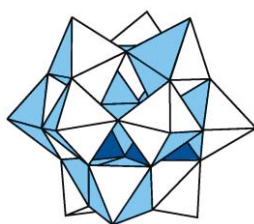


Российская академия наук,  
Научный совет РАН по химической физике,  
Научный совет РАН по материалам и наноматериалам

Институт проблем химической физики РАН,  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова



# **ТЕЗИСЫ**

**X Национальной кристаллохимической конференции**

Приэльбрусье, 5 - 9 июля 2021 г

## **Тезисы докладов X Национальной кристаллохимической конференции**

В сборнике представлены тезисы пленарных лекций, устных и стендовых докладов X Национальной кристаллохимической конференции (Приэльбрусье 5 – 9 июля 2021 г).

Доклады посвящены современному состоянию исследований в области кристаллохимии - фундаментальным вопросам строения и реакционной способности, взаимосвязи «структура-свойство», созданию новых многофункциональных материалов с заранее заданными свойствами, структурным аспектам твердофазных реакций, вопросам динамической кристаллохимии и химической связи, представлены работы по общим вопросам кристаллохимии, методам рентгеноструктурного анализа и возможностям дифракционных методов исследования наноматериалов.

Сборник издан в авторской редакции

Технический редактор – к.х.н. И.А. Шилова

Организаторы конференции:

Институт проблем химической физики, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Конференция проводится при поддержке Российской академии наук, Научного совета РАН по химической физике, Научного совета РАН по материалам и наноматериалам

ISBN 978-5-6044508-3-3

ISBN 978-5-6044508-3-3



9 785604 450833

## ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ КАЛЬЦИЙ-КАДМИЙ ФОСФАТОВ С ВИТЛОКИТОПОДОБНОЙ СТРУКТУРОЙ

Жуковская Е.С.<sup>@</sup>, Сипина Е.В., Дейнеко Д.В.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
химический факультет, Москва, Россия

<sup>@</sup> *evg.zhukovskaya@gmail.com*

Светодиоды давно зарекомендовали как крайне эффективные источники света. Наилучший индекс цветопередачи демонстрируют RGB-диоды, в которых белый свет складывается из красной, зеленой и синей компонент. Одной из наиболее перспективных неорганических матриц для светодиодных материалов являются фосфаты со структурой типа минерала витлокита [1].

В работе были синтезированы новые витлокитоподобные фосфаты кальция-кадмия, содержащие редкоземельные элементы. Синтез проводился твердофазным методом из стехиометрического количества оксидов РЗЭ, кадмия, карбоната и гидрофосфата кальция марки не ниже «х.ч.». Были получены однофазные образцы состава  $\text{Ca}_8\text{CdR}(\text{PO}_4)_7$ , где  $R = \text{La-Eu}$ . Наибольший интерес с точки зрения среди них представляет фосфат, содержащий европий, поскольку он люминесцирует в красной области спектра, которая для современных светодиодов является на данный момент наиболее проблемной.

На основе данных рентгеновской дифракции на синхротронном излучении уточнена структура соединения  $\text{Ca}_8\text{CdEu}(\text{PO}_4)_7$ . Известно, что аналогичные фосфаты могут кристаллизоваться как в пр.гр.  $R\bar{3}c$ , так и  $R\bar{3}c$ , однако по рентгеновским данным различить их проблематично. Согласно данным, полученных методом генерации второй оптической гармоники, сигнал ГВГ для данного образца очень мал ( $I_{2\omega}/I_{2\omega}(\text{SiO}_2) < 0.1$ ), что говорит о центросимметричности структуры и ее принадлежности к пр.гр.  $R\bar{3}c$ . Анализ заселенностей показывает катионы кадмия и европия распределены между позициями  $M1$ ,  $M3$  и  $M5$ , имеющимися в структуре, а позиции  $M4$  и  $M6$  свободны. Уточнение показало, что структура  $\text{Ca}_8\text{CdEu}(\text{PO}_4)_7$  подобна структурам центросимметричных соединений  $\text{Ca}_8M\text{Eu}(\text{PO}_4)_7$  ( $M = \text{Mg, Zn}$ ). Все катионы  $M^{2+}$  замещают кальций в позиции  $M5$ , в то время как редкоземельный элемент замещает кальций в позициях  $M1$  и  $M3$ .

Спектр фотолюминесценции (рис. 1) демонстрирует типичное для иона европия излучение из возбужденного состояния  $^5D_0$  в основное состояние  $^7F_1$ .

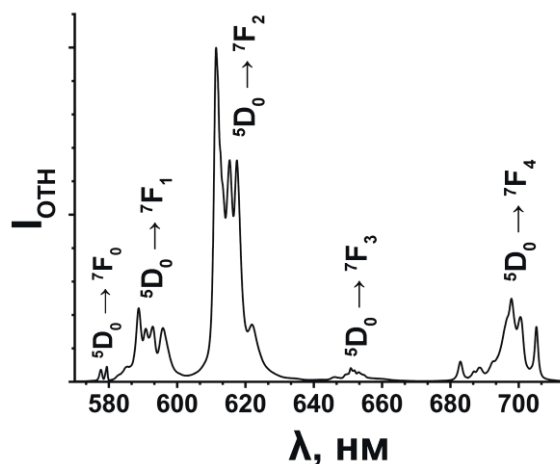


Рисунок 1 – Спектр фотолюминесценции  $\text{Ca}_8\text{CdEu}(\text{PO}_4)_7$

Особого внимания заслуживает переход  $^5D_0 \rightarrow ^7F_0$  в области 574–581 нм, содержащий два пика, что говорит о наличии неэквивалентных позиций европия. Это может служить свидетельством отсутствия центра инверсии, но это противоречит данным ГВГ для данного образца. Однако уточнение структуры в нецентросимметричной пространственной группе  $R3c$  приводило к худшим параметрам достоверности, чем в случае  $R\bar{3}c$ . Вероятно, возникновение второго пика на спектре люминесценции связано с возникновением локальной доменной структуры, содержащей как центросимметричные, так и нецентросимметричные фрагменты.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ 19-77-10013.

[1] Sun W., Jia Y., Pang R., Li H., Ma T., Li D., Fu J., Zhang S., Jiang L., Li C., 2015, ACS Appl. Mater. Interf. 7, 25219–25226.