Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 9

ТВЕРЬ 2017

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения об рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – 592 с.

ISBN 978-5-7609-1275-6

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1275-6

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2017

© Тверской государственной
университет, 2017

УДК 543.429.23:546.36'815'773

**ЛОКАЛЬНОЕ ОКРУЖЕНИЕ КАТИОНОВ
В ДВОЙНЫХ ШЕЕЛИТАХ $\text{Li}(\text{Na})\text{Bi}(\text{MoO}_4)_2$ ПО ДАННЫМ ЯМР И
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ**

Н.А. Журавлев¹, Д.В. Суетин¹, И.Р. Шеин¹, А.В. Скачков¹, А.А. Савина²,
Т.С. Спиридонова², А.Л. Бузлуков^{1,3}, Т.А. Денисова¹

¹ФГБУН «Институт химии твердого тела Уральского отделения РАН»
620990, Россия, Екатеринбург, ГСП, ул. Первомайская, 91
zhuravlev@ihim.uran.ru

²ФГБУН «Байкальский институт природопользования Сибирского отделения РАН»
670047, Россия, Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, 6
alex551112@mail.ru

³ФГБУН «Институт физики металлов имени М.Н. Михеева»,
620108, Россия, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
buzlukov@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.189

Аннотация: Первопринципными методами квантовой химии проведены расчеты электронного строения и определены параметры градиента электрического поля вблизи ядер ${}^7\text{Li}$, параметр асимметрии и квадрупольная частота двойного молибдата $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$. Из анализа спектров ЯМР установлено, что состояния ядер ${}^7\text{Li}$ в $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$ в катионной подрешетке не различаются, тогда как в соединении $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ атомы Na в позициях Bi имеют разную заселенность и характеристики электрического поля.

Ключевые слова: $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$, $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$, структура шеелита, электронное строение, квантово-химические расчеты, ЯМР ${}^7\text{Li}$ и ${}^{23}\text{Na}$, параметры ГЭП.

1. Введение

Двойные молибдаты висмута и щелочных металлов рассматриваются перспективными в качестве матрицы для введения редкоземельных элементов при получении оптических материалов, в том числе твердотельных лазеров, люминофоров и т.д. (см. работы [1-3] и ссылки в них). К таким составам относятся и соединения $\text{MBi}(\text{MoO}_4)_2$ ($M = \text{Li}, \text{Na}$) со структурой шеелита [4-6]. Согласно работе [5] двойные молибдаты $\text{MBi}(\text{MoO}_4)_2$ ($M = \text{Li}, \text{Na}$) имеют тетрагональную структуру (пространственная группа $I\bar{4}$) с параметрами решетки $a = 5,28\text{\AA}$ и $5,23\text{\AA}$; $c = 11,60\text{\AA}$ и $11,49\text{\AA}$ для $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ и $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$ соответственно. Ионы молибдена занимают две разные позиции в тетраэдрическом окружении ионов кислорода MoO_4^{2-} с расстояниями $1,762\text{\AA}$ для $\text{Mo}(1)-\text{O}$ и $1,791\text{\AA}$ для $\text{Mo}(2)-\text{O}$. Считается, что ионы щелочных металлов статистически распределены по кристаллографическим позициям висмута. Однако в работе [6] показано, что в структуре молибдата натрия-висмута ионы Na^+ и

Bi^{3+} в кристалле имеют ближний порядок, а их распределение отклоняется от статистического. Сделано заключение, что локальное нарушение катионных слоев образует «доменную» структуру, которая, по мнению авторов, может быть характерна для кристаллов типа шеелита. Фрагмент структуры $NaBi(MoO_4)_2$ по данным [6] с различной заселенностью ионами натрия позиций висмута показан на рис. 1.

Рис. 1. Кристаллическая структура $NaBi(MoO_4)_2$, где тетраэдры обозначают фрагменты MoO_4^{2-} , а заселенность позиций висмута ионами Na^+ составляет 45 и 55 % согласно [6].

Настоящая работа предпринята с целью получения характеристик локального окружения ионов щелочных металлов в структуре $MBi(MoO_4)_2$ ($M = Li, Na$) с использованием ЯМР 7Li , ^{23}Na и первопринципных расчетов их электронного строения и параметров ГЭП.

2. Материалы и методы

В качестве исходных веществ для получения двойных молибдатов состава $MBi(MoO_4)_2$ ($M = Li, Na$) использовали выпускаемые промышленностью реактивы MoO_3 , Li_2CO_3 , $NaMoO_4 \cdot 2H_2O$ и Bi_2O_3 (все квалификации «х.ч.»). Молибдат лития Li_2MoO_4 синтезировали отжигом стехиометрических количеств карбоната лития с триоксидом молибдена при 400–600 °С. Безводный Na_2MoO_4 получали прокаливанием соответствующего кристаллогидрата при 550–600 °С. $Bi_2(MoO_4)_3$

синтезировали 70-часовым отжигом стехиометрических количеств оксидов висмута и молибдена при 450–500 °С. Молибдаты состава $MBi(MoO_4)_2$ ($M = Li, Na$) получены прокаливанием смесей соответствующих средних молибдатов, взятых в соотношении 1:1, при 450–550 °С в течение 40–50 часов. Однофазность продуктов синтеза контролировали рентгенографически (автодифрактометр D8 Advance фирмы Bruker, λCuK_α , вторичный монохроматор, $2\theta_{max} = 100^\circ$, шаг сканирования 0,02076°). Термические и кристаллографические характеристики полученных двойных молибдатов соответствовали литературным данным.

ЯМР эксперимент на ядрах 7Li и ^{23}Na проведен при комнатной температуре на импульсном спектрометре Agilent VNMR 400 на частотах 155,44 МГц (7Li) и 105,86 МГц (^{23}Na). Статические спектры ЯМР были получены путем Фурье-преобразования сигнала спинового эха: $\tau - t_{del} - t_{del} - acq$. Длительность возбуждающего импульса составляла $\tau = 3$ мкс, что соответствовало углу поворота вектора ядерной намагниченности $\theta \sim 70-75^\circ$. Величины химических сдвигов для ядер 7Li определены относительно 9,7 М $LiCl$, для ядер ^{23}Na – относительно 0,1 М $NaCl$. Аппроксимация экспериментальных спектров проводилась с использованием программного комплекса DmFIT [7].

Расчеты электронной структуры, а также ЯМР параметров были проведены линейным методом присоединенных плоских волн (FLAPW) с обобщенной градиентной аппроксимацией (GGA) в форме PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) [8] обменно-корреляционного потенциала, реализованного в программном пакете WIEN2k [9]. Базисный набор волновых функций внутри каждой muffin tin (MT) сферы делился на остовную и валентную часть. Учет остовных состояний осуществлялся в рамках скалярно-релятивистского приближения, предполагалось, что они имеют сферически симметричную плотность заряда в MT сферах. Зарядовая плотность валентных состояний внутри атомных сфер была разложена в ряд до $l = 12$. Валентную часть волновых функций выражали в виде потенциала, разложенного по сферическим гармоникам вплоть до $l = 5$. Параметр плосковолнового расширения $R_{MT} \times K_{max}$ был взят равным 7,0, для FLAPW-GGA расчетов использовалась сетка с 1000k – точек в зоне Бриллюэна. В качестве стартовых брались следующие электронные конфигурации атомов: для лития – $[He] 2s^1$, висмута – $[Xe] 4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$, молибдена – $[Kr] 5s^24d^4$, для кислорода – $[He] 2s^22p^4$. Значения MT радиусов были выбраны равными 1,9 а.е. для Li , 2,15 а.е. для Bi , 1,7 а.е. для Mo и 1,4 а.е. для атомов O . Сходимость проводимых расчетов задавалась по условиям минимума полной зонной энергии ($E_{tot} < 0,01$ мРб)

и сил, действующих на атомы ($f_i < 1$ мРб/а.е.). Плотность электронных состояний (ПС) была получена с использованием модифицированного метода тетраэдров [10].

Тензор градиента электрического поля (ГЭП) рассчитывался исходя из зарядовой плотности, далее проходила процедура диагонализации с получением главных значений V_{xx}, V_{yy}, V_{zz} . Здесь величина V_{zz} определяет максимальное значение ГЭП. Затем были получены такие параметры ЯМР как параметр асимметрии (1) и квадрупольная частота (2):

$$\eta = (V_{xx} - V_{yy}) / V_{zz}, \quad (1)$$

$$\nu_Q = \frac{3eQV_{zz}}{2I(2I-1)h}, \quad (2)$$

где e – заряд электрона, h – постоянная Планка, Q – ядерный электрический квадрупольный момент, I – спин ядра. Для изотопов ^7Li , ^{23}Na , ^{209}Bi спины ядер составляют $3/2$, $3/2$ и $7/2$, квадрупольные моменты равны $-0,0406$, $0,108$ и $-0,373$ барн [11] соответственно.

3. Результаты и обсуждение

Рассмотрены различные варианты расположения атомов Li и Bi , которые занимают идентичные атомные позиции в молибдате $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$. Все они сводятся к двум моделям: более дальнего ($d \sim 5,5 \text{ \AA}$) и более близкого ($d \sim 3,9 \text{ \AA}$) распределения соседних атомов Li или атомов Bi друг относительно друга. Проведенные оценки полных энергий данных модельных структур показали, что первый вариант является более предпочтительным, а энергетический выигрыш составляет $\sim 0,027$ эВ/атом. Таким образом, далее будут преимущественно обсуждены результаты первой модели, полученные для структуры молибдата с максимальным удалением атомов $\text{Li}(\text{Bi})$ друг относительно друга.

Сначала была проведена структурная оптимизация молибдата, получены его равновесные параметры решетки a и c . Согласно нашим данным, $a_{\text{theor}} = 5,2501 \text{ \AA}$, $c_{\text{theor}} = 11,5321 \text{ \AA}$, что практически совпадает с имеющимися экспериментальными значениями [5]. Небольшое завышение параметров решетки, не превышающее $0,3\%$, связано с использованием GGA приближения и является типичным для такого рода расчетов.

Для оптимизированной структуры молибдата рассчитаны полная и парциальные плотности состояний для первой модельной структуры молибдата $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$, которые приведены на рис. 2. Как видно из рис. 2, общая валентная полоса $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$ состоит из нескольких подполос. Так,

имеют место три квазиостовные зоны, обусловленные главным образом $Bi\ 5d$, $O\ 2s$ и $Bi\ 6s$ состояниями и располагающиеся около -22 эВ , -17 эВ и $-9,2\text{ эВ}$ относительно уровня Ферми соответственно. Между собой эти зоны отделены запрещенными щелями. Далее с $-5,3\text{ эВ}$ до уровня Ферми лежит основная валентная полоса, которая, в свою очередь, делится на две подполосы, переходящие одна в другую. Нижняя полоса от -5 эВ до -3 эВ составлена в основном гибридованными $Mo\ 4d$ и $O\ 2p$ состояниями с добавлением $Bi\ 6p$, $Mo\ 5s$, $Mo\ 5p$ и $Li\ 2s$ состояний. Полоса от -3 эВ до 0 эВ заполнена практически целиком $O\ 2p$ состояниями, вклад остальных состояний здесь крайне мал. Дно зоны проводимости составляют $Mo\ 4d$, $O\ 2p$ и $Bi\ 6p$ состояния. Исследуемый молибдат $LiBi(MoO_4)_2$ относится к группе широкозонных полупроводников с $E_g \sim 3\text{ эВ}$. Рассчитанная ширина запрещенной щели составляет $E_g = 2,46\text{ эВ}$, что заметно меньше экспериментального значения $E_g = 3,26\text{ эВ}$ [2], это связано с использованием GGA приближения, обычно систематически занижающего величину E_g .

Рис. 2. Полная (вверху) и парциальные плотности состояний для $LiBi(MoO_4)_2$.

Вычисленные компоненты тензора ГЭП молибдата $LiBi(MoO_4)_2$ со структурой шеелита приведены в Таблице 1. Максимальные компоненты тензора ГЭП для всех магнитных ядер, за исключением ^{16}O , направлены по оси z . Кроме того, недиагональные компоненты равны нулю, а тензор ГЭП является симметричным ($V_{xx} = V_{yy}$). В то же время для ядер кислорода компонента V_{zz} в кристаллографических осях не является максимальной, и необходим учет всех диагональных и недиагональных компонент тензора ГЭП (см. Таблицу 1). Значения V_{ij} для ядер Mo и O существенно зависят от типа неэквивалентной атомной позиции. Была выполнена диагонализация тензора ГЭП, соответствующие значения в главных осях представлены в Таблице 2. Для ядер кислорода, находящихся в позиции 1, максимальное значение по абсолютной величине в кристаллографических осях принимает компонента V_{xx} , а для ядер O в позиции 2 – V_{yy} .

Таблица 1. Рассчитанные компоненты тензора ГЭП (V_{ij} , в 10^{21} В/м²) в кристаллографических осях на магнитных ядрах в $LiBi(MoO_4)_2$ (первая модель)

Ядро	V_{xx}	V_{yy}	V_{zz}	V_{xy}	V_{xz}	V_{yz}
<i>Li</i>	0,01472	0,01472	-0,02944	0	0	0
<i>Bi</i>	0,95849	0,95849	-1,91699	0	0	0
<i>Mo</i> (1)	-1,81081	-1,81081	3,62162	0	0	0
<i>Mo</i> (2)	-4,36159	-4,36159	8,72317	0	0	0
<i>O</i> (1)	0,69607	-1,70339	1,00733	0,99748	2,31101	-0,19228
<i>O</i> (2)	-0,35777	0,76029	-0,40251	-2,64382	-0,48923	-0,28937

Таблица 2. Рассчитанные компоненты тензора ГЭП (V_{ij} , в 10^{21} В/м²) в главных осях на магнитных ядрах в $LiBi(MoO_4)_2$

Ядро	V_{xx}	V_{yy}	V_{zz}
<i>Li</i>	0,01472	0,01472	-0,02944
<i>Bi</i>	0,95849	0,95849	-1,91699
<i>Mo</i> (1)	-1,81081	-1,81081	3,62162
<i>Mo</i> (2)	-4,36159	-4,36159	8,72317
<i>O</i> (1)	3,22919	-2,48199	-0,74720
<i>O</i> (2)	-2,64225	2,90567	-0,26342

Для второй модельной структуры $LiBi(MoO_4)_2$ были также проделаны подобные вычисления. Основные изменения по сравнению с первой моделью состоят в наличии недиагональных компонент тензора ГЭП для всех магнитных ядер, а также несимметричности тензора, т.е. $V_{xx} \neq V_{yy}$.

Значение V_{zz} остается максимальным для ядер Li , Bi и Mo .

Несомненный интерес представляет также сравнение теоретических и экспериментальных параметров ЯМР, позволяющее разумно интерпретировать реальные ЯМР спектры. Были определены параметр асимметрии η и квадрупольная частота ν_Q магнитных ядер 7Li , полученные данные суммированы в Таблице 3.

Таблица 3. Рассчитанные и экспериментальные значения квадрупольных частот ν_Q , параметров асимметрии η , заселенностей позиций S и химического сдвига¹ δ сложных молибдатов $MBi(MoO_4)_2$ ($M = Li, Na$)

Состав	ядро	параметр	расчет ²		эксперимент	
			модель 1	модель 2	линия 1	линия 2
$LiBi(MoO_4)_2$	7Li	ν_Q , МГц	0,0146	0,0150	0,0075	
		η	0,000	0,734	0,00	
		δ , м.д.		—	-8,97	
$NaBi(MoO_4)_2$	${}^{23}Na$	ν_Q , МГц	—	—	0,0013	0,0017
		η	—	—	0,02	0,02
		δ , м.д.	—	—	-6,45	-12,41
		S , %	—	—	45,1	54,9

¹ – приведены только экспериментальные значения химического сдвига.

² – приведены результаты для двух модельных структур с различным распределением атомов Li и Bi в молибдате.

Экспериментальные спектры ЯМР представлены на рис. 3 и 4. Ядра с спиновым квантовым числом $I > 1/2$ имеют несферическое распределение заряда в ядре, что приводит к появлению квадрупольного момента, который взаимодействует с градиентом электрического поля (ГЭП), присутствующим на ядре. Компоненты тензора ГЭП определяются, в свою очередь, особенностями локального окружения ядра-зонда [12]. В случае сильных магнитных полей влияние квадрупольного взаимодействия описывается обычно как малые поправки к зеемановской энергии (в рамках теории возмущений). В первом порядке теории возмущений наличие квадрупольного взаимодействия приводит к характерному расщеплению ЯМР спектров и появлению (в случае 7Li и ${}^{23}Na$ с $I = 3/2$) трех линий: линии, соответствующей центральному переходу, $m_I = -1/2 \leftrightarrow +1/2$, и двух сателлитных линий ($m_I = \pm 3/2 \leftrightarrow \pm 1/2$). Для порошкового образца пики сателлитных линий смещены относительно положения центральной линии на расстояние $\pm 1/2 \nu_Q (1 - \eta)$, где величины квадрупольной частоты (ν_Q) и параметра асимметрии (η) определяются компонентами тензора ГЭП (уравнения (1) и (2)). На рис. 3 и 4 показаны

примеры аппроксимации экспериментальных спектров в рамках первого порядка теории возмущений. Для соединения $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$ экспериментальный спектр ЯМР ^7Li описывается одиночной линией с малой величиной квадрупольной частоты (ν_Q) (см. Таблицу 3) и нулевым значением параметра асимметрии (η), что отражает слабое искажение электрического поля вблизи ядер ^7Li , расположенных в позициях Bi . Из результатов Таблицы 3 видно, что расчетные и экспериментальные значения ν_Q находятся в разумном соответствии друг с другом. Имеющееся отклонение можно объяснить значительной подвижностью легких атомов Li в условиях реальной температуры [13]. Также установлено, что параметр асимметрии в случае первой модельной структуры равен 0 в силу симметрии тензора ГЭП для ядер ^7Li , как и в эксперименте, а для второй модели асимметрия велика и значение η составляет $\sim 0,73$. Таким образом, атомы Li и Bi , по-видимому, распределяются в кристаллической структуре молибдата $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$ преимущественно в согласии с первой моделью. Сделанный вывод не противоречит проведенным оценкам полных энергий данных систем (см. выше). Иная картина наблюдается в случае соединения $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$.

Рис. 3. Экспериментальный спектр ЯМР ^7Li (точки) и его аппроксимация (сплошная кривая) соединения $\text{LiBi}(\text{MoO}_4)_2$.

Рис. 4. Экспериментальный спектр ЯМР ^{23}Na (точки), его аппроксимация линия 1) и составляющие спектра (линии 2 и 3) соединения $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$.

Как видно из рис. 4, экспериментальный спектр ЯМР ^{23}Na имеет асимметричную форму (более высокое плечо в области значений химического сдвига $\delta \approx -20$ м.д.) и может быть описан как суперпозиция двух линий с различающимися величинами квадрупольной частоты и химического сдвига и одинаковыми значениями параметра асимметрии (см. Таблицу 3). Относительные интегральные интенсивности

составляющих экспериментального сигнала ЯМР $^2S: ^1S \approx 55:45$, что совпадает с данными [6] и подтверждает высказанное авторами предположение, что в структуре $NaBi(MoO_4)_2$ распределение ионов натрия по позициям висмута отклоняется от статистического.

4. Заключение

В результате анализа экспериментальных спектров ЯМР 7Li и ^{23}Na в молибдатах $MBi(MoO_4)_2$ ($M = Li, Na$) установлено, что параметры ГЭП имеют малые значения, что свидетельствует о слабых искажениях электрического поля вблизи ядер щелочных металлов. В отличие от $LiBi(MoO_4)_2$, где по данным квантово-химических расчетов и анализа спектров ЯМР состояния ионов лития в катионной подрешетке молибдата не различаются, в соединении $NaBi(MoO_4)_2$ ионы Na в позициях Bi отличаются заселенностью и характеристиками электрического поля вблизи магнитных ядер ^{23}Na .

В работе посредством квантово-химических расчетов определено электронное строение и установлены параметры градиента электрического поля вблизи ядер 7Li , а также параметр асимметрии η и квадрупольная частота ν_Q двойного молибдата $LiBi(MoO_4)_2$ для двух модельных структур с различным распределением атомов Li и Bi . Получено, что данный молибдат относится к группе широкозонных полупроводников с $E_g \sim 3$ эВ, что согласуется с другими имеющимися данными. Расчетные и экспериментальные значения ν_Q для ядер 7Li находятся в разумном соответствии друг с другом, имеющееся отклонение может быть обусловлено высокой подвижностью атомов Li при реальной температуре. Проведенные оценки полных энергий, а также сравнение теоретических и экспериментальных параметров асимметрии $LiBi(MoO_4)_2$ позволяет предположить, что соседние атомы $Li(Bi)$ располагаются в кристаллической структуре молибдата преимущественно в соответствии с первой моделью, т.е. на максимальном удалении один от другого.

Работа выполнена в соответствии с государственными заданиями ИХТТ УрО РАН и ИФМ УрО РАН по комплексной программе УрО РАН (проект № 15-17-23-31), БИП СО РАН (тема 0339-2016-0007) и при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-03-00164).

Библиографический список:

1. **Rico, M.** Polarization and local disorder effects on the properties of Er^{3+} –doped $XBi(YO_4)_2$, $X = Li$ or Na and $Y = W$ or Mo , crystalline tunable laser hosts / M. Rico,

- A. Méndez-Blas, V. Volkov et al. // Journal of the Optical Society of America: B. – 2006. – V. 23. – I. 10. – P. 2066-2078.
2. **Hizhnyi, Y.** Electronic structure and luminescence spectroscopy of $M^I\text{Bi}(\text{MoO}_4)_2$ ($M^I = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$), $\text{LiY}(\text{MoO}_4)_2$ and $\text{NaFe}(\text{MoO}_4)_2$ molybdates / Y. Hizhnyi, S. Nedilko, V. Chornii et al. // Solid State Phenomena. – 2013. – V. 200. – P. 114-122.
3. **Рядун, А.А.** ЭПР и фотолюминесценция кристаллов $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$, активированных ионами гадолиния / А.А. Рядун, В.А. Надолинный, Б.Н. Цыдыпова и др. // Физика твердого тела. – 2015. – Т. 57. – Вып. 6. – С. 1168-1171.
4. **Teller, R.G.** Refinement of some $\text{Na}_{0.5-x}\text{M}_{0.5+x/32x/3}\text{MoO}_4$, $M = \text{Bi}, \text{Ce}, \text{La}$, scheelite structures with powder neutron and X-ray diffraction data / R.G. Teller // Acta crystallographica. Section C, Crystal structure communications. – 1992. – V. 48. – I. 12. – P. 2101-2104.
5. **Hanuza, J.** 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. Hanuza, M. Maczka, J.H. van der Maas // Journal of Molecular Structure. – 1995. – V. 348. – P. 349-352.
6. **Hanuza, J.** Structure and vibrational properties of tetragonal scheelite $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ / J. Hanuza, A. Haznar, M. Maczka et al. // Journal of Raman Spectroscopy. – 1997. – V. 28. – I. 12. – P. 953-963.
7. **Massiot, D.** Modelling one- and two-dimensional solid-state NMR spectra / D. Massiot, F. Fayon, M. Capron et al. // Magnetic Resonance in Chemistry. – 2002. – V. 40. – I. 1. – P. 70-76.
8. **Perdew, J.P.** Generalized gradient approximation made simple / J.P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof // Physical Review Letters. – 1996. – V. 77. – I. 18. – P. 3865-3867.
9. **Blaha, P.** WIEN2k, An augmented plane wave plus local orbitals program for calculating crystal properties / P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen et al. – Vienna: Vienna University of Technology. 2001. – 254 p.
10. **Blöchl, P.E.** Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations / P.E. Blöchl, O. Jepsen, O.K. Anderson // Physical Review: B. – 1994. – V. 49. – I. 23. – P. 16223-16229.
11. **Stone, N.J.** Table of nuclear magnetic dipole and electric quadrupole moments // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 2005. – V. 90. – I. 2. – P. 75-176.
12. **Abragam, A.** The principles of nuclear magnetism / A. Abragam. – Oxford: Clarendon Press, 1961. – 599 p.
13. **Селезнев, В.А.** Электронная структура и квадрупольные взаимодействия в тройных молибдатах $\text{Li}_2\text{M}_3\text{Al}(\text{MoO}_4)_4$, $M = \text{Cs}, \text{Rb}$ / В.А. Селезнев, Н.И. Медведева, Т.А. Денисова и др. // Журнал структурной химии. – 2016. – Т. 57. – № 2. – С. 292-297.