

**КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ:
КЛАСТЕРЫ K66 И K130 ДЛЯ САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ
K₇₈In₁₆₀-hP238 И КЛАСТЕР K17 ДЛЯ САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ
СТРУКТУРЫ K₈In₁₁-hR114**

© 2021 г. В. Я. Шевченко¹, 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, г. Самара, 443100 Россия

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

*e-mail: gdilyushin@gmail.com

Поступила в редакцию 11.02.2020 г.

После доработки 01.10.2020 г.

Принята к публикации 08.10.2020 г.

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллической структуры K₇₈In₁₆₀-hP238 (пр. гр. $P-3m1$, $a = b = 17.211$, $c = 28.888$ Å. $V = 7410$ Å³) и K₈In₁₁-hR114 (пр. гр. $R-3c$, $a = b = 10.021$, $c = 50.891$ Å. $V = 4426$ Å³). Икосаэдры In₁₂ (с симметрией $-3m$) являются темплатами, на которых происходит образование трехслойных кластеров K130 = 0@12(In₁₂)@30(In₁₂K₁₈)@86(K₂₀In₆₆) с диаметром 17 Å. Двухслойный кластер K66, образующийся на полиэдрах Фриауфа K(K₄In₁₂) (с симметрией $3m$), имеет химический состав оболочек K@16(K₄In₁₂)@49(K₁₆In₃₃) и диаметр 14 Å. Нанокластеры K130 и K66 являются каркас-образующими и участвуют в формировании 2D слоев А и В соответственно, образующих трехслойный пакет В–А–В. В пустотах слоя из кластеров K66 расположены кластеры In₁₂ (с симметрией $-3m$), гексагональные бипирамиды In₈ (с симметрией $3m$) и атомы-спейсеры К. Толщина трехслойного пакета соответствует значению модуля вектора трансляции $c = 28.888$ Å. Каркасная структура формируется при связывании трехслойных пакетов В–А–В в направлении [001]. Для K₈In₁₁-hR114 установлен кластер-прекурсор K17 = 0@In₁₁K₆ в виде треугольной бипирамиды In₅, на 6 гранях которой расположены атомы In, с которыми связаны 6 атомов калия. Образование микрослоя происходит при связывании первичных цепей в плоскости (001) со сдвигом. В слое происходит локализация атомов-спейсеров К. Микрокаркас структуры формируется при связывании микрослоев со сдвигом.

Ключевые слова: самосборка кристаллических структур, структурный тип K₇₈In₁₆₀-hP238, структурный тип K₈In₁₁-hR114, двухслойный кластер-прекурсор K66 = K@16(K₄In₁₂)@49(K₁₆In₃₃), икосаэдрический трехслойный кластер-прекурсор K130 = 0@12(In₁₂)@30(In₁₂K₁₈)@86(K₂₀In₆₆), супраполиэдрический кластер K17 = 0@In₁₁K₆

DOI: 10.31857/S013266512101011X

Таблица 1. Кристаллографические данные интерметаллидов

Соединение	Пр. группа	Класс Пирсона	Последовательность Уайкоффа	Параметры элементарной ячейки в Å	$V, \text{Å}^3$
KIn ₄ [3]	<i>I4/mmm</i>	<i>tI10</i>	<i>eda</i>	4.846, 4.846, 12.687	298.0
RbIn ₄ [3]	<i>I4/mmm</i>	<i>tI10</i>	<i>eda</i>	4.928, 4.928, 12.575	305.4
SrIn ₄ [4]	<i>I4/mmm</i>	<i>tI10</i>	<i>eda</i>	4.939, 4.939, 12.225	298.3
BaIn ₄ [3]	<i>I4/mmm</i>	<i>tI10</i>	<i>eda</i>	4.970, 4.970, 11.983	296.0
K ₈ In ₁₁ [5]	<i>R-3c</i>	<i>hR114</i>	<i>f²ec²</i>	10.021, 10.021, 50.891	4425.8
K ₈ Tl ₁₁ [6]	<i>R-3c</i>	<i>hR114</i>	<i>f²ec²</i>	9.991, 9.991, 50.840	4395.0
Rb ₈ In ₁₁ [7]	<i>R-3c</i>	<i>hR114</i>	<i>f²ec²</i>	10.301, 10.301, 52.367	4812.2
Rb ₈ Tl ₁₁ [8]	<i>R-3c</i>	<i>hR114</i>	<i>f²ec²</i>	10.280, 10.280, 52.305	4787.0
Cs ₈ Ga ₁₁ [9]	<i>R-3c</i>	<i>hR114</i>	<i>f²ec²</i>	9.996, 9.996, 50.839	4399.4
Cs ₈ Ga ₁₁ Cl [9]	<i>R-3c</i>	<i>hR120</i>	<i>f²ec²b</i>	10.011, 10.011, 50.504	4383.5
Cs ₈ Tl ₁₁ Pd [10]	<i>R-3c</i>	<i>hR120</i>	<i>f²ec²a</i>	10.610, 10.610, 54.683	5331.1
K ₁₇ In ₄₁ [11]	<i>Fd-3m</i>	<i>cF480</i>	<i>g⁴e²dc</i>	24.241, 24.241, 24.241	14244.6
K ₂₁ In ₄₀ [12]	<i>R-3m</i>	<i>hR160</i>	<i>i¹⁰h⁵c⁵</i>	17.214, 17.214, 44.612	11448.4
K ₇₈ In ₁₆₀ [13]	<i>P-3m1</i>	<i>hP238</i>	<i>f⁸i²¹d⁶c²</i>	17.211, 17.211, 28.888	7410.7

ВВЕДЕНИЕ

В двойных системах К–М с участием 15 химических элементов М установлено образование 47 структурных типов интерметаллических соединений [1, 2]. Наибольшее число интерметаллидов образуются в системе К–Hg (шесть соединений) и системах К–М, где М = In, Tl, Pb (по пять соединений [1, 2]). В системе К–Zn и К–Cd образуется по два соединения, в системе К–Na – одно соединение [1, 2].

В системе К–In кристаллохимические аналоги имеют два интерметаллида KIn₄-*tI10* и K₈In₁₁-*hR114* (табл. 1) [3–10]. Кристаллохимически сложные интерметаллиды K₁₇In₄₁-*cF480* [11], K₂₁In₄₀-*hR160* [12] и K₇₈In₁₆₀-*hP238* [13] обладают уникальной кристаллической структурой.

Структура наиболее кристаллохимически сложного интерметаллида K₇₈In₁₆₀-*hP238* с 37 кристаллографически независимыми атомами [13], характеризуется большими значениями параметров гексагональной ячейки: $a = b = 16.909 \text{ Å}$, $c = 28.483 \text{ Å}$, $V = 7052 \text{ Å}^3$, пр. группой *P-3m1* (164) и уникальной последовательностью Уайкоффа *f⁸i²¹d⁶c²*. Значения координационных чисел (КЧ) атомов К равны 14 (два атома) и 16 (13 атомов), атомов In – 10 (2 атома), 11 (13 атомов), 12 (4 атома), 14 (2 атома), 16 (1 атом). В [13] выделены каркас-образующие In-полиэдры: икосаэдры 0@In₁₂ с центрами в позициях 1*a*, 6*i* и 1*b*, полиэдры In@In₁₆ с центрами в позициях 2*d* и полиэдры 0@In₁₅ с 3-, 6-, 7-атомными кольцами (с центрами в позициях 2*d*). 15 кристаллографически различных атомов К занимают пустоты в In-каркасе [13].

Интерметаллид K₈In₁₁-*hR114* (пр. гр. *R-3c*, $a = b = 10.021$, $c = 50.891 \text{ Å}$, $V = 4426 \text{ Å}^3$) [4] имеет несколько кристаллохимических аналогов (табл. 1). Значения КЧ атомов К – 14 и 15, атомов In – 10 и 12. Кристаллическая структура K₈In₁₁ описана в виде слоя, образованного из полиэдров 0@In₁₁, атомов К(2) и сдвоенных слоев из атомов К(1).

В кристаллических структурах семейства A₈Tl₁₁Pd, A = Cs, Rb, K [9], атомы Pd являются центральными атомами полиэдров Pd@Tl₁₁.

В кристаллических структурах семейства $A_8Tr_{11}X$: $A = \text{Cs, Rb}$; $Tr = \text{Ga, In, Tl}$; $X = \text{Cl, Br, I}$ [10] установлено расположение атомов X между двояными слоями из атомов A .

В настоящей работе с помощью пакета программ TorosPro [14] проведен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры интерметаллидов $K_{78}In_{160}\text{-}hP238$ и $K_8In_{11}\text{-}hR114$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры $K_{78}In_{160}\text{-}hP238$ из нанокластеров-прекурсоров $K130$ и $K66$ и 3D структуры $K_8In_{11}\text{-}hR114$ из кластеров $K17$ в виде первичная цепь $S_3^1 \rightarrow$ \rightarrow слой (пакет) $S_3^2 \rightarrow$ каркас S_3^3 .

Работа продолжает исследования [15–21]. Методики использованные при компьютерном анализе приведены в [15–21].

Полученные значения координационных последовательностей атомов в 3D-сетках интерметаллидов $K_{78}In_{160}\text{-}hP238$ и $K_8In_{11}\text{-}hR114$ приведены в табл. 2 и 3, в которых жирным шрифтом выделено число соседних атомов в ближайшем окружении, т.е. в первой координационной сфере атома.

САМОСБОРКА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР $K_{78}In_{160}\text{-}hP238$ И $K_8In_{11}\text{-}hR114$

Использованный метод моделирования кристаллической структуры основан на определении иерархической последовательности ее самосборки в кристаллографическом пространстве [15, 16].

Нанокластерный анализ структуры $K_{78}In_{160}\text{-}hP238$

Пространственная группа $K_{78}In_{160} P\text{-}3m1$ характеризуется позициями с точечной симметрией: $-3m$ ($1a, 1b$), $3m$ ($2c, 2d$), $2/m$ ($3e, 3f$), 2 ($6g, 6h$), m ($6i$). Порядок группы 12. В табл. 2 приведено локальное окружение 15 кристаллографически независимых атомов K и 22 атомов In в 3D атомной сетке. Всего найдено 5500 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц от 4 до 10.

В структуре имеются два кристаллографически различных икосаэдрических кластера In_{12} с симметрией $-3m$. Кластеры In_{12} в позициях $1b$, а также кластеры в виде гексагональной бипирамиды In_8 с симметрией $3m$ (рис. 1) являются спейсерами. Икосаэдры In_{12} с центром в позиции $1a$ являются темплатами, на которых происходит образование трехслойных кластеров $K130$ с диаметром 17 \AA (рис. 2 и 3). Нанокластер $K130$ имеет химический состав оболочек $0@12(In_{12})@30(In_{12}K_{18})@86(K_{20}In_{66})$.

Второй двухслойный кластер $K66$, образующийся на полиэдрах Фриауфа $K(K_4In_{12})$ с симметрией $3m$, имеет химический состав оболочек $K@16(K_4In_{12})@49(K_{16}In_{33})$ и диаметр 14 \AA (рис. 4).

Самосборка кристаллической структуры $K_{78}In_{160}\text{-}hP238$

Кластеры $K130$ (табл. 4) и $K66$ (табл. 5) являются каркас-образующими кластерами, участвующими в формировании 2D слоев A и B . Образование базисного слоя A происходит при связывании первичных цепей из кластеров $K130$ расположенных со сдвигом (рис. 5). Расстояние между центрами кластеров $K130$ в первичной цепи и в слое определяет длину векторов трансляций $a = b = 17.211 \text{ \AA}$. Базовая 2D сетка имеет тип 3^6 . Базисный слой B формируется при связывании первичных цепей из кластеров $K66$ расположенных со сдвигом (рис. 5). Расстояние между центрами кластеров $K66$ в первичной цепи и в слое определяет длину векторов трансляций $a = b = 17.211 \text{ \AA}$. Трехслойный пакет $B\text{-}A\text{-}B$ состоит из центрального слоя A и слоев B , расположен-

Таблица 2. $K_{78}In_{160}$ -*hP* 238. Локальное окружение атомов K и In и значения координационных последовательностей

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности
		$N_1 N_2 N_3 N_4 N_5$
K1	7 K + 7 In	14 58 132 233 350
K2	4 K + 12 In	16 48 107 221 353
K3	5 K + 11 In	16 53 116 222 369
K4	4 K + 12 In	16 48 99 214 353
K5	4 K + 12 In	16 49 109 210 355
K6	4 K + 12 In	16 53 115 225 373
K7	6 K + 10 In	16 54 118 227 372
K8	5 K + 11 In	16 51 112 220 364
K9	4 K + 12 In	16 49 109 221 362
K10	4 K + 12 In	16 48 105 211 356
K11	4 K + 12 In	16 50 111 208 350
K12	5 K + 11 In	16 53 111 219 363
K13	4 K + 12 In	16 53 115 226 372
K14	4 K + 12 In	16 46 119 226 322
K15	6 K + 8 In	14 55 126 221 351
In1	5 K + 6 In	11 45 111 210 334
In2	5 K + 6 In	11 46 112 199 323
In3	5 K + 6 In	11 46 114 201 322
In4	16 In16	16 44 116 222 312
In5	5 K + 6 In	11 45 112 207 328
In6	5 K + 6 In	11 46 112 199 322
In7	5 K + 6 In	11 45 110 203 335
In8	6 K + 5 In	11 46 112 209 337
In9	6 K + 5 In	11 50 117 205 324
In10	5 K + 7 In	12 52 123 217 341
In11	5 K + 6 In	11 46 112 198 317
In12	5 K + 6 In	11 45 110 204 327
In13	5 K + 6 In	11 45 112 204 335
In14	5 K + 7 In	12 52 123 217 348
In15	6 K + 4 In	10 48 116 207 328
In16	5 K + 7 In	12 52 123 215 334
In17	5 K + 6 In	11 45 110 205 328
In18	6 K + 8 In	14 58 130 224 342
In19	8 K + 4 In	12 51 121 213 339
In20	5 K + 6 In	11 45 108 205 334
In21	6 K + 4 In	10 47 117 209 330
In22	7 K + 7 In7	14 58 130 220 343
K1	7 K + 7 In	14 52 117 215 351
K2	6 K + 9 In	15 52 118 223 347
In1	6 K + 4 In	10 45 107 204 337
In2	4 K + 8 In	12 40 108 202 338
In3	6 K + 6 In	12 41 114 205 331

Таблица 3. $K_{78}In_{160}-hP238$. Варианты кластерного представления кристаллической структуры с 4 и 10 структурными единицами. Указан центральный атом или центр пустоты полиэдрического кластера, число его оболочек (в первой скобке) и количество атомов в каждой оболочке (во второй и третьей скобке). Кристаллографические позиции, соответствующие центрам пустот полиэдрических кластеров обозначены ZA1 и ZA2

4 структурные единицы

- 4:ZA1(1a)(3)(0@12@32@86) K1(1)(1@14) K2(2)(1@16@49) K8(1)(1@16)
 4:ZA1(1a)(3)(0@12@32@86) K2(2)(1@16@49) In22(1)(1@14) K8(1)(1@16)
 4:ZA2(1b)(3)(0@12@32@98) ZA1(1a)(2)(0@12@32) K1(1)(1@14) K9(2)(1@16@49)
 4:ZA2(1b)(3)(0@12@32@98) ZA1(1a)(2)(0@12@32) K9(2)(1@16@49) In22(1)(1@14)
 4:ZA2(1b)(2)(0@12@32) ZA1(1a)(3)(0@12@32@86) K1(1)(1@14) K2(2)(1@16@49)
 4:ZA2(1b)(2)(0@12@32) ZA1(1a)(3)(0@12@32@86) K2(2)(1@16@49) In22(1)(1@14)
 4:ZA2(1b)(3)(0@12@32@98) K1(1)(1@14) K9(2)(1@16@49) K5(1)(1@16)
 4:ZA2(1b)(3)(0@12@32@98) K9(2)(1@16@49) In22(1)(1@14) K5(1)(1@16)

10 структурных единиц (12 вариантов из 352)

- ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(1)(1@14) K2(1)(1@16) K10(1)(1@16)
 In4(1)(1@16) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(0)(1)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(1)(1@14) K2(1)(1@16) K10(1)(1@16)
 In4(0)(1) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(0)(1)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(0)(1) K2(1)(1@16) K10(1)(1@16)
 In4(1)(1@16) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(0)(1)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(1)(1@14) K2(1)(1@16) K10(1)(1@16)
 In4(0)(1) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(1)(1@11)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(1)(1@14) K2(1)(1@16) K10(0)(1)
 In4(0)(1) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(1)(1@11)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(1)(1@14) K2(0)(1) K10(0)(1)
 In4(0)(1) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(1)(1@11)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(1)(1@14) K2(0)(1) K10(1)(1@16)
 In4(0)(1) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(1)(1@11)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(1)(1@14) K2(1)(1@16) K10(0)(1)
 In4(1)(1@16) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(1)(1@11)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(1)(1@14) K2(0)(1) K10(0)(1)
 In4(1)(1@16) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(1)(1@11)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(0)(1) K2(0)(1) K10(0)(1)
 In4(1)(1@16) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(1)(1@11)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(0)(1) K2(1)(1@16) K10(0)(1)
 In4(1)(1@16) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(1)(1@11)
 ZA2(1b)(1)(0@12) ZA1(1a)(1)(0@12) K1(1)(1@14) K2(0)(1) K10(1)(1@16)
 In4(1)(1@16) K5(1)(1@16) K13(1)(1@16) K15(1)(1@14) In3(1)(1@11)

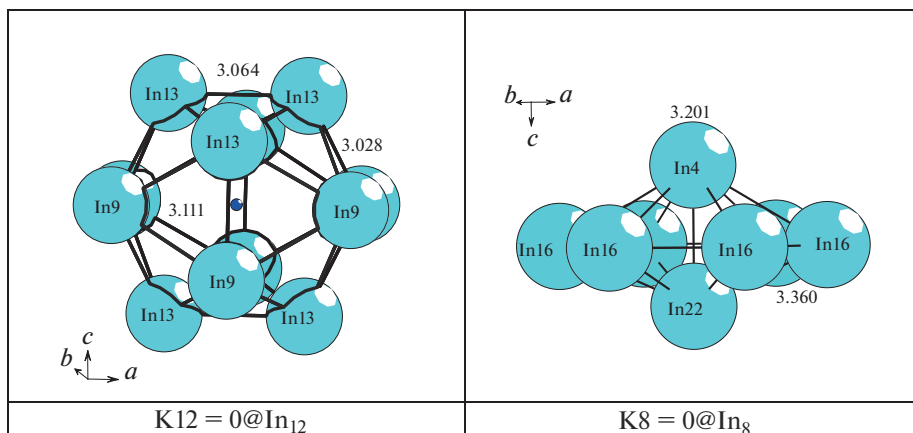


Рис. 1. $K_{78}In_{160}$ - $hP238$. Полиэдрические кластеры-спейсеры In_{12} и In_8 .

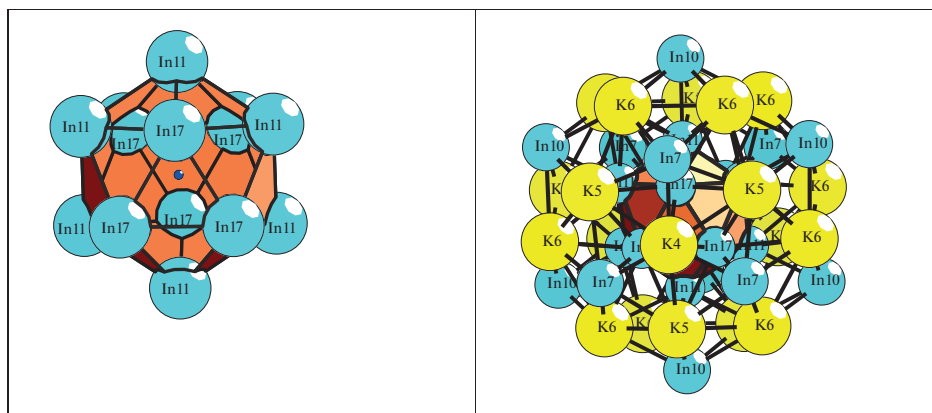


Рис. 2. $K_{78}In_{160}$ - $hP238$. Полиэдрический кластер $0@12(In_{12})$ (слева) и двухслойный кластер $0@12(In_{12})@30(In_{12}K_{18})$ (справа).

ных над и под его поверхностью (рис. 6). В пустотах слоя из кластеров $K6b$ расположены икосаэдрические кластеры In_{12} , гексагональные бипирамиды In_8 и атомы-спейсеры $K(1)$ и $K(12)$. Толщина пакета соответствует длине вектора трансляции $c = 28.888 \text{ \AA}$. 3D каркасная структура S_3^3 формируется при связывании трехслойных пакетов В–А–В (рис. 6) в направлении $[001]$.

Нанокластерный анализ структуры K_8In_{11} - $hR114$

Пространственная группа K_8In_{11} $R-3c$ характеризуется позициями с точечной симметрией: $32(1a)$, $-3(1b)$, $3(12c)$, $-1(18d)$, $2(18e)$. Порядок группы 36. В табл. 4 приведено локальное окружение атомов K , In и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке $K_8(In_{11})$. В локальном окружении атома K находятся 14 или 15 атомов, атомы In окружены 10 или 12 атомами. Всего найдено 7 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки. Установлен кластер-прекурсор $K17 = 0@In_{11}K_6$ в

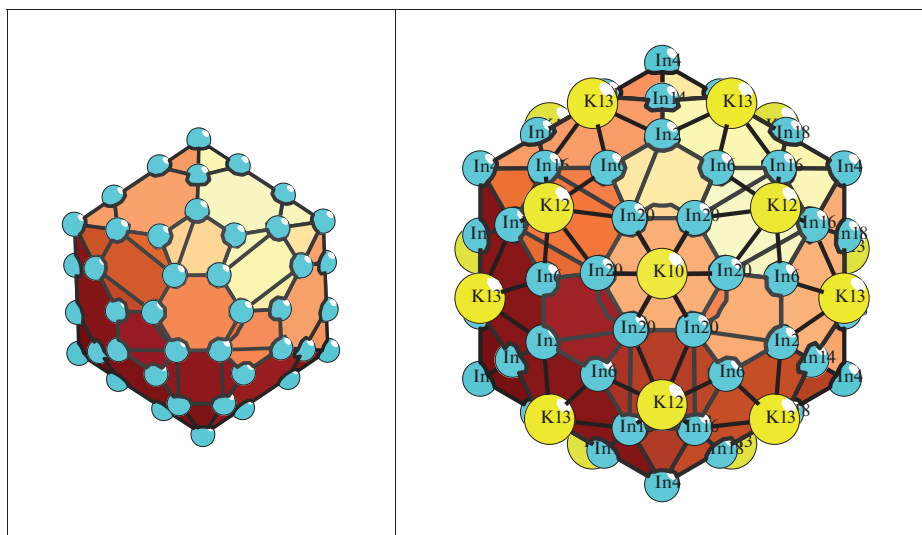


Рис. 3. $K_{78}In_{160}$ - $hP238$. Трехслойный кластер K130: оболочка из 66 атомов In (слева), и оболочка из 20 атомов K и 66 атомов In (справа).

виде треугольной бипирамиды In_5 , на 6 гранях которой расположены атомы In, с которыми связаны 6 атомов калия (рис. 7). Центр кластера-прекурсора K17 находится в позиции $6a$ с симметрией 32 .

Самосборка кристаллической структуры K_8In_{11} - $hR114$

Первичная цепь S_3^1 формируется в результате связывания кластеров K17 + K17 в направлении $[100]$ (рис. 8). Расстояние между центрами кластеров K17 определяет длину вектора трансляции $a = 10.021 \text{ \AA}$.

Таблица 4. Атомы, формирующие 130-атомный нанокластер K130. Жирным шрифтом выделены атомы K

Нанокластер K130 = 0@12@32@86		
Икосаэдрический кластер 0@12	32-атомная оболочка	86-атомная оболочка
1 ZA1	6 In10	6 In14
–	6 In7	12 In16
6 In11	2 K4	12 In18
6 In17	6 K5	6 In2
–	12 K6	12 In20
		6 In4
		12 In6
		2 K10
		6 K12
		12 K13
Всего 130 атомов		

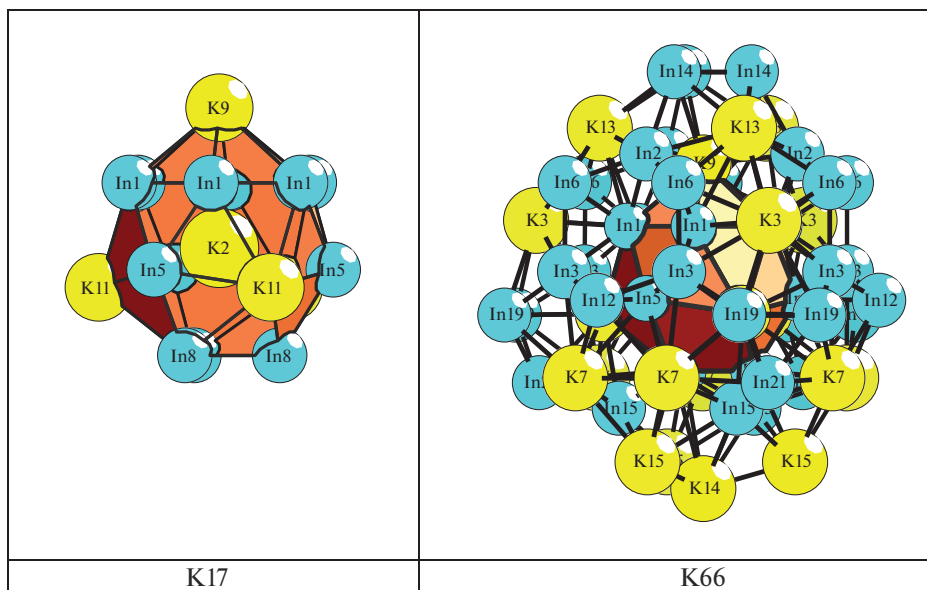


Рис. 4. $K_{78}In_{160}$ -*hP*238. Полиэдрический кластер $K@16(K_4In_{12})$ (слева) и двухслойный кластер $K@16(K_4In_{12})@49(K_{16}In_{33})$ (справа).

Таблица 5. Атомы, формирующие 66-атомный кластер K66. Жирным шрифтом выделены атомы K

Кластер K66 = 1@16@49	
Кластер K17	49-атомная оболочка
1 K2	3 In12
6 In1	3 In14
3 In5	3 In15
3 In8	6 In19
3 K11	3 In2
1 K9	3 In21
	6 In3
	6 In6
	3 K13
	1 K14
	3 K15
	3 K3
	6 K7
Всего 66 атомов	

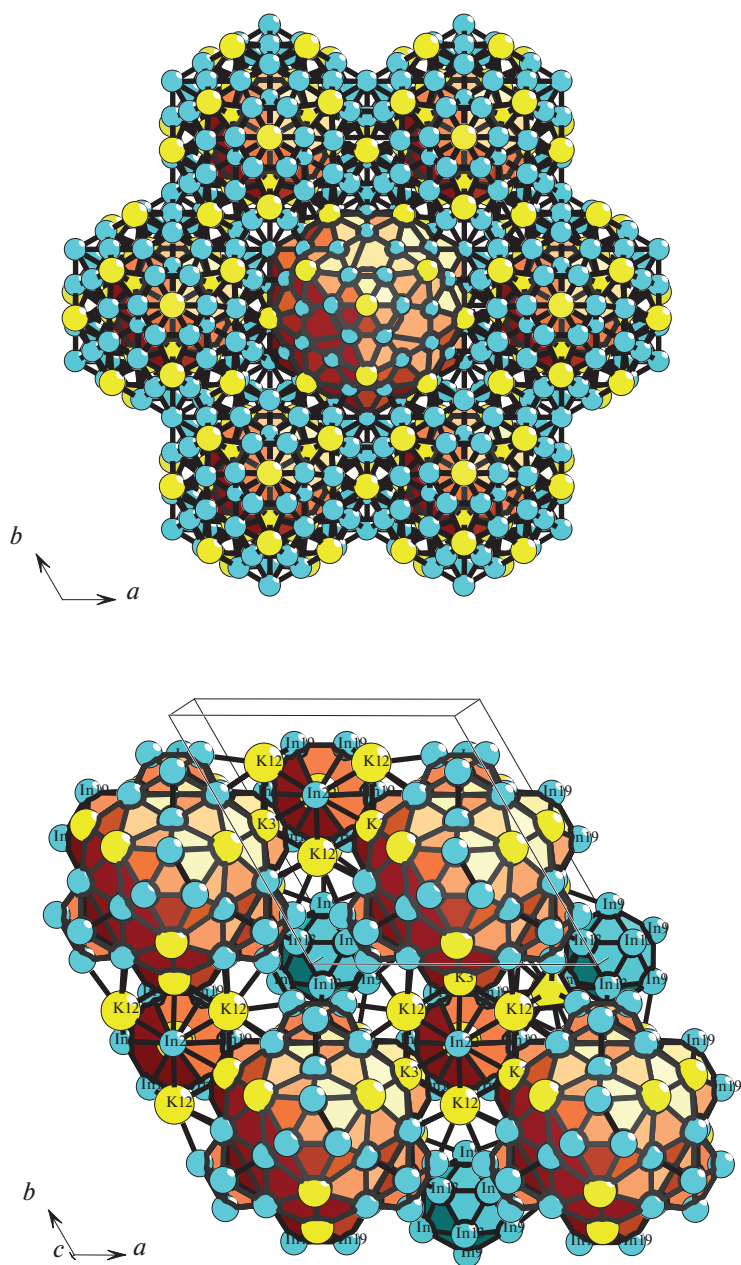


Рис. 5. $K_{78}In_{160}$ -hP238. Слой А из кластеров K130 (сверху) и слой В из кластеров K66, спейсеров In12 и атомов калия (снизу).

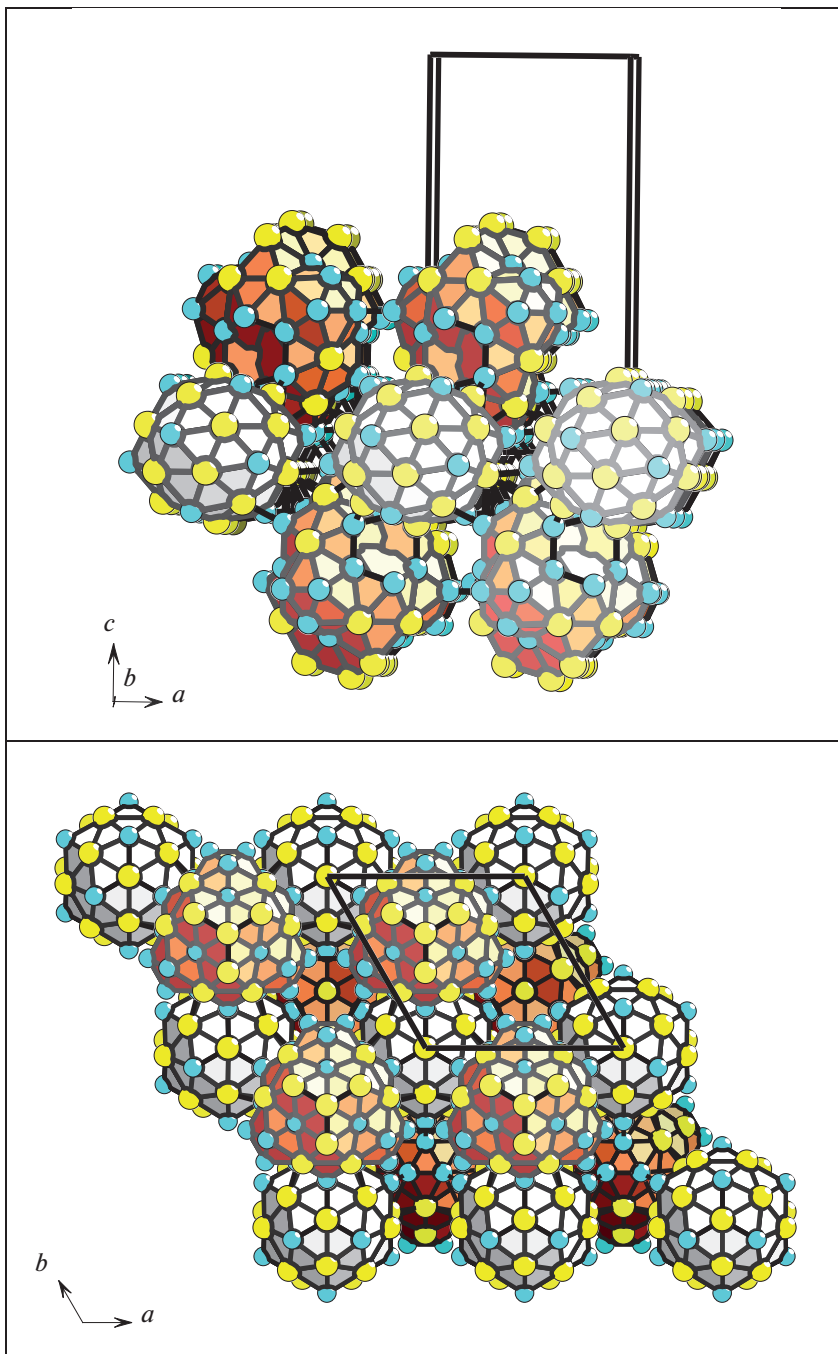


Рис. 6. $K_{78}In_{160}$ - $hP238$. Трехслойный пакет В–А–В (две проекции).

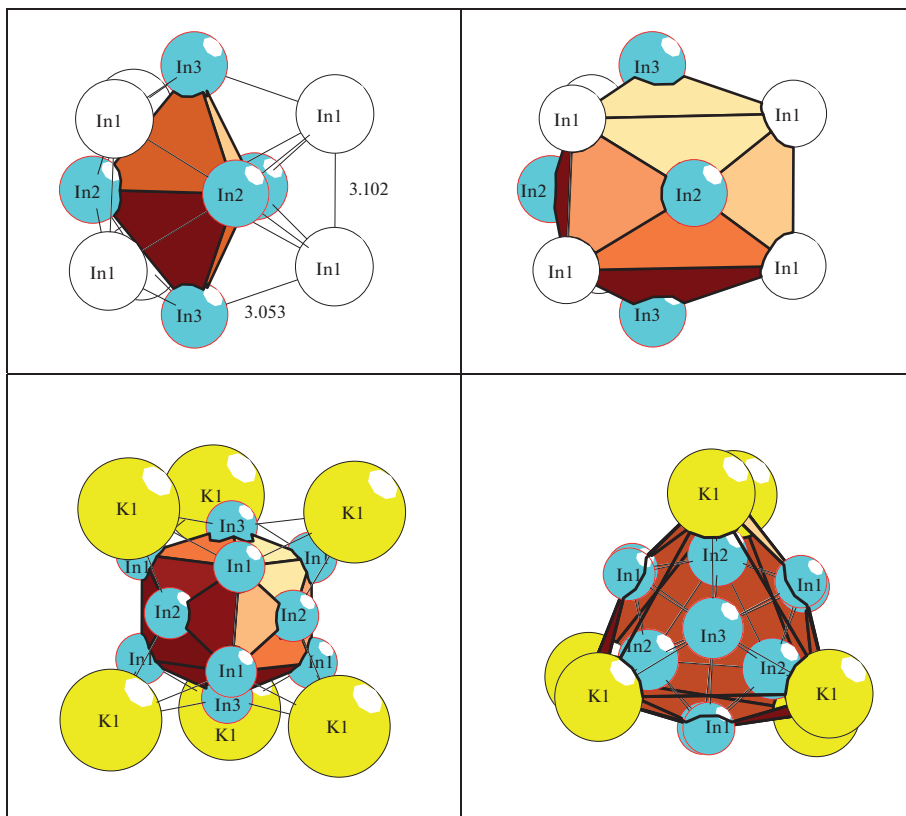


Рис. 7. K_8In_{11} - $hR114$. Кластер-прекурсор $K17 = 0@In_{11}K_6$ в виде треугольной бипирамиды In_5 , на 6 гранях которой расположены атомы In (сверху), с которыми связаны 6 атомов калия (снизу).

Образование микрослоя S_3^2 происходит при связывании первичных цепей в плоскости (001) со сдвигом (рис. 8). Расстояние между центрами кластеров $K17$ из соседних цепей определяет длину вектора трансляций $b = 10.021 \text{ \AA}$. Микрокаркас структуры S_3^3 формируется при связывании микрослоев со сдвигом (рис. 8).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование кластерной самосборки кристаллической структуры интерметаллидов $K_{78}In_{160}$ - $hP238$ и $K_8(In_{11})$ - $hR114$. Методом разложения 3D атомной сетки интерметаллида $K_{78}In_{160}$ - $hP238$ на кластерные структуры. Установлены два каркас-образующих кластера $K130$ и $K66$, участвующие в формировании 2D слоев.

Для интерметаллида K_8In_{11} - $hR114$ установлен кластер-прекурсор $K17 = 0@In_{11}K_6$ в виде треугольной бипирамиды In_5 , на 6 гранях которой расположены атомы In, с которыми связаны 6 атомов калия.

Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры $K_{78}In_{160}$ - $hP238$ из кластеров-прекурсоров $K130$ и $K66$ и 3D структуры

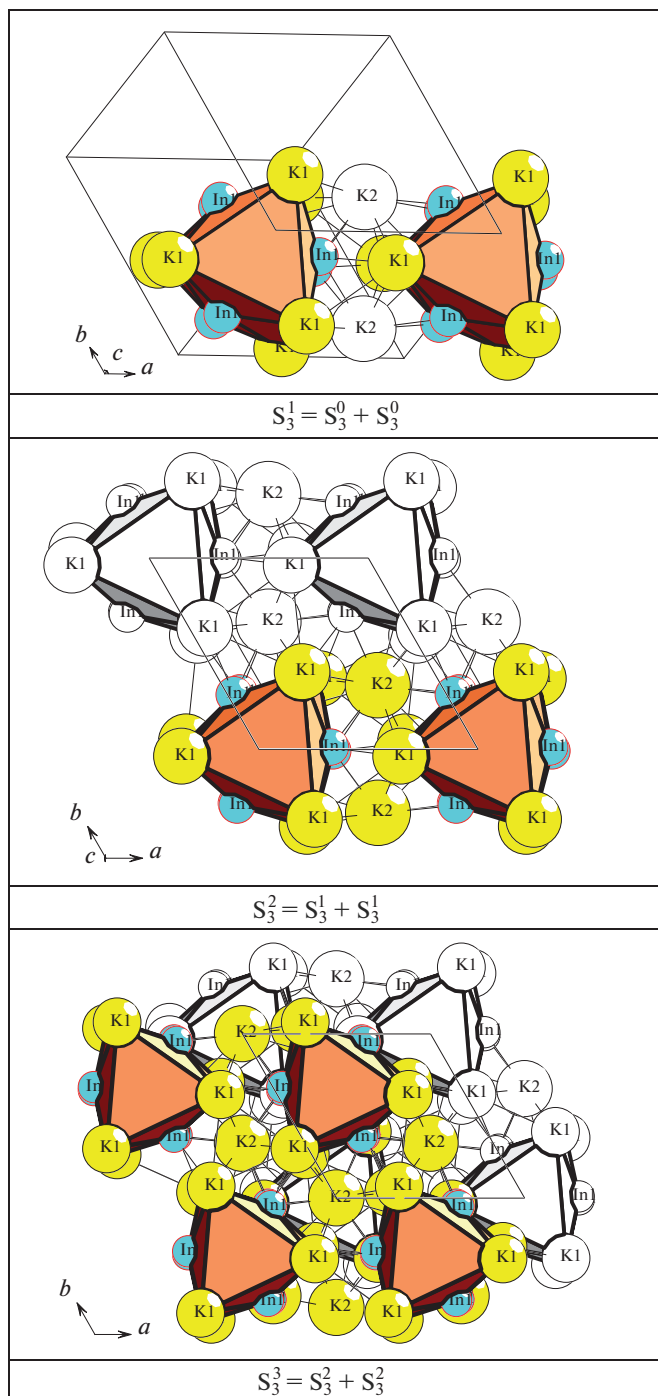


Рис. 8. K_8In_{11} -hR114. Стадии самосборки кристаллической структуры: первичная цепь S_3^1 (сверху), микро-слой S_3^2 (в центре) и микрокаркас S_3^3 (снизу).

K_8In_{11} -*h*R114 из кластеров-прекурсоров K17 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 фонда фундаментальных исследований (РФФИ № 19-02-00636).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *P. Villars, K. Cenzual*. 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. *Brussone G*. The D13 structure type in intermetallic compounds // *Acta Crystallographica B*: 1969. V. 25. P. 1206–1207.
4. *Ameriou S., Haussermann U*. Structure and bonding of Sr₃In₁₁: How size and electronic effects determine structural stability of polar intermetallic compounds // *Inorg. Chem.* 2003. V. 42. P. 7782–7788.
5. *Blase W., Cordier G*. Crystal structure of potassium indium (8/11), K₈In₁₁ // *Zeitschrift fuer Kristallographie*. 1991. V. 194. P. 150–151.
6. *Cordier G., Mueller V*. Crystal structure of octapotassium undecathallide, K₈Tl₁₁ // *Z. Kristallogr.* 1992. V. 198. P. 281–282.
7. *Cordier G., Mueller V*. Crystal structure of octarubidium undecaindide, Rb₈In₁₁ in the (K₈In₁₁)-type // *Z. Kristallogr.* 1993. V. 203. P. 154–155.
8. *Cordier G., Mueller V*. Crystal structure of octarubidium undecathallide, Rb₈Tl₁₁ in the (K₈In₁₁)-type // *Z. Kristallogr.* 1993. V. 203. P. 152–153.
9. *Kaskel S., Klem M.T., Corbett J.D*. Polyatomic clusters of the triel elements. Palladium-centered clusters of thallium in A₈Tl₁₁Pd, A = Cs, Rb, K // *Inorg. Chem.* 2002. V. 41. P. 3457–3462.
10. *Henning R.W., Corbett J.D*. Cs₈Ga₁₁, a new isolated cluster in a binary gallium compound. A family of valence analogues A₈Tr₁₁X; A = Cs, Rb; Tr = Ga, In, Tl; X = Cl, Br, I // *Inorg. Chem.* 1997. V. 36. P. 6045–6049.
11. *Cordier G., Mueller V*. Crystal structure of potassium indium (17/41), K₁₇In₄₁ // *Z. Kristallogr.* 1993. V. 205. P. 353–354.
12. *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.
13. *Lin B., Corbett J.D*. Synthesis and characterization of the new cluster phase K₃₉In₈₀. Three K-In compounds with remarkably specific and transferable cation dispositions // *Inorg. Chem.* 2003. V. 42. P. 8768–8772.
14. *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.
15. *Илюшин Г.Д.* Моделирование процессов самоорганизации в кристаллообразующих системах. М.: Едиториал УРСС, 2003. 376 с.
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. *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.
18. *Ilyushin G.D*. Symmetry and Topology Code of the Cluster Self-Assembly of Intermetallic Compounds A₂^[16]B₄^[12] of the Fr.iauf Families Mg₂Cu₄ and Mg₂Zn₄ // *Crystallography Reports*. 2018. V. 63. № 4. P. 543–552
19. *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.
20. *Pankova A. A., Akhmetshina T. G., Blatov V. A., Proserpio D. M*. A collection of topological types of nanoclusters and its application to icosahedra-based intermetallics // *Inorg. Chem.* 2015. V. 54. № 13. P. 6616–6630.
21. *Ilyushin G.D*. Crystal Chemistry of Lithium Intermetallic Compounds: A Survey // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2018. V. 63. № 14. P. 1786–1799.