
**ТЕОРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
СТРУКТУР**

УДК 548.736

ИНТЕРМЕТАЛЛИДЫ Na_kM_n ($M = \text{K}, \text{Cs}, \text{Ba}, \text{Ag}, \text{Pt}, \text{Au}, \text{Zn}, \text{Bi}, \text{Sb}$): ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ, КЛАСТЕРНЫЕ ПРЕКУРСОРЫ И САМОСБОРКА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

© 2020 г. Г. Д. Илюшин^{1,*}¹Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, Россия

*E-mail: gdilyushin@gmail.com

Поступила в редакцию 05.07.2019 г.

После доработки 05.07.2019 г.

Принята к публикации 20.07.2019 г.

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлен геометрический и топологический анализ и проведено моделирование самосборки кристаллических структур интерметаллидов, образующихся в системах $\text{Na}-M$, где $M = \text{K}, \text{Cs}, \text{Ba}, \text{Ag}, \text{Pt}, \text{Au}, \text{Zn}, \text{Bi}, \text{Sb}$. Металлокластеры-прекурсоры кристаллических структур Na_kM_n определены с использованием алгоритмов разложения структурных графов на кластерные структуры и построения базисной сетки структуры в виде графа, узлы которого соответствуют положению центров кластеров. Установлены тетраэдрические металлокластеры M_4 , образующие упаковки в кристаллических структурах $\text{Na}_3\text{Bi}-hP8$, $\text{Na}_2\text{Bi}_2-tP4$, $\text{Na}_2\text{Sb}_2-mP16$, тетраэдрические металлокластеры M_4 и спейсеры для каркасных структур $\text{Na}_2(\text{Au}_4)-cF24$ и $\text{Ba}_2(\text{Na}_4)-hP12$, октаэдрические кластеры M_6 для $\text{Na}_4\text{Au}_2-tI12$, октаэдрические M_6 и тетраэдрические M_4 металлокластеры для $\text{Na}_2(\text{Na}_4)(\text{Ba}_6)-cF96$ и $\text{Au}_2(\text{In}_4)(\text{Na}_6)-cF96$ и икосаэдрические металлокластеры M_{13} для $\text{Na}(\text{Zn}_{13})-cF116$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки кристаллических структур интерметаллидов Na_kM_n из металлокластеро-прекурсоров S_3^0 в виде: цепь $S_3^1 \rightarrow$ микрослой $S_3^2 \rightarrow$ микрокаркас S_3^3 .

DOI: 10.31857/S0023476120030121

ВВЕДЕНИЕ

В двойных системах $A-B$ с участием атомов щелочных металлов $A = \text{Li}, \text{Na}$ установлено образование 130 интерметаллидов Li_nM_k и 79 интерметаллидов Na_nM_k [1, 2]. В [3] проведен геометрический и топологический анализ интерметаллидов лития, образующихся в системах $\text{Li}-M$ с атомами d -элементов $M = \text{Ag}, \text{Au}, \text{Pt}, \text{Pd}, \text{Ir}, \text{Rh}$. Из 13 установленных структурных типов интерметаллидов лития для 11 определены тетраэдрические типы металлокластеро-прекурсоров S_3^0 и реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки кристаллических структур интерметаллидов. Алгоритм определения кластеро-прекурсоров S_3^0 реализован в комплексе программ TOPOS [4].

Кристаллизация Na -интерметаллидов установлена в 18 системах $\text{Na}-M$ [1, 2]. В пяти системах $\text{Na}-M$ с атомами $M = \text{K}, \text{Cs}, \text{Ag}, \text{Pt}, \text{Zn}$ образуется только по одному интерметаллиду, в четырех системах с атомами $M = \text{Ba}, \text{Au}, \text{Bi}, \text{Sb}$ – по два интерметаллида. Наибольшее число интерметаллидов – 6, 7 и 10 – образуется в системах с атомами $M = \text{Ge}, \text{Hg}, \text{Sn}$.

В настоящей работе осуществлен геометрический и топологический анализ и проведено моделирование самосборки кристаллических структур интерметаллидов, образующихся в системах $\text{Na}-M$, где $M = \text{K}, \text{Cs}, \text{Ba}, \text{Ag}, \text{Pt}, \text{Au}, \text{Zn}, \text{Bi}, \text{Sb}$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки кристаллических структур интерметаллидов из металлокластеро-прекурсоров S_3^0 в виде: цепь $S_3^1 \rightarrow$ микрослой $S_3^2 \rightarrow$ микрокаркас S_3^3 .

Работа продолжает исследования [3, 5–9] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супраполиэдрическом уровне и геометрического и топологического анализа кристаллических структур с применением компьютерных методов (пакета программ ToposPro [4]).

МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ ToposPro, позволяющего проводить исследование кристаллической структуры в автоматиче-

Таблица 1. Кристаллохимические и топологические данные структурных типов Na-интерметаллидов

Структурный тип	Группа симметрии, последовательность Уайкова	Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
				N_1	N_2	N_3	N_4	N_5
Na ₃ Bi- <i>hP8</i>	<i>P6₃/mmc</i> (194), <i>fc</i> <i>b</i>	Na1	6Na + 3Bi	9	33	92	155	237
		Na2	7Na + 4Bi	11	38	89	158	242
		Bi1	11Na	11	41	86	155	245
Na ₂ Bi ₂ - <i>tP4</i>	<i>P4/mmm</i> (123), <i>eca</i>	Na1	4Na + 8Bi	12	42	92	162	252
		Bi1	8Na + 4Bi	12	42	92	162	252
		Bi2	8Na + 4Bi	12	42	92	162	252
Na ₂ Sb ₂ - <i>mP16</i>	<i>P2₁/c</i> (14), <i>e4</i>	Na1	4Na + 6Sb	10	37	81	150	236
		Na2	5Na + 6Sb	11	37	83	148	233
		Sb1	6Na + 2Sb	8	32	78	41	226
		Sb2	6Na + 2Sb	8	33	79	40	230
Na ₄ Au ₂ - <i>tI12</i>	<i>I4/mcm</i> (140), <i>ha</i>	Na1	7Na + 4Au	11	42	95	170	263
		Au1	8Na + 2Au	10	38	86	158	258
Na ₂ (Na ₄)(Ba ₆)- <i>cF96</i>	<i>Fd$\bar{3}m$</i> (227), <i>fed</i>	Na1	6Na + 6Ba	12	43	111	196	328
		Na2	6Na + 6Ba	12	44	114	210	330
		Ba1	6Na + 8Ba	14	53	115	218	352
Au ₂ (In ₄)(Na ₆)- <i>cF96</i>	<i>Fd$\bar{3}m$</i> (227), <i>fed</i>	In1	6Na + 6Ba	12	43	111	196	328
		Au1	6Na + 6Ba	12	44	114	210	330
		Na1	6Na + 8Ba	14	53	115	218	352
Ba ₂ Na ₄ - <i>hP12</i>	<i>P6₃/mmc</i> (194), <i>hfa</i>	Ba1	4Ba + 12Na	16	52	125	232	358
		Na1	6Ba + 6Na	12	50	120	230	374
		Na2	6Ba + 6Na	12	50	110	212	348
Na ₂ Au ₄ - <i>cF24</i>	<i>Fd$\bar{3}m$</i> (227), <i>da</i>	Na1	12Ag + 4Na	16	52	130	244	380
		Au1	6Ag + 6Na	12	50	110	216	356
NaZn ₁₃ - <i>cF112</i>	<i>Fm$\bar{3}c$</i> (226), <i>iba</i>	Na1	24Zn	24	62	132	254	384
		Zn1	12Zn	12	32	126	188	330
		Zn2	2Na + 10Zn	12	55	129	239	376

ском режиме, используя представление структур в виде “свернутых графов” (фактор-графов).

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 из 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 высокосиммет-

ричные позиции; набор нанокластеров-прекурсоров и кластеров-спейсеров включает в себя все атомы структуры.

Кристаллохимические и топологические данные для Na-интерметаллидов представлены в табл. 1. Параметры и объемы элементарных ячеек представителей кристаллохимических семейств Na-интерметаллидов приведены в табл. 2–7. На рис. 1 даны длины связей атомов в кластерах-прекурсорах кристаллических структур металлов, на рис. 2 и 3 – в кластерах-прекурсорах кристаллических структур интерметаллидов.

СИММЕТРИЙНЫЙ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ
КОД (ПРОГРАММА) САМОСБОРКИ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР
ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ

При моделировании кристаллической структуры интерметаллидов определяется иерархическая последовательность ее самосборки в кристаллографическом пространстве XYZ , т.е. восстанавливается симметричный и топологический код формирования макроструктуры в виде последовательности значимых элементарных событий, характеризующих самую короткую (быструю) программу кластерной самосборки из тетраэдрических металлокластеров S_3^0 в виде: первичная цепь $S_3^1 \rightarrow$ микрослой $S_3^2 \rightarrow$ микрокаркас S_3^3 .

Структурный тип Na_3Bi - $hP8$ [10]. Кристаллохимическое семейство состоит из 16 интерметаллидов [1, 2]. К семейству щелочных интерметаллидов относятся восемь соединений (табл. 2). В локальном окружении атомов Na1 и Na2 находятся 9 и 11 атомов, атома Bi – 11 атомов (табл. 1). Металлокластер-прекурсор M_4 представляет собой тетраэдр Na_3Bi с симметрией m (рис. 2). Длины связей Na–Bi и Na–Na равны 3.152 и 3.542 и 3.231 и 3.542 Å соответственно. Для кластеров M_4 установлена базовая 2D-сетка S_3^6 .

Первичная цепь S_3^1 формируется в результате связывания металлокластеров Na_3Bi с индексом связанности $P_c = 4$ (рис. 4). Расстояние между тетраэдрами вдоль оси X определяет модуль вектора трансляции $a = 5.459$ Å. Слой S_3^2 образуется в процессе связывания параллельно расположенных цепей со сдвигом. Расстояние между тетраэдрами вдоль оси Y определяет модуль вектора трансляции $b = 5.4598$ Å. Каркас структуры S_3^3 формиру-

Таблица 2. Кристаллохимическое семейство Na_3Bi - $hP8$, пр. гр. $P6_3/mmc$

Интерметаллид [1, 2]	$a, b, c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
Li_3Sb	4.710, 4.710, 8.326	160.0
Na_3Sb	5.365, 5.365, 9.515	237.2
Na_3Bi	5.459, 5.459, 9.675	249.7
Na_3Hg	5.433, 5.433, 9.795	250.4
K_3Sb	6.037, 6.037, 10.717	338.3
K_3Bi	6.190, 6.190, 10.955	363.5
Rb_3Sb	6.320, 6.320, 11.190	387.1
Rb_3Bi	6.490, 6.490, 11.490	419.1

Таблица 3. Кристаллохимическое семейство Na_2Bi_2 - $tP4$, пр. гр. $P4/mmm$

Интерметаллид [1, 2]	$a, b, c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
Li_2Bi_2	4.753, 4.753, 4.247	95.9
Na_2Bi_2	4.910, 4.910, 4.809	115.9

Таблица 4. Кристаллохимическое семейство Na_2Sb_2 - $mP16$, пр. гр. $P2_1/c$

Интерметаллид [1, 2]	$a, b, c, \text{Å}$ β , град	$V, \text{Å}^3$
Na_2Sb_2	6.800, 6.340, 12.480 117.60	476.8
Na_2As_2	6.242, 5.849, 11.550 117.10	375.4

ется при упаковке слоев со сдвигом. Расстояние между слоями в направлении оси Z соответствует длине вектора трансляции $c = 9.657$ Å.

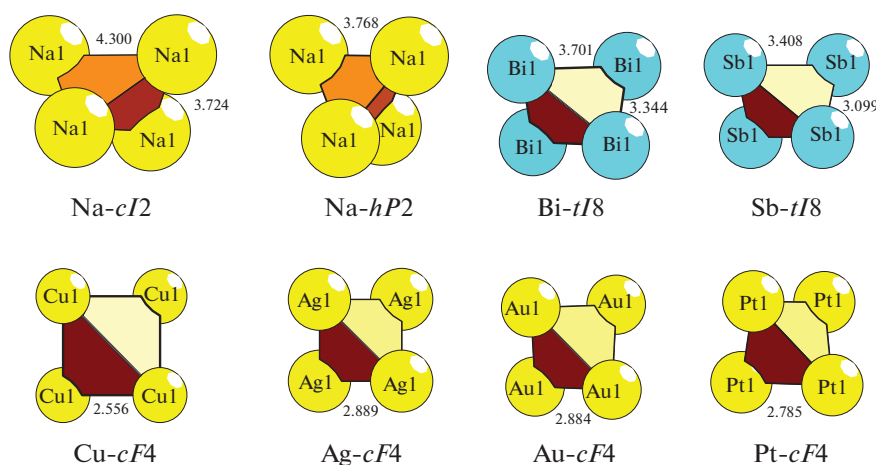
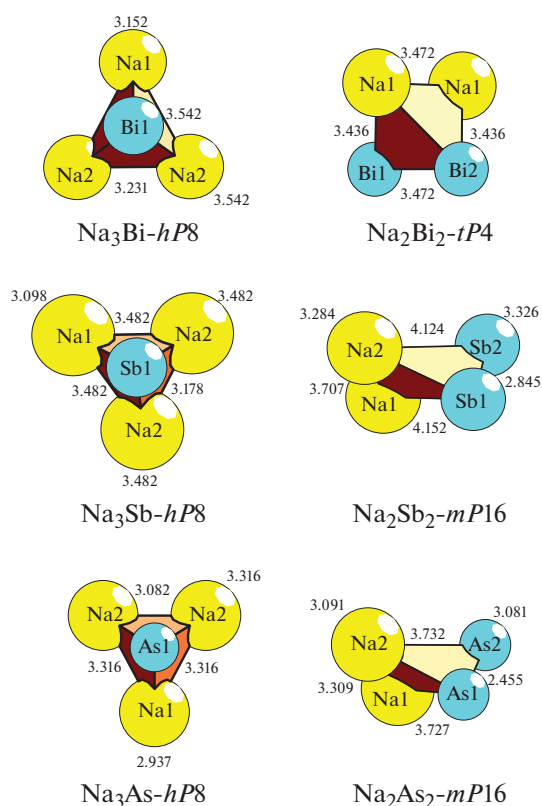


Рис. 1. Тетраэдрические кластеры в кристаллических структурах металлов. Здесь и далее цифры обозначают длины связей (Å).

Таблица 5. Кристаллохимическое семейство $\text{Na}_2(\text{Au}_4)\text{-}mP16$, пр. гр. $Fd\bar{3}m$

Интерметаллид [1, 2]	$a, b, c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
$\text{Na}_2(\text{Pt}_4)$	7.480, 7.480, 7.480	418.5
$\text{Na}_2(\text{Au}_4)$	7.812, 7.812, 7.812	476.7
$\text{Na}_2(\text{Ag}_4)$	7.923, 7.923, 7.923	497.4

Структурный тип $\text{Na}_2\text{Bi}_2\text{-}tP4$ [11]. Кристаллохимическое семейство включает 47 интерметаллидов. К семейству щелочных интерметаллидов относятся два соединения (табл. 3). Металлокластер-прекурсор представляет собой тетраэдр Na_2Bi_2 (рис. 2) с симметрией m . Длины связей $\text{Na}-\text{Bi} = 3.436$, $\text{Na}-\text{Na} = 3.472$ и $\text{Bi}-\text{Bi} = 3.436 \text{ Å}$. Для металлокластеров установлена базовая 2D-сетка 4^4 . Первичная цепь S_3^1 формируется в результате связывания ($P_c = 4$) тетраэдрических кластеров-прекурсоров Na_2Bi_2 . Расстояние между центрами кластеров определяет длину вектора трансляции b (рис. 4). Слой S_3^2 образуется вдоль оси Y в результате связывания параллельно рас-

**Рис. 2.** Металлокластеры-прекурсоры кристаллических структур Na_2M -интерметаллидов с $M = \text{Bi}, \text{Sb}, \text{As}$.**Таблица 6.** Кристаллохимическое семейство $\text{Ba}_2(\text{Na}_4)\text{-}hP12$, пр. гр. $P6_3/mmc$

Интерметаллид [1, 2]	$a, b, c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
$\text{Ba}_2(\text{Na}_4)$	7.393, 7.393, 11.999	568.0
$\text{K}_2(\text{Na}_4)$	7.480, 7.480, 12.270	594.5
$\text{Cs}_2(\text{Na}_4)$	7.861, 7.861, 13.062	699.0

Таблица 7. Кристаллохимическое семейство $\text{Na}_2(\text{Na}_4)(\text{Ba}_6)\text{-}cF96$, пр. гр. $Fm\bar{3}c$

Интерметаллид [1, 2]	$a, b, c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
$\text{Na}_2(\text{Na}_4)(\text{Ba}_6)$	17.027, 17.027, 17.027	4936
$\text{Au}_2(\text{In}_4)(\text{Na}_6)$	13.533, 13.533, 13.533	2478

положенных цепей с индексом $P_c = 10$. Каркас структуры S_3^3 формируется при упаковке слоев S_3^2 . Расстояние между осями первичных цепей из соседних слоев соответствует периоду трансляции a .

Структурный тип $\text{Na}_2\text{Sb}_2\text{-}mP16$. К семейству Na -интерметаллидов относятся Na_2Sb_2 [12], Na_2As_2 [13] (табл. 4). Металлокластер-прекурсор представляет собой тетраэдр Na_2Sb_2 (рис. 2). Длины связей $\text{Na}-\text{Sb}$ равны 4.124 и 4.152 Å , $\text{Na}-\text{Na} = 3.707$ и 3.542 Å , $\text{Sb}-\text{Sb} = 2.485 \text{ Å}$. Для кластеров M_4 установлена базовая 2D-сетка 4^4 . Первичная цепь S_3^1 формируется в результате связывания ($P_c = 8$) тетраэдрических металлокластеров Na_2As_2 осью симметрии 2_1 (рис. 4). Удвоенное расстояние между тетраэдрами в направлении оси Y определяет период трансляции $b = 6.340 \text{ Å}$. Образование слоя S_3^2 происходит в ходе связывания параллельно расположенных цепей (рис. 4). Удвоенное расстояние между осями первичных цепей вдоль оси Z равно длине вектора трансляции $c = 12.480 \text{ Å}$.

Каркас структуры S_3^3 формируется при связывании слоев. Расстояние между слоями в направлении оси X соответствует модулю вектора трансляции $a = 6.800 \text{ Å}$.

Структурный тип $\text{Na}_2(\text{Au}_4)\text{-}cF24$ [14]. Число представителей в кристаллохимическом семействе 224. К Na -интерметаллидам относятся $\text{Na}_2(\text{Au}_4)$, $\text{Na}_2(\text{Ag}_4)$, $\text{Na}_2(\text{Pt}_4)$ (табл. 5). Металлокластер-прекурсор представляет собой тетраэдр с симметрией $\bar{4}3m$ (рис. 3). В тетраэдрах длины связей $\text{Pt}-\text{Pt} = 2.645$, $\text{Au}-\text{Au} = 2.762$, $\text{Ag}-\text{Ag} = 2.801 \text{ Å}$ соответствуют длинам связей атомов в кристаллических структурах $\text{Pt}-cF4$, $\text{Ag}-cF4$, $\text{Au}-cF4$ (рис. 1). Для металлокластеров установлена базовая 2D-сетка 4^4 . Самосборка первичных цепей S_3^1

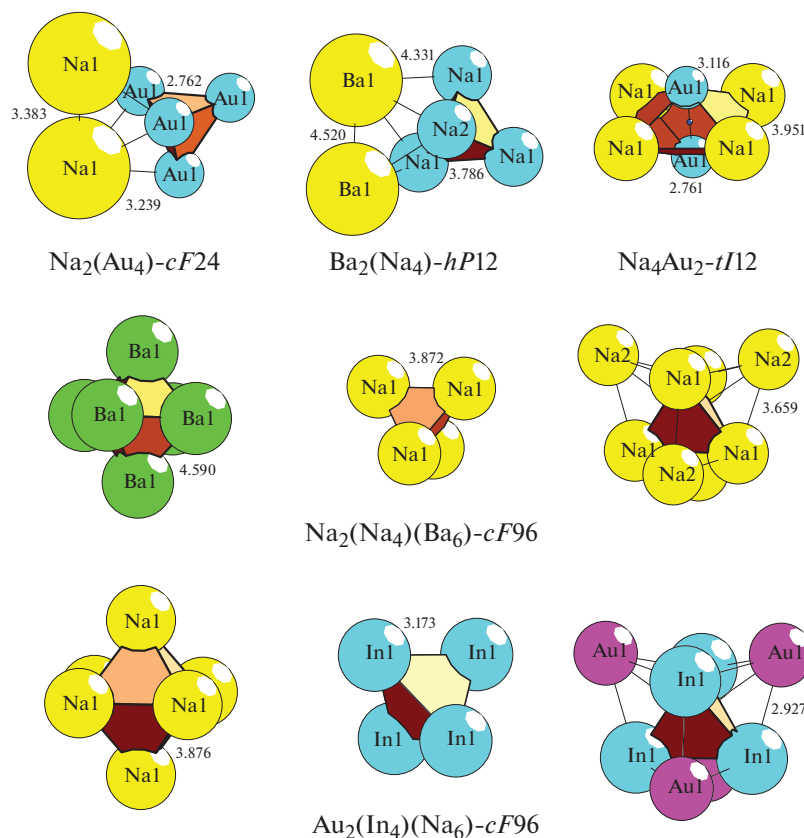


Рис. 3. Металлокластеры-прекурсоры кристаллических структур Na,*M*-интерметаллидов с *M* = Ba, In, Au.

из кластеров Au_4 происходит в направлении диагонали в плоскости XY (рис. 5). Образование слоя S_3^2 происходит при связывании параллельно расположенных первичных цепей в плоскости XY . Расстояния между центрами тетраэдров Au_4 из соседних цепей в направлении осей X и Y соответствуют периодам трансляции $a = b = 7.812 \text{ \AA}$. Каркас структуры S_3^3 формируется при связывании (со сдвигом) слоев S_3^2 . Расстояние между слоями S_3^2 определяет половину периода трансляции $c = 7.812 \text{ \AA}$.

Структурный тип $\text{Ba}_2(\text{Na}_4)\text{-hP12}$ [15]. Число представителей в кристаллохимическом семействе 59. К Na-интерметаллидам относятся $\text{Ba}_2(\text{Na}_4)$, $\text{K}_2(\text{Na}_4)$, $\text{Cs}_2(\text{Na}_4)$ (табл. 6). Металлокластер-прекурсор представляет собой тетраэдр Na_4 с симметрией $3m$ (рис. 2). Длины связей Na–Na в тетраэдрах равны 3.712 и 3.786, 3.747 и 3.754, 3.930 и 3.976 \AA для Ba-, K-, Cs-соединений соответственно. Для металлокластеров установлена базовая 2D-сетка 3^6 . Самосборка первичных цепей S_3^1 происходит параллельно оси X в плоскости XY

(рис. 5). Расстояние между кластерами Na_4 соответствует длине вектора трансляции $a = 7.393 \text{ \AA}$. Слой S_3^2 образуется при связывании (со сдвигом) цепей S_3^1 параллельно оси Y . Расстояние между осями первичных цепей (проходящими через центры тяжести кластеров Na_4) равно модулю вектора трансляции $b = 7.393 \text{ \AA}$. Каркас структуры S_3^3 формируется при связывании слоев со сдвигом. Расстояние между слоями определяет половину периода трансляции $c = 11.999 \text{ \AA}$.

Структурный тип $\text{Na}_4\text{Au}_2\text{-tI12}$ [14]. Число представителей в кристаллохимическом семействе 49. К щелочным соединениям относится только интерметаллид Na_4Au_2 . Металлокластер-прекурсор представляет собой октаэдр Na_4Au_2 (рис. 3) с симметрией $4/m$. Расстояние Au–Au 2.761 \AA соответствует длинам связей в Au-cF4 (рис. 1). Для металлокластеров Na_4Au_2 установлена базовая 2D-сетка 3^6 . Самосборка первичных цепей S_3^1 происходит в результате связывания кластеров Na_4Au_2 с индексом $P_c = 5$ (рис. 4). Слой S_3^2 образуется при связывании параллельно рас-

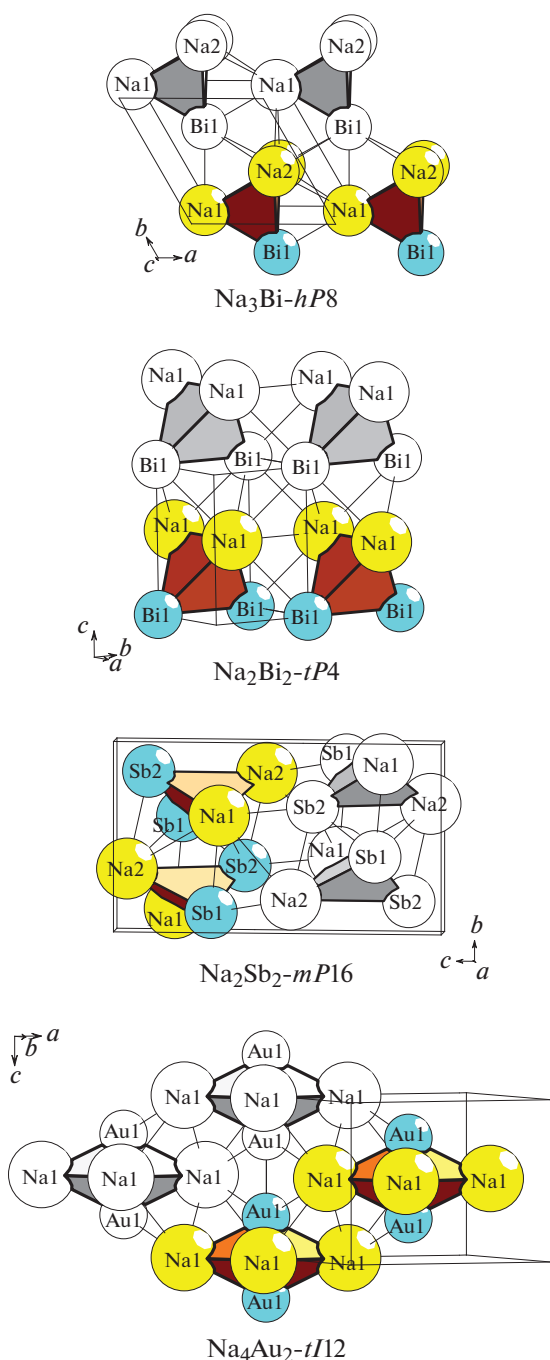


Рис. 4. Слои S_3^2 из кластеров-прекурсоров кристаллических структур Na-интерметаллидов. Здесь и далее разным цветом выделены эквивалентные структурные единицы.

положенных цепей со сдвигом. Расстояние между центрами кластеров Na_4Au_2 равно модулю вектора трансляции $c = 5.522 \text{ \AA}$. Каркас структуры S_3^3 формируется при упаковке (со сдвигом) слоев S_3^2 . Расстояние между первичными цепями вдоль осей X и Y соответствует периодам трансляций $a = b = 7.415 \text{ \AA}$.

Структурный тип $\text{Na}_2(\text{Na}_4)(\text{Ba}_6)$ -cF96. К семейству Na-интерметаллидов относятся $\text{Na}_2(\text{Na}_4)(\text{Ba}_6)$ [16] и $\text{Au}_2(\text{In}_4)(\text{Na}_6)$ [17] (табл. 7). Центры октаэдрических Ba_6 и Na_6 и тетраэдрических Na_4 и In_4 кластеров (рис. 3) находятся в позициях $8a$ и $8b$ с симметрией $m\bar{3}m$ соответственно. В кластерах Na_6 и Na_4 все длины связей Na–Na равны 3.87 \AA . Первичная цепь S_3^1 кристаллической структуры $\text{Na}_2(\text{Na}_4)(\text{Ba}_6)$ формируется в результате связывания кластеров Na_4 и Ba_6 с участием атомов-спейсеров Na (рис. 5). Первичная цепь S_3^1 $\text{Au}_2(\text{In}_4)(\text{Na}_6)$ образуется при связывании кластеров In_4 и Na_6 и атомов-спейсеров Au, слой S_3^2 – при связывании (со сдвигом) первичных цепей. Каркас структуры S_3^3 формируется в процессе связывания слоев S_3^2 .

Структурный тип NaZn_{13} -cF116 [18]. Общее число представителей в кристаллохимическом семействе 46. Установлено, что интерметаллиды AZn_{13} образуются с атомами $A = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Ba}$ [1, 2]. Параметры кубической ячейки NaZn_{13} : $a = 12.273 \text{ \AA}$, $V = 1848 \text{ \AA}^3$. Кластер-прекурсор представляет собой икосаэдр из 12 атомов Zn с атомом Zn в центре, который занимает позицию $8b$ с наивысшей возможной кристаллографической симметрией $m\bar{3}$. Для металлокластеров M_{13} установлена 2D-сетка 4^4 . Самосборка первичных цепей S_3^1 происходит в направлении оси X (рис. 5). Расстояние между центрами кластеров Zn_{13} соответствует длине вектора трансляции $a = 12.273 \text{ \AA}$. При связывании икосаэдров $P_c = 8$. Микрослой S_3^2 образуется при связывании параллельно расположенных коротких цепей S_3^1 , микрокаркас S_3^3 – при упаковке микрослоев. Атом Na находится в центре полости и образует 24 связи Na–Zn (по три с каждым из восьми икосаэдров).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен геометрический и топологический анализ кристаллических структур интерметаллидов, образующихся в системах Na– M с атомами $M = \text{K}, \text{Cs}, \text{Ba}, \text{Ag}, \text{Pt}, \text{Au}, \text{Zn}, \text{Bi}, \text{Sb}$. С использованием алгоритмов разложения структурных графов на кластерные структуры для интерметаллидов определены металлокластеры-прекурсоры в виде тетраэдров, октаэдров и икосаэдров. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки кристаллических структур из металлокластеров-прекурсоров S_3^0 в виде: первичная цепь $S_3^1 \rightarrow$ микрослой $S_3^2 \rightarrow$ микрокаркас S_3^3 .

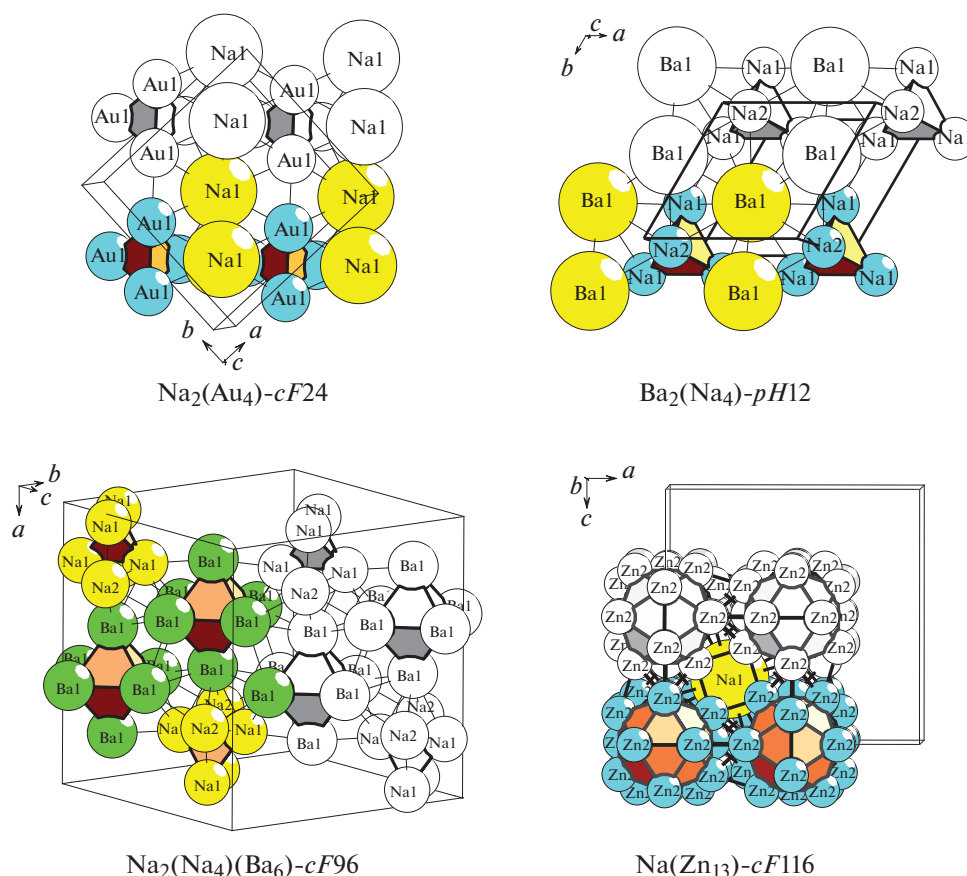


Рис. 5. Слои S_3^2 из кластеров-прекурсоров и спейсеров в каркасных структурах Na-интерметаллидов.

Автор выражает благодарность В.А. Блатову за предоставление для расчетов пакета программ ToposPro.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00636).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Villars P., Cenzual K. Pearson's Crystal Data-Crystal Structure Database for Inorganic Compounds (PCDIC) ASM International: Materials Park, OH.
- Inorganic Crystal Structure Database (ICSD). Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ), Germany and US National Institute of Standard and Technology (NIST), USA.
- Ilyushin G.D. // Crystallography Reports. 2020. V. 65. № 2. P. 202.
- Blatov V.A., Shevchenko A.P., Proserpio D.M. // Cryst. Growth Des. 2014. V. 14. P. 3576.
- Pankova A., Blatov V., Ilyushin G., Proserpio D. // Inorg. Chem. 2013. V. 52. P. 13094.
- Blatov V.A., Ilyushin G.D., Proserpio D. M. // Chem. Mater. 2013. V. 25. P. 412.
- Ilyushin G.D. // Crystallography Reports. 2017. V. 62. 5. P. 670.
- Ilyushin G.D. // Crystallography Reports. 2018. V. 63. 4. P. 543.
- Ковальчук М.В., Алексеева О.А., Благов А.Е., Илюшин Г.Д. и др. // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 1. С. 10.
- Brauer G., Zintl E. // Z. Phys. Chem. B. 1937. V. 37. P. 323.
- Zintl E., Dullenkopf W. // Z. Phys. Chem. B. 1932. V. 16. P. 183.
- Cromer D.T. // Acta Cryst. 1959. V. 12. P. 41.
- Burtzloff S., Holynska M., Dehnen S. // Z. Anorg. Allg. Chem. 2010. B. 636. S. 1691.
- Haucke W. // Naturwissenschaften. 1937. B. 25. S. 61.
- Snyder G.J., Simon A. // Z. Naturforschung B: Chem. Sci. 1994. B. 49. S. 189.
- Smetana V. // Dissertation Universitaet Freiburg/Breisgau. 2009.
- Li B., Corbett J.D. // Inorgan. Chem. 2005. V. 44. P. 6515.
- Wendorff M., Roehr C. // J. Alloys Compd. 2006. V. 421. P. 24.