

**Перечень важнейших результатов  
секции «Образование и структура кристаллов»  
в 2009 году**

1. В Институте общей физики им. А.М.Прохорова РАН под руководством д.х.н. Федорова П.П. на основе термодинамико-топологического анализа предложена термодинамическая интерпретация полосчатости кристаллов, выращиваемых методом направленной кристаллизации расплава в концентрационной окрестности седловинных точек конгруэнтного плавления твердых растворов. Полосчатость связывается с нелокальной бифуркацией в концентрационном пространстве.

В ИОФ РАНе Совместно с Институтом геологии и минералогии СО РАН (А.Е.Коха) проведено исследование фазовых равновесий в тройной взаимной системе Na,Ba//BO<sub>2</sub>,F. Определены условия кристаллизации нелинейного кристалла BaB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (BBO) и нового фторбората Ba<sub>2</sub>Na<sub>3</sub>[B<sub>3</sub>O<sub>6</sub>]<sub>2</sub>F.

Получены доказательства нового механизма роста микрокристаллов за счет когерентного срастания наночастиц (на примере CeO<sub>2</sub> и Ba<sub>4</sub>R<sub>3</sub>F<sub>17</sub>, R=Yb,Bi).

2. В Институте геологии и минералогии (ИГМ) СО РАН под руководством д.т.н. Коха А.Е. достигнуты высокие результаты в выращивании нелинейно-оптических кристаллов боратов бария BaB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (BBO) и лития LiB<sub>3</sub>O<sub>5</sub> (LBO) с применением метода изменения симметрии и вращения теплового поля. Особенно значительный прогресс достигнут в выращивании кристаллов LBO, в настоящее время вес выращиваемых кристаллов составляет около 1.5 кг, а размер нелинейно-оптических элементов до 65 мм в диаметре с толщиной 15 мм. Элементы из кристаллов LBO показали великолепное оптическое качество.

3. В Институте неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского Отделения РАН (ИНХ СО РАН) под руководством д.ф.-м.н. С.В. Борисова в рамках разрабатываемой концепции кристаллического состояния, утверждающей, что упорядочение атомов осуществляется системами параллельных равноудаленных плоскостей, получено объяснение экстраординарного факта образования в кубической кристаллической структуре минерала швацита Cu<sub>6</sub>(Cu,Hg)<sub>6</sub>(As,Sb)<sub>4</sub>S<sub>13</sub> весьма компактной атомной группировки: Cu<sub>6</sub>-октаэдра с анионом серы в центре со сближенными до 3,14 Å расстояниями Cu-Cu и шестью короткими (2,22 Å) расстояниями Cu-S.

4. В Институте неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского Отделения РАН (ИНХ СО РАН) под руководством д.ф.-м.н. С.В. Борисова получены при кумулятивном нанесении покрытий сверхтвердые высокотемпературные фазы  $W_2B$  и  $\beta$ -WB и проведены их структурные исследования. Данные фазы образуются при использовании многокомпонентных облицовок, которые кроме аморфного бора содержат мелкодисперсные порошки вольфрама и титана. Были использованы борсодержащие облицовки и получены покрытия на титане с микротвердостью до 40 ГПа.

5. В Федеральном государственном учреждении Российский научный центр «Курчатовский институт» (РНЦ КИ) методом дифракции нейтронов, рентгеновских лучей и синхротронного излучения изучена структурная эволюция аморфных сплавов на основе эффективных гидридообразователей при высоких газовых давлениях (до 2000 атм.) и различных температурах в области стабильности аморфной фазы. В сплавах PdZr обнаружено явление индуцированного водородом полиаморфного распада на гидриды компонентов с образованием метастабильного гидрида палладия с ОЦК структурой и аморфной фазы гидрида циркония (совместно с Московским государственным университетом им. М.В.Ломоносова).

6. В РНЦ КИ методом дифракции нейтронов при высокотемпературном отжиге фуллеритов, полученных с помощью механоактивации, обнаружен фазовый переход из молекулярного (фуллереноподобного) стекла в атомарное (алмазоподобное), сопровождающийся исчезновением фуллеренных гало при малых углах рассеяния и увеличением температуры разложения (от 1000К до 2000К).

7. В Институте кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН под руководством к.ф.-м.н. А.Э.Волошина получены доказательства реализации в хрупких кристаллах, выращиваемых из растворов, механизма релаксации упругих напряжений, альтернативного механизму образования дислокаций. В условиях, когда процессы генерации и движения дислокаций затруднены, основная роль в реализации этого механизма связана с образованием включений маточного раствора. Неоднородное распределение упругих напряжений по толщине кристалла способствует формированию макроступеней, а это, в свою очередь, приводит к неоднородному распределению деформации вдоль поверхности вследствие релаксации напряжений на свободном ребре макроступени. В результате края последующих макроступеней искривляются, что приводит к захвату включений. Включения частично релаксируют упругие напряжения, а

также могут служить источниками дислокаций, которые дополнительно снижают уровень напряжений в кристалле. В результате раскрытия этого механизма и создания условий роста кристалла сульфата калия-кобальта, снижающих вероятность образования макроступеней, удалось получить бикристаллический оптический фильтр УФ диапазона (на основе сульфатов калия-никеля – калия-кобальта), эффективность которого в солнечно-слепой области спектра близка к теоретической (рассеяние на дефектах менее 1%). Такой элемент обладает на порядок более высокой эффективностью подавления нерабочих участков спектра по сравнению с традиционным фильтром из гексагидрата сульфата никеля.