

УДК 544.22

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ МОЛИБДАТА СТРОНЦИЯ-ВИСМУТА: ЭКСПЕРИМЕНТ И РАСЧЕТ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

© 2023 г. Е. В. Соколенко^{1, *}, Е. С. Буянова², З. А. Михайловская^{2, 3}, Г. В. Слюсарев¹

¹Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1, Ставрополь, 355017 Россия

²Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002 Россия

³Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО Российской академии наук,
ул. Академика Вонсовского, 15, Екатеринбург, 620016 Россия

*e-mail: sokolenko-ev-svis@rambler.ru

Поступила в редакцию 24.09.2022 г.

После доработки 22.01.2023 г.

Принята к публикации 23.01.2023 г.

Из первых принципов выполнены квантово-химические расчеты колебательных спектров кластеров SrMoO_4 и катион-дефицитной фазы с шеелитоподобной структурой $\text{Sr}_{0.4}\text{Bi}_{0.4}\text{MoO}_4$. Вычисленные значения сравнивали со значениями, полученными из экспериментальных спектров комбинационного рассеяния. Влияние внедрения висмута и разупорядочения структуры кластеров проявляется в дополнительных ножничных колебаниях кислорода.

Ключевые слова: шеелит, нанокластеры, теория функционала плотности, КРС

DOI: 10.31857/S0002337X23030132, **EDN:** YUARIY

ВВЕДЕНИЕ

Соединения типа ABO_4 со структурой шеелита хорошо изучены, а легкость замещения позиций металлов позволяет тонко регулировать их функциональные характеристики. Поэтому они привлекательны для поиска новых материалов для сцинтилляторов, светодиодов и лазеров [1, 2], ионных проводников [3], люминофоров [4], фотокатализаторов [5], СВЧ-диэлектриков [6] и т.д. Решить задачу оптимизации составов и дефектной структуры можно с привлечением современных методов квантово-химических вычислений. Моделирование структуры и сравнение расчетных и экспериментальных частот [7] служит эффективным инструментом изучения влияния замены катионов в структуре шеелита [8] и структурного беспорядка [9]. Для шеелитоподобных составов $\text{Ca}_{1-3x}\text{Bi}_{2x}\text{MoO}_4$ результаты колебательной спектроскопии доказывают наличие существенных искажений полиэдров MoO_4 и BiO_8 при замещениях в катионной А-подрешетке AMoO_4 [10].

Мы теоретически исследовали влияние внедрения висмута и разупорядочения структуры нанокластера на кристаллическую решетку и спектры КРС шеелита. Нашей задачей было моделирование дефектной структуры молибдата стронция-висмута с использованием квантово-химического подхода, определение природы колебаний, со-

ответствующих экспериментальным спектрам КРС, и оценка роли разупорядочения кластера.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Молибдат стронция SrMoO_4 кристаллизуется в структурном типе шеелита (пр. гр. $I4_1/a$), он построен из молибден-кислородных тетраэдров, между которыми располагаются восьмикоординированные атомы стронция [11]. Замещение позиций стронция в SrMoO_4 висмутом возможно путем формирования катиондефицитных фаз $\text{Sr}_{1-3x}\text{Bi}_{2x}\text{MoO}_4$ для концентраций висмута $x < 0.15$ [12, 13], при этом наблюдаются значительные искажения структуры и сжатие элементарной ячейки. Для составов с высоким содержанием висмута ($0.15 < x < 0.25$ $\text{Sr}_{1-3x}\text{Bi}_{2x}\text{MoO}_4$) отмечено наличие сверхструктурного упорядочения [12, 14]. Наличие дефектов и понижение симметрии решетки могут приводить к изменению формы линий КРС в исследуемых материалах [15].

В работе [12] предложена структурная модель, описывающая расширенную элементарную ячейку $\text{Sr}_{0.4}\text{Bi}_{0.4}\text{MoO}_4$, и получена информация о координатах кристаллографических позиций и их заселенности.

Использование методов моделирования может быть эффективно для тяжелых атомов со сложной

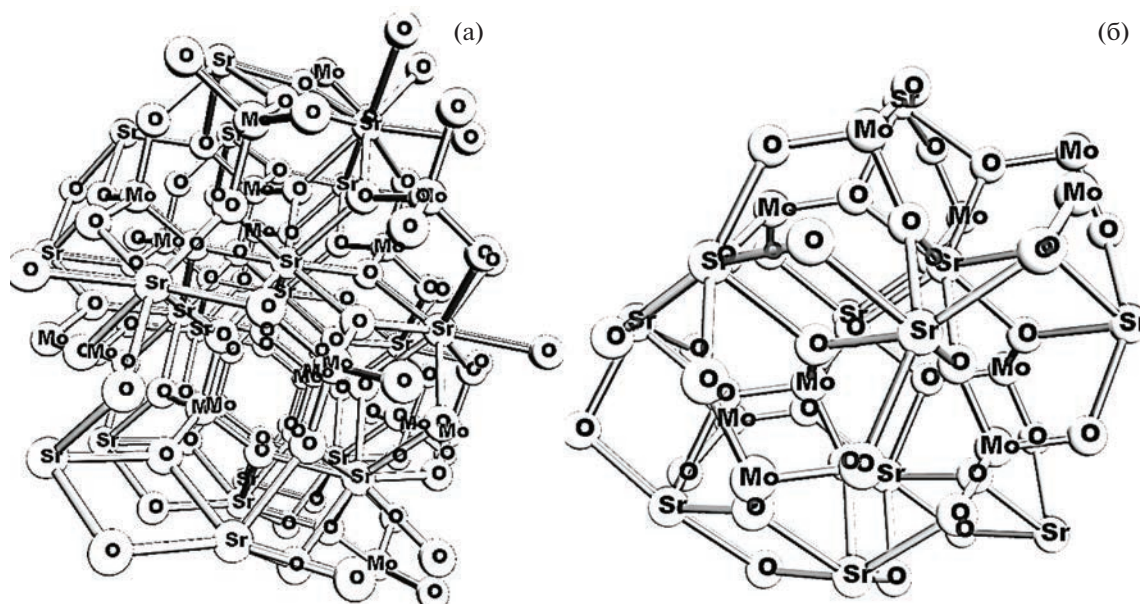


Рис. 1. Исходная ячейка SrMoO_4 размером $2 \times 2 \times 1$ (а) и кластер SrMoO_4 (б).

электронной структурой для понимания механизмов различных процессов, в первую очередь дефектообразования. Поэтому интерес представляет расчет колебательной структуры нанокластеров шеелита, включающих собственные и примесные дефекты.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Спектры КРС были получены с помощью спектрометра Horiba LabRam HR800 Evolution, включающего конфокальный микроскоп Olympus BX-FM. Для возбуждения применялись He–Ne-лазер (длина волны 633 нм) и решетка 600 штр./мм. Использовался объектив Olympus 50 $\times$ (числовая апертура 0.7). Спектральное разрешение составляло $\sim 1 \text{ см}^{-1}$.

Для моделирования структуры кластера на основе SrMoO_4 были использованы координаты атомов из работы [11]. Предварительно построены ячейки размером $2 \times 2 \times 1$ (рис. 1а). Все связи Mo–O равны 1.84785 Å. Длина четырех связей в SrO_8 равна 2.4980 Å, еще четырех – 2.53734 Å. На рис. 1б атомы, связанные с остальной структурой единичными связями, отсутствуют. Кластеры $\text{Sr}_{0.4}\text{Bi}_{0.4}\text{MoO}_4$ построены аналогично на основе структурных данных [12, 16], исходная ячейка $1 \times 1 \times 1$. Все связи Mo–O разные: 1.69211, 1.70114, 1.74779 и 2.00408 Å. Соответственно, длины всех связей в SrO_8 тоже разные и равны для Mo–O5 2.66093 Å, Mo–O6 2.58162 Å, Mo–O7 2.61325 Å, Mo–O8 2.55154 Å, Mo–O9 2.50434 Å, Mo–O10 2.59692 Å, Mo–O11 2.47705 Å, Mo–O12 2.67940 Å.

Эти искажения с учетом большей массы висмута должны привести к появлению дополнительных колебательных частот.

Расчеты колебательных спектров кластеров с помощью метода теории функционала плотности выполнялись программой Q-chem в режиме удаленного доступа на сервере СКФУ [17, 18]. Использование квантово-химического подхода позволяет моделировать необходимую дефектную структуру любой сложности, однако висмут накладывает ограничения при выборе волновых функций. Мы применяли набор Кристиансена–Росса–Эрмлера–Нэша–Бурстена (CRENBL) и базисные наборы Карлсруэ def2 с ECP, которые рекомендуется использовать от Na до Bi [19, 20].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В кластерах SrMoO_4 и $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ частоты, расположенные в дальней ИК-области 80–180 см^{-1} , связаны с колебаниями решетки (табл. 1, линии 86, 93, 113 и 139 см^{-1}). Экспериментальная линия 139 см^{-1} и соответствующие расчетные частоты дополнительно связаны с асимметричными колебаниями связи Sr–O и веерными колебаниями кислорода (рис. 2). В кластере $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ дополнительно появились частоты 146.03, 146.56 и 146.82 см^{-1} , связанные с симметричными валентными колебаниями связи Bi–O.

Экспериментальной линии 162 см^{-1} соответствует набор частот кластера SrMoO_4 (табл. 1), который обусловлен колебаниями решетки и асимметричными колебаниями связи Sr–O. В кластере

Таблица 1. Значения колебательных частот, полученные экспериментально и в результате расчета

ν , см^{-1}		
эксперимент	расчет SrMoO_4	расчет $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$
86	86.88, 88.71	86.26, 87.71, 89.30, 90.33, 92.5
93	97.03, 99.47, 100.98, 104.67, 109.45	93.86, 94.92, 96.57, 100.25, 101.82, 103.46, 105.65, 107.14, 111.56, 112.97
113	<i>114.44, 116.82, 118.49, 120.35, 123.13, 128.58, 135.68</i>	113.08, 115.35, 117.51, 118.06, 121.08, 122.05, 124.72, 126.94, 128.44, 131.00, 131.37, 133.07, 136.08
139	136.44, 139.63 , 141.65, 143.74, <i>146.40</i>	137.74 , 139.18, <i>141.40</i> , <i>142.55</i> , 146.03 , 146.56, 146.82
162	<i>150.12, 153.55, 158.26, 162.13, 164.07, 169.51, 171.47, 178.95</i>	152.02 , 154.22 , 156.11, <i>158.72</i> , <i>161.41</i> , <i>165.35</i> , <i>166.32</i> , <i>173.22</i> , <i>177.85</i>
183	182.34 , <i>185.62, 191.68, 197.21, 203.03</i>	175.95 , 178.71, 183.52, 188.29, 189.75, <i>193.10</i> , <i>197.08</i> , 200.06 , 201.70, <i>204.79</i> , <i>208.25</i> , <i>216.44</i> , <i>229.12</i>
233	235.75 , <i>254.84, 258.28, 259.63, 266.27, 276.56, 280.57</i>	233.01, <i>236.16</i> , 236.82, 240.77 , 245.19 , <i>251.48</i> , 256.16, 258.14, 259.83, 264.40, 266.12, 267.69, 271.31, 277.38, 282.58, 284.99, 291.33, 293.18
	<i>287.45, 289.51, 296.03, 301.65, 305.9</i>	300.83 , 320.07, 322.91, 325.68, 331.67, 280.59, 294.92, 307.47, 315.04
327	<i>307.92, 314.62, 316.3, 03, 318.03, 322.6, 329.49, 335.22, 335.52, 340.38, 344.36, 351.22, 352.82, 358.42</i>	333.80 , 335.24, 335.99, 343.54, 346.90, 350.18, 354.45, 356.96
367	364.10 , 367.34, 371.13, 375.47	361.01 , 374.07, 362.00 , 362.74, 367.03, 371.60, 375.60, 379.26, 380.14, 383.05
383	383.26, 385.78, 388.78, 399.32	384.27 , 387.80, 389.04, 391.45, 396.36, 397.96, 402.64
407	410.48 , 417.21, 423.2, <i>425.14, 434.98, 436.71, 444.09, 453.73, 457.42, 466.15, 473.9, 477.99</i>	408.87, 411.59, 413.39, 419.84, 423.40, 436.40 , 437.53, 439.79, 445.79, 458.40, 461.41, 467.70, 486.74
	<i>484.33, 496.42, 508.92, 520.09, 549.56, 613.14, 615.35, 624.68, 632.72, 638.23, 651.04, 661.53, 670.71, 681.53, 698.57, 712.36</i>	424.90 , 453.37, 456.66, 468.01, 476.63, 493.15 , 506.33, 525.62, 531.01, 536.03 , 558.72, 591.61, 597.54 , 615.37
796	<i>731.18, 758.16, 764.7, 773.29, 787.64</i>	764.07
845		
887		884.30, 891.60, 897.65, 911.02, 913.37
931		930.39 , 951.13 , 968.11, 952.67 , 964.17, 970.93, 973.68, 976.88, 984.02, 997.00

Примечание. Полу жирным шрифтом выделены моды, представленные на рис. 2, курсивом — колебания, в которые вносят по амплитуде основной вклад поверхностные связи.

$\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ дополнительно появились асимметричные валентные колебания связи $\text{Bi}-\text{O}$. Линия 183 см^{-1} соответствует асимметричным колебаниям связи $\text{Sr}-\text{O}$ и веерным колебаниям кислорода. По расчетным данным, в кластерах SrMoO_4 и $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ дополнительно появились ножничные колебания кислорода, связанного со стронцием. Таким же образом можно интерпретировать линию 233 см^{-1} . Дополнительный набор частот кла-

стера SrMoO_4 в интервале $287.45-305.9\text{ см}^{-1}$ связан с маятниковыми колебаниями тетраэдра MoO_4 .

В кластере $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ набор частот $245.19-284.99\text{ см}^{-1}$ (табл. 1) определяется асимметричными валентными колебаниями связи $\text{Bi}-\text{O}$.

Частота 291.33 см^{-1} обусловлена асимметричными валентными колебаниями связей $\text{Bi}-\text{O}-\text{Mo}$, $\text{Sr}-\text{O}-\text{Mo}$, проявились ножничные колебания кислорода, связанного со стронцием, и веерные коле-

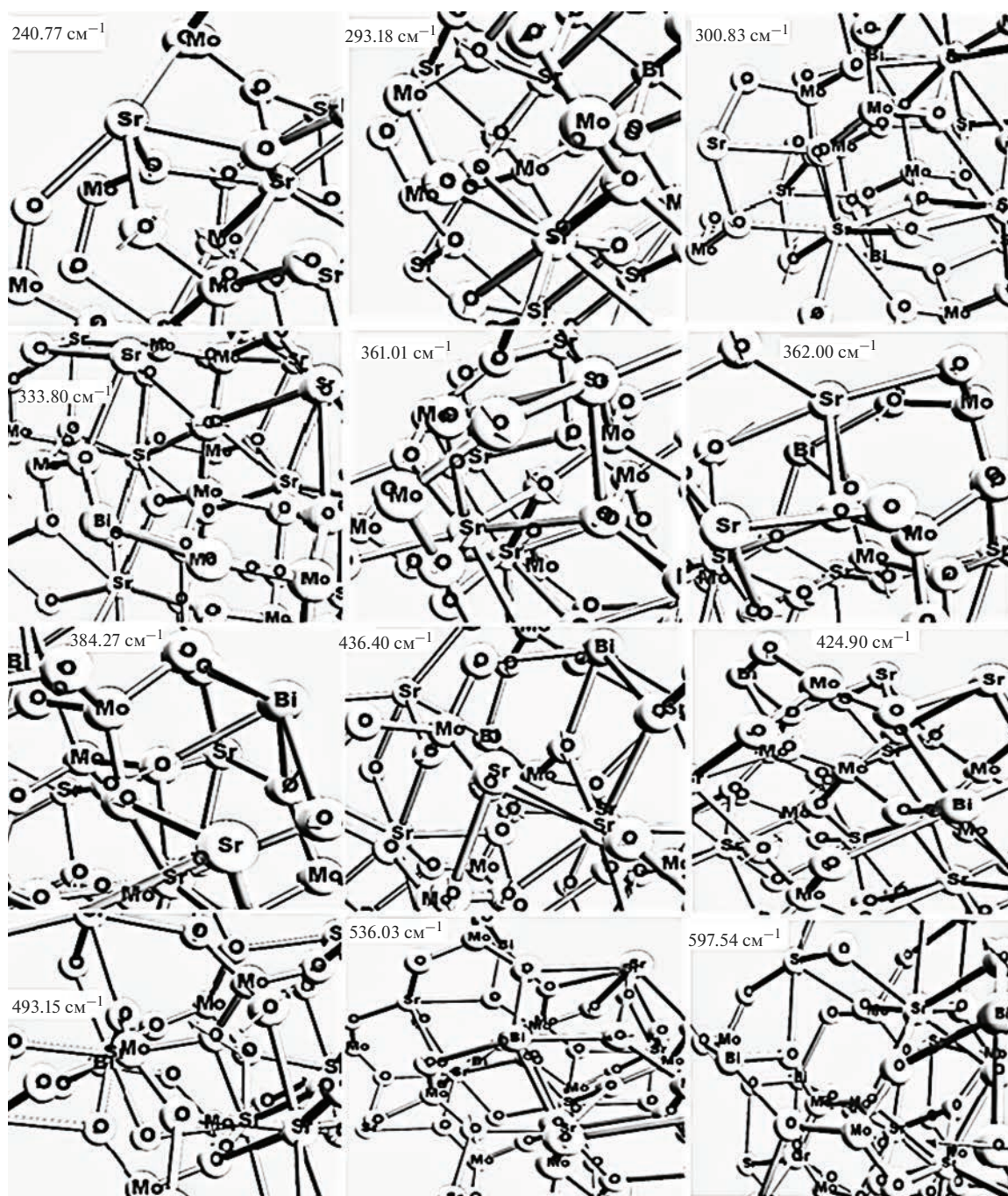


Рис. 2. Модели вибраций некоторых частот.

бания кислорода. Расчетная частота 293.18 см^{-1} связана с маятниковыми колебаниями тетраэдра MoO_4 . Линия 327 см^{-1} является комбинацией веерных колебаний кислорода с асимметричными валентными колебаниями связи $\text{Sr}-\text{O}$, асимметричными валентными колебаниями связей $\text{Sr}-\text{O}-\text{Mo}$ и маятниковыми колебаниями тетраэдра MoO_4 . В окрестности линии 367 см^{-1} набор частот $364.10\text{--}388.78\text{ см}^{-1}$ кластера SrMoO_4 связан дополнительно

с ножничными колебаниями $\text{O}-\text{Sr}-\text{O}$ и $\text{O}-\text{Mo}-\text{O}$. В кластере $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ проявились валентные и ножничные колебания Bi.

Линия 383 см^{-1} и, соответственно, 399.32 см^{-1} при расчете кластера SrMoO_4 определяется комбинацией веерных колебаний кислорода, асимметричными валентными колебаниями связи $\text{Sr}-\text{O}$ и маятниковыми колебаниями тетраэдра MoO_4 . В

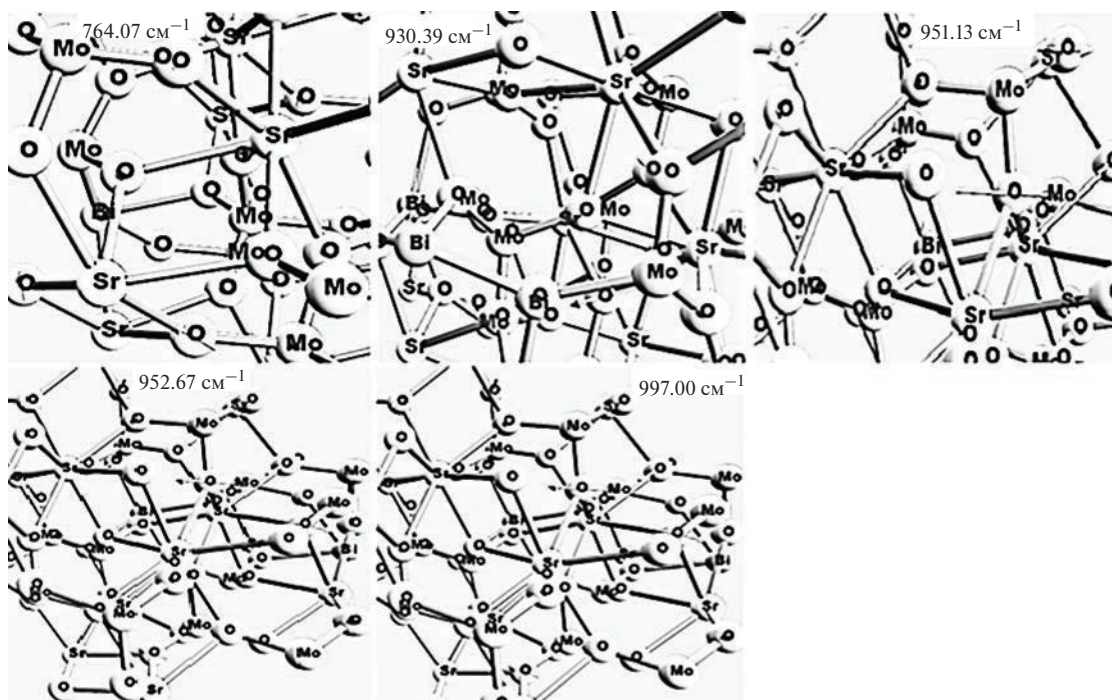


Рис. 2. Окончание

кластере $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ дополнительно вносят вклад асимметричные валентные колебания связи $\text{Bi}-\text{O}$.

Линии 407 см^{-1} отвечает частота 410.48 см^{-1} из расчета кластера SrMoO_4 , которая связана с комбинацией веерных колебаний кислорода, асимметричными валентными колебаниями связи $\text{Sr}-\text{O}$ и ножничными колебаниями $\text{O}-\text{Sr}-\text{O}$ и $\text{O}-\text{Mo}-\text{O}$. Соответственно, в кластере $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ дополнительно наблюдаются асимметричные валентные колебания связи $\text{Bi}-\text{O}$. Спектр частот из расчета кластера SrMoO_4 в области $417-520\text{ см}^{-1}$ определяется комбинацией веерных колебаний кислорода, асимметричными валентными колебаниями связи $\text{Sr}-\text{O}$ и ножничными колебаниями $\text{O}-\text{Mo}-\text{O}$. Частота 549.56 см^{-1} связана дополнительно с ножничными колебаниями $\text{O}-\text{Sr}-\text{O}$. Расчет кластера $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ дал две полосы частот: $408.87-486.74$ и $424.90-615.37\text{ см}^{-1}$. Вторая определяется комбинацией веерных колебаний кислорода, асимметричными валентными колебаниями связи $\text{Sr}-\text{O}$ и ножничными колебаниями $\text{O}-\text{Mo}-\text{O}$. А первая — дополнительно асимметричными валентными колебаниями связи $\text{Bi}-\text{O}$. Частота 549.56 см^{-1} кластера SrMoO_4 связана с комбинацией веерных колебаний кислорода, асимметричными валентными колебаниями связи $\text{Sr}-\text{O}$ и ножничными колебаниями $\text{O}-\text{Sr}-\text{O}$ и $\text{O}-\text{Mo}-\text{O}$. В группе частот $493.15-531.01\text{ см}^{-1}$ в кластере $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ появляется дополнительно асимметричное валентное колебание связи

$\text{Mo}-\text{O}$, которое в различных вариациях наблюдается в группе частот $536.03-615.37\text{ см}^{-1}$. Асимметричное валентное колебание связи $\text{Mo}-\text{O}$ наблюдается в группе частот $613.14-712.36\text{ см}^{-1}$ кластера SrMoO_4 (табл. 1) в дополнение к ножничным колебаниям $\text{O}-\text{Sr}-\text{O}$.

Линия 796 см^{-1} обусловлена с частотами $731.18-787.64\text{ см}^{-1}$ кластера SrMoO_4 , которые определены в качестве симметричных валентных мод растяжения связей $\text{Mo}-\text{O}$ в тетраэдре MoO_4 и ножничных колебаний $\text{O}-\text{Sr}-\text{O}$. В кластере $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ частота 764.07 см^{-1} отражает асимметричные валентные колебания связей $\text{Sr}-\text{O}$ и $\text{O}-\text{Mo}-\text{O}$. Линия 887 см^{-1} обусловлена частотами $884.30-913.37\text{ см}^{-1}$, ей соответствует асимметричное валентное колебание связей $\text{Mo}-\text{O}$ и $\text{Sr}-\text{O}$. Кроме того, в частоте 884.30 см^{-1} отмечен вклад валентных колебаний $\text{Bi}-\text{O}$.

В кластере $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ частоты, расположенные около $951.13, 968.11\text{ см}^{-1}$, определены в качестве симметричных валентных мод растяжения связей $\text{Mo}-\text{O}$ в тетраэдре и представляют проекцию движений кислорода относительно Mo (рис. 2). Частоты $952.67, 964.17, 970.93, 973.68, 976.88, 984.02$ и 997.00 см^{-1} принадлежат асимметричным валентным колебаниям растяжения связей $\text{Mo}-\text{O}$.

Таким образом, замещение висмутом стронция в молибдате SrMoO_4 , сопровождающееся генерацией катионных вакансий, влияет на упругие

характеристики поликристаллических образцов $\text{Sr}_{1-3x}\text{Bi}_{2x}\text{MoO}_4$ и приводит к расщеплению колебаний под действием локального кристаллического поля [14].

Наблюдается существенное расхождение по числу мод между предсказанным для шеелита значением из теоретико-группового анализа колебаний и наблюдаемыми значениями в эксперименте и расчетах. Это является подтверждением понижения симметрии структуры. Использование метода теории функционала плотности для шеелитов приводит к отличиям в расчетных и экспериментальных спектрах, как отмечено в работе [21], авторы которой выдвинули предположение о причине различий. Структура шеелита подтверждается данными РФА, который дает усредненную по кристаллу картину [13]. В целом структура шеелита сохраняется, но в искаженном виде. Величина искажений определяется катионной и анионной подрешетками, размером кристаллитов, дефектами в объеме и на поверхности.

Влияние двухвалентных катионов малозаметно в спектрах КРС [5, 19, 20], а зонный расчет выявил наличие двух дополнительных частот [20]. Внедрение трехвалентных ионов и образование двойных шеелитов приводит к существенным искажениям структуры и понижению сингонии до моноклинной [22, 23], при этом также увеличивается число наблюдаемых мод.

Замена аниона тоже проявляется в разупорядочении и спектрах [21]. Эти моды не полностью поляризованы, и, следовательно, они появляются во всех спектрах КРС и ИК. Исследования нанопорошков [6] тоже обнаружили ряд дополнительных линий в спектрах КРС, которые нельзя отнести к погрешности эксперимента. К влиянию дефектов и поверхностной обработки [24] ИК-спектры более чувствительны, чем РФА. Об этом говорит появление широких полос комбинационного рассеяния пропорционально расширению решетки [25]. Причинами этого явления тоже являются снижение симметрии и неэквивалентность связей нанокристалла или кластера.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Расчет спектров КРС кластеров SrMoO_4 и $\text{Bi}_{0.4}\text{Sr}_{0.4}\text{MoO}_4$ выявил дополнительные частоты, которые обусловлены понижением симметрии структуры соединений. В частности, это дополнительные асимметричные и симметричные колебания связи $\text{Bi}-\text{O}$, ножничные колебания кислорода, связанного со стронцием, и веерные колебания кислорода, а также маятниковые колебания тетраэдра MoO_4 .

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Синтез, аттестация и экспериментальное определение функциональных характеристик материалов были проведены при поддержке гранта РФФ 20-73-10048.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования Северо-Кавказского федерального университета (ЦКП СКФУ) при финансовой поддержке Минобрнауки России, уникальный идентификатор проекта RF—2296.61321X0043 (соглашение № 075-15-2021-672).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Danevich F.A., Georgadz A.Sh., Kobychiev V.V., Kropivnyansky B.N., Nagorny S.S. Application of PbWO_4 Crystal Scintillators in Experiment to Search for 2β Decay of ^{116}cd // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. 2006. V. 556. P. 259–265. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2005.09.049>
2. Shimamura K., Sato H., Bensalah A., Machida H., Saurukura N., Fukuda T. Growth of Ce-Doped Colquirite- and Scheelite-Type Single Crystals for Uv Laser // Appl. Opt. Mater. 2002. V. 19. № 1. P. 109–116. [https://doi.org/10.1016/S0925-3467\(01\)00207-5](https://doi.org/10.1016/S0925-3467(01)00207-5)
3. Emelynova Y.V., Krylov A.A., Kasantseva A.D., Buyanova E.S., Petrova S.A., Nikolaenko I.V. Bismuth Niobates $\text{Bi}_3\text{Nb}_{1-x}\text{Er}_x\text{O}_{7-\delta}$: Structure and Transport Properties // Russ. J. Inorg. Chem. 2019. V. 64. № 1.2. P. 151–157.
4. Баковец В.В., Золотова Е.С., Антонова О.В., Корольков И.В., Юшина И.В. Возможности адаптации спектра фотолюминесценции шеелитов Ca к спектру эмиссии ламп накаливания: соединения $\text{CaMoO}_4:\text{Eu}^{3+}$ и $\text{CaWO}_4:\text{Eu}^{3+}$ // ЖТФ. 2016. Т. 86. Вып. 7. С. 104–111.
5. Parulin R.A., Timoshenko I.V., Kuznetsova Yu.A., Zatsepin A.F., Buyanova E.S., Mikhaylovskaya Z.A., Koubisy M.S.I. Optical Properties and Energy Band Parameters of Luminescent $\text{CaMoO}_4:\text{Bi}$ Ceramics // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 1124. P. 051005. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1124/5/051005>
6. Vidya S., John A., Solomon S., Thomas J.K. Optical and Dielectric Properties of SrMoO_4 Powders Prepared by the Combustion Synthesis Method // Adv. Mater. Res. 2012. V. 1. № 3. P. 191–204. doi: 10.12989/amr.2012.1.3.191
7. Bilkan M.T., Yurdakul S. Experimental and Theoretical Studies on Molecular Structures and Vibrational Modes of Novel Compounds Containing Silver // Russ. J. Inorg. Chem. 2017. V. 62. № 7. P. 910–924. <https://doi.org/10.1134/S0036023617070038>
8. Кожеевникова Н.М. Синтез и исследование тройных молибдатов $\text{KCaLn}(\text{MoO}_4)_3$ шеелитоподобной структуры в системах $\text{K}_2\text{MoO}_4-\text{CaMoO}_4-\text{Ln}_2(\text{MoO}_4)_3$ ($\text{Ln} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}$) // Журн. неорганической химии. 2018. Т. 63. № 2. С. 147–161. <https://doi.org/10.7868/S0044457X18020034>
9. Ляшенко Л.П., Щербакоева Л.Г., Тартаковский И.И., Максимов А.А., Светогоров Р.Д., Зубавичус Я.В. Структурные преобразования порядок–беспорядок в нанокристаллических высокодефектных флюоритпроизводных Gd_2MO_5 ($\text{M} = \text{Zr}, \text{Hf}$) // Не-

- орган. материалы. 2018. Т. 54. № 3. С. 257–264.
<https://doi.org/10.7868/S0002337X18030065>
10. Guo J., Randall A.C., Zhang G., Zhou D., Chen Y., Wang H. Synthesis, Structure, and Characterization of New Low-Firing Microwave Dielectric Ceramics: $(\text{Ca}_{1-3x}\text{Bi}_{2x}\text{F}_x)\text{MoO}_4$ // J. Mater. Chem. C. 2014. V. 35. № 2. P. 7364–7372.
<https://doi.org/10.1039/C4TC00698D>
 11. SrMoO_4 ($\text{Sr}[\text{MoO}_4]$) Crystal Structure // Inorganic Solid Phases // Pauling File / Ed. Villars P. Heidelberg: Springer.
https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_1014644
 12. Михайловская З.А., Буянова Е.С., Петрова С.А., Кузнецова Ю.А., Пьянкова Д.В. Синтез и свойства твердых растворов $(\text{Ca}/\text{Sr})_{1-3x}\text{Bi}_{2x}\text{MoO}_4$ // Неорган. материалы. 2019. Т. 55. № 10. С. 1080–1086.
<https://doi.org/10.1134/S0002337X19080098>
 13. Sleight J.A.W., Aykan K. New Nonstoichiometric Molybdate, Tungstate, and Vanadate Catalysts with the Scheelite-Type Structure // Solid State Chem. 1975. V. 13. № 3. P. 231–236.
 14. Михайловская З.А., Буянова Е.С., Соколенко Е.В., Слюсарев Г.В., Петрова С.А., Зацепин А.Ф. Влияние добавок висмута на кристаллическую и электронную структуру молибдата стронция // ЖФХ. 2020. Т. 94. № 12. С. 1857–1864.
 15. Воронько Ю.К., Соболев А.А., Шукишин В.Е., Загуменный А.И., Заварцев Ю.Д., Кутовой С.А. Исследование структурного разупорядочения в кристаллах YVO_4 , GdVO_4 и CaWO_4 методом спектроскопии комбинационного рассеяния света // ФТТ. 2009. Т. 51. № 9. С. 1776–1782.
 16. Mikhaylovskaya Z.A., Buyanova E.S., Petrova S.A., Nikitina A.A. Scheelite-Related Strontium Molybdates: Synthesis and Characterization // Chim. Tech. Acta. 2018. V. 5. № 4. P. 189–195.
<https://doi.org/10.15826/chimtech.2018.5.4.03>
 17. Соколенко Е.В., Слюсарев Г.В. Моделирование дефектов в структуре карбида кремния // Неорган. материалы. 2019. Т. 55. № 1. С. 21–33.
<https://doi.org/10.1134/S0002337X19010159>
 18. Furlani Th.R., Kong J., Gill P.M.W. Parallelization of SCF Calculations Within Q-Chem // Comput. Phys. Commun. 2000. V. 128. P. 170–177.
 19. Wadt W.R., Hay P.J. Ab Initio Effective Core Potentials for Molecular Calculations Potentials for Main Group Elements Na to Bi // J. Chem. Phys. 1985. V. 82. P. 284–298.
<https://doi.org/10.1063/1.448800>
 20. Botelho G., Nogueira I.C., Moraes E., Longo E. Study of Structural and Optical Properties of CaMoO_4 Nanoparticles Synthesized by the Microwave-Assisted Solvothermal Method // Mater. Chem. Phys. 2016. V. 183. P. 110–120.
<https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2016.08.008>
 21. Oliveira F.K.F., M.C., Gracia L., Tranquilin R.L., Paskocimas C.A., Motta F.V., Longo E., Andr es J., Bomio M.R.D. Experimental and Theoretical Study to Explain the Morphology of CaMoO_4 Crystals // J. Phys. Chem. Solids. 2018. V. 114. P. 141–152.
<https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2017.11.019>
 22. Sczancoski J.C., Cavalcante L.S., Marana N.L., Silva R.O., Tranquilin R.L., Joya M.R., Pizani P.S., Varela J.A., Sambrano J.R., Siu Li M., Longo E., Andr es J. Current Electronic Structure and Optical Properties of BaMoO_4 Powders // Appl. Phys. 2010. V. 10. P. 614–624.
<https://doi.org/10.1016/j.cap.2009.08.006>
 23. Hanuza J., Benzar A., Haznar A., Maczka M., Pietraszko A., Maas J.H. Structure and Vibrational Dynamics of Tetragonal $\text{NaBi}(\text{WO}_4)_2$ Scheelite Crystal // Vibr. Spectrosc. 1996. V. 12. P. 25–36.
 24. Hanuza J., Maczka M., Maas J.H. Vibrational Characteristics of the Single-Bridge MoOMo and Double-bridge MoO_2Mo Intermolecular Interactions-Polarized Infrared and Raman Spectra of Monoclinic $\text{KBi}(\text{MoO}_4)_2$ Single Crystal // Vibr. Spectrosc. 1995. V. 8. P. 417–423.
 25. Hanuza J., Maczka M., Maas J.H. Polarized IR and Raman Spectra of Tetragonal $\text{NaBi}(\text{WO}_4)_2$, $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ and $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$ Single Crystals with Scheelite Structure // J. Mol. Struct. 1995. V. 348. P. 349–352.