

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ $\text{Fe}_{0.5}\text{Ti}(\text{S}, \text{Se})_2$
МЕТОДАМИ ТЕРМОРЕНТГЕНОГРАФИИ
И НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ**

Баглаева Ю.А., Селезнева Н.В.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Слоистая структура дихалькогенидов переходных металлов с общей формулой TX_2 (Т - металл, Х - халькоген) позволяет получать соединения с новыми свойствами путем интеркаляции, например, атомов 3d металлов, обладающих магнитным моментом. Предыдущие исследования показали, что наряду с интеркаляцией замещение по анионной подрешетке также приводит к изменениям структуры, электрических и магнитных свойств соединений.

Цель работы – изучение кристаллохимических особенностей соединений системы $\text{Fe}_{0.5}\text{Ti}(\text{S}, \text{Se})_2$ при различных температурах с помощью рентгеновской и нейтронной дифракции. Исследование кристаллической структуры соединений $\text{Fe}_{0.5}\text{Ti}(\text{S}, \text{Se})_2$ осуществляли на рентгеновском дифрактометре Bruker D8 ADVANCE с использованием термокамеры НТК-16 Anton Paar в температурном диапазоне 300 К – 850 К. Нейтронографические данные были получены в Институте Пауля Шеррера (Швейцария) в температурном диапазоне 2 К – 300 К. Измерения намагниченности в области высоких температур (до 1000 К) проводили с помощью вибромагнитометра Lake Shore VSM 7407.

Высокотемпературная терморентгенография показала, что при $T \sim 573$ К происходит изменение симметрии решетки с моноклинной на гексагональную, связанное с разупорядочением атомов железа и вакансий в катионной подрешетке. Во всем исследуемом температурном диапазоне наблюдается увеличение объема элементарной ячейки с ростом температуры. В области низких температур при охлаждении ниже температуры магнитного упорядочения ($T_N \sim 140$ К) выявлены анизотропные деформации кристаллической решетки, которые являются следствием магнитоупругих взаимодействий, при этом на температурной зависимости объема элементарной ячейки никаких аномалий не выявлено. По данным нейтронографического эксперимента, магнитный момент на атоме железа в магнитоупорядоченной области имеет значение порядка ~ 3 μ_B , что ниже ожидаемого значения 4 μ_B для иона Fe^{2+} . Такое различие объясняется участием 3d электронов Fe в образовании ковалентноподобных связей и гибридизацией с 3d состояниями титана и 3p состояниями серы. Из данных по магнитной восприимчивости в парамагнитной области получено, что значение эффективного магнитного момента μ_{eff} в расчете на атом Fe, зависит от температуры и варьируется в пределах 3.6 - 4.8 μ_B .

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 3.2916.2017/4.6).