

第一原理研究 LuPO_4 中氧空位的性质

李 金, 刘廷禹, 姚舒安, 付明雪, 鲁晓晓

(上海理工大学 理学院, 上海 200093)

摘 要: 磷酸结构的晶体在掺杂二价阳离子后容易形成产生焦磷酸结构(P_2O_7)⁴⁻, 这种含有焦磷酸结构的氧化物材料十分适合做质子导体、燃料电池、气体传感器以及陶瓷膜等。本文利用第一性原理研究了 LuPO_4 晶体中氧空位的结构性质, 结果显示当氧空位带二价正电时, 会引发氧空位周围原子奇特的畸变, 形成焦磷酸结构。为了解释这种结构畸变的机理, 本文利用过渡态搜索计算了结构变化过程中势能面的变化情况, 正一价氧空位形成焦磷酸结构需要越过 2.4 eV 的势垒, 而正二价氧空位形成焦磷酸结构则不需要越过任何势垒, 因此很容易形成焦磷酸结构。最后给出氧空位不同带电态的晶格结构、电子态密度以及电荷密度分布等基本物理性质, 氧空位处于正二价态结构下, 氧空位附近的 P 原子与 O 原子成键, 又由于 O 原子有较强的电负性, P 的 s 轨道电子向 O 的 p 轨道转移。P 的 s、p 轨道在禁带中出现了与总态密度对应的缺陷能级, 结果表明带正二价氧空位的晶体性质发生了明显变化。

关 键 词: 第一性原理; LuPO_4 ; 氧空位; 过渡态搜索

中图分类号: O77 文献标识码: A

First Principles Study on the Property of O Vacancy in LuPO_4 Crystal

LI Jin, LIU Ting-Yu, YAO Shu-An, FU Ming-Xue, LU Xiao-Xiao

(College of Science, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: Phosphoric acid crystal doped with bivalent cation is easy to form pyrophosphate structure (P_2O_7)⁴⁻. This kind of oxide material containing pyrophosphate structure is very suitable for proton conductor, fuel cell, gas sensor, and ceramic film, etc. In this research we applied first principles to study the structural behaviour of oxygen vacancy in LuPO_4 crystal. The results showed that oxygen vacancies with two positive charges distort structure largely and form pyrophosphate structure. In order to verify the feasibility of this structure transition, the nudged elastic band method is used to find the highest saddle point of potential energy. The calculated results show that transition state energies of oxygen vacancy with +1 and +2 charge forming pyrophosphate structure are about 2.4 and 0 eV, respectively. So pyrophosphate structure easily forms for oxygen vacancy with +2 charge. Finally, the lattice structure, density of states and charge density distribution are obtained. P atom and O atom around the oxygen vacancy with +2 charge can form chemical bond. The electron on the P s will shift to O p orbit for oxygen with strong electronegative, which introduces the defect level in forbidden band. It is indicated that the property of the crystal changes drastically for the existence of the oxygen vacancy with two positive charges.

Key words: first principle; LuPO_4 ; oxygen vacancy; nudged elastic band method

收稿日期: 2018-09-12; 收到修改稿日期: 2019-01-27

基金项目: 国家自然科学基金(61675132) National Natural Science Foundation of China (61675132)

作者简介: 李 金(1994-), 男, 硕士研究生. E-mail: 995084819@qq.com

通讯作者: 刘廷禹, 教授. E-mail: Liutyxj@163.com

磷酸结构的晶体在掺杂二价阳离子后会产生焦磷酸结构(P_2O_7)⁴⁻, 根据电荷补偿机制, 在替位的阳离子附近容易形成氧空位(焦磷酸结构)^[1]。这种含有焦磷酸结构的氧化物材料十分适合做质子导体、燃料电池、气体传感器以及陶瓷膜等^[1]。以 LaPO_4 晶体为例, 在掺入正二价的 Sr 离子后, Sr^{2+} 替位 La^{3+} 生成一个负电中心 Sr_{La} , 同时引入正电中心的氧空位(V_O)作为电荷补偿。 LaPO_4 中的 V_O 是以焦磷酸结构的形式存在^[2-3], 即两个邻近的 PO_4 四面体共用一个氧原子。当材料处在潮湿环境中会引入水分子并与焦磷酸结合形成 HPO_4 结构, 即 $(\text{P}_2\text{O}_7)^{4-} + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \rightarrow 2(\text{HPO}_4)^{2-}$, 水分子的羟基进入氧空位, 余下的质子与另一个 PO_4 四面体结合形成两个 $(\text{HPO}_4)^{2-}$, $(\text{HPO}_4)^{2-}$ 的存在使得质子可以在 LaPO_4 中传递。这种现象普遍存在于含有磷酸根(PO_4^{3-})的材料, 例如 NdPO_4 、 SmPO_4 、 YPO_4 等^[4-6]。

LuPO_4 材料有着稳定的化学性质等特点^[7], 在掺杂 Ce、Nd 和 Eu 等元素后展现出良好的光学性能^[8-11]。但至今为止很少有文献研究该材料的内部缺陷对其结构以及性能的影响。与 YPO_4 和 LaPO_4 有着类似的结构以及相似化学成分的 LuPO_4 晶体, 本课题组研究发现当存在氧空位时同样也会形成焦磷酸结构, 这使得 LuPO_4 也可能成为潜在的质子导体。最近, Li 等^[12]深入地研究了钙钛矿缺陷电荷对电子/空穴复合时间影响, 对缺陷电荷分配的研究有重要参考价值。

本课题组在研究不同电荷分布氧空位的结构稳定性及光谱性质时发现, 当氧空位处于正二价态时, 形成了焦磷酸结构^[13], 实验也表明磷酸结构的晶体在氧空位附近很容易形成焦磷酸结构^[1], 对其形成的机理目前仍不是很清楚, 本文针对该问题展开研究, 通过计算 LuPO_4 晶体存在氧空位时的结构模型, 使用过渡态搜索(NEB)计算结构变化的最低能量路径以及能量的鞍点, 给出了带正二价的氧空位形成焦磷酸结构的机制。并讨论了氧空位处于不同价态下的晶格结构、电子态密度以及电荷密度分布。

1 计算方法和计算模型

选取 96 个原子 LuPO_4 超原胞作为计算模型, 晶体的空间群为 $I41/\text{amd}$ ^[14-15]。如图 1 所示为四方锆石结构的 LuPO_4 晶体, P 原子被四个氧原子包围构成正四面体结构, Lu 原子被八个氧原子包围形成十二面体结构。使用 VASP 软件^[16-17]对 LuPO_4 晶体进行模拟计算, 选取平面波赝势结合广义梯度近似法

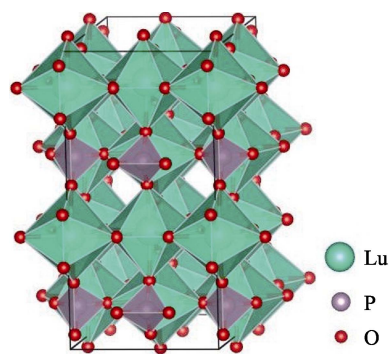


图 1 四方锆石结构的 LuPO_4 超原胞

Fig. 1 Tetragonal zircon structure of LuPO_4 supercell

GGA-PBE 处理交换相关能^[18-20], K 网格点选取为 $3 \times 3 \times 3$, 截断能选取为 450 eV, 以上参数均经过收敛测试确定。 LuPO_4 晶体中的氧原子只有一种对称格位, 氧空位的模型是在超原胞中心附近挖去一个氧原子, 并对氧空位在 0、+1、+2 价态下做结构弛豫以及静态计算。不同价态的氧空位优化后, 结构区别最大的是氧空位最近邻的一个 P 原子。过渡态搜索方法为: 完整晶体挖去一个氧原子做结构优化的结构作为 Nudged Elastic Band (NEB) 计算的初态, 而含带两个正电荷的氧空位晶体做结构优化的结果(含焦磷酸结构(P_2O_7)⁴⁻结构)作为末态, 在初态以及末态中性插入四个点作为过渡态, 并让氧空位分别带+1 价和+2 价做 NEB 计算^[21]。比较+1 价与+2 价的计算结果, 得出结构变化的机理。

2 结果与分析

2.1 P 原子的位移

通过对含有氧空位的 LuPO_4 晶格做结构弛豫, 不同价态下的结构弛豫结果如图 2 所示。P 原子被四个氧原子包围构成正四面体结构, 当除去在 P 原子附近一个氧原子形成氧空位后, P 原子的位置会随着价态的变化而发生改变, 向着与氧空位相反的方向移动。当氧空位处于正二价态时, P 原子会穿过三个氧原子(O(5)、O(6)和 O(7))构成的势垒面到达这个面的另一侧, 并重新键连 O 原子形成一个新的正四面体结构。如图 2 所示 P(2)与 O(4)键连并与左侧的一个完整的(PO_4)³⁻四面体结合形成一个新的焦磷酸结构 $[\text{P}_2\text{O}_7]^{4-}$ 。

表 1 表示 P 原子与附近原子间的键长, 可以看出在完整结构下 P 原子与近邻的 O 原子间距近似为 0.155 nm, P 原子处在正四面体的中心位置。氧空位处于电中性时, 与 V_O 最近邻的原子将向着空位方向移动。从表格中也可以看出氧空位处于电中性下

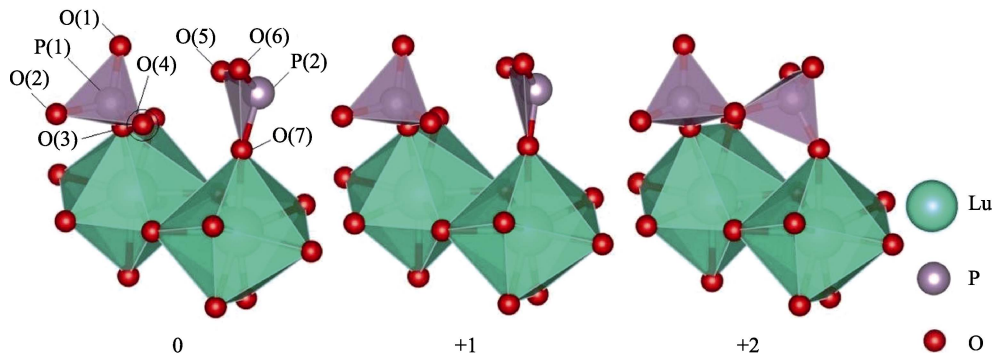
图 2 含 Vo 的 LuPO₄ 晶格在不同价态下的结构Fig. 2 Structure of an O vacancy in LuPO₄ which in different charge states

表 1 完整超原胞和含不同价态下氧空位晶体的结构参数(nm)

Table 1 Calculated structural parameters for the neutral and charged oxygen vacancy (nm)

Bond	Perfect	0(Neutral state)	+1(Charged state)	+2(Charged state)
P(1)-O(1)	0.1552	0.1557	0.1559	0.1525
P(1)-O(2)	0.1552	0.1547	0.1546	0.1518
P(1)-O(3)	0.1552	0.1557	0.1559	0.1525
P(1)-O(4)	0.1552	0.1547	0.1548	0.1625
P(1)-P(2)	0.3740	0.3948	0.3737	0.2907
P(2)-O(5)	0.1552	0.1618	0.1552	0.1520
P(2)-O(6)	0.1552	0.1606	0.1539	0.1518
P(2)-O(7)	0.1552	0.1606	0.1539	0.1518
P(2)-O(4)	0.3322	0.3497	0.3244	0.1684

P(2)与 P(1)、O(4)以及近邻的三个氧原子的距离有所增大, 意味着 P 原子向着空位方向移动。通过 P(2)与近邻的三个氧原子(O(5)、O(6)、O(7))的距离可以看出随着带电数的增加 P 是向远离 V_O 的方向移动。由于正电荷局域在氧空位附近, 又由于正五价的 P 原子与正二价的氧空位有较强的库仑排斥作用使得 P 原子附近结构发生了急剧变化形成了焦磷酸结构(P₂O₇)⁴⁻。通过观察 P(1)与 O(4)的键长发现随着 P(2)的靠近 O(4)也在向着与 P 原子成键的方向移动, 成键后的 O(4)与 P(1)、P(2)的键长分别为 0.162 和 0.168 nm, 相较于完整结构下 P-O 键均有所拉长。

2.2 过渡态搜索

过渡态搜索是一种已知反应物和生成物而寻找能量的最小路径以及鞍点的方法^[21], 使用完整晶体挖去一个氧原子做结构优化的结构作为 NEB 计算的初态, 而带两个正电荷的氧空位晶体作结构优化结果作为末态, 采用线性插值作为插入点的算法并插入四个过程的中间态。当氧空位带正二价时, 相应结构的能量从初态到末态呈单调递减趋势, 如图 3

所示。这意味结构变化的过程中没有势垒, 初态结构的能量较高, 晶格会随着弛豫过程自发地向末态结构变化。含正一价的氧空位晶体过渡态搜索结果用高斯曲线拟合, 结果如图 4 所示。横坐标表示原子移动的距离, 纵坐标表示相对于初态能量每个结构下的势能。峰值能量大约为 2.4 eV, 可以看出结构变化中需要越过的势垒较高, 对于正一价氧空位要形成焦磷酸结构从能量角度考虑比较困难。而正二价氧空位形成焦磷酸结构则不需要越过任何势垒, 很容易形成焦磷酸结构。图 4 中只显示了五个点是因为末态的能量急剧降低为-4.45 eV 无法拟合高斯函数, 这可能因为形成了焦磷酸结构, 能量急剧降低后在这个结构下达到稳定, 这也从侧面印证了在氧空位存在的情况下焦磷酸结构比较稳定。

图 5 表示 LuPO₄ 晶格在氧空位处于不同价态下的电荷密度分布, 可以看出 Lu 原子周围的电荷呈圆形分布, 说明 Lu 主要为离子性。O 原子周围电荷分布存在明显方向性, O 原子有较强的电负性, O 原子与 P 原子之间以共价键为主。图中可以看出随着氧空位带正电数的增加, P 原子与 O 原子向着成键的方向移动, 最终一个氧原子将会与两个 P 原子成

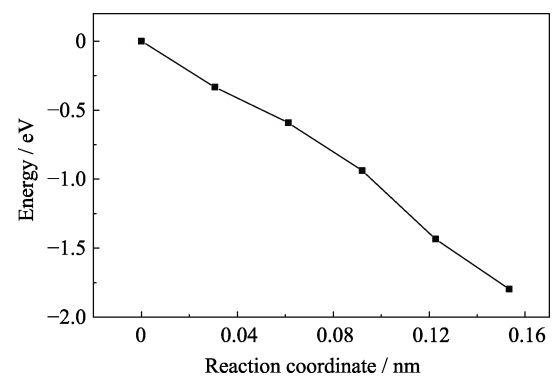


图 3 过渡态搜索计算得到的能量路径(Vo 处于正二价态)
Fig. 3 Energy path way calculated with nudged elastic band method for oxygen vacancy with two positive charges

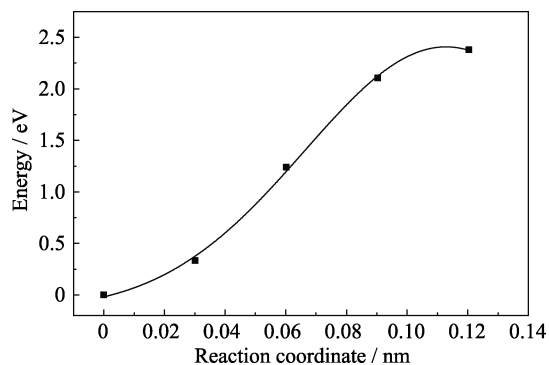


图 4 过渡态搜索计算的最低能量路径(V_o 处于正一价态), 峰值大约 2.4 eV

Fig. 4 Energy path way calculated with nudged elastic band method for oxygen vacancy with one positive charges. Peak located at ~ 2.4 eV

键并形成焦磷酸结构, 这个过程中 P 原子从有一个悬挂键到与 O4 形成共价键, 需要与 O4 共享电子, 也就是 O4 将可能失去部分电子给 P 原子, 说明 O4 可能发生了氧化反应。

2.3 电子态密度

含不同价态氧空位的 LuPO_4 晶体态密度以及完整结构的总态密度如图 6 所示, 从完整结构的态密度图可以看出 LuPO_4 的带隙 5.8 eV 相比实验带隙值 8.6 eV^[22] 偏小, 这是由于密度泛函理论对交换相关项处理不够从而低估了材料的带隙值^[8], 但并不影响对态密度的定性分析。完整晶体价带顶主要由 Lu 的 4f 轨道和 O 的 2p 轨道构成, 导带底主要由 Lu 的 5d 轨道和少量 P 的 3s、3p 轨道以及 O 的 2p 轨道构成。深能级分别是由 Lu 的 p 轨道和 O 的 s、p 轨道构成以及少量 P 的 s、p 轨道构成价带顶的尖峰大约在 -3.5 eV 是由 Lu 的 4f 轨道构成, 峰值在 -24 eV 的能量来自于 Lu 的 5p 态, -20.5 eV 来自 O 的 2s 态, -17.5 eV 主要是由 O 的 2s 态构成。靠近价带顶的

两个能量区间 -4.5~-6 eV、-7~-8.5 eV 分别来自 O 的 2p 轨道与 P 的 3p 轨道以及 O 的 2s、2p 轨道与 P 的 3s 轨道的杂化。

通过分析图 6 发现氧空位处于电中性时在禁带中出现一个由 O 的 2p 轨道构成的缺陷能级, 距离价带顶大约 1 eV。当氧空位带一价正电时在价带顶和导带底附近分别各出现一个缺陷能级, 其中距价带顶 0.7 eV 的缺陷能级同样是由 O 的 2p 态构成, 距离导带底 0.4 eV 的缺陷能级是由 Lu 的 5d 轨道构成, 推测可能是由于配位场的改变导致 Lu 的能级分裂, 因而在禁带之中产生了缺陷能级。带隙中存在缺陷能级会影响材料的光学性能, 这类靠近带边的缺陷能级可能会成为一个浅陷阱, 抓住电子或空穴, 当 LuPO_4 晶体掺入发光中心作为闪烁晶体时, 这类浅陷阱可能会延长晶体的发光时间, 产生慢发光成分从而影响材料的光学性能^[23]。当氧空位带正二价电时 Lu 的 5d 态构成的缺陷能级距离导带底大约 0.7 eV, 这是由于氧空位附近的晶格畸变更加明显, 导致附近 Lu 离子的配位场进一步改变, 使得 Lu 离子的外层电子轨道分裂更加明显, 从而引入的缺陷能级距离导带底更远。当吸收光子能量时离化的施主可能会和价带之间产生激发跃迁, 而这类靠近导带底的缺陷能级参与的吸收光能量将非常靠近带边吸收的能量。在 $\text{LuPO}_4:\text{Nd}$ 晶体中发现存在一个由缺陷引起的紫外吸收^[24], 吸收对应的能量非常靠近带边吸收, 这种吸收很可能与氧空位的存在有关^[13]。

本文进一步研究了氧空位附近变化最明显的 O(4) 原子和 P(2) 两个原子的态密度分布, O(4) 原子 p 轨道的分波态密度如图 7 所示。正二价态下的态密度变化最明显, 这是由于形成了 $[\text{P}_2\text{O}_7]^{4-}$ 的结构使得 O(4) 的对称性破坏能级发生分裂, 导致 O(4) 原子的态密度上出现更多特征明显的尖峰。其中氧空位处于正二价态下出现 3 个明显的尖峰, 峰值分别位于

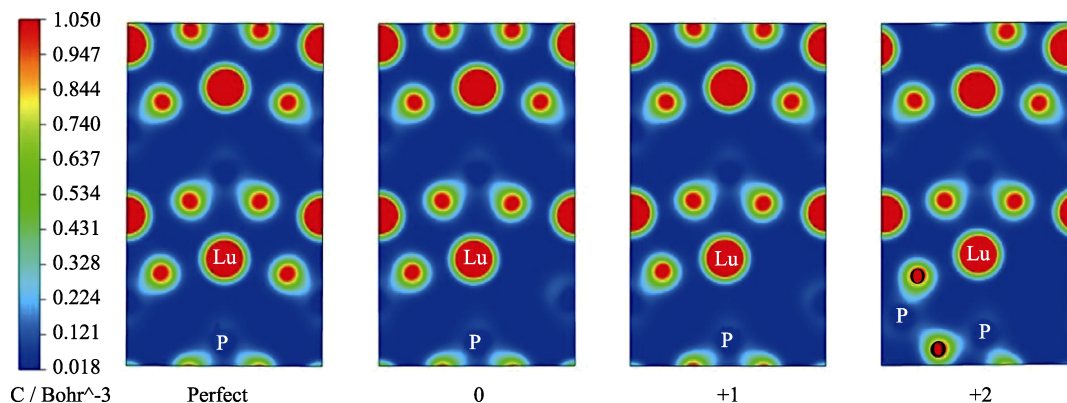


图 5 完整结构以及含缺陷晶格的电荷密度分布图

Fig. 5 Charge density distribution for pure and defective crystals

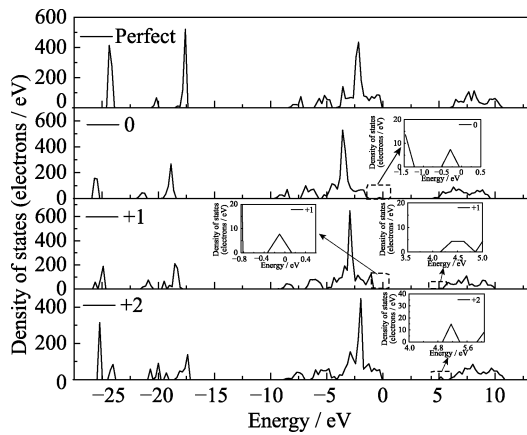


图 6 不同结构下总态密度图
Fig. 6 Total density of states under different structures

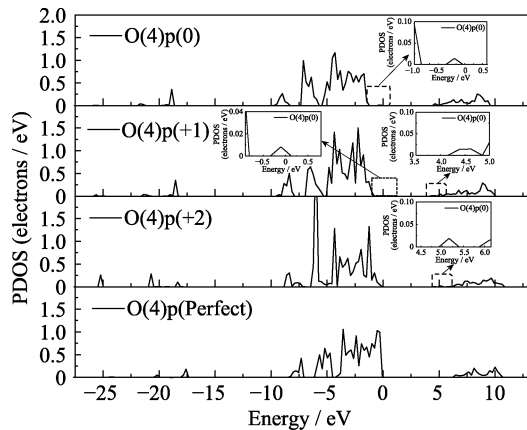


图 7 不同结构下 O(4)原子 p 轨道的分波态密度图
Fig. 7 Partial density of states for p orbital of the O(4) atom under different structures

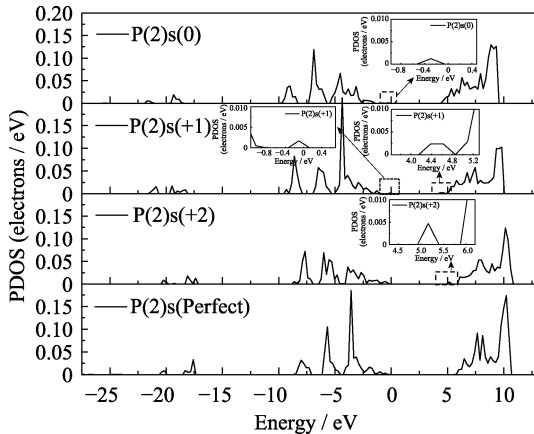


图 8 不同结构下 P(2)原子 s 轨道的分波态密度图
Fig. 8 Partial density of states for s orbital of the P(2) atom under different structures

-1.2、-4.3 和 -6 eV, 而价带顶附近其他峰值的态密度有所减弱, 这说明在氧空位处于正二价态时, 这三个峰的局域性较强。从图中还可以看出带隙中出现的缺陷能级与总态密度的缺陷能级对应, 是由于 Vo 的存在使邻近的 O(4)原子配位场发生改变产生

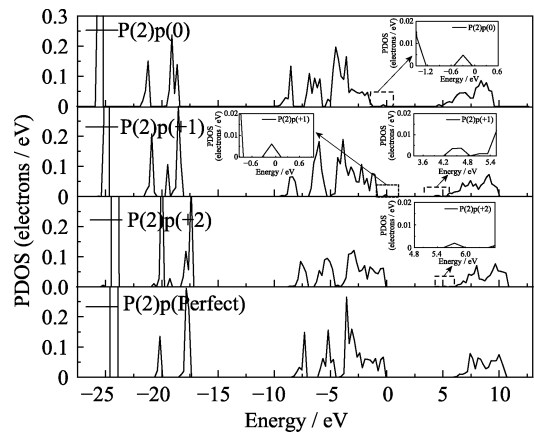


图 9 不同结构下 P(2)原子 p 轨道的分波态密度图
Fig. 9 Partial density of states for p orbital of the P(2) atom under different structures

能级分裂, 因而在禁带中产生了由 O(4)的 p 轨道构成的缺陷能级。P(2)原子 s、p 轨道的分态密度如图 8 和图 9 所示。与 O(4)的 p 轨道不同 P(2)的 p 轨道变化并不明显如图 9 所示, 态密度的变化主要来自 s 轨道。图 8 可以看出在氧空位处于正一价态下, P(2)原子 s 轨道主要局域在 -4.3 eV 附近, 但当氧空位处于正二价态时该峰值消失并且态密度有所下降。通过比对 O(4)在正二价的 s 轨道发现在 -4.3 eV 附近出现了明显的峰值, 推测可能是由于在氧空位处于正二价态结构下 P(2)原子与 O(4)原子成键。P(2)的 s、p 轨道在禁带中出现了与总态密度对应的缺陷能级, 说明氧空位对 P(2)原子的配位场存在明显影响, 使得原子的能级产生分裂并引入到禁带中。

3 结论

本文通过密度泛函理论下的广义梯度近似结合平面波赝势方法对含有 Vo 的 LuPO₄ 的晶体进行了研究。计算了不同价态的 Vo 在 LuPO₄ 中的结构, 当 Vo 带正二价电时, P 原子会越过由三个氧原子构成的势垒面, 并重新键连一个 O 原子形成焦磷酸结构 (P₂O₇)⁴⁻。使用过渡态搜索计算结构变化过程中势能面的鞍点, 从势能角度验证了带正二价氧空位周围晶格发生奇特的畸变的机理。并讨论了氧空位处于不同价态时对应结构的电荷密度分布以及电子态密度。带正二价氧空位的晶体性质发生了明显变化。LuPO₄:Nd 晶体中靠近带边吸收很可能与氧空位的存在有关。

参考文献:

[1] PHADKEP S, NINO J C, ISLAM M S. Structural and defect properties of the LaPO₄ and LaP₃O₁₄-based proton conductors. *Journal*

- of Materials Chemistry*, 2012, **22(48)**: 25388–25394.
- [2] SOLOMON J, ADELSTEIN N, ASTA M, *et al.* Charge-compensating pyrophosphate defect structures in Sr-doped LaPO₄. *ECS Transactions*, 2012, **45(1)**: 117–120.
- [3] AMEZAWZ K, MAEKAWA H, TOMII Y, *et al.* Protonic conduction and defect structures in Sr-doped LaPO₄. *Solid State Ionics*, 2001, **145(1–4)**: 233–240.
- [4] KITAMURA N, AMEZAWA K, TOMII Y, *et al.* High temperature protonic conduction in Sr-doped NdPO₄. *Journal of the Japan Society of Powder and Powder Metallurgy*, 2002, **49(10)**: 856–860.
- [5] KITAMURA N, AMEZAWA K, TOMII Y, *et al.* Protonic conduction in rare earth orthophosphates with the monazite structure. *Solid State Ionics*, 2003, **162**: 161–165.
- [6] AMEZAWA K, TOMII Y, YAMAMOTO N. High temperature protonic conduction in Ca-doped YPO₄. *Solid State Ionics*, 2003, **162**: 175–180.
- [7] RAPAPORT A, DAVID V, BASS M, *et al.* Optical spectroscopy of erbium-doped lutetium orthophosphate. *Journal of Luminescence*, 1999, **85(1/2/3)**: 155–161.
- [8] SUN C, LI X, WANG H, *et al.* Crystallization-dependent luminescence properties of Ce: LuPO₄. *Inorganic Chemistry*, 2016, **55(6)**: 2969–2976.
- [9] LEMPICKI A, BERMAN E, WOJTOWICZ A J, *et al.* Cerium-doped orthophosphates: new promising scintillators. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 1993, **40(4)**: 384–387.
- [10] MAKHOV V N, KIRIKOVA N Y, KIRM M, *et al.* Luminescence properties of YPO₄: Nd³⁺: a promising VUV scintillator material. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2002, **486(1/2)**: 437–442.
- [11] VISTOVSKYY V, MALYI T, VAS'KIV A, *et al.* Luminescent properties of LuPO₄-Pr and LuPO₄-Eu nanoparticles. *Journal of Luminescence*, 2016, **179**: 527–532.
- [12] LI WEI, SUN YI-YANG, LI LIN-QIN. Control of charge recombination in perovskites by oxidation state of halide vacancy. *Journal of the American Chemical Society*, 2018, **140(46)**: 15753–15763.
- [13] LI JING, LIU TINGYU, FU MINGYUE, *et al.* Optical properties simulating calculation of the F or F⁺ center in LuPO₄ crystal. *Acta Photonica Sinica*, 2018, **47(7)**: 1–7.
- [14] NIPKO J C, LOONG C K, LOEWENHAUPT M, *et al.* Lattice dynamics of xenotime: the phonon dispersion relations and density of states of LuPO₄. *Physical Review B*, 1997, **56(18)**: 11584–11592.
- [15] NIPKO J C, LOONG C K, LOEWENHAUPT M, *et al.* Lattice Dynamics of LuPO₄. *Journal of Alloys and Compounds*, 1997, **250(1/2)**: 573–576.
- [16] KRESSE G, FURTHMULLER J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 1996, **54(16)**: 11169–11186.
- [17] KRESSE G, FURTHMULLER J. Efficiency of *ab-initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational Materials Science*, 1996, **6(1)**: 15–50.
- [18] PERKEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 1996, **77(18)**: 3865–3868.
- [19] KRESSE G, JOUBERT D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 1999, **59(3)**: 1758–1775.
- [20] BLOCHL P E. Projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 1994, **50(24)**: 17953–17979.
- [21] HENKELMAN G, JUAO N S S O N H. Improved tangent estimate in the nudged elastic band method for finding minimum energy paths and saddle points. *The Journal of Chemical Physics*, 2000, **113(22)**: 9978–9985.
- [22] MIKHAILIN V V, SPASSKY D A, KOLOBANOV V N, *et al.* Luminescence study of the LuBO₃ and LuPO₄ doped with RE³⁺. *Radiation Measurements*, 2010, **45(3–6)**: 307–310.
- [23] WISNIEWSKI D, TAVERNIEER S, WOJTOWICZ A J, *et al.* LuPO₄:Nd and YPO₄:Nd—new promising VUV scintillation materials. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2002, **486(1/2)**: 239–243.
- [24] WISNIEWSKI D, TAVERNIER S, DORENBOS P, *et al.* VUV Scintillation of LuPO₄:Nd and YPO₄:Nd. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2002, **49(3)**: 937–940.