ВВЕДЕНИЕ

Часть неорганических соединений, включающая в себя атомы с 3d9 электронной оболочкой и обладающих несимметричной поверхностью Ферми, вызывают интерес для исследований. В настоящее время существует большое количество исследований магнетизма и сверхпроводимости соединений с атомами переходных металлов[link]. Одним из актуальных исследований является работа (10.1021/acs.inorgchem.8b02698), в которой экспериментально показано возникновение антиферромагнитного упорядочения в слоистой структуре Sr2CuO2Cu2S2 на атомах меди Cu+ и Cu2+. Помимо исследования слоистых структур, получение которых сложное и дорогостоящее, развиты методы получения и исследования объемных материалов. Так например, в работе исследования сверхпроводящих купратов(10.1038/NMAT4295), отмечается высокая вероятность возникновения спин-флуктуационного механизма, который приводит к искажению поверхности Ферми и возникновению dx2-y2-симметрии параметра порядка вблизи атомов меди. Наблюдаемые искажения приводят к возникновению валентности на атомах меди в диапазоне от 2,4-..[link]. Как известно, купраты обладают особенностями кристаллической структуры: переходный металл находится в слоях между полиэдрами разной конфигурации, а образованных полиэдрами пустоты заполняются стабилизирующими структуру катионами. Таким образом создаются структурные комбинации, которые приводят в возникновению сложной электронной структуры.

Другими перспективными для исследования неорганическими соединениями являются соединения солей из группы теннантита-тетраэдрита. В основе этих соединений лежит "лавесовский" полиэдр: усеченный тэтраэдр, в центре граней которого находятся 6 атомов меди. Сформированный "лавесовский" полиэдр окружен тэтраэдрическими комплексами, направленными в одну сторону. Ввиду особенностей "лавесовского" полиэдра и его окружения наблюдается сдвиг атомов меди от их идеального положения. Таким образом, благодаря перекрытию электронных орбиталей атомов меди, формируется особенная электронная структура. Благодаря высокой чувствительности электронной структуры к расстоянию между атомами меди и чувствительности к окружению "лавесовского" полиэдра, соединения из группы группы теннантита-тетраэдрита вызывают интерес для исследований. В настоящее время в научной литературе о соединениях из группы теннантита-тетраэдрита отмечается возникновение аномальной теплопроводности[link] и магнитных свойств[link], которые возникает ввиду особенностей формирования электронной структуры.

Современное технические и методические обеспечение позволяет исследовать материалы с переменной валентностью.

The layer structures have been formed in many other transitional metal compounds such as La2B2Se2O3 (B = Mn, Fe, Co). For the Ni-based compounds, we predict that the parental compounds host collinear antiferromagnetic states similar to those in iron-based high temperature superconductors. The electronic physics near Fermi energy is controlled by two eg d-orbitals with completely independent in-plane kinematics. We predict that the superconductivity in this family is characterized by strong competition between extended s-wave and d-wave pairing symmetries.

Описание антиферромагнетизма на Cu2 и Cu1 https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.inorgchem.8b02698

Так же стоит отметить, положение атомов в "лавесовском" полиэдре влияет , которые приводят к возникновению динамических процессов между атомами. Такие динамические процесс приводят к возникновению уникальных свойств.

К Неорганические соединения с 3d9 оболочкой включает себя сверхпроводник и курпаты. Как показывают исследования эти соединения чувствительны к положению атомов в пространстве

The electronic 3d band of the transition metals (T) is determined by the overlap between the d orbitals of adjacent atoms and depends on the number of nearest-neighbours and on the hopping integral, which is very sensitive to the TeT distances [9]. The strength and the sign of the interaction between the neighbouring local moments are determined by the occupation fraction of d-orbitals and the orientation of these orbitals in the lattice [10]. The Mn-based alloys and compounds are assumed to exhibit a strong dependence of MneMn exchange interaction as a function of distance between the nearest-neighbour Mn atoms. It is well known that the MneMn interaction is antiferromagnetic when the distance dMneMn is smaller than 2.9 A [11]. Typical examples are the equiatomic XMn (X ¼ Ni, Pd, Pt) compounds of CuAu(I) e structure type [4,11,12], the Laves phase compounds RMn2 (R ¼ Y, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb) [13,14] and ThMn2 [15], and the RMn12 (R ¼Yand heavy rare earths) of ThMn12 e structure type [16].

Работа вызвана различием в литературных данных: разные данные о фазах, чувствительность к кислороду, возможное политипия