**Кристаллическое и электронное строение и магнитные свойства ScFeGe2-xSnx**

***Шуев Н.В.***

*Аспирант, 2 г.о.*

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

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: nikita.shuev@chemistry.msu.ru*

Интерметаллические соединения – это обширная группа неорганических соединений, обладающих разнообразными физическими свойствами и многообразием кристаллической структуры. Среди них особый интерес представляют германиды железа, для которых свойственно многообразие структур полиэдров из атомов железа и германия, приводящие в совокупности с конкуренцией магнитных взаимодействий к обширному спектру физических свойств [1]. При этом некоторый семейства тройных соединений остаются малоизученными. В частности, для семейства RFeGe2 (R- металл 3 и 4 групп)отсутствуют достоверные данные о кристаллической структуре и физических свойствах.

В данной работе нами были проведены попытки синтеза монокристаллов соединения ScFeGe2 с использованием избытка олова в качестве флюса. В результате чего были получены монокристаллы твердого раствора ScFeGe2-xSnx. Анализ элементного состава методом ЛРСА показал, что Ge и Sn содержатся в отобранном кристалле в соотношении 97:3, что соответствует *x* = 0.06. Рентгеноструктурный анализ данного кристалла показал, что соединение принадлежит структурному типу ZrCrSi2 и кристаллизуется в орторомбической сингонии в пространственной группе *Pbam* [2]. Подрешетка атомов железа в структуре ScFeGe2-xSnx состоит из слоев линейных чередующихся фрагментов из трех атомов железа соединенных через отдельные атомы Ge, а также через гантель Ge-Ge в общий трехмерный каркас, в пустотах которого расположены атомы Sc. Уточнение заселенности атомов p-элементов показало, что атомы олова занимают только одну позицию, окруженную наименьшим количеством атомов скандия. Используя полученные структурные данные, были проведены теоретические расчеты немагнитного варианта электронной структуры в приближении *x* = 0. Результаты данных расчетов показали высокую плотность состояний на уровне Ферми, что указывает на возможность магнитного упорядочения. Кроме того, расчеты показывают высокую степень ковалентности для взаимодействий Ge-Ge и Ge-Fe.

Магнитные измерения монокристаллов ScFeGe2-xSnx проводились в температурном интервале от 2 до 300 К в полях с напряженностью до 50 кЭ по направлению роста кристаллов и перпендикулярно ему. Данные магнитных измерений говорят об отсутствии явных магнитных переходов. Соединение демонстрирует слабый магнитный отклик даже при высокой напряженности поля, что может быть связано как с отсутствием значительного магнитного момента на атомах железа, так и с сильными антиферромагнитными взаимодействиями, которые характерны для германидов железа с высоким содержанием германия.

**Литература**

1. Khalaniya R.A., Shevelkov A.V. When two is enough: On the origin of diverse crystal structures and physical properties in the Fe-Ge system // J. Solid State Chem. 2019. Vol. 270. P. 118-128.

2. Ярмолюк И.П., Сикирица М., Аксельруд Л.Г., Лысенко Л.А., Гладышевский Е.И. Кристаллическая структура соединения ZrCrSi2 *//* Кристаллография. 1982. Vol.27. P. 1090–1093.