**Новые интерметаллиды MoSb2-xEx (E = Ga, Ge, Sn) структурного типа OsGe2**

***Пленкин Д.С., Верченко В.Ю., Шевельков А.В.***

*Студент, 5 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: danil.plenkin@chemistry.msu.ru*

Интерметаллические соединения представляют собой широкий класс неорганических веществ, богатый различными кристаллическими структурами. В то же время экспериментально доказано, что один и тот же структурный тип часто характеризуется строго определенным диапазоном количества валентных электронов на формульную единицу соединения. Существующая взаимосвязь между кристаллической и электронной структурой в конечном итоге определяет функциональные свойства веществ. Среди интерметаллических соединений можно выделить небольшую группу веществ, проявляющих аномальные неметаллические свойства. Как правило, в состав этих полупроводниковых интерметаллидов входят d-металл и элемент p-блока. Взаимодействие различных по симметрии и энергии d-орбиталей переходного металла и s- и p-орбиталей p-элемента приводит к формированию острых максимумом плотности состояний вблизи уровня Ферми, а в ряде случаев и к раскрытию энергетической щели. При определенном заполнении электронных энергетических уровней и попадании уровня Ферми в запрещенную зону соединение будет проявлять неметаллические свойства. Данная особенность электронной структуры и связанное с ними неметаллическое поведение данной группы интерметаллидов позволяет рассматривать эти вещества в качестве перспективных термоэлектрических материалов [1].

Структурный тип OsGe2,помимобинарных интерметаллических соединений (TaP2 [2] и NbSb2 [3]), включает и тройные фазы (TiMoAs4, TiMoSb4 [3]), обладающие 15-16 валентными электронами на формульную единицу. В то же время интерметаллид MoSb2, имеющий 16 электронов на формульную единицу, не может быть синтезирован из простых веществ. При построении зонной структуры данного гипотетического соединения в структурном типе OsGe2 уровень Ферми находится выше по энергии характерного минимума плотности состояний, что позволяет выдвинуть гипотезу о возможном гетеровалентном замещении сурьмы на атом другого p-элемента с меньшим числом валентных электронов для уменьшения заполнения электронных энергетических уровней и смещения уровня Ферми. Синтезы, проведенные в системах Mo-Sb-E (E = Ga, Ge, Sn), подтверждают наличие фазы на основе MoSb2 структурного типа OsGe2. При уточнении кристаллической структуры показано, что атом p-элемента замещает атом сурьмы только в одной ее кристаллографической позиции.

В рамках данной работы мы сообщаем о существовании квазибинарных соединений MoSb2-xSnx, MoSb2-xGax и MoSb2-xGex структурного типа OsGe2, а также приводим их синтез, кристаллическую и электронную структуру.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-15-2021-1353.*

**Литература**

1. Likhanov M. S., Shevelkov A. V. // Rus. Chem. Bull. 2020. Vol. 69. P. 2231-2255.

2. Lomnytska Ya. et al. // Journal of Solid State Chemistry. 2019. Vol. 277. P. 77-82.

3. Derakhscan S. et al. // Inorg. Chem. 2007. Vol. 46. P. 1459-1463.