

РАЗОРИЕНТИРОВКА ТРЕУГОЛЬНИКОВ BO_3 В БОРАТАХ И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

Бубнова Р.С.^{1, @}, Юхно В.А.¹, Филатов С.К.²

¹Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН,
Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

@rimma_bubnova@mail.ru

Многие функциональные свойства боратов определяются относительной ориентировкой треугольников BO_3 [1, 2]. Отмечалось также, что треугольные полиэдры BO_3 стремятся занимать параллельное друг другу расположение, либо близкое к нему [3], но возможны и иные разориентировки. Хорошо известны бораты, в которых такие треугольники параллельны друг другу, например структурный кальцита (β) и арагонита (λ) REEBO_3 (β , $\text{REE} = \text{Sc}, \text{In}, \text{Y}, \text{Lu}$; λ , $\text{REE} = \text{Nd}, \text{La}$). Также параллельны друг другу триборатные группы, содержащие кольца из трех треугольников, например, известный НЛО-борат $\beta\text{-BaB}_2\text{O}_4$, фотолуминофор $\text{LuBa}_3\text{B}_9\text{O}_{18}$ и др. Такие структуры будем считать исходными. Отклонения от параллельности характеризуются углом разориентировки. Иная ситуация в пентаборатных группах, в которых угол между двумя триборатными кольцами, входящими в группу, близок к 90° . Ставится задача выявления ориентационной статистики расположения плоских BO_3 -полиэдров. Очевидно, что подобная статистика является различной для изолированных треугольников и в жестких BO -группах. В анализ включены также боросиликаты, содержащие BO_3 -треугольники и SiO_4 -тетраэдры.

Исследования поддержаны проектом РФФИ 18-29-12106.

- [1] Chen C.T., Wu Y., Li R.K. 1989, Rev. Phys. Chem. **8**. 65–91.
- [2] Bubnova R., Volkov S., Albert B., Filatov S. 2017, Crystals. **7**. 93–125.
- [3] Bubnova R.S., Filatov S. K. Struct. 2016, Chem. **27**. 1647–1662.