

«Электронные» интерметаллиды: как зонная структура объясняет эмпирические правила и физические свойства

Докладчик: аспирант 2 г/о Верченко В.Ю.

Руководитель: проф., д.х.н. Шевельков А.В.

Рецензент: в.н.с., д.х.н. Кузнецов А.Н.

Среди интерметаллидов можно выделить несколько классов соединений, которые называют «электронными» интерметаллидами. Для таких интерметаллидов обнаружены эмпирические правила и закономерности, связанные с количеством валентных электронов (КВЭ) в рассматриваемых соединениях. Например, обнаружено, что для соединений Nowotny Chimney Ladders (NCLs) с общей формулой T_dE_m (T – d металл 7-9 групп, E – p металл 13-14 групп) общее количество валентных электронов, рассчитанное на один атом d металла, равно 14. С другой стороны, интерметаллиды, кристаллизующиеся в структурном типе $FeGa_3$, известны только для 17 или 18 валентных электронов в расчёте на формульную единицу. Таким образом, устойчивость структурных типов «электронных» интерметаллидов определяется КВЭ. В ряде исследований было показано, что и физические свойства, такие как тип проводимости и магнитное поведение, «электронных» интерметаллидов также зависят от КВЭ. Почему существуют такие эмпирические правила и как с помощью теоретических подходов объяснить наблюдаемые закономерности – наиболее актуальные вопросы современной химии интерметаллидов.

В докладе будут рассмотрены основные классы «электронных» интерметаллидов, а также показаны фундаментальные взаимосвязи зонной структуры и свойств данных соединений.