

КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ:
НОВЫЙ ТРЕХСЛОЙНЫЙ КЛАСТЕР K142 ДЛЯ САМОСБОРКИ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $K_{44}In_{80}$ -hR366 И ТЕТРАКЛАСТЕР
БЕРГМАНА K141 ДЛЯ САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ
СТРУКТУРЫ $K_{34}In_{82}$ -cF464

© 2020 г. В. Я. Шевченко^{1, *}, В. А. Блатов², Г. Д. Илюшин^{2, 3}

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

²Международный научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению,
Самарский государственный технический университет,
ул. Молодогвардейская, 244, Самара, 443100 Россия

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

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

Поступила в редакцию 17.04.2020 г.

После доработки 05.06.2020 г.

Принята к публикации 05.06.2020 г.

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры $K_{44}In_{80}$ -hR366, (пр. гр. $R\bar{3}$, $a = b = 17.214 \text{ \AA}$, $c = 44.612 \text{ \AA}$) и $K_{34}In_{82}$ -cF464 (пр. гр. $Fd\bar{3}m$, $a = 24.241 \text{ \AA}$, $V = 14244.64 \text{ \AA}^3$). Методом полного разложения 3D атомной сетки интерметаллида $K_{44}In_{80}$ на кластерные структуры установлен каркас-образующий 142-атомный икосаэдрический нанокластер K142. Нанокластеры K142 с симметрией $\bar{3}$ являются трехслойными с составом оболочек $0@12In@32(K_{26}In_6)@98(K_{26}In_{72})$. Первые две оболочки формируют кластер Бергмана. Третья оболочка из 98 атомов образована 5-, 6- и 7-атомными кольцами (5^{54} , 6^{38} , 7^6) и содержит 98 вершин, 270 ребер и 174 грани. Нанокластеры K142 образуют плотноупакованные двумерные слои 3^6 , расположенные со сдвигом вдоль [001]. Расстояние между центрами кластеров K142 определяет значение вектора трансляции $a_{hex} = 17.214 \text{ \AA}$. Пустоты в 3D каркасе занимают спейсеры $0@K_6In_2$. В интерметаллиде $K_{34}In_{82}$ формируются супраполиэдрические кластеры K141 с симметрией $\bar{4}3m$, состоящие из четырех кластеров Бергмана $0@12In@32(K_{20}In_{12})$, каждый из которых имеет симметрию $\bar{3}m$. Пустоты в 3D каркасе занимают спейсеры $In(In_4)$ в виде тетраэдров с центральным атомом In, имеющие симметрию $\bar{4}3m$. Для интерметаллидов $K_{44}In_{80}$ и $K_{34}In_{82}$ установлен симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры из нанокластеро-прекурсоров K142 и K141 в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Ключевые слова: самосборка кристаллических структур, структурный тип $K_{78}In_{160}$ -hP238, структурный тип $K_{34}In_{82}$ -cF464, икосаэдрический трехслойный кластер K142 = $0@12In@32(K_{26}In_6)@98(K_{26}In_{72})$, кластер Бергмана K44 = $0@12In@32(K_{20}In_{12})$

DOI: 10.31857/S0132665120050108

ВВЕДЕНИЕ

В системе К–In установлено образование пяти интерметаллидов [1, 2], из них только интерметаллиды KIn_4-tI10 [3] и $K_8In_{11}-hR114$ [4] имеют 19 и 6 кристаллохимических аналогов [1, 2]. Уникальной кристаллической структурой обладают интерметаллиды $K_{78}In_{160}-hP238$ [5], $K_{44}In_{80}-hR366$ [6] и $K_{34}In_{82}-cF464$ [7].

В [8] осуществлено моделирование самосборки наиболее кристаллохимически сложного К, In-интерметаллида $K_{78}In_{160}-hP238$. Самосборка кристаллической структуры происходит с участием трехслойных кластеров $K130 = 0@12(In_{12})@30(In_{12}K_{18})@86(K_{20}In_{66})$, образующихся на икосаэдрах $0@12(In_{12})$ и двухслойных кластеров $K66 = K@16(K_4In_{12})@49(K_{16}In_{33})$, образующихся на полиэдрах Фриауфа $K(K_4In_{12})$. Нанокластеры К130 и К66 участвуют в формировании 2D слоев А и В образующих трехслойный пакет В–А–В. Толщина трехслойного пакета соответствует значению вектора трансляции $c = 28.888 \text{ \AA}$.

Кристаллическая структура $K_{44}In_{80}$ с пр. гр. $R\bar{3}$ характеризуется большими значениями параметров гексагональной ячейки: $a = b = 17.214 \text{ \AA}$, $c = 44.612 \text{ \AA}$, $V = 11448 \text{ \AA}^3$ [6]. Последовательность Вайкоффа для 19 кристаллографически независимых атомов имеет вид $t^4h^{11}c^4$. Для атомов К установлены значения КЧ = 14 (один атом), 16 (6 атомов), 19 (один атом) и для атомов In – 10 (два атома), 11 (6 атомов), 12 (два), 14 (один атом). В [4] в качестве каркас-образующих кластеров выделены два кристаллографически-независимых In_{12} – икосаэдра и In_{15} -полиэдр.

Кристаллическая структура $K_{34}In_{82}-cF464$ с пр. гр. $Fd\bar{3}m$ характеризуется большими значениями параметров кубической ячейки: $a = 24.241 \text{ \AA}$, $V = 14244.64 \text{ \AA}^3$ [7]. Последовательность Вайкоффа для 8 кристаллографически независимых атомов имеет вид g^4e^2ba . В локальном окружении атомов К находятся 16 атомов, атомов In – 11, 12, 14 или 16 атомов. В [7] в качестве каркас-образующих кластеров выделены In_{12} – икосаэдр и $In(In_{15})$ -полиэдр Фриауфа.

В настоящей работе с помощью пакета программ ToposPro [9] проведен геометрический и топологический анализ кристаллических структур интерметаллидов $K_{44}In_{80}$ и $K_{34}In_{82}$. Установлен симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из трехслойных икосаэдрических нанокластеров-прекурсоров К142 и кластеров Бергмана К44 в виде: первичная цепь → слой → каркас.

Работа продолжает исследования [8, 10–16] 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 [9], 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 интерметаллидов $K_{44}In_{80}$ и $K_{34}In_{82}$ приведены в табл. 1, 2, в которых жирным шрифтом выделено число соседних атомов в ближайшем окружении, т.е. в первой координаци-

Таблица 1. $K_{44}In_{80}$ - $hR366$. Локальное окружение атомов К, In и значения координационных последовательностей

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N_1	N_2	N_3	N_4	N_5
K1	6K + 10In	16	54	118	227	373
K2	4K + 12In	16	50	112	206	345
K3	5K + 11In	16	51	112	222	363
K4	4K + 12In	16	53	115	216	356
K5	6K + 8In	14	55	126	221	346
K6	3K + 16In	19	47	116	231	319
K7	4K + 12In	16	49	106	220	350
K8	4K + 12In	16	48	106	218	362
In1	7K + 5In	12	53	121	210	332
In2	5K + 6In	11	45	109	210	333
In3	5K + 6In	11	46	116	202	321
In4	5K + 6In	11	45	112	205	344
In5	6K + 5In	11	50	117	205	327
In6	5K + 6In	11	45	110	205	330
In7	6K + 4In	10	48	117	208	330
In8	5K + 6In	11	46	117	205	332
In9	7K + 5In	12	51	116	209	346
In10	6K + 5In	10	48	117	206	329
In11	7K + 7In	14	61	136	227	346

онной сфере атома. Все атомы характеризуются различными наборами координационных последовательностей $\{N_k\}$.

Алгоритм разложения в автоматическом режиме структуры любого интерметаллида, представленного в виде свернутого графа, на кластерные единицы основывается на следующих принципах: структура образуется в результате самосборки из кластеров-прекурсоров. При этом кластеры-прекурсоры образуют каркас, пустоты в котором заполняются кластерами-спейсерами (состоящими из небольшого числа атомов). Кластеры-прекурсоры занимают высокосимметричные позиции. Набор нанокластеров-прекурсоров и кластеров-спейсеров включает в себя все атомы структуры.

Самосборка кристаллических структур $K_{78}In_{160}$ и $K_{34}In_{82}$. Использованный нами метод моделирования кристаллической структуры основан на определении иерархической последовательности ее самосборки в кристаллографическом пространстве [10, 11]. На первом уровне самоорганизации системы определяется механизм формирования первичной цепи структуры из нанокластеров 0-уровня, сформированных на темплатной стадии химической эволюции системы, далее – механизм самосборки из цепи слоя (2-ой уровень) и затем из слоя – трехмерного каркаса структуры (3-й уровень).

Нанокластерный анализ структуры $K_{44}In_{80}$ - $hR366$. Пространственная группа $R\bar{3}m$ характеризуется позициями с точечной симметрией: $\bar{3}m$ (3a, 3b), $3m$ (6c), $2/m$ (9d, 9e), 2 (18f, 18g), m (18h). В табл. 1 приведено локальное окружение 8 кристаллографически независимых атомов К и 11 атомов In в 3D атомной сетке. Для атомов К установлено КЧ = 14, 16 (6 атомов), 19 и для атомов In – 10 (два атома), 11 (6 атомов), 12 (два атома), 14.

Таблица 2. $K_{34}In_{82}-cF464$. Локальное окружение атомов К, In и значения координационных последовательностей

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N_1	N_2	N_3	N_4	N_5
K1	4K + 12In	16	53	115	225	373
K2	4K + 12In	16	49	109	214	359
K3	4K + 12In	16	48	100	218	356
In1	5K + 6In	11	46	112	198	322
In2	5K + 6In	11	45	110	206	336
In3	6K + 8In	14	58	130	224	346
In4	16In	16	44	116	222	316
In5	5K + 7In7	12	52	123	217	341

Общее число вариантов разложения на кластерные подструктуры с числом выделенных кластеров, равным 2, 3, 4, 5 и 6, составило 2, 16, 37, 59 и 11 соответственно. Варианты разложения на кластерные подструктуры с числом выделенных кластеров 2, 3 и 6 приведены табл. 3.

В кристаллической структуре икосаэдрические кластеры $0@In_{12}$ занимают позиции $3b$ с симметрией $\bar{3}m$ и позиции $9e$ с симметрией $2/m$. Кластеры-спейсеры в виде гексагональной бипирамиды $0@K_6In_2$ занимают позиции $3a$ с симметрией $\bar{3}m$ (рис.1).

Икосаэдры $0@In_{12}$ с центром в позициях $3a$ являются темплатами, на которых происходит образование трехслойных кластеров K142 с диаметром 17 \AA (рис. 2, 3, табл. 4). Кластер K142 имеет химический состав оболочек $0@12In@32(K_{26}In_6)@98(K_{26}In_7)$. Вторая 32-атомная оболочка $K_{26}In_6$ соответствует внешней оболочке кластера Бергмана. Третья оболочка $K_{26}In_7$ из 98 атомов образована 5-, 6- и 7-атомными кольцами ($5^{54} \cdot 6^{38} \cdot 7^6$) и содержит 98 вершин, 270 ребер и 174 грани.

Икосаэдры $0@In_{12}$ с центром в позиции $9e$ характеризуют механизм связывания кластеров K142 друг с другом с объединением 5-членных колец (со связанностью $P_c = 10$).

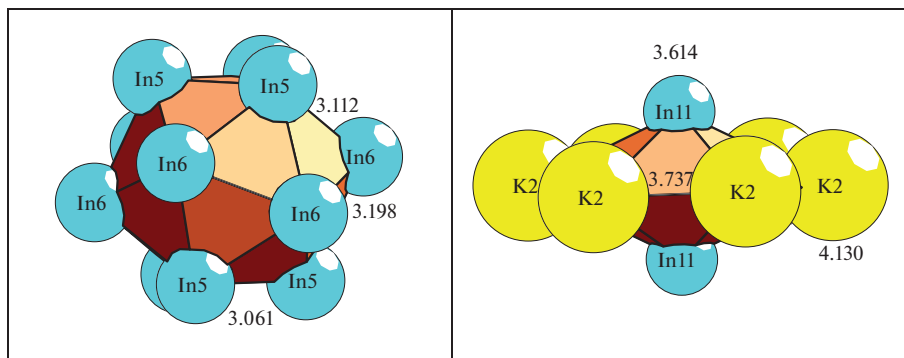


Рис. 1. $K_{44}In_{80}-hR366$. Кластер $0@In_{12}$ (слева) и кластер $@In_2K_6$ (справа). Числа указывают длины связей атомов в Å .

Таблица 3. Варианты кластерного представления кристаллической структуры $K_{44}In_{80}-hR366$. Указан центральный атом полиэдрического кластера, число его оболочек (в первой скобке) и количество атомов в каждой оболочке (во второй скобке). Кристаллографические позиции, соответствующие центрам пустот полиэдрических кластеров, обозначены ZA1, ZA2

Две структурные единицы
K6(1)(1@19) K8(2)(1@16@48)
ZA2(3b)(3)(0@12@32@98) ZA1(3a)(1)(0@8)
Три структурные единицы
K6(1)(1@19) K7(1)(1@16) K3(1)(1@16)
K6(1)(1@19) K2(1)(1@16) K3(1)(1@16)
K6(1)(1@19) K3(1)(1@16) In8(1)(1@11)
ZA1(3a)(1)(0@8) K6(1)(1@19) K8(2)(1@16@48)
ZA1(3a)(1)(0@8) K8(2)(1@16@48) In7(1)(1@10)
ZA1(3a)(1)(0@8) K8(2)(1@16@48) In10(1)(1@10)
ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K7(2)(1@16@49)
ZA2(3b)(2)(0@12@32) K6(1)(1@19) K2(1)(1@16)
Шесть структурных единиц
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K6(1)(1@19) K7(1)(1@16) K3(1)(1@16)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K6(1)(1@19) K8(1)(1@16) K2(1)(1@16)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K6(0)(1) K2(1)(1@16) K3(1)(1@16)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K6(1)(1@19) K2(1)(1@16) K3(1)(1@16)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K7(1)(1@16) K3(0)(1) In7(1)(1@10)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K7(1)(1@16) K3(1)(1@16) In7(1)(1@10)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K7(0)(1) K3(1)(1@16) In10(1)(1@10)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K7(1)(1@16) K3(1)(1@16) In10(1)(1@10)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K8(1)(1@16) K2(0)(1) K5(1)(1@14)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K8(0)(1) K2(1)(1@16) K5(1)(1@14)
ZA3(9e)(1)(0@12) ZA2(3b)(1)(0@12) ZA1(3a)(1)(0@8) K8(1)(1@16) K2(1)(1@16) K5(1)(1@14)

Таблица 4. Атомы, формирующие икосаэдрический кластер 1@12, а также 32- и 98-атомные оболочки

Нанокластер 0@12@32@98		
ZA2	6 In6	12 In1
6 In4	12 K1	12 In10
6 In5	6 K3	12 In2
	6 K5	12 In3
	2 K8	12 In7
		6 In8
		6 In9
		12 K2
		6 K4
		6 K6
		2 K7
Всего 142 атома		

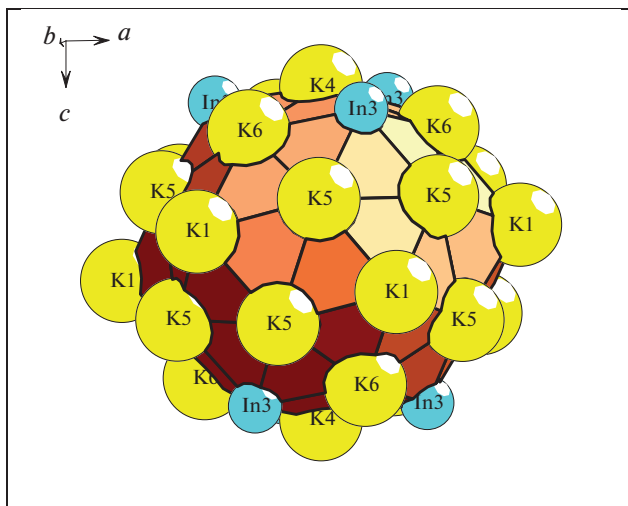


Рис. 2. $K_{44}In_{80}$ -*hR366*. Двухслойный кластер $0@12In@32(K_{28}In_6)$.

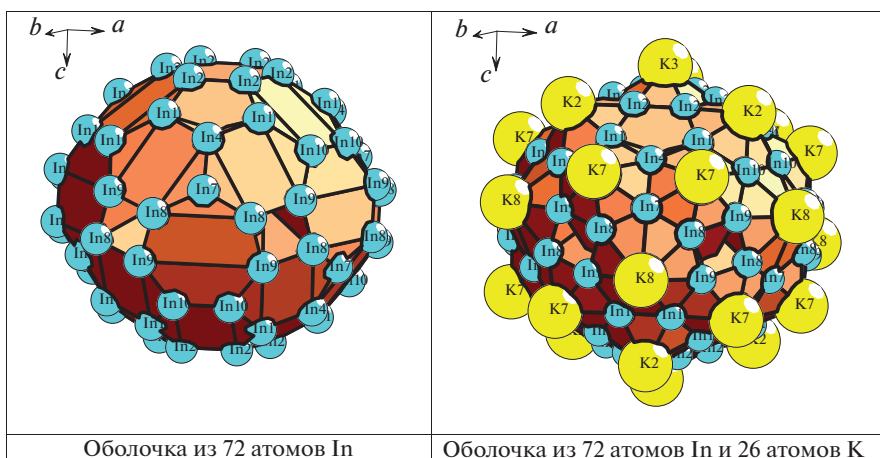


Рис. 3. $K_{44}In_{80}$ -*hR366*. Трехслойный кластер $0@12In@32(K_{28}In_6)@98(K_{26}In_{72})$.

Полиэдрические кластеры $0@In_{15}$ с центром в позиции $6c$, указанные в [6] в качестве каркас-образующих полиэдров, характеризуют локальную область в виде тройных и шестерных колец (связанных тремя парами атомов), в больших окнах которых расположены атомы K.

Самосборка кристаллической структуры $K_{44}In_{80}$ -*hR366*. Первичная цепь. Самосборка первичных цепей S_3^1 из кластеров $K142$ происходит в направлении $[100]$ (рис. 4). Расстояние между центрами кластеров $K142$ определяет значение вектора трансляций $a = 17.214 \text{ \AA}$.

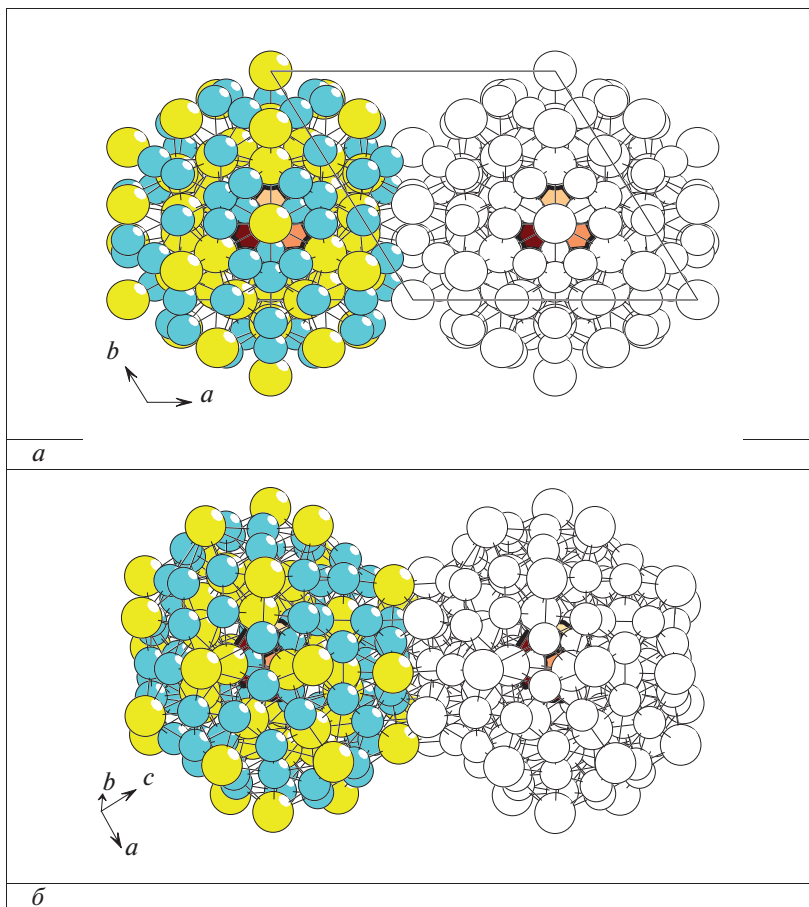


Рис. 4. $K_{44}In_{80}$ - $hR366$. Механизм связывания кластеров K142 при образовании первичной цепи (а). Механизм связывания кластеров K142 из соседних слоев при образовании каркаса (б).

Самосборка слоя. Образование базисного слоя S_3^2 происходит при связывании первичных цепей из кластеров K142, расположенных со сдвигом (рис. 5). Расстояние между центрами кластеров K142 в первичной цепи и в слое определяет длину векторов трансляций $a = b = 17.214 \text{ \AA}$. Базовая 2D сетка имеет топологический тип 3^6 . На этой стадии самосборки происходит локализация атомов In в пустотах слоя.

Самосборка каркаса. Каркас структуры S_3^3 формируется при связывании двух базисных слоев со сдвигом. Расстояние между слоями в направлении $[001]$ определяет значения вектора трансляции $c/3 = 44.612 \text{ \AA}/3$.

Пространственная группа $Fd\bar{3}m$ характеризуется позициями с точечной симметрией: $-43m$ (8a, 8b), $\bar{3}m$ (16c, 16d), $3m$ (32e) и др. В табл. 2 приведено локальное окружение атомов K, In и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке. В локальном окружении все атомов K находятся 16 атомов, атомов In – 11 (два атома), 12, 14, 16. Общее число вариантов разложения на кластерные подструктуры с

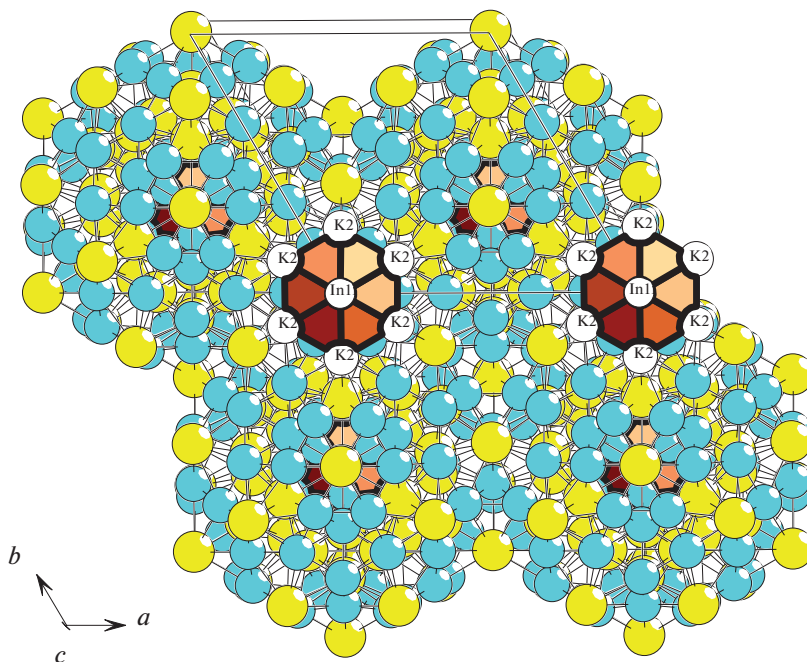


Рис. 5. $K_{44}In_{80}$ - $hR366$. Слой S_3^2 из двух первичных цепей.

числом выделенных кластеров, равным 2, 3, и 4 составило 2, 5, и 3 соответственно (табл. 5).

Как и для интерметаллида $K_{44}In_{80}$, в кристаллической структуре $K_{34}In_{82}$ установлены искосаэдры $0@In_{12}$ с симметрией $\bar{3}m$ и с центром в позиции $16d$. Икосаэдры $0@In_{12}$

Таблица 5. Варианты кластерного представления кристаллической структуры $K_{34}In_{82}$ - $cF464$

Две структурные единицы

$K1(2)(1@16@48)$ $In1(1)(1@16)$

$In1(1)(1@16)$ $K2(1)(1@16)$

Три структурные единицы

$ZA1(16c)(1)(0@8)$ $K1(2)(1@16@48)$ $In1(0)(1)$

$ZA1(16c)(1)(0@8)$ $K1(2)(1@16@48)$ $In1(1)(1@16)$

$ZA1(16c)(1)(0@8)$ $In1(0)(1)$ $K2(1)(1@16)$

$ZA1(16c)(1)(0@8)$ $In1(1)(1@16)$ $K2(1)(1@16)$

$ZA2(16d)(1)(0@12)$ $In1(1)(1@16)$ $K2(1)(1@16)$

Четыре структурные единицы

$ZA2(16d)(1)(0@12)$ $ZA1(16c)(1)(0@8)$ $K1(1)(1@16)$ $In1(1)(1@16)$

$ZA2(16d)(1)(0@12)$ $ZA1(16c)(1)(0@8)$ $In1(0)(1)$ $K2(1)(1@16)$

$ZA2(16d)(1)(0@12)$ $ZA1(16c)(1)(0@8)$ $In1(1)(1@16)$ $K2(1)(1@16)$

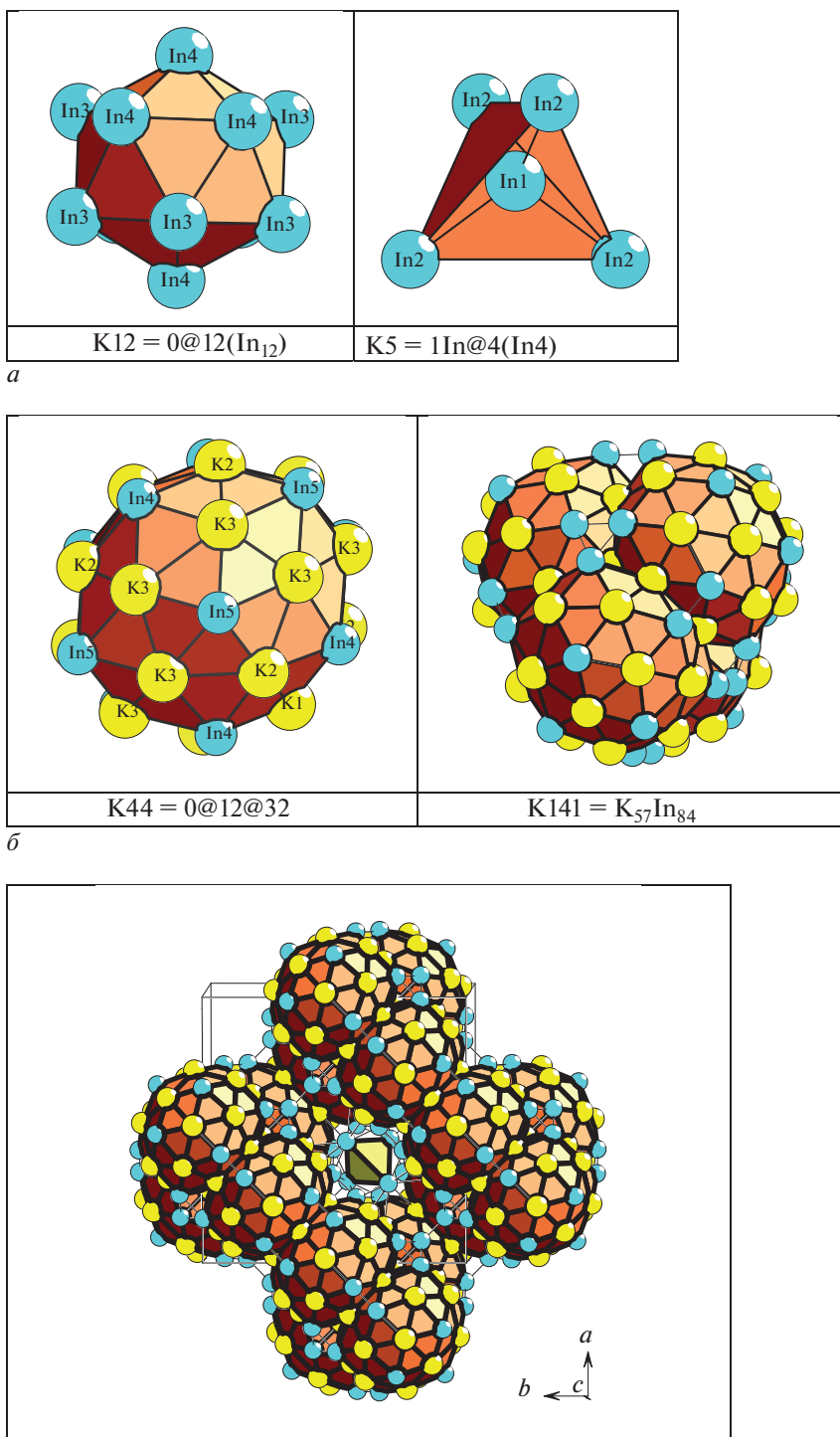


Рис. 6. $K_{34}In_{82}$ - $cF464$. Кластеры $0@In_{12}$ и $In(In_4)$ (а). Кластеры K44 и K141 (б). Слой из кластеров K141 (в).

также являются темплатами, на которых происходит образование 32-атомной оболочки $K_{20}In_{12}$, соответствующей кластеру Бергмана $0@12(In_{12})@32(K_{20}In_{12})$ (рис. 6). Четыре кластера Бергмана формируют супраполиэдрический кластер K141, имеющий симметрию $-43m$ с центром в позиции $8b$. В структуре имеются спейсеры $In(In_4)$ в виде тетраэдра с центральным атомом In, также имеющие симметрию $-43m$ с центром в позиции $8a$ (рис. 6).

Самосборка кристаллической структуры $K_{34}In_{82}$ -cF464. *Первичная цепь.* Самосборка первичных цепей происходит в направлении $[110]$ (рис. 6). Расстояние между центрами супракластеров K141 соответствует половине значения диагонали.

Самосборка слоя. Образование микрослоя S_3^2 происходит при связывании параллельно расположенных первичных цепей в плоскости (001) (рис. 6). На этой стадии происходит локализация спейсера $In(In_4)$. Расстояние между центрами супракластеров K141 из соседних цепей в направлениях $[100]$ и $[010]$ соответствует значениям векторов $a = b = 24.241 \text{ \AA}$.

Самосборка каркаса. Самосборка микрокаркаса. Микрокаркас структуры S_3^3 формируется при связывании (со сдвигом) двух микрослоев в направлении $[001]$. Расстояние между микрослоями определяет половину значения вектора трансляции $c = 24.241 \text{ \AA}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом полного разложения 3D атомной сетки на кластерные структуры для интерметаллида $K_{44}In_{80}$ -hR366 установлен каркас-образующий 142-атомный икосаэдрический нанокластер диаметром 17 \AA . Нанокластеры K142 являются трехслойными $0@12In@32(K_{26}In_6)@98(K_{26}In_7)$ с симметрией $\bar{3}$. Для интерметаллида $K_{34}In_{82}$ -cF464 установлен супраполиэдрический кластер K141 из четырех кластеров Бергмана, имеющий симметрию $-43m$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры $K_{44}In_{80}$ из кластеров-прекурсоров K142 и 3D структуры $K_{34}In_{82}$ из кластеров-прекурсоров K141 в виде: первичная цепь $S_3^1 \rightarrow$ слой (пакет) $S_3^2 \rightarrow$ каркас S_3^3 .

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН и Российского научного фонда (РНФ № 20-13-00054).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Villars P., Cenzual K. Pearson's Crystal Data-Crystal Structure Database for Inorganic Compounds (PCDIC) ASM International: Materials Park, OH.
2. Inorganic crystal structure database (ICSD). Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ), Germany and US National Institute of Standard and Technology (NIST).
3. Brusso G. The D13 structure type in intermetallic compounds // Acta Crystallographica B: 1969. V. 25. P. 1206–1207.
4. Blase W., Cordier G. Crystal structure of potassium indium (8/11), K_8In_{11} // Z. Kristallogr. 1991. V. 194. P. 150–151.
5. Lin B., Corbett J.D. Synthesis and characterization of the new cluster phase $K_{39}In_{80}$. Three K-In compounds with remarkably specific and transferable cation dispositions // Inorg. Chem. 2003. V. 42. P. 8768–8772.
6. Cordier G., Mueller V. Crystal structure of potassium indium ($22 - x/39 + x$) ($x = 0.67$), $K_{21.33}In_{39.67}$ // Z. Kristallogr. 1992. V. 198. P. 302–303.
7. Cordier G., Mueller V. Crystal structure of potassium indium (17/41), $K_{17}In_{41}$ // Z. Kristallogr. 1993. V. 205. P. 353–354.
8. Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д. Кластерная самоорганизация интерметаллических систем: кластеры K66 и K130 для самосборки кристаллической структуры $K_{78}In_{160}$ -hP238 и кластеры K17 для самосборки кристаллической структуры K_8In_{11} -hR114 // Физика и химия стекла. 2020. В печати.

9. *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.
10. *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.
11. *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.
12. *Blatov V.A., Ilyushin G.D., Proserpio D.M.* New Types of Multishell Nanoclusters with a Frank-Kasper Polyhedral Core in Intermetallics // *Inorg. Chem.* 2011. V. 50. P. 5714–5724.
13. *Ilyushin G.D.* Symmetry and Topology Code of the Cluster Self-Assembly of Intermetallic Compounds $A_2^{[16]}B_4^{[12]}$ of the Friauf Families Mg_2Cu_4 and Mg_2Zn_4 // *Crystallography Reports.* 2018. V. 63. 4. P. 543–552.
14. *Ilyushin G.D.* Modeling of Self-Organization Processes in Crystal-Forming Systems: Symmetry and Topology Code for the Cluster Self-Assembly of Crystal Structures of Intermetallic Compounds // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2017. V. 62. 13. P. 1730–1769.
15. *Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д.* Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. Новые двухслойные кластеры-прекурсоры $0@(Na_2Cd_6)@(Na_{12}Cd_{26})$ и $0@(Na_3Cd_6)@(Na_6Cd_{35})$ для самосборки кристаллической структуры $Na_{26}Cd_{141}$ – *hP168* // *Физика и химия стекла.* 2019. Т. 45. № 5. С. 403–411.
16. *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.