

НЕОБЫЧНЫЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ В КРИСТАЛЛАХ С ДЫШАЩИМИ ПИРОХЛОРНЫМИ ПОДРЕШЕТКАМИ

Таланов М.В.,^a Таланов В.М.,^b Широков В.Б.^b

^aНИИ физики Южного федерального университета
344090 Ростов-на-Дону, Стачки 194, ЮФУ

^bЮжно-Российский государственный политехнический университет
346428 Новочеркасск, Просвещения 132, e-mail: valtalanov@mail.ru

^cЮжный научный центр РАН 344006 Ростов-на-Дону, Чехова 41

Теоретически изучены структурные механизмы фазовых переходов (реальных или виртуальных) в геометрически фрустрированных кристаллах MgTi_2O_4 , CuTi_2S_4 , $\text{CuZr}_{1.86}\text{S}_4$ и AlV_2O_4 . Снятие спинового (MgTi_2O_4 , CuTi_2S_4 , $\text{CuZr}_{1.86}\text{S}_4$) и зарядового (AlV_2O_4) вырождения, обусловленного геометрической фрустрацией, происходит в результате искажения решетки, атомного и орбитального упорядочения а также кластерообразования. В результате фазовых переходов образуются структуры с так называемыми “дышащими” пироклорными подрешетками. Так, в тетрагональной фазе MgTi_2O_4 образуются металлические пико- и наноструктуры: димеры Ti_2 , два вида спиральных нитей вдоль осей второго и четвертого порядков тетрагональной ячейки и двух видов одномерных нитей из ионов титана¹⁻³. В ромбоэдрических тиошпинелях CuTi_2S_4 и $\text{CuZr}_{1.86}\text{S}_4$ образуются гроздя димеров^{4,5}, в ромбоэдрической модификации AlV_2O_4 – тримеры⁶. Универсальный механизм образования тетраэдрических металлических кластеров в кристаллах с геометрически фрустрированными подрешетками предложен. Образование тетраэдрических металлических кластеров в упорядоченных шпинелях, упорядоченных лакунарных шпинелях, упорядоченных фазах Лавеса (структурный тип MgCu_4Sn) и упорядоченных пироклорах рассмотрено.

Литература

1. Schmidt M., Ratcliff W., Radaelli P. G., Refson K., Harrison N. M., Cheong S.W. Phys. Rev. Lett., 2004, 92, 056402.
2. Talanov V. M., Shirokov V. B., Ivanov V. V., Talanov M. V. Crystallography Reports, 2015, 60, 101.
3. Ivanov V.V., Talanov V.M., Shirokov V.B., Talanov M.V. Inorganic Materials, 2011, 47, 990.
4. Talanov M.V., Shirokov V.B., Talanov V.M. Phys. Chem. Chem. Phys., 2016, 18, 10600.
5. Talanov M.V. Crystal Growth and Design, 2018, 18, 3433.
6. Talanov M.V., Shirokov V.B., Avakyan L.A., Talanov V.M., Borlakov K.S. Acta Crystallogr. B., 2018, 74, 337.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-72-00030.