

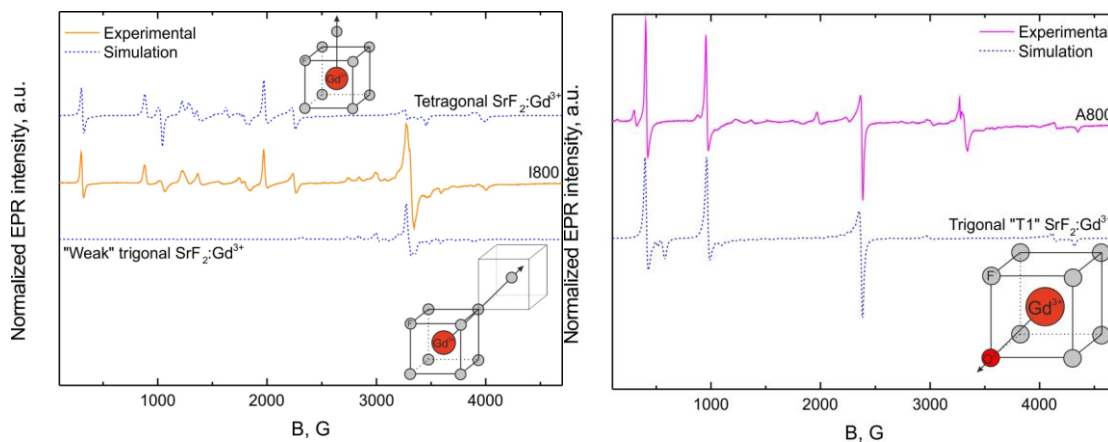
S-stāvokļa jonu struktūra un īpašības SrF₂ nanodaļiņās

Andris Antuzevičs

Fluorīta struktūras fluorīdu (MeF₂; Me = Ca, Sr Ba) nanomateriāli tiek pētīti kā perspektīvi luminofori, starojuma augšpārveidotāji un materiāli zondēm medicīnā. Sarežģīta situācija izveidojas, kad aktivatora jons ir trīsvērtīgs un pēc divvērtīgā Me²⁺ jona aizvietošanas tam nepieciešama papildus lādiņa kompensācija. Rezultātā materiālā var veidoties dažādu simetriju defekti, kur katram ir savas optiskās īpašības, tāpēc aktuāli ir raksturot, kā defektu veidošanos ir iespējams kontrolēt.

Šajā projektā pētītas mangāna, eiropija un gadolīnija jonu spektroskopiskās īpašības ar nogulsnešanas metodi sintezētās SrF₂ nanodaļiņās. Noskaidrots, ka, pielietojot šādu sintēzes metodi, eiropija joni iebūvējas trīsvērtīgā valences stāvoklī, bet Mn²⁺ izomorfi aizstāj Sr²⁺ jonus, saglabājot kubisko apkārtnes simetriju. Elektronu paramagnētiskās rezonances (EPR) spektru skaitliskās modelēšanas rezultāti liecina, ka sākotnēji iegūtajos SrF₂ paraugos Gd³⁺ jonu apkārtne ir nesakārtotība. Kā vispiemērotākā zonde turpmākiem trīsvērtīgo aktivatoru defektu pētījumiem izvēlēts Gd³⁺, jo Eu³⁺ nav paramagnētisks un to nevar detektēt ar EPR metodi.

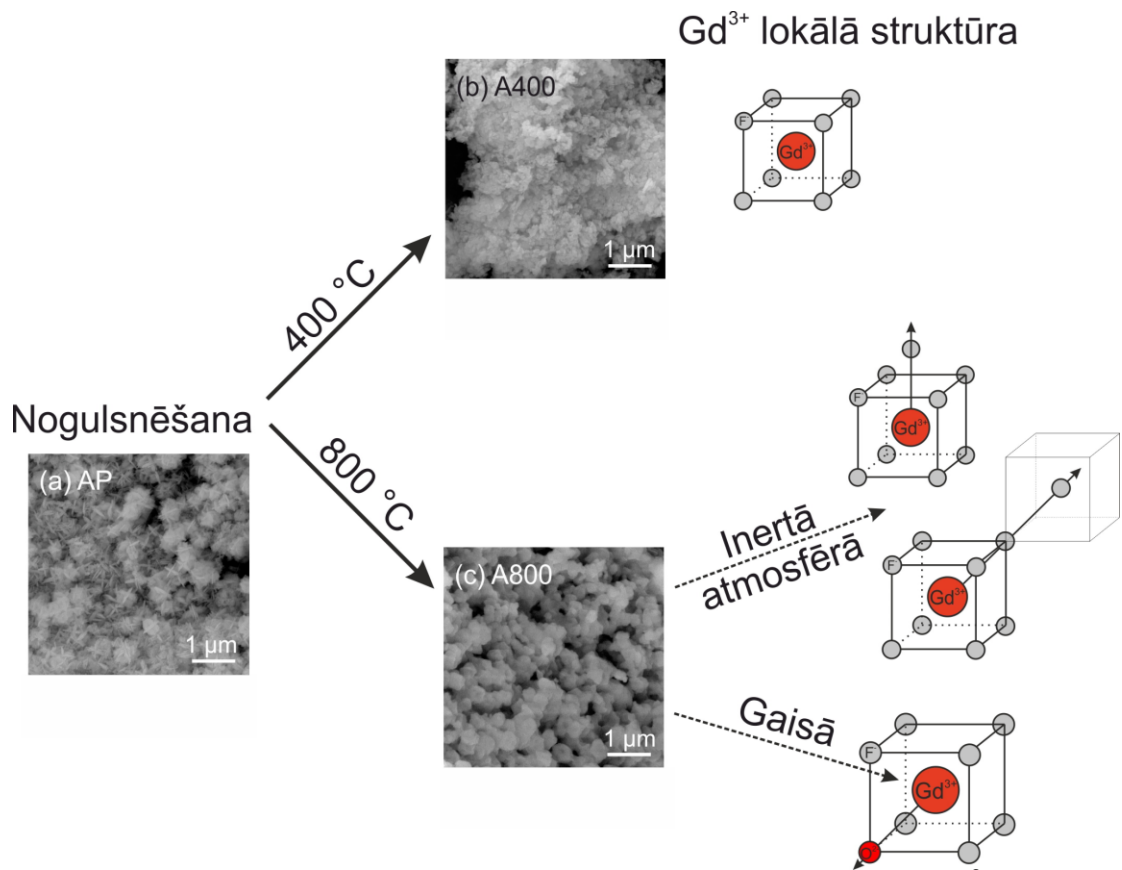
SrF₂:Gd³⁺ paraugos tika padziļināti pētīta Gd³⁺ lokālās struktūras izmaiņa atkarībā no paraugu termiskās pēcapstrādes apstākļiem. Noskaidrots, ka, karsējot salīdzinoši zemās temperatūrās (līdz 600 °C), Gd³⁺ lokālā apkārtne saglabājas kubiska, taču pie augstākām karsēšanas temperatūrām veidojas zemākas simetrijas fluoru (karsējot argonā) vai skābekļa (karsējot gaisā) jonu kompensēti Gd³⁺ centri. Iegūtie secinājumi izdarīti no 1. attēlā redzamo EPR spektru skaitliskās modelēšanas.



1. att. Gd³⁺ centru EPR spektri kreisajā pusē – argonā karsētajos; labajā pusē – gaisā karsētajos SrF₂ paraugos. [1]

Veiktais pētījums sniedz ieguldījumu fundamentālajā zināšanu bāzē par defektu veidošanos fluorīta struktūras nanodaļiņās. Kopsavilkums par pētījuma rezultātiem ilustratīvi parādīts 2. attēlā.

[1] A. Antuzevics, M. Kemere, G. Kriekē, Multisite formation in gadolinium doped SrF₂ nanoparticles, J. Alloys Compd. 762 (2018) 500–507. doi:10.1016/j.jallcom.2018.05.283. SNIP = 1.403.



2. att. Paraugu skenējošā elektronu mikroskopa (SEM) bildes un Gd³⁺ lokālās struktūras ilustrācijas atšķirīgos apstākļos karsētos SrF₂ paraugos.