

**КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ:  
НОВЫЕ ДВУХСЛОЙНЫЕ НАНОКЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ  
K64 = 0@8(Sn<sub>4</sub>Ba<sub>4</sub>)@56(Na<sub>4</sub>Sn<sub>52</sub>) И K47 = Na@Sn<sub>16</sub>@Na<sub>30</sub>  
В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ Na<sub>52</sub>Ba<sub>4</sub>Sn<sub>80</sub>-cF540**

© 2020 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 11.06.2020 г.

После доработки 20.07.2020 г.

Принята к публикации 06.08.2020 г.

С помощью компьютерных методов (пакета программ ToposPro) осуществлен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры интерметаллида Na<sub>52</sub>Ba<sub>4</sub>Sn<sub>80</sub>-cF540 ( $a = 25.053 \text{ \AA}$ ,  $V = 16\,010.82 \text{ \AA}^3$ , пр. группа  $F-43m$ ). Установлены два новых нанокластера-прекурсора с симметрией  $-43m$ : двухслойный нанокластер K47 состава Na@16Sn@30Na с внутренним полиэдром Фриауфа NaSn<sub>16</sub> и с 30 атомами Na в оболочке и двухслойный нанокластер K64 состава 0@8(Sn<sub>4</sub>Ba<sub>4</sub>)@56(Na<sub>4</sub>Sn<sub>52</sub>) с внутренним полиэдром Sn<sub>4</sub>Ba<sub>4</sub> и с 56 атомами (4Na + 52Sn) в оболочке. Реконструирован симметричный и топологический коды процессов самосборки 3D структур из нанокластеров-прекурсоров K64 и K47 в виде: первичная цепь → микрослой → микрокаркас. В качестве спейсеров, занимающих пустоты в 3D каркасе из нанокластеров K64 и K47, установлены кластеры Na<sub>4</sub> и Sn<sub>8</sub> с симметрией  $-43m$  и атомы Na.

**Ключевые слова:** интерметаллид Na<sub>52</sub>Ba<sub>4</sub>Sn<sub>80</sub>-cF540, самосборка кристаллической структуры, нанокластеры-прекурсоры K64 = 0@8(Sn<sub>4</sub>Ba<sub>4</sub>)@56(Na<sub>4</sub>Sn<sub>52</sub>) и K47 = Na@16Sn@30Na

DOI: 10.31857/S0132665120060219

## ВВЕДЕНИЕ

В 103 тройных системах Na–M1–M2 установлено образование 176 кристаллохимически различных Na-интерметаллидов [1, 2]. В образовании двойных Na-интерметаллидов Na<sub>n</sub>M<sub>m</sub> принимали участие 22 химических элемента M, в образовании тройных Na-интерметаллидов – уже 32 химических элемента M1 или M2. Многочисленные тройные интерметаллиды Na образуются в системах с участием атомов Sn (33 структурных типа), Sb (18 структурных типов), и Ga (16 структурных типов). В системах Na–Sn–M установлено образование 46 интерметаллидов с участием 30 атомов M, относящихся к 33 кристаллохимическим семействам [1, 2]. Наибольшее число тройных интерметаллидов (табл. 1) образуется с атомами Zn (семь) [3–6], по три – с атомами

Таблица 1. Кристаллохимические данные тройных Na-интерметаллидов

Интерметаллид	Группа симметрии	Параметры элементарной ячейки, Å и градусы, °	$V, \text{Å}^3$	Индекс Пирсона
$\text{Na}_6\text{Sn}_2\text{Zn}$ [3]	$C2/m$ (12)	10.077, 5.473, 9.316 90.00, 98.07, 90.00	508.7	$mS18$
$\text{Na}_{20}\text{Sn}_{11}\text{Zn}_8$ [3]	$C2/c$ (15)	16.150, 9.276, 27.594 90.00, 102.97, 90.00	4028.6	$mS156$
$\text{Na}_{29}\text{Sn}_{32}\text{Zn}_{24}$ [4]	$P-62m$ (189)	15.712, 15.712, 9.462	2023.0	$hP85$
$\text{Na}_{22}\text{Sn}_{19}\text{Zn}_{20}$ [5]	$Pnma$ (62)	16.403, 15.597, 22.655	5796.1	$oP244$
$\text{Na}_{16}\text{Sn}_{13.5}\text{Zn}_{13.5}$ [5]	$Ibam$ (72)	27.401, 16.100, 18.431	8131.2	$oI344$
$\text{Na}_{34}\text{Sn}_{38}\text{Zn}_{66}$ [5]	$R-3m$ (166)	16.956, 16.956, 36.861	9177.6	$hR139$
$\text{Na}_5\text{Sn}_{10}\text{Zn}_2$ [6]	$P6_322$ (178)	6.451, 6.45, 16.237	224.78	$hP8$
$\text{NaAuSn}$ [7]	$Pna2_1$ (33)	7.476, 8.088, 4.530	273.9	$oP12$
$\text{Na}_2\text{AuSn}_3$ [8]	$P6_3/mmc$ (194)	9.585, 9.585, 7.516	598.0	$hP24$
$\text{Na}_{60}\text{Au}_{78}\text{Sn}_{24}$ [9]	$Im-3$ (204)	14.989, 14.989, 14.989	3367.6	$cI162$
$\text{NaGaSn}_5$ [10]	$P3_12$ (151)	6.328, 6.328, 6.170	214.0	$hP9$
$\text{Na}_3\text{Ga}_8\text{Sn}_3$ [11]	$C2/m$ (12)	15.327, 8.907, 12.249 90.00, 129.60, 90.00	1288.5	$mS56$
$\text{Na}_{10}\text{Ga}_6\text{Sn}_3$ [12]	$P4_2/mnm$ (136)	14.576, 14.576, 8.976	1907.0	$tP96$
$\text{Na}_8\text{EuSn}_6$ [13]	$P2_1/m$ (11)	12.912, 5.220, 15.721, 90.00, 108.09, 90.00	1007.2	$mP32$
$\text{Na}_8\text{BaSn}_6$ [13]	$P2_1/m$ (11)	12.897, 5.362, 15.826, 90.00, 108.19, 90.00	1039.7	$mP32$
$\text{Ba}_{16}\text{Na}_{204}\text{Sn}_{322}$ [14]	$F-43m$ (216)	25.053, 25.053, 25.053	15725.3	$cF540$
$\text{Ba}_{16}\text{Na}_{204}\text{Sn}_{309}$ [14]	$F-43m$ (216)	25.203, 25.203, 25.203	16008.5	$cF556$

Au [7–9] и Ga [10–12], по два – с атомами Ca, Sr, Ba [13, 14], Cu, Sb, по одному – с пятнадцатью атомами, в их числе – Li, K, Rb, Cs.

Наиболее кристаллохимически сложным (и не имеющим аналогов) является интерметаллид  $\text{Na}_{52}\text{Ba}_4\text{Sn}_{80}$ - $cF540$  с параметрами кубической ячейки:  $a = 25.053 \text{ Å}$ ,  $V = 16010.82 \text{ Å}^3$ , пр. группа  $F-43m$  [14]. Последовательность Вайкоффа для 19 кристаллографически независимых атомов имеет вид  $i^4h^{11}c^4$ . Значения КЧ (координационных чисел) атомов Na – 12, 14, 15, 16 атомов, атома Ba – 19, атомов Sn – 9, 10.

В настоящей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры интерметаллида  $\text{Na}_{52}\text{Ba}_4\text{Sn}_{80}$ - $cF540$  (пакет программ ToposPro) [15]. Установлен симметричный и топологический код процессов кластерной самосборки кристаллической структуры в виде: первичная цепь  $S_3^1 \rightarrow$  микрослой  $S_3^2 \rightarrow$  микрокаркас  $S_3^3$ .

Работа продолжает исследования [16–25] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супраполиэдрическом уровне и геометрического и топологического анализа кристаллических структур с применением современных компьютерных методов (пакет программ ToposPro).

#### МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ ToposPro [15], позволяющего проводить многоцелевое исследование кри-

**Таблица 2.**  $\text{Na}_{52}\text{Ba}_4\text{Sn}_{80}$ . Координационные последовательности атомов

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		$N_1$	$N_2$	$N_3$	$N_4$	$N_5$
Na1	16Sn	<b>16</b>	30	<b>104</b>	204	284
Na2	6Na + 6Sn	<b>12</b>	49	<b>122</b>	211	327
Na3	3Na + 11Sn	<b>14</b>	42	<b>112</b>	200	309
Na4	6Na + 10Sn	<b>16</b>	49	<b>124</b>	213	321
Na5	5Na + 10Sn	<b>15</b>	46	<b>117</b>	222	311
Na6	7Na + 8Sn	<b>15</b>	46	<b>119</b>	202	339
Na7	8Na + 6Sn	<b>14</b>	54	<b>117</b>	205	322
Na8	7Na + 7Sn	<b>14</b>	53	<b>120</b>	202	343
Ba1	19Sn	<b>19</b>	40	<b>118</b>	218	331
Sn1	1Na + 6Sn + 3Ba	<b>10</b>	50	<b>85</b>	189	346
Sn2	6Na + 3Sn3 + 1Ba	<b>10</b>	48	<b>116</b>	221	329
Sn3	3Na + 4Sn + 2Ba	<b>9</b>	50	<b>100</b>	201	343
Sn4	6Na + 3Sn + 1Ba	<b>10</b>	52	<b>111</b>	213	335
Sn5	6Na + 3Sn + 1Ba	<b>10</b>	52	<b>109</b>	204	342
Sn6	4Na + 6Sn	<b>10</b>	40	<b>102</b>	194	310
Sn7	5Na + 5Sn	<b>10</b>	41	<b>89</b>	180	294
Sn8	7Na + 3Sn	<b>10</b>	43	<b>109</b>	211	305
Sn9	6Na + 3Sn	<b>9</b>	45	<b>104</b>	203	301

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 узлов в  $k$ -ой координационной сфере 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.

При идентификации типа нанокластера-прекурсора кристаллической структуры интерметаллида использовали алгоритм разложения структуры на простейшие нанокластеры на основе следующих принципов: структура образуется самосборкой из нанокластеров-прекурсоров, нанокластеры-прекурсоры занимают высокосимметричные позиции, нанокластеры-прекурсоры образуют упаковку, т.е. не имеют общих атомов, в каркасных структурах, отдельные атомы или небольшие атомные группировки играют роль спейсеров — заполнителей пространства между нанокластерами-прекурсорами. Набор нанокластеров-прекурсоров и спейсеров включает в себя все атомы структуры.

#### САМОСБОРКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $\text{Na}_{52}\text{Ba}_4\text{Sn}_{80}$ -*cF540*

Использованный нами метод моделирования кристаллической структуры основан на определении иерархической последовательности ее самосборки в кристаллографическом пространстве [16, 17]. На первом уровне самоорганизации системы определя-

**Таблица 3.** Нанокластер K64. Атомы, формирующие внутренний тетраэдрический кластер K8 = 0@8 и 56-атомную оболочку

Нанокластер 0@8@56	
Кластер K8	Оболочка
4 Ba1	4 Na3
4 Sn1	4 Sn2
	12 Sn3
	12 Sn4
	24 Sn5
<b>Всего 64 атома</b>	

ется механизм формирования первичной цепи структуры из нанокластеров 0-уровня, сформированных на темплатной стадии химической эволюции системы, далее – механизм самосборки из цепи микрослоя (2-ой уровень) и затем из микрослоя – трехмерного микрокаркаса структуры (3-й уровень).

*Кристаллографические данные Na<sub>52</sub>Ba<sub>4</sub>Sn<sub>80</sub>-сF540*

Пространственная группа *F*-43*m* (но. 216) характеризуется позициями с точечной симметрией: -43*m* (4*a*, 4*b*, 4*c*, 4*d*), 3*m* (16*e*) и др.

В табл. 2 приведено локальное окружение атомов Na, Ba, Sn и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке. Для атомов Na значения координационных чисел КЧ = 12 (один атом), 14 (три), 15(два), 16 (два), атома Ba – 19, атомов Sn – 9 (два), 10 (семь).

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 2, 3, 4, 5, 6, и 7 составило 4, 38, 65, 187, 210 и 87 соответственно. В результате установлены каркас-образующие нанокластеры K47 = Na@16Sn@30Na и K64 = 0@8(Sn<sub>4</sub>Ba<sub>4</sub>)@56(Na<sub>4</sub>Sn<sub>52</sub>) (табл. 3, 4). Двухслойный нанокластер K47 с внутренним полиэдром Фриауфа NaSn<sub>16</sub> и с 30 атомами Na в оболочке находится в позиции 4*b* с симметрией -43*m*. Двухслойный нанокластер K64 с внутренним полиэдром Sn<sub>4</sub>Ba<sub>4</sub> и с 56 атомами (4Na + 52Sn) в оболочке находится в позиции 4*a* также с симметрией -43*m*. В пустотах каркаса расположены Na<sub>4</sub>-тетраэдры с симметрией -43*m* в позиции 4*c* и Sn<sub>8</sub>-кубы, также имеющие симметрию -43*m* с центром в позиции 4*d* (рис. 1). В качестве спейсеров установлены атомы Na5 и Na6.

**Таблица 4.** Нанокластер K47. Атомы, формирующие кластер Фриауфа K17 = 1@16 и 30-атомную оболочку

Нанокластер 1@16@30	
Кластер Фриауфа	Оболочка
Na1	6 Na4
4 Sn6	12 Na7
12 Sn7	12 Na8
<b>Всего 47 атомов</b>	

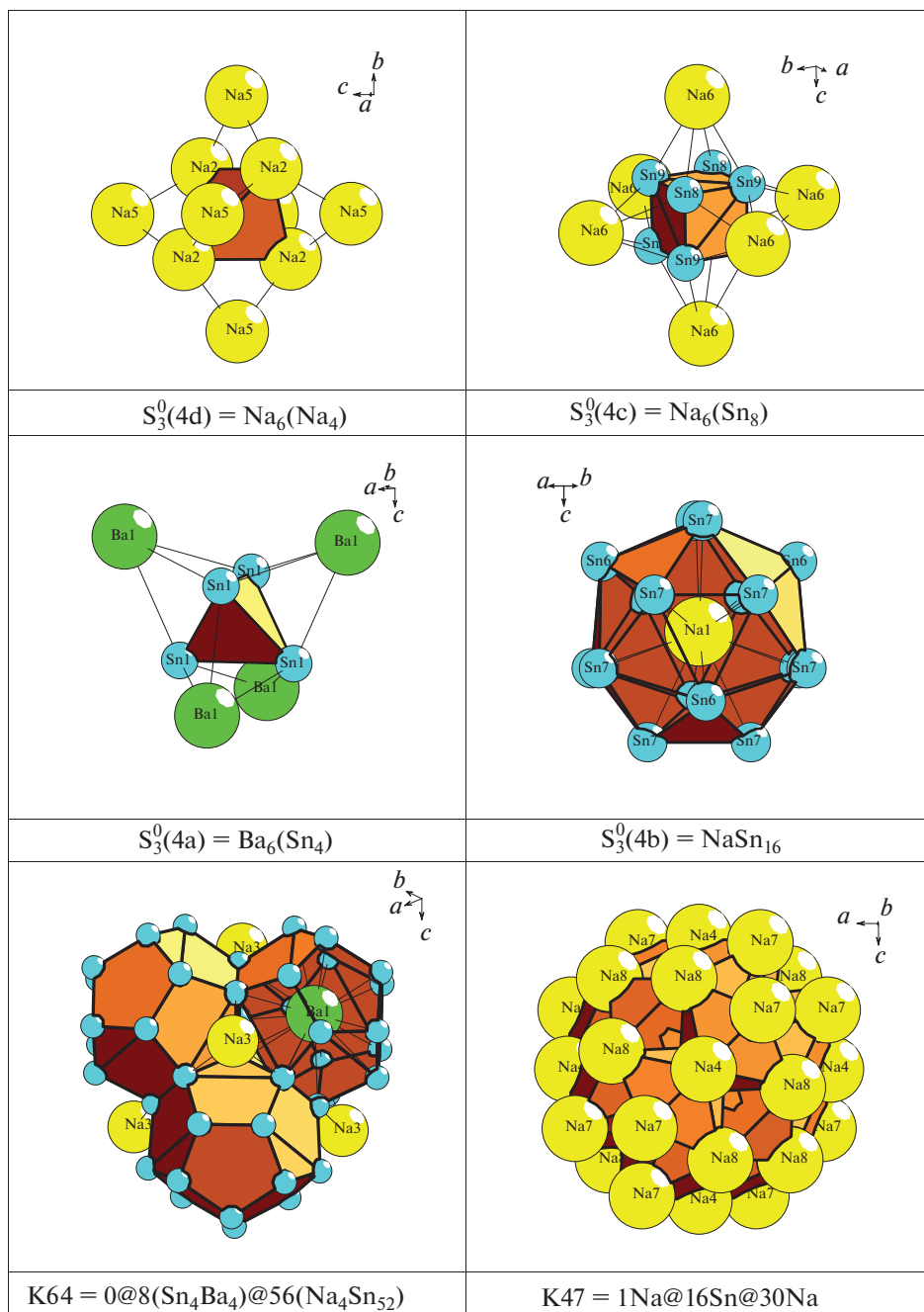


Рис. 1.  $Na_{52}Ba_4Sn_{80}$ . Нанокластерные структуры.

*Самосборка кристаллической структуры  $Na_{52}Ba_4Sn_{80}$*

**Первичная цепь.** Самосборка первичных цепей происходит при связывании нанокластеров K47 с K64 в направлении [100] (рис. 2). Расстояние между центрами образо-

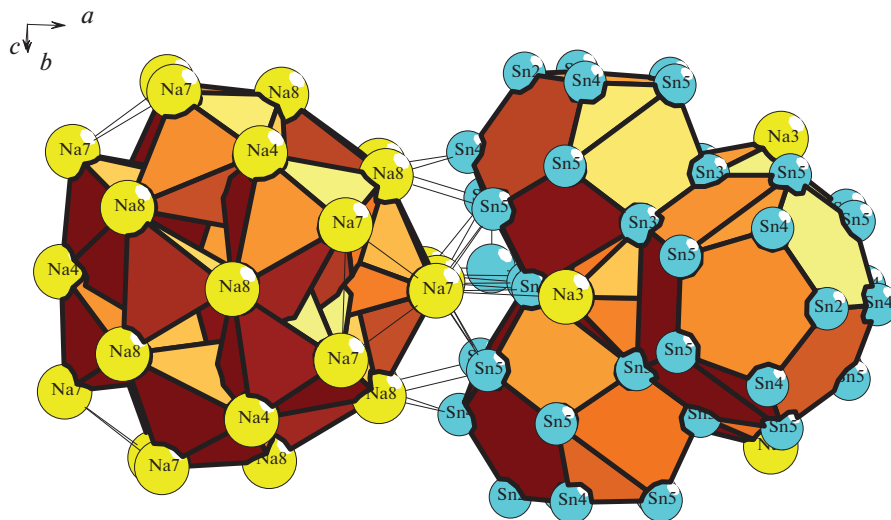


Рис. 2.  $\text{Na}_{52}\text{Ba}_4\text{Sn}_{80}$ . Механизм комплементарного связывания нанокластеров K64 и K47 при образовании первичной цепи.

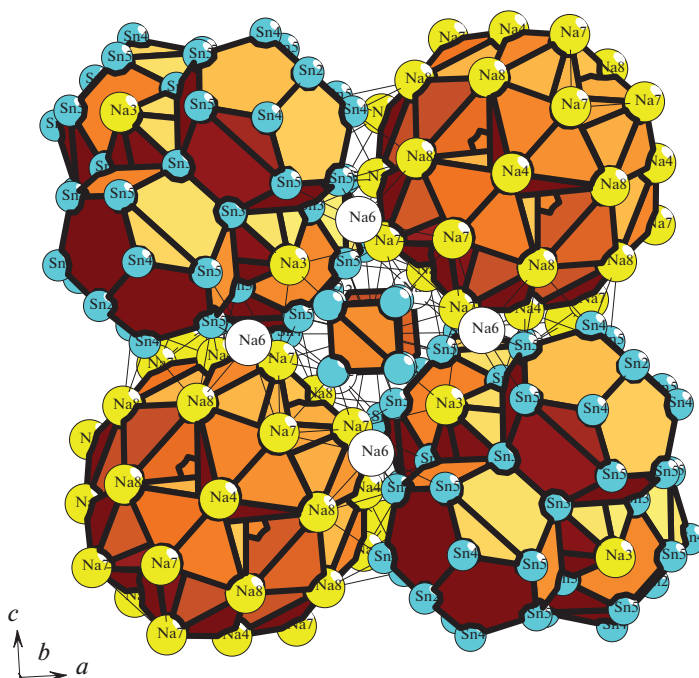


Рис. 3.  $\text{Na}_{52}\text{Ba}_4\text{Sn}_{80}$ . Микрослой, образованный из нанокластеров K64 и K47. Показано расположение кластеро-спейсеров  $\text{Sn}_8$  и  $\text{Na}_4$  и атомов  $\text{Na}_6$ .

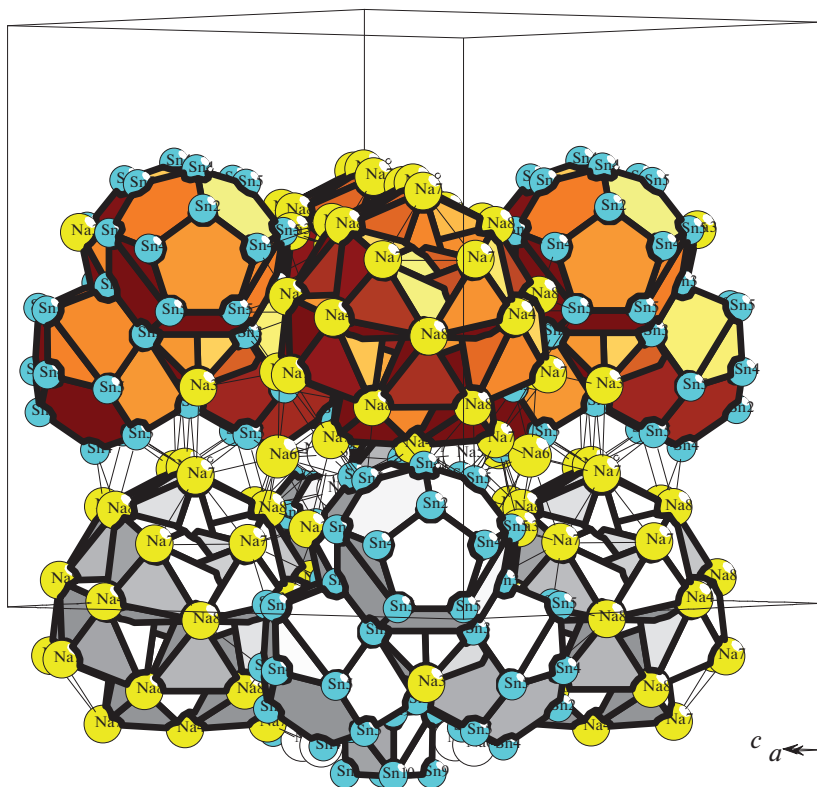


Рис. 4.  $\text{Na}_{52}\text{Ba}_4\text{Sn}_{80}$ . Микрокаркас из двух микрослоев, состоящих из связанных нанокластеров K64 и K47.

вавшихся супракластеров K141 соответствует половине длины вектора трансляции  $a/2 = 25.053 \text{ \AA}/2$ .

**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  $\text{Na}_4$ -тетраэдров,  $\text{Sn}_8$ -кубов и атомов Na5 и Na6. Расстояние между центрами супракластеров из соседних цепей в направлениях [100] и [010] соответствует длинам векторов  $a/2 = b/2 = 25.053 \text{ \AA}/2$ .

**Самосборка каркаса.** Микрокаркас структуры  $S_3^3$  формируется при связывании двух микрослоев в направлении [001]. Расстояние между микрослоями определяет длину вектора трансляции  $c/2 = 25.053 \text{ \AA}/2$  (рис. 4).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Самосборка каркасной структуры интерметаллида  $\text{Na}_{52}\text{Ba}_4\text{Sn}_{80}$  осуществляется с участием новых двухслойных нанокластеров-прекурсоров  $\text{K47} = \text{Na}@16\text{Sn}@30\text{Na}$  и  $\text{K64} = 0@8(\text{Sn}_4\text{Ba}_4)@56(\text{Na}_4\text{Sn}_{52})$ . Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из нанокластеров-прекурсоров K64 и K47 в виде: первичная цепь  $\rightarrow$  микрослой  $\rightarrow$  микрокаркас. В качестве спейсеров, занимаю-

щих пустоты в 3D каркасе из нанокластеров K64 и K47, установлены кластеры  $\text{Na}_4$  и  $\text{Sn}_8$  с симметрией  $-43m$ , а также атомы Na.

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. Kim Sung Jin, Kraus F., Faessler T.F.  $\text{Na}_6\text{ZnSn}_2$ ,  $(\text{Na}_{4.24}\text{K}_{1.76})\text{ZnSn}_2$ , and  $\text{Na}_{20}\text{Zn}_8\text{Sn}_{11}$ : Three intermetallic structures containing the linear {Sn-Zn-Sn}6- unit // J. American Chemical Society. 2009. V. 131. № 4. P. 1469–1478.
4. Kim Sung Jin, Hoffman S.D., Faessler T.F.  $\text{Na}_{29}\text{Zn}_{24}\text{Sn}_{32}$ : A Zintl Phase Containing a Novel Type of {Sn<sub>14</sub>} Enneahedra and Heteroatomic {Zn<sub>8</sub>Sn<sub>4</sub>} Icosahedra // Angewandte Chemie. International Edition. 2007. V. 46. P. 3144–3148.
5. Kim Sung Jin, Faessler T.F. Networks of icosahedra in the sodium-zinc-stannides  $\text{Na}_{16}\text{Zn}_{13.54}\text{Sn}_{13.46(5)}$ ,  $\text{Na}_{22}\text{Zn}_{20}\text{Sn}_{19(1)}$ , and  $\text{Na}_{34}\text{Zn}_{66}\text{Sn}_{38(1)}$  // J. Solid State Chemistry. 2009. V. 182. № 4. P. 778–789.
6. Ponou S., Kim S.J., Fässler T.F. Synthesis and characterization of  $\text{Na}_5\text{M}_{2+x}\text{Sn}_{10-x}$  ( $x \approx 0.5$ , M = Zn, Hg) – A doped tetrahedral framework structure // J. Am. Chem. Soc. 2009. V. 131. P. 10246–10252.
7. Wrobel G., Schuster H.U. Die Kristallstrukturen der Phasen  $\text{Na}_2\text{AuGe}$  und  $\text{NaAuSn}$  // Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie. 1977. V. 432. P. 95–100.
8. Zachwieja U. (Sn3/3)-Roehren und  $\text{AuSn}_3$ -Baugruppen: Darstellung und Struktur von  $\text{Na}_2\text{AuSn}_3$  // Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie. 2001. V. 627. P. 353–356.
9. Lin Qisheng, Smetana Volodymyr, Miller Gordon J., Corbett John D. Conventional and stuffed Bergman-type phases in the Na–Au–T (T = Ga, Ge, Sn) systems: syntheses, structures, coloring of cluster centers, and Fermi sphere-Brillouin zone interactions // Inorganic Chemistry. 2012. V. 51(16). P. 8882–8889.
10. Blasé W., Cordier G.  $\text{NaGaSn}_5$ , eine neue Zintl-Phase mit Ga-Sn-Schrauben // Zeitschrift fuer Naturforschung, B: Chemical Sciences. 1988. V. 43. P. 1017–1019.
11. Blasé W., Cordier G.  $\text{Na}_{10}\text{Ga}_6\text{Sn}_3$ , eine Verbindung an der Zintl-Grenze // Zeitschrift fuer Naturforschung, B: Chemical Sciences. 1989. V. 44. P. 1479–1482.
12. Blasé W., Cordier G. Darstellung und Kristallstruktur von  $\text{Na}_3\text{Ga}_8\text{Sn}_3$  und die Interpretation der Bindungsverhältnisse auf der Basis der Wadeschen Regeln und Zintl-Konzepte // Zeitschrift fuer Naturforschung, B: Chemical Sciences. 1989. V. 44. P. 1011–1014.
13. Yamada Takahiro, Yamane Hisanori, Nagai Hideaki. A thermoelectric Zintl phase  $\text{Na}_{2+x}\text{Ga}_{2+x}\text{Sn}_{4-x}$  with disordered Na atoms in helical tunnels // Advanced Materials. 2015. V. 27. № 32. P. 4708–4713.
14. Todorov I., Sevov S.C. Heavy-metal aromatic rings: cyclopentadienyl anion analogues  $\text{Sn}_5^{6-}$  and  $\text{Pb}_5^{6-}$  in the Zintl phases  $\text{Na}_8\text{BaSn}_6$ ,  $\text{Na}_8\text{BaSn}_6$ , and  $\text{Na}_8\text{EuSn}_6$  // Inorganic Chemistry. 2004. V. 43. № 20. P. 6490–6494.
15. Bobev S., Sevov S.C. Naked Clusters of 56 Tin Atoms in the Solid State // J. American Chemical Society. 2002. V. 124. P. 3359–3365.
16. 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. <https://topospro.com/>
17. Илюшин Г.Д. Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. М.: Едиториал УРСС. 2003. 376 с.
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. 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.
20. Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д. Кластерная самоорганизация интерметаллических систем: 108-атомный трехслойный икосаэдрический кластер  $0@12(\text{Ga}_{12})@24(\text{Na}_{12}\text{Ga}_{12})@72(\text{Rb}_4\text{Na}_8\text{Ga}_{60})$  и 44-атомный двухслойный икосаэдрический



- кластер  $@12(\text{Ga}_{12})@32(\text{Na}_{20}\text{Ga}_{12})$  для самосборки кристаллической структуры  $\text{Rb}_{24}\text{Na}_{200}\text{Ga}_{696}\text{-oF920}$  // Физика и химия стекла. 2019. Т. 45. № 3. С. 203–214.
21. Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д. Кластерная самоорганизация интерметаллических систем. Новый кластер-прекурсор  $(\text{InNa}_5)(\text{AuAu}_5)$  и первичная цепь с симметрией  $5m$  для самосборки кристаллической структуры  $\text{Na}_{32}\text{Au}_{44}\text{In}_{24}\text{-oP100}$  // Физика и химия стекла. 2019. Т. 45. № 4. С. 303–310.
  22. 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  $\text{Na}_{26}\text{Cd}_{141}\text{-hP168}$  // Физика и химия стекла. 2019. Т. 45. № 5. С. 403–411.
  23. 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.
  24. Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д. Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. Кластеры-прекурсоры для самосборки кристаллической структуры  $\text{Na}_{99}\text{Hg}_{468}\text{-hP56}$  // Физика и химия стекла. 2019. Т. 45. № 6. С. 503–509.
  25. Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д. Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. Новый двухслойный кластер-прекурсор  $\text{K44} = 0@8(\text{Na}_2\text{In}_6)@36(\text{In}_6\text{Cd}_6\text{K}_6)_2$  для самосборки кристаллической структуры  $\text{K}_{23}\text{Na}_8\text{Cd}_{12}\text{In}_{48}\text{-hP91}$  // Физика и химия стекла. 2019. Т. 45. № 6. С. 510–518.