

ОТЧЕТ О ПРОДЕЛАННОЙ РАБОТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБОРУДОВАНИЯ ИВЦ НГУ

1. Аннотация

Проект посвящен исключительно перспективному в научном и практическом плане классу соединений – боратам. Все возрастающая потребность использования в передовых технологических процессах коротковолнового когерентного излучения требует направленного поиска материалов для приборов и оптических систем ультрафиолетового (УФ) диапазона спектра. Источники когерентного УФ излучения востребованы в планарных технологиях, фотонике, в атмосферных и аэрокосмических исследованиях, прецизионной микрообработке материалов. Энергия фотонов в УФ области спектра является достаточной для начала процесса разрушения связей во многих соединениях, что открывает возможность использования такого излучения в фотохимии, биологии, медицине.

2. Тема работы

Разработка новых материалов на основе фторидоборатов с "антицеолитной" структурой для оптоэлектронных устройств видимого и УФ-диапазонов

3. Состав коллектива

1. Беккер Татьяна Борисовна, профессор РАН, д.г.-м.н., в.н.с. Институт Геологии и Минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, руководитель.
2. Инербаев Талгат Муратович, к.ф.-м.н., с.н.с. Институт Геологии и Минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, исполнитель.
3. Сагатов Нурсултан Ерболулы, м.н.с., аспирант Институт Геологии и Минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, исполнитель.

4. Информация о гранте

Совместный грант РФФИ и правительства Новосибирской области № 20-42-540001 "Разработка новых эффективных люминофоров для термолюминесцентных дозиметров и светодиодов видимого диапазона на основе фторидоборатов щелочных и щелочноземельных металлов", 2021 г.

Грант РНФ № No 21-19-00097 "Разработка новых материалов на основе фторидоборатов с "антицеолитной" структурой для оптоэлектронных устройств видимого и УФ-диапазонов", 2021-2023гг.

5. Научное содержание работы

5.1 Постановка задачи

В настоящее время бораты являются не имеющими альтернативы кристаллическими средами для нелинейно-оптического преобразования лазерного излучения в область ближнего и вакуумного ультрафиолета, являются основными компонентами поляризационной оптики УФ диапазона. Связано это с удачным сочетанием свойств, а именно, широким диапазоном прозрачности, высоким порогом интенсивности разрушающего излучения, двулучепреломлением, приемлемыми значениями нелинейно-оптических коэффициентов. Примерами важнейших промышленно используемых кристаллов боратов являются бораты бария (β -BaB₂O₄) и лития (LiB₃O₅), после открытия которых поиск новых функциональных боратов непрерывно продолжается. Относительно новым активно развивающимся направлением является использование кристаллов боратов в качестве матриц для создания светодиодов белого цвета. Люминофоры на кристаллах боратов характеризуются высоким индексом цветопередачи, хорошей воспроизводимостью цвета, низкой коррелированной цветовой температурой.

5.2 Современное состояние проблемы

Решение задач обнаружения и измерения радиации становится все более актуальным в связи с возрастающей ее ролью в деятельности человека. К важнейшим задачам современной дозиметрии относятся контроль радиационной безопасности человека и окружающей среды, клиническая и технологическая дозиметрия, проблемы, связанные с захоронением радиоактивных отходов.

Одним из наиболее активно развивающихся направлений дозиметрии ионизирующих излучений является твердотельная термолюминесцентная дозиметрия. Метод основан на свойстве так называемых накопительных кристаллолюминофоров излучать свет при нагревании после предварительного возбуждения ионизирующим излучением. Свободные носители заряда, образующиеся под действием

излучения, могут локализоваться в центрах захвата, меняя свое энергетическое состояние, и могут оставаться в этом состоянии длительное время после прекращения действия излучения. При передаче дополнительной энергии при нагреве эти центры могут возвращаться в исходное состояние, что сопровождается излучательной рекомбинацией. Количество испускаемых оптических квантов пропорционально поглощенной дозе ионизирующего излучения.

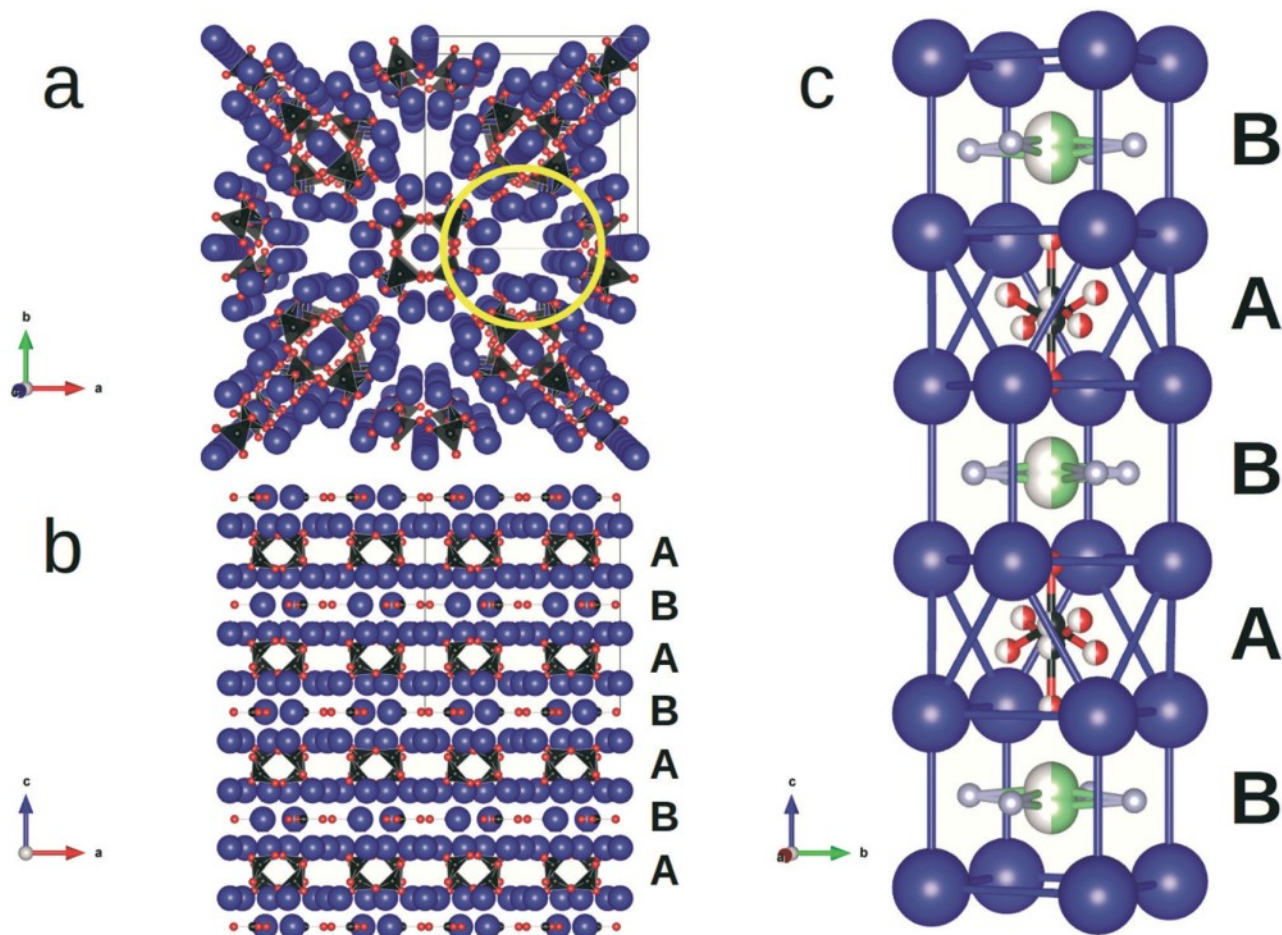


Рисунок 1 — (а) каркас $[\text{Ba}_{12}(\text{VO}_3)_6]^{6+}$ в проекции вдоль оси c (выделен один из структурных каналов); (b) Каркас $[\text{Ba}_{12}(\text{VO}_3)_6]^{6+}$, спроецированный вдоль оси b (последовательность «слоев» с параллельным (В-тип) и косым (А-тип) расположением $(\text{VO}_3)^{3-}$ треугольников); c – фрагмент структурного канала, заселенного неупорядоченными анионными группами $[\text{VO}_3]^{3-}$ и $[\text{LiF}_4]^{3-}$. Атомы Ва, О, F и В показаны синим, красным, белым и черным цвет соответственно. Li показан светло-зеленым цветом.

Кристаллы бората обладают значительным потенциалом для производства эффективных термолюминесцентных тканезквивалентных дозиметров, среди которых наиболее изучены легированные кристаллы тетрабората лития $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ [1-3] и кадмия CdB_4O_7 [4]. Наиболее распространенными добавками для этих кристаллов являются Cu, In, Mn, Ag и редкоземельные элементы. В целом термолюминесцентные свойства легированных боратов сильно зависят от природы как легирующей примеси, так и основной матрицы.

Основным объектом исследования являются Cu-содержащие кристаллы $\text{Ba}_{12}(\text{VO}_3)_6[\text{VO}_3\text{iF}_4]$, относящиеся к группе антицеолитных боратов.[5-6] Отличительной чертой строения антицеолитовых боратов является положительно заряженный каркас $[\text{Ba}_{12}(\text{VO}_3)_6]^{6+}$ с каналами вдоль оси c , заполненными различными анионными группами (Рисунок 1), такими как $[\text{VO}_3]^{3-}$, $[\text{LiF}_4]^{3-}$, $[\text{Cu}^+\text{F}_4]^{3-}$ и $[\text{Cu}^{2+}\text{F}(\text{OH})_6]^{4-}$. Диаметр каналов составляет около 5.7–5.9 Å. Экспериментальные исследования свидетельствуют о наличии как моно- (Cu^+), так и двухвалентных (Cu^{2+}) ионов меди в кристаллах $\text{Ba}_{12}(\text{VO}_3)_6[\text{VO}_3][\text{LiF}_4]:\text{Cu}$ и показывают, что они удовлетворяют требованиям, предъявляемым к материалам для термолюминесцентной дозиметрии.[7] Чтобы внести свой вклад в разработку оптимального датчика для приложений термолюминесценции, в этом исследовании мы устанавливаем влияние совместного

легирования на люминесцентные и термолюминесцентные свойства Cu-содержащих кристаллов $Ba_{12}(BO_3)_6[BO_3][LiF_4]$.

Дозиметры TL обычно используются при комнатной температуре, где они накапливают излучение. Однако лабораторные исследования для понимания природы процессов, происходящих в ФЛ, проводятся при криогенных температурах для уменьшения теплового уширения спектральных линий. В данной работе проводится моделирование при низких температурах для описания экспериментальных спектров PL, полученных при температуре жидкого азота.

Кристалл бората может быть активирован как центрами ионов одновалентной, так и двухвалентной меди. При накоплении внешнего излучения и нагревании происходит гипотетический процесс переноса заряда между центрами. Предполагается, что этот перенос заряда облегчает фотолюминесценцию центров одного типа и препятствует фотолюминесценции центров другого типа. Этот гипотетический механизм обещает недорогую и высокоэффективную дозиметрию, основанную на наблюдаемых превращениях центров ионов меди. Экспериментальное и теоретическое доказательство этой гипотезы является амбициозной задачей. В качестве первого шага можно сосредоточиться на выявлении механизмов фотолюминесценции центров меди, внедренных в боратную матрицу-хозяин. Ожидается, что свойства и механизмы излучения PL отдельных центров одновалентной и двухвалентной меди послужат основой для дальнейшего изучения радиационно-индуцированных превращений матриц, содопированных центрами Cu^+ и Cu^{2+} , в качестве важной предпосылки для разработки эффективных материалов для детекторов излучения.

Теоретический и расчетный анализ фотолюминесценции в легированных диэлектриках имеет объективные проблемы и стандартные подходы.[8] Наиболее важными аспектами являются (I) правило Каши, (ii) ширина линии, (iii) множественность спинов и (iv) квантовый выход. (i) Правило Каши: существует эффективная гипотеза о том, что любой материал должен излучать из самого нижнего доступного возбужденного электронного состояния.[9] Это правило основано на предположении, что каскадная термализация любого возбужденного состояния релаксирует к низшему возбуждению, высвобождая тепло в колебания решетки, в масштабе времени, значительно меньшем, чем время жизни фотолюминесценции от низшего возбуждения. Эта парадигма часто нарушается в материалах с большими подщелями, особенно в кристаллах, легированных центрами окраски. В таких системах, нарушающих правило Каши, присутствуют смещенные в синий цвет сигналы PL, основанные на излучении высших возбужденных состояний. Чтобы оценить возможный вклад некашинского излучения, необходимо явно смоделировать динамику неравновесного возбужденного состояния каскадной термализации, например, с помощью уравнения Редфилда для матрицы плотности. [10] (ii) Ширина линии: Энергия оптических переходов из основной матрицы и легирующих центров зависит от локальных межатомных конфигураций, которые испытывают случайные флуктуации при ненулевых температурах. Изменение энергии перехода наиболее заметно для d-d-расщепления в переходных металлах, очень чувствительных к изменениям лигандного поля окружающей среды. Усреднение по ансамблю ядерных конфигураций методом MDPL (molecular dynamics photoluminescence) [11] является разумным способом исследовать уширение спектральных линий и объяснить зависимость этого уширения от температуры. Метод MDPL позволил получить представление об интерпретации экспериментов с рядом светоизлучающих материалов, от молекулярных систем до больших наноструктур и металлоорганических каркасов. (iii) Множественность спинов: модификация степени окисления переходного металла изменяет конфигурацию его спинов, что требует спин-поляризованной и/или неколлинеарной спиновой обработки. Вклад в фотолюминесценцию в такой системе вносят оптические переходы с сохранением спина (α - α , β - β) и переходы с переворотом спина (α - β , β - α). [12] Для начального анализа можно получить основные тенденции в приближении сохранения спина. [13] (iv) Квантовый выход: Темные состояния с высокой скоростью безызлучательной рекомбинации обеспечивают исчезающие вклады в результирующий сигнал ФЛ. В случае, если низшее возбуждение имеет такой «темновой» характер, спектр оценивается по возбуждениям более высокой энергии. [14] В целом адекватное описание каждого аспекта имеет решающее значение для качественного и количественного согласования рассчитанных и измеренных PL, что служит критерием для понимания основных процессов.

1. M. Prokic, Radiat. Meas., 2001, 33, 393–396.
2. M. Ignatovych, V. Holovey, T. Vidoczy, P. Baranyai and A. Kelemen, Radiat. Phys. Chem., 2007, 76, 1527.
3. M. Ignatovych, M. Fasoli and A. Kelemen, Radiat. Phys. Chem., 2012, 81, 1528–1532.
4. O. Annalakshmi, M. T. Jose, J. Sridevi, B. Venkatraman, G.

5. T. B. Bekker, S. V. Rashchenko, V. P. Solntsev, A. P. Yelisseyev, A. A. Kragzhda, V. V. Bakakin, Y. V. Seryotkin, A. E. Kokh, K. A. Kokh and A. B. Kuznetsov, *Inorg. Chem.*, 2017, 56, 5411–5419.
6. V. Solntsev, T. Bekker, A. Davydov, A. Yelisseyev, S. Rashchenko, A. Kokh, V. Grigorieva and S.-H. Park, *J. Phys. Chem. C*, 2019, 123, 74469–74474.
7. T. Bekker, V. Solntsev, A. Yelisseyev, A. Davydov and S. Rashchenko, *Cryst. Growth Des.*, 2020, 20, 4100–4107.
8. Svelto, O. *Principles of Lasers*; Plenum Press: 1976.
9. Kasha, *Discuss. Faraday Soc.* 1950, 9, 14–19.
10. Huang, S.; Inerbaev, T. M.; Kilin, D. *J. Phys. Chem. Lett.* 2014, 5 (16), 2823–2829.
11. Vogel, D. J.; Kilin, D. *J. Phys. Chem. C* 2015, 119 (50), 27954–27964.
12. Forde, A.; Fagan, J. A.; Schaller, R. D.; Thomas, S. A.; Brown, S. L.; Kurtti, M. B.; Petersen, R. J.; Kilin, D. S.; Hobbie, E. K. *J. Phys. Chem. Lett.* 2020, 11 (17), 7133–7140.
13. Brown, S. L.; Hobbie, E. K.; Tretiak, S.; Kilin, D. S. *J. Phys. Chem. C* 2017, 121 (43), 23875–23885.
14. Forde, A.; Fagan, J. A.; Schaller, R. D.; Thomas, S. A.; Brown, S. L.; Kurtti, M. B.; Petersen, R. J.; Kilin, D. S.; Hobbie, E. K. *J. Phys. Chem. Lett.* 2020, 11 (17), 7133–7140.

5.3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы

Электронная структура с учетом кулоновского, корреляционного и обменного электрон-электронных взаимодействий и взаимодействия электронов с ионами вычисляется с помощью теории функционала плотности (DFT) путем самосогласованного решения уравнений Кона-Шэма, реализованного в пакете Vienna Ab initio Simulation Program (VASP). [1,2] В этой работе использовались обменно-корреляционный функционал Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [3] и гибридный функционал Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06). [4] Параметр смешения, определяющий величину точного обмена Хартри-Фока, был выбран равным 0.25. Этот выбор хорошо описывает ширину запрещенной зоны кристаллов фторидбората.[5] Кулоновская корреляция d-электронов на месте учитывалась с использованием поправок Хаббарда в параметризации Дударева со значением $U-J=6$ эВ для меди. Расчеты проводились с использованием формализма проецированных присоединенных волн (PAW), который был разработан с использованием концепции псевдопотенциалов в базисе плоских волн, предоставленной VASP.[6] Расчеты электронной структуры основного состояния, выполненные с использованием функционала HSE06, дали более точные значения ширины запрещенной зоны по сравнению с использованием PBE. Однако, поскольку при использовании функционала HSE06 и PBE наблюдаются одни и те же тенденции, мы предпочитаем PBE, учитывая его низкую вычислительную стоимость. Для адиабатических молекулярно-динамических расчетов модели с оптимизированной геометрией нагревались до 10 или 77 К с помощью термостата Нозье-Гувера с повторным масштабированием скорости. Затем генерировались микроканонические траектории длительностью 1 пс с использованием алгоритма Верле [7] с временным шагом 1 фс.

Для оценки влияния состояния ионов меди на оптические свойства были проведены первопринципные расчеты. Для численного исследования в качестве исходной структуры была взята элементарная ячейка $Ba_{12}(BO_3)_6[BO_3][LiF_4]$ симметрии $P4_2bc$ [8], содержащая четыре формульные единицы. Модельная решетка с ионами Cu^+ были созданы путем замены групп $[Li^+F_4]^{3-}$ в исходной структуре на группы $[Cu^+(OH)_4]^{3-}$ (структура $Cu(OH)_4 \cdot BO_3$). В результате кубические клетки были заполнены группами $[Cu^+(OH)_4]^{3-}$, а антикубические клетки – группами $[BO_3]^{3-}$.

Решетку с ионами Cu^{2+} создавали заменой обеих групп $[Cu^+(OH)_4]^{3-}$ и $[BO_3]^{3-}$ для сохранения зарядовой нейтральности по схеме замещения $[LiF_4]^{3-} + [BO_3]^{3-} \rightarrow [Cu(OH)_6]^{4-} + [F_2]^{2-}$. Группы $[Cu(OH)_6]^{4-}$ расположены в кубических клетках, тогда как группы $[F_2]^{2-}$ находятся в антикубических клетках (структура $Cu(OH)_6 \cdot F_2$). Наличие ионов Cu^{2+} в октаэдрическом окружении $[CuF_6]^{4-}$ было определено для твердого раствора $Ba_{12}(BO_3)_6 [BO_3]_2 :Cu$. [9] Ионы одновалентной меди демонстрируют координацию с четырьмя гидроксильными группами в почти квадратной плоской координации. Двухвалентный ион меди демонстрирует координацию с шестью гидроксильными группами почти октаэдрическим образом. В данном исследовании мы сосредоточились на зависимости оптических спектров от электронного состояния ионов меди. По этой причине мы изучаем ОН-координированные ионы Cu и не рассматриваем комплексы $[CuF_6]^{4-}$.

1. Kresse, G.; Joubert, D. *Phys. Rev. B* 1999, 59 (3), 1758–1775.
2. Kresse, G.; Furthmüller, J. *Phys. Rev. B* 1996, 54 (16), 11169–11186.
3. Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. *Phys. Rev. Lett.* 1997, 78 (7), 1396–1396

4. Krukau, A. V.; Vydrov, O. A.; Izmaylov, A. F.; Scuseria, G. E. *J. Chem. Phys.* 2006, 125 (22), 224106.
5. Bekker, T. B.; Inerbaev, T. M.; Yelisseyev, A. P.; Solntsev, V. P.; Rashchenko, S. V.; Davydov, A. V.; Shatskiy, A. F.; Litasov, K. D. *Inorg. Chem.* 2020, 59 (18), 13598–13606.
6. Blöchl, P. E. *Phys. Rev. B* 1994, 50 (24), 17953–17979.
7. Verlet, L. *Phys. Rev.* 1967, 159 (1), 98–103.
8. Bekker, T. B.; Rashchenko, S. V.; Solntsev, V. P.; Yelisseyev, A. P.; Kragzhda, A. A.; Bakakin, V. V.; Seryotkin, Y. V.; Kokh, A. E.; Kokh, K. A.; Kuznetsov, A. B. *Inorg. Chem.* 2017, 56 (9), 5411–5419.
9. Bekker, T.; Solntsev, V.; Yelisseyev, A.; Davydov, A.; Rashchenko, S. *Cryst. Growth Des.* 2020, 20 (6), 4100–4107.

5.4. Полученные результаты

На Рисунке 2 показана электронная плотность состояний, рассчитанная для боратов, содержащих медь в одно- и двухвалентном состоянии. Характерной особенностью обоих случаев является то, что энергетические уровни электронов Cu-3d расположены в пределах запрещенной зоны соединения без меди, где клетки заполнены комплексами $[\text{LiF}_4]^{3-}$ (нелегированный борат). В структуре $\text{Cu}(\text{OH})_4\text{-BO}_3$ все 10 электронов Cu-3d образуют пик вблизи вершины валентной зоны (Рисунок 2а). Это приводит к тому, что порог оптического поглощения начинается с 3.1 эВ вместо 5.2 эВ в случае нелегированного бората (Рисунок 3б). Это изменение поглощения связано с электронными переходами Cu-3d \rightarrow Ва-5d. В случае структуры $\text{Cu}(\text{OH})_6\text{-F}_2$ один незаполненный уровень Cu-3d образует пик DOS вблизи дна зоны проводимости (Рисунок 2с). Порог оптического поглощения теперь составляет около 3.7 эВ. Изменения поглощения обусловлены электронными переходами O-2p \rightarrow Cu-3d (Рисунок 2д). Оптические переходы O-2p \rightarrow Ва-5d, характерные для чистого бората, сохраняются. Этот результат указывает на то, что электронная структура кристаллов фторидборатов, содопированных комплексами, содержащими одно- и двухвалентные ионы меди, идеально подходит для использования в качестве детекторов ТЛ. Вакантные состояния ионов Cu^{2+} вблизи дна зоны проводимости служат ловушками для электронных возбуждений, а заполненные состояния Cu^+ способны захватывать дырочные состояния. В частности, термостимулированный захваченный электрон переносится в зону проводимости с последующей релаксацией. Это согласуется со значениями смещения энергии Cu^{2+} .

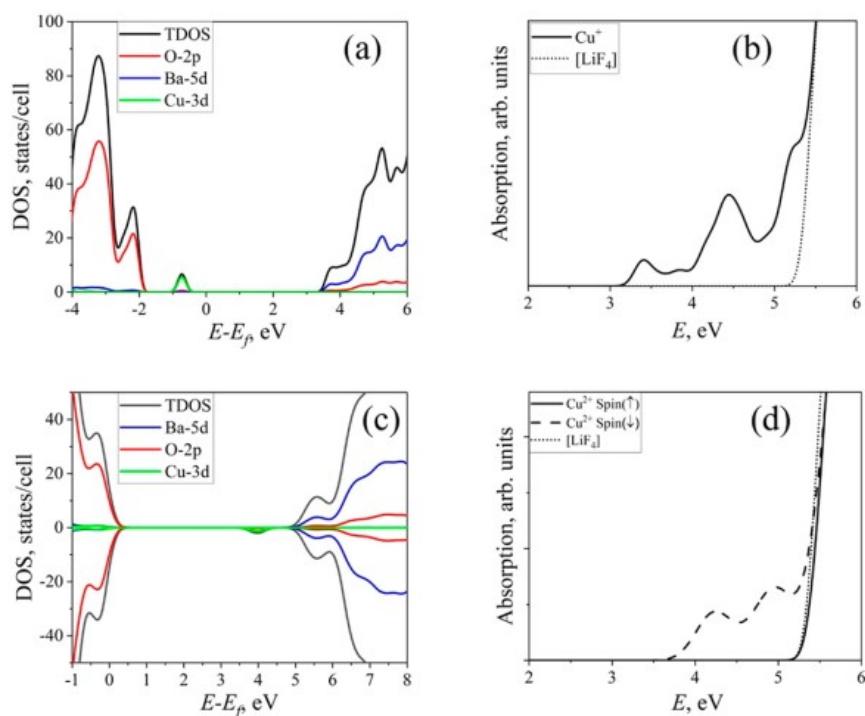


Рисунок 2. (а) Плотности электронных состояний (DOS) и (б) линейное оптическое поглощение для структур с одновалентной медью. (с) DOS и (д) линейное оптическое поглощение для структур с двухвалентной медью. Короткие пунктирные линии на рисунках б и д показывают оптическое поглощение нелегированных кристаллов бората.

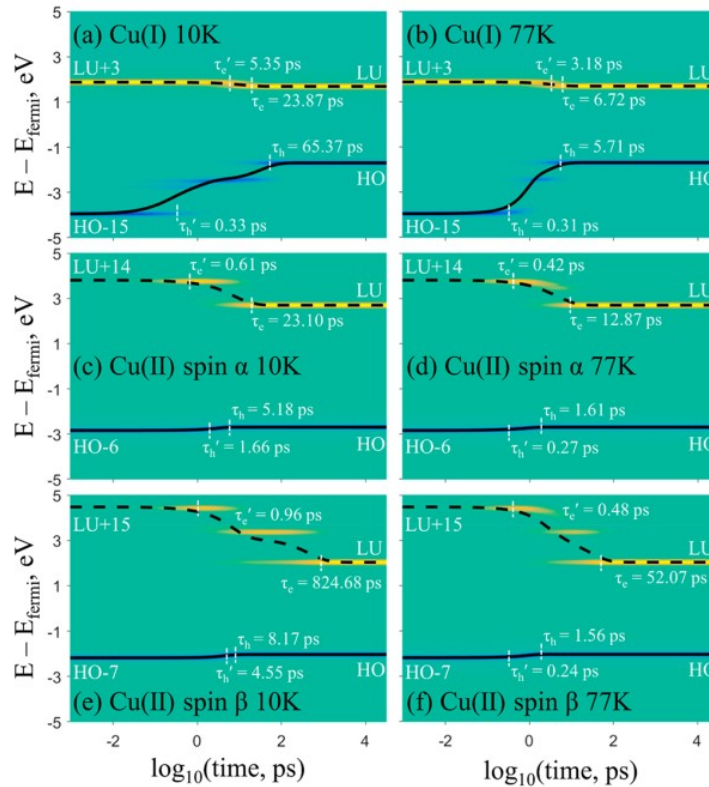


Рисунок 3 — Динамика носителей заряда для всех исследованных моделей. (a, b) Cu^+ -борат и (в-е) Cu^{2+} -борат. (a, c, e) 10 К и (b, d, f) 77 К. Зеленый, желтый и синий цвета представляют собой равновесное распределение, потерю электронной плотности и увеличение плотности соответственно. Черные пунктирные и сплошные линии представляют средние значения энергии электронов и дырок соответственно. Вертикальные белые пунктирные линии обозначают охлаждение горячего носителя. τ_e и τ_h представляют собой время релаксации горячих электронов и дырок соответственно. Начальные условия HO-х и LU+y выбираются на основе сил осцилляторов.

Для динамики носителей заряда существует начальное и мгновенное фотовозбуждение от HO-х до LU+y (HO и LU – наивысший занятый и наинизший свободный электронные уровни для системы в основном состоянии, соответственно), которое продвигает электроны из зоны проводимости в валентную зону. В качестве начальных фотовозбуждений используются высоковероятные переходы с большими силами осцилляторов. На Рисунке 3 показана динамика релаксации носителей заряда для систем, содержащих ионы Cu^+ и Cu^{2+} при различных температурах. Зеленый, желтый и синий цвета представляют равновесное распределение, потерю электронной плотности и увеличение плотности соответственно. Черные пунктирные и сплошные линии представляют средние значения энергии электронов $\langle \epsilon_e \rangle(t)$ и дырок $\langle \epsilon_h \rangle(t)$ соответственно. С увеличением времени можно обнаружить, что горячие электроны и дырки испытывают каскадные переходы вниз по энергии с высвобождением электронной энергии в колебания решетки, пока они не достигнут краев зон. В каждый момент такой траектории электронного возбужденного состояния существуют определенные активные пары орбиталей, демонстрирующие инверсную заселенность и готовые как к излучательному, так и к безизлучательному путям релаксации и рекомбинации. На рисунке 3 также представлены времена релаксации горячих электронов (τ_e) и дырок (τ_h), подгоняя $\langle \epsilon \rangle(t)$ к экспоненциальному спаду. Времена релаксации заметно различаются для разных систем при разных температурах. Обратите внимание, что на время релаксации могут влиять несколько факторов, таких как перекрытие орбит, фоновые частоты, подщели и состояния ловушек. Во всех случаях горячие дырки релаксируют быстрее, чем горячие электроны, за исключением системы, содержащей Cu^+ , при 10 К. Сравнение левой и правой панелей показывает, что при

повышении температуры от 10 до 77 К времена релаксации как электронов, так и дырок уменьшаются. Наблюдается примерно на порядок уменьшение времен релаксации от 10 до 77 К для горячих дырок системы, содержащей Cu^+ , и как для горячих дырок, так и для электронов в компоненте спина β системы, содержащей Cu^{2+} .

На Рисунке 4 показаны спектры PL, измеренные при 77 К в соответствии с экспериментальными данными, а также спектры PL, рассчитанные методом MDPL для систем, содержащих ионы Cu^+ и Cu^{2+} . Обратите внимание, что спектры MDPL Cu^+ -борат и Cu^{2+} -борат сдвинуты в красную область на 0,30 и 0,15 эВ соответственно, чтобы соответствовать экспериментальным спектрам PL. На рисунке 10а спектр MDPL бората Cu^+ при 10 К показывает два пика, что согласуется с экспериментальными данными. Пик i' в основном относится к низшему переходу $\text{LU} \rightarrow \text{HO}$, а пик ii' в основном относится к второму низшему переходу $\text{LU} \rightarrow \text{HO}-1$. Спектр MDPL Cu^{2+} -бората при 10 К показывает два пика в основном от самого нижнего перехода $\text{LU} \rightarrow \text{HO}$. Более смещенный в красную сторону пик (пик i) довольно широкий и согласуется с экспериментальными данными. В экспериментальном спектре PL с длиной волны ~ 530 нм резкого и более смещенного в синюю область (~ 330 нм) пика не наблюдается.

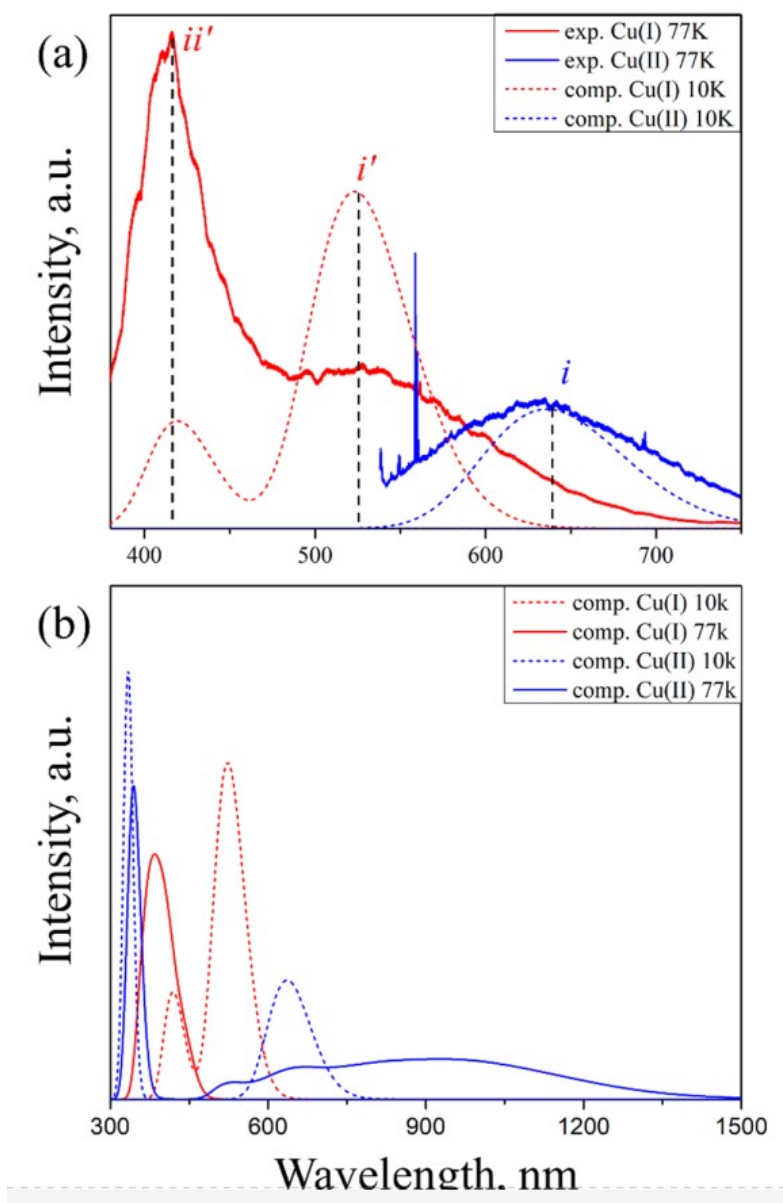


Рисунок 4. Сравнение экспериментальных спектров фотолюминесценции и расчетных MDPL для всех исследованных моделей. (a) Сплошная и пунктирная линии представляют собой экспериментальные спектры, полученные при 77 К, и спектры МДФЛ при 10 К соответственно в зависимости от длины волны в нанометровых единицах. (b) Сплошные и пунктирные линии представляют спектры MDPL при 77 и 10 К соответственно в зависимости от длины волны в нанометровых единицах. Красный и синий цвета обозначают результаты для Cu^+ и Cu^{2+} -боратов, соответственно.

6. Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Использование квантово-химического моделирования на базе оборудования ИВЦ НГУ является значимой частью всей работы, поскольку, во-первых, позволяет интерпретировать экспериментальные данные. Использование многопроцессорных суперкомпьютеров с этой точки зрения является обязательным условием, поскольку первопринципные расчеты для систем, содержащих порядка 100 атомов на персональных компьютерах провести невозможно. Использование параллельных вычислений позволяет значительно ускорить процесс моделирования.

7. Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. T. B. Bekker, A. P. Yelissev, V. P. Solntsev, A. V. Davydov, T. M. Inerbaev, S. V. Rashchenko and A. I. Kostyukov The influence of co-doping on the luminescence and thermoluminescence properties of Cu-containing fluoride borate crystals // CrystEngComm, 2021, Vol. 23, P. 6599-6609 (Импакт-фактор: 3.756). <https://doi.org/10.1039/D1CE00556A>
2. Inerbaev T.M., Han Y., Bekker T.B., and Kilin D.S. Mechanisms of Photoluminescence in Copper-Containing Fluoride Borate Crystals // The Journal of Physical Chemistry C 2022, 126, 6119–6128 (Импакт-фактор: 4.177). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c10206>