

**КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ:
ТРЕХСЛОЙНЫЕ КЛАСТЕРЫ $K159A = 1@16@44@98$ И $K159B = 1@14@40@104$
И ДВУХСЛОЙНЫЕ КЛАСТЕРЫ $K61 = 1@16@44$ И $K26 = 0@4@22$
В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ $Ta_{156}Al_{288}-cF444$**

© 2021 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

²Межвузовский научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению,
Самарский технический университет, ул. Молодогвардейская, 244, Самара, 443011 Россия

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

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

Поступила в редакцию 03.02.2021 г.

После доработки 01.06.2021 г.

Принята к публикации 07.06.2021 г.

С помощью компьютерных методов (пакета программ ToposPro) осуществлен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры интерметаллида $Ta_{156}Al_{288}-cF444$ ($a = 19.153 \text{ \AA}$, $V = 7026.04 \text{ \AA}^3$, пр. группа $F-43m$). Установлены 324 варианта кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц от 2 до 6. Рассмотрены три варианта самосборки кристаллической структуры из трехслойных кластеров $K159A = 1@16@44@98$ и $K159B = 1@14@40@104$, и двухслойных кластеров $K61 = 1@16@44$ и $K26 = 0@4@22$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Ключевые слова: интерметаллид $Ta_{156}Al_{288}-cF444$, самосборка кристаллической структуры, трехслойные кластеры $K159A = 1@16@44@98$ и $K159B = (1@14@40@104)$, двухслойные кластеры $K61 = 1@16@44$ и $K26 = 0@4@22$

DOI: 10.31857/S0132665121050140

ВВЕДЕНИЕ

В двойных системах $M-Al$ установлено образование 586 интерметаллидов M_xAl_y с участием 56 различных металлов M . Многочисленные двойные соединения M_xAl_y образуются с атомами $M = Ti, Zr, Mg, Mn, Fe, Cu, Pt, Ta, \text{ и } V$ [1, 2]. В элементарных ячейках этих интерметаллидов максимальное число атомов изменяется в пределах от 48 до 176, например: $TiAl_2-tI48$ (пр. группа $I4_1/amd$), $ZrAl_2-tI48$ (пр. группа $I4_1/amd$), Cu_4Al_3-oF88 (пр. группа $Fmm2$), $Fe_4Al_{13}-mS102$ (пр. группа $C2/m$), $Pt_8Al_{21}-tI120$ (пр. группа $I4_1/a$), $MnAl_3-oP156$ (пр. группа $Pnma$), $VAl_{10}-cF176$ (пр. группа $Fd-3m$) [1, 2]. В системах $Mg-Al$ и $Ta-Al$ образуются кристаллохимически наиболее сложные интерметаллиды $Mg_2Al_3-cF1240$ (пр. группа $Fd-3m$) [3, 4] и $Ta_{156}Al_{288}-cF444$ (пр. группа $F-43m$) [5].

В работе [4] был установлен механизм самосборки кристаллической структуры $Mg_2Al_3-cF1240$ участием двух типов наноразмерных кластеров: 63-атомного нанокла-

Таблица 1. Кристаллохимические данные интерметаллидов Nb_nAl_m и Ta_nAl_m

| Соединение | M/Al | Пр. группа | Класс Пирсона | Параметры элементарной ячейки в Å, градусах | $V, \text{Å}^3$ |
|---------------------------|------|------------------|---------------|---|-----------------|
| $NbAl_3$ [6] | 0.33 | $I4/mmm$ (139) | $tI8$ | 3.837, 3.837, 8.584 | 126.4 |
| $TaAl_3$ [6, 7] | 0.33 | $I4/mmm$ (139) | $tI8$ | 3.841, 3.841, 8.540 | 126.0 |
| $Ta_{156}Al_{288}$ [5] | 0.57 | $F-43m$ (216) | $cF444$ | 19.153, 19.153, 19.153 | 7026.0 |
| Ta_5Al_3 [8] | 0.66 | $P6_3/mcm$ (193) | $hP16$ | 7.734, 7.734, 5.245 | 271.7 |
| $Ta_{1.108}Al$ [9] | 1.11 | $P2_1/c$ (14) | $mP86$ | 9.871, 9.877, 16.354, 90.00, 116.48, 90.00 | 1427.1 |
| $Ta_{22.4}Al_{20.6}$ [10] | 1.11 | $P2_1/n$ (14) | $mP86$ | 9.879, 9.901, 14.894, 90.00, 99.96, 90.00 | 1434.9 |
| $Ta_{17}Al_{12}$ [10] | 1.41 | $I-43m$ (217) | $cI58$ | 9.880, 9.880, 9.880 | 964.4 |
| Ta_2Al [11] | 2 | $P4_2/mnm$ (136) | $tP30$ | 9.891, 9.891, 5.198 | 508.5 |
| Nb_2Al [12] | 2 | $P4_2/mnm$ (136) | $tP30$ | 9.943, 9.943, 5.186 | 512.7 |
| Nb_3Al [13] | 3 | $Pm-3n$ (223) | $cP8$ | 5.186, 5.186, 5.186 | 139.5 |

стера $K63 = 1@12@50$, образующегося на 13-атомном икосаэдре $1@12$, и 61-атомного нанокластера $K61$, $1@16@44$, образующегося на 17-атомном полиэдре Фриауфа $1@16$.

В системе Ta–Al кроме интерметаллида $Ta_{156}Al_{288}-cF444$ получены еще пять простых интерметаллидов Ta_nAl_m (табл. 1, [5–13]). Интересно, что в системе Nb–Al получены только два интерметаллида, имеющие кристаллохимические Ta-аналоги: $NbAl_3-tI8$ и $Nb_2Al-tP30$ (табл. 1). Третий интерметаллид $Nb_3Al-cP8$ с максимальным содержанием атомов Nb не имеет Ta-аналога. Типы простых кластеров и их геометрические характеристики в кристаллических структурах металлов Ta и Al, и простых интерметаллидов Ta_nAl_m приведены на рис.1.

Кристаллическая структура $Ta_{156}Al_{288}-cF444$ [5] характеризуется гигантскими параметрами кубической ячейки $a = 19.153 \text{ Å}$, $V = 7026.04 \text{ Å}^3$, пр. группой $F-43m$, содержит 17 кристаллографически независимых атомов с КЧ атомов Al, равным 8, 9, 10, 12 (6 атомов) и КЧ атомов Ta, равным 13 (два атома), 14 (два атома), 15, 16 (три атома). В работе [4] приведено кристаллохимическое описание кристаллической структуры $Ta_{156}Al_{288}-cF444$, в которой выделены четыре полиэдрических кластера, содержащих 4, 4, 4 и 5 кристаллографически независимых атомов.

В настоящей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры $Ta_{156}Al_{288}-cF444$. Установлены три варианта самосборки кристаллической структуры с участием трехслойных кластеров-прекурсоров $K159A = 1@16@44@98$, $K159B = 1@14@40@104$, и двухслойных кластеров $K61 = 1@16@44$ и $K26 = 0@4@22$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Работа продолжает исследования [14–21] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супраполиэдрическом уровне и геометрического и топологического анализа кристаллических структур с применением современных компьютерных методов.

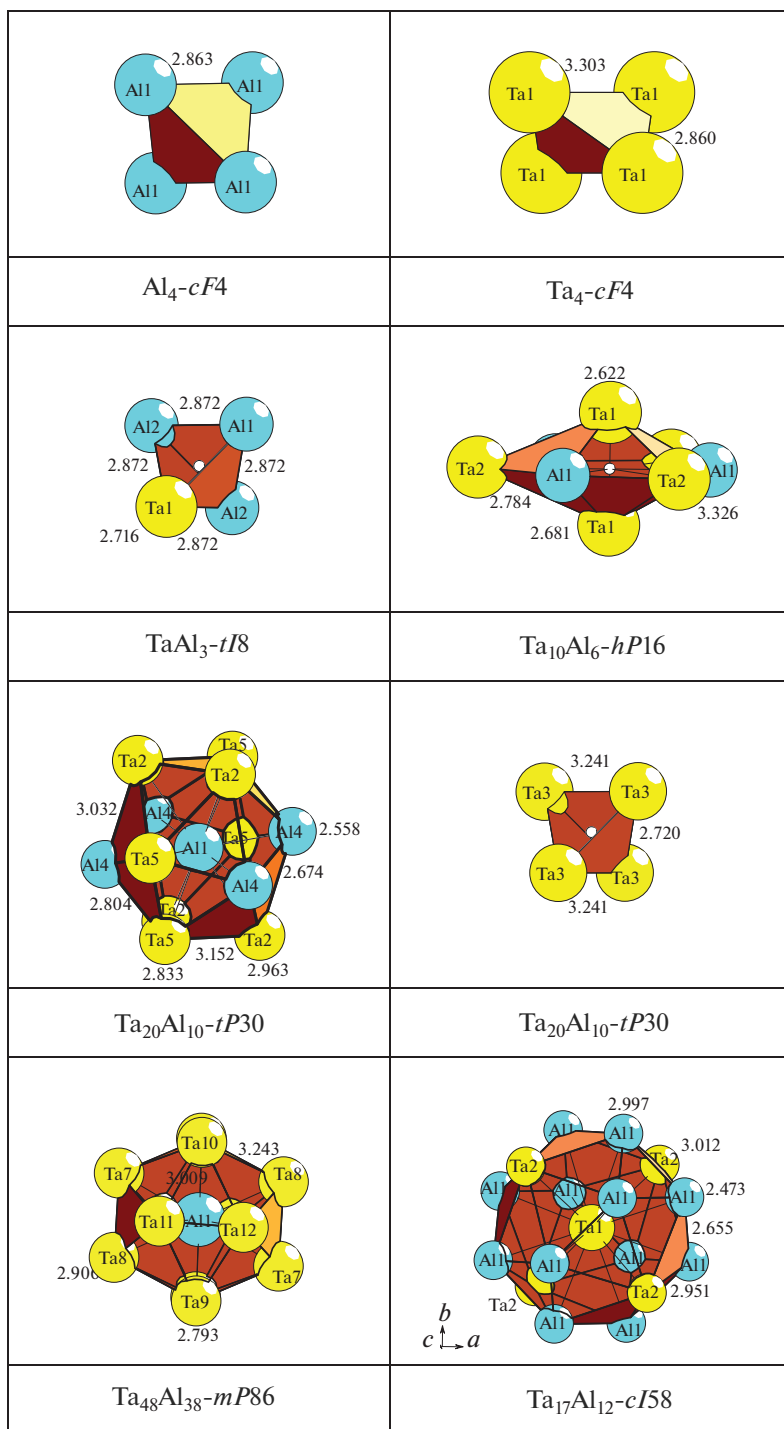


Рис. 1. Кластеры в кристаллических структурах металлов Ta и Al, и простых интерметаллидов Ta_nAl_m . Здесь и далее длины связей указаны в Å.

Таблица 2. Ta₁₅₆Al₂₈₈. Координационные последовательности {N_k} локальное окружение атомов Al и Ta

| Атом | Окружение | Координационные последовательности | | | | |
|------|--------------|------------------------------------|----|-----|-----|-----|
| | | N1 | N2 | N3 | N4 | N5 |
| Al1 | 6Al + 6Ta6 | 12 | 47 | 109 | 209 | 326 |
| Al2 | 6Al + 2Ta2 | 8 | 38 | 96 | 182 | 310 |
| Al3 | 6Al + 4Ta4 | 10 | 44 | 106 | 194 | 306 |
| Al4 | 6Al + 6Ta6 | 12 | 48 | 112 | 194 | 311 |
| Al5 | 4Al + 5Ta5 | 9 | 43 | 103 | 186 | 309 |
| Al6 | 6Al + 6Ta6 | 12 | 46 | 108 | 199 | 311 |
| Al7 | 5Al + 7Ta7 | 12 | 47 | 104 | 190 | 316 |
| Al8 | 6Al + 6Ta6 | 12 | 45 | 107 | 186 | 301 |
| Al9 | 7Al + 5Ta5 | 12 | 46 | 106 | 198 | 317 |
| Ta1 | 12Al + 4Ta4 | 16 | 44 | 98 | 196 | 298 |
| Ta2 | 12Al + 4Ta4 | 16 | 52 | 94 | 194 | 322 |
| Ta3 | 14Al14 | 14 | 40 | 104 | 198 | 284 |
| Ta4 | 10Al + 4Ta4 | 14 | 49 | 107 | 196 | 319 |
| Ta5 | 12Al + 4Ta4 | 16 | 46 | 101 | 196 | 308 |
| Ta6 | 12Al + 3 Ta3 | 15 | 44 | 103 | 202 | 308 |
| Ta7 | 9Al + 4Ta4 | 13 | 48 | 109 | 194 | 315 |
| Ta8 | 10Al + 3Ta3 | 13 | 48 | 110 | 199 | 310 |

МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ TorosPro [14], 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, приведены в табл. 2, в которой также даны число и типы соседних атомов в ближайшем окружении, т.е. в первой координационной сфере атома. Алгоритм разложения в автоматическом режиме структуры интерметаллида, представленного в виде свернутого графа на кластерные единицы, приведен в работах [14–16].

Самосборка кристаллической структуры Ta₁₅₆Al₂₈₈-сF444

Использованный нами метод моделирования кристаллической структуры основан на определении иерархической последовательности ее самосборки в кристаллографическом пространстве [15–21]. 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 микрослоя (2-ой уровень) и затем из микрослоя – трехмерного микрокаркаса структуры (3-й уровень).

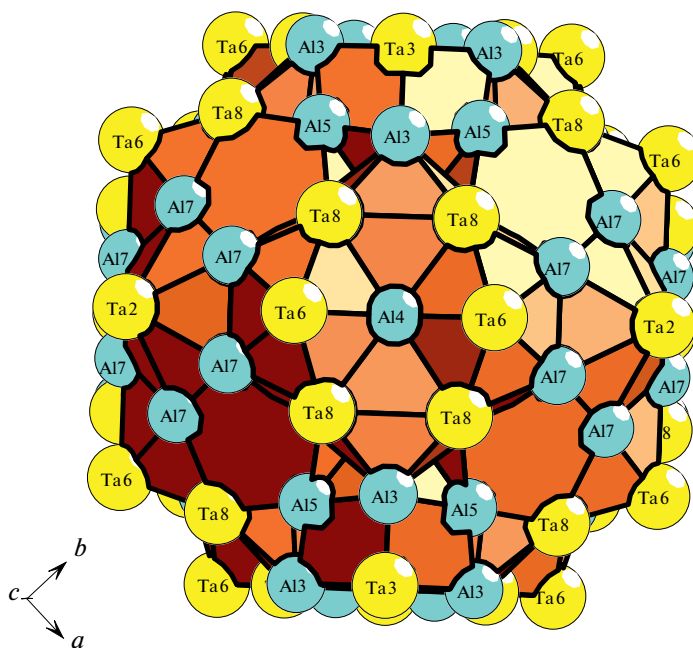


Рис. 2. $Ta_{156}Al_{288}$ - $cF444$. Трехслойный кластер $K159A = 1@16@44@98$.

Кристаллографические данные $Ta_{156}Al_{288}$ - $cF444$

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

Метод полного разложения 3D фактор-графа структуры на кластерные подструктуры был использован для определения каркас-образующих нанокластеров кристаллической структуры. Установлены 324 варианта кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц от 2 до 6. Число вариантов разложения на кластерные подструктуры с числом выделенных кластеров, равным 2, 3, 4, 5 и 6 составило 4, 2, 87, 183 и 148 соответственно.

Установлены три различных варианта самосборки кристаллической структуры из трехслойных кластеров $K159A = 1@16@44@98$ (рис. 2) и $K159B = 1@14@40@104$ (рис. 3), и двухслойных кластеров $K61 = 1@16@44$ и $K26 = 0@4@22$ (Рис. 4).

Вариант 1. Трехслойный кластер $K159A = 1@16@44@98$ с центром в позиции $4a$, образуется на полиэдре Фриауфа $Ta@16(Ta_4Al_{12})$. Кластеры $K159A$ формируют слой, в пустотах которого расположены спейсеры в виде Al_4 -тетраэдров (рис. 5).

Вариант 2. Трехслойный кластер $K159B = 1@14@40@104$, образуется на 14-атомном полиэдре $Ta@Al_{14}$. В слое между связанными кластерами $K159B$, в пустотах расположены спейсеры в виде атомов Ta (рис. 6).

Вариант 3. Двухслойный нанокластер $K61 = Ta@16(Ta_4Al_{12})@44(Ta_{16}Al_{28})$ (с центром в позиции $4a$) образуется на полиэдре Фриауфа $Ta@16(Ta_4Al_{12})$ и содержит 44 атома ($Ta_{16}Al_{28}$) во второй оболочке (табл. 3, рис. 4a). Двухслойный нанокластер $K26 = 0@Al_4@22(Al_6Ta_{16})$ (с центром в позиции $4b$) образуется на Al_4 -тетраэдре и содержит

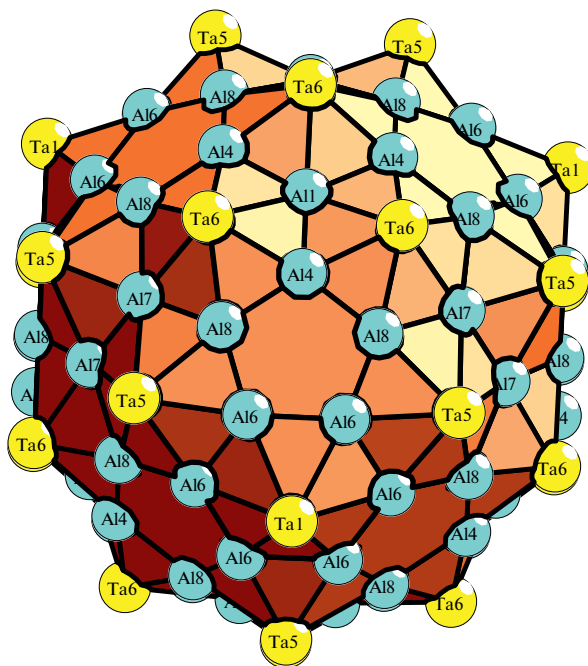


Рис. 3. $Ta_{156}Al_{288}$ -*cF444*. Трехслойный кластер $K_{159B} = 1@14@40@104$.

22 атома (Al_6Ta_{16}) во второй оболочке (табл. 4, рис. 4а). В пустотах каркаса в позициях 4с и 4d расположены кластеры $TaAl_{12}$ и $TaAl_{10}$.

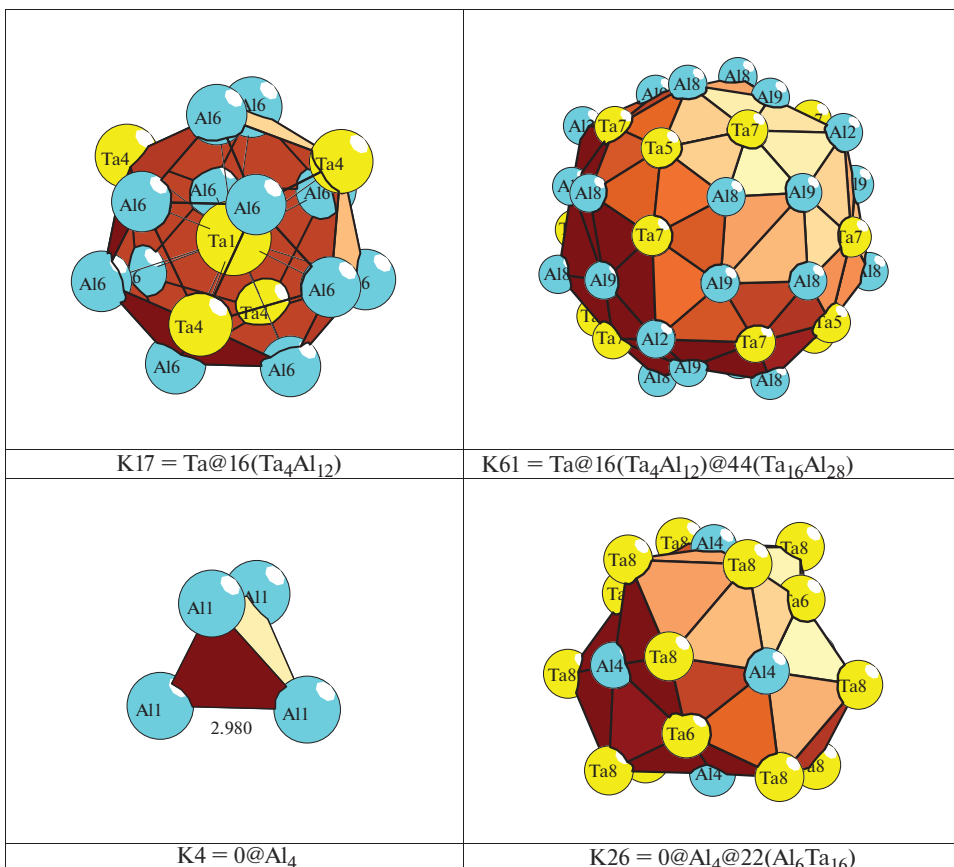
*Самосборка кристаллической структуры $Ta_{156}Al_{288}$ -*cF444*. Первичная цепь*

Самосборка первичных цепей происходит при связывании нанокластеров K61 и K26 в направлении [100] с образованием между ними 16 общих связей Ta–Ta, Ta–Al и

Таблица 3. Нанокластер K61. Атомы, формирующие внутренний полиэдр Фриауфа 1@16 и 44-атомную оболочку

| Нанокластер 1@16@44 | |
|----------------------|-----------------------|
| Полиэдр Фриауфа | Оболочка |
| 1 Ta1 | 4 Ta5 |
| 4 Ta4 | 12 Ta7 |
| 12 Al6 | 4 Al2 |
| | 12 Al8 |
| | 12 Al9 |
| $Ta@16(Ta_4Al_{12})$ | $@44(Ta_{16}Al_{28})$ |
| Всего 61 атом | |

a



б

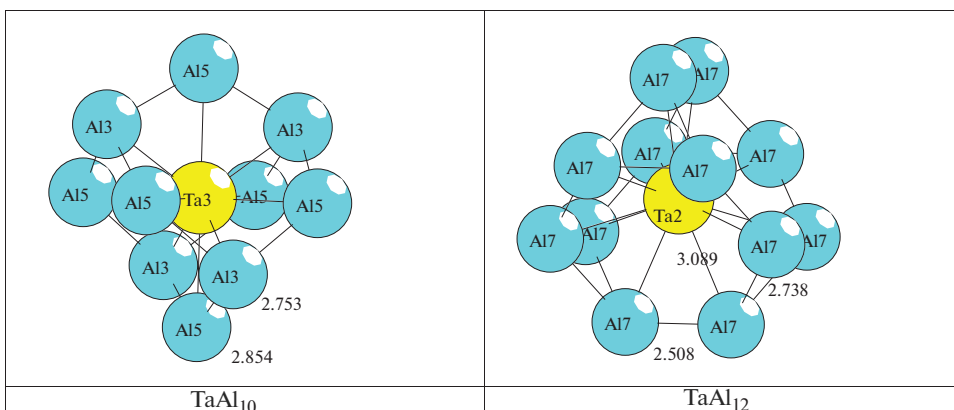


Рис. 4. $Ta_{156}Al_{288}$ -*cF444*. Двухслойные кластеры-прекурсоры (*a*); спейсеры (*б*).

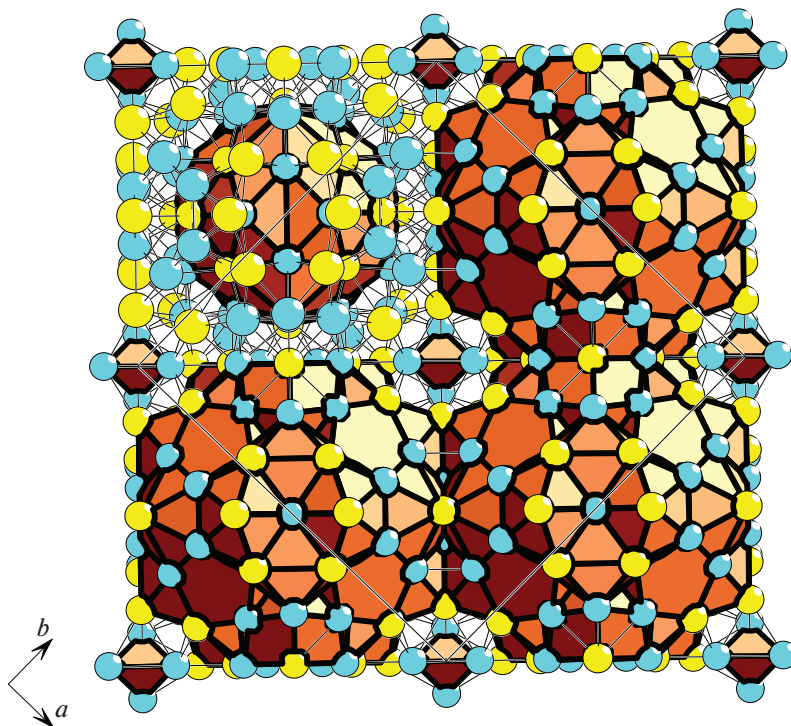


Рис. 5. $Ta_{156}Al_{288}$ - $cF444$. Слой из трехслойных кластеров $1@16@44@98$. В пустотах тетраэдры Al_4 .

Al–Al (рис.7). Расстояние между центрами нанокластеров соответствует половине длины вектора трансляции $a/2 = 19.153 \text{ \AA}/2 = 9.5765 \text{ \AA}$.

Самосборка слоя. Образование микрослоя S_3^2 происходит при связывании параллельно расположенных первичных цепей в плоскости (010) (рис. 8). На этой стадии в пустотах микрослоя происходит локализация полиэдрических кластеров $Ta(4c)Al_{12}$, и $Ta(4d)Al_{10}$. Расстояние между центрами кластеров из соседних цепей в направлениях [100] и [010] соответствует длинам векторов $a/2 = c/2 = 9.5765 \text{ \AA}$.

Таблица 4. Нанокластер K26. Атомы, формирующие внутренний тетраэдр $0@4$ и 22-атомную оболочку

| Нанокластер $0@4@22$ | |
|----------------------|--------------------|
| Тетраэдр K4 | Оболочка |
| 4 Al1 | 6 Al4 |
| | 4 Ta6 |
| | 12 Ta8 |
| $0@4(Al_4)$ | $@22(Al_6Ta_{16})$ |
| Всего 26 атомов | |

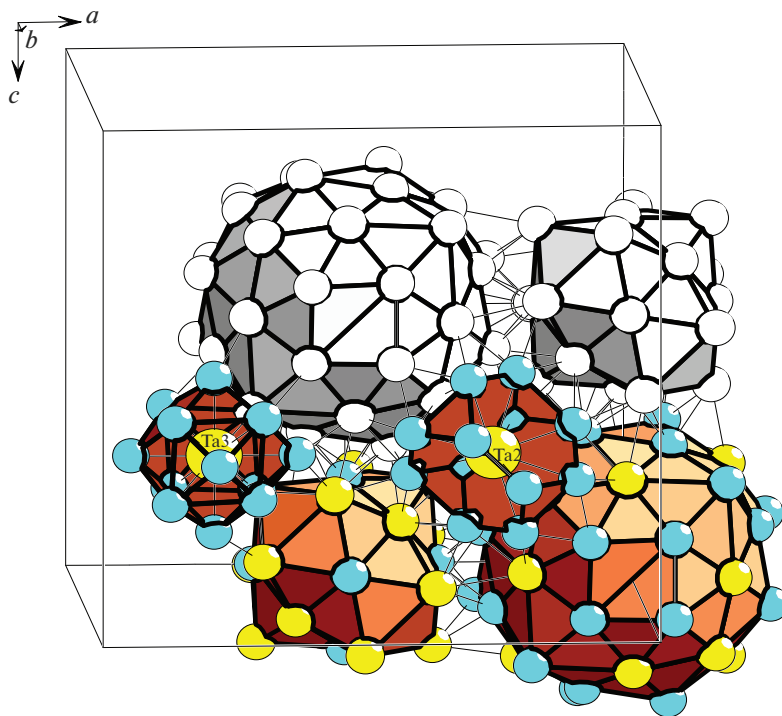


Рис. 8. $Ta_{156}Al_{288}$ - $cF444$. Слой из кластеров K61 и K26. Над слоем расположены спейсеры $TaAl_{10}$ и $TaAl_{12}$.

Самосборка каркаса. Микрокаркас структуры S_3^3 формируется при связывании двух микрослоев в направлении $[010]$. Расстояние между микрослоями определяет длину вектор

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки кристаллической структуры $Ta_{156}Al_{288}$ - $cF444$ из нанокластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь \rightarrow микрослой \rightarrow микрокаркас. Рассмотрены три варианта самосборки кристаллической структуры $Ta_{156}Al_{288}$ - $cF444$ из трехслойных кластеров $K159A = 1@16@44@98$ и $K159B = 1@14@40@104$, и двухслойных кластеров $1@16@44$ и $K26 = 0@4@22$. Между связанными кластерами $K159A$ в пустотах расположены спейсеры в виде Al_4 -тетраэдров, а между кластерами $K159B$ – спейсеры в виде атомов Ta. Двухслойные нанокластеры-прекурсоры $K61 = Ta@16(Ta_4Al_{12})@44(Ta_{16}Al_{28})$ и $K26 = 0@Al_4@22(Al_6Ta_{16})$ образуют 3D упаковку. В пустотах каркаса расположены кластеры-спейсеры $TaAl_{12}$ и $TaAl_{10}$.

Моделирование процесса самосборки кристаллической структуры выполнено при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения работ по государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, нанокластерный анализ выполнено при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения работ по государственному заданию АААА-А19-119022290092-5 (ИХС РАН), топологический анализ выполнен при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания № 0778-2020-0005.

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. *Samson S.* The crystal structure of the phase beta-Mg₂Al₃ // *Acta Crystallographica*. 1965. V. 19. P. 401–413.
4. *Blatov V.A., Ilyushin G.D., Proserpio D. M.* Nanocluster model of intermetallic compounds with giant unit cells: β, β'-Mg₂Al₃ polymorphs // *Inorg. Chem.* 2010. V. 49. № 4. P. 1811–1818.
5. *Mahne S., Harbrecht B.* Al₆₉Ta₃₉ – a new variant of a face-centred cubic giant cell structure // *Journal of Alloys and Compounds*. 1994. V. 203. P. 271–279.
6. *Brauer G.* Ueber die Kristallstruktur von Ti Al₃, Nb Al₃, Ta Al₃ und Zr Al₃ // *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1939. V. 242. P. 1–22.
7. *Condron C.L., Miller G.J., Strand J.D., Bud'ko S.L., Canfield P.C.* A new look at bonding in trialuminides: reinvestigation of Ta Al₃ // *Inorg. Chem.* 2003. V. 42 P. 8371–8376.
8. *Schuster Julius C., Nowotny Hans.* Investigations of the ternary systems (Zr, Hf, Nb, Ta)-Al-C and studies on complex carbides // *Zeitschrift fuer Metallkunde*. 1980 V. 71 P. 341–346.
9. *Boulineau A., Joubert J.M., Cerny R.* Structural characterization of the Ta-rich part of the Ta-Al system // *J. Solid State Chemistry*. 2006. V. 179. P. 3385–3393.
10. *Conrad M., Harbrecht B.* The crystal structure of Al_{20.6} Ta_{22.4} and its relation to Frank-Kasper phases // *Philosophical magazine letters*. 2007. V. 87. P. 493–503.
11. *Raman A.* Ueber das System Tantal-Aluminium // *Aluminium*. 1965. V. 41. P. 318–319.
12. *Brown P.J., Forsyth J.B.* The structure of the sigma-phase Nb₂ Al // *Acta Crystallographica*. 1961. V. 14. P. 362–364.
13. *Mueller P.* Supraleitung in quasibinaeren Legierungsreihen vom Typ A₃ B - Nb₃ Simit A₁₅-Struktur // *Zeitschrift fuer Metallkunde*. 1977. V. 68. P. 421–427.
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. № 7. P. 3576–3585.
15. *Shevchenko V.Ya., Blatov V.A., Ilyushin G.D.* Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: New Two-Layer Nanocluster Precursors K₆₄ = 0@8(Sn₄Ba₄)@56(Na₄Sn₅₂) and K₄₇ = Na@Sn₁₆@Na₃₀ in the Crystal Structure of Na₅₂Ba₄Sn₈₀-cF540 // *Glass Physics and Chemistry*. 2020. V. 46. P. 448–454.
16. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds K_nM_m (M = Ag, Au, As, Sb, Bi, Ge, Sn, Pb): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65. № 7. P. 1095–1105.
17. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds Na_kM_n (M = K, Cs, Ba, Ag, Pt, Au, Zn, Bi, Sb): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65. № 4. P. 539–545.
18. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds Li_kM_n (M = Ag, Au, Pt, Pd, Ir, Rh): Geometrical and Topological Analysis, Tetrahedral Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65. № 2. P. 202–210.
19. *Ilyushin G.D.* Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: 124-Atom Cluster 0@12@32@80 and 44-Atom Cluster 0@12@32 for the Self-Assembly of Li₄₈Na₈₀Ga₃₃₂-oF920 Crystal Structure // *Crystallography Reports*. 2019. V. 64. № 6. P. 857–861.
20. *Ilyushin G.D.* Symmetry and Topology Code of Cluster Crystal Structure Self-Assembly for Metal Oxides: Cs₁₁O₃-mP56, Rb(Cs₁₁O₃)-oP30, Cs(Cs₁₁O₃)-oP60, Rb₃(Rb₄) Cs₁₁O₃-oP84, (Cs₄)(Cs₆)(Cs₁₁O₃)-hP24, Rb₉O₂-mP22, (Rb₃)(Rb₉O₂)-hP28, and (Rb₂O)₃(Rb₁₃)-cF176 // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2018. V. 63. №12. P. 1590–1598.
21. *Shevchenko V.Ya., Blatov V.A., Ilyushin G.D.* Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: New Three-Layer Cluster Precursor K₁₃₆ = 0@Zn₁₂@32(Mg₂₀Zn₁₂)@92(Zr₁₂Zn₈₀) and a New Two-Layer Cluster Precursor K₃₀ = 0@Zn₆@Zn₂₄ in the Crystal Structure of Zr₆Mg₂₀Zn₁₂₈-cP154 // *Glass Physics and Chemistry*. 2020. V. 46. № 6. P. 455–460.