**Особенности кристаллического строения твердого раствора Zr4+xFe4Ge7-2x (x = 0-0.5)**

***Шуев Н.В.***

*Аспирант, 3 год обучения*

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

*химический факультет, Москва, Россия*

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

Интерметаллические соединения представляют собой неорганические вещества, образующиеся в результате химической связи двух или более элементов-металлов или металлоидов, образующих совершенно новую структуру, отличную от структур металлов-компонентов. В отличие от традиционных сплавов, интерметаллические соединения обладают четким упорядоченным расположением атомов с четко определенной стехиометрией. Они часто демонстрируют уникальные физические, химические и механические свойства, которые могут включать особые электронные или магнитные свойства, высокотемпературную стабильность, исключительную твердость, память формы и т. п. Среди них особый интерес представляют тройные системы R-T-E, где R и T — два разных переходных металла с собственной подструктурой, а Е — металлоид. Исходя из многообразия интерметаллических структур германидов железа, большого обилия полиэдров на их основе, приводящих в совокупности с конкуренцией магнитных взаимодействий к обширному спектру физических свойств [1], нами в ходе работы в качестве T и E элемента были выбраны железо и германий, а в качестве элемента R — металлы триады 4 группы. Одними из малоизученных семейств интерметаллидов в этой системе являются R4Fe4Ge7 (R — металл 4 группы) структурного типа Zr4Co4Ge7 [2]. В частности, отсутствуют достоверные данные о кристаллической структуре и физических свойствах для данных соединений.

В настоящей работе нами были проведены попытки синтеза монокристаллов Zr4Fe4Ge7 с использованием избытка олова в качестве флюса. Исходные элементы с соотношением Zr:Fe:Ge:Sn = 1:1:3:35 помещали в алундовый тигель и вакуумировали в кварцевой ампуле с последующим синтезом в резистивной программируемой печи. В результате чего были получены прямоугольные вытянутые кристаллы. Рентгеноспектральный микроанализ полученных образцов в совокупности с рентгенофазовым анализом порошка из перетертых кристаллов показал, что полученные кристаллы близки по химическому составу и строению к Zr4Fe4Ge7. Проведенный нами рентгеноструктурный анализ при этом указывает на значимые отличия в строении и составе полученного соединения от литературных данных, а уточненный соответствует формуле Zr4.5Fe4Ge6. В структуре Zr4.5Fe4Ge6 происходит замещение определенных гантелей из атомов германия на атом циркония, что приводит к понижению симметрии от тетрагональной *I*4/mmm в Zr4Fe4Ge7 к орторомбической *I*mmm. Анализ полученных с помощью дуговой плавки поликристаллических образцов указывает также на наличие непрерывной области твердого раствора Zr4+xFe4Ge7-2x между Zr4Fe4Ge7 и Zr4.5Fe4Ge6, в котором происходит постепенное замещение гантелей Ge2 на атом Zr. Особенности кристаллического строения полученного твердого раствора и структурных превращений на разрезе Zr4Fe4Ge7-Zr4.5Fe4Ge6 будут подробно обсуждены в докладе.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант № 22-13-00006.*

**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. Jeitschko W., Jordan A.G., Beck P.A. V and E Phases in Ternary Systems with Transition Metals and Silicon or Germanium // Trans. Metall. Soc. AIME. 1969. Vol. 245. P. 335-339.