



Contribution ID : 47

Type : not specified

DFT предсказание кристаллической структуры и упругих свойств нового нелинейно-оптического кристалла $\text{Pb}_2(\text{TeO}_3)(\text{NO}_3)_2$

Нелинейно-оптические (NLO) кристаллы, способные к спектральной трансформации лазерного излучения, вызывают устойчивый интерес в научном сообществе благодаря своему потенциалу для оптоэлектронных применений, однако их рациональное проектирование остается непростой задачей [1]. В настоящей работе методами теории функционала плотности (DFT) прогнозируется возможность существования нового кристалла $\text{Pb}_2(\text{TeO}_3)(\text{NO}_3)_2$ (далее – PTNO) и проводится исследование его кристаллической структуры и механической стабильности. PTNO получен путём изоморфного замещения Se на Te в известной структуре $\text{Pb}_2(\text{SeO}_3)(\text{NO}_3)_2$ [2]. Кристалл имеет орторомбическую пространственную группу $\text{Pmn}2_1$ с параметрами решётки $a = 5.4669 \text{ \AA}$, $b = 10.3277 \text{ \AA}$, $c = 7.2610 \text{ \AA}$, $V = 409.96 \text{ \AA}^3$. Она образована пирамидальными селенит-ионами $\{\text{TeO}_3\}^{2-}$ и плоскими нитрат-ионами $\{\text{NO}_3\}^{-}$, которые формируют слоистую архитектуру с двумя кристаллографически неэквивалентными нитратными группами.

Primary author(s) : Ms. GVOZDIKOVA, Ekaterina (Kemerovo State University)

Presenter(s) : Ms. GVOZDIKOVA, Ekaterina (Kemerovo State University)