

УДК 541.136.3

С.Е.Шолкин (5 курс, каф. ТМЭТ), Ф.Ф.Греков, д.х.н., проф.

### НОВАЯ МАТРИЦА ДЛЯ ЛЮМИНОФОРОВ

Известно, что сиалоны являются одной из наиболее перспективных матриц для синтеза новых люминофоров [1]. Учитывая устойчивость структурного мотива фенакита, характерного для сиалонов, можно поставить вопрос о реализации их «безазотных» аналогов. Такими могут быть фазы переменного состава в системе Li – Zn – Al – Si – O, включающей, в частности, известный люминофор - виллемит  $Zn_2SiO_4$

Основная идея состоит в том, чтобы побудить виллемитовую структуру, аналогичную  $\beta$ -сиалону, содержащую туннели, перестроиться путем иной укладки слоев в гомеотектическую структуру, содержащую полости. Стабилизации этой структуры должно содействовать заполнение (части) полостей атомами лантанидов, так как это происходит в «заполненных»  $\alpha$ -сиалонах. При этом должно выполняться правило октета. В количестве, пропорциональном введенному лантаниду и его степени окисления, должно уменьшиться число формальных зарядов катионов виллемитового каркаса.

В общем виде, гетеровалентное замещение в катионной части при легировании внекаркасным катионом Ln ( где m степень его окисления) можно выразить формулой  $Ln_x(Li_lZn_zAl_aSi_s)O_4$

Составлена программа в Borland Turbo Pascal 7.0 для расчета вероятных составов искомым фаз (допустимые сочетания индексов l, z, a, s) с соблюдением правила октета и структурных требований. Шаг изменения параметров выбран 0,05. Зная допустимые сочетания индексов, можно рассчитать требуемые количества исходных реагентов и провести направленный синтез. Для практической реализации этой программы имеются необходимые предпосылки в виде модифицированной золь-гель технологии.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Головкин А.Г., Греков Ф.Ф., Черновец Б.В. Синтез виллемита модифицированным золь-гель методом // Журнал прикладной химии, 2004, №10, С. 77.