

СМЕШАННЫЕ ХАЛЬКОГЕНИДЫ И ПНИКТИДЫ МЕТАЛЛОВ 10-Й ГРУППЫ НА ОСНОВЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ФРАГМЕНТОВ: КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ И СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К ОПИСАНИЮ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Кузнецов А.Н.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет

Упорядоченные интерметаллические соединения представляют значительный интерес как с фундаментальной (кристаллическое строение, вопросы образования химической связи), так и с прикладной (электрофизические и магнитные свойства, термическая устойчивость, механическая прочность) точки зрения. Не меньший интерес вызывает и образование более сложных структур на основе устойчивых интерметаллических мотивов. В докладе будут рассмотрены кристаллические соединения, относящиеся к различным структурным типам, но построенные на основе распространенных интерметаллических фрагментов типа Cu_3Au и $\text{Ni}_2\text{In/NiAs}$.

За основу в работе были взяты интерметаллические системы на основе связей «*d*-металл (элементы 10-й группы – Ni, Pd, Pt) – *p*-металл». С использованием неметалла (халькогена или пниктогена) в качестве т.н. «химических ножниц» мы получили в ограниченном круге систем целый ряд соединений пониженной размерности, относящихся к различным структурным типам: $\text{Ni}_{7-x}\text{MQ}_2$ и $\text{Ni}_{9-x}\text{M}_2\text{Q}_2$ – фазы блочного строения на основе одинарных или удвоенных фрагментов со структурой типа Cu_3Au ; Pd_5MQ и Pt_5MQ – фазы блочного строения, относящиеся к структурному типу Pd_5PtAs , на основе одинарных фрагментов типа Cu_3Au ; фазы типа $\text{Pd}_8\text{M}_2\text{Q}$ – новый структурный тип с удвоенным гетерометаллическим фрагментом; фаза $\text{Pd}_{17}\text{In}_4\text{Se}_4$ – новый структурный тип соединений с открытой структурой на основе фрагментов типа Cu_3Au ; $\text{Ni}_{3-x}\text{MTe}_2$ – соединения на основе упорядоченных структур $\text{Ni}_2\text{In/NiAs}$; фазы типа Pd_3MTe_2 или $\text{PdM}_{1-x}\text{Te}_x$ со структурой неупорядоченного $\text{Ni}_2\text{In/NiAs}$. В докладе рассматриваются кристаллохимические особенности каждого структурного типа, в частности, наличие или отсутствие переменного состава по переходному металлу, характер упорядочения вакансий и возможности манипулирования структурой.

Для описания электронной структуры и химической связи в интерметаллических фазах на основе *d*-элементов и структурах, производных от них, необходимо использовать самые современные квантовохимические подходы. Информация, получаемая из анализа зонной структуры и дисперсионных кривых, позволяет увидеть сходство в электронном строении интерметаллических фаз и халькогенидов/пниктидов на их основе, однако не дает возможности выявить различия. Только использование современных индикаторов химической связи (ELF, ELI, DI) в сочетании с применением теории QTAIM P. Бэйдера дает возможность получить информацию, в том числе количественную, характеризующую образование связей «металл-металл» в данных объектах. В частности, использование такого подхода позволило показать существенные различия в образовании связей для никеля, палладия и платины в рамках исследованных структурных типов. В докладе также обсуждаются проблемы, возникающие при описании электронной структуры и химической связи в интерметаллических фрагментах на основе *d*-металлов.