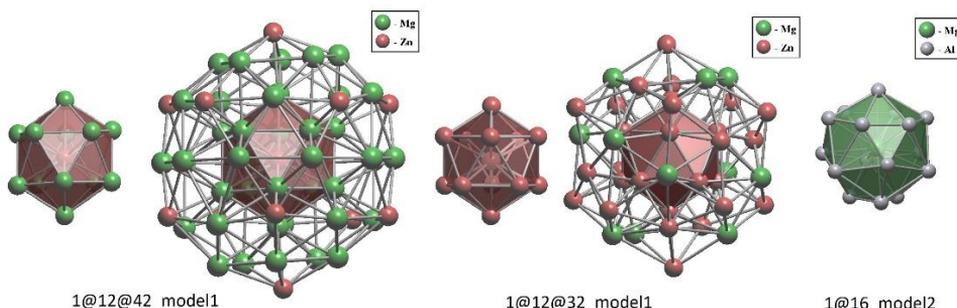


## КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТАБИЛЬНЫХ ФАЗ В СИСТЕМЕ Mg-Al-Zn

*Солодовникова М.А., Егорова Е.М., Блатова О.А.*  
Самарский государственный технический университет  
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244

В работе проведен кристаллохимический анализ фаз в системе Mg – Al – Zn. В рамках кристаллохимического анализа из базы данных ICSD (2022\_2), содержащей информацию о 212600 неорганических соединениях, с помощью программного пакета для анализа геометрических и топологических свойств периодических структур ToposPro было отобрано 15 интерметаллидов, образованных Mg, Al, Zn. Для найденных соединений определены топологии сеток интерметаллида и проанализированы количество и химический состав представителей с аналогичной топологией связей. В результате анализа выявлено 13 топологических типов. Среди которых определены фазы Лавеса с топологией  $mgz-x$  и  $\alpha$ -Mn.

Для каждой структуры системы проведено нанокластерное моделирование, в процессе которого разбили структуры на набор нанокластеров, состоящих из нескольких атомных оболочек. Нанокластеры рассматриваются как устойчивые группировки, образующиеся в расплаве перед кристаллизацией. Среди смоделированных нанокластеров были определены известные полиэдры, отвечающие следующим моделям:  $1@12@42$  кластер Маккея,  $1@12@32$  кластер Бергмана и  $1@16$  многогранник Фриауфа (см. рисунок).



слева кластер Маккея, состава  $Zn@Mg_{12}@Mg_{30}Zn_{12}$  в соединении [104901];  
Посередине кластер Бергмана, состава  $Zn@Zn_{12}@Mg_{12}Zn_{20}$  структура [104898];  
Справа многогранник Фриауфа, состава  $Mg@Al_{16}$  структура [608396]

Проведена апробация механохимического синтеза интерметаллида  $Mg_{17}Al_{12}$ . Механосинтез проводили в планетарной шаровой мельнице Retsch PM100 в атмосфере аргона. РФА показал рефлексы незначительной интенсивности фазы интерметаллида  $Mg_{17}Al_{12}$  и фазы алюминия и магния.

*Работа выполнена в рамках гранта РНФ (проект № 22-23-00322).*