

**Кристаллическая структура нового нелинейно-оптического К,Та-бората и его родство с минералом пепроссиитом**

**Фадеева Ольга Александровна**

Студент

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Геологический факультет, Москва, Россия  
E-mail: oly-fadeeva@mail.ru

В гидротермальных условиях получены кристаллы нового бората  $\text{KTa}[\text{B}_4\text{O}_6(\text{OH})_4](\text{OH})_2$ , пр.гр. *P-62m*. Кристаллы нового бората синтезированы в системе  $\text{Ta}_2\text{O}_5 - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2$  с соотношением окислов 2:1:1, в растворе присутствовали в качестве минерализаторов соли  $\text{KF}$  и  $\text{K}_2\text{CO}_3$  в концентрации 20 вес.%. Параметры синтеза  $T=270^\circ\text{-}280^\circ\text{C}$ ,  $P\sim 70$  атм, продолжительность опытов 18-20 суток. Рентгендифракционный спектр не позволил идентифицировать кристаллы. Они отличались невысоким качеством: были мутные, мелкие и среди них также было затруднительно выбрать хороший монокристалл для дальнейших исследований. Состав новой фазы был определен на растровом электронном микроскопе Jeol JSM-6480LV. Он показал присутствие К и Та, что свидетельствовало о том, что это борат, исходя из состава системы и возможностей микроанализа. Проведенный тест на генерацию второй гармоники (ГВГ) для кристаллов нового бората установил их значительную нелинейно-оптическую активность, причем величина сигнала ГВГ составила 70 единиц  $\text{SiO}_2$  [Стефанович С.Ю. 1994].

Параметры определены и уточнены на дифрактометре XCalibur с координатным детектором с изометричного полупрозрачного кристалла размерами  $0.125\times 0.125\times 0.1$  мм. При увеличенной экспозиции из-за его очень малого размера, удалось получить параметры гексагональной ячейки:  $a=4.5121$ ,  $c=12.057$  &#197;,  $g=120^\circ$ . Трехмерный экспериментальный набор получен также с увеличенной экспозицией в полной области обратного пространства, расчеты выполнены по комплексу CSD. Структура расшифрована методом тяжёлого атома, МНК-уточнение дало  $R(F)=0.08$ .

Данный борат кристаллизуется в ацентричной пространственной группе и относится к конденсированным боратам со слоевым слюдоподобным анионным радикалом, составленным из тетраэдров бора. Подобный анионный радикал был найден в синтетическом борате  $\text{NdAl}_{2.07}[\text{B}_4\text{O}_{10}]\text{O}_{0.6}$  [Пушаровский Д.Ю. 1978], кристаллизующемся в той же пр.гр. *P-62m*. Параметры  $a$  обоих кристаллов совпадают в то время, как параметр  $c$  исследованного ранее бората короче ( $a=4.558$ ,  $c=9.298$  &#197;). Структура данного бората идентична найденному позднее в природе минералу пепроссииту  $(\text{Th}_{0.75}, \text{La}_{0.25})\text{Al}_3\text{O}_{0.667}(\text{B}_4\text{O}_{10})$ . Основное различие структуры исследованного нами нового слоевого бората и минерала пепроссиита, также как и его синтетического прототипа, состоит в межпакетном пространстве, в то время, как сердечник из Та-призм, экранированный с двух сторон слоями из тетраэдров, совпадает в обоих структурных типах с учетом замены Та на Nd. Высокие нелинейно-оптические свойства кристаллов, наиболее вероятно, связаны с ангармоническими колебаниями атомов Та в центрах призм.

Новые кристаллы представляют определенный материаловедческий интерес благодаря большой оптической нелинейности.

### **Литература**

1. Стефанович С.Ю. Abstracts of Europ. Conf. on Lasers and Elecrto-Optics (CLEO-Europe'94). Amsterdam, 1994. P. 249.
2. Пушаровокий Д.Ю., Карпов О.Г., Леонюк Н.И. Кристаллическая структура нестехиометричного неодим, алюминиевого - диметабората., ДАН СССР, 1978.

### **Слова благодарности**

Автор выражает благодарность ст.н.с., д. ф-м. н. Стефановичу С.Ю. и в.н.с., д. г-м. н. Димитровой О.В. , а так же особую благодарность за помощь в написание научному руководителю доц., д. х. н. Белоконевой Е.Л.