

КЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ И САМОСБОРКА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

 $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}\text{-}o\text{S64}$ И $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3\text{-}o\text{S28}$ © 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 Россия²Международный научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению,
Самарский государственный технический университет,
ул. Молодогвардейская, 244, Самара, 443100 Россия³Федеральный научно-исследовательский центр “Кристаллография и фотоника”,
Ленинский пр., 59, Москва, 119333 Россия

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

Поступила в редакцию 18.05.2020 г.

После доработки 23.07.2020 г.

Принята к публикации 06.08.2020 г.

С помощью компьютерных методов (пакет программ TorosPro) осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллической структуры $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}\text{-}o\text{S64}$ (пр. гр. $Cmcm$, $a = 4.640$, $b = 27.112$, $c = 11.491$ Å, $V = 1445.5$ Å³) и $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3\text{-}o\text{S28}$ (пр. гр. $Cmcm$, $a = 4.782$, $b = 20.717$, $c = 7.743$ Å, $V = 767.1$ Å³). Для интерметаллида $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}$ установлен новый тип 11-атомного кластера K11, образованного из двояных пентагональных колец: $\text{K11} = 0@11(\text{Li}_5)\text{Ca}(\text{Sn}_5)$. Максимальная симметрия кластера K11 и первичной цепи из трансляционно-связанных кластеров K11 соответствует некристаллографической симметрии $5m$. Первичные цепи из связанных кластеров K11, сохраняющие только симметрию m , расположены в направлении [100] и расстояние между центрами кластеров определяет длину вектора $a = 4.640$ Å. Образование слоя происходит при связывании расположенных антипараллельно первичных цепей. Между первичными цепями располагаются тетраэдрические кластеры $\text{K4} = 0@4(\text{Li}_3\text{Sn})$, образующие цепи в направлении [100]. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры интерметаллида $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3\text{-}o\text{S28}$ из кластеров $\text{K4} = 0@4(\text{LiMgEuSn})$ и $\text{K3} = 0@3(\text{Sn}_2\text{Eu})$. Образование слоя происходит при связывании расположенных параллельно цепей из $\text{K4} + \text{K3}$.

Ключевые слова: интерметаллид $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}\text{-}o\text{S64}$, интерметаллид $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3\text{-}o\text{S28}$, самосборка кристаллической структуры, кластеры-прекурсоры $\text{K3} = 0@3(\text{Sn}_2\text{Eu})$, $\text{K4} = 0@4$ и $\text{K11} = 0@11$

DOI: 10.31857/S0132665120060207

ВВЕДЕНИЕ

В тройных системах $\text{A}_n\text{B}_m\text{C}_k$ с участием атомов щелочных металлов А число кристаллохимически различных интерметаллидов в ряду $\text{Li} \rightarrow \text{Na} \rightarrow \text{K}, \text{Rb} \rightarrow \text{Cs} \rightarrow$ последовательно уменьшается: $511 \rightarrow 176 \rightarrow 135 \rightarrow 66 \rightarrow 53$ [1, 2]. Если в образовании двойных Li-интерметаллидов принимают участие только 22 химических элемента, то в образовании тройных Li-интерметаллидов принимают участие уже 51 химический элемент. Многочисленные интерметаллиды Li образуются с участием атомов Ge, Sn,

Таблица 1. Кристаллографические данные интерметаллидов, образующихся в тройных и четверных системах

Интерметаллид	Группа симметрии	Параметры ячейки, Å	$V, \text{Å}^3$	Индекс Пирсона
$\text{Li}_2\text{Sm}_2\text{Ge}_3$	<i>Cmcm</i>	4.372, 18.494, 6.840	553.1	<i>oS28</i>
$\text{Li}_2\text{Nd}_2\text{Ge}_3$	<i>Cmcm</i>	4.422, 18.658, 6.891	568.5	<i>oS28</i>
$\text{Li}_2\text{Pr}_2\text{Ge}_3$	<i>Cmcm</i>	4.443, 18.723, 6.911	575.0	<i>oS28</i>
$\text{Li}_2\text{Ce}_2\text{Ge}_3$	<i>Cmcm</i>	4.472, 18.825, 6.942	584.5	<i>oS28</i>
$\text{Li}_2\text{La}_2\text{Ge}_3$	<i>Cmcm</i>	4.531, 19.001, 7.008	603.4	<i>oS28</i>
$\text{LiMgSr}_2\text{Ge}_3$	<i>Cmcm</i>	4.636, 19.703, 7.324	669.0	<i>oS28</i>
$\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3$	<i>Cmcm</i>	4.782, 20.717, 7.743	767.1	<i>oS28</i>
$\text{LiMgSr}_2\text{Sn}_3$	<i>Cmcm</i>	4.843, 20.923, 7.805	790.9	<i>oS28</i>
Li_9CaSn_6	<i>Cmcm</i>	4.640, 27.112, 11.491	1445.5	<i>oS68</i>
Li_9EuSn_6	<i>Cmcm</i>	4.723, 27.125, 11.436	1465.1	<i>oS68</i>
LiCa_2Ge_3	<i>Pnnm</i>	11.380, 10.730, 4.430	540.9	<i>oP24</i>
LiEu_2Ge_3	<i>Pnnm</i>	10.968, 11.687, 4.548	583.0	<i>oP24</i>

Al, Ga, In, Ca, Mg, Zn. Наибольшее число кристаллических структур Li-интерметаллидов характеризуются пр. группами *Fm-3m* (108 соединений), *F-43m* (65), *Cmcm* (31), *Pnma* (31) и *Fd-3m* (27).

В системах Li–Ca–M и Li–Eu–M установлено образование 25 и 11 кристаллохимически различных интерметаллидов [1, 2]. Из них только интерметаллиды Li_9EuSn_6 -*oS68* [3] и Li_9CaSn_6 -*oS68* [3] с пр. группой *Cmcm* и LiEu_2Ge_3 -*oP24* [4] и LiCa_2Ge_3 -*oP24* [5] с пр. группой *Pnnm* являются кристаллохимическими аналогами (табл. 1).

Тройные интерметаллиды семейства $\text{Li}_2\text{Ln}_2\text{Ge}_3$ -*oS28* (с пр. группой *Cmcm* и Ln = La, Ce, Pr, Nd, Sm [6]) имеют кристаллохимические аналоги среди четверных интерметаллидов $\text{LiMgSr}_2\text{Ge}_3$ -*oS28* [7], $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3$ -*oS28* [3], $\text{LiMgSr}_2\text{Sn}_3$ -*oS28* [3] (табл. 1).

В настоящей работе с помощью пакета программ ToposPro [8] проведен геометрический и топологический анализ кристаллических структур интерметаллидов $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}$ -*oS64* и $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3$ -*oS28*. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}$ -*oS64* из кластеров-прекурсоров $K4 = 0@11(\text{Li}_3\text{Sn})$ и $K11 = 0@11(\text{Li}_5\text{Ca})(\text{Sn}_5)$ и $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3$ -*oS28* из кластеров $K4 = 0@4(\text{LiMgEuSn})$ и $K3 = 0@3(\text{Sn}_2\text{Eu})$ в виде: первичная цепь → слой → каркас. Работа продолжает исследования [9–17] 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 [8], 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.

Таблица 2. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в структуре $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}$

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Li1	8Li + 6Sn	14	47	105	190	290
Li2	8Li + 4Sn	12	41	96	176	294
Li3	5Li + 1Ca + 6Sn	12	47	106	187	299
Li4	6Li + 1Ca + 5Sn	12	42	94	186	302
Li5	8Li + 4 Sn4	12	42	98	174	306
Li6	6Li + 1Ca + 5Sn	12	45	100	186	295
Ca1	5Li + 10Sn	15	44	108	183	304
Sn1	8Li + 2Ca + 2Sn	12	49	111	192	300
Sn2	6Li + 2Ca + 2Sn	10	44	101	183	283
Sn3	8Li + 2Ca + 2Sn	12	45	96	191	301
Sn4	9Li9	9	38	92	169	284

Таблица 3. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в структуре $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3$

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Mg1	3Mg + 4Sn + 5Eu	12	44	98	178	262
Sn1	Mg + 2Sn + 6Eu	9	45	90	168	281
Sn2	6Mg + 3 Eu3	9	41	96	165	269
Eu1	4Mg + 9Sn + 1Eu	14	42	98	184	270
Eu2	6Mg + 6Sn + 1Eu	13	41	102	161	287

Полученные значения координационных последовательностей атомов в 3D-сетках, приведены в табл. 2 и 3, в которых жирным шрифтом выделено число соседних атомов в ближайшем окружении, т.е. в первой координационной сфере атома. Все атомы характеризуются различными наборами координационных последовательностей $\{N_{kl}\}$, следовательно, все атомы топологически (и функционально) различны.

Алгоритм разложения в автоматическом режиме структуры любого интерметаллида, представленного в виде свернутого графа, на кластерные единицы реализован в комплексе программ ToposPro [8].

САМОСБОРКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}$ -oS64 И $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3$ -oS28

Использованный нами метод моделирования кристаллической структуры основан на определении иерархической последовательности ее самосборки в кристаллографическом пространстве [9–11]. На первом уровне самоорганизации системы определяется механизм формирования первичной цепи структуры из нанокластеров 0-уровня, сформированных на темплатной стадии химической эволюции системы, далее – ме-

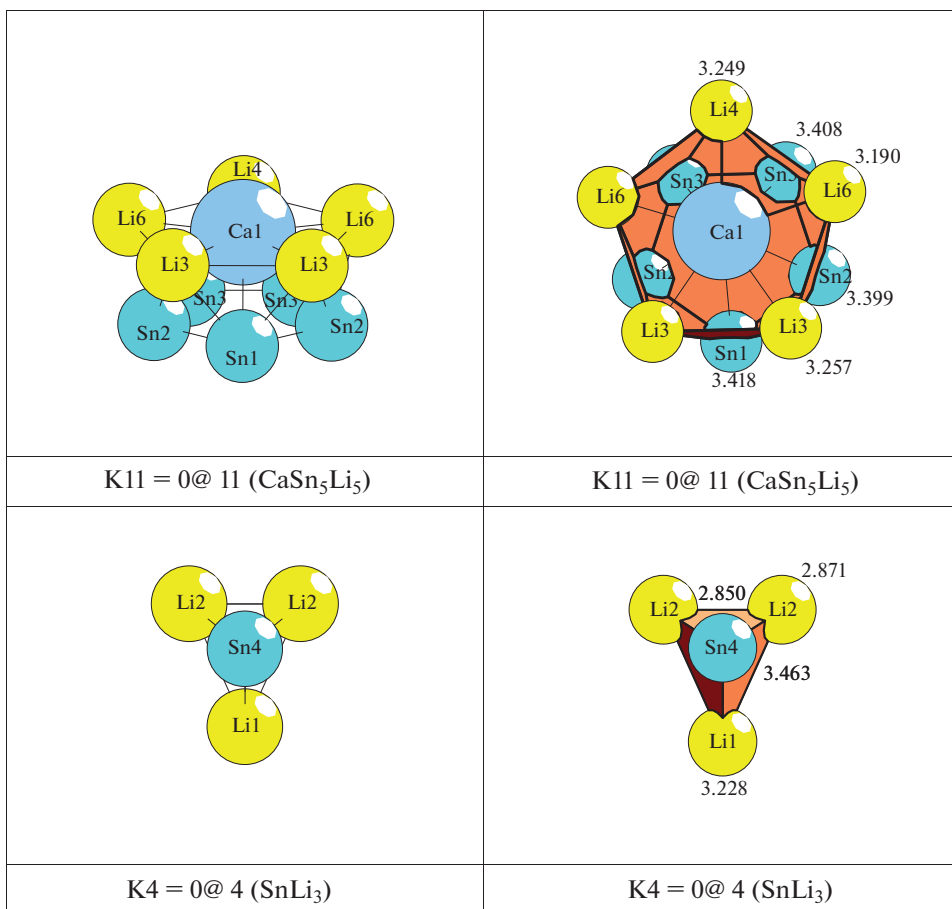


Рис. 1. $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}\text{-oS64}$. Кластеры-прекурсоры K11 и K4.

ханизм самосборки из цепи слоя (2-ой уровень) и затем из слоя – трехмерного каркаса (3-й уровень).

Кристаллографические данные $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}\text{-oS64}$

В элементарной ячейке все атомы находятся в частных позициях пространственной группы *Стт* (по. 63) в двух плоскостях (100) на высоте 0 и 0.5. Из них в позиции $4b$ ($2/m$) – атом Li1, в позиции $4c$ ($m2m$) – Li1, Li4, Ca1, Sn1, Sn4, в позиции $8f$ (m) – Li2, Li3, Li6, Sn2, Sn3.

В табл. 1 приведено локальное окружение атомов Ca, Li, Sn и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке. Атомы Ca характеризуются $\text{KЧ} = 15$, атомы Li – 12 (пять атомов) и 14, атомы Sn – 9, 10 и 12 (два атома).

Супраполиэдрический кластер-прекурсор K11. Полиэдрический кластер-прекурсор $\text{K11} = 0@11(\text{Li}_5\text{CaSn}_5)$ с симметрией m и центром в позиции $8g$ ($1/4, 0.86, 1/4$) представляет собой пентагональную пирамиду CaSn_5 , на каждой грани которой располо-

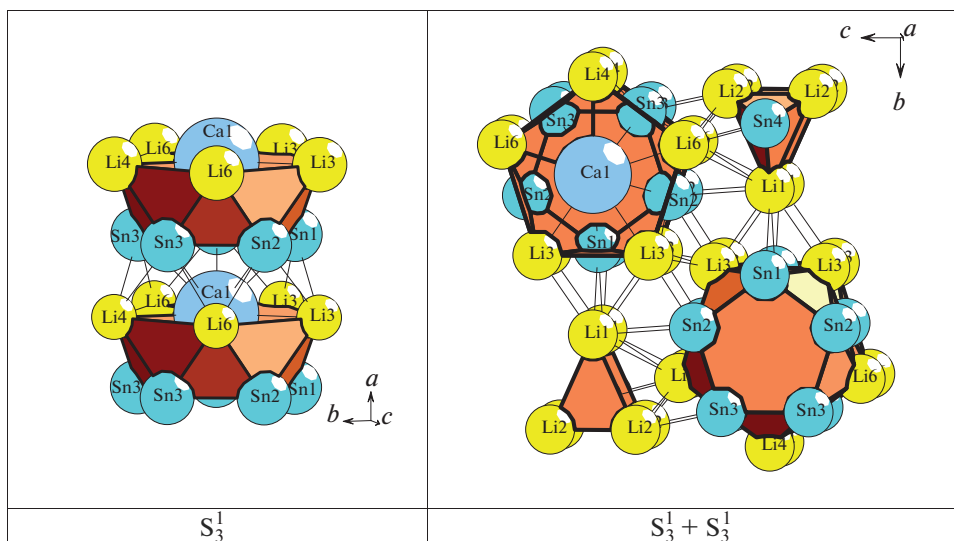


Рис. 2. $Li_{36}Ca_4Sn_{24}-oS64$. Первичная цепь S_3^1 (слева) и слой S_3^1 (справа).

жены атомы Li, связанные в 5-ные кольца, лежащие в одной плоскости с атомами Ca (рис. 1a). Максимальная симметрия кластера K11 соответствует некристаллографической симметрии $5m$.

Полиэдрический кластер-прекурсор K4. Кластер $K4 = 0@4(Li_3Sn)$ с симметрией m представляет собой тетраэдр (рис. 1). Центр кластера K4 находится в позиции $8g$ ($3/8, 0.58, 1/4$).

Самосборка кристаллической структуры $Li_{36}Ca_4Sn_{24}-oS64$. Самосборка первичных цепей S_3^1 из кластеров K11 происходит в направлении $[100]$ (рис. 2). Расстояние между центрами кластеров K11 определяет длину наименьшей трансляции $a = 4.640 \text{ \AA}$.

Образование слоя S_3^2 происходит при связывании расположенных антипараллельно первичных цепей $S_3^1 + S_3^1$ ($g = -1$, позиция $8d$ ($1/4, 3/4, 1/2$)) (рис. 2). Между первичными цепями располагаются тетраэдрические кластеры Li_3Sn , образующие цепи в направлении $[100]$. Каркасная структура S_3^3 формируется при связывании слоев в направлении $[001]$ (рис. 3). Расстояние между эквивалентными 2D слоями определяет длину вектора $c = 11.490 \text{ \AA}$.

Кристаллографические данные $LiMgEu_2Sn_3-oS28$

В элементарной ячейке атомы находятся в частных позициях пространственной группы $Cmcm$ в двух плоскостях (100) на высоте 0 и 0.5. Из них в позиции $4c$ – Eu1, Eu2, Sn2; в позиции $8f$ – (Li + Mg), Sn1. В табл. 3 приведено локальное окружение атомов Mg, Eu, Sn и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке. Атомы Eu характеризуются КЧ = 13 и 14, атом Mg (Li) – КЧ = 12, атомы Sn – КЧ = 9.

Кластеры-прекурсоры K4 и K3. Полиэдрический кластер-прекурсор $K4 = 0@4(LiMgEuSn)$ с симметрией m представляет тетраэдр (рис. 4). Центр кластера K4

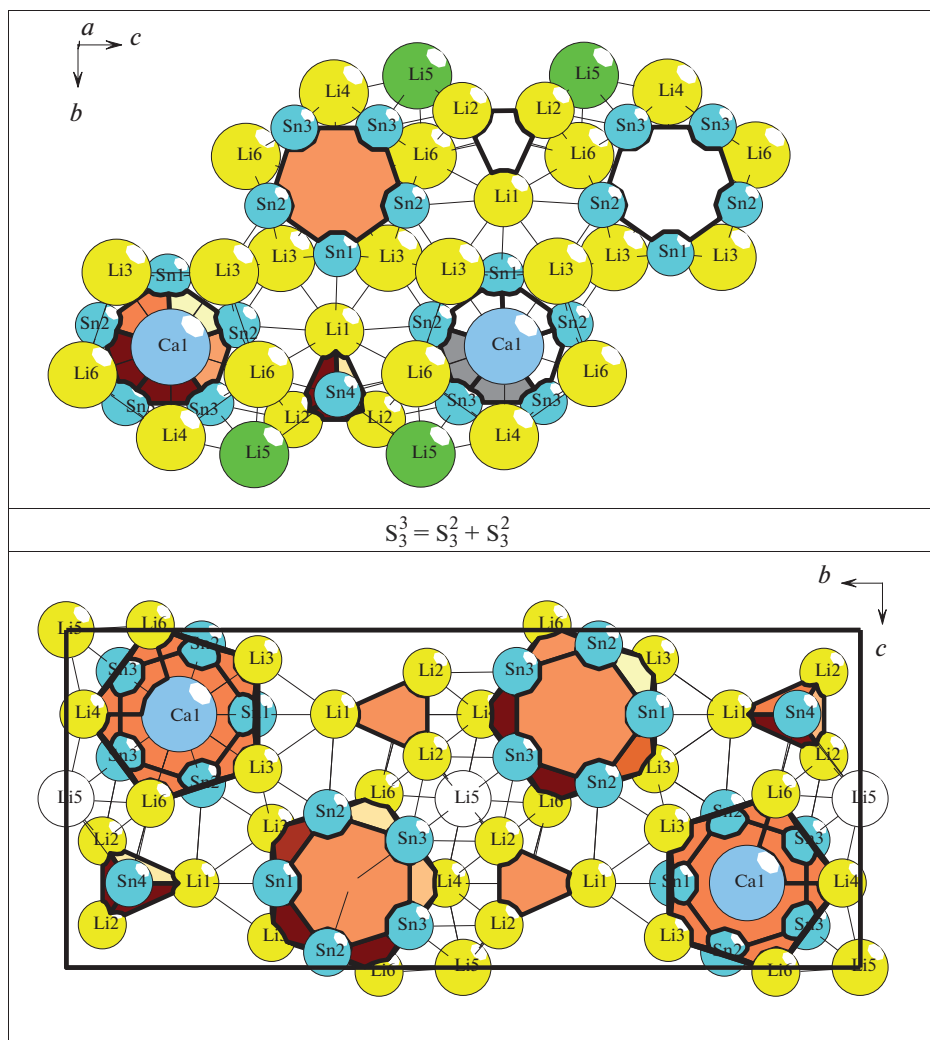


Рис. 3. $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}\text{-oS}_{64}$. Самосборка каркаса $S_3^3 = S_3^2 + S_3^2$ при связывании S_3^2 в направлении [010] (сверху) и [001] (снизу).

находится в позиции $8g$ ($3/8, 0.76, 1/4$). Кластер-прекурсор $K3 = 0@3(\text{Sn}_2\text{Eu})$ имеет форму треугольника и также занимает позиции $8g$ ($3/8, 0.76, 1/4$) и ($1/6, 0.52, 1/4$).

Самосборка кристаллической структуры $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3\text{-oS}_{28}$. Самосборка первичной цепи $S_3^1\text{-A}$ из кластеров $K4 + K4$ со связанностью $P_c = 7$ происходит в направлении [001] (рис. 5). Вторичная цепь $S_3^1\text{-B}$ из кластеров $K3 + K3$ формируется при их связывании с тетраэдрами первичной цепи (с $P_c = 8$) (рис. 5).

Образование каркаса S_3^3 происходит при связывании слоев S_3^2 в направлении [100] (рис. 5) и затем в направлении [010] (рис. 6).

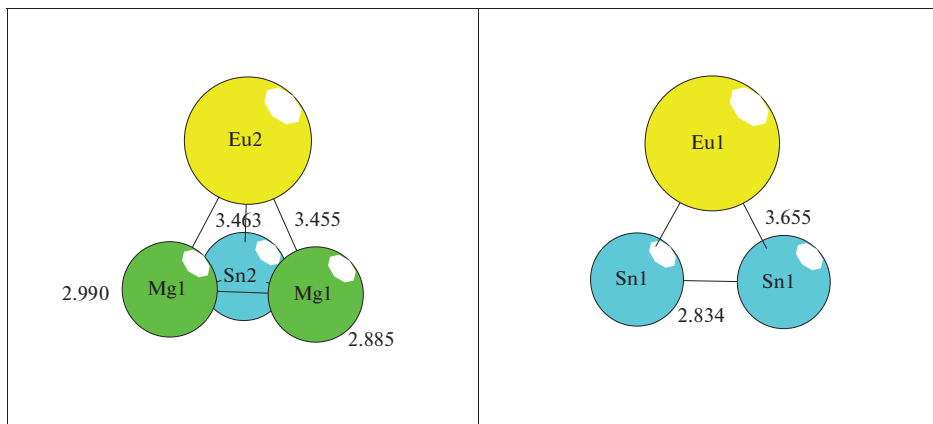


Рис. 4. $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3\text{-}o\text{S28}$. Кластеры-прекурсоры K4 (слева) и K3 (справа).

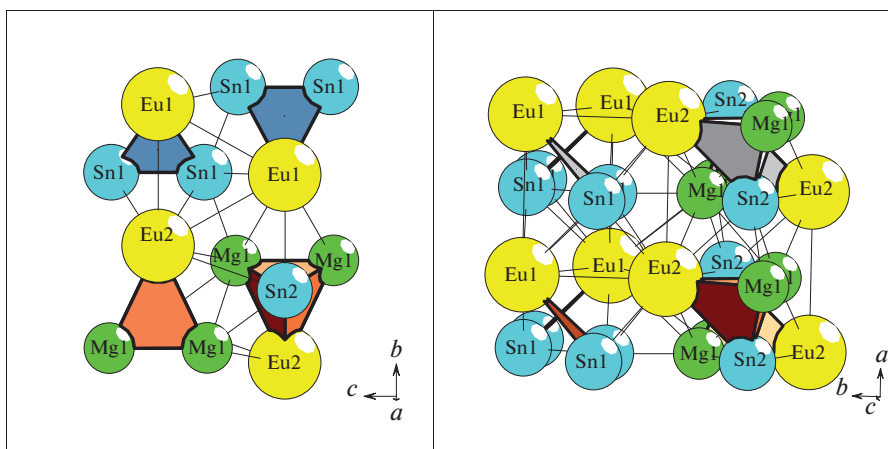


Рис. 5. $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3\text{-}o\text{S28}$. Слой S_3^2 (слева) и каркас S_3^3 (справа).

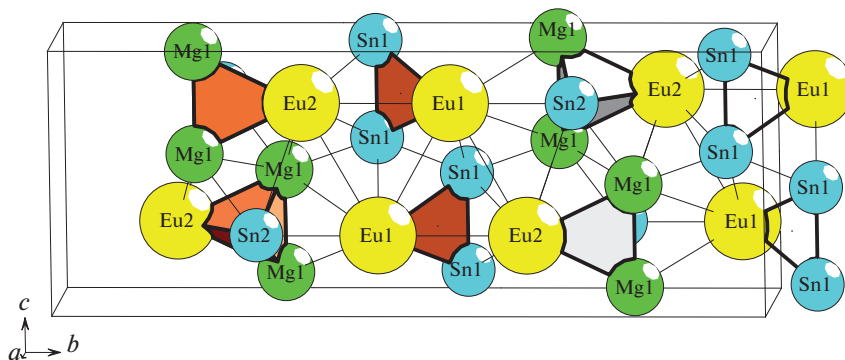


Рис. 6. $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3\text{-}o\text{S28}$. Сборка каркаса S_3^3 в направлении [010].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование кластерной самосборки кристаллической структуры $\text{Li}_{36}\text{Ca}_4\text{Sn}_{24}\text{-}o\text{S}64$ из полиэдрических кластеров-прекурсоров $\text{K11} = 0@11(\text{CaSn}_5\text{Li}_5)$ с симметрией m , образованного из двояных пентагональных колец. Максимальная симметрия кластера K11 и первичной цепи из трансляционно связанных кластеров K11 соответствует некристаллографической симметрии $5m$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры из кластеров-прекурсоров K11 и K4 в виде: первичная цепь $\text{S}_3^1 \rightarrow \rightarrow$ микрослой $\text{S}_3^2 \rightarrow$ микрокаркас S_3^3 . Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры интерметаллида $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3\text{-}o\text{S}28$ из кластеров $\text{K4} = 0@4(\text{LiMgEuSn})$ и $\text{K3} = 0@3(\text{Sn}_2\text{Eu})$. Образование слоя происходит при связывании расположенных параллельно цепей из $\text{K4} + \text{K3}$.

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. 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. Todorov I., Sevov S.C. Heavy—metal aromatic and conjugated species: rings, oligomers, and chains of tin in $\text{Li}_{(9-x)}\text{EuSn}_{(6+x)}$, $\text{Li}_{(9-x)}\text{CaSn}_{(6+x)}$, $\text{Li}_5\text{Ca}_7\text{Sn}_{11}$, $\text{Li}_6\text{Eu}_5\text{Sn}_9$, $\text{LiMgEu}_2\text{Sn}_3$, and $\text{LiMgSr}_2\text{Sn}_3$ // Inorg. Chem. 2005 V. 44. P. 5361–5369.
4. Xie Q.-X., Nesper R. Crystal structure of dieuropium monolithium trigermanide, Eu_2LiGe_3 // Z. Kristallogr. — New Cryst. Struct. 2004 V. 219. P. 79–80.
5. Mueller W., Schaefer H., Weiss A. Die Struktur der Phasen Ca_2LiSi_3 und Ca_2LiGe_3 // Zeitschrift fuer Naturforschung, Teil B. Anorganische Chemie, Organische Chemie. 1971. V. 26. P. 5–7.
6. Guo Shengping, You Taesoo, Bobev S. Closely related rare—earth metal germanides $\text{RE}_2\text{Li}_2\text{Ge}_3$ and $\text{RE}_3\text{Li}_4\text{Ge}_4$ (RE = La – Nd, Sm): synthesis, crystal chemistry, and magnetic properties // Inorganic Chemistry. 2012. V. 51. P. 3119–3129.
7. Xie Q.-X., Nesper R. Crystal structure of dieuropium and distrontium di(lithium, magnesium) trigermanide, $\text{M}_2\text{Li}(x)\text{Mg}(2-x)\text{Ge}_3$ (M = Eu, $x = 1.16$; M = Sr, $x = 0.94$) // Z. Kristallogr. New Cryst. Struct. 2004. V. 219. P. 83–84.
8. 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. № 7. P. 3576–3585.
9. Shevchenko V.Ya., Blatov V.A., Ilyushin G.D. Cluster Self—Organization of Intermetallic Systems: New Two—Layer Cluster—Precursor $\text{K46} = 0@8(\text{Ca}_2\text{Hg}_6)@38(\text{Hg}_6 + \text{CaHg}_6)2(\text{Ca}_6\text{Hg}_6)$ for Self—Assembly of the Crystal Structure of $\text{Ca}_{11}\text{Hg}_{54}\text{-}h\text{P}65$ // Glass Physics and Chemistry. 2020. V. 46. P. 1–5.
10. Shevchenko V.Ya., Blatov V.A., Ilyushin G.D. Cluster Self—Organization of Intermetallic Systems: New Precursor Cluster $0@8(\text{Sr}_2\text{Au}_6)$ for Self—Assembly of the Crystal Structure of $(\text{Sr}_2\text{Au}_6)(\text{Ga}_3)\text{-}h\text{R}66$ // Glass Physics and Chemistry. 2020. V. 46. P. 6–12.
11. Илюшин Г.Д. Интерметаллиды Li_kM_n (M – Ag, Au, Pt, Pd, Ir, Rh): геометрический и топологический анализ, тетраэдрические кластерные прекурсоры и самосборка кристаллических структур // Кристаллография. 2020. Т. 65. Вып. 2. С. 202–210.
12. Илюшин Г.Д. Интерметаллиды Na_kM_n (M = K, Cs, Ba, Ag, Pt, Au, Zn, Bi, Sb): геометрический и топологический анализ, тетраэдрические кластерные прекурсоры и самосборка кристаллических структур // Кристаллография. 2020. Т. 65. С. 428–434.
13. Ковальчук М.В., Алексеева О.А., Благов А.Е., Илюшин Г.Д. Исследование структуры кристаллообразующих растворов дигидрофосфата калия $\text{K}(\text{H}_2\text{PO}_4)$ (тип КДР) на основе модели-

- рования кластеров прекурсоров и по данным малоуглового рассеяния // Кристаллография. 2019. Т. 64. Вып. 1. С. 10–14.
14. *Shevchenko V.Ya., Blatov V.A., Ilyushin G.D.* Symmetrical and Topological Self–Assembly Code of the Crystalline Structure of a New Aluminosilicate Zeolite ISC–1 from Templated t–plg Suprapolyhedral Precursors // *Glass Physics and Chemistry*. 2019. V. 45. № 2. P. 85–90.
 15. *Ilyushin G.D.* Crystal Chemistry of Lithium Intermetallic Compounds: A Survey. Russian // *J. Inorganic Chemistry*. 2018. V. 63. Iss. 14. P. 1786–1799.
 16. *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.
 17. *Илюшин Г.Д.* Кластерная самоорганизация интерметаллических систем: 124 атомный кластер $0@Ga_{12}@Li_{20}Ga_{12}@Li_4Na_{16}Ga_{60}$ и 44-атомный кластер $0@Ga_{12}@Li_2Na_{18}Ga_{12}$ для самосборки кристаллической структуры $Li_{48}Na_{80}Ga_{332} - oF920$ // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 6. С. 857–861.