

Wpływ wakansów Ca na własności spektroskopowe $\text{KCa}(\text{PO}_3)_3$ domieszkowanego jonami Eu

Bartosz Brzostowski

Instytut Fizyki
Uniwersytet Zielonogórski
ul. Prof. Szafrana 4a, 65-516 Zielona Góra

11 luty 2014

Synteza materiału

A. Matraszek, P. Godlewska, I. Szczygieł i J. Hanuza:

Instytut Chemii i Technologii Żywności, Uniwersytet Ekonomiczny we Wrocławiu

Zsyntetyzowano próbki $\text{KCa}_{1-x}\text{Eu}_x\text{P}_3\text{O}_9$ ($x = 0.01-0.05$). Użyto następujące substancje chemiczne CaCO_3 , $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ i KH_2PO_4 . Źródłem europu było Eu_2O_3 .

Badania eksperymentalne

A. Watras i P. J. Dereń:

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, Wrocław

Zastosowane różnorodne metody doświadczalne do analizy struktury i własności badanych fosforanów, były to m.im dyfraktometria rentgenowska (XRD), spektroskopia Ramana, spektroskopia IR. Zmierzono widma emisyjne i wzbudzenia. Więcej szczegółów w Physical Chemistry Chemical Physics 2014
DOI: 10.1039/c3cp54875a

Analiza teoretyczna

J. Wojtkiewicz:

Katedra Metod Matematycznych Fizyki, Uniwersytet Warszawski

B. Brzostowski:

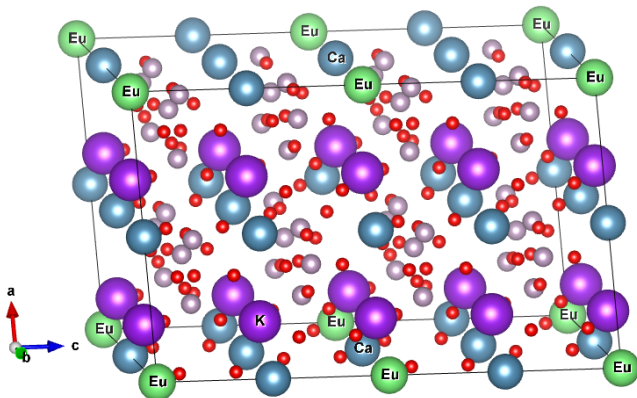
Instytut Fizyki, Uniwersytet Zielonogórski

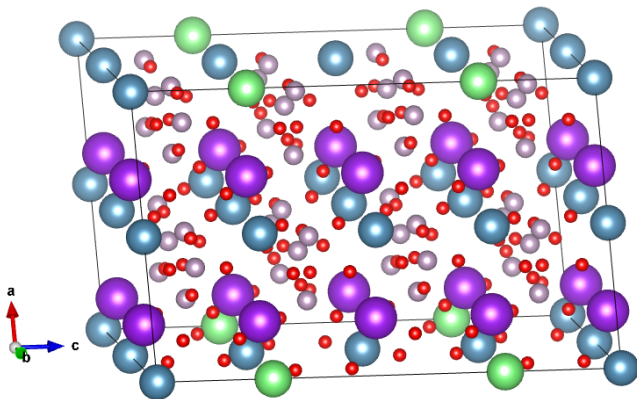
G. Banach:

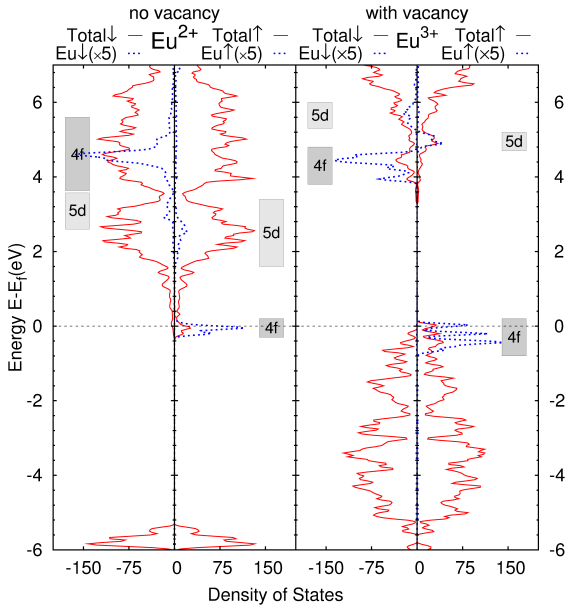
Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe, Politechnika Wroclawska

Brak emisji charakterystycznej dla Eu^{2+} był zaskakujący w wynikach doświadczalnych. Wcześniejsze analizy eksperymentalne dla innych fosforanów oraz struktura badanego materiału sugerowały właśnie taką emisję. Odnotowano jednak jedynie emisję charakterystyczną dla Eu^{3+} . Aby wyjaśnić ten problem wykonano analizę teoretyczną badanego materiału.

Wykonano obliczenia dla układu domieszkowanego z superkomórką ośmiokrotnie większą (tj. 224 atomy) od oryginalnej komórki elementarnej (28 atomów). Jony Eu były podstawione w miejsca Ca. Dało to symulację domieszki 12.5% jonów Eu. Obliczenie dla układu z wakansem Ca wykonano dla superkomórki zawierającej 223 atomy.







Dziękuję