Выводы:

1. Показано, что на структурную формулу в синтетическом теннантите Сu\textsubscript{12}As\textsubscript{4}S\textsubscript{13} приходится 12 атомов меди;
2. Проведен анализ расположения атомов меди в лавесовском полиэдре методом первопринципных расчетов, проведено сравнение элиптичности рядов меди для плоскости (011) атомарного изображения структуры синтетического теннантита Сu\textsubscript{12}As\textsubscript{4}S\textsubscript{13};
3. Обнаружен фазовый переход 2 рода при температуре 124 К в синтетическом теннантите Сu\textsubscript{12}As\textsubscript{4}S\textsubscript{13};
4. Показано возникновение низкоэнергетических фононных мод (ввиду ассиметричной связи в As(CuS\textsubscript{3})As) в соединениях синтетических теннантита Сu\textsubscript{12}As\textsubscript{4}S\textsubscript{13} и мгриита Cu\textsubscript{3}AsSe\textsubscript{3} путём сравнения расчетной и экспериментальной зависимостей теплоёмкостей;
5. Получены экспериментальные значения энергий низкоэнергетических фононных мод для исследуемых соединений;
6. Изовалентное замещение Cu--(As,Sb)--S приводит к уменьшению температуры магнитного упорядочения с 124 К на 84 К;
7. Изовалентное замещение Cu--(As,Sb)--Se приводит к увеличению температур диапазона магнитного упорядочения с 170--270~К на 170--300~К.

Заключение:

В данной работе рассмотрены перспективные для дальнейшего исследования и создания новых функциональных материалов неорганические соединения солей из группы теннантита-тетраэдрита, в которых наблюдается переменная валентность на атомах одного сорта.

Результаты анализа формирования лавесовского полиэдра позволяют выявить схожие структурные зависимости для крайних членов солей из группы теннантита-тетраэдрита, чего нельзя было сделать ранее. Также работа вносит вклад в развитие современного материаловедения и дополняет существующие представления о механизмах формирования физических свойств в соединениях, обладающих схожими с соединениями солей из группы теннантита-тетраэдрита структурными особенностями.

Исследования изовалентного замещения на транспортные и магнитиные свойства этих соединений подтвердило высокую чувствительность электронной структуры сульфосолей к расстоянию между атомами меди в лавесовском полиэдре. Полученные в работе тенденции при изовалентном замещении представляют начальный этап в исследовании сульфосолей и позволяют оценить направления дальнейших исследований транспортных и магнитных свойств сульфосолей.