

**Высокотемпературные фазовые переходы типа порядок-беспорядок в соединениях  $\text{LnBSiO}_5$  ( $\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}$ ) со структурой стиллуэллита**

**Научный руководитель – Кржижановская Мария Георгиевна**

**Копылова Юлия Олеговна**

*E-mail: yuliua.kopylova@gmail.com*

Соединения со структурой типа стиллуэллита обладают сегнетоэлектрическими и нелинейно-оптическими свойствами, полезными для практических применений в различных областях техники [1, 2]. Основу структуры составляют спиральные цепи из тетраэдров  $\text{VO}_4$  и  $\text{SiO}_4$ , соединенные между собой многогранниками лантаноидов. Для ряда синтетических стиллуэллитов описано высокотемпературное фазовое превращение, природа которого не полностью изучена [2]. Недавно в [1] синтезированы кристаллы  $(\text{La}, \text{Nd})\text{BSiO}_5$ , обладающие уникальными лазерными свойствами. Авторы утверждают, что легирование неодимом позволяет избежать фазового перехода, происходящего в  $\text{LaBSiO}_5$  при  $150^\circ\text{C}$ . В данной работе представлено исследование эволюции кристаллических структур  $\text{LaBSiO}_5$  и  $\text{NdBSiO}_5$  в интервале от  $-180$  до  $1000^\circ\text{C}$  методом рентгеновской монокристаллической дифрактометрии в сопоставлении с результатами по природному стиллуэллиту-Се из [3]. Показано, что обе фазы, как и стиллуэллит-Се, испытывают фазовый переход типа порядок-беспорядок. Аналогично природному соединению, в области перехода наблюдается превращение из частично разупорядоченной низкотемпературной фазы (в тетраэдре  $\text{VO}_4$  две из 4-х вершин расщеплены) в полностью упорядоченную высокотемпературную. Температура перехода возрастает при уменьшении размера лантаноида от  $150^\circ\text{C}$  для  $\text{LaBSiO}_5$  до  $\sim 900^\circ\text{C}$  - для  $\text{NdBSiO}_5$ .

*Автор приносит благодарность научному руководителю, Кржижановской М.Г., Верещагину О.С. (СПбГУ) за предоставленные образцы кристаллов  $\text{LaBSiO}_5$  и  $\text{NdBSiO}_5$ , а также ресурсным центрам «Рентгенодифракционных методов исследований» и «Геомодель» СПбГУ за инструментальные исследования. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (22-27-00430).*

**Источники и литература**

- 1) Li L., Huang F., Shi Y., Luo Z.-Z., Wang G.-Q., Li X.-X., Li B., Zhang L., Yu Y., Feng Ya-N., Yang Ch., Yu Y., Poeppelmeier K. R. Triple-Wavelength Lasing with a Stabilized  $\beta$ - $\text{LaBSiO}_5:\text{Nd}^{3+}$  // Crystal. J. Am. Chem. Soc. 2022. Vol. 144. P. 11822-11830.
- 2) Stefanovich S.Yu., Mill B., Sigaev V.N. Processing and characterisation of ferro/piezoelectrics in the stillwellite family // Ferroelectrics. 1997. Vol. 201. P. 285-294.
- 3) Krzhizhanovskaya M. G., Kopylova Yu. O., Obozova E. D., Zalesskii V. G., Lushnikov S. G., Gorelova L. A., Shilovskikh V. V., Ugolkov V. L., Britvin S. N., Pekov I. V. Thermal evolution of stillwellite,  $\text{CeBSiO}_5$ , a natural prototype for a family of NLO-active materials // J. Solid. State Chem. 2023. Vol. 318. P. 123786.