

**КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ.
РОЛЬ КЛАСТЕРОВ $K5 = 0@5$, $K9 = 1@8$ и $K11 = 0@11$ В САМОСБОРКЕ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР**

© 2020 г. В. Я. Шевченко^{1, *}, Г. Д. Илюшин^{2, 3}, И. В. Медриш³, В. А. Блатов³

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

²Федеральный научно-исследовательский центр “Кристаллография и фотоника”,
Ленинский пр., 59, Москва, 119333 Россия

³Международный научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению,
Самарский государственный технический университет,
ул. Молодогвардейская, 244, Самара, 443100 Россия

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

Поступила в редакцию 02.03.2020 г.

После доработки 01.04.2020 г.

Принята к публикации 03.04.2020 г.

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллической структуры $\text{Na}_9\text{Hg}_{36}\text{-}hR132$ (пр. группа $R\text{-}3c$, $a = b = 9.228$, $c = 52.6380 \text{ \AA}$, $V = 3\ 881.91 \text{ \AA}^3$) и $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8\text{-}tP20$ (пр. группа $P4_2/mnm$, $a = b = 8.520$, $c = 7.800 \text{ \AA}$, $V = 566.2 \text{ \AA}^3$). Для интерметаллида $\text{Na}_9\text{Hg}_{36}\text{-}hR132$ впервые установлены полиэдрические кластеры-прекурсоры $K11 = 0@11(\text{Na}_8\text{Hg}_3)$ и $K9 = \text{Hg}@Na_8$, и для интерметаллида $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8\text{-}tP20$ – полиэдрические кластеры-прекурсоры $K5 = 0@Na_3Hg_2$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры $\text{Na}_9\text{Hg}_{36}\text{-}hR132$ из нанокластеров-прекурсоров $K11$ и $K9$ и для 3D структуры $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8\text{-}tP20$ из кластеров $K5$ в виде: первичная цепь $S_3^1 \rightarrow$ слой $S_3^2 \rightarrow$ каркас S_3^3 . Проведен анализ структур всех известных интерметаллидов и найдены многочисленные примеры сборки их структур из кластеров $K5$, $K9$ и $K11$.

Ключевые слова: интерметаллид $\text{Na}_9\text{Hg}_{36}\text{-}hR132$, самосборка кристаллической структуры, полиэдрические кластеры-прекурсоры $K5$, $K9$ и $K11$

DOI: 10.31857/S0132665120040113

ВВЕДЕНИЕ

В системе Na–Hg установлена кристаллизация 7 Na-интерметаллидов (табл. 1, [1–7]), в системе Ca–Hg образуются 11 Ca-интерметаллидов [8–10]. Структурными аналогами являются только наиболее простые по химическому составу и кристаллической структуре интерметаллиды $\text{NaHg}_2\text{-}hP3$ и $\text{CaHg}_2\text{-}hP3$ [8].

В системе Na–Hg наиболее кристаллохимически сложными соединениями являются интерметаллиды $\text{Na}_{99}\text{Hg}_{468}\text{-}hP567$ [1] и $\text{Na}_9\text{Hg}_{36}\text{-}hR132$ [5], а в системе Ca–Hg – интерметаллид $\text{Ca}_{11}\text{Hg}_{54}\text{-}hP65$ [9]. Только в одной системе Na–Ca–Sn установлено образование Na-, Ca-интерметаллидов $\text{CaNa}_{10}\text{Sn}_{12}$ [11] и Na_4CaSn_6 [12].

В работе [13] проведено моделирование самосборки кристаллической структуры интерметаллида $\text{Na}_{99}\text{Hg}_{468}\text{-}hP567$ и установлены уникальные супракластеры-прекур-

Таблица 1. Кристаллографические данные интерметаллидов, образующихся в системе Na–Hg

Соединение	Пространственная группа	Класс Пирсона	Параметры ячейки, Å	$V, \text{Å}^3$
Na ₉₉ Hg ₄₆₈ [1]	<i>P</i> -6	<i>hP</i> 567	39.703, 39.703, 9.681	13215.9
NaHg ₂ [2]	<i>P6/mmm</i>	<i>hP</i> 3	5.029, 5.029, 3.230	70.8
Na ₂ Hg ₂ [3]	<i>Cmcm</i>	<i>oC</i> 16	7.190, 10.790, 5.210	404.2
Na ₁₂ Hg ₈ [4]	<i>P4₂/mnm</i>	<i>tP</i> 20	8.520, 8.520, 7.800	566.2
Na ₉₆ Hg ₃₆ [5]	<i>R</i> -3 <i>c</i>	<i>hR</i> 132	9.228, 9.228, 52.638	3881.9
Na ₃ Hg [6]	<i>R</i> -3 <i>m</i>	<i>hR</i> 4	5.404, 5.404, 13.420	339.4
Na ₃ Hg [7]	<i>P6₃/mmc</i>	<i>hP</i> 18	5.438, 5.438, 9.808	251.2

соры Na₁₈Hg₁₅₇ в виде трех связанных шестерных колец из Na-полиэдров. При образовании колонн супракластеры-прекурсоры Na₁₈Hg₁₅₇ связаны шестерными кольцами Hg₆ и Na-спейсерами.

Для интерметаллида Ca₁₁Hg₅₄-*hP*65 в [14] определены полиэдрические кластеры-прекурсоры K8 = 0@Ca₂Hg₆, представляющие собой гексагональные бипирамиды, полиэдрические кластеры K11 = 0@Ca₃Hg₈ и полиэдрические кластеры с центральным Hg-атомом K12 = Hg(Ca₃Hg₈). Кластеры-прекурсоры Ca₂Hg₆ являются темплатами, на поверхности которых происходит образование атомных оболочек из 38 атомов.

Интерметаллид Na₉₆Hg₃₆-*hR*132 с пространственной группой *R*-3*c* относится к кристаллохимически сложным соединениям: параметры его тригональной ячейки (в гексагональной установке): $a = b = 9.228 \text{ Å}$, $c = 52.638 \text{ Å}$. Значения координационных чисел (КЧ) четырех кристаллографически независимых атомов Na = 11, 13 и 14 и трех атомов Hg = 8, 10 и 12. Кристаллическая структура Na₉₆Hg₃₆-*hR*132 в работе [5] представлена в виде чередующихся гексагональных сеток типа 3⁶ из изолированных атомов Hg (“анионов ртути”) находящихся на расстоянии $d(\text{Hg}-\text{Hg}) > 5 \text{ Å}$ и топологически образующих плотные упаковки, в которой атомы Na заполняют все октаэдрические пустоты и 5/6 тетраэдрических пустот. К кристаллохимическому семейству Na₉₆Hg₃₆-*hR*132 относятся интерметаллиды Pd₉₆Sb₃₆ [15], Au₉₆Al₃₆ [16], Yb₉₆In₃₆ [17], и Eu₉₆In₃₆ [18].

Интерметаллид Na₁₂Hg₈-*tP*20 с пространственной группой *P4₂/mnm* [4] не имеет кристаллохимических аналогов (табл. 1). Значения КЧ четырех кристаллографически независимых атомов Na1, Na2, Na3, Hg1 равны соответственно 14, 15, 14, 10. Уникальность кристаллической структуры Na₁₂Hg₈-*tP*20 по данным [4] связана с наличием изолированных кластеров Hg₄ в виде квадрата, разделенных атомами Na.

В настоящей работе с помощью пакета программ ToposPro [19] проведен геометрический и топологический анализ интерметаллида Na₉₆Hg₃₆-*hR*132 и Na₁₂Hg₈-*tP*20. Реконструирован симметричный и топологический код самосборки 3D кристаллической структуры Na₉₆Hg₃₆-*hR*132 из новых полиэдрических кластеров-прекурсоров K11 = 0@11 (Na₈Hg₃) и K9 = 1Hg@Na₈, для Na₁₂Hg₈-*tP*20 из кластеров K5.

Работа продолжает исследования [13, 14, 20–25] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супраполиэдрическом уровне и геометрического и топологического анализа кристаллических структур с применением современных компьютерных методов.

МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ ToposPro [19], позволяющего проводить многоцелевое исследование кри-

Таблица 2. Na₉₆Hg₃₆-hR132. Локальное окружение атомов и значения координационных последовательностей

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Na1	9 Na + 4 Hg	13	48	111	207	334
Na2	10 Na + 4 Hg	14	51	113	209	339
Na3	9 Na + 4 Hg	13	50	121	218	356
Na4	7 Na + 4 Hg	11	43	103	188	305
Hg1	12 Na	12	48	114	204	330
Hg2	8 Na	8	42	98	194	302
Hg3	10 Na	10	44	104	196	328

сталлической 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. 2, в которой жирным шрифтом выделено число соседних атомов в ближайшем окружении, т.е. в первой координационной сфере атома. Все атомы характеризуются различными наборами координационных последовательностей $\{N_k\}$, следовательно, все атомы топологически (и функционально) различны.

Алгоритм разложения в автоматическом режиме структуры любого интерметаллида, представленного в виде свернутого графа, на кластерные единицы основывается на принципах, опубликованных ранее [20, 21] и реализован в комплексе программ ToposPro [19].

Самосборка кристаллической структуры Na₉₆Hg₃₆-hR132. В табл. 2 приведено локальное окружение атомов Na, Hg и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке Na₉₆Hg₃₆. Значения координационных чисел атомов Na – 11, 13 (два атома) и 14 и для атомов Hg – 8, 10, и 12.

Нанокластерный анализ с помощью ToposPro дал 9 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с тремя структурными единицами, в качестве которых установлены полиэдрические кластеры-прекурсоры K11 = 0@11 (Na₈Hg₃) и K9 = 1Hg@Na₈ (рис. 1). Центры кластеров K11 и K9 занимают позиции *6a* и *6b* с симметрией 32 и $\bar{3}$. На рис. 1 приведены полиэдрические кластеры K8 = 0@Ca₂Hg₆, K11 = 0@Ca₃Hg₈, K12 = Hg(Ca₃Hg₈), установленные ранее в кристаллической структуре Ca₁₁Hg₅₄-hP65 [14]. Отметим топологическое различие кластеров K11 = 0@11 (Na₈Hg₃) и K11 = 0@Ca₃Hg₈. Базовая 2D сетка для кластеров K11 и K9 имеет топологический тип **hxl** (3⁶) с КЧ = 6.

Самосборка первичных цепей. Первичная цепь S₃¹ формируется в результате связывания металлокластеров K11 = 0@11 состава Na₈Hg₃ в направлении [100] (рис. 2). Расстояние между центрами кластеров K11 определяет значение вектора трансляций $a = 9.228 \text{ \AA}$.

Самосборка микрослоя L1. Образование микрослоя S₃² происходит при связывании (со сдвигом) первичных цепей в плоскости (001) (рис. 2). Расстояние между центрами кластеров из соседних первичных цепей определяет значения вектора трансляции $b = 9.228 \text{ \AA}$.

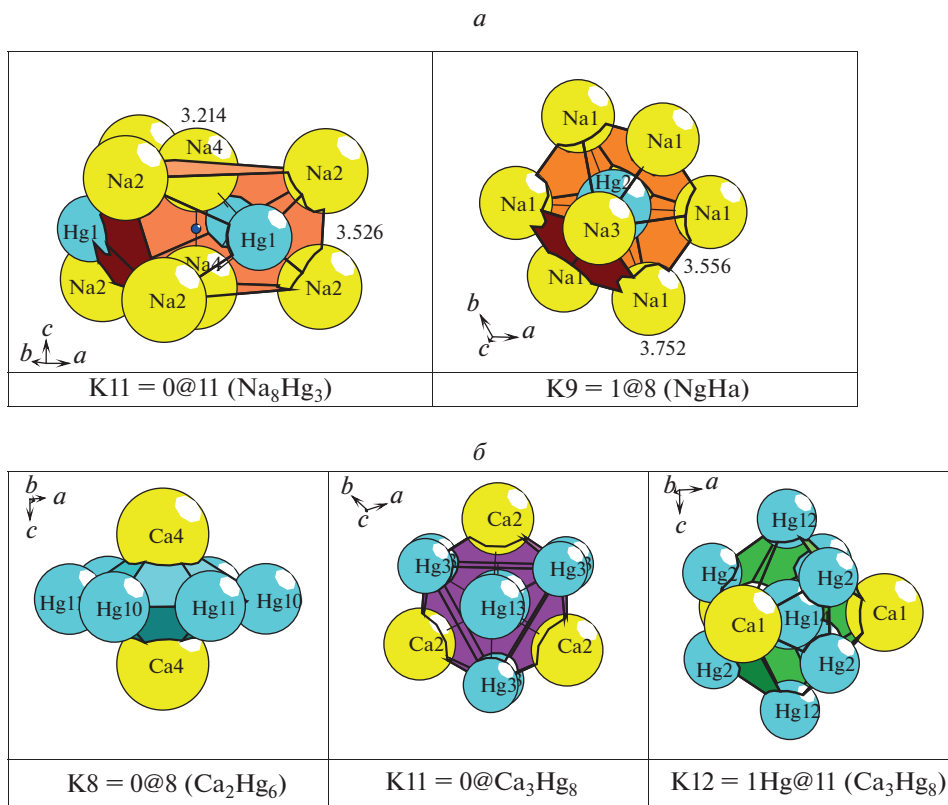


Рис. 1. Полиэдрические кластеры-прекурсоры кристаллической структуры Na₉₆Hg₃₆-*hR132* (*a*) и Ca₁₁Hg₅₄-*hP65* (*б*). Цифры указывают межатомные расстояния в Å.

Самосборка двухслойного пакета P. На поверхности микрослоя *L1* образуется микрослой *L2* из кластеров K9 и атомов-спейсеров Hg, расположенных между кластерами K9 (рис. 3).

Самосборка каркаса. Микрокаркас структуры S_3^3 формируется при связывании двухслойных пакетов $P = L1 + L2$ со сдвигом (рис. 4).

Кристаллографические данные Na₁₂Hg₈-tP20. В табл. 3 приведено локальное окружение атомов Na, Hg и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке Na₁₂Hg₈. В локальном окружении атома Na1, Na2, Na3, Hg1 находятся 14, 15, 14, 10 атомов. Всего найдено 5 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки. В элементарной ячейке находятся четыре металлокластера-прекурсора K5 = 0@Na₃Hg₂ в виде треугольной бипирамиды, в состав которой вошли все кристаллографически независимые атомы (рис. 5). Центр металлокластера-прекурсора находится в позиции 16*k* (0.07, 0.17, 0.27).

Самосборка первичных цепей. Первичная цепь S_3^1 формируется в результате связывания димеров Na₃Hg₂ + Na₃Hg₂ (центр в позиции 2*b* (0.0, 0.5) и симметрия *mmm*) в направлении [001] (рис. 6) с индексом связанности 6. Расстояние между центрами димеров определяет значение вектора трансляций $c = 7.708$ Å.

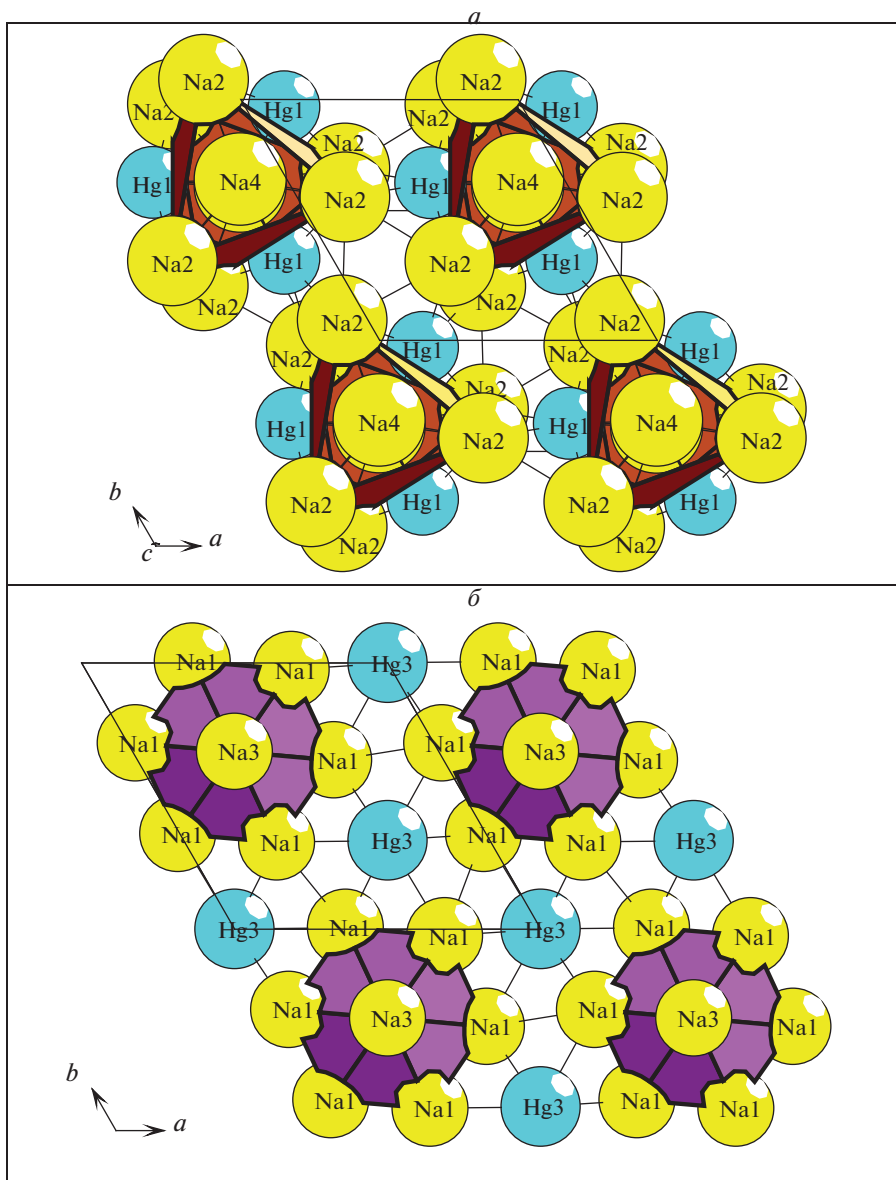


Рис. 2. $\text{Na}_{96}\text{Hg}_{36}\text{-hR132}$. Слой L1 из кластеров K11 (a) и слой L2 из кластеров K9 и атомов-спейсеров Hg (б).

Самосборка микрослоя. Образование микрослоя S_3^2 происходит при связывании первичных цепей в плоскости (110) со сдвигом (рис. 6).

Самосборка микрокаркаса. Микрокаркас структуры S_3^3 формируется при связывании микрослоев (рис. 7). Расстояние между первичными цепями из соседних микрослоев определяет значения вектора трансляции $a = b = 8.458 \text{ \AA}$.

Роль кластеров K5, K9 И K11 в самосборке кристаллических структур других интерметаллидов. Представляло интерес выяснить, насколько часто встречаются найденные

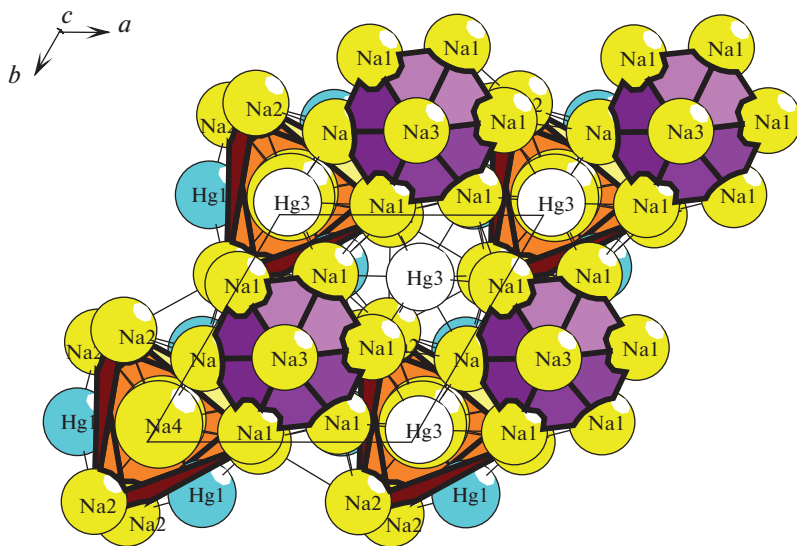


Рис. 3. $\text{Na}_{96}\text{Hg}_{36}\text{-}hR132$. Двухслойный пакет $P = L1 + L2$.

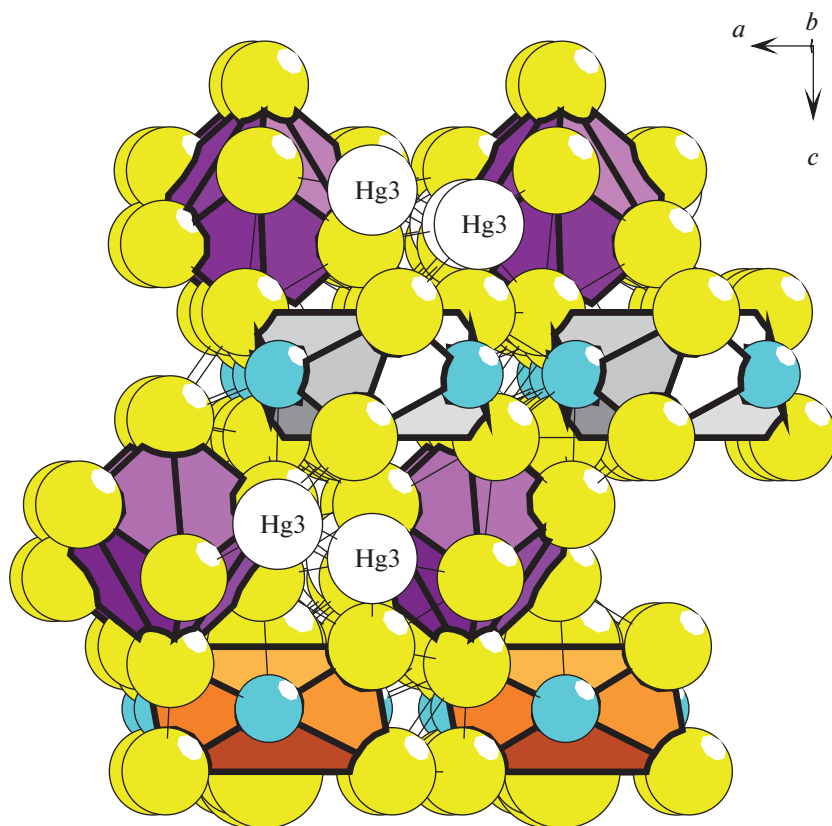


Рис. 4. $\text{Na}_{96}\text{Hg}_{36}\text{-}hR132$. Каркасная 3D структура, образованная из двухслойных пакетов $P = L1 + L2$.

Таблица 3. $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8\text{-}tP20$. Локальное окружение атомов и значения координационных последовательностей

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Na1	8 Na + 6 Hg	14	50	120	210	334
Na2	9 Na + 6 Hg	15	50	109	204	327
Na3	10 Na+4 Hg	14	54	118	214	354
Hg1	8 Na + 2 Hg	10	46	108	198	317

кластеры K5, K9 и K11 в структурах интерметаллидов и какую роль эти кластеры играют в сборке структур. Ранее нами был проведен анализ 12315 интерметаллических структур из базы данных неорганических кристаллических структур (ICSD, выпуск 2018/2) [26] и обновлена коллекция топологических типов нанокластеров ToposPro (TTN) [27], содержащая информацию о составе, структуре и встречаемости более 2800 топологических типов нанокластеров.

Согласно TTN коллекции, нанокластеры 0@5, 1@8 и 0@11 обнаружены соответственно в 1143, 340 и 150 кристаллических структурах интерметаллидов.

Структуры, построенные из кластеров 1@8. Как было отмечено выше, кластер 1@8 участвует в сборке 340 структур, из которых большая часть – 190 структур (29 бинарных, 159 тернарных, 2 кватернарных) – собраны только из этого кластера. Интересно отметить, что дополнительные атомы-спейсеры обнаружены лишь в четырех структурах, что, по-видимому, связано с формой кластера. Интерметаллиды, построенные из кластеров 1@8, весьма разнообразны по симметрии и относятся ко всем сингониям от моноклинной (пространственные группы $C2/m$ (3 структуры) и $P2_1/c$ (2 структуры)) до кубической (6 пространственных групп: $Pm-3$, $I432$, $F-43m$, $Fm-3m$, $Im-3m$, $Ia-3d$), в которой решены 178 структур. Наиболее представительной группой, включающей 148 структур, являются тернарные соединения состава ABC , из которых 147 кристаллизуются в пространственной группе $F-43m$. В качестве A , B и C могут выступать атомы

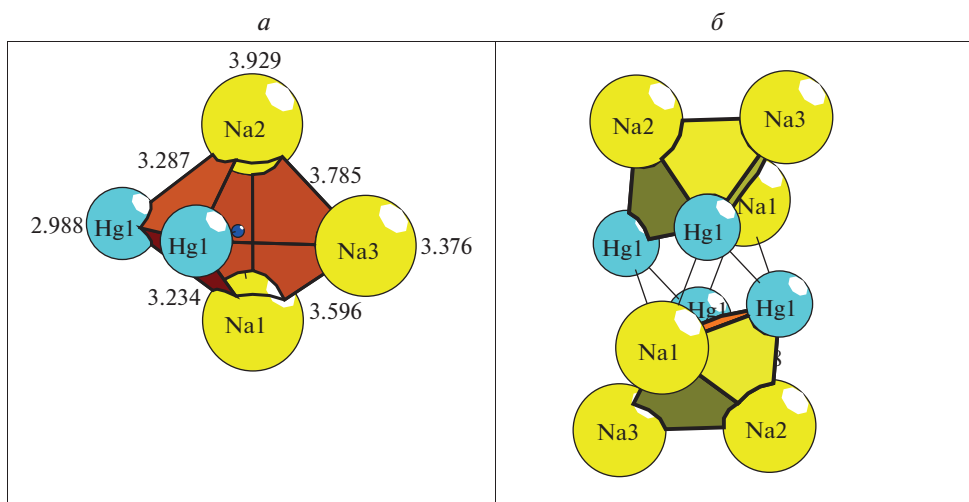


Рис. 5. $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8\text{-}tP20$. Полиэдрические кластеры-прекурсоры K5 (а) и димеры K5 + K5 (б).

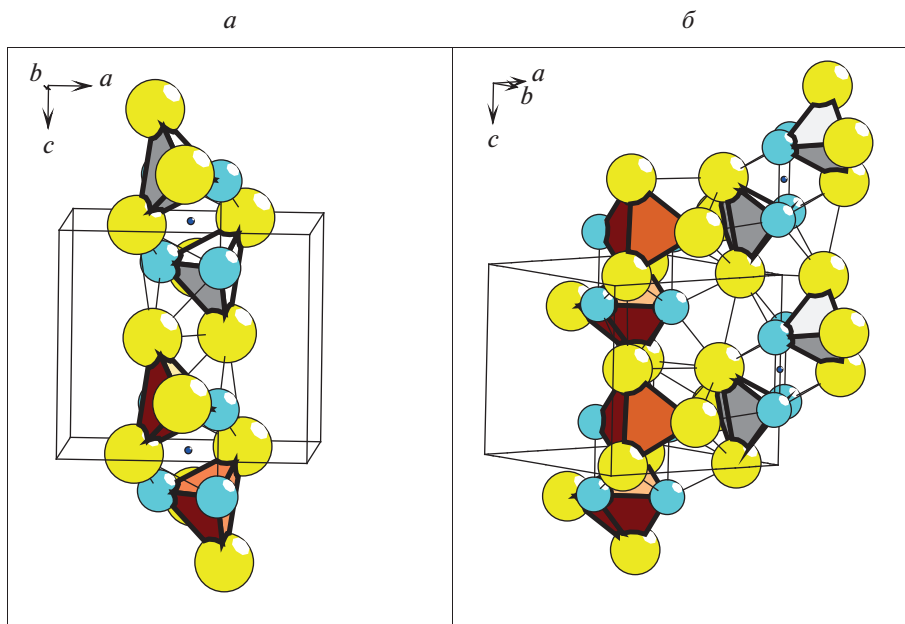


Рис. 6. $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8\text{-tP20}$. Первичная цепь S_3^1 (а) и слой S_3^2 (б).

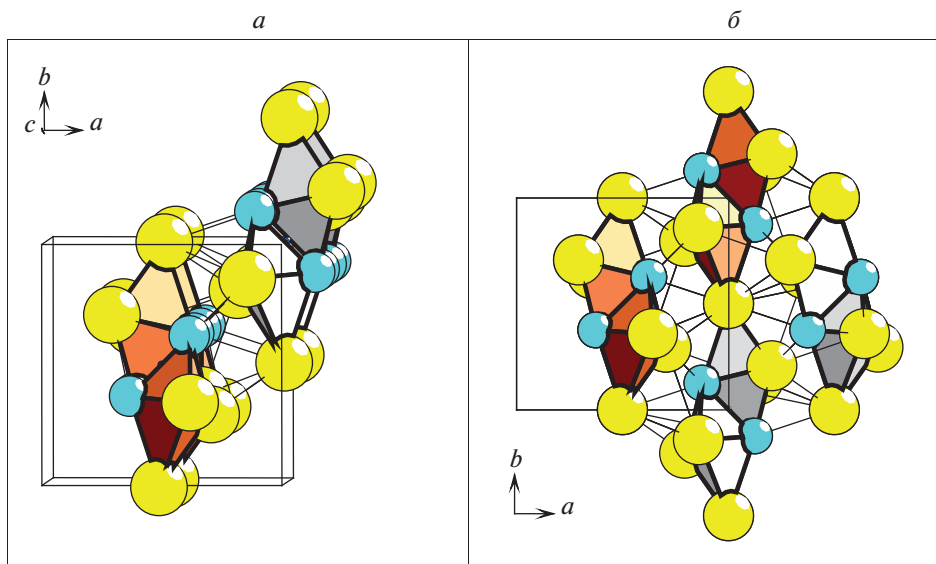


Рис. 7. $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8\text{-tP20}$. Проекция в направлении $[001]$ слоев S_3^2 (а) и каркас S_3^3 (б).

47 элементов, среди которых лидируют Sb и Bi, входящие в состав 72 и 35 структур, соответственно.

Структуры, построенные из кластеров $0@11$. Из 149 структур интерметаллидов, в сборке которых участвует кластер $0@11$, 112 структур, среди которых 14 бинарных и

98 тернарных соединений, могут быть собраны только из кластеров данного типа (возможно, с участием дополнительных атомов-спейсеров). Все эти структуры относятся к гексагональной сингонии. Наиболее представительной группой, объединяющей 65 структур, являются тернарные соединения состава *ABC* (где в качестве *A*, *B* и *C* могут выступать атомы 35 элементов), кристаллизующиеся в пространственных группах *P*-62*m*, *P*-62*c* и *P*-6*m*2 (соответственно 51, 11 и 3 структуры).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование кластерной самосборки кристаллической структуры интерметаллидов $\text{Na}_9\text{Hg}_{36}$ -*hR132* и $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8$ -*tP20*. Методом разложения 3D атомной сетки на кластерные структуры для $\text{Na}_9\text{Hg}_{36}$ -*hR132* установлены полиэдрические кластеры-прекурсоры $\text{K11} = 0@11$ (Na_8Hg_3) и $\text{K9} = 1\text{Hg}@11$ и атомы-спейсеры Hg. Для $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8$ -*tP20* определены кластеры-прекурсоры $\text{K5} = \text{Na}_3\text{Hg}_2$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры $\text{Na}_9\text{Hg}_{36}$ -*hR132* из нанокластеров-прекурсоров K11 и K116 и из кластеров K5 для $\text{Na}_{12}\text{Hg}_8$ -*tP20* в виде: первичная цепь $S_3^1 \rightarrow$ слой $S_3^2 \rightarrow$ каркас S_3^3 . Проведен анализ структур всех известных интерметаллидов и найдены многочисленные примеры сборки их структур из кластеров K5 , K9 и K11 .

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ № 19-02-00636) и Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hoch C., Simon A. $\text{Na}_{11}\text{Hg}_{52}$: complexity in a polar metal // *Angew. Chem. Int. ed.* 2012 V. 51. № 13. P. 3262–3265.
2. Nielson J.W., Baenziger N.C. The crystal structures of NaHg_2 , NaHg and Na_3Hg_2 // *Acta Crystallogr.* 1954. V. 7. P. 27–7282.
3. Deiseroth H.J., Stupperich A., Pankaluoto R., Christensen N.E. A variant of the cesium chloride structure: structural relations and electronic structure // *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1991. V. 597. P. 41–50.
4. Tkachuk A.V., Mar A. Redetermination of Na_3Hg_2 // *Acta Crystallogr. Sect. E. Struct. Rep. Online.* 2006. V. 62. P. i129–i130
5. Deiseroth H.J., Toelstede D. Na_8Hg_3 : an Alkali Metal Rich Amalgam with Isolated Mercury Anions? // *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1990 V. 587. P. 103–109.
6. Deiseroth H.J., Rochnia M. Einkristallstudien zur Temperaturabhangigkeit der Kristallstruktur von alpha Na_3Hg // *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1994 V. 620. P. 1736–1740.
7. Deiseroth H.J., Rochnia M. β - Na_3Hg : ein Feststoff mit geschmolzener Natriumteilstruktur im Temperaturbereich 36–60°C // *Angewandte Chemie (German Edition)*. 1993. V. 105. P. 1556–1558.
8. Inorganic crystal structure database (ICSD). Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ), Germany and US National Institute of Standard and Technology (NIST), USA.
9. Bruzzone G., Merlo F. The calcium-mercury system // *J. Less-Common Met.* 1973. V. 32. P. 237–241.
10. Tkachuk A.V., Mar A. Alkaline-earth metal mercury intermetallics $\text{A}_{(11-x)}\text{Hg}_{(54+x)}$ ($\text{A} = \text{Ca}, \text{Sr}$) // *Inorganic Chemistry*. 2008. V. 47(4). P. 1313–1318.
11. Bobev S., Sevov S.C. Synthesis and Characterization of the largest Isolated Clusters of Tin, $(\text{Sn}_{12})^{-12}$, in $(\text{AE})\text{Na}_{10}\text{Sn}_{12}$ ($\text{AE} = \text{Ca}$ or Sr) // *Inorg. Chem.* 2001. V. 40. P. 5361–5364.
12. Todorov I., Sevov S.C. In search of benzene-like $\text{Sn}_6(-6)$: synthesis of Na_4CaSn_6 with interconnected cyclohexane like $\text{Sn}_6(6-)$ // *Inorg. Chem.* 2006. V. 45. P. 4478–4483.
13. Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д. Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. Супраполиэдрические кластеры-прекурсоры $\text{Na}_{18}\text{Hg}_{157}$ для самосборки кристаллической структуры $\text{Na}_{99}\text{Hg}_{468}$ -*hP567* // *Физ. хим. стекла.* 2019, Т. 45. № 6. С. 399–404.
14. Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д. Кластерная самоорганизация интерметаллических систем. Новый двухслойный кластер-прекурсор $\text{K46} = 0@8(\text{Ca}_2\text{Hg}_6)@38$ ($\text{Hg}_6 + \text{CaHg}_6$) $_2(\text{Ca}_6\text{Hg}_6)$ для самосборки кристаллической структуры $\text{Ca}_{11}\text{Hg}_{54}$ -*hP65* // *Физ. хим. стекла.* 2020. Т. 46. № 1. С. 1–9.

15. *Marsh R.E.* The Centrosymmetric–Noncentrosymmetric Ambiguity: Some More Examples // *Acta Crystallographica A*. 1994. V. 50. P. 450–455.
16. *Range K.J., Buchler H.* Hoch drucksynthese und kristallstruktur von Al_3Au_8 // *J. Less-Common Metals*. 1989 V. 154. P. 251–260.
17. *Cirafici S., Fornasini M.L.* Crystal structures of Yb_2Tl , Yb_8Tl_3 and Yb_8In_3 // *J. Less-Common Metals*. 1989. V. 154. P. 79–88.
18. *Gaebler F., Niewa R.* Polymorphism of Eu_8In_3 and the solid solution $(\text{Ca}_{(x)}\text{Eu}_{(1-x)})_8\text{In}_3$ // *Z. Anorg. Allg. Chem.* 2010. V. 636. P. 1803–1809.
19. *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. P. 3576–3585.
20. *Илюшин Г.Д.* Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. М.: Едиториал УРСС. 2003. 376 с.
21. *Ilyushin G.D.* Symmetry and Topology Code of the Cluster Self-Assembly of Intermetallic Compounds $\text{A}^{[16]_2}\text{B}^{[12]_4}$ of the Friauf Families Mg_2Cu_4 and Mg_2Zn_4 // *Crystallography Reports*. 2018. V. 63. 4. P. 543–552.
22. *Ilyushin G.D.* The Crystal Chemistry of Intermetallic Lithium Compounds. A review // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2018. V. 63. № 14. P. 1786–1799.
23. *Ilyushin G.D.* Modeling of the Self-Organization Processes in Crystal-Forming Systems. Tetrahedral Metal Clusters and the Self-Assembly of Crystal Structures of Intermetallic Compounds // *Crystallography Reports*. 2017. V. 62. 5. P. 670–683.
24. *Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д.* Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. Новые двухслойные кластеры-прекурсоры $0@(\text{Na}_2\text{Cd}_6)@(\text{Na}_{12}\text{Cd}_{26})$ и $0@(\text{Na}_3\text{Cd}_6)@(\text{Na}_6\text{Cd}_{35})$ для самосборки кристаллической структуры $\text{Na}_{26}\text{Cd}_{141}$ -hP168 // *Физ. хим. стекла*. 2019. Т. 45. С. 303–310.
25. *Илюшин Г. Д.* Кластерная самоорганизация интерметаллических систем: 124-атомный кластер $0@ \text{Ga}_{12}@ (\text{Li}_{20}\text{Ga}_{12})@ (\text{Li}_4\text{Na}_{16} \text{Ga}_{60})$ и 44-атомный кластер $0@ \text{Ga}_{12}@ (\text{Li}_2\text{Na}_{18}\text{Ga}_{12})$ для самосборки кристаллической структуры $\text{Li}_{48}\text{Na}_{80} \text{Ga}_{332}$ -oF920 // *Кристаллография*. 2019. Т. 64. С. 857–861.
26. *Shevchenko V.Ya., Medrish I.V., Ilyushin G.D., Blatov V.A.* From clusters to crystals: scale chemistry of intermetallics // *Structural Chemistry*. 2019. V. 30. P. 2015–2027.
27. *Pankova A.A., Akhmetshina T.G., Blatov V.A., Proserpio D.M.* A Collection of Topological Types of Nanoclusters and its application to icosahedron-based intermetallics // *Inorg. Chem.* 2015. V. 54. P. 6616–6630.