

Синтез и структурные особенности кристаллов лантан-хромового бората**Алпанова Регина Руслановна***Студент (магистр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: reginaalpanova@gmail.com

Лантан-хромовый борат ($\text{LaCr}_3(\text{BO}_3)_4$, далее - ЛХБ) относится к семейству боратов с общей химической формулой $\text{RM}_3(\text{BO}_3)_4$ ($R = \text{Y}$ или La-Lu ; $M = \text{Al, Ga, Sc, Fe, Cr}$), представители которого демонстрируют необычные оптические, магнитные и магнитоэлектрические характеристики [1-2]. Среди них можно выделить редкоземельные бораты с двумя магнитными подсистемами (где R — $4f$ -элемент группы лантаноидов, а M — $3d$ -металл Fe или Cr). При этом, магнитные характеристики редкоземельных хромовых боратов, в отличие от их редкоземельно-железистых аналогов, остаются малоизученными, что делает их исследование перспективным. Установлено, что редкоземельно-хромовые бораты могут кристаллизоваться в двух структурных модификациях: гексагональной ($R\bar{3}2$) и моноклинной ($C2/c$), образование которых в значительной степени зависит от температурно-концентрационных условий их синтеза [3]. Таким образом, определение условий кристаллизации обеих структурных модификаций и комплексное исследование их магнитных и оптических свойств является актуальной, но весьма нетривиальной задачей.

Целью данной работы были синтез и исследование структурных параметров кристаллов ЛХБ. Для этого были использованы два метода: раствор-расплавная кристаллизация в системе на основе тримолибдата калия $\text{K}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}$ и метод твердофазного синтеза. Полученные образцы изучались методами рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа, ИК-спектроскопии, дифференциально-термического анализа, оптической микроскопии. Для системы $\text{LaCr}_3(\text{BO}_3)_4\text{-K}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}\text{-V}_2\text{O}_5$ установлена область образования $\text{LaCr}_3(\text{BO}_3)_4$ с пр. гр. $R\bar{3}2$ и $C2/c$ (соотношение определялось по методике измерения интенсивности фононных мод [4]): 50-90 мас. % $\text{LaCr}_3(\text{BO}_3)_4$ и 0-10 мас. % V_2O_5 . Для системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Cr}_2\text{O}_3\text{-H}_3\text{BO}_3$ методом твердофазного синтеза были получены кристаллы $\text{LaCr}_3(\text{BO}_3)_4$ при соотношении исходных оксидов и борной кислоты 1:3:8 соответственно при 1000 и 1100°C. Также впервые была расшифрована структура моноклинной модификации ЛХБ и установлена пространственная группа ($C2/c$): $a=7.47980(5)$ Å, $b=9.55180(7)$ Å, $c=11.48330(8)$ Å, $V=796.04(1)$ Å³. В результате расчёта зонной структуры моноклинной модификации ЛХБ энергия Ферми составляет 10,3678 эВ.

Авторы выражают благодарность сотруднику ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН Антипину А. М. за помощь с детальными структурными исследованиями.

Источники и литература

- 1) Kuz'micheva G. M., I. A. Kaurova, V. B. Rybakov, V. V. Podbel'skiy. Crystallochemical Design of Huntite-Family Compounds. // Crystals. 2019. V. 9, № 2, p. 100-108.
- 2) Kuz'min N. N., Mal'tsev V. V., Volkova E. A., Leonyuk N. I., Boldyrev C. N., Bludov A. N. Growth and Spectroscopic and Magnetic Properties of $\text{TbCr}_3(\text{BO}_3)_4$ crystals. // Inorganic Materials. 2020, Vol. 56, № 8, p. 828–835.
- 3) Leonyuk N.I., Leonyuk L.I. Growth and characterization of $\text{RM}_3(\text{BO}_3)_4$ crystals. // Prog. Cryst. Growth and Charact. 1995, Vol. 31, p. 179-278.
- 4) E. A. Dobretsova, K. N. Boldyrev, M. N. Popova, V. A. Chernyshev, E. Yu. Borovikova, V. V. Maltsev, N. I. Leonyuk. J. // Physics: Conference Series. 2016, p. 737.