

Смешанные ванадаты-фосфаты стронция-самария-марганца: строение, свойства и граница неоднородности

Выполнила ученица 11Х класса Исланкина Анастасия
Научный руководитель Э. М. Галлямов

СУНЦ МГУ 2023

Цели работы

Синтезировать вещества состава $\text{Sr}_8\text{SmMn}(\text{VO}_4)_x(\text{PO}_4)_{7-x}$, исследовать его свойства с помощью РФА, ГВГ, сделать уточнение структуры методом Ритвельда и проверить, обладают ли данные вещества люминесценцией .

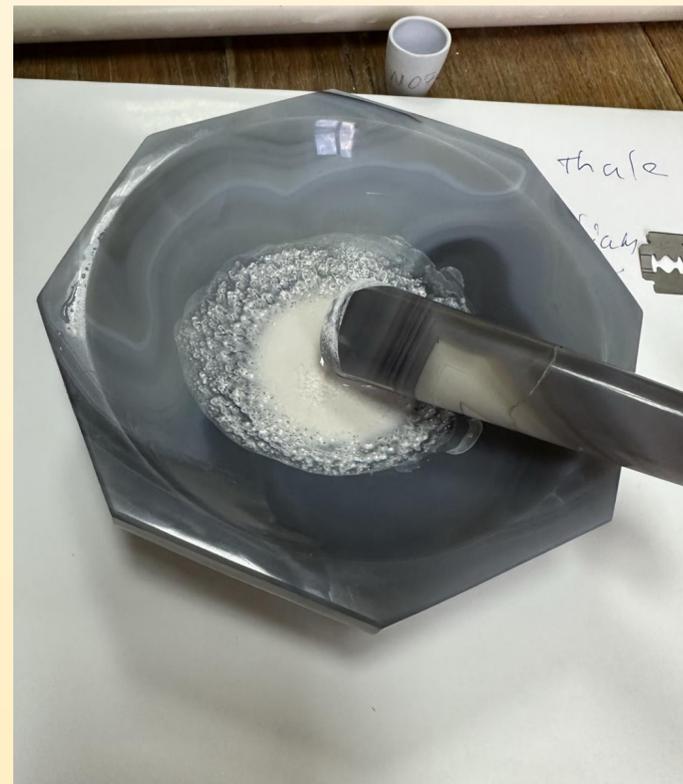
Актуальность работы

Интерес к данным веществам обуславливается их возможными свойствами: люминесцентными, сегнетоэлектрическими, нелинейно-оптическими.
Возможное применение их промышленности

Выполнение работы



взвешиваем Sm_2O_3 , $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$,
 MnCO_3 , SrCO_3 и V_2O_5

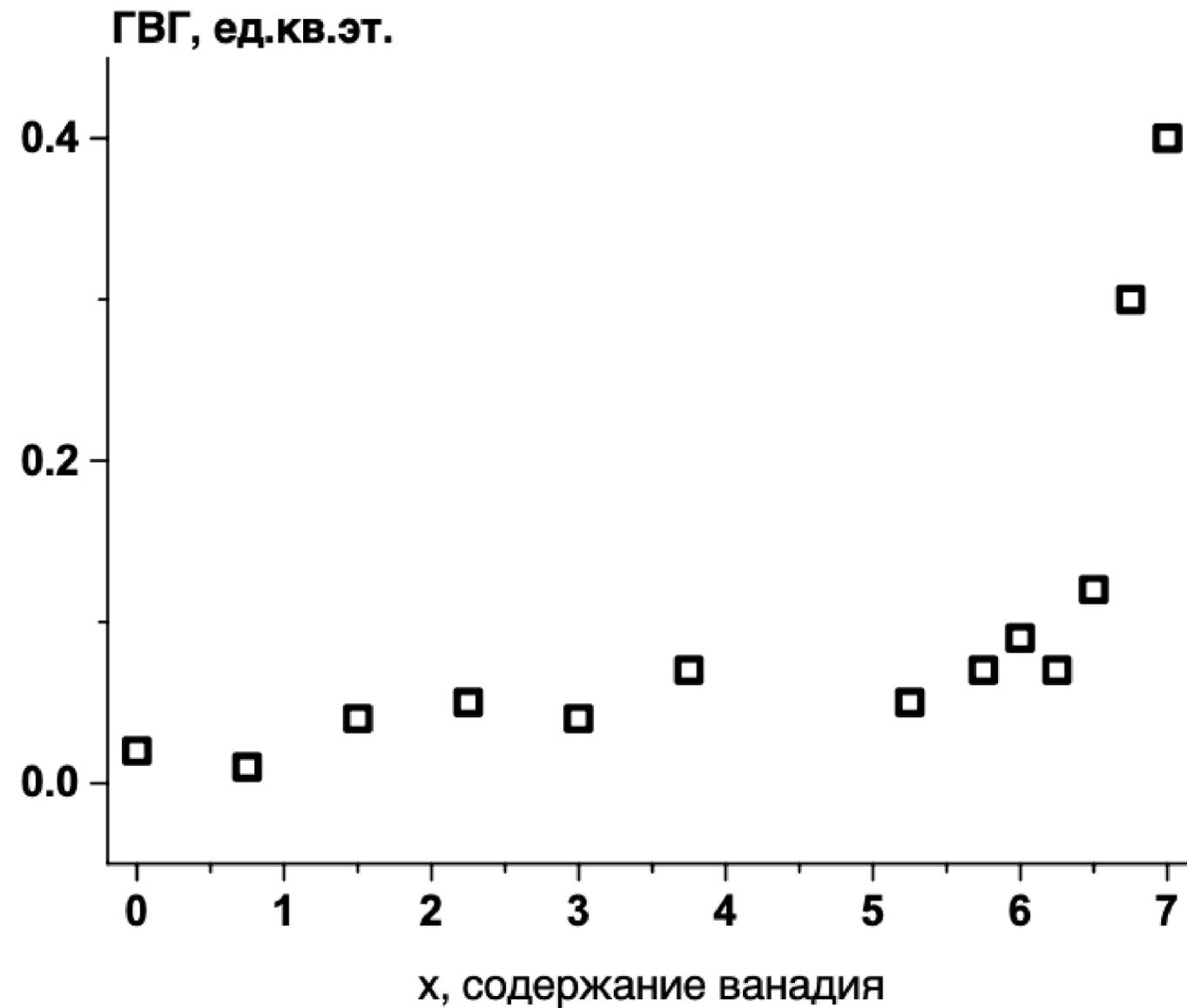


перетирание с ацетоном



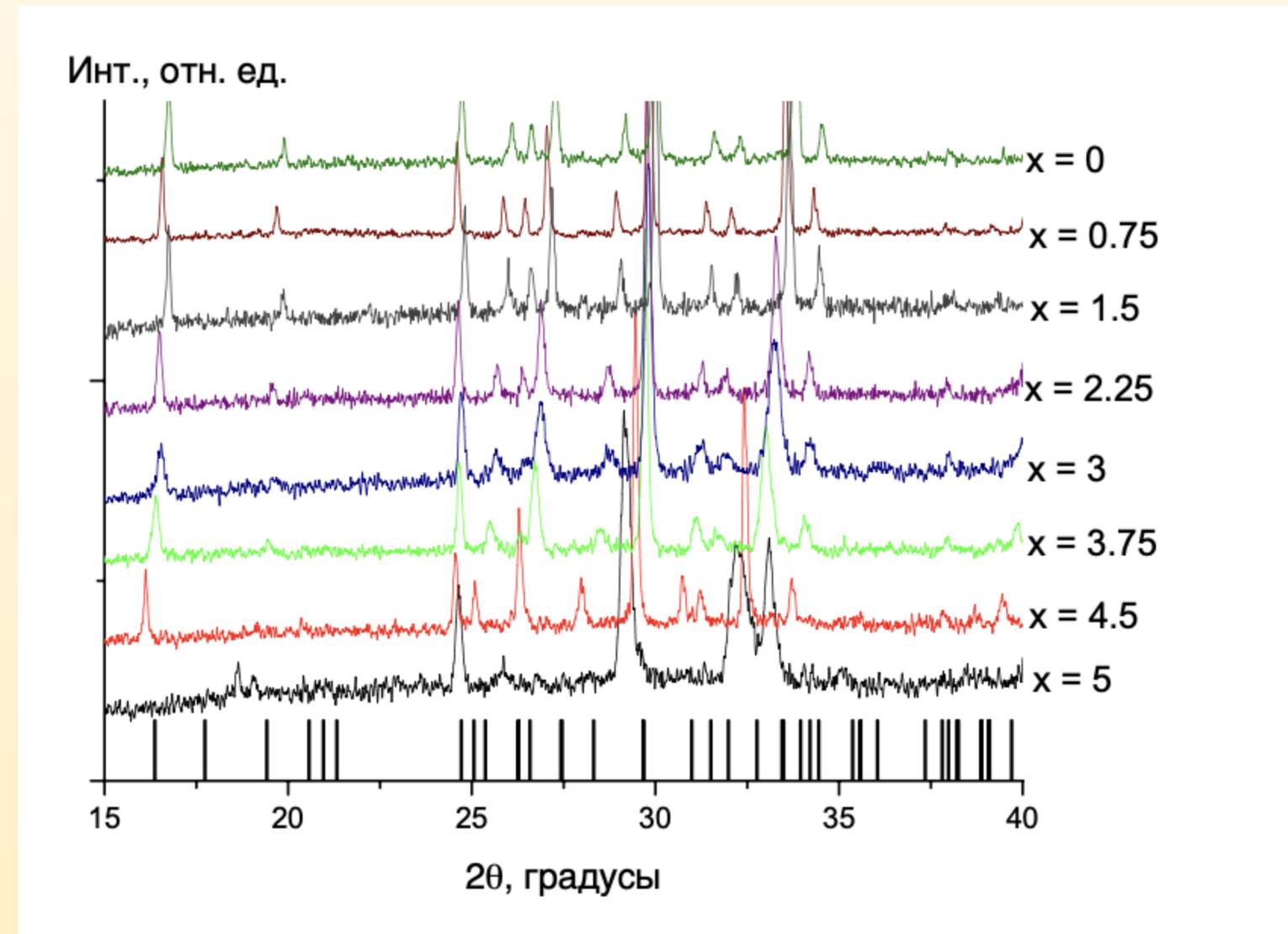
вещества после спекания
в эппендорфе

Анализ ГВГ



Графически получена зависимость ГВГ в единицах кварцевого эталона от количества ванадия в образцах.

Рентгенофазовый анализ



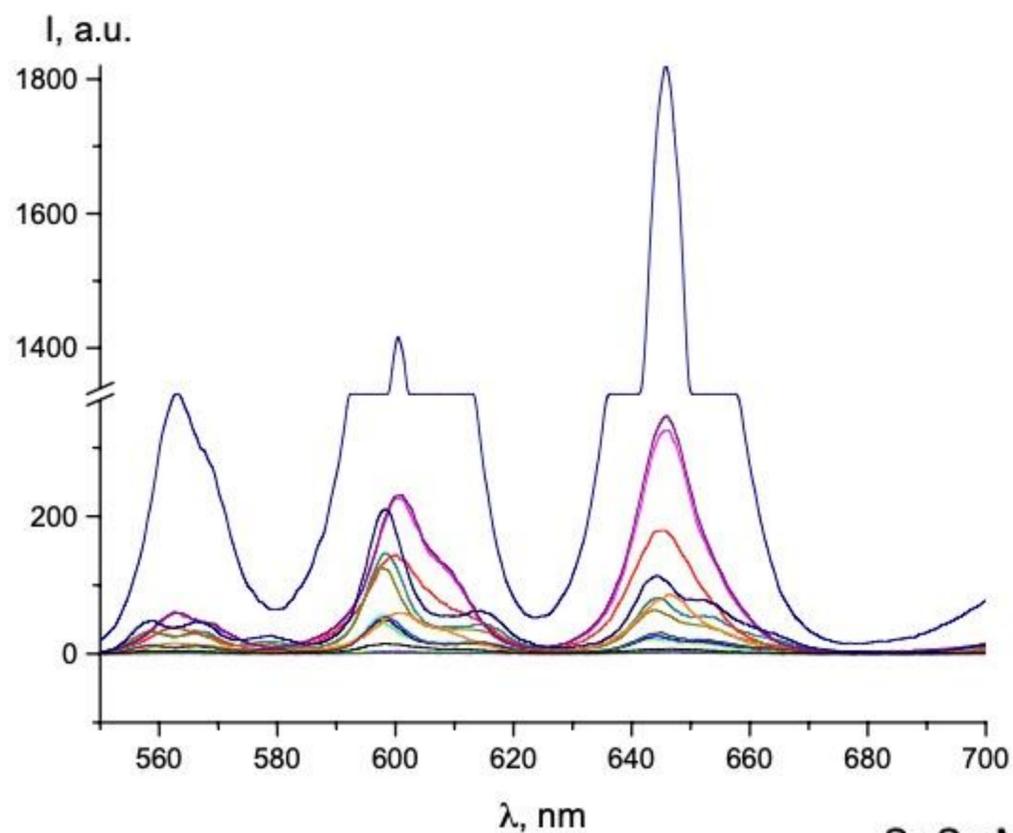
Результаты уточнения по методу Le Bail

x	a, Å	c, Å	v, Å ³
0	10.613(1)	39.203(6)	3824(1)
0.75	10.6668(3)	39.217(1)	3864.4(2)
1.5	10.705(1)	39.248(6)	3895(1)
2.25	10.789(2)	39.289(6)	3960(1)
3	10.848(4)	39.35(1)	4010(3)
3.75	10.895(3)	39.29(1)	4039(2)
4.75	11.080(2)	39.354(8)	4184(2)
5	11.15(1)	39.67(3)	4268(7)

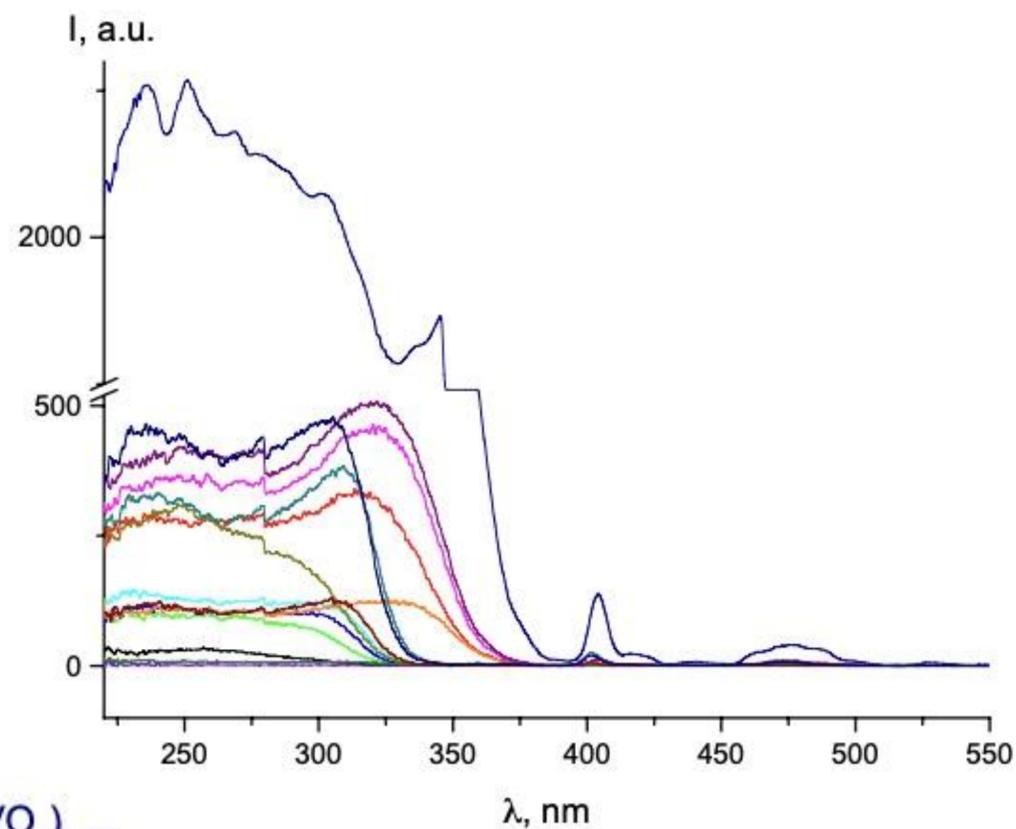
Основные результаты и выводы

- 1) Получена серия твердых растворов $\text{Sm}_8\text{Mn}(\text{VO}_4)_{7-x}(\text{PO}_4)_x$. Показано влияние состава на генерацию второй гармоники при увеличении количества ванадатов в составе. Большинство веществ обладает однофазностью.
- 2) Обнаруженная однофазность $\text{Sr}_8\text{SmMn}(\text{VO}_4)_7$ является доказательством открытия пятого витлокита в семействе ванадатов стронция.
- 3) Посчитаны параметры элементарных ячеек каждого из образца и подтверждена тенденция к их росту вследствие большего атомного радиуса ванадия.
- 4) Полученные вещества обладают люминесцентными характеристиками.

Люминесценция



260 нм



558 нм



Список литературы

- «Центро- и нецентросимметричные люминофоры на основе трикальцийфосфата». Никифоров Иван Валерьевич, диссертация на соискание ученой степени кандидат химических наук, 2022 г., 157с.

Спасибо за внимание!

Результаты уточнения по Ритвельду

			x	y	z	Occ.	U	Site	Sym.
1	Sr	Sr1	0,70257	0,85545	0,43328	0,913	0	18b	1
2	Sm	Sm1	0,77521	0,85982	0,42665	0,116	0	18b	1
3	Sr	Sr2	0,62082	0,79833	0,22722	0,877	0,007	18b	1
4	Sm	Sm2	0,65177	0,86137	0,23697	0,117	0	18b	1
5	Sr	Sr3	0,15282	0,30443	0,32772	0,902	0,018	18b	1
6	Sm	Sm3	0,11984	0,2707	0,32094	0,082	0	18b	1
7	Mn	Mn5	0	0	0	1	0,001	6a	3
8	P	P1	0	0	0,23855	1	0	6a	3
9	P	P2	0,68394	0,82947	0,13436	1	0,004	18b	1
10	P	P3	0,6531	0,83217	0,03136	1	0	18b	1
11	O	O2	0,07117	0,93833	0,26417	1	0,052	18b	1
12	O	O3	0,76045	0,89496	0,17413	1	0,001	18b	1
13	O	O4	0,73623	0,75049	0,11382	1	0	18b	1
14	O	O5	0,75481	-0,01759	0,11831	1	0	18b	1
15	O	O6	0,54409	0,79703	0,12959	1	0	18b	1
16	O	O7	0,60126	0,92488	0,04803	1	0	18b	1
17	O	O8	0,61202	0,69568	0,04304	1	0,008	18b	1
18	O	O9	0,84799	0,89457	0,03421	1	0	18b	1
19	O	O10	0,60206	0,7887	0,99101	1	0	18b	1

