

СТРУКТУРНАЯ ХИМИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ: ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ, ИКОСАЭДРИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРНЫЕ ПРЕКУРСОРЫ $K45 = \text{Hg}@\text{Hg}_{12}@\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{20}$ И $K81 = \text{Hg}@\text{Hg}_{12}@\text{Hg}_{32}@\text{Hg}_{36}$ И САМОСБОРКА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР $\text{Cs}_6\text{Hg}_{40}-cP46$ И $\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{162}-cP174$

© 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, 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 13.12.21 г.

После доработки 03.02.22 г.

Принята к публикации 05.08.22 г.

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлен геометрический и топологический анализ и проведено моделирование самосборки кристаллических структур интерметаллидов $\text{Cs}_6\text{Hg}_{40}-cP46$, $a = 10.913 \text{ \AA}$, $Pm-3n$ и $\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{162}-cP174$, $a = 16.557 \text{ \AA}$, $Im-3$. Металлокластеры-прекурсоры определены с использованием алгоритма разложения структурных графов на кластерные структуры и путем построения базисной сетки структуры в виде графа, узлы которого соответствуют положению центров кластеров-прекурсоров S_3^0 . В кристаллической структуре $\text{Cs}_6\text{Hg}_{40}-cP46$ установлены двухслойные икосаэдрические кластеры $K45 = \text{Hg}@\text{Hg}_{12}@\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{20}$, а для кристаллической структуры $\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{162}-cP174$ определены трехслойные икосаэдрические кластеры $K81 = \text{Hg}@\text{Hg}_{12}@\text{Hg}_{32}@\text{Hg}_{36}$ с симметрией $g = m-3$ и Cs-спейсеры. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки кристаллических структур интерметаллидов из прекурсоров S_3^0 в виде: цепь $S_3^1 \rightarrow$ микрослой $S_3^2 \rightarrow$ микрокаркас S_3^3 .

Ключевые слова: интерметаллиды $\text{Cs}_6\text{Hg}_{40}-cP46$ и $\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{162}-cP174$, самосборка кристаллических структур, икосаэдрические кластеры $K45 = \text{Hg}@\text{Hg}_{12}@\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{20}$, икосаэдрические кластеры $K81 = \text{Hg}@\text{Hg}_{12}@\text{Hg}_{32}@\text{Hg}_{36}$

DOI: 10.31857/S013266512110067X

ВВЕДЕНИЕ

С участием атомов щелочных металлов $A = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$ установлено образование около 350 кристаллических структур двойных интерметаллидов A_nB_m [1, 2]. Наиболее многочисленное семейство составляют 130 интерметаллидов Li_nB_m , которым соответствуют 49 структурных типов. Наименее многочисленное семейство включает в себя 42 интерметаллида Cs_nB_m , которым соответствуют 33 структурных типа. В пяти системах Cs–Au, Cs–Pt, Cs–Na, Cs–Rb образуется по одному интерметаллиду, в системе Cs–K – два интерметаллида. В системах Cs–M с $M = \text{Zn}, \text{Cd}, \text{Hg}$ установлено об-

разование семи различных структурных типов. В системах Cs–M с $M = \text{Ge, Sn, Pb}$ десяти интерметаллидам соответствуют 6 структурных типов, а в системах Cs–M с $M = \text{Sb, Bi}$ одиннадцати интерметаллидам соответствуют 9 структурных типов.

В системе Cs–Hg установлена кристаллизация пяти интерметаллидов Cs_nHg_m с широкой областью изменения состава $\text{Hg} : \text{Cs} = 1\text{--}13.5$ [1, 2]. Из них четыре образуют кристаллохимические семейства $\text{Cs}_2\text{Hg}_4\text{-oI12}$ [3–5], $\text{Cs}_2\text{Hg}_2\text{-aP8}$ [3, 5, 6], $\text{Cs}_{10}\text{Hg}_{38}\text{-tI48}$ [5], $\text{Cs}_6\text{Hg}_{40}\text{-cP46}$ [7, 8]. Интерметаллид $\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{162}\text{-cI174}$ [9] с наибольшим соотношением $\text{Hg}/\text{Cs} = 13.5$ кристаллохимических аналогов не имеет.

В работе [10] проведено моделирование самосборки кристаллических структур трех семейств: $\text{Cs}_2\text{Hg}_4\text{-oI12}$ (состоящего из 55 соединений), $\text{Cs}_2\text{Hg}_2\text{-aP8}$ (из трех соединений) и $\text{Cs}_{10}\text{Hg}_{38}\text{-tI48}$ (из двух соединений). Установлены тетраэдрические металлокластеры $K4 = 0@4$ в $\text{Cs}_2\text{Hg}_2\text{-cI2}$, октаэдрические металлокластеры $K6 = 0@6$ в Cs_2Hg_4 и новый полиэдрический металлокластер $K21 = \text{Cs}@_{\text{Cs}_4}\text{Hg}_{16}$ в $\text{Cs}_{10}\text{Hg}_{38}\text{-tI48}$.

В настоящей работе с помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro [11]) осуществлен геометрический и топологический анализ и проведено моделирование самосборки кристаллических структур $\text{Cs}_6\text{Hg}_{40}\text{-cP46}$ и $\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{162}\text{-cI174}$.

Работа продолжает исследования [10, 12–14] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супраполиэдрическом уровне и геометрического и топологического анализа кристаллических структур интерметаллидов с применением компьютерных методов.

МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ ToposPro, позволяющего проводить исследование кристаллической структуры в автоматическом режиме, используя представление структур в виде “свернутых графов” (фактор-графов). Данные о функциональной роли атомов при образовании кристаллических структур получены расчетом топологических индексов (координационных последовательностей, точечных и вершинных символов).

Алгоритм разложения в автоматическом режиме структуры любого интерметаллида, представленного в виде свернутого графа, на кластерные единицы основывается на следующих принципах. Структура образуется в результате самосборки кластеров-прекурсоров. Кластеры-прекурсоры образуют каркас структуры, пустоты в котором заполняют спейсеры. Многослойные нанокластеры-прекурсоры не имеют общих внутренних атомов, но они могут иметь общие атомы на поверхности. Кластеры-прекурсоры занимают высокосимметричные позиции. Набор нанокластеров-прекурсоров и спейсеров включает в себя все атомы структуры.

Кристаллохимические и топологические данные интерметаллидов представлены в табл. 1.

СИММЕТРИЙНЫЙ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ КОД (ПРОГРАММА) САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ

При моделировании кристаллической структуры определяется иерархическая последовательность ее самосборки в кристаллографическом пространстве, т.е. восстанавливается симметрично-топологический код формирования макроструктуры в виде последовательности значимых элементарных событий, характеризующих самую короткую (быструю) программу конвергентной кластерной самосборки. Алгоритм самосборки трехмерной структуры происходит по универсальному принципу максимального (комплементарного) связывания кластеров-прекурсоров при переходе на более высокий уровень структурной самоорганизации системы.

Таблица 1. Кристаллохимические и топологические данные интерметаллидов Cs_3Hg_{20} -*cP46* и Cs_6Hg_{81} -*cI174*

Интерметаллид	Группа симметрии	Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
				N ₁	N ₂	N ₃	N ₄	N ₅
Cs_3Hg_{20} - <i>cP46</i>	<i>Pm-3n</i> (223)	Cs1	20Hg	20	54	124	242	364
		Hg1	12Hg	12	32	120	206	332
		Hg2	3Cs + 9Hg	12	54	126	216	360
		Hg3	3Cs + 9Hg	12	56	114	248	362
		Hg4	4Cs + 8Hg	12	58	128	210	386
$Cs_{12}Hg_{162}$ - <i>cI174</i>	<i>Im-3</i> (204)	Cs1	20Hg	20	53	129	232	370
		Hg1	2Cs + 10Hg	12	56	119	218	338
		Hg2	3Cs + 8Hg	11	59	127	230	359
		Hg3	15Hg	15	51	117	213	351
		Hg4	2Cs + 11Hg	13	56	121	218	355
		Hg5	1Cs + 11Hg	12	49	115	207	346
		Hg6	16Hg	16	46	118	214	335
		Hg7	12Hg	12	68	92	240	362

Кристаллическая структура Cs_6Hg_{40} -*cP46*. Кристаллохимическое семейство состоит из Cs_6Hg_{40} и Rb_6Hg_{40} . Параметры кубической ячейки Cs_3Hg_{20} : $a = 10.913 \text{ \AA}$, $V = 1299.67 \text{ \AA}^3$, $Z = 2$. Пространственная группа *Pm-3n* (№ 223) содержит элементы точечной симметрии и соответствующие им позиции Уайкоффа $g = m-3$ (2a), *mmm* (6b), $-4m$ (6c, 6d), 32 (8e) и др.

Локальное окружение атомов и значения координационных последовательностей приведены в табл. 1. Координационное число (КЧ) атома Cs равно 20; координационный полиэдр имеет 20 вершин, 48 ребер и 30 граней. Для атома Hg1 значение КЧ = 12 соответствует икосаэдрическому кластеру $K13 = Hg@Hg_{12}$ с симметрией *m-3* (рис. 1). 12 атомов Hg2 образуют оболочку икосаэдрического кластера K13 и в локальном окружении кроме центрального атома Hg1 находятся еще 11 атомов (3 атома Cs и 8 атомов Hg).

Установлены 11 вариантов кластерного представления кристаллической структуры Cs_3Hg_{20} -*cP46* (табл. 2). Ниже рассмотрен наиболее быстрой вариант самосборки кристаллической структуры из образующихся в процессе формирования вторых оболочек кластеров $K45 = 1@12@32$ (рис. 2) в виде: первичная цепь → слой → каркас.

Супраполиэдрческий кластер-димер образуется в результате связывания темплатированных кластеров-прекурсоров $K13 + K13$ (рис. 3). На поверхности кластера $K13$ с участием атомов Hg3, Hg4, и Cs формируется оболочка из 32 атомов $Cs_{12}Hg_{20}$. Темплатированный кластер $K45$ имеет топологию известного кластера Бергмана и химический состав оболочек $Hg@Hg_{12}@Cs_{12}Hg_{20}$ (табл. 3). Образование тетрамера S_3^2 происходит связыванием параллельно расположенных цепей в направлении оси Z (рис. 3). Микрокаркас структуры S_3^3 формируется при связывании тетрамеров $S_3^2 + S_3^2$.

Кристаллическая структура $Cs_{12}Hg_{162}$ -*cI174*. Параметры кубической ячейки: $a = 16.557 \text{ \AA}$, $V = 4538.84 \text{ \AA}^3$, $Z = 2$ Cs_6Hg_{81} . Пространственная группа *Im-3* (no. 204) со-

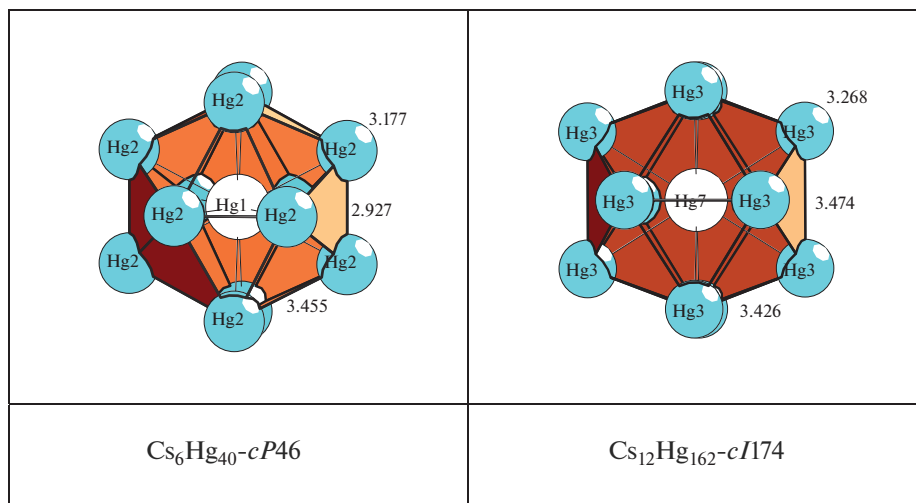


Рис. 1. Икосаэдры $K13 = Hg@Hg_{12}$. Числа указывают длины связей в Å.

держит элементы точечной симметрии и соответствующие им позиции Уайкоффа $g = m-3$ ($2a$), mmm ($6b$), -3 ($4c$), $mm2$ ($12d$, $12e$), 32 ($8e$), 3 ($16f$) и др.

Локальное окружение атомов и значения координационных последовательностей приведены в табл. 1. Так же, как и в кристаллической структуре $Cs_3Hg_{20}\text{-}cP46$, атомы Cs имеют КЧ = 20, однако топология координационного полиэдра незначительно от-

Таблица 2. $Cs_3Hg_{20}\text{-}cP46$. 11 вариантов кластерного представления кристаллической структуры. Указан центральный атом или центр пустоты полиэдрического кластера, число его оболочек (в скобках) и количество атомов в каждой оболочке (в скобках). Кристаллографические позиции, соответствующие центрам пустот полиэдрических кластеров, обозначены ZA1

1 структурная единица
$Hg1(2)(1@12@32)$
2 структурные единицы
$Hg1(0)(1) Cs1(1)(1@20)$
$Hg1(1)(1@12) Cs1(1)(1@20)$
$Hg1(0)(1) Hg4(1)(1@12)$
$Hg1(1)(1@12) Hg4(1)(1@12)$
$Hg1(0)(1) Hg3(1)(1@12)$
$Hg1(1)(1@12) Hg3(1)(1@12)$
3 структурные единицы
$ZA1(6b)(1)(0@8) Hg1(1)(1@12) Hg3(0)(1)$
$ZA1(6b)(1)(0@8) Hg1(0)(1) Hg3(0)(1)$
$ZA1(6b)(1)(0@8) Hg1(0)(1) Hg3(1)(1@12)$
$ZA1(6b)(1)(0@8) Hg1(1)(1@12) Hg3(1)(1@12)$

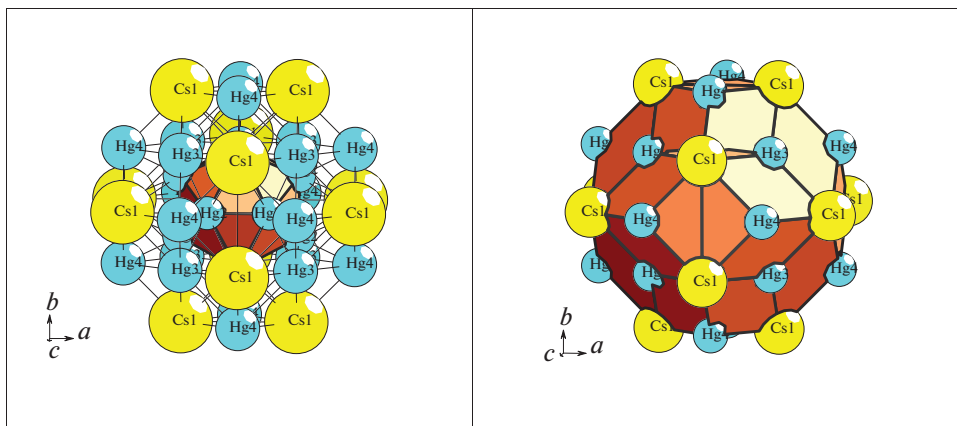


Рис. 2. $\text{Cs}_6\text{Hg}_{40}\text{-cP46}$. Кластер $K45 = \text{Hg}@ \text{Hg}_{12}@ \text{Cs}_{12}\text{Hg}_{20}$.

Таблица 3. $\text{Cs}_3\text{Hg}_{20}\text{-cP46}$. Нанокластер $K45$. Атомы, формирующие внутренний икосаэдр и 32-атомную оболочку. Для оболочек полиэдров в скобках приведено число вершин, ребер и граней

Нанокластер $\text{Hg}_1(2)(1@12 @32)$	
Икосаэдр $\text{Hg}@ \text{Hg}_{12}$	Оболочка $\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{20}$
1 Hg1	12 Cs1
12 Hg2	8 Hg3
	12 Hg4
(12, 30, 20)	(32, 84, 54)
Всего 45 атомов	

личается: он содержит 20 вершин, 45 ребер и 27 граней. Для 7 атомов Hg установлены значения КЧ = 11, 12 (три атома), 13, 15 и 16.

На поверхности икосаэдра $\text{Hg}@ \text{Hg}_{12}$ (рис. 1) образуется 68-атомная двухслойная оболочка; состав оболочек кластера характеризуется последовательностью $K81 = \text{Hg}@ \text{Hg}_{12}@ \text{Hg}_{32}@ \text{Hg}_{36}$ (рис. 4). Установлены 20 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц 2 (7 вариантов), 3 (10 вариантов), 4 (3 варианта) (табл. 4). Ниже рассмотрен наиболее быстрой вариант самосборки кристаллической структуры из трехслойных кластеров $K81$ в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас (рис. 5).

В элементарной ячейке центр кластера $K81$ расположен в позиции $2a$ с симметрией $g = m-3$. Первичная цепь S_3^1 формируется в результате связывания кластеров-прекурсоров $K81 + K81$ с участием атомов-спейсеров Cs (табл. 5, рис. 5). Расстояние между центрами кластеров соответствует половине диагонали элементарной ячейки. Образование микрослоя S_3^2 происходит связыванием параллельно расположенных цепей в

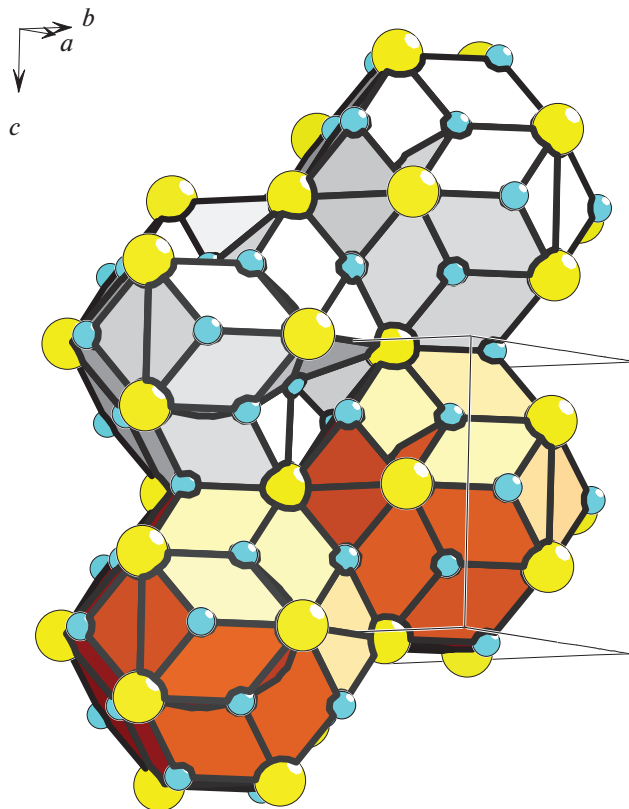


Рис. 3. $\text{Cs}_3\text{Hg}_{20}\text{-cP46}$. Тетрамер $S_3^2 = S_3^1 + S_3^1$.

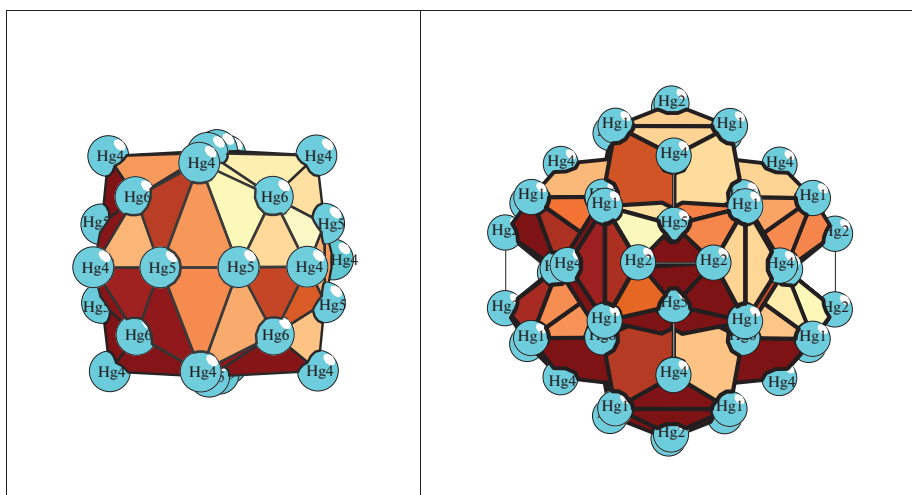


Рис. 4. $\text{Cs}_{12}\text{Hg}_{162}\text{-cI174}$. Кластер $K45 = \text{Hg}@\text{Hg}_{12}@\text{Hg}_{32}$ (слева) и $K81 = \text{Hg}@\text{Hg}_{12}@\text{Hg}_{32}@\text{Hg}_{36}$ (справа).

Таблица 4. Cs₁₂Hg₁₆₂-с/174. 23 варианта кластерного представления кристаллической структуры. Кристаллографические позиции, соответствующие центрам пустот полиэдрических кластеров обозначены ZA1 и ZA2

2 структурные единицы	
Hg7(2)(1@12@68) Cs1(0)(1)	
Hg7(2)(1@12@68) Cs1(1)(1@20)	
Hg7(0)(1) Hg4(1)(1@13)	
Hg7(1)(1@12) Hg4(1)(1@13)	
ZA1(6b)(1)(0@10) Hg7(2)(1@12@68)	
ZA2(8c)(2)(0@8@30) Hg7(0)(1)	
ZA2(8c)(2)(0@8@30) Hg7(1)(1@12)	
3 структурные единицы	
ZA1(6b)(1)(0@10) Hg7(0)(1) Hg4(1)(1@13)	
ZA1(6b)(1)(0@10) Hg7(1)(1@12) Hg4(1)(1@13)	
ZA2(8c)(2)(0@8@30) ZA1(6b)(1)(0@10) Hg7(0)(1)	
ZA2(8c)(2)(0@8@30) ZA1(6b)(1)(0@10) Hg7(1)(1@12)	
ZA2(8c)(1)(0@8) ZA1(6b)(1)(0@10) Hg7(2)(1@12@68)	
ZA2(8c)(1)(0@8) Hg7(2)(1@12@68) Cs1(0)(1)	
ZA2(8c)(1)(0@8) Hg7(1)(1@12) Cs1(1)(1@20)	
ZA2(8c)(1)(0@8) Hg7(2)(1@12@68) Cs1(1)(1@20)	
ZA2(8c)(1)(0@8) Hg7(0)(1) Hg4(1)(1@13)	
ZA2(8c)(1)(0@8) Hg7(1)(1@12) Hg4(1)(1@13)	
4 структурные единицы	
ZA2(8c)(1)(0@8) ZA1(6b)(1)(0@10) Hg7(1)(1@12) Hg4(0)(1)	
ZA2(8c)(1)(0@8) ZA1(6b)(1)(0@10) Hg7(0)(1) Hg4(1)(1@13)	
ZA2(8c)(1)(0@8) ZA1(6b)(1)(0@10) Hg7(1)(1@12) Hg4(1)(1@13)	

Таблица 5. Cs₁₂Hg₁₆₂-с/174. Атомы, формирующие кластерные структуры. Для оболочек полиэдров в скобках приведено число вершин, ребер и граней

Hg7(2)(1@12@68) Cs1(0)(1) и Hg7(2)(1@12@68) Cs1(1)(1@20)			
Кластер K81 = (1@12@68)		Атом	Кластер K21 = 1@20
1 Hg7	24 Hg1	1 Cs1	1 Cs1
12 Hg3	12 Hg2		8 Hg1
	12 Hg4		6 Hg2
	12 Hg5		4 Hg4
	8 Hg6		2 Hg5
(12, 30, 20)	(68, 228, 162)		(20, 45, 27)
Всего 81 атом		1 атом	21 атом

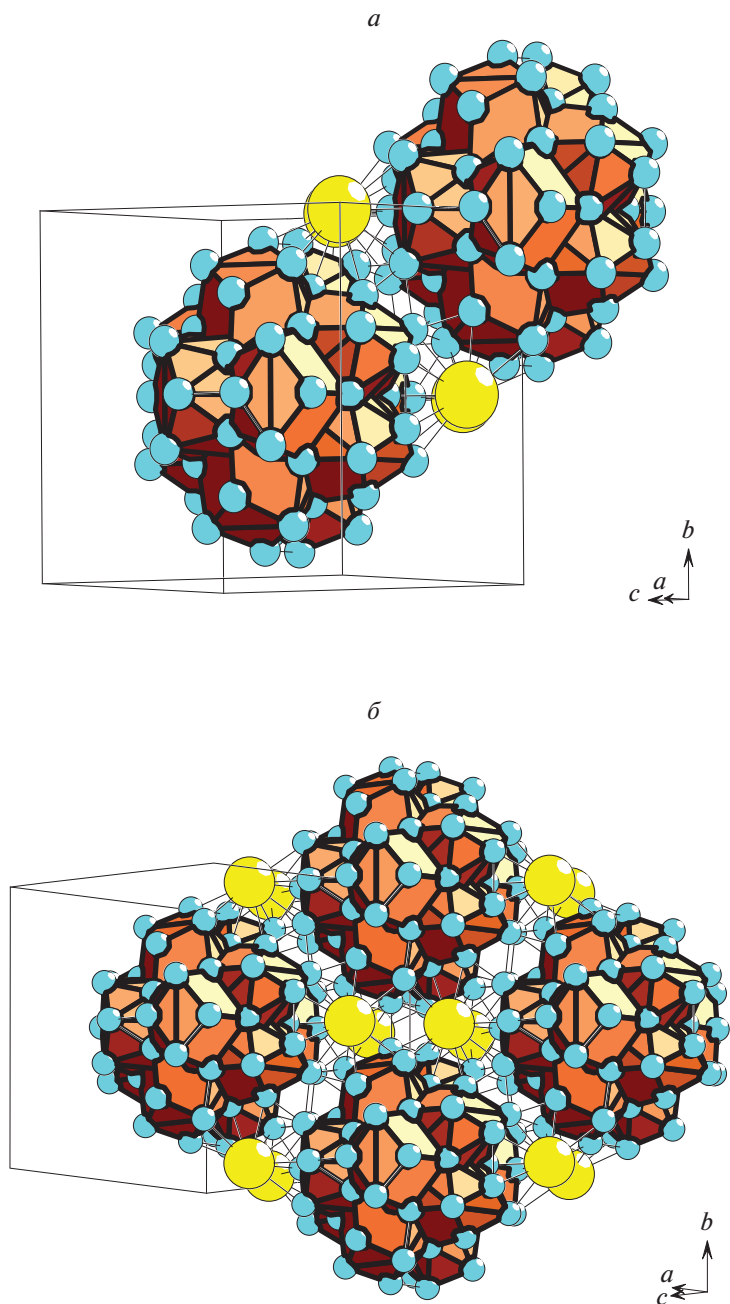


Рис. 5. $\text{Cs}_6\text{Hg}_{81}\text{-c}/174$. Стадии самосборки кристаллической структуры: димер (сверху) и тетрамер (снизу).

направлении диагонали элементарной ячейки (рис. 5). Микрокаркас структуры S_3^3 формируется при связывании микрослоев S_3^2 .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен геометрический и топологический анализ кристаллических структур интерметаллидов Cs_6Hg_{40} -*cP46*, *Pm-3n* и $Cs_{12}Hg_{162}$ -*cI174*, *Im-3*. В кристаллической структуре Cs_6Hg_{40} -*cP46* установлены икосаэдрические кластеры $K45 = Hg@Hg_{12}@Cs_{12}Hg_{20}$ с симметрией *m-3*, а для кристаллической структуры $Cs_{12}Hg_{162}$ -*cI174* определены икосаэдрические кластеры $K81 = Hg@Hg_{12}@Hg_{32}@Hg_{36}$ с симметрией *m-3* и Cs-спейсеры. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки кристаллических структур интерметаллидов из прекурсоров S_3^0 в виде: цепь $S_3^1 \rightarrow$ микрослой $S_3^2 \rightarrow$ микрокаркас S_3^3 .

Анализ самосборки кристаллической структуры выполнен при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения работ по государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, нанокластерный анализ выполнен при поддержке Российского научного фонда (РНФ № 21-73-30019).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Inorganic crystal structure database (ICSD). Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ), Germany and US National Institute of Standard and Technology (NIST), USA.
2. P. Villars, K. Cenzual. Pearson's Crystal Data-Crystal Structure Database for Inorganic Compounds (PCDIC) ASM International: Materials Park, OH.
3. Duwell E.J., Baenziger N.C. The crystal structures of K₂Hg and K₂Hg₂ // Acta Crystallogr. 1955. V. 8. P. 705–710.
4. Deiseroth H.J., Strunck A., Bauhofer W. RbHg₂ und CsHg₂, Darstellung, Kristallstruktur, elektrische Leitfähigkeit // Z. Anorg. Allg. Chem. 1988. V. 558. P. 128–136.
5. Deiseroth H.J., Strunck A. Quadratische Hg₄-Cluster in der Verbindung CsHg // Angewandte Chemie. 1987. V. 99. P. 701–702.
6. Deiseroth H.J., Strunck A., Bauhofer W. CsHg, eine ungewöhnliche Variante der Cs Cl – Struktur. Darstellung, Kristallstruktur und physikalische Eigenschaften // Z. Anorg. Allg. Chem. 1989. V. 575. P. 31–38.
7. Biehl E., Deiseroth H.J. Eine neue, geordnete Defektvariante des Ba Al₄-Strukturtyps // Z. Anorg. Allg. Chem. 1999. V. 625. P. 389–394.
8. Todorov E., Sevov S.C. Synthesis and structure of the alkali metal amalgams A₃ Hg₂₀ (A = Rb, Cs), K₃Hg₁₁, Cs₅ Hg₁₉, and A₇ Hg₃₁ (A = K, Rb) // Journal of Solid-State Chemistry. 2000. 149. P. 419–427.
9. Hoch C., Simon A. Cs₂ Hg₂₇, the mercury-richest amalgam with close relationship to the Bergman phases // Z. Anorg. Allg. Chem. 2008. V. 634. P. 853–856.
10. Шевченко В.Я., Блатов В.А., Илюшин Г.Д. Интерметаллиды Cs_2Hg_2 -*aP8*, Cs_2Hg_4 -*oI12*, $Cs_{10}Hg_{38}$ -*tI48*: Геометрический и топологический анализ, кластерные прекурсоры *K4*, *K6*, *K21* и самосборка кристаллических структур // Физика и химия стекла. 2022. В печати.
11. 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.
12. 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.
13. 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.
14. 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.
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.