**Структурные особенности и физические свойства диселенида титана с высоким содержанием железа**

строка

***Носова Н.М.1, Константинова Е.Н.2***

1младший научный сотрудник, к.ф.-м.н., 2студент, лаборант-исследователь

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: toporova.natalia@urfu.ru*

Дихалькогениды переходных металлов (ДПМ), представляющие собой обширный класс слоистых материалов, обладают впечатляющим разнообразием структурных, электронных и магнитных свойств, что делает их объектом интенсивного изучения в современной физике твердого тела. Исходное соединение, диселенид титана TiSe2, имеет слоистую кристаллическую структуру (структурный тип CdI2). Связь между слоями в блоках Se-Ti-Se является ковалентной, а между блоками осуществляется посредством слабого Ван-дер-Ваальсового взаимодействия, что обеспечивает квазидвумерный характер структуры [1]. Соединение TiSe2 интересно тем, что является одним из наиболее известных материалов благодаря существованию фазового перехода в состояние с волной зарядовой плотности (ВЗП) ниже 200 К [1]. Было обнаружено, что данный фазовый переход исчезает в соединениях *Mx*TiSe2 при малой концентрации внедренных (*M*) атомов (*x*<0.1). Было сделано предположение, что при дальнейшем увеличении содержания интеркаланта при *x* ≥ 0.25 может происходить возвращение перехода в состояние с ВЗП [2,3], что сопровождается появлениями аномалий на температурных зависимостях удельного сопротивления. Более того, в то время как соединения Ti*Ch*2 являются парамагнетиками Паули, интеркалированные соединения *Mx*Ti*Ch*2 демонстрируют широкое разнообразие магнитных состояний в зависимости от типа и концентрации атомов *M*. Например, соединения интеркалированные атомами Cr и Fe демонстрируют антиферромагнитное упорядочение при высоком содержании интеркаланта, в то время как для Mn*x*TiSe2 [2] состояние спинового или кластерного стекла наблюдается во всем диапазоне концентраций вплоть до *x* = 0.5, а соединения Ni*x*TiSe2 демонстрируют парамагнитное поведение для 0 < *x* < 0.5 [4].

В данной работе представлены результаты исследования кристаллической структуры и физических свойств диселенида титана с высоким содержанием внедренных атомов железа, полученных впервые.

Для получения соединений был применен метод твердофазного синтеза при температуре 800 °С. Аттестация фазового состава и исследование кристаллической структуры полученных соединений проводились методом рентгеновского дифракционного анализа с использованием дифрактометра Bruker D8 Advance. Для изучения кинетических свойств соединений проводились измерения температурных зависимостей электросопротивления стандартным четырехконтактным методом на поликристаллических спеченных образцах в интервале температур 15–300 К. Измерения намагниченности образцов выполнялись посредством PPMS DynaCool Т9 и на вибромагнетометре 7407 VSM.

В работе показано, что и соединение-матрица TiSe2, и железосодержащий образец Fe*x*TiSe2 (*x* ˃ 0.75) получены однофазными, но имеют различные кристаллические структуры. При увеличении атомов железа в соединении происходит смена пространственной группы от *P*3 ̅m*1* (*x* = 0) до *I*2/*m* (*x* ≥ 0.75), а также наблюдается упорядочение атомов Fe в сверхструктуру √3*a*0×*a*0×2*c*0 (где *a*0, *c*0 – параметры элементарной ячейки TiSe2). Измерения температурных зависимостей электросопротивления синтезированных поликристаллических образцов TiSe2 и Fe*x*TiSe2 выявило интересные особенности, связанные с переходами в состояние с волной зарядовой плотности. Полученный нами образец TiSe2 демонстрирует изменение электросопротивления при температуре около 185 К характерное для перехода в состояние с ВЗП [5] и который, как известно, подавляется малым содержанием железа. А, например, на зависимости *ρ*(*Т*) образца Fe0.9TiSe2 выявлена ярко выраженная аномалия в поведении сопротивления при *T* ~ 120 К и наличие гистерезиса, что может свидетельствовать о наличии перехода в состояние с ВЗП при высоком содержании железа. В результате анализа температурных и полевых зависимостей намагниченности было установлено, что в соединении Fe0.9TiSe2 возникает ферримагнитное состояние с температурой магнитного упорядочения *T*N ~ 154 К и с высоким значением коэрцитивной силы, которое достигает *H*С ~ 13 кЭ при *Т* = 2 К. Отрицательное значение парамагнитной температуры Кюри указывает на преобладание антиферромагнитного обменного взаимодействия между атомами железа в данном составе.

**Литература**

* + - 1. Di Salvo, F.J., Moncton, D.E., Waszczak, J.V. Electronic properties and superlattice formation in the semimetal TiSe2 // Phys. Rev. B. 1976, V. 14. p. 4321–4328.
      2. Baranov, N.V., Maksimov, V.I., Mesot, J., Pleschov, V.G., Podlesnyak, A., Pomjakushin, V., Selezneva, N.V. Possible reappearance of the charge density wave transition in MxTiSe2 compounds intercalated with 3d metals // J. Phys.: Condens. Matter. 2007, V. 19. p. 016005.
      3. Selezneva, N.V., Baranov, N.V., Sherokalova, E.M., Pleshchov, V.G., Kazantsev, V.A. Suppression and inducement of the charge-density-wave state in CrxTiSe2 // J. Phys.: Condens. Matter. 2016, V. 28. p. 315401.
      4. Baranov, N.V., Inoue, K., Maksimov, V.I., Ovchinnikov, A.S., Pleschov, V.G., Podlesnyak, A., Titov, A.N., Toporova, N.V. Ni-intercalation of titanium diselenide: effect on the lattice, specific heat and magnetic properties // J. Phys.: Condens. Matter. 2004, V. 16. p. 9243–9258.
      5. Rimmington, H.P.B., Balchin, A.A. The growth by iodine vapour transport techniques and the crystal structures of layer compounds in the series TiSxSe2−x, TiSxTe2−x, TiSexTe2−x // [Journal of Crystal Growth](https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-crystal-growth). 1974, V. 21. p. 171–181.