

**КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ:
НОВЫЕ ЧЕТЫРЕХСЛОЙНЫЕ КЛАСТЕРЫ $K339 = Tb@18@42@86@192$
И ТРЕХСЛОЙНЫЕ КЛАСТЕРЫ $K147 = Tb@18@42@86$ И $K124 = 0@8@26@90$
В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ $Tb_{117}Fe_{52}Ge_{112}-cF1124$**

© 2022 г. В. Я. Шевченко¹, *, В. А. Блатов², Г. Д. Илюшин³

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, г. 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 11.03.2021 г.

После доработки 30.11.2021 г.

Принята к публикации 06.12.2021 г.

С помощью компьютерных методов (пакета программ ToposPro) осуществлен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры интерметаллида $Tb_{117}Fe_{52}Ge_{112}-cF1124$ с гигантскими значениями параметров кубической ячейки $a = 28.580 \text{ \AA}$, $V = 23344.61 \text{ \AA}^3$, и пр. группой $Fm-3m$. Установлены 575 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц от 3 до 8. Рассмотрены два варианта самосборки кристаллической структуры из четырехслойных кластеров-прекурсоров $K339 = Tb@18(Fe_{12}Ge_6)@42(Ge_{18}Tb_{24})@86(Ge_{32}Tb_{54})@192(Ge_{72}Fe_{48}Tb_{72})$, и двух трехслойных кластеров $K147 = Tb@18(Fe_{12}Ge_6)@42(Ge_{18}Tb_{24})@86(Ge_{32}Tb_{54})$ и $K124 = 0@8Fe@26(Fe_8Tb_{18})@90(Ge_{42}Tb_{48})$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из новых кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Ключевые слова: интерметаллид $Tb_{117}Fe_{52}Ge_{112}-cF1124$, самосборка кристаллической структуры, четырехслойные нанокластеры-прекурсоры $K339 = Tb@18@42@86@192$, трехслойные нанокластеры-прекурсоры $K147 = Tb@18@42@86$ и $K124 = 0@8@26@90$

DOI: 10.31857/S0132665122020068

ВВЕДЕНИЕ

В двойных системах А–В [1, 2] наиболее кристаллохимически сложными структурами с гигантским числом атомов в элементарной кубической ячейке, превышающим 1000, являются кубические интерметаллиды, известные как фазы Самсона $NaCd_2-cF1157$ [3, 4], $Cu_4Cd_3-cF1124$ [5], $Mg_2Al_3-cF1227$ [6].

В работах [7–9] с помощью компьютерных методов (пакета программ ToposPro [10]) проведен геометрический и топологический анализ указанных структур и установлено, что их образование происходит с участием двух различных наноразмерных кластеров. Для интерметаллидов $NaCd_2$ и Mg_2Al_3 установлены икосаэдрический нанокластер $K63 = 1@12@50$ и нанокластер с внутренним полиэдром Фриауфа $K61 =$

= 1@16@44 [7, 8]. Каркасная структура интерметаллида Cu_4Cd_3 формируется с участием трехслойного нанокластера $K139 = 1@16@52@70$ с внутренним полиэдром Фриауфа, и 86-атомного супраполиэдрического кластера $K86$ из восьми связанных по вершинам икосаэдров [9].

Среди тройных интерметаллидов кристаллическая структура с гигантским числом атомов в элементарной ячейке, превышающим 1000, впервые была установлена в 1987 г. для $\text{Tb}_{117}\text{Fe}_{52}\text{Ge}_{112}$ - $cF1124$ [11] и затем в 1991 г. для изоструктурного $\text{Pr}_{117}\text{Co}_{52}\text{Ge}_{112}$ - $cF1124$ [12]. В работе [13] осуществлен синтез и приведены кристаллохимические данные новых интерметаллидов семейства $\text{TR}_{117}\text{Fe}_{52}\text{Ge}_{112}$ ($\text{TR} = \text{Gd}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$) и интерметаллида $\text{Sm}_{117}\text{Cr}_{52}\text{Ge}_{112}$. В настоящее время известны 5 кристаллохимических семейств $\text{TR}_{117}\text{Cr}_{52}\text{Ge}_{112}$ ($\text{TR} = \text{Nd}$ и Sm), $\text{TR}_{117}\text{Fe}_{52}\text{Ge}_{112}$ ($\text{TR} = \text{Y}, \text{Pr}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}, \text{Lu}$), $\text{TR}_{117}\text{Co}_{52}\text{Ge}_{112}$ ($\text{TR} = \text{Pr}$ и Sm), $\text{TR}_{117}\text{Ni}_{53-y}\text{Sn}_{112-z}$ ($\text{TR} = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$) и $\text{TR}_{117}\text{Co}_{52-x}\text{Sn}_{112-y}$ ($\text{TR} = \text{Pr}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$) [1, 2].

В настоящей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры $\text{Tb}_{117}\text{Fe}_{52}\text{Ge}_{112}$ - $cF1124$. Рассмотрены два варианта самосборки кристаллической структуры с участием четырехслойных нанокластеров-прекурсоров $K339$ и трехслойных кластеров-прекурсоров $K147$ и $K124$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структуры из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Работа продолжает исследования [7–9, 14–20] 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 *TorosPro* [10]. 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. 1, 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 [7–9].

САМОСБОРКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $\text{Tb}_{117}\text{Fe}_{58}\text{Ge}_{112}$ - $cF1124$

Использованный нами метод моделирования кристаллической структуры основан на определении иерархической последовательности ее самосборки в кристаллографическом пространстве [14–20]. 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).

Кристаллографические данные $\text{Tb}_{117}\text{Fe}_{58}\text{Ge}_{112}$ - $cF1124$

Пространственная группа $Fm\bar{3}m$ (но. 225) характеризуется позициями с симметрией: $m\bar{3}m$ ($4a, 4b$), $\bar{4}3m$ ($8c$), mmm ($24d$) и др.

Таблица 1. Локальное окружение атомов Fe, Ge, Tb в структуре Tb₁₁₇Fe₅₂Ge₁₁₂ и значения их координационных последовательностей

Атом	Окружение	Координационные последовательности N_1-N_5
Fe1	2Fe + 5Ge + 5Tb	12 51 107 195 341
Fe2	1Fe + 3Ge + 6Tb	10 43 103 202 362
Fe3	4Fe + 3Ge + 5Tb	12 41 95 200 333
Fe4	4Fe + 6Tb	10 51 137 248 409
Ge1	1Fe + 8Tb	9 49 115 218 337
Ge2	1Ge + 9Tb	10 51 112 218 355
Ge3	1Ge + 9Tb	10 57 145 226 378
Ge4	3Fe + 3Ge + 4Tb	10 46 98 189 319
Ge5	1Fe + 2Ge + 7Tb	10 50 116 203 346
Ge6	4Fe + 1Ge + 5Tb	10 38 93 189 321
Ge7	4Fe + 2Ge + 5Tb	11 47 99 191 320
Ge8	1Fe + 1Ge + 7Tb	9 50 113 221 375
Ge9	3Fe + 3Ge + 6Tb	12 49 107 186 334
Tb1	3Fe + 7Ge + 7Tb	17 51 119 229 381
Tb2	2Fe + 7Ge + 5Tb	14 51 121 218 344
Tb3	2Fe + 6Ge + 6Tb	14 52 125 225 364
Tb4	7Ge + 8Tb	15 58 131 240 388
Tb5	4Fe + 5Ge + 6Tb	15 53 127 253 387
Tb6	4Fe + 5Ge + 8Tb	17 61 146 270 414
Tb7	12Fe + 10Ge	22 40 100 202 286
Tb8	12Fe + 6Ge6	18 42 86 192 344

Для атомов Tb установлены значения координационных чисел КЧ = 14 (2 атома), 15 (2 атома), 17 (2 атома), 18 и 22, для атомов Fe = 10 (2 атома) и 12 (2 атома) и атомов Ge = 9 (2 атома), 10 (5 атомов) и 11 (табл. 1).

Метод полного разложения 3D фактор-графа структуры на кластерные подструктуры был использован для определения каркас-образующих нанокластеров кристаллической структуры. Установлены 575 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц от 3 до 8 (табл. 2). Число вариантов разложения на кластерные подструктуры с числом выделенных кластеров, равным 3, 4, 5, 6, 7 и 8, составило 11, 33, 92, 156, 170, 114.

Рассмотрим два основных варианта самосборки кристаллической структуры: первый – из четырехслойных кластеров-прекурсоров $K339 = Tb@18@42@86@192$ (рис. 1, табл. 3) и второй – из трехслойных кластеров $K147 = Tb@18@42@86$ (рис. 1, табл. 4) и трехслойных кластеров $K124 = 0@8@26@90$ (рис. 2, табл.5) с максимальной симметрией $m-3m$.

Таблица 2. Варианты кластерного представления кристаллической структуры Tb₁₁₇Fe₅₂Ge₁₁₂. 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 и ZA2

Три структурные единицы

Tb8(4)(1@18@42@86@192) Tb7(1)(1@22) Fe2(0)(1)
 Tb8(4)(1@18@42@86@192) Tb7(1)(1@22) Fe2(1)(1@10)
 Tb8(4)(1@18@42@86@192) Fe2(0)(1) Ge4(1)(1@10)
 Tb8(4)(1@18@42@86@192) Fe2(1)(1@10) Ge4(1)(1@10)
 Tb8(3)(1@18@42@86) Tb7(1)(1@22) Tb5(1)(1@15)
 Tb8(2)(1@18@42) Tb7(2)(1@22@40) Tb5(1)(1@15)
 Tb8(3)(1@18@42@86) Tb7(2)(1@22@40) Tb5(1)(1@15)
 Tb8(3)(1@18@42@86) Ge4(1)(1@10) Tb5(1)(1@15)
 Tb8(3)(1@18@42@86) Ge7(1)(1@11) Tb5(1)(1@15)
 ZA1(4b)(3)(0@8@26@90) Tb8(2)(1@18@42) Tb7(2)(1@22@40)

4 структурных единицы

Tb8(1)(1@18) Tb7(2)(1@22@40) Fe2(1)(1@10) Tb4(1)(1@15)
 Tb8(2)(1@18@42) Tb7(2)(1@22@40) Fe2(1)(1@10) Tb4(1)(1@15)
 Tb8(2)(1@18@42) Tb7(1)(1@22) Ge9(1)(1@12) Tb5(1)(1@15)
 Tb8(2)(1@18@42) Tb7(1)(1@22) Tb5(1)(1@15) Ge5(1)(1@10)
 Tb8(2)(1@18@42) Ge4(1)(1@10) Ge9(1)(1@12) Tb5(1)(1@15)
 Tb8(2)(1@18@42) Ge4(1)(1@10) Tb5(1)(1@15) Ge5(1)(1@10)
 Tb8(2)(1@18@42) Ge9(1)(1@12) Ge7(1)(1@11) Tb5(1)(1@15)
 Tb8(2)(1@18@42) Ge7(1)(1@11) Tb5(1)(1@15) Ge5(1)(1@10)
 ZA1(4b)(3)(0@8@26@90) Tb8(2)(1@18@42) Tb7(1)(1@22) Ge9(1)(1@12)
 ZA1(4b)(3)(0@8@26@90) Tb8(2)(1@18@42) Tb7(1)(1@22) Ge5(1)(1@10)
 ZA1(4b)(3)(0@8@26@90) Tb8(2)(1@18@42) Ge4(1)(1@10) Ge9(1)(1@12)
 ZA1(4b)(3)(0@8@26@90) Tb8(2)(1@18@42) Ge4(1)(1@10) Ge5(1)(1@10)
 ZA1(4b)(3)(0@8@26@90) Tb8(2)(1@18@42) Ge9(1)(1@12) Ge7(1)(1@11)

8 структурных единиц

ZA2(24d)(1)(0@12) ZA1(4b)(2)(0@8@26) Tm8(1)(1@18) Tm7(1)(1@22) Ge3(1)(1@10) Ge9(1)(1@12)
 Ge1(1)(1@9) Ge8(0)(1)
 ZA2(24d)(1)(0@12) ZA1(4b)(2)(0@8@26) Tm8(1)(1@18) Tm7(1)(1@22) Ge3(1)(1@10) Ge9(1)(1@12)
 Ge1(0)(1) Ge8(0)(1)
 ZA2(24d)(1)(0@12) ZA1(4b)(2)(0@8@26) Tm8(1)(1@18) Tm7(1)(1@22) Ge3(0)(1) Ge9(1)(1@12)
 Ge1(1)(1@9) Ge8(0)(1)
 ZA2(24d)(1)(0@12) ZA1(4b)(2)(0@8@26) Tm8(0)(1) Tm7(1)(1@22) Ge3(1)(1@10) Ge9(1)(1@12)
 Ge1(0)(1) Ge8(1)(1@9)
 ZA2(24d)(1)(0@12) ZA1(4b)(2)(0@8@26) Tm8(1)(1@18) Tm7(1)(1@22) Ge3(1)(1@10) Ge9(0)(1)
 Ge1(0)(1) Ge8(1)(1@9)
 ZA2(24d)(1)(0@12) ZA1(4b)(1)(0@8) Tm8(1)(1@18) Tm7(1)(1@22) Ge3(1)(1@10) Ge9(0)(1)
 Ge1(0)(1) Ge8(1)(1@9)
 ZA2(24d)(1)(0@12) ZA1(4b)(2)(0@8@26) Tm8(1)(1@18) Tm7(1)(1@22) Ge3(0)(1) Ge9(1)(1@12)
 Ge1(0)(1) Ge8(1)(1@9)
 ZA2(24d)(1)(0@12) ZA1(4b)(1)(0@8) Tm8(1)(1@18) Tm7(1)(1@22) Ge3(0)(1) Ge9(1)(1@12)
 Ge1(0)(1) Ge8(1)(1@9)
 ZA2(24d)(1)(0@12) ZA1(4b)(1)(0@8) Tm8(1)(1@18) Tm7(1)(1@22) Ge3(1)(1@10) Ge9(1)(1@12)
 Ge1(0)(1) Ge8(1)(1@9)

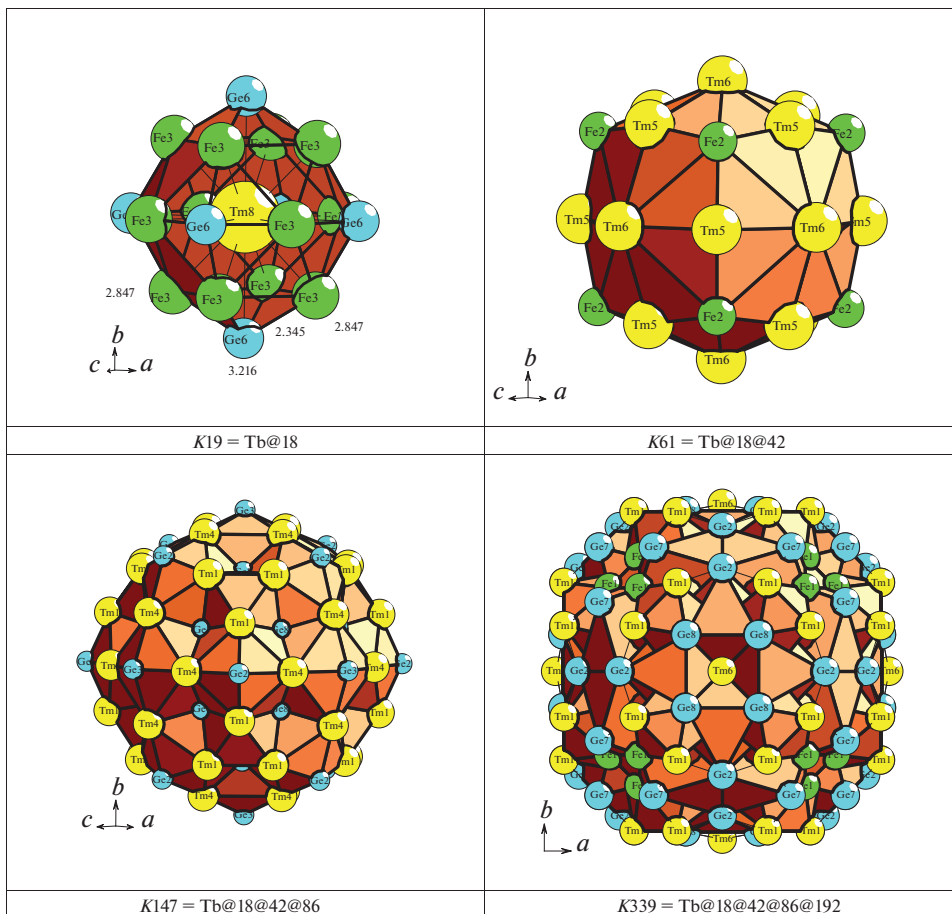


Рис. 1. Кластерные структуры $K19$, $K61$, $K147$ и $K339$. Здесь и далее длины связей указаны в Å.

Вариант 1. Четырехслойный кластер-прекурсор $K339$ с центром в позиции $4a$ характеризуется внутренним 19-атомным полиэдром $Tb@18(Fe_{12}Ge_6)$, 42 атомами $Ge_{18}Tb_{24}$ во второй оболочке, 86 атомами в третьей оболочке $Ge_{32}Tb_{54}$ и 192 атомами в четвертой оболочке $Ge_{72}Fe_{48}Tb_{72}$ (табл. 3). Кластеры-прекурсоры $K339$ формируют слой, в пустотах которого расположены атомы-спейсеры Fe и Tb (рис. 3).

Вариант 2. Трехслойный нанокластер $K124 = 0@8Fe@26(Fe_8Tb_{18})@90(Ge_{42}Tb_{48})$ с центром в позиции $4b$ характеризуется внутренним 8-атомным полиэдром $0@8Fe$, 26 атомами Fe_8Tb_{18} во второй оболочке и 90 атомами в третьей оболочке $Ge_{42}Tb_{48}$ (рис. 2). Другой трехслойный нанокластер $K147 = Tb@18(Fe_{12}Ge_6)@42(Ge_{18}Tb_{24})@86(Ge_{32}Tb_{54})$ с центром в позиции $4a$ характеризуется внутренним 19-атомным полиэдром $Tb@18(Fe_{12}Ge_6)$, 42 атомами $Ge_{18}Tb_{24}$ во второй оболочке и 86 атомами в третьей оболочке $Ge_{32}Tb_{54}$ (рис. 4). В пустотах каркаса из связанных кластеров $K124$ и $K147$ расположены полиэдрические кластеры $K23 = Tb@22(Fe_{12}Ge_{10})$ в позиции $8c$ с симметрией $m-3m$.

Таблица 3. Нанокластер K339. Атомы, формирующие внутренний полиэдр 1@18, 42-, 86- и 192-атомную оболочку

Нанокластер K339			
Полиэдр 1@18	42-атомная оболочка	86-атомная оболочка	192-атомная оболочка
1 Tb8	12 Ge1	24 Ge5	24 Fe1
12 Fe3	6 Ge3	8 Ge9	24 Fe4
6 Ge6	24 Tb3	24 Tb2	24 Ge2
		24 Tb4	24 Ge7
		6 Tb6	24 Ge8
			48 Tb1
			24 Tb5
18 вершин, 48 ребер, 32 граней	42 вершины, 120 ребер, 80 граней	86 вершин, 228 ребер, 144 грани	192 вершин, 492 ребер, 302 граней

Всего 339 атомов

Таблица 4. Нанокластер K124. Атомы, формирующие внутренний полиэдр 0@8, 26- и 90-атомную оболочку

Нанокластер K124		
Полиэдр 0@8	26-атомная оболочка	90-атомная оболочка
1 ZA1 (4b)	8 Fe2	12 Ge2
8 Fe4	12 Tb5	6 Ge3
	6 Tb6	24 Ge8
		24 Tb1
		24 Tb4
8 вершин, 12 ребер, 6 граней	26 вершины, 48 ребер, 24 граней	90 вершин, 240 ребер, 152 граней

Всего 124 атома

Таблица 5. Трехслойный кластер K147. Атомы, формирующие внутренний полиэдр 1@18, 42- и 86-атомную оболочку

Кластер K147		
Полиэдр 1@18	42-атомная оболочка	86-атомная оболочка
1 Tb8	12 Ge1	24 Ge5
12 Fe3	6 Ge3	8 Ge9
6 Ge6	24 Tb3	24 Tb2
		24 Tb4
		6 Tb6
18 вершин, 48 ребер, 32 граней	42 вершины, 120 ребер, 80 граней	86 вершин, 228 ребер, 144 грани

Всего 147 атомов

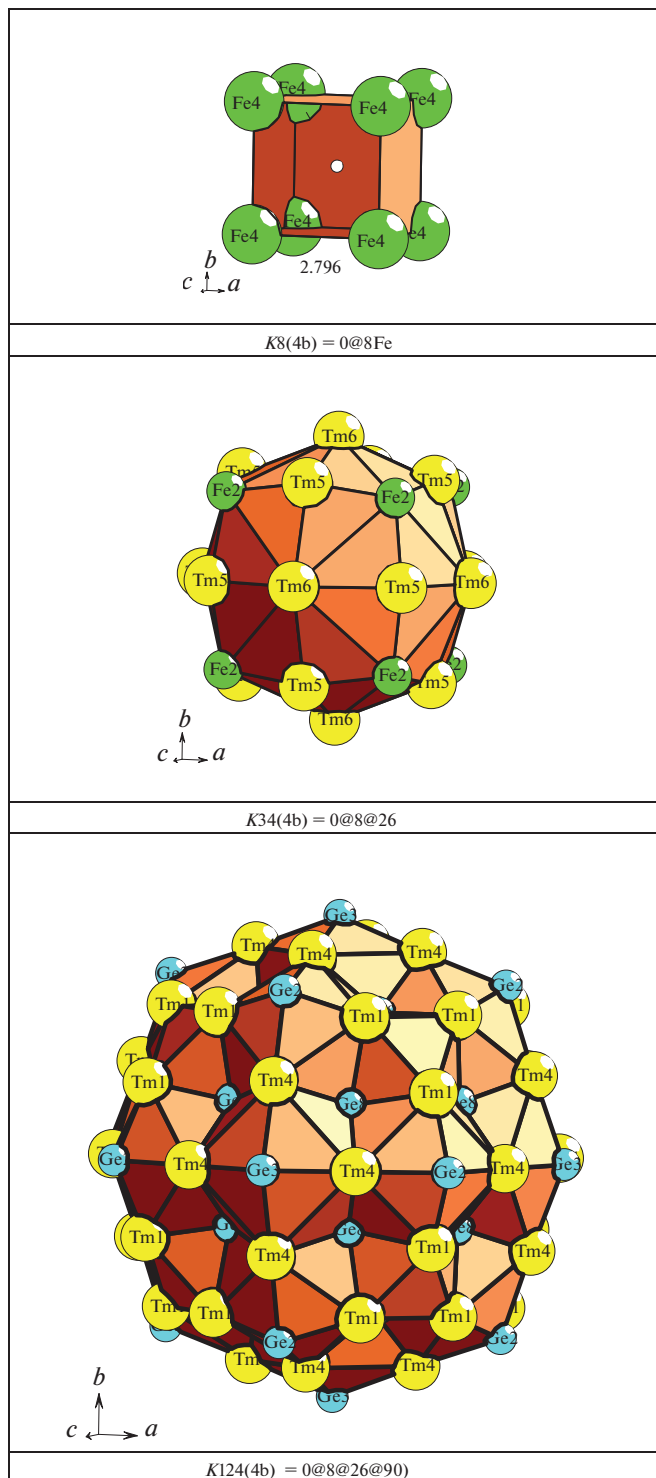


Рис. 2. Кластерные структуры K8, K34, и K124.

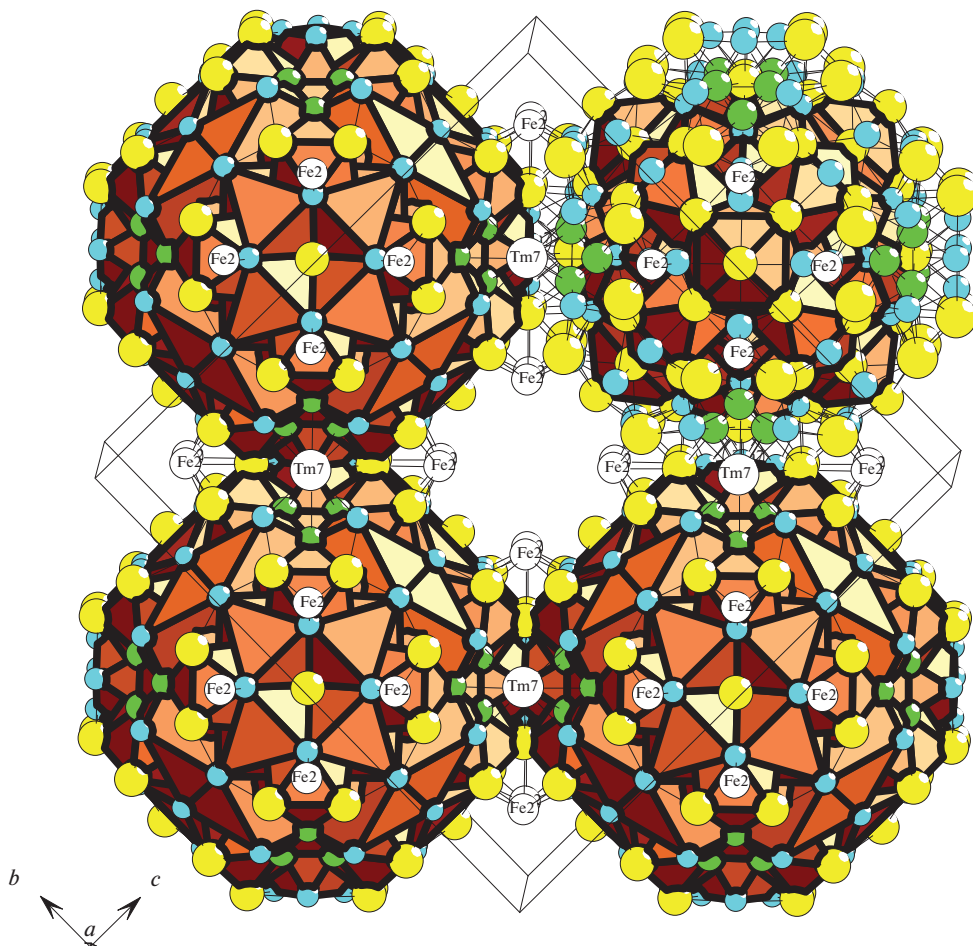


Рис. 3. Слой из четырехслойных кластеров $K339$. В пустотах расположены атомы-спейсеры Fe и Tb.

Самосборка кристаллической структуры $Tb_{117}Fe_{58}Ge_{112}-cF1148$ из кластеров $K147$ и $K124$

Первичная цепь. Самосборка первичных цепей происходит при связывании кластеров $K147$ с $K124$ в направлении $[100]$ (рис. 4). Расстояние между центрами кластеров соответствует половине длины вектора трансляции $a/2 = 28.58 \text{ \AA}/2 = 14.29 \text{ \AA}$.

Самосборка слоя. Образование микрослоя S_3^2 происходит при связывании параллельно расположенных первичных цепей в плоскости (001) . На этой стадии в пустотах микрослоя происходит локализация кластеров $K23 = Tb@22(Fe_{12}Ge_{10})$ (рис. 4). Расстояние между центрами кластеров из соседних цепей в направлениях $[100]$ и $[010]$ соответствует длинам векторов $a/2 = b/2 = 14.29 \text{ \AA}$.

Самосборка каркаса. Микрокаркас структуры S_3^3 формируется при связывании двух микрослоев в направлении $[001]$. Расстояние между микрослоями определяет длину вектора трансляции $c/2 = 14.29 \text{ \AA}$.

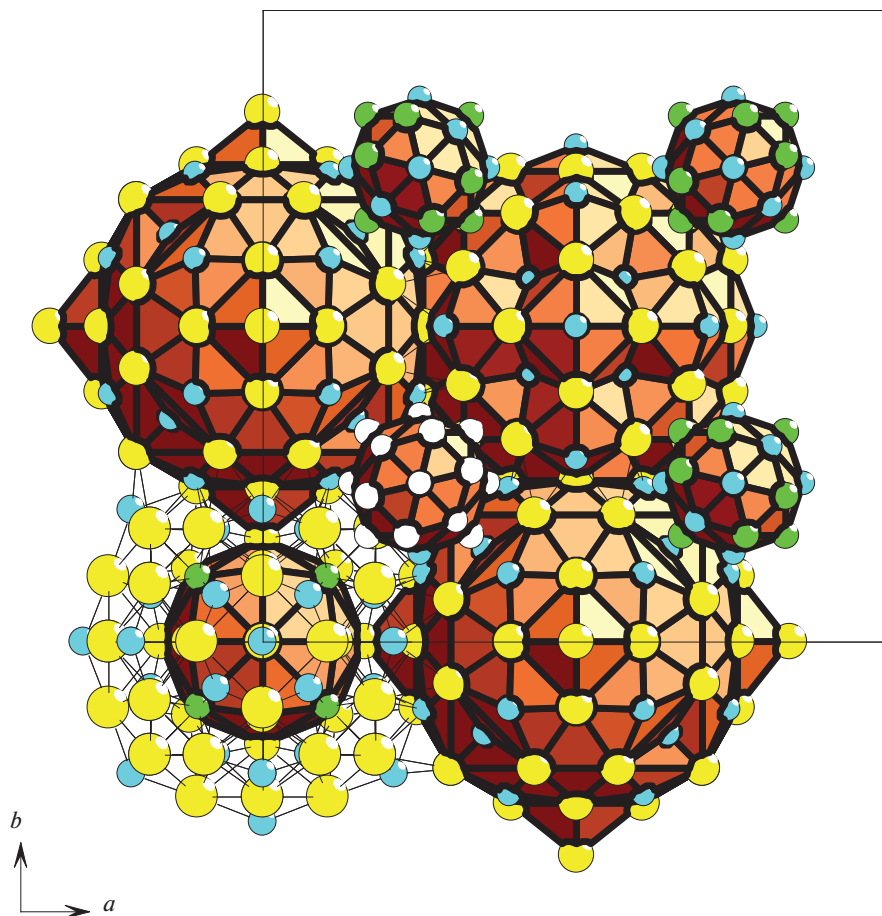


Рис. 4. Слой из трехслойных кластеров $K124$ и $K147$. В пустотах расположены полиэдры-спейсеры $K23 = \text{Tb@22} (\text{Fe}_{12}\text{Ge}_{10})$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Осуществлен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры интерметаллида $\text{Tb}_{117}\text{Fe}_{58}\text{Ge}_{112}\text{-}cF1148$. Рассмотрены два варианта самосборки кристаллической структуры из четырехслойных кластеров-прекурсоров $K339 = \text{Tb@18@42@86@192}$, и трехслойных кластеров-прекурсоров $K147 = \text{Tb@18@42@86}$ и $K124 = 0@8@26@90$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из нанокластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Нанокластерный анализ и моделирование самосборки кристаллических структур выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ № 19-02-00636) и Минобрнауки РФ в рамках выполнения работ по государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” 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.* Crystal structure of NaCd_2 // *Nature (London)*. 1962. V. 195. № 4838. P. 259–262.
4. *Samson S.* A method for the determination of complex cubic metal structures and its application to the solution of the structure of NaCd_2 // *Acta Cryst.* 1964. V. 17. P. 491–495.
5. *Samson S.* The crystal structure of the intermetallic compound Cu_4Cd_3 // *Acta Cryst.* 1967. V. 23 P. 586–600.
6. *Samson S.* The crystal structure of the phase $\beta\text{-Mg}_2\text{Al}_3$ // *Acta Cryst.* 1965. V. 19. P. 401–413.
7. *Blatov V.A., Ilyushin G.D., Proserpio D. M.* Nanocluster model of intermetallic compounds with giant unit cells: β , β' - Mg_2Al_3 polymorphs // *Inorg. Chem.* 2010. V. 49. № 4. P. 1811–1818.
8. *Shevchenko V.Ya., Blatov V.A., Ilyushin G.D.* Intermetallic compounds of the NaCd_2 family perceived as assemblies of nanoclusters // *Struct. Chem.* 2009. V. 20. № 6. P. 975–982.
9. *Blatov V.A., Ilyushin G.D.* New Method for Computer Analysis of Complex Intermetallic Compounds and Nanocluster Model of the Samson Phase Cd_3Cu_4 // *Crystallogr. Rep.* 2010. V. 55. № 7. P. 1100–1105.
10. *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.
11. *Печарский В.Л., Бодак О.И., Бельский В.К.* Кристаллическая структура $\text{Tb}_{117}\text{Fe}_{52}\text{Ge}_{112}$ // *Кристаллография*. 1987. Т. 32. С. 334–338.
12. *Федина М.Ф., Бодак О.И., Печарский В.К.* Взаимодействия в системе Pr–Co–Ge system // *Известия АН. Неорганические материалы*. 1991. Т. 27. С. 918–920.
13. *Morozkin A.V., Seropegin Y.D., Portnoy V.K., Sviridov I.A., Leonov A.V.* New ternary compounds $\text{R}_{117}\text{Fe}_{52}\text{Ge}_{112}$ (R = Gd, Dy, Ho, Er, Tm) and $\text{Sm}_{117}\text{Cr}_{52}\text{Ge}_{112}$ of the $\text{Tb}_{117}\text{Fe}_{52}\text{Ge}_{112}$ -type structure // *Materials Research Bulletin*. 1998. V. 33. № 6. P. 903–908.
14. *Shevchenko V.Ya., Blatov V.A., Ilyushin G.D.* Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: New Two-Layer Nanocluster Precursors $\text{K64} = 0@8(\text{Sn}_4\text{Ba}_4)@56(\text{Na}_4\text{Sn}_2)$ and $\text{K47} = \text{Na}@8\text{Sn}_{16}@2\text{Na}_{30}$ in the Crystal Structure of $\text{Na}_{52}\text{Ba}_4\text{Sn}_{80}\text{-cF540}$ // *Glass Physics and Chemistry*. 2020. V. 46. P. 448–454.
15. *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.
16. *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.
17. *Shevchenko V.Ya., Blatov V.A., Ilyushin G.D.* Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: New Three-Layer Cluster Precursor $\text{K136} = 0@2\text{Zn}_{12}@32(\text{Mg}_{20}\text{Zn}_{12})@92(\text{Zr}_{17}\text{Zn}_{80})$ and a New Two-Layer Cluster Precursor $\text{K30} = 0@2\text{Zn}_6@2\text{Zn}_{24}$ in the Crystal Structure of $\text{Zr}_6\text{Mg}_{20}\text{Zn}_{128}\text{-cP154}$ // *Glass Physics and Chemistry*. 2020. V. 46. № 6. P. 455–460.
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 $\text{Li}_{48}\text{Na}_{80}\text{Ga}_{332}\text{-oF920}$ 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: $\text{Cs}_{11}\text{O}_3\text{-mP56}$, $\text{Rb}(\text{Cs}_{11}\text{O}_3)\text{-oP30}$, $\text{Cs}(\text{Cs}_{11}\text{O}_3)\text{-oP60}$, $\text{Rb}_3(\text{Rb}_4)\text{Cs}_{11}\text{O}_3\text{-oP84}$, $(\text{Cs}_4)(\text{Cs}_6)(\text{Cs}_{11}\text{O}_3)\text{-hP24}$, $\text{Rb}_9\text{O}_2\text{-mP22}$, $(\text{Rb}_3)(\text{Rb}_9\text{O}_2)\text{-hP28}$, and $(\text{Rb}_2\text{O})_3(\text{Rb}_{13})\text{-cF176}$ // *Russian J. Inorganic Chemistry*. 2018. V. 63. № 12. P. 1590–1598.