

ПОИСК, СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ. ПРОЕКТ № 88

Координатор: акад. Александров К. С.

Исполнители: ИФ, ИНХ, ИК, ИМП, ИФПМ СО РАН

Выполнен кристаллохимический анализ структур перовскитоподобных кристаллов, удалось представить их в виде перовскитных пакетов и промежуточных блоков. В рамках этого подхода удалось построить сотни новых структур, в том числе в обширных семействах фаз Руддлсдена—Поппера, Ауривиллиуса, кристаллы с антиперовскитной решеткой, оксигалогениды, оксицианиды, карбиды, нитриды, бориды. Выполненный прогноз открывает перспективы синтеза монокристаллов сотен новых соединений.

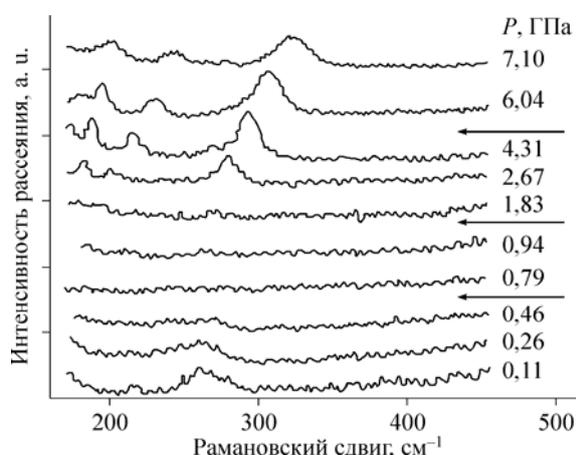
Развит основанный на первых принципах метод расчета устойчивости, основных физических свойств и колебательного спектра ионных кристаллов, позволяющий эффективно учитывать дальние мультипольные взаимодействия ионов. Проанализирована устойчивость структур ряда малоизученных галогенсодержа-

щих перовскитоподобных кристаллов; в них предсказаны и позднее найдены экспериментально фазовые переходы в условиях высоких давлений (см. рисунок). Обнаружены также неизвестные ранее фазы высокого давления.

С целью создания новых активных лазерных сред в дальнем ИК-диапазоне и новых активных сред с низкоэнергетическим фонным спектром получены и исследованы отличающиеся значительной химической стойкостью кристаллы на основе тройных галогенидов типа $MePb_2X_5$ ($Me = K, Rb; X = Cl, Br$). Разработана методика синтеза, исследованы структуры, комплекс физических свойств, получен и интерпретирован колебательный спектр, определяющий нижнюю границу окна прозрачности, при этом показано, что специфика низкосимметричной структуры этих кристаллов приводит к существенному (в два раза) понижению данной границы по сравнению с используемыми сейчас материалами. Установлено, что специфические протяженные дефекты в ряде кристаллов этого семейства являются доменными границами, возникающими при высокотемпературном фазовом переходе. В легированных неодимом кристаллах обнаружены новые линии генерации лазерного излучения.

Разработаны также методики группового синтеза совершенных монокристаллов семейства лангасита (галлогерманаты свинца и бария), как чистых, так и активированных ионами редких земель, — перспективных лазерных материалов ближнего ультрафиолетового диапазона.

Синтезированы монокристаллы и керамики составов $SmBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ (123Sm), исследованы их структура, зависимость сверхпроводящих свойств от состава и условий синтеза.



Изменения спектра комбинационного рассеяния кристалла $RbMnCl_3$ при высоких давлениях. Стрелками показаны точки обнаруженных фазовых переходов.

Transformation of Raman spectrum of $RbMnCl_3$ crystal under high pressure. Observed phase transition points are shown with arrows.

Синтезированы поликристаллы металло-сульфидов $Me_xMn_{1-x}S$ ($Me = Fe, Cr, Co; 0 \leq x \leq 0,5$) и монокристаллы $Fe_{0,29}Mn_{0,71}S$ — перспективных материалов с колоссальным магнитосопротивлением. С использованием метода дифференцирующего растворения исследованы реальный химический и фазовый состав полученных образцов. Определены границы твердого раствора в системе $MnS-FeS$ на основе кубической решетки.

В семействе оксиборатов меди — перспективных магнитных кристаллов — найдены неизвестные ранее соединения: $Cu_5V_4Bi_2O_{14}$ и Cu_2VBiO_5 , определены их состав и структура. Показано, что кристаллы $Cu_5Bi_2V_4O_{14}$, полученные в одном эксперименте, могут характеризоваться различным составом (атомное содержание меди меняется между 5,0 и 4,2 ат. ед.), при этом наблюдается прямая связь дефицита меди с размером кристалла: флуктуации составов сосредоточены на границах кристаллитов. Найдены оптимальные составы исходных компонент и параметры температурного режима для получения качественных кристаллов. Выполнены исследования магнитной структуры и низкотемпературных магнитных фазовых переходов полученных кристаллов

Исследована уникальная система стекол $22,5Al_2O_3 \cdot 22,5K_2O \cdot 55B_2O_3$, допированных Fe_2O_3

и MnO , в которых при крайне низких концентрациях парамагнитных составляющих в исходной шихте формируются нанокристаллы ферритов. Благодаря этому стекла характеризуются нелинейной полевой зависимостью намагниченности с гистерезисом и магнитным насыщением в относительно низких магнитных полях, т. е. их поведение в магнитном поле типично для веществ с ферромагнитным или ферримагнитным порядком. В то же время они остаются прозрачными в видимом и ближком инфракрасном спектральных диапазонах и демонстрируют высокие значения магнитооптического вращения Фарадея. Впервые проведено прямое наблюдение наночастиц непосредственно в стекольной матрице; установлены корреляции между размерами, формой, структурой частиц и технологическими параметрами, а также между морфологическими характеристиками частиц и магнитными свойствами содержащих их стекольных образцов. Установлена прямая связь величины магнитооптического эффекта Фарадея с размером и кристаллическим совершенством наночастиц. Результаты показывают перспективность разработки магнитооптических элементов на основе этих материалов для практически важной спектральной области 1,0—1,5 мкм.

Основные публикации

1. Александров К. С., Безносиков Б. В. Перовскиты. Настоящее и будущее. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004. 231 с.
2. Максимов Е. Г., Зиненко В. И., Замкова Н. Г. // УФН. 2004. Т. 174, № 11. С. 1145—1170.
3. Втюрин А. Н., Горяйнов С. В., Замкова Н. Г., Зиненко В. И., Крылов А. С., Крылова С. Н., Шефер А. Д. // ФТТ. 2004. Т. 46, № 7. С. 1261—1270.
4. Rademaker K., Krupke W. F., Page R. H., Payne S. A., Petermann K., Huber G., Yelisseyev A., Isaenko L., Roy U. N., Burger A., Mandal K. C., Nitsch K. // JOSA. B. 2004. V. 21. P. 2117.
5. Pisarev R., Sanger I., Petrakovskii G., Fiebig M. // Phys. Rev. Letters. 2004. V. 93. P. 037204.
6. Васильева И. Г., Довлитова Л. С., Зайковский В. И., Малахов В. В., Эдельман И. С., Степанов С. А., Александров К. С. // Докл. РАН. 2005. Т. 401, № 3. С. 349.