

Атомистическое моделирование шеелитоподобных молибдатов и их твердых растворов.

Научный руководитель – Дудникова Валентина Борисовна

Антонов Даниил Иванович

Студент (магистр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: askell123@mail.ru

Молибдаты, содержащие ионы редкоземельных элементов, находят применение в качестве люминофоров для светодиодов белого свечения [2] и твердотельных лазеров [3]. Настоящая работа является продолжением работы [1].

Методом межатомных потенциалов с использованием программного комплекса GULP 4.0.1 (General Utility Lattice Program). проведено моделирование твёрдых растворов $\text{NaGd}(\text{MoO}_4)_2 - \text{Gd}_2(\text{MoO}_4)_3$. Эти твёрдые растворы являются катион-дефицитными и могут быть представлены общей формулой $\text{Na}_{(2-3x)}\text{Gd}_x\text{□}_{(2x-1)}\text{MoO}_4$, где □ - вакансии в катионных позициях. Проведён выбор оптимального размера сверхъячейки для адекватного описания этих твёрдых растворов. Сравнивались результаты, полученные при моделировании в сверхъячейках размером $6 \times 3 \times 2$ и $5 \times 5 \times 3$ элементарных ячеек. Было оценено также влияние различия конфигурации твёрдого раствора одного и того же состава на результаты моделирования. Различие конфигурации обусловлено различным взаимным расположением катионов Na, Gd и вакансий в катионной подрешётке раствора и связано с отклонением распределения частиц в сверхъячейке от статистического. В результате моделирования рассчитаны важные физические и термодинамические характеристики твёрдых растворов разного состава. Полученные результаты согласуются с известными экспериментальными данными. С помощью программы GISTOGRAMMA исследована локальная структура твёрдого раствора $\text{Na}_{(2-3x)}\text{Gd}_x\text{□}_{(2x-1)}\text{MoO}_4$. Оценены величины длин связи □-O, Na-O и Gd-O и их дисперсия (DR) для всей серии твёрдых растворов.

Источники и литература

- 1) Дудникова В.Б. и др. Атомистическое моделирование шеелитоподобных молибдатов и их твердых растворов // Проблемы кристаллологии. Выпуск 7. М, 2019. С. 30-56.
- 2) Mo F. et al. Potential red-emitting $\text{NaGd}(\text{MO}_4)_2: \text{R}$ (M= W, Mo, R= Eu^{3+} , Sm^{3+} , Bi^{3+}) phosphors for white light emitting diodes applications // Ceramics International. 2012. Т. 38. №. 8. С. 6289-6294.
- 3) Zharikov.E.V. et al. Double tungstate and molybdate crystals for laser and nonlinear optical applications // MRS bulletin. 2009. Т. 34. №. 4. С. 271-276.