ВЛИЯНИЕ НЕСТЕХИОМЕТРИИ НА ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ TiSe₂₋₈

Озорнина А.С., Шерокалова Е.М., Селезнева Н.В. Уральский федеральный университет 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Соединение TiSe₂ имеет слоистую структуру, в которой слой титана расположен между двумя слоями селена, при этом атом металла (Ті) октаэдрически координирован шестью атомами халькогена (Se). Несмотря на огромное количество работ, первые из которых появились еще в начале 40-х годов XX века, многие вопросы, связанные с наблюдаемыми свойствами, до сих пор остаются открытыми и продолжают привлекать внимание исследователей. Так остается неясным является ли TiSe₂ полупроводником с очень маленькой непрямой щелью (0.2 эВ) или полуметаллом с очень маленьким непрямым перекрытием зон. Неопределенность может быть связана с достаточно широкой областью гомогенности этого соединения, которая, по разным данным, варьируется от 66.7 ат. % Se (TiSe₂) до 61.24–62.9 ат. % Se (TiSe_{1.57}-TiSe_{1.7}). Считается открытым вопрос и о природе возникновения состояния с волной зарядовой плотности, наблюдаемой в соединении TiSe₂ при температуре ниже 200 К. Экспериментально установлено, что приложение внешнего давления, отклонение от стехиометрии 1:2 (Ti:Se) или интеркалация малых количеств 3d-металла приводит к постепенному подавлению такого состояния.

Цель настоящей работы — синтез и комплексное исследование соединений $TiSe_{2-\delta}$ с различной степенью нестехиометричности (0 < $\delta \le 0.3$), а также железосодержащих соединений на их основе.

Исходные матрицы $TiSe_{2-\delta}$ в виде поликристаллических образцов были синтезированы с использованием метода твердофазных реакций. Необходимое количество Ti и Se запечатывались в вакуумных кварцевых трубках и равномерно нагревались до 800 °C со скоростью нагрева 0.1 С/мин. Установившуюся температуру поддерживали в течение 48 ч. Полученный материал в виде однородных гранул от фиолетового до темно-серого цвета перемалывали, повторно прессовали, вакуумировали, запечатывали в кварцевых трубках и отжигали (гомогенизировали) при 800 °C в течение 150 ч. Железосодержащие соединения также получали путем прямого смешения необходимых количеств полученной матрицы и элементарного гранулированного железа и отжига полученной смеси в вакуумированных ампулах при температуре 800 °C в течении 350 ч. с промежуточным однократным перетиранием и прессованием.

В результате рентгенографической аттестации, измерений температурных и полевых зависимостей намагниченности и электросопротивления синтезированных соединений получены концентрационные зависимости кристаллографических параметров, определены критические температуры наблюдаемых фазовых переходов, рассчитаны значения эффективного магнитного момента на атоме железа.