**Многокомпонентные германиды со структурой производной от Th6Mn23**

***Лукачева С.М., Захарова Е.Ю., Маханёва А.Ю., Нестеренко С.Н., Казаков С.М., Кузнецов А.Н.***

*Студент, 5 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: sofiia.lukacheva@chemistry.msu.ru*

Интерметаллические системы активно исследуются в рамках неорганической химии и химии твёрдого тела. Они играют ключевую роль в синтезе новых соединений, изучении фазовых равновесий и физических свойств, а также в поиске новых функциональных материалов. Умение синтезировать интерметаллические соединения (ИМС) с определённым составом и структурой представляет собой важную задачу и создаёт предпосылки для разработки функциональных материалов с заданными характеристиками. Однако, несмотря на многочисленные исследования, интерметаллиды пока находят ограниченное практическое применение, что связано в основном с отсутствием чётких научных основ для их использования. В то же время металлические сплавы широко применяются как материалы, при этом многие материалы, называемые «сплавами», содержат ИМС или сами являются интерметаллическими соединениями.

G-фазы представляют собой интерметаллические соединения со структурой типа Mg6Cu16Si7, которая является производной от структуры Th6Mn23. Эти фазы способны улучшать жаропрочность и жаростойкость сплавов, однако их влияние до конца не изучено. Структура Mg6Cu16Si7 связана со структурой Th6Mn23, отличаясь упорядоченным замещением части позиций атомов марганца атомами р-элемента. В обеих структурах присутствует по 5 занятых кристаллографических позиций, а также свободная октаэдрическая пустота. Если в незанятую позицию структуры Mg6Cu16Si7 внедрить атом четвёртого элемента, можно получить структурный тип U6Fe16Si7C или Ti6Ni16Si8.

В этом исследовании были рассмотрены системы T’6Т’’16Ge7, T’6Т’’16Ge7Si (T’ = металл с 4 по 7 группу, T’’ = металл с 8 по 10 группу). Навески подвергали дуговому сплавлению или искровому спеканию (оборудование: Edmund Buhler MAM-1 и LABOX-625). Вакуумированные кварцевые ампулы с образцами подвергали отжигу в печах при 800-850 ºС на протяжении 5–7 дней. Полученные образцы перетирали в агатовой ступке и регистрировали рентгенограммы на порошковом дифрактометре Huber Image Plate G670 (излучение СuKα1, λ = 1.540598 Ǻ, Ni фильтр, монохроматор – германий), геометрия на пропускание). Рентгенограммы, содержащие наименьшее количество примесей, были проиндицированы с параметрами G-фаз (Ti6Ni16Ge7, Ta6Ni16Ge7, Nb6Ni16Ge7, Mn6Ni16Ge7), а также подвергнуты полнопрофильныму уточнению методом Ритвельда, которое подтвердило модели структур G-фаз: Ti6Ni16Ge7, Ta6Ni16Ge7 и Mn6Ni16Ge7.По данным определения структуры тем же методом показано существование новой фазы Nb6Ni16Ge7Si структурного типа U6Fe16Si7C (*a* = 11.4867(3) Ǻ, Rexp = 3.43 %, Rwp = 7.58 %, Rp = 5.33 %, GOF = 2.21).

Охарактеризовано электронное строение Ti6Ni16Ge7, Mn6Ni16Ge7, а также структур с внедрением атома кремния. Квантовохимические расчёты зонной структуры проводились на уровне теории функционала плотности (DFT) c использованием метода псевдопотенциалов (PAW).

*Работа выполнена при поддержке РНФ (грант 25-23-00343).*