

СИНТЕЗ, СТРУКТУРНЫЕ, КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА МИКРОКРИСТАЛЛОВ $\text{RbNd}(\text{MoO}_4)_2$

Хижун О.Ю., Бекенев В.Л., Агучин В.В.⁽¹⁾, Чимитова О.Д.⁽²⁾, Гаврилова Т.А.⁽³⁾,
Молокеев М.С.⁽⁴⁾, Суровцев Н.В.⁽⁵⁾, Базаров Б.Г.⁽²⁾

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины,
ул. Кржижановского, 3, Киев, 03680, Украина, e-mail: khyzhun@ipms.kiev.ua

- ⁽¹⁾Лаборатория оптических материалов и структур, Институт физики полупроводников, СО РАН, Новосибирск 90, 630090, Россия
- ⁽²⁾Лаборатория оксидных систем, Байкальский институт управления природой, СО РАН, Улан-Уде, 670047, Россия
- ⁽³⁾Лаборатория нанодиагностики и нанолитографии, Институт физики полупроводников, СО РАН, Новосибирск 90, 630090, Россия
- ⁽⁴⁾Лаборатория физики кристаллов, Институт физики, СО РАН, Красноярск 36, 660036, Россия
- ⁽⁵⁾Лаборатория спектроскопии конденсированного вещества, Институт автоматики и электрометрии, СО РАН, Новосибирск 90, 630090, Россия

Комплексные молибдаты демонстрируют разнообразие кристаллических структур и обладают полезными электрофизическими, оптическими и каталитическими свойствами. Известно, что двойные молибдаты, содержащие щелочные и трехвалентные металлы, принадлежат к широкому семейству кристаллов $\text{MLn}(\text{MoO}_4)_2$ (где М – щелочной металл, Ln – лантаноид). Молибдаты $\text{MLn}(\text{MoO}_4)_2$ являются прекрасными Ln-содержащими лазерными материалами. Из-за сильного искажения MoO_6 октаэдров, для многих молибдатов характерна нецентросимметричная кристаллическая структура. Сложные молибдаты, содержащие Ln^{3+} ионы, являются перспективными материалами для их использования в качестве эффективных лазерных сред. Целью настоящего исследования является синтез $\text{RbNd}(\text{MoO}_4)_2$ микрокристаллов и определение их морфологии, структурных, колебательных и электронных свойств.

Микрокристаллы $\text{RbNd}(\text{MoO}_4)_2$ получали твердофазным синтезом при температуре 550-600°C. Микроморфология полученного молибдата представлена на Рис. 1. Кристаллическая структура полученного соединения $\text{RbNd}(\text{MoO}_4)_2$ (для ее уточнения использовали метод Ритвельда) следующая: пространственная группа $Pbcn$, параметры решетки $a = 5.1772(1) \text{ \AA}$, $b = 18.7293(4) \text{ \AA}$, $c = 8.2774(1) \text{ \AA}$ ($R_B = 5.05\%$). Рамановские спектры исследовали на спектрометре TriVista 777.

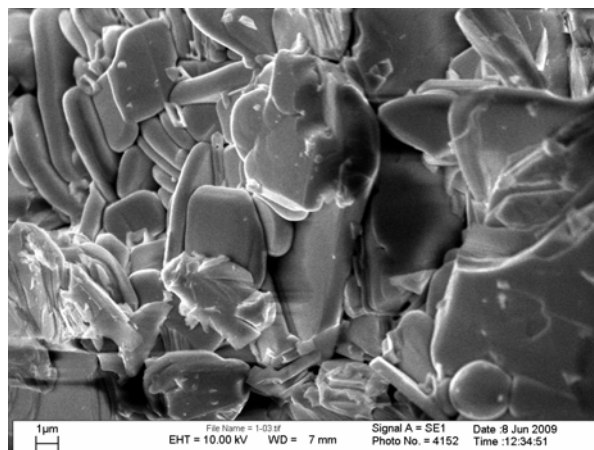


Рис. 1 СЭМ-исследование $\text{RbNd}(\text{MoO}_4)_2$

Полные и парциальные плотности электронных состояний молибдата $\text{RbNd}(\text{MoO}_4)_2$ рассчитывали «из первых принципов» с помощью FP-LAPW метода по программе WIEN97. С целью проверки корректности теоретических результатов, электронную структуру микрокристаллов $\text{RbNd}(\text{MoO}_4)_2$ изучали также экспериментально с использованием рентгеновской эмиссионной спектроскопии (РЭС) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФС). Были получены РЭС $\text{MoL}_{\beta_{2,15}}$ и $\text{O}K\alpha$ полосы, а также исследованы РФС-спектры валентных и внутренних электронов. Нами получено хорошее соответствие теоретических и экспериментальных данных относительно особенностей электронной структуры молибдата $\text{RbNd}(\text{MoO}_4)_2$.