

Teoretycy z UW i IFJ wyjaśniają struktury krystaliczne monotlenków metali przejściowych

Monotlenki metali przejściowych *t.j.* związki chemiczne o wzorze MO stanowią cenne rudy metali; były one używane już w neolicie do barwienia ceramiki – a później także szkła. Te ważne materiały wykazują dużą różnorodność cech fizykochemicznych takich jak przewodnictwo elektronowe i termiczne czy cechy magnetyczne oraz optyczne, i znajdują one liczne zastosowania praktyczne. Znanych jest blisko dwadzieścia monotlenków metali przejściowych. Od dawna było wiadomo, że większość z nich krystalizuje w strukturze regularnej typu chlorku sodu (NaCl) – albo idealnej albo nieznacznie zniekształconej ze względu na oddziaływania magnetyczne. Ten ważny typ struktury przyjmowany jest przez mnóstwo związków nieorganicznych, szczególnie jonowych. Ale pięć tlenków: miedzi, srebra, palladu, platyny i rtęci wydawało się nie pasować do tej rodziny, gdyż krystalizują one w dużo bardziej złożonych strukturach o niższej symetrii. Czy jednak rzeczywiście nie mają one nic wspólnego ze swoimi regularnymi odpowiednikami?

W swym komunikacie dr Mariana Derzsi i Prof. Wojciech Grochala z Uniwersytetu Warszawskiego wraz z Prof. Przemysławem Piekarczykiem z Instytutu Fizyki Jądrowej w Krakowie opisali wysokiej jakości obliczenia teoretyczne dla rzeczonych pięciu związków. Kwantowomechaniczne studium oparte było o bardzo dokładne lecz kosztowne obliczenia oparte o hybrydową teorię funkcjonału gęstości. Każdy z pięciu badanych tlenków okazał się być niestabilny w strukturze typu NaCl i **dla każdego pojawiał się urojony mod fononowy w tym samym punkcie pierwszej strefy Brillouina, $L=(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$** . Właśnie ta niestabilność wiedzie do wszystkich typów struktur przyjmowanych w niskiej temperaturze przez w/wym. tlenki.

W ten sposób badaczom udało się wyjaśnić w jaki sposób złożone struktury krystaliczne pochodzą od prostego prototypu regularnego. To pozwoliło im zracjonalizować zauważone wcześniej podobieństwa strukturalne dla różnych tlenków metali przejściowych (M. Derzsi *et al.*, *Eur. J. Inorg. Chem.* (29): 5095-5102 2013). Co ciekawe, za dystorsje strukturalne odpowiedzialne są w każdym przypadku różne przyczyny sprzężenia elektron-fonon.

Model "niestabilności fononowej" jest jednak wg. autorów bardzo ogólny. Zostanie on teraz użyty do wyjaśnienia dużej liczby złożonych struktur krystalicznych pierwiastków i związków chemicznych.

Artykuł "*Structures of late transition metal monoxides from Jahn-Teller instabilities in the rock salt lattice*" ukaże się w *Physical Review Letters*. Obliczenia prowadzone na komputerach ICM UW z użyciem pakietu Medea zabrały ponad rok.

