

**КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ:  
НОВЫЕ ДВУХСЛОЙНЫЕ НАНОКЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ  
K61 =  $\text{In}@16(\text{Ce}_4\text{In}_{12})@44(\text{Ce}_4\text{In}_{12}\text{Pd}_{28})$  И K42 =  $0@8(\text{In}_8)@34(\text{Ce}_6\text{Pd}_4\text{In}_{24})$   
В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ  $\text{Ce}_{80}\text{Pd}_{128}\text{In}_{284}\text{-}cF492$**

© 2021 г. В. Я. Шевченко<sup>1, \*</sup>, В. А. Блатов<sup>2</sup>, Г. Д. Илюшин<sup>2, 3</sup>

<sup>1</sup>Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН,  
наб. Макарова, 2, Санкт-Петербург, 199034 Россия

<sup>2</sup>Межвузовский научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению,  
Самарский технический университет, ул. Молодогвардейская, 244, Самара, 443011 Россия

<sup>3</sup>Федеральный научно-исследовательский центр “Кристаллография и фотоника”,  
Ленинский пр., 59, Москва, 119333 Россия

\*e-mail: shevchenko@isc.nw.ru

Поступила в редакцию 29.12.2020 г.

После доработки 26.01.2021 г.

Принята к публикации 07.06.2021 г.

С помощью компьютерных методов (пакета программ TorosPro) осуществлен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры интерметаллида  $\text{Ce}_{80}\text{Pd}_{128}\text{In}_{284}\text{-}cF492$  ( $a = 21.838 \text{ \AA}$ ,  $V = 10414.79 \text{ \AA}^3$ , пр. группа  $F-43m$ ). Установлены два новых нанокластера-прекурсора с симметрией  $-43m$ : двухслойный нанокластер K61 состава  $\text{In}@16(\text{Ce}_4\text{In}_{12})@44(\text{Ce}_4\text{In}_{12}\text{Pd}_{28})$  с внутренним центрированным полиэдром Фриауфа  $\text{In}@16(\text{Ce}_4\text{In}_{12})$  и с 44 атомами во внешней оболочке и двухслойный нанокластер K42 состава  $0@8(\text{In}_8)@34(\text{Ce}_6\text{Pd}_4\text{In}_{24})$  с внутренним полиэдром  $\text{In}_8$  и с 34 атомами во внешней оболочке. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из нанокластеров-прекурсоров K61 и K42 в виде: первичная цепь  $\rightarrow$  микрослой  $\rightarrow$  микрокаркас. В качестве спейсеров, занимающих пустоты в 3D каркасе из нанокластеров K-61 и K-42, установлены  $\text{In}_4$ -тетраэдры с симметрией  $-43m$ , а также атомы-спейсеры Ce и In.

**Ключевые слова:** интерметаллид  $\text{Ce}_{80}\text{Pd}_{128}\text{In}_{284}\text{-}cF492$ , самосборка кристаллической структуры, нанокластеры-прекурсоры K61 =  $\text{In}@16(\text{Ce}_4\text{In}_{12})@44(\text{Ce}_4\text{In}_{12}\text{Pd}_{28})$  и K42 =  $0@8(\text{In}_8)@34(\text{Ce}_6\text{Pd}_4\text{In}_{24})$

DOI: 10.31857/S0132665121050139

## ВВЕДЕНИЕ

Данные по числу химических элементов  $M$ , образующих интерметаллиды в системах  $A-M1-M2$ , с атомами  $A = \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$  и  $\text{Ln}$  ( $\text{La-Lu}$ ), различаются как по числу соединений в этих трех группах, так по числу химических элементов  $M$ , образующих тройные интерметаллиды. Так, в 103 тройных системах  $\text{Na-M1-M2}$  установлено образование и кристаллическая структура 176 интерметаллидов с участием 32 химических элементов; в 179 тройных системах  $\text{Ca-M1-M2}$  найдены 588 интерметаллидов с участием 46 химических элементов; в 276 тройных системах  $\text{Ce-M1-M2}$  синтезированы 1181 интерметаллида с участием 53 химических элементов [1, 2]. Многочисленные тройные интерметаллиды образуются с участием атомов  $M = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Pd}, \text{Ce}$ , а также  $\text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$  и  $\text{Ge}, \text{Sn}$ . В 17 тройных системах  $\text{Ce-In-M}$  установле-

**Таблица 1.** Система Ce–Pd–In. Кристаллохимические данные интерметаллидов

Интерметаллид	(In + Pd)/Ce	Группа симметрии	Параметры элементарной ячейки, Å и градусы,	$V, \text{Å}^3$	Индекс Пирсона
Ce <sub>11</sub> Pd <sub>4</sub> In <sub>9</sub> [3]	1.18	<i>Cmmm</i> (65)	15.431, 22.516, 3.763	1307.4	<i>oS48</i>
Ce <sub>2</sub> InPd <sub>2</sub> [4]	1.5	<i>P4/mbm</i> (127)	7.813, 7.813, 3.916	239.0	<i>tP10</i>
CePdIn [5]	2	<i>P-62m</i> (189)	7.704, 7.704, 4.019	206.6	<i>hP9</i>
Ce <sub>6</sub> Pd <sub>12</sub> In <sub>5</sub> [6]	2.83	<i>P6<sub>3</sub>/mcm</i> (193)	8.292, 8.292, 16.051	955.8	<i>hP46</i>
CeInPd <sub>2</sub> [7]	3	<i>P6<sub>3</sub>/mmc</i> (194)	4.627, 4.627, 9.198	170.5	<i>hP8</i>
CePdIn <sub>2</sub> [8]	3	<i>Cmcm</i> (63)	4.621, 10.694, 7.455	368.4	<i>oS16</i>
Ce <sub>3</sub> PdIn <sub>11</sub> [9]	4	<i>P4/mmm</i> (123)	4.685, 4.685, 16.846	369.7	<i>tP15</i>
Ce <sub>5</sub> Pd <sub>2</sub> In <sub>19</sub> [9]	4.2	<i>P4/mmm</i> (123)	4.701, 4.701, 29.136	643.9	<i>tP26</i>
Ce <sub>2</sub> PdIn <sub>8</sub> [9]	4.5	<i>P4/mmm</i> (123)	4.690, 4.690, 12.185	268.0	<i>tP11</i>
Ce <sub>2</sub> Pd <sub>4</sub> In <sub>5</sub> [10]	4.5	<i>P2<sub>1</sub>/m</i> (11)	9.552, 4.614, 10.582, 90.00, 102.56, 90.00	455.2	<i>mP22</i>
CePd <sub>3</sub> In <sub>2</sub> [11]	5	<i>Pnma</i> (62)	10.265, 4.623, 9.878	468.8	<i>oP24</i>
CePdIn <sub>4</sub> [12]	5	<i>Cmcm</i> (63)	4.535, 16.856, 7.308	558.6	<i>oS24</i>
Ce <sub>80</sub> Pd <sub>128</sub> In <sub>284</sub> [13]	5.15	<i>F-43m</i> (216)	21.838, 21.838, 21.838	10414.8	<i>cF492</i>
Ce <sub>4</sub> Pd <sub>10</sub> In <sub>21</sub> [14]	5.25	<i>C2/m</i> (12)	23.082, 4.525, 19.448, 90.00, 133.40, 90.00	1475.9	<i>mS70</i>
CePd <sub>2</sub> In <sub>4</sub> [15]	6	<i>Pnma</i> (62)	18.449, 4.565, 7.415	624.4	<i>oP28</i>
CePd <sub>2</sub> In <sub>4</sub> [16]	6	<i>Pmc2<sub>1</sub></i> (26)	4.572, 9.920, 33.017	1497.5	<i>oP70</i>

но образование 118 интерметаллидов, из них 16 образуется с участием атомов Pd (табл. 1), 13 – с атомами Pt, и 11 – с атомами Ni и Cu. По одному интерметаллиду образуются атомами  $M = \text{La, Mn, Zn}$ , по два – с атомами  $M = \text{Y, Sn, Co}$ .

Кристаллохимической особенностью строения интерметаллидов в системах Ce–In– $M$ , является образование кристаллических структур с одним и двумя небольшими значениями вектора трансляций 3.8–4.8 Å. В системах с участием атомов Ni такими небольшими векторами трансляций характеризуются все 11 кристаллических структур, в системах с участием атомов Pt – 11 из 13 кристаллических структур, а в системах с участием атомов Pd – 14 из 16 кристаллических структур (табл. 1).

Наиболее кристаллохимически сложным (и не имеющим аналогов) является интерметаллид Ce<sub>80</sub>Pd<sub>128</sub>In<sub>284</sub>-*cF492* с параметрами кубической ячейки:  $a = 21.838 \text{ Å}$ ,  $V = 10414.79 \text{ Å}^3$ , пр. пр. группа *F-43m* [13]. В настоящей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры Ce<sub>80</sub>Pd<sub>128</sub>In<sub>284</sub>-*cF492*. Установлены новые двухслойные кластеры-прекурсоры K61 и K42, участвующие в самосборке кристаллической структуры интерметаллида. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь → слой → каркас. Работа продолжает исследования [18–25] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супраполиэдрическом уровне и геометрического и топологического анализа кристаллических структур с применением современных компьютерных методов.

**Таблица 2.**  $Ce_{80}Pd_{128}In_{284}$ . Координационные последовательности атомов

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		$N_1$	$N_2$	$N_3$	$N_4$	$N_5$
Pd1	1Pd + 5In + 4Ce	10	52	110	197	326
Pd2	8In	8	33	98	175	293
Pd3	6In + 4Ce	10	47	100	197	342
In1	2Pd + 4In + 4Ce	10	53	117	203	331
In2	9In + 3Ce	12	53	124	206	327
In3	4Pd + 3In + 4Ce	11	50	112	197	333
In4	2Pd + 8In + 2Ce	12	47	106	202	314
In5	3Pd + 6In + 3Ce	12	48	118	192	331
In6	4Pd + 6In + 3Ce	13	48	117	190	327
In7	9In + 3Ce	12	50	108	218	320
In8	1Pd + 9In + 3Ce	13	53	111	209	331
In9	4Pd + 6In + 3Ce	13	44	103	203	336
In10	12In + 4Ce	16	50	120	200	358
Ce1	6Pd + 9In	15	44	109	218	315
Ce2	4Pd + 14In	18	53	115	215	321
Ce3	6Pd + 12In	18	47	115	212	327
Ce4	7Pd + 10In	17	45	113	220	311

### МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ TorosPro [16], позволяющего проводить многоцелевое исследование кристаллической структуры в автоматическом режиме, используя представление структур в виде “свернутых графов” (фактор-графов). Данные о функциональной роли атомов при образовании кристаллической структуры получены расчетом координационных последовательностей, т.е. наборов чисел  $\{N_k\}$ , где  $N_k$  – число атомов в  $k$ -ой координационной сфере данного атома. Полученные значения координационных последовательностей атомов в 3D-сетках, приведены в табл. 1, в которой также даны число и типы соседних атомов в ближайшем окружении, т.е. в первой координационной сфере атома. Алгоритм разложения в автоматическом режиме структуры интерметаллида, представленного в виде свернутого графа на кластерные единицы приведен в работах [18–20].

#### *Самосборка кристаллической структуры $Ce_{80}Pd_{128}In_{284}$ -сF492*

Использованный нами метод моделирования кристаллической структуры основан на определении иерархической последовательности ее самосборки в кристаллографическом пространстве [18–20]. На первом уровне самоорганизации системы определяется механизм формирования первичной цепи структуры из нанокластеров 0-уровня, сформированных на темплатной стадии химической эволюции системы, далее – ме-

**Таблица 3.** Нанокластер К61. Атомы, формирующие внутренний полиэдр Фриауфа  $K17 = 1@16$  и 44-атомную оболочку

Нанокластер $1@16@44$	
Полиэдр Фриауфа	Оболочка
1 In10	4 Ce3
4 Ce4	12 In3
12 In1	24 Pd1
	4 Pd3
In@16(Ce <sub>4</sub> In <sub>12</sub> )	@44(Ce <sub>4</sub> In <sub>12</sub> Pd <sub>28</sub> )
Всего 61 атом	

**Таблица 4.** Нанокластер К42. Атомы, формирующие внутренний полиэдр  $K8 = 0@8$  и 34-атомную оболочку

Нанокластер $0@8@34$	
Полиэдр K8	Оболочка
4 In2	6 Ce2
4 In8	12 In4
	12 In5
	4 Pd2
0@8(In <sub>8</sub> )	@34(Ce <sub>6</sub> Pd <sub>4</sub> In <sub>24</sub> )
Всего 42 атома	

ханизм самосборки из цепи микрослоя (2-ой уровень) и затем из микрослоя – трехмерного микрокаркаса структуры (3-й уровень).

#### *Кристаллографические данные $Ce_{80}Pd_{128}In_{284}-cF492$*

Пространственная группа  $F-43m$  (но. 216) характеризуется позициями с точечной симметрией:  $-43m$  (4a, 4b, 4c, 4d),  $3m$  (16e) и др. В табл. 2 приведено локальное окружение атомов Ce, Pd, In и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке. Для атомов Ce значения координационных чисел КЧ = 15, 17, 18 (два атома), атома Pd – 8, 10 (два атома), и In – 10, 11, 12 (4 атома), 13 (3 атома), 16 (1 атом).

Метод полного разложения 3D фактор-графа структуры на кластерные подструктуры был использован для определения каркас-образующих нанокластеров кристаллической структуры. Число вариантов разложения на кластерные подструктуры с числом выделенных кластеров, равным 1, 2, 3, 4, 5, 6 и 7 составило 1, 1, 26, 77, 138, 134, 49 соответственно. В результате установлены образующие 3D упаковку каркас-образующие нанокластеры К61 и К42 (табл. 3 и 4). Двухслойный нанокластер К61 с внутренним полиэдром Фриауфа In@16(Ce<sub>4</sub>In<sub>12</sub>) и с 44 атомами Ce<sub>4</sub>In<sub>12</sub>Pd<sub>28</sub> во второй оболочке находится в позиции 4a (рис. 1a). Двухслойный нанокластер К42 с внутренним полиэдром In<sub>8</sub> и с 34 атомами (Ce<sub>6</sub>Pd<sub>4</sub>In<sub>24</sub>) в оболочке находится в позиции 4b (рис. 1б). В пустотах каркаса в позициях 4c и 4d расположены In<sub>4</sub>-тетраэдры. В качестве спейсеров фигурируют атомы Ce1 и In6.

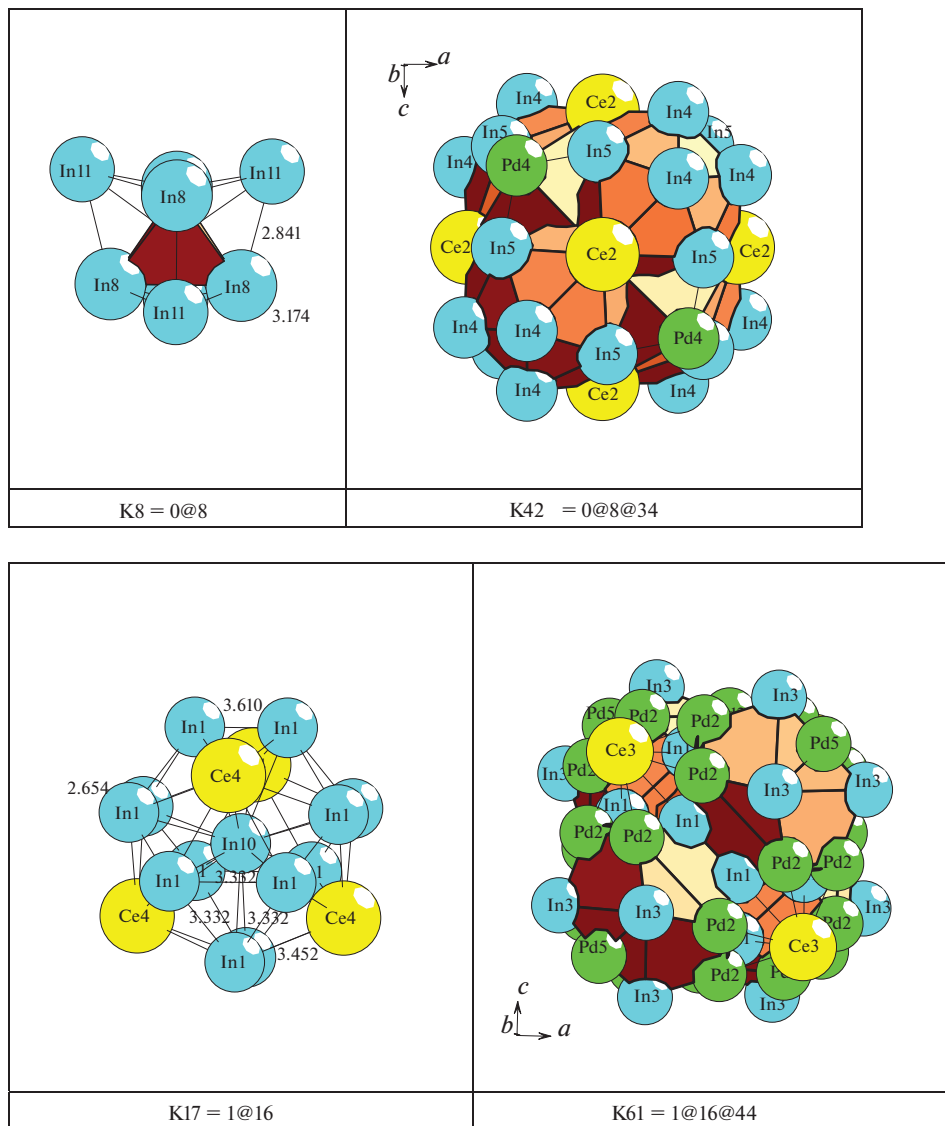


Рис. 1.  $Ce_{80}Pd_{128}In_{284}$ . Нанокластерные структуры.

*Самосборка кристаллической структуры  $Ce_{80}Pd_{128}In_{284}$ -сF492*

**Первичная цепь.** Самосборка первичных цепей происходит при связывании нанокластеров K61 с K42 в направлении [100] (рис.2). Расстояние между центрами нанокластеров соответствует половине длины вектора трансляции  $a/2 = 10.919 \text{ \AA}$ .

**Самосборка слоя.** Образование микрослоя  $S_3^2$  происходит при связывании параллельно расположенных первичных цепей в плоскости (001) (рис. 3). На этой стадии в пустотах микрослоя происходит локализация  $In_4$ -тетраэдров, и атомов-спейсеров Ce1

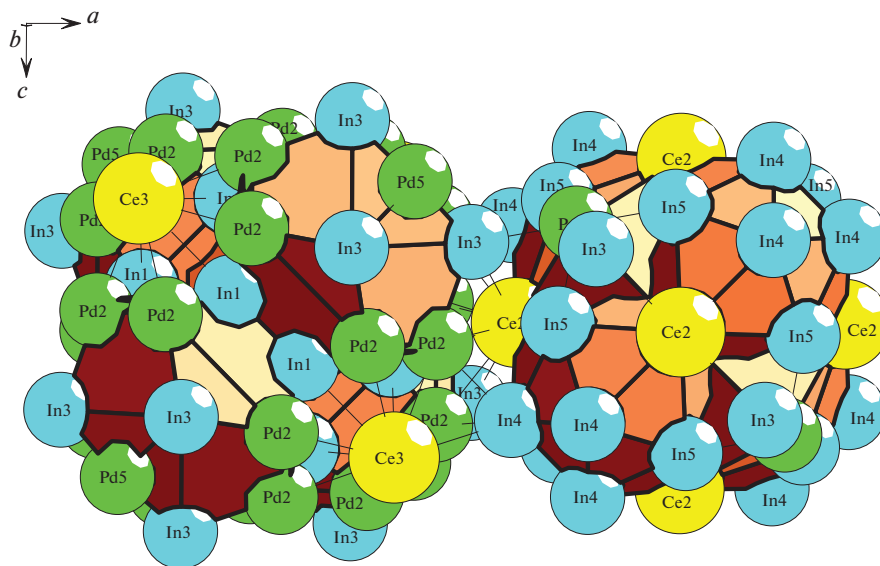


Рис. 2.  $\text{Ce}_{80}\text{Pd}_{128}\text{In}_{284}$ . Механизм комплементарного связывания нанокластеров К61 и К42 при образовании первичной цепи.

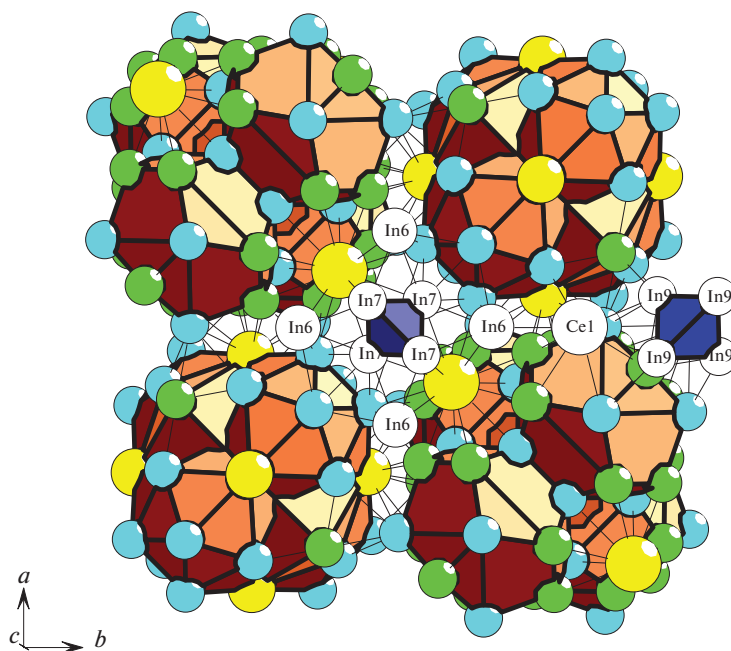


Рис. 3.  $\text{Ce}_{80}\text{Pd}_{128}\text{In}_{284}$ . Микрослой, образованный из нанокластеров К61 и К42.

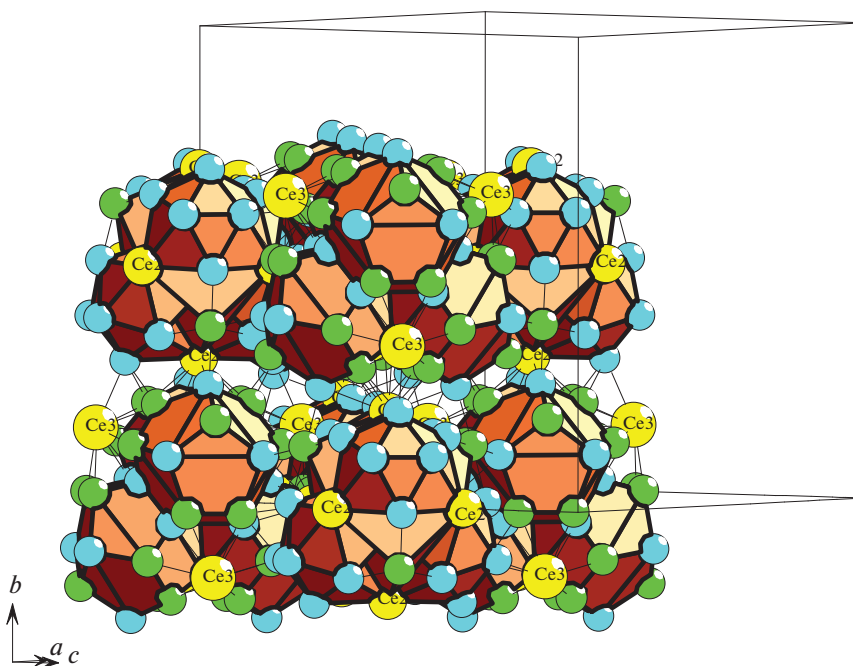


Рис. 4.  $\text{Ce}_{80}\text{Pd}_{128}\text{In}_{284}$ . Микрокаркас из двух микрослоев, состоящих из связанных нанокластеров K61 и K42.

и In6 (рис. 3). Расстояние между центрами кластеров из соседних цепей в направлениях [100] и [010] соответствует длинам векторов  $a/2 = b/2 = 10.919 \text{ \AA}$ .

**Самосборка каркаса.** Микрокаркас структуры  $S_3^3$  формируется при связывании двух микрослоев в направлении [001]. Расстояние между микрослоями определяет длину вектора трансляции  $c/2 = 10.919 \text{ \AA}$  (рис. 4).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Самосборка каркасной структуры интерметаллида  $\text{Ce}_{80}\text{Pd}_{128}\text{In}_{284}$ -*cF492* осуществляется с участием новых двухслойных нанокластеров-прекурсоров  $\text{K61} = \text{In}@16(\text{Ce}_4\text{In}_{12})@44(\text{Ce}_4\text{In}_{12}\text{Pd}_{28})$  и  $\text{K42} = 0@8(\text{In}_8)@34(\text{Ce}_6\text{Pd}_4\text{In}_{24})$ . Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры из нанокластеров-прекурсоров K61 и K42 в виде: первичная цепь  $\rightarrow$  микрослой  $\rightarrow$  микрокаркас. В качестве спейсеров, занимающих пустоты в 3D каркасе из нанокластеров K61 и K42, установлены  $\text{In}_4$ -тетраэдров с симметрией  $-43m$ , а также атомы Ce и In.

Нанокластерный анализ и моделирование самосборки кристаллических структур выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ № 19-02-00636) и Минобрнауки РФ в рамках выполнения работ по государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, топологический анализ выполнен при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания № 0778-2020-0005.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Inorganic crystal structure database (ICSD). Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ), Germany and US National Institute of Standard and Technology (NIST), USA.
2. *Villars P., Cenzual K.* Pearson's Crystal Data-Crystal Structure Database for Inorganic Compounds (PCDIC) ASM International: Materials Park, OH.
3. *Sojka L., Demchyina M., Belan B., Manyako M., Kalychak Ya.* New compounds with  $\text{Nd}_{11}\text{Pd}_4\text{In}_9$  structure type in the systems RE-Pd-In (RE = La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy) // *Intermetallics*. 2014. V. 49. P. 14–17.
4. *Giovannini M., Michor H., Bauer E., Hilscher G., Rogl P., Ferro R.* Structural chemistry, magnetism and thermodynamic properties of  $\text{R}_2\text{Pd}_2\text{In}$  // *J. Alloys Compd.* 1998. V. 280. P. 26–38.
5. *Tursina A.I., Nesterenko S.N., Seropegin Yu.D.* Intermetallic  $\text{CePdIn}$  // *Acta Crystallogr. Sect. E: Struct. Rep. Online* 2004. V. 60. P. i64–i65.
6. *Nesterenko S.N., Tursina A.I., Noel H., Seropegin Y.D.* Single crystal investigation of  $\text{Ce}_6\text{Pd}_{12}\text{In}_5$  // *Journal of Alloys Compd.* 2006. V. 426. P. 190–192.
7. *Xue B., Hulliger F., Baerlocher C., Estermann M.* The  $\text{GdPt}_2\text{Sn}$ -type crystal structure of  $\text{CePd}_2\text{In}$  // *J. Alloys Compd.* 1993. V. 191 P. 9–10.
8. *Ijiri Y., DiSalvo F.J., Yamane H.* Structural, magnetic and electrical properties of the new ternary  $\text{CePdIn}_2$  // *J. Solid State Chem.* 1996. V. 122. P. 143–147.
9. *Tursina A., Nesterenko S., Seropegin Y., Noel H., Kaczorowski D.*  $\text{Ce}_2\text{PdIn}_8$ ,  $\text{Ce}_3\text{PdIn}_{11}$ , and  $\text{Ce}_5\text{Pd}_7\text{In}_{19}$ . Members of homological series based on  $\text{AuCu}_3$ - and  $\text{PtHg}_2$ -type structural units // *Journal of Solid State Chemistry*. 2013. V. 200. P. 7–12.
10. *Nesterenko S.N., Tursina A.I., Shtepa D.V., Noel H., Seropegin Yu.D.* Single crystal investigation of the ternary indides  $\text{Ce}_2\text{Pd}_4\text{In}_5$  and  $\text{CePdIn}_4$  // *J. Alloys Compd.* 2007. V. 442. P. 93–95.
11. *Nesterenko S.N., Tursina A.I., Rogl P., Seropegin Yu.D.* Single crystal investigation of  $\text{CePd}_3\text{In}_2$  // *J. Alloys Compd.* 2004. V. 373. P. 220–222.
12. *Nesterenko S.N., Tursina A.I., Shtepa D.V., Noel H., Seropegin Yu.D.* Single crystal investigation of the ternary indides  $\text{Ce}_2\text{Pd}_4\text{In}_5$  and  $\text{CePdIn}_4$  // *J. Alloys Compd.* 2007. V. 442. P. 93–95.
13. *Tursina A.I., Nesterenko S.N., Noel H., Seropegin Y.D.* A new ternary indide,  $\text{Ce}_{20}\text{Pd}_{36}\text{In}_{67}$  // *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online* 2005. V. 61. P. i99–i101.
14. *Zaremba V., Rodewald U., Kal'ichak Ya.M., Galadzhun Ya.V., Kaczorowski D., Hoffmann R.D., Potentgen R.* Ternary indides  $\text{RE}_4\text{Pd}_{10}\text{In}_{21}$  (RE = La, Ce, Pr, Nd, Sm) – synthesis, structure, and physical properties // *Z. Anorg. Allg. Chem.* 2003. V. 629. P. 434–442.
15. *Nesterenko S.N., Tursina A.I., Gribanov A.V., Seropegin Y.D., Kurenbaeva J.M.* Single crystal investigation of  $\text{CePd}_2\text{In}_4$  and  $\text{CePt}_2\text{In}_4$  compounds // *J. Alloys Compd.* 2004. V. 383. P. 242–244.
16. *Tursina A., Nesterenko S., Murashova E., Kurenbaeva Z., Seropegin Yu., Noel H., Roisnel T., Kaczorowski D.* Synthesis, crystal structure and magnetic properties of the new ternary indides  $\text{REPd}_2\text{In}_4$  (RE = La, Ce, Pr, Nd) // *Intermetallics*. 2011. V. 19. P. 1864–1872.
17. *Blatov V.A., Shevchenko A.P., Proserpio D.M.* Applied Topological Analysis of Crystal Structures with the Program Package ToposPro // *Cryst. Growth Des.* 2014. V. 14. no. 7. P. 3576–3585.
18. *Ilyushin G.D.* Theory of cluster self-organization of crystal-forming systems. Geometrical-topological modeling of nanocluster precursors with a hierarchical structure // *Struct. Chem.* 2012. V. 20. № 6. P. 975–1043.
19. *Shevchenko V.Ya., Medrish I.V., Ilyushin G.D., Blatov V.A.* From clusters to crystals: scale chemistry of intermetallics // *Struct. Chem.* 2019. V. 30. № 6. P. 2015–2027.
20. *Pankova A.A., Blatov V.A., Ilyushin G.D., Proserpio D.M.*  $\gamma$ -Brass Polyhedral Core in Intermetallics: The Nanocluster Model // *Inorg. Chem.* 2013. V. 52. № 22. P. 13094–13107.
21. *Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д.* Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. Кластеры-прекурсоры для самосборки кристаллической структуры  $\text{Na}_{99}\text{Hg}_{468}\text{-hP}56$  // *Физика и химия стекла*. 2019. Т. 45. № 6. С. 503–509.
22. *Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д.* Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. Новый двухслойный кластер-прекурсор  $\text{K}44 = 0@8(\text{Na}_2\text{In}_6)@36(\text{In}_6\text{Cd}_6\text{K}_6)_2$  для самосборки кристаллической структуры  $\text{K}_{23}\text{Na}_8\text{Cd}_{12}\text{In}_{48}\text{-hP}91$  // *Физика и химия стекла*. 2019. Т. 45. № 6. С. 510–518.
23. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds  $\text{K}_r\text{M}_m$  ( $M = \text{Ag, Au, As, Sb, Bi, Ge, Sn, Pb}$ ): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65. № 7. P. 1095–1105.
24. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds  $\text{Na}_k\text{M}_n$  ( $M = \text{K, Cs, Ba, Ag, Pt, Au, Zn, Bi, Sb}$ ): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65. № 4. P. 539–545.
25. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds  $\text{Li}_k\text{M}_n$  ( $M = \text{Ag, Au, Pt, Pd, Ir, Rh}$ ): Geometrical and Topological Analysis, Tetrahedral Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65. № 2. P. 202–210.