр, выявить наиболее интенсивные полосы поглощения для сравнения с экспериментальными данными.

ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ МЕТОДЫ И ПОДХОДЫ

Экспериментальная часть работы включает в себя синтез на основе золь-гель метода дисперсной формы $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ алюмоиттриевого граната (YAG) — объекта квантово-химического моделирования.

Синтез бинарных гидрозолей проводили по ранее разработанной методике [9]. На первом этапе получали прозрачные агрегативно устойчивые гидрозоли гидроксидов алюминия—иттрия смешанного состава $\text{Al}_5(\text{NO}_3)_3(\text{OH})_{12} \cdot 3\text{Y}(\text{OH})_2(\text{OOCCH}_3)_3$, которые на втором этапе подвергали высушиванию, диспергированию и термообработке до 1250°C с формированием фазы YAG.

ИК-спектр тонкого слоя порошка граната зарегистрирован Фурье-спектрофотометром Shimadzu IR Prestige-21 в диапазоне 4000—400 см^{-1} .

Расчет геометрии моделей YAG производился при помощи программы Gaussian03 [10]. Для исследования выбрано несколько моделей:

1) $\text{Y}_6\text{Al}_{15}\text{O}_{15}$ — фрагмент кристаллического алюмоиттриевого граната, взятый из базы данных [11], который был масштабирован и помещен в редактор PBC Editor, геометрия оптимизирована по минимуму потенциальной энергии методом DFT/uPBE/PBE/SDD.

2) $\text{Y}_7\text{Al}_9\text{O}_{26}$ — фрагмент кристаллического алюмоиттриевого граната, состоящий из 42 атомов, в котором к октаэдрическим позициям кислорода в алюминии добавлены тетраэдрические позиции и проведена оптимизация геометрии по минимуму энергии методом DFT/uB3PW91/SDD.

Нахождение оптимальной геометрии исследуемых моделей кластеров производилось верификацией рассчитанных волновых чисел с экспериментальными значениями в рамках метода DFT/uB3PW91/SDD. При этом для рассчитанных волновых чисел применяли масштабирующий множитель (scale factor) от 1.0 до 0.91, полная ширина на уровне половины высоты (FWHM) составила 6–14 см^{-1} .

Расчет электронных спектров производился методом DFT/rB3PW91/SDD для 260 энергетических уровней в синглетном состоянии.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Объектом исследования является кристаллический образец алюмоиттриевого граната, полученный золь-гель методом и отожженный при температуре 1250°C.

В работе авторов [12] и на рис. 1а приводится строение молекулы $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$. Она включает в себя группы AlO_4^{5-} , AlO_6^{9-} , в которых O находится в тетраэдрических и октаэдрических позициях ($d4$ и $d6$ соответственно). Y представлен в виде YO_8^{13-} , в которых O находится в додекаэдрических позициях ($d8$). Аналогичная структура представлена в базе данных [11], в которой приведены основные длины связей и углы между атомами, а также другие параметры кристаллической решетки алюмоиттриевого граната.

Первоначальная геометрия исследуемого алюмоиттриевого граната взята из базы данных [11], в которой приведена кубическая ячейка размером $12.0 \times 12.0 \times 12.0 \text{ \AA}$. $V = 1729.39 \text{ \AA}^3$, содержащая 160 атомов. В ячейке содержатся группы атомов AlO_4^{5-} , AlO_6^{9-} , YO_8^{13-} . Длины связей и углы основных групп приведены в табл. 1 и 2. Для получения начальной геометрии и ее дальнейшей оптимизации по минимуму потенциальной энергии, число атомов было уменьшено со 160 до 36 при помощи масштабирующего множителя, встроенного в редактор PBC

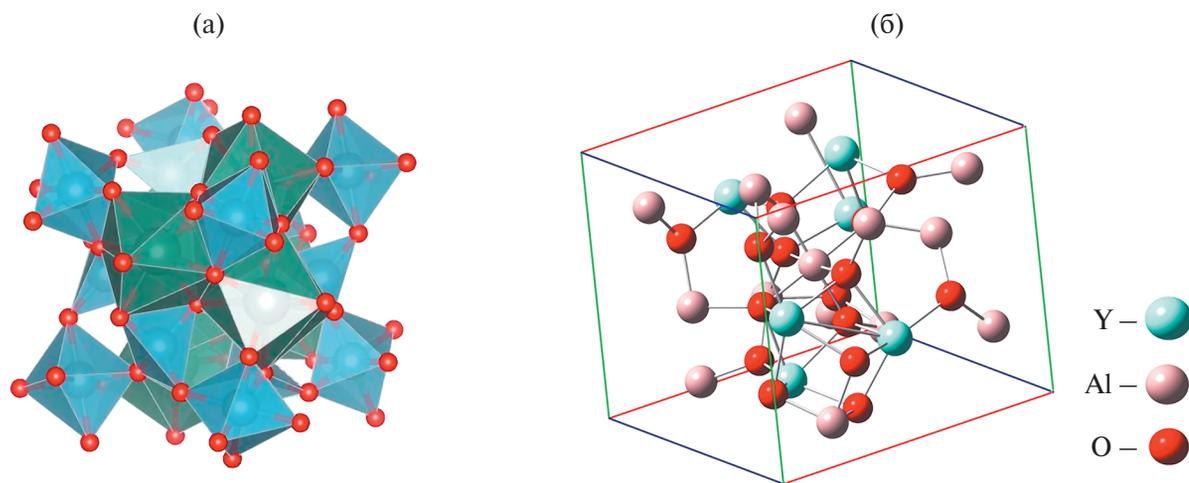


Рис. 1. Строение молекулы алюмоиттриевого граната: а – в соответствии с работой [11, 12], б – рассчитанная методом DFT/уРВЕРВЕ/SDD.

Таблица 1. Длины связей и углы в молекуле алюмоиттриевого граната

Сегмент	r (Å)		Угол (град)		
	Al–O		O ₁ -Al-O ₃ O ₁ -Al-O ₄ O ₄ -Al-O ₃ O ₆ -Al-O ₅	O ₁ -Al-O ₅ O ₁ -Al-O ₆ O ₅ -Al-O ₄ O ₃ -Al-O ₆	O ₁ -Al-O ₂
	Эксп. [11]	1.94	86.87	93	180
	Y ₆ Al ₁₅ O ₁₅	1.93–1.95	85.7–85.72	91.4–92.6	177
	Al–O		O ₁ -Al-O ₂ O ₁ -Al-O ₄ O ₂ -Al-O ₃ O ₂ -Al-O ₄	O ₁ -Al-O ₃ O ₄ -Al-O ₃	
	Эксп. [11]	1.78	114.37	100.06	
	Y ₇ Al ₉ O ₂₆	1.79–1.81	114.0	96.8	

Editor программы gaussian. Параметры ячейки составили значение $6.4 \times 6.4 \times 6.4 \text{ \AA}$. Стехиометрический состав – Y₆Al₁₅O₁₅ и рисунок начальной геометрии приведены на рис. 16. Затем проведена оптимизация геометрии в соответствии с минимумом потенциальной энергии и выполнен расчет волновых чисел, полученной геометрии методом DFT/уРВЕРВЕ/SDD (рис. 16). В соответствии с рис. 16 в состав оптимизированной молекулы входит группа AlO₆⁹⁻, в которой кислород находится в октаэдрических позициях. Приведенная группа расположена в центре ячейки. Вокруг группы располагаются атомы алюминия и атомы иттрия в группах вида – AlO₃³⁻,

YAlO₂²⁺. Следует отметить, атомы иттрия и алюминия в модели находятся в качестве краевых атомов, поэтому не наблюдаются группы AlO₄, AlO₆. Однако положения атомов Al и Y соответствуют модели молекулы, представленной в работе [11]. Сопоставление геометрии длин связей и углов для начальной геометрии с известными из эксперимента выполнено только для группы AlO₆⁹⁻ и приведено в табл. 1.

При сравнении длин связей и углов видно, что результат в среднем соответствует эксперименту с незначительным разбросом в меньшую сторону. Для найденной структуры рассчитан ИК-спектр, приведенный на рис. 2.

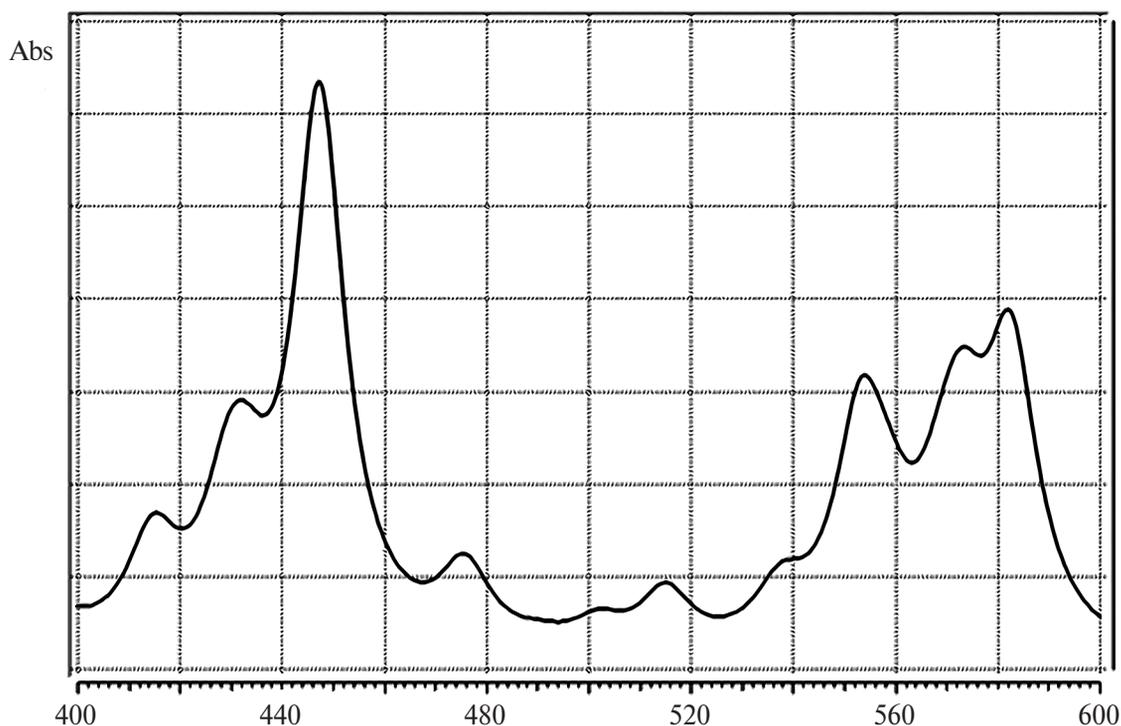


Рис. 2. Рассчитанный ИК-спектр алюмоиттриевого граната состава $Y_6Al_{15}O_{15}$ (scale factor – 0.91 и FWHM = 6 cm^{-1}).

В ИК-спектре алюмоиттриевого граната, измененного в работе [3], наблюдаются характерные полосы поглощения при значениях волновых чисел: 430, 455, 475, 513, 567, 690, 729, 789 cm^{-1} . Однако в рассчитанном ИК-спектре на рис. 2 отсутствуют какие-либо колебания при значениях волновых чисел выше 600 cm^{-1} и присутствуют при значениях 415, 433, 447, 476, 569, 583 cm^{-1} . Причем наиболее интенсивные при 447 cm^{-1} относятся к $\delta(AlO_3)$, 475 cm^{-1} к $\delta(AlO_6)$, 569–583 cm^{-1} к $\nu(YAlO)$. Геометрия построенной модели $Y_6Al_{15}O_{15}$ частично совпадает с моделью из работ [11, 12], а колебания свыше 600 cm^{-1} , вероятнее всего, относятся к колебаниям в группах AlO_4^{5-} и YO_8^{13-} и к связанными с ними атомами.

Таким образом, полученная модель совпадает с зарегистрированным спектром при значениях волновых чисел до 600 cm^{-1} . Для дальнейших исследований было решено усложнить модель, добавив недостающие группы атомов в виде тетраэдров $(AlO_4)^{5-}$. Методом DFT/uB3PW91/SDD оптимизирована по минимуму потенциальной энергии структура, состоящая из 42 атомов, включающих в себя недостающие группы. Таким образом, разработана модель состава $Y_7Al_9O_{26}$, включающая основные группы и ИК-спектр, который согласуется с экспериментально определенным.

В рассчитанном ИК-спектре для модели $Y_7Al_9O_{26}$ на рис. За обнаруживаются наиболее интенсивные

полосы поглощения при $\nu = 825, 792, 735, 687, 570, 517, 480, 454, 426, 400 cm^{-1}$. В работе [3] и зарегистрированном нами спектре проявляются наиболее интенсивные полосы поглощения при 820 cm^{-1} , относящиеся к колебаниям групп $\nu(Y-O, Al-O)$ и при 789, 729, 690, 567, 513, 475, 455, 430 cm^{-1} . При сопоставлении рассчитанных с экспериментальными значениями обнаружено, что соответствующие волновые числа совпадают с разбросом в диапазоне от -5 до $+4 cm^{-1}$. Сложности соотношения значений частот к отдельным группам обусловлены тем, что большинство из них относятся к колебаниям групп атомов, содержащих Al–O. При колебательной визуализации на фоне движения всех атомов по всему кластеру некоторые удалось идентифицировать (см. табл. 2).

При оптимальной геометрии для $Y_7Al_9O_{26}$ методом TD-SCF/DFT/rB3PW91/SDD вычислены энергии электронных уровней в синглетном состоянии. Наиболее интенсивные по величине энергетические переходы между уровнями представлены в табл. 3.

При сопоставлении рассчитанных длин волн поглощения с известными из литературы значениями для алюмоиттриевого граната [4, 13] отмечено наличие полос 0.255 и 0.340 мкм, а также слабовыраженной полосы при 0.455 мкм, которая появлялась в номинально чистых образцах. По расчетам (табл. 3

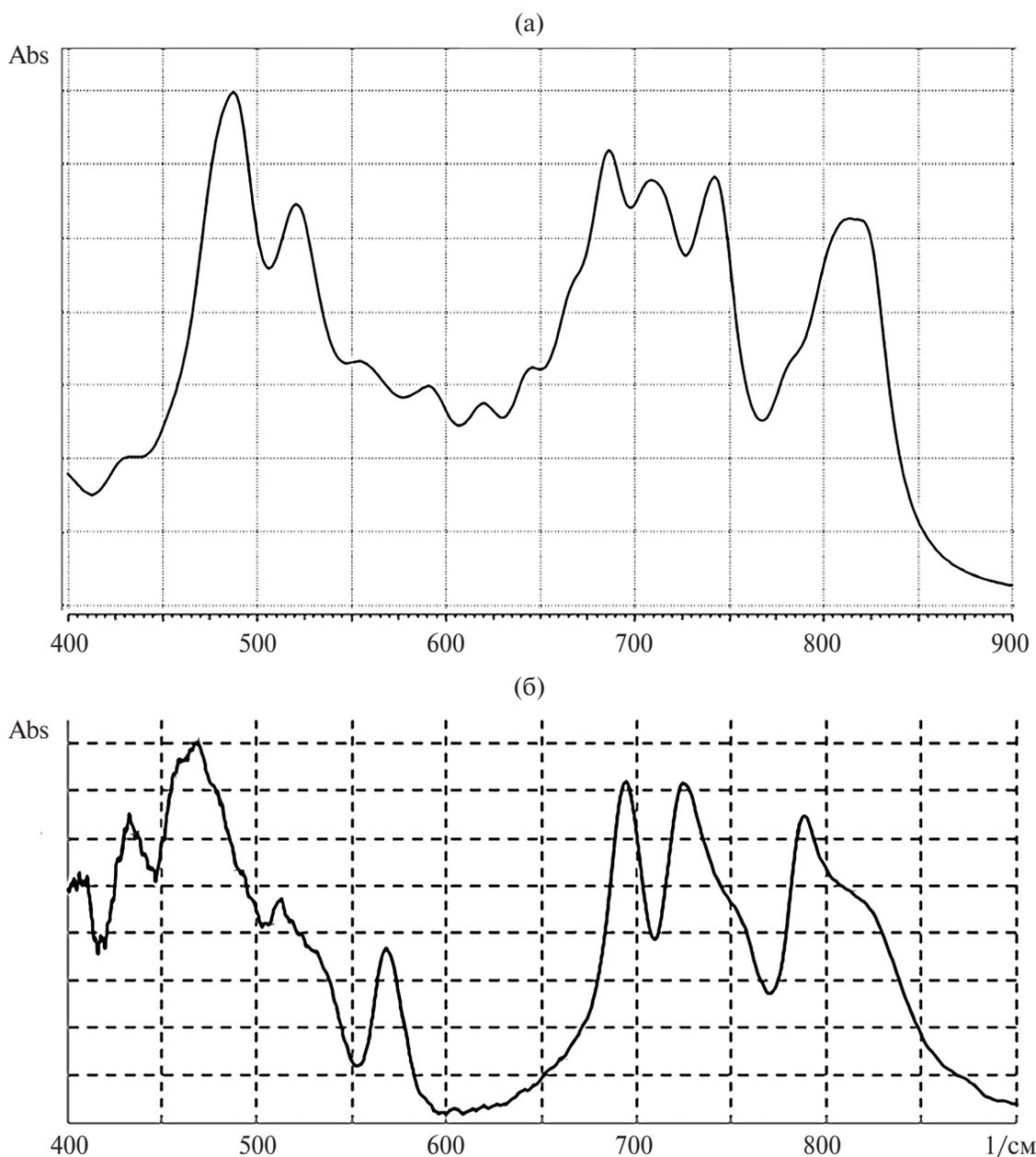
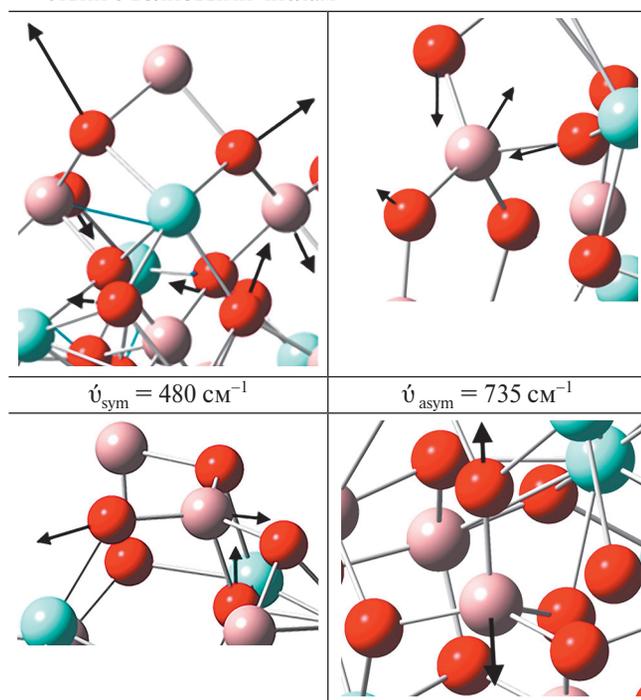


Рис. 3. (а) Рассчитанный ИК-спектр (состав $Y_7Al_9O_{26}$; scale factor – 1.0 и FWHM = 12 cm^{-1}), (б) зарегистрированный ИК-спектр алюмоиттриевого граната.

и рис. 4) наблюдаются высокоинтенсивные полосы поглощения вблизи 0.255 мкм и умеренно выраженные при 0.340 мкм для структуры, находящейся в синглетном состоянии, а также полосы поглощения от 0.271 до 0.607 мкм в триплетном состоянии. Переход из синглетного в триплетное состояние (интеркомбинационная конверсия (ИКК)) возможен в связи с близостью двух уровней вблизи длины волны 0.272 мкм . Люминесценция при таком переходе с последующим испусканием, вероятнее всего, будет наблюдаться в области УФ и видимого света, что подтверждается работами авторов [4], где диа-

пазон испускания составляет $0.250\text{--}0.850\text{ мкм}$ со слабой и широкой полосой в части приведенного диапазона $0.550\text{--}0.850\text{ мкм}$.

Более детальный характер поглощения при значениях длин волн 0.254 и 0.34 мкм в соответствии с работой [4] приписывают к дырочным центрам O_3^{-2} , ассоциированным с вакансиями при Al^{3+} (0.255 мкм) и с вакансиями при Y^{3+} (0.340 мкм). В табл. 4 приведены номер и вид НВО орбитали, принадлежащей к группе с наблюдаемыми энергетическими переходами.

Таблица 2. Виды колебаний групп атомов в соответствии с волновыми числами

Среди множества вычисленных переходов к поглощению на длине волны в 0.254 мкм можно отнести переход в связанных атомах Al₁₉ и O₂₅. А при длине волны в 0.340 мкм наблюдаются переходы в системе связанных атомов O₂₀, O₁₈ и Y.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами квантовой химии (Gaussian03w) построена и оптимизирована по минимуму потенциальной энергии модель кластера алюмоиттриевого граната. Модель включает в себя основные группы атомов: AlO₄⁵⁻, AlO₆⁹⁻, в которых O находится в тетраэдрических и октаэдрических позициях (*d4* и *d6* соответственно). Y представлен в виде групп YO₃³⁻, YO₄⁵⁻, YO₈¹³⁻. В соответствии с моделью рассчитаны ИК-спектры. Полученные спектры соотнесены с экспериментальными и выявлены некоторые закономерности: для волновых чисел 450–600 см⁻¹ наблюдаются колебания, отнесенные к группам (AlO₆)⁹⁻, (YO₄)⁵⁻, а в области 600–800 см⁻¹ – к группам (AlO₄)⁵⁻ и связанным с ними атомами. В рассчитанных UV-Vis спектрах обнаружена возможность ИКК конверсии при длине волны в 0.272 мкм. Наблюдается высокоинтенсивная полоса поглощения при 0.255 мкм и менее выраженная при 0.340 мкм, а также умеренно выраженные в диапазоне от 0.4 до 1 мкм. Обнаружено, что полоса поглощения при 0.254 мкм ассоциируется с атомами Al и

Таблица 3. Энергия переходов и длина волны поглощения для Y₇Al₉O₂₆

Энергия перехода, эВ		Длина волны поглощения, мкм	
синглет	триплет	синглет	триплет
3.6	2.0	0.340	0.607
3.8	2.3	0.329	0.544
4.4	2.8	0.285	0.437
4.6	4.6	0.272	0.271
4.8	-	0.255	-
4.9	-	0.254	-

Таблица 4. Энергетические переходы и соответствующие им NBO орбитали

Длина волны, нм	Переходы электронов на соотв. NBO орбитали	NBO орбитали
254	201 → 207 201 → 209 201 → 210 201 → 211 201 → 212 201 → 213 201 → 215	201-LP* (Al ₁₉) 211-LP (O ₂₅) 213-LP (O ₂₉) 212-LP (Al ₂₆)
340	200 → 202 200 → 203	200-LP (O ₁₈) 202-LP (O ₂₀) 203-LP (O ₂₀)

LP, LP* – связывающая и разрыхляющая орбиталь, приписываемая неподеленным парам одного атома.

O, а при 0.340 мкм – с атомами кислорода O₃²⁻, связанными с атомами иттрия.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 20-73-10110, <https://rscf.ru/en/project/20-73-10110/>

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Осипов В.В., Шитов В.А., Максимов Р.Н., Соломонов В.И., Лукьяшин К.Е., Орлов А.Н. // Фотоника. 2018. Т. 12. № 3. С. 318–334.
2. Ikesue A., Aung Y.L., Taira T., Kamimura T., Yoshida K., Messing. G.L. // Annu. Rev. Mater. Res. 2006. V. 36. P. 397.
3. Lukowiak A., Wiglusz R.J., Maczka M., Gluchowski P., Strek W. // Chemical Physics Letters. 2010. V. 494. № 4–6. P. 279–283. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2010.06.033>
4. Соломонов В.И., Осипов В.В., Шитов В.А., Лукьяшин К.Е., Бубнова А.С. // Оптика и спектроскопия. 2020. Т. 128, вып. 1. С. 5–9. <https://doi.org/10.21883/OS.2020.01.48831.117-19>

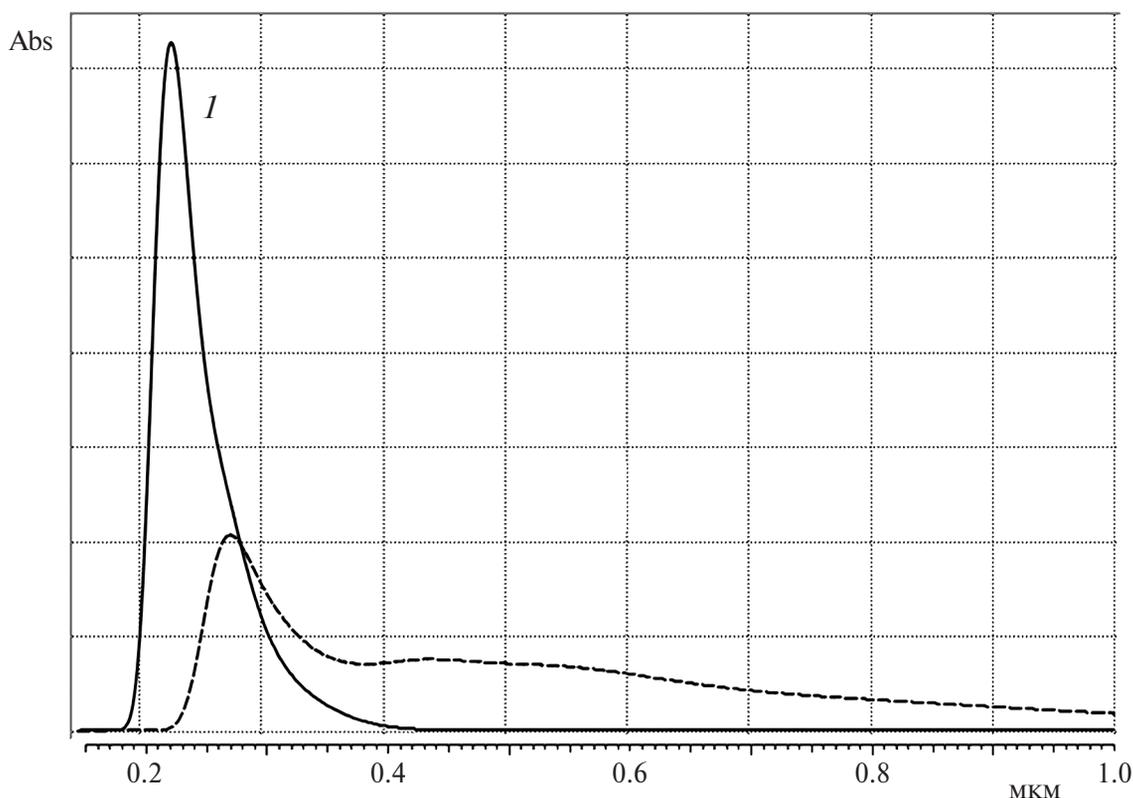


Рис. 4. Рассчитанный методом DFT/RB3PW91/SDD электронный спектр модели $Y_7Al_9O_{26}$ (1 – синглетное состояние, 2 – триплетное состояние).

5. Волженская Л.Г., Зоренко Ю.В., Пацаган Н.И., Пашковский М.В. // Опт. и спектр. 1987. Т. 63. № 1. С. 135.
6. Зоренко Ю.В., Пашковский М.В., Батенчук М.М., Лимаренко Л.Н., Назар И.В. // Опт. и спектр. 1996. Т. 80. № 5. С. 776.
7. Balabanov S.S., Gavrishchuk E.M., Rostokina E.Ye., Plekhovich A.D., Kuryakov V.N., Amaratov S.V., et al. // Ceramics International. 2016. V. 42. P. 17571–17580. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.08.071>
8. Bangjun L., Ke Gai, Qian W., Tong Z. // Ceram. Int. 2023. V. 49. № 19. P. 32318–32323. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.07.098>
9. Балабанов С.С., Гаврищук Е.М., Дроботенко В.В., Плехович А.Д., Ростокина Е.Е. // Неорг. Матер. 2014. Т. 50. № 10. С. 1114–1118. <https://doi.org/10.7868/S0002337X14100030>
10. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., et al. // Gaussian 03 Gaussian, Inc., Wallingford, CT. 2003.
11. Data retrieved from the Materials Project for $Y_3Al_5O_{12}$ (mp-3050) from database version v2022.10.28. <https://doi.org/10.17188/1204905>
12. Dobrzycki Ł., Bulska E., Pawlak D.A., Frukacz Z., Wozniak K. // Inorg. Chem. 2004. V. 43. P. 7656–7664. <https://doi.org/10.1021/ic049920z>
13. Роозе Н.С., Анисимов Н.А. // Опт. и спектр. 1975. Т. 38. № 3. С. 627.

QUANTUM-CHEMICAL MODELING OF DISPERSED SYSTEMS WITH THE YTTRIUM ALUMINUM GARNET BASE

C. D. Plekhovich^{a,*}, A. D. Plekhovich^b, A. M. Kutiin^b,
E. E. Rostokina^b, A. V. Budruev^a, T. Yu. Biryukova^a

^a Lobachevsky State University, Russia, Nizhny Novgorod, Russia

^b Institute of Chemistry of High-Purity Substances of the Russian Academy of Sciences (ICHPS RAS), Nizhny Novgorod, Russia

*E-mail: plekhovich@ihps-nnov.ru

Laser material $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG), originally known in the form of a single-crystal, has been distributed and widely commercialized in the form of optical ceramics. The desire to expand the functionality of materials made of nanocrystals due to the size effect actualizes the study of the influence of their structure on the optical (vibrational and electronic) and other properties of new promising materials with the YAG base including glass ceramics. In this work, models of crystalline alumina-iodine garnet fragments have been calculated by DFT/uPBEPBE/SDD, DFT/uPBEPBE/lanl2DZ, and DFT/uB3PW91/SDD methods. The IR spectra were calculated by DFT/uPBEPBE/lanl2DZ method and the absorption bands of the calculated wave numbers were correlated with the measured ones. The electronic absorption spectrum and energy levels were calculated by the DFT/RB3PW91/SDD method.

Keywords: alumina garnet, structural fragments, IR and CD spectra, electronic spectrum

REFERENCES

1. Osipov V.V., Shitov V.A., Maksimov R.N., Solomonov V.I., Lukyashin K.E., Orlov A.N. // *Photonics*. 2018. V. 12. № 3. P. 318–334.
2. Ikesue A., Aung Y.L., Taira T., Kamimura T., Yoshida K., Messing G.L. // *Annu. Rev. Mater. Res.* 2006. V. 36. P. 397.
3. Lukowiak A., Wiglusz R.J., Maczka M., Gluchowski P., Strek W. // *Chemical Physics Letters*. 2010. V. 494. № 4–6. P. 279–283.
<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2010.06.033>
4. Solomonov V.I., Osipov V.V., Shitov V.A., Lukyashin K.E., Bubnova A.S. // *Optics and Spectroscopy*. 2020. V. 128, Iss. 1. P. 5–9.
<https://doi.org/10.21883/OS.2020.01.48831.117-19>
5. Volzhenskaya L.G., Zorenko Y.V., Patsagan N.I., Pashkovsky M.V. // *Opt. and Spectrum*. 1987. V. 63. № 1. P. 135.
6. Zorenko Y.V., Pashkovsky M.V., Batenchuk M.M., Limarenko L.N., Nazar I.V. // *Opt. and Spectrum*. 1996. V. 80. No. 5. P. 776.
7. Balabanov S.S., Gavrishchuk E.M., Rostokina E.Ye., Plekhovich A.D., Kuryakov V.N., Amarantov S.V., et al. // *Ceramics International*. 2016. V. 42. P. 17571–17580.
<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.08.071>
8. Bangjun L., Ke Gai, Qian W., Tong Z. // *Ceram. Int.* 2023. V. 49. № 19. P. 32318–32323.
<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.07.098>
9. Balabanov S.S., Gavrishchuk E.M., Drobotenko V.V., Plekhovich A.D., Rostokina E.E. // *Neorg. Mater.* 2014. V. 50. № 10. P. 1114–1118.
<https://doi.org/10.7868/S0002337X14100030>
10. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., et al. // *Gaussian 03 Gaussian, Inc., Wallingford, CT*. 2003.
11. Data retrieved from the Materials Project for $Y_3Al_5O_{12}$ (mp-3050) from database version v2022.10.28.
<https://doi.org/10.17188/1204905>
12. Dobrzycki Ł., Bulska E., Pawlak D.A., Frukacz Z., Wozniak K. // *Inorg. Chem.* 2004. V. 43. P. 7656–7664.
<https://doi.org/10.1021/ic049920z>
13. Roose N.S., Anisimov N.A. // *Opt. and Spectrum*. 1975. V. 38. № 3. P. 627.