

## Кристаллохимические критерии поиска функциональных оптических материалов

Бубнова Р.С.<sup>1, @</sup>, Южно В.А.<sup>1</sup>, Филатов С.К.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-  
Петербург, Россия  
<sup>@</sup>rimma\_bubnova@mail.ru

Как впервые показано авторами [1], проявлению эффективных НЛО-свойств способствует резкая анизотропия термического расширения и ангармонизм смещений атомов. Отмечалось также [2, 3], что НЛО-свойства зависят от относительной ориентировки треугольников  $\text{VO}_3$  и группировок из  $\text{VO}_3$ . Часто треугольники  $\text{TO}_3$  ( $T = \text{V}, \text{C}, \text{N}$ ) стремятся занимать параллельное друг другу расположение, либо близкое к нему – с. т. кальцита ( $\beta$ ) и арагонита ( $\lambda$ )  $\text{REEVO}_3$  [4], также параллельны друг другу 3В-группы – кольца из трех  $\text{VO}_3$ , например, НЛО-борат  $\beta\text{-BaB}_2\text{O}_4$ , фотолюминофор  $\text{LuBa}_3\text{V}_9\text{O}_{18}$  и др. Такое расположение треугольников будем считать исходным, отклонение от параллельности характеризуется углом разориентировки. Однако возможны и иные ориентировки: в 5В-группах угол между двумя 3В-кольцами группы близок к  $90^\circ$ ; реже встречаются бораты с изолированными треугольниками и углом их разориентировки близким к  $90^\circ$  ( $\text{BiSr}_3(\text{YO})_3(\text{VO}_3)_4$  и др.). Ставится задача выявления ориентационной статистики расположения плоских  $\text{VO}_3$ -полиэдров и проявления ими НЛО-свойств.

Критериями выбора неорганической матрицы для люминофоров может быть наличие нескольких катионных помимо предлагаемого ранее разупорядочения и расщепления структурных позиций [5].

Исследования поддержаны проектом РФФИ 18-29-12106.

[1] Shepelev Yu.F., Bubnova R.S., Filatov S.K. et al., 2005, JSSC. **178**. 2987–2997.

[2] Chen C.T., Wu Y., Li R.K. 1989, Rev. Phys. Chem. **8**. 65–91.

[3] Bubnova R., Volkov S., Albert B., Filatov S. 2017, Crystals. **7**. 93–125.

[4] Bubnova R.S., Filatov S. K. 2016, Struct. Chem. **27**. 1647–1662.

[5] Shablinskii A.P., Bubnova R.S., Kolesnikov I.E. et al. 2017, Solid St. Sci. **70**. 93–100.