

492 нм, у CsNSH – 500 нм.

В результате проведенных термогравиметрических исследований были установлены температуры начала дегидратации полученных кристаллов: 111 °С – у CsNSH и 126 °С – у RbNSH.

Дефектная структура кристаллов RbNSH, CsNSH исследована с помощью проекционной рентгеновской топографии. Выявлена достаточно высокая степень совершенства выращенных кристаллов.

Все полученные монокристаллы обладают высоким оптическим качеством и могут успешно применяться в качестве УФ фильтров.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 07-02-01346-а.

RMS DPI 2007-1-59-0

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В КРИСТАЛЛАХ BAVF PHASE TRANSITION IN BAVF CRYSTALS

Меркулов А.А., Исаенко Л.И., Журков С.И.

Merkulov A.A., Isaenko L.I., Zhurkov S.I.

Institute of Geology and Mineralogy SB RAS, Novosibirsk, Russia,

merkulov@uiggm.nsc.ru

The nonlinear fluorine contained crystals may be used for ultraviolet light generation. It is promising for application in photolithography and medicine. Early the structure of a new crystal $BaAlBO_3F_2$ (BAVF) was refined in the space group $P6_3/m$. The reinvestigation of this structure in recent work gives the space group $P-6$. In present work the synthesis of the BAVF and the thermal treatment of the powder were realized. It was discovered the crystal may be stabilized in two phases. It was established that a low-temperature nonlinear α -phase of the $P-6$ group may be grown at about 800°C from the flux with low concentration whereas a high-temperature centre-symmetric β -phase $P6_3/m$ grows from concentrated flux at ~ 900°C. In situ division of the anionic net that assumed the different ionic radii for the different anions was performed. The empty knots of the anionic net were found near Ba^{2+} cations. The Ba^{2+} displacement to empty knots provides phase transition.

Нелинейные фторсодержащие кристаллы, характеризующиеся отсутствием центра инверсии, могут быть использованы в качестве преобразователей частоты видимого диапазона в УФ–ВУФ область, что особенно актуально для применения в фотолитографии и медицине. Этим обусловлен постоянно возрастающий интерес к этим соединениям [1]. Структуру нового кристалла $BaAlBO_3F_2$ (BAVF) авторы работы [2] определили как центросимметричную $P6_3/m$, а в работе [3] структура описана как нецентросимметричная $P-6$, демонстрирующая удвоение частоты излучения неодимового лазера. С целью проверки причины неоднозначных данных авторы провели твердофазный синтез BAVF, осуществили ряд последовательных термических обработок порошков при возрастающих температурах и вырастили кристаллы из раствора-расплава. На всех этапах обработки проводился рентгенофазовый анализ,

и проверялась способность образцов к нелинейному преобразованию – удвоению частоты неодимового лазера.

Результаты работы показали, что оба определения структуры верны. Кристаллы BAVF характеризуются наличием двух фаз. Низкотемпературная α -фаза с пространственной группой $P6$ нелинейная, высокотемпературная β -фаза $P6_3/m$ центросимметричная. Низкотемпературная фаза выращивается из разбавленных плавов при температуре около 800 °С, центросимметричные кристаллы - из концентрированных растворов при высоких температурах (~900 °С). Структуры различаются разворотом BO_3 групп относительно треугольного сечения AlO_3 пентаэдра AlO_3F_2 . Делением анионной решетки авторской *in situ* методикой (при неравных радиусах анионов O^{2-} и F) показано наличие в структуре обоих соединений пустых узлов анионной решетки, расположенных вблизи катионов бария. Переход этих катионов из одних позиций в другие и обеспечивает осуществление фазового перехода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 07-02-00442) и Федеральной программы «Технологии создания и обработки кристаллических материалов» (контракт № 02.513.11.3131).

[1]. С.Т.Сhen, L.Bai, Z.Z.Wang, R.K.Li // J. Cryst. Growth, V. 292, 2006, P. 169-178.

[2]. H.Park, J.Barbier // J. Solid State Chem., V. 155, 2000, P. 354-358.

[3]. Z.G.Hu, K.Maramatsu, N.Kanehisa, M.Yoshimura, Y.Mory, T.Sasaki, Y.Kai // Z. Kristallogr., V. 218, 2003, P. 1-2.

RMS DPI 2007-1-60-0

О МЕХАНИЗМАХ ИЗМЕНЕНИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ ЧИСЕЛ Mg И Al В ЦЕНТРАЛЬНОЙ ЧАСТИ СИСТЕМЫ $MgO-BeO-Al_2O_3-SiO_2$ ABOUT MECHANISMS OF COORDINATION NUMBERS VARIATION OF Mg AND Al AT CENTRAL PART OF SYSTEM $MgO-BeO-Al_2O_3-SiO_2$

Михайлов М.А., Демина Т.В., Мамонтова С.Г., Богданова Л.А.

Mihaylov M.A., Dyomina T.V., Mamontova S.G., Bogdanova L.A.

A.P. Vinogradov Institute of Geochemistry SB RAS, Irkutsk, Russia,

mikmik@igc.irk.ru

It is experimentally established that the “*relay*”-mechanism of coordination number (CN) variation of Mg and Al ($MgO_4+AlO_6 \rightarrow MgO_6+AlO_4$) in cooling melt of beryllian indialite (BI). The principles and additional “*vector*”-mechanism of CN^{Al}-variation ($MgO_6+AlO_6 \rightarrow MgO_6+AlO_4$) ($MgO_6+AlO_6 \rightarrow MgO_4+AlO_4 \rightarrow MgO_6+AlO_4$) with “*swing*”-mechanism CN^{Mg}-variation at last scheme is realized in conditions of solid-phase synthesis.

Экспериментально было установлено, что получение бериллиевого индиалита (БИ, $Mg_2BeAl_2Si_6O_{18}$) из собственного расплава осложнено особенностями фазообразования при переходе расплав→кристалл [1]. Показано, что набор основных фаз, их доли в слитке и химические