

УДК 548.3:004.94

## МОДЕЛИРОВАНИЕ САНМАРТИНИТА $ZnWO_4$ МЕТОДОМ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

© 2025 г. В. Б. Дудникова<sup>1,\*</sup>, Е. В. Жариков<sup>2</sup>, Н. Н. Еремин<sup>1,3</sup><sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр “Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН”, Москва, Россия<sup>3</sup>Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН, Москва, Россия

\*E-mail: VDudnikova@hotmail.com

Поступила в редакцию 07.10.2024 г.

После доработки 15.11.2024 г.

Принята к публикации 15.11.2024 г.

Проведено моделирование структуры и свойств санмартинита  $ZnWO_4$  методом эмпирических меж-атомных потенциалов. Разработана система согласованных межатомных потенциалов, позволяющая описать структуру, упругие и термодинамические свойства вольфрамата цинка и дающая возможность моделировать более сложные композитные среды с участием этого компонента.

DOI: 10.31857/S0023476125010012, EDN: IUCFWN

### ВВЕДЕНИЕ

Минерал санмартинит  $ZnWO_4$  был впервые обнаружен в 1948 г. в Аргентине вблизи г. Сен-Мартин и почти сразу обратил на себя внимание исследователей в качестве перспективного люминесцентного материала [1], сегодня он по-прежнему активно изучается и находит все новые применения.

$ZnWO_4$  конгруэнтно плавится при температуре  $1216 \pm 5^\circ\text{C}$  [2], не претерпевает полиморфных фазовых переходов ниже температуры плавления, поэтому крупные кристаллы  $ZnWO_4$  могут быть выращены непосредственно из расплава традиционным методом Чохральского [3–5]. Были получены крупные кристаллы  $ZnWO_4$  массой до 14 кг [6]. Последние разработки позволили создать из вольфрамата цинка высококачественные кристаллические скинтилляторы большого объема с предельно низким уровнем радиоактивного загрязнения [7, 8].

Вольфрамат цинка – многофункциональный нетоксичный материал, обладающий рядом уникальных достоинств, в частности высоким показателем преломления, термической и химической стабильностью, высоким коэффициентом поглощения рентгеновского излучения, высокой светодоудачей – выше, чем у коммерческого  $Bi_4Ge_3O_{12}$ , а также высокой плотностью, коротким временем затухания и низким послесвечением люминесценции [8–10]. Благодаря этим свойствам вольфрамат цинка широко применяется в качестве скинтилляторов [11], фотокатализаторов [12], люминофоров [13]. Кристаллы  $ZnWO_4$  являются так называемыми анизотропными скинтилляторами, в которых

имеет место анизотропия светового выхода для тяжелых частиц (протонов,  $\alpha$ -частиц) в противоположность изотропному отклику по отношению к  $\beta$ - и  $\gamma$ -излучению [14]. В связи с этим вольфрамат цинка представляет значительный интерес для исследователей при поиске двойного  $\beta$ -распада, темной материи, а также в криогенных экспериментах по поиску редких  $\alpha$ - и  $\beta$ -распадов [15].

Кристаллы вольфрамата цинка являются эффективной нелинейной средой и находят применение в создании лазеров на вынужденном комбинационном рассеянии света [16]. Люминофоры на основе  $ZnWO_4$ , легированные редкоземельными элементами, имеют немаловажное значение для создания твердотельных лазеров, излучающих на различных длинах волн [17, 18], а также светодиодов белого цвета для реализации так называемого твердотельного освещения [19, 20].

$ZnWO_4$  имеет структуру вольфрамита (моноклинная сингония, пр. гр.  $P2_1/c$ ) с двумя формульными единицами в элементарной ячейке [21, 22]. Структура  $ZnWO_4$  представлена на рис. 1. Ионы цинка и вольфрама имеют октаэдрическую координацию по кислороду (рис. 1а). Октаэдр  $ZnO_6$  состоит из двух атомов  $O_1$  и четырех атомов  $O_2$ , в то время как октаэдр  $WO_6$  включает в себя четыре атома  $O_1$  и два атома  $O_2$ . Структура состоит из чередующихся слоев бесконечных в направлении [001] зигзагообразных цепочек октаэдров  $ZnO_6$  с общими ребрами и октаэдров  $WO_6$  с общими ребрами (рис. 1б). Каждая цепочка октаэдров  $ZnO_6$  соединяется через общие кислородные вершины

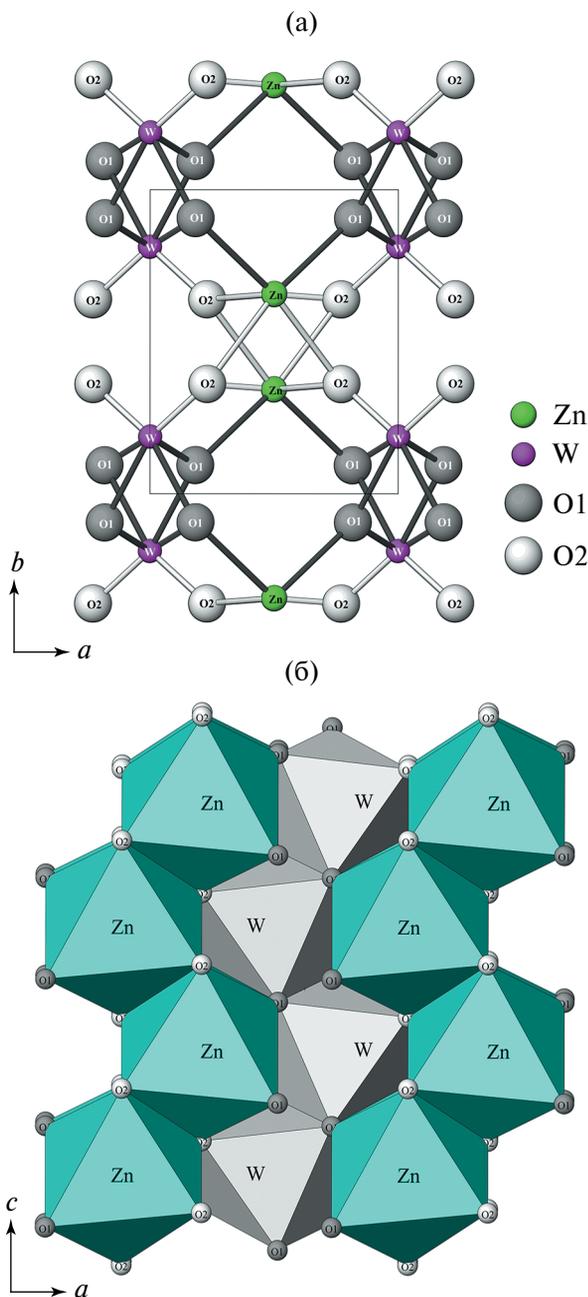


Рис. 1. Структура вольфрамата цинка  $ZnWO_4$ , проекция на плоскость: а –  $ab$ , б –  $ac$ .

с четырьмя цепочками октаэдров  $WO_6$  и наоборот, формируя открытые каналы в направлении  $[001]$  (рис. 1а).

Математическое моделирование структуры и свойств вольфрамата цинка проводили *ab initio* в нескольких работах в рамках метода функционала электронной плотности (density functional theory – DFT) [23–26] с использованием различных подходов. Так, для вычисления упругих констант и модулей в [23] при вычислении обменно-корреляционной энергии использовали два, ставшие сегодня

уже традиционными, численных приближения: локальной электронной плотности (LDA – local density approximation) [27] и обобщенного градиента (GGA – generalized gradient approximation) [28]. Было отмечено, что приближение GGA позволяет лучше описывать неоднородные системы, особенно с ковалентной связью. В [24, 25] при моделировании использовали аппроксимацию обобщенного градиента GGA с наиболее универсальным эмпирическим функционалом Пердью–Берка–Эрнцерхофа (Perdew–Burke–Ernzerhof – PBE) для описания обменно-корреляционного потенциала [29]. В [26] в отличие от предыдущих публикаций аппроксимацию метода DFT проводили с помощью линейной комбинации атомных орбиталей LCAO (linear combination of atomic orbitals).

Альтернативой расчетов *ab initio* является атомистическое моделирование методом эмпирических межатомных потенциалов, которое успешно используется для описания различных систем, в том числе молибдатов и вольфраматов, их твердых растворов, собственных и примесных дефектов, локального окружения ионов матрицы и активатора (например, [30–35]). Методом межатомных потенциалов санмартинит  $ZnWO_4$  не исследовали.

Настоящее исследование посвящено разработке в рамках атомистического моделирования системы потенциалов, которые позволили бы описать свойства  $ZnWO_4$  и сделать возможным моделирование с участием этого компонента более сложных систем, находящихся сегодня все большее применение [17–20, 36–39].

## МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделирование проведено методом межатомных потенциалов с использованием программы GULP 4.0.1 (General Utility Lattice Program) [40], в основе которой лежит процедура минимизации энергии межатомных взаимодействий.

Атомистический подход основан на использовании эмпирически определенных потенциалов, описывающих взаимодействие между ионами в кристалле. Парный потенциал  $U_{ij}$  взаимодействия ионов  $i$  и  $j$  с зарядами  $q_i$  и  $q_j$  определялся следующим образом:

$$U_{ij}(R_{ij}) = q_i q_j e^2 / R_{ij} + A_{ij} \exp(-R_{ij} / \rho_{ij}) - C_{ij} / R_{ij}^6, \quad (1)$$

где  $R_{ij}$  – межатомное расстояние,  $A_{ij}$ ,  $\rho_{ij}$ ,  $C_{ij}$  – эмпирические параметры короткодействующих потенциалов, область действия которых в настоящей работе составляла 15 Å для контакта кислород–кислород и 12 Å для остальных контактов. Ковалентный характер связи учитывали, вводя эффективный заряд ионов.

За стартовую модель была принята структура  $ZnWO_4$  с параметрами ячейки и координатами атомов, соответствующими [22]. Для цинка

использовали заряд 1.26e, как в ZnO [41]. Заряды вольфрама и кислорода варьировались. Параметры потенциалов для ZnWO<sub>4</sub> определяли с помощью итерационной процедуры “fitting relax” [40] при изотропном изменении параметров элементарной ячейки.

**РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ**

Наилучшее соответствие экспериментальным значениям параметров элементарной ячейки и координат атомов ZnWO<sub>4</sub> было получено с зарядами атомов и параметрами потенциалов межатомных взаимодействий, перечисленными в табл. 1. В результате их использования определен ряд свойств вольфрамата цинка. Результаты представлены в табл. 2–5 в сравнении с имеющимися литературными данными.

В табл. 2 показаны параметры и объем элементарной ячейки, а также координаты атомов. Структура ZnWO<sub>4</sub> изучена во многих работах с разной степенью надежности и точности результатов. В табл. 2 приведены наиболее прецизионные, подробные и надежные экспериментальные данные трех работ [22, 42, 43]. Как видно из таблицы,

результаты этих работ достаточно хорошо согласуются, так же как и результаты моделирования, проведенного в настоящей работе. Параметры и объем элементарной ячейки воспроизводят экспериментальные данные с точностью до десятых долей процента. Атомы локализованы в большинстве случаев довольно точно (отклонения координат атомов от экспериментальных значений не превышают 5%), наименее точно определено положение атомов кислорода по оси x. Это, по-видимому, вносит основной вклад в погрешность определения межатомных расстояний.

В табл. 3 представлены для сравнения результаты расчета межатомных расстояний с экспериментальными данными. Для октаэдров ZnO<sub>6</sub> и WO<sub>6</sub> показаны пары расстояний Zn–O и W–O. Кроме того, оценены средние расстояния в октаэдре ( $R_{cp}$ ), определяющие размер полиэдра, и дисперсия расстояний ( $\Delta R$ ) – разница между наибольшим и наименьшим расстоянием, характеризующая степень искажения полиэдра. Наибольшие отклонения от экспериментальных значений демонстрируют межатомные расстояния Zn–O1 и W–O2, в то время как остальные неплохо согласуются с экспериментом, особенно если обратить внимание на разброс

**Таблица 1.** Параметры потенциалов межатомного взаимодействия, полученные в работе

Взаимодействие	Параметры потенциалов			Атом	Заряд, e
	A, эВ	$\rho$ , Å	c, эВ·Å <sup>6</sup>		
Zn–O	98686.612014	0.171609	0.0	Zn	1.26
W–O	1005.782073	0.352777	0.0	W	5.1
O–O	2433.647679	0.269041	49.853817	O	–1.59

**Таблица 2.** Параметры элементарной ячейки и координаты атомов в сравнении с экспериментальными данными

Параметры, координаты	Настоящая работа	[42]	[43]	[22]
a, Å	4.6806	4.69263(5)	4.6986(8)	4.6902(1)
b, Å	5.7052	5.72129(7)	5.7293(8)	5.7169(1)
c, Å	4.9167	4.92805(5)	4.9367(11)	4.9268(1)
$\beta$ , град	90.626	90.6321(9)	90.615(25)	90.626(1)
V, Å <sup>3</sup>	131.29	132.300(2)	132.89(4)	132.14(1)
Zn y/b	0.6563	0.6833(4)	0.6840(2)	0.6838(4)
W y/b	0.1876	0.1823(5)	0.18258(6)	0.1820(4)
O1 x/a	0.1825	0.2171(3)	0.2169(10)	0.2171(3)
O1 y/b	0.9056	0.8955(3)	0.1051(9)	0.8953(2)
O1 z/c	0.4499	0.4360(3)	–0.0637(9)	0.4373(3)
O2 x/a	0.2299	0.2547(3)	0.2565(10)	0.2557(3)
O2 y/b	0.3604	0.3772(3)	0.3777(10)	0.3751(3)
O2 z/c	0.3902	0.4005(3)	0.3996(10)	0.3999(3)

Таблица 3. Межатомные расстояния в октаэдрах  $ZnO_6$  и  $WO_6$ 

Расстояния	Настоящая работа	[42]	[43]	[22]	[44]	[45]	[46]
Zn–O1, Å	2.286	2.026(2)	2.025(5)	2.025(2)	2.0606		
Zn–O2, Å	2.165	2.090(2)	2.094(5)	2.088(1)	2.1387		
	2.223	2.227(3)	2.226(5)	2.234(2)	2.1326		
$R_{cp}$	2.225	2.114	2.115	2.115	2.209		
$\Delta R$	0.122	0.201	0.201	0.209	0.078		
W–O1, Å	1.794	1.915(2)	1.915(5)	1.908(1)	1.8554	1.84(1)	1.8938
	2.065	2.133(3)	2.140(5)	2.134(2)	2.1838	2.13(1)	2.0310
W–O2, Å	1.609	1.790(2)	1.797(5)	1.784(2)	1.8156	1.84(1)	1.8370
$R_{cp}$	1.823	1.946	1.951	1.942	1.952	1.936	1.920
$\Delta R$	0.456	0.343	0.343	0.350	0.368	0.29	0.194

Таблица 4. Упругие константы  $ZnWO_4$ 

$C_{ij}$	Настоящая работа	Эксперимент		Расчет		
		[47]	[23] DFT–LDA	[23] DFT–GGA	[24] DFT–GGA + PBE	
$C_{11}$	198.65	240.23	252.25	196.88	199.1	
$C_{22}$	164.54	214.93	233.91	150.88	164.7	
$C_{33}$	317.72	287.96	314.59	258.50	247.8	
$C_{44}$	70.58	69.65	77.51	63.65	53.97	
$C_{55}$	118.79	70.01	94.96	65.27	61.3	
$C_{66}$	84.67	24.93	39.49	12.73	15.2	
$C_{12}$	108.34	108.94	125.17	75.91	89.98	
$C_{13}$	142.46	102.21	123.68	94.09	104.96	
$C_{15}$	28.80		16.04	16.04	13.10	
$C_{23}$	66.82	112.99	122.46	93.80	93.7	
$C_{25}$	6.74		13.12	19.65	3.89	
$C_{35}$	76.87		15.03	6.49	11.3	
$C_{46}$	–24.27		–7.93	1.11	8.55	

экспериментальных значений, приведенных в разных работах. По результатам моделирования, как и по экспериментальным данным, октаэдр  $ZnO_6$  крупнее, чем  $WO_6$  (больше  $R_{cp}$ ). Вместе с тем октаэдр  $WO_6$  более искажен (больше  $\Delta R$ ). Таким образом, результаты моделирования  $ZnWO_4$  неплохо описывают структурные характеристики этого соединения.

В табл. 4, 5 представлены результаты оценки упругих свойств  $ZnWO_4$  в сравнении с литературными данными. В табл. 4 даны упругие константы ( $C_{ij}$ ). Упругие свойства вольфрамата цинка исследованы довольно слабо. Существует лишь одна экспериментальная работа 1988 г. [47], в которой упругие константы  $ZnWO_4$  определяли с помощью измерения скорости распространения ультразвука.

В [47] оценку  $C_{ij}$  проводили в приближении ромбической сингонии, поэтому был получен неполный набор упругих констант (табл. 4). Полная матрица до сих пор экспериментально не определена.

Что касается моделирования упругих констант вольфрамата цинка, то их оценивали в [23–26] с помощью разных вариантов моделирования из первых принципов. Видно, что налицо большой разброс результатов, особенно велико отклонение в случае моделирования методом DFT–LCAO [26].

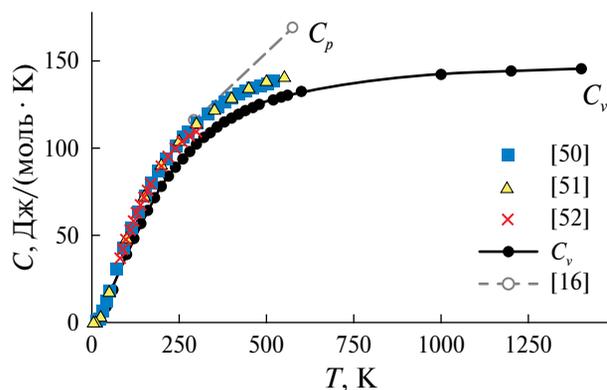
В табл. 5 представлены упругие модули: объемный модуль упругости  $K$ , модуль сдвига  $G$  и модуль Юнга  $E_i$ . Объемный модуль упругости и модуль сдвига даны в приближении Хилла. Модуль Юнга свидетельствует об анизотропии упругих свойств. Наибольшей упругостью  $ZnWO_4$  характеризуется

**Таблица 5.** Упругие модули  $ZnWO_4$ 

Модули		Настоящая работа	Эксперимент		Расчет		Метод расчета	
$K$ , ГПа	136.66	153	[47]	$179.03 \pm 1.94$ [50]		[23]	DFT–LDA	
				$125.75 \pm 5.25$			DFT–GGA	
		161(3)	[22]	102.37		[24]	DFT–GGA + PBE	
				140		[25]	DFT–GGA + PBE	
		145(6)	[48]	257		[26]	DFT–LCAO	
$G$ , ГПа	69.03	$G_z = 69.86$		–		–		
$E_i$ , ГПа	$x$	93.95	176	[47]	171.23		DFT–LDA	
					146.80		DFT–GGA	
	$y$	104.52	147		156.98		[23]	DFT–LDA
					103.15		DFT–GGA	
	$z$	187.59	217		231.93		DFT–LDA	
					$183 \pm 21$	[49]	185.41	

в направлении [001], совпадающем с направлением открытых каналов в этой структуре. В табл. 5 приведены также литературные данные об упругих модулях. Экспериментальные результаты по объемному модулю упругости получены в [22, 47, 48] с помощью различных методов. В [47], как уже упоминалось, модуль упругости вольфрамата цинка был определен на основе измерения скорости распространения ультразвука в кристаллах. В [22] объемный модуль был оценен исходя из нейтронно-дифракционного эксперимента по определению температурной зависимости параметров решетки  $ZnWO_4$ , в то время как в [48] оценки проводили исходя из рентгенодифракционного эксперимента по определению параметров решетки  $ZnWO_4$  при приложении давления. В [49] резонансным методом, основанным на лазерной доплеровской виброметрии, были получены данные о модуле Юнга применительно к нитевидным нанокристаллам  $ZnWO_4$ . Кристаллы были выращены в направлении [001] и имели длину несколько сотен микрометров и толщину в диапазоне 67–120 нм. Приведенное в таблице значение относится к максимальному диаметру нанокристаллов и, по-видимому, должно соответствовать значениям для объемных монокристаллов, что позволяет рассматривать этот результат наряду с другими. Литературные расчетные значения упругих модулей даны в табл. 5 с указанием метода расчета.

Обращает на себя внимание значительное расхождение литературных данных, касающихся упругих свойств  $ZnWO_4$ . Так, оценки упругих констант могут различаться более чем на 100%. Значения объемного модуля упругости варьируются в диапазоне от 102 до 257 ГПа. Различия модуля Юнга в ряде случаев превышают 50%. Результаты


**Рис. 2.** Температурная зависимость теплоемкости  $ZnWO_4$ :  $C_v$  – настоящая работа,  $C_p$  – [50–52], [16] (штриховая линия).

моделирования методом межатомных потенциалов в большинстве случаев попадают в интервал, определяемый литературными данными, или сопоставимы с ними.

На рис. 2 представлены результаты, полученные при моделировании температурной зависимости теплоемкости при постоянном объеме  $C_v$  в сравнении с экспериментальными данными измерения теплоемкости при постоянном давлении  $C_p$ . Данные работ об изменении  $C_p$  в диапазоне 5–520 [50], 5–550 [51] и 81–301 К [52] хорошо согласуются между собой, из-за близости значений практически сливаются и на рис. 2 трудно различимы. Из рисунка видно хорошее соответствие результатов моделирования экспериментальным оценкам, тем более что обычно  $C_p$  немного больше, чем  $C_v$ . Вместе с тем результаты, полученные в [16] в диапазоне 293–573 К (показаны штриховой линией), свидетельствующие о значительном,

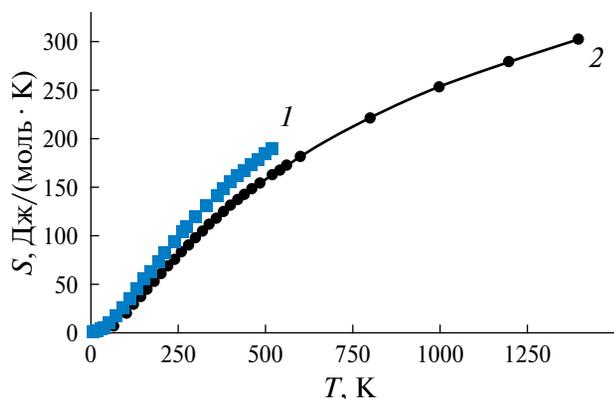


Рис. 3. Температурная зависимость энтропии  $\text{ZnWO}_4$ : 1 – [50], 2 – настоящая работа.

близком к линейному, возрастании теплоемкости в этом диапазоне, результатами моделирования не подтверждаются. На рис. 3 представлена температурная зависимость энтропии в сравнении с экспериментальными результатами [50]. Эти данные тоже согласуются.

Таким образом, проведенное моделирование кристаллов позволило неплохо описать температурные зависимости теплоемкости и энтропии по сравнению с имеющимися экспериментальными данными и оценить их значения в области более высоких температур.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом эмпирических межатомных потенциалов проведено моделирование кристаллов  $\text{ZnWO}_4$ . Оценены параметры элементарной ячейки, координаты атомов, межатомные расстояния, упругие константы и модули, температурные зависимости теплоемкости и энтропии. В большинстве случаев полученные результаты соответствуют имеющимся литературным данным и дополняют их. Разработанная система межатомных потенциалов может быть использована для моделирования более сложных композитных сред, твердых растворов с участием  $\text{ZnWO}_4$ , а также поиска составов с оптимальными свойствами.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы МГУ им. М.В. Ломоносова АААА-А16-116033010121-7. Часть работы выполнена в рамках темы № 124022400142-2 государственного задания ИГЕМ РАН.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kroeger E.A. // Some Aspects of the Luminescence of Solids. New York: Elsevier, 1948. P. 107.
2. Degoda V.Ya., Afanasieva L.A., Belli P. et al. // J. Lumin. 2022. V. 249. 119028. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2022.119028>
3. Nagornaya L.L., Dubovik A.M., Vostretsov Y.Y. // IEEE Trans. Nucl. Sci. 2008. V. 55. P. 1469. <https://doi.org/10.1109/TNS.2007.910974>
4. Galashov E.N., Gusev V.A., Shlegel V.N., Vasiliev Ya.V. // Crystallography Reports. 2009. V. 54. P. 689. <https://doi.org/10.1134/S1063774509040245>
5. Leng X., Dai L., Chao X. et al. // Optik. 2014. V. 125. P. 1267. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jle.2013.08.033>
6. Atuchin V.V., Bekenev V.L., Borovlev Yu.A. et al. // J. Optoelectron. Adv. Mater. 2017. V. 19. P. 86.
7. Barabash A.S., Belli P., Bernabei R. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2016. V. 833. P. 77. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nima.2016.07.025>
8. Belli P., Bernabei R., Borovlev Y.A. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2022. V. 1029. 166400. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2022.166400>
9. Grassmann H., Moser H.G. // J. Lumin. 1985. V. 33. P. 109. [https://doi.org/10.1016/0022-2313\(85\)90034-1](https://doi.org/10.1016/0022-2313(85)90034-1)
10. Dkhilalli F., Borchani S.M., Rasheed M. // J. Mater. Sci.: Mater. Electron. 2018. V. 29. P. 6297. <https://doi.org/10.1007/s10854-018-8609-z>
11. Jeong H.Y., Lim H.S., Lee J.H. // Nanomaterials. 2020. V. 10. P. 1721. <http://dx.doi.org/10.3390/nano10091721>
12. De Macedo O.B., de Oliveira A.L.M., dos Santos I.M.G. // Ceramica. 2022. V. 68. P. 294. <https://orcid.org/0000-0002-7930-6234>
13. Lou Z., Hao J., Cocivera M. // J. Lumin. 2002. V. 99. P. 349. [https://doi.org/10.1016/S0022-2313\(02\)00372-1](https://doi.org/10.1016/S0022-2313(02)00372-1)
14. Bernabei R., Belli P., Cappella F. et al. // EPJ Web Conf. 2017. V. 136. 05002. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201713605002>
15. Caracciolo V., Degoda V.Ya., Belli P. et al. // SciPost Phys. Proc. 2023. V. 12. P. 021. <https://doi.org/10.21468/SciPostPhysProc.12.021>
16. Wang X., Fan Z., Yu H. et al. // Opt. Mater. Express. 2017. V. 7. P. 1732. <https://doi.org/10.1364/OME.7.001732>
17. Xia Z., Yang F., Qiao L., Yan F. // Opt. Commun. 2017. V. 387. P. 357. <http://dx.doi.org/10.1016/j.optcom.2016.12.008>
18. Subbotin K., Loiko P., Volokitina A. et al. // J. Lumin. 2020. V. 228. 117601. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2020.117601>
19. Chen X.P., Xiao F., Ye S. et al. // J. Alloys Compd. 2011. V. 509. P. 1355. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2010.10.061>
20. Ran W., Wang Q., Zhou Y. et al. // Mater. Res. Bull. 2015. V. 64. P. 146. <http://dx.doi.org/10.1016/j.materresbull.2014.12.050>
21. Филипенко О.С., Победимская Е.А., Белов Н.В. // Кристаллография. 1968. Т. 13. С. 163.
22. Trots D.M., Senyshyn A., Vasylychko L. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. V. 21. 325402. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/32/325402>

23. *Brik M.G., Nagirnyi V., Kirm M.* // Mater. Chem. Phys. 2013. V. 137. P. 977.  
<http://dx.doi.org/10.1016/j.matchemphys.2012.11.011>
24. *Zhang X.Q., Zhang B.* // Rus. J. Phys. Chem. B. 2023. V. 17. P. 1049.  
<http://dx.doi.org/10.1134/S1990793123050135>
25. *Errandonea D., Manjón F.J., Garro N. et al.* // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. 054116.  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.78.054116>
26. *Evarestov R., Kalinko A., Kuzmin A. et al.* // Integr. Ferroelectr. 2009. V. 108. P. 1.  
<https://doi.org/10.1080/10584580903323990>
27. *Kohn W., Sham L.J.* // Phys. Rev. 1965. V. 140. P. A1133.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
28. *Perdew J.P., Chevary J.A., Vosko S.H. et al.* // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 6671.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.6671>
29. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3865.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
30. *Senyushyn A., Kraus H., Mikhailik V.B., Yakovyna V.* // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. 214306.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.214306>
31. *Дудникова В.Б., Жариков Е.В.* // ФТТ. 2017. Т. 59. С. 847.  
<http://dx.doi.org/10.21883/FTT.2017.05.44370.359>
32. *Lin Q., Feng X* // J. Phys.: Condens. Matter. 2003. V. 15. P. 1963.  
<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/15/12/313>
33. *Dudnikova V.B., Zharikov E.V., Eremin N.N.* // Mater. Today Commun. 2020. V. 23. 101180.  
<http://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101180>
34. *Shao Z., Zhang Q., Liu T., Chen J.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2008. V. 266. P. 797.  
<http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2008.01.018>
35. *Дудникова В.Б., Антонов Д.И., Жариков Е.В., Еремин Н.Н.* // ФТТ. 2022. Т. 64. С. 1741.  
<http://dx.doi.org/10.21883/FTT.2022.11.53328.413>
36. *Huang H., Liu L., Tian N., Zhang Y.* // J. Alloys Compd. 2015. V. 637. P. 471.  
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.02.224>
37. *Tang L., Zhu M., Chen W. et al.* // New J. Chem. 2020. V. 44. P. 19796.  
<http://dx.doi.org/10.1039/d0nj04622a>
38. *Malyukin Y., Seminko V., Maksimchuk P., Bespalova I.* // Opt. Mater. 2019. V. 98. 109455.  
<https://doi.org/10.1016/j.optmat.2019.109455>
39. *Krutyak N., Nagirnyi V., Zadneprovski B., Buriy M.* // J. Lumin. 2024. V. 267. 120356.  
<https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2023.120356>
40. *Gale J.D.* // Z. Kristallogr. 2005. V. 220. P. 552.  
<https://doi.org/10.1524/zkri.220.5.552.65070>
41. *Урусов В.С., Еремин Н.Н.* Атомистическое компьютерное моделирование структуры и свойств неорганических кристаллов и минералов, их дефектов и твердых растворов. М: ГЕОС, 2012. 428 с.
42. *Scofield P.F., Knight K.S., Redfern S.A.T., Cressey G.* // Acta Cryst. B. 1997. V. 53. P. 102.  
<https://doi.org/10.1107/S0108767396008446>
43. *Dahlborg M.A., Svensson G.* // Acta Chem. Scandinavica. 1999. V. 53. P. 1103.  
<https://doi.org/10.3891/acta.chem.scand.53-1103>
44. *Redfern S.A.T., Bell A.M.T., Henderson C.M.B. et al.* // Eur. J. Mineral. 1995. V. 7. P. 1019.  
<https://doi.org/10.1127/ejm/7/4/1019>
45. *Kuzmin A., Purans J.* // Radiat. Measur. 2001. V. 33. P. 583.  
[https://doi.org/10.1016/S1350-4487\(01\)00063-4](https://doi.org/10.1016/S1350-4487(01)00063-4)
46. *Yadav P., Rout S.K., Sinha E.* // J. Alloys Compd. 2017. V. 726. P. 1014.  
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.07.308>
47. *Pisarevskii Yu.V., Silvestrova I.M., Voszka R. et al.* // Phys. Status Solidi. A. 1988. V. 107. P. 161.  
<https://doi.org/10.1002/pssa.2211070115>
48. *Ruiz-Fuertes J., Lopez-Moreno S., Errandonea D. et al.* // J. Appl. Phys. 2010. V. 107. 083506.  
<http://dx.doi.org/10.1063/1.3380848>
49. *Ma L., Yibibulla T., Jiang Y. et al.* // Physica E. 2022. V. 136. 114990.  
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2021.114990>
50. *Lyon W.G., Westrum Jr. E.F.* // J. Chem. Thermodyn. 1974. V. 6. P. 763.  
[https://doi.org/10.1016/0021-9614\(74\)90141-4](https://doi.org/10.1016/0021-9614(74)90141-4)
51. *Landee C.P., Westrum Jr. E.F.* // J. Chem. Thermodyn. 1975. V. 7. P. 973.  
[https://doi.org/10.1016/0021-9614\(75\)90161-5](https://doi.org/10.1016/0021-9614(75)90161-5)
52. *Попов П.А., Скробов С.А., Матовников А.В. и др.* // ФТТ. 2016. Т. 58. С. 827.

## SIMULATION OF $ZnWO_4$ SANMARTINITE BY THE METHOD OF INTERATOMIC POTENTIALS

V. B. Dudnikova<sup>a,\*</sup>, E.V. Zharikov<sup>b</sup>, N.N. Eremin<sup>a,c</sup>

<sup>a</sup>*Lomonosov Moscow State University, GSP-1, Leninskie Gory, Moscow, Russia*

<sup>b</sup>*Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, GSP-1, Moscow, 38 Vavilov Str., Russia*

<sup>c</sup>*Institute of Geology of Ore Deposits, Petrography, Mineralogy and Geochemistry (IGEM RAS), Moscow, Russia*

\*E-mail: VDudnikova@hotmail.com

**Abstract.** The structure and properties of  $ZnWO_4$  have been simulated using the method of empirical interatomic potentials. The system of consistent interatomic potentials has been developed, which makes it possible to describe the structure, elastic and thermodynamic properties of zinc tungstate and provide the simulation of more complex composite media involving this component.