**Сложный ванадат-ниобат кальция-иттербия-европия: изменение нелинейно-оптических свойств, граница неоднофазности**

***Вакшин А.И., Галлямов Э.М., Титков В.В.***

*Студент 2 курс*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:**artemfox57@gmail.com*

Вещества со структурой витлокит обладают широким диапазоном свойств: сегнетоэлектричество, нелинейно-оптическая активность, люминесценция, ионная проводимость [1]. Эти свойства ярко меняются при допировании в катионной и анионной части. Изменяя состав вещества, мы можем влиять на его структуру, которая, в свою очередь, влияет на свойства. В отличие от витлокитоподобных сложных фосфатов кальция, аналогичные соединения редкоземельных и d-металлов пока не так подробно исследованы [2].

Привнесение ниобия в анионную часть в аналогичных соединениях повышает интенсивность сигнала ГВГ. Также, добавление небольшого количества европия в соединение (1%) создаст люминесцентные свойства. По характеру линий люминесценции мы сможем сделать выводы о структуре вещества. В качестве исходной матрицы был взят Ca9Yb(VO4)7 [3]. Были поставлены задачи увеличения сигнала ГВГ и изучения люминесценции.

Результаты показали, что сигнал ГВГ действительно немного увеличивается вплоть до границы неоднофазности. Параметры и объём элементарной ячейки растут также до границы неоднофазности. После достижения границы они остаются примерно постоянными.

Таблица 1. Зависимость сигнала ГВГ (кварцевый эталон) от содержания ниобия.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **x** | **0.07** | **0.14** | **0.21** | **0.35** |
| **a** | 10.8308(5) | 10.836(3) | 10.859(1) | 10.853(1) |
| **c** | 37.809(2) | 37.82(1) | 37.893(5) | 37.884(4) |
| **v** | 3841.0(4) | 3846(2) | 3869.5(8) | 3864.1(8) |
| **ГВГ**  | 48 | 47 | 50 | 47 |

Таким образом, установлено соответствие состав-структура-свойства для составов Ca9Yb0.99Eu0.01(VO4)7-x(NbO4)x. Нелинейно-оптические свойства значительно превосходят кварцевый эталон.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ 20-03-00929 и в рамках государственного задания "Вещества и материалы для обеспечения безопасности, надежности и энергоэффективности" № АААА-А21-121011590086-0.*

**Литература**

1. Лазоряк Б.И. Дизайн неорганических соединений с тетраэдрическими анионами // Успехи химии 1996. т. 65. №. 4. с. 307-325.

2. Belik A.A. New noncentrosymmetric vanadates Sr9R(VO4)7 (R = Tm, Yb, and Lu): synthesis, structure analysis, and characterization // Chem. Mater. 2005. Vol. 17, Iss. 1. P. 122–129.

3. Lazoryak B.I. et al. Ferroelectric crystal Ca9Yb(VO4)7 in the series of Ca9R(VO4)7 non-linear optical materials (R = REE, Bi, Y) // Journal of Materials Chemistry C. 2017. Vol. 5. P. 2301-2310.