

УДК 548

**КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ
СИСТЕМ: КЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ K3, K4, K6
ДЛЯ САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР
 $\text{Y}_8\text{Rh}_{12}\text{Sn}_{20}\text{-oS40}$, $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$, $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$**

© 2025 В. Я. Шевченко¹, Г. Д. Илюшин², *

¹ Филиал НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ–ИХС,
199034, Россия, Санкт-Петербург, наб. Макарова, 2

² Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ “Курчатовский институт”,
119333, Россия, Москва, Ленинский пр., 59

*e-mail: gdilyushin@gmail.com

Поступила в редакцию 11.10.2024

После доработки 03.02.2025

Принята к публикации 27.02.2025

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлены комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур $\text{Y}_8\text{Rh}_{12}\text{Sn}_{20}\text{-oS40}$ ($a = 4.387 \text{ \AA}$, $b = 26.212 \text{ \AA}$, $c = 7.155 \text{ \AA}$, $V = 822.77 \text{ \AA}^3$), $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$ ($a = 4.179 \text{ \AA}$, $b = 18.368 \text{ \AA}$, $c = 15.050 \text{ \AA}$, $V = 1155.24 \text{ \AA}^3$), $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$ ($a = 4.485 \text{ \AA}$, $b = 29.052 \text{ \AA}$, $c = 13.687 \text{ \AA}$, $V = 1783.63 \text{ \AA}^3$) с пространственной группой $Cmc2_1(36)$. Для $\text{Y}_8\text{Rh}_{12}\text{Sn}_{20}\text{-oS40}$ установлены 18 вариантов выделения кластерных структур с числом кластеров $N = 1$ (1 вариант), $N = 2$ (11 вариантов), $N = 3$ (6 вариантов). Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки кластеров-прекурсоров в виде сдвоенных тетраэдров $K6 = 0@6(\text{YSn}_3\text{Rh}_2)$ и тетраэдров $K4 = 0@4(\text{YSn}_2\text{Rh})$. Для $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$ установлены 66 вариантов выделения кластерных структур с числом кластеров $N = 1$ (1 вариант), $N = 2$ (25 вариантов), $N = 3$ (20 вариантов) и $N = 4$ (20 вариантов). Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки трех атомных кластеров-прекурсоров $K3(D1) = 0@3(\text{Lu Ge}_2)$, $K3(D2) = 0@3(\text{Lu Zn Ge})$, $K3(D3) = 0@3(\text{Lu Zn Ge})$, $K3(D4) = 0@3(\text{Lu Zn Ge})$, $K3(D5) = 0@3(\text{GeZn}_2)$. Для $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$ установлены 129 вариантов выделения кластерных структур с числом кластеров $N = 2$ (36 вариантов) и $N = 3$ (103 варианта). Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки кластеров-прекурсоров: пентагональных пирамид $K6 = 0@6(\text{BaIn}_5)$, тетраэдров $K4a = 0@4(\text{BaRhIn}_2)$ и тетраэдров $K4b = 0@4(\text{Rh}_2\text{In}_2)$, колец $K3 = 0@4(\text{RhIn}_2)$ и атомов-спейсеров In. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки кристаллической структур $\text{Y}_8\text{Rh}_{12}\text{Sn}_{20}\text{-oS40}$, $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$, $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$ из кластеров-прекурсоров $K3$, $K4$, $K6$ в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Ключевые слова: $\text{Y}_8\text{Rh}_{12}\text{Sn}_{20}\text{-oS40}$, $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$, $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$, самосборка кристаллической структуры, кластерные прекурсоры, кольца $K3$, тетраэдры $K4$, сдвоенные тетраэдры $K6$, пентагональные пирамиды $K6$

DOI: 10.31857/S0132665125010012, EDN: DZXOIX

ВВЕДЕНИЕ

В базах данных кристаллических структур неорганических соединений [1–3] большее число интерметаллидов $A_nB_nC_n$ образуется с участием атомов щелочно-земельных металлов $A = \text{Ca, Sr, Ba}$, лантаноидов Ln , Zr и Hf и характеризуются пространственной группой $Cmc2_1(36)$. В табл. 1 приведены кристаллохимические данные для соединений $A_nB_nC_n$ с атомами, занимающими только частные $4a$ -позиции в плоскости m [1–3].

В выделенном семействе интерметаллидов $A_nB_nC_n$ все кристаллические структуры характеризуются небольшими значениями векторов трансляций от 3.587 Å до 4.455 Å, которые соответствуют толщине двухслойных пакетов.

Установлено четыре кристаллохимических семейства $A_nB_nC_n$, образующихся с участием больших атомов $A = \text{Ca, Sr, Ba}$, атомов лантаноидов Ln , Zr и Hf и четыре интерметаллида, не имеющих кристаллохимических аналогов (см. табл. 1).

Структурный тип $\text{Eu}_2\text{ZnP}_2\text{-oS20}$ [4–6] с пятью кристаллографически независимыми атомами a^5 , лежащими в плоскости m , сохраняется при замещении атомов P на As и Sb (см. табл. 1). Структурный тип $\text{Y}_8\text{Rh}_{12}\text{Sn}_{20}\text{-oS40}$ [7] (рис. 1.) с 10 атомами a^{10} сохраняется при замещении атомов Sn на In и Bi, и атомов Rh на Pt и Au. Структурный тип $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$ [8] с 15 атомами a^{15} сохраняется при замещении атома Zn на Mg. Интерметаллиды $\text{HfGeTe}_4\text{-a6}$ [9] и $\text{ZrGeTe}_4\text{-a6}$ [10] образуют кристаллохимическое семейство.

Кристаллические структуры $\text{Er}_8(\text{B}_3\text{Si}_5)\text{Si}_{12}\text{-a7}$ [11], $\text{Yb}_2\text{Ga}_4\text{Ge}_6\text{-a12}$ [12], $\text{Ce}_5\text{Rh}_5\text{Al}_6\text{-a16}$ [13], $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$ [14] не имеют кристаллохимических аналогов.

Для всех соединений $A_nB_nC_n$ (см. табл. 1) тип каркас-образующих кластеров-прекурсоров, образующих упаковки, не известен.

В нашей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллических структур $\text{Y}_8\text{Rh}_{12}\text{Sn}_{20}\text{-oS40}$, $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$, $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$. Установлены кластеры-прекурсоры в виде пентагональной пирамиды K_6 , сдвоенных тетраэдров K_6 , тетраэдров K_4 , колец K_3 , участвующие в образовании супракластеров. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D-структур из супракластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Работа продолжает исследования [15–19] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супраполиэдрическом уровне и геометрического и топологического анализа кристаллических структур с применением компьютерных методов [3].

МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ *TorosPro* [3], позволяющего проводить многоцелевое исследование кристаллической структуры в автоматическом режиме, используя представление структур в виде 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 -й координационной сфере данного атома. В табл. 2–4 приведено локальное окружение атомов и значения координационных последовательностей атомов в кристаллических структурах интерметаллидов $\text{Y}_8\text{Rh}_{12}\text{Sn}_{20}\text{-oS40}$, $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$, $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$.

Таблица 1. Кристаллохимические данные тройных соединений $A_nB_nC_n$ с пространственной группой $Cmc2_1$

Соединение	Последовательность Вайкоффа	Индекс Пирсона	Параметры элементарной ячейки, Å	V, Å ³
Eu ₂ Zn P ₂ [4]	a^5	20	4.178,15.925,7.301	485.7
Ca ₂ Cd P ₂ [5]	a^5	20	4.207,16.120,7.064	479.0
Eu ₂ Cd P ₂	a^5	20	4.298,16.350,7.359	517.0
Sr ₂ Cd P ₂	a^5	20	4.326,16.506,7.469	533.3
Ba ₂ Cd P ₂	a^5	20	4.473,17.015,7.924	603.1
Ca ₂ CdAs ₂ [6]	a^5	20	4.316,16.506,7.142	508.8
Eu ₂ CdAs ₂	a^5	20	4.442,16.847,7.498	561.1
Sr ₂ CdAs ₂	a^5	20	4.446,16.904,7.589	570.3
Ba ₂ CdAs ₂	a^5	20	4.592,17.405,8.053	643.6
Yb ₂ CdSb ₂	a^5	20	4.618,17.418,7.178	577.4
Y ₂ Rh ₃ Sn ₅ [7]	a^{10}	40	4.387,26.212,7.155	822.8
Sm ₂ Rh ₃ Sn ₅	a^{10}	40	4.445,26.362,7.183	841.6
Ce ₂ Rh ₃ Sn ₅	a^{10}	40	4.499,26.484,7.216	859.8
Nd ₂ Pt ₃ Sn ₅	a^{10}	40	4.515,26.140,7.291	860.5
Sm ₂ Pt ₃ Sn ₅	a^{10}	40	4.498,26.298,7.293	862.6
Eu ₂ Pt ₃ Sn ₅	a^{10}	40	4.533,26.629,7.318	883.4
Yb ₂ Au ₃ In ₅	a^{10}	40	4.535,26.824,7.464	908.0
Ce ₂ Pt ₃ In ₅	a^{10}	40	4.602,26.920,7.363	912.0
Ce ₂ Rh ₃ Bi ₅	a^{10}	40	4.598,27.100,7.431	925.9
Lu ₄ Zn ₅ Ge ₆ [8]	a^{15}	60	4.179,18.368,15.050	1155.2
Tm ₄ Zn ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.190,18.410,15.105	1165.2
Er ₄ Zn ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.197,18.428,15.133	1170.4
Ho ₄ Zn ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.215,18.486,15.199	1184.2
Dy ₄ Zn ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.226,18.554,15.252	1196.0
Y ₄ Zn ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.228,18.563,15.271	1198.6
Tb ₄ Zn ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.233,18.576,15.275	1201.1
Gd ₄ Zn ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.249,18.663,15.423	1223.0
Pr ₄ Mg ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.459,19.899,15.905	1411.2
Ce ₄ Mg ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.477,19.966,15.991	1429.5
La ₄ Mg ₅ Ge ₆	a^{15}	60	4.503,20.085,16.207	1465.8
HfGeTe ₄ [9]	a^6	24	3.980,15.953,10.973	696.6
ZrGeTe ₄ [10]	a^6	24	3.979,15.930,10.996	697.0
Er ₈ (B ₃ Si ₅) Si ₁₂ [11]	a^7	28	4.013,28.867,3.841	445.0
Yb ₂ Ga ₄ Ge ₆ [12]	a^{12}	48	4.170,23.254,10.730	1040.4
Ce ₅ Rh ₅ Al ₆ [13]	a^{16}	64	4.262,41.906,7.149	1276.8
Ba ₂ Ir ₄ In ₁₃ [14]	a^{19}	76	4.486,29.052,13.687	1783.6

Таблица 2. $Y_8Rh_{12}Sn_{20}-oS40$. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение атома	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Y1	4Rh + 10Sn	14	44	102	181	297
Y2	5Rh + 8Sn	13		106	187	290
Rh1	4Y + 5Sn	9	43	101	177	283
Rh2	2Y + 7Sn		40	96	174	279
Rh3	3Y + 6Sn		42	99	171	286
Sn1	3Y + 4Rh + 7Sn	14	48	100	188	291
Sn2	3Y + 4Rh + 5Sn	12	42	102	183	288
Sn3	3Y + 3Rh + 5Sn		49	103	191	298
Sn4	5Y + 4Rh + 3Sn		44		180	292
Sn5	3Y + 3Rh + 6Sn		46	102	188	290

Таблица 3. $Lu_{16}Zn_{20}Ge_{24}-oS60$. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение атома	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Zn1	2Zn + 4Ge + 5Lu	11	45	96	187	267
Zn2	2Zn + 4Ge + 4Lu	10	41		179	282
Zn3	2Zn + 4Ge + 5Lu	11	45	95	185	276
Zn4	5Zn + 4Ge + 2Lu		38	99	166	286
Zn5	1Zn + 4Ge + 4Lu	9	37	86	173	273
Ge1	4Zn + 3Lu	7	40	100	186	269
Ge2	1Zn + 1Ge + 6Lu	8	39	85	169	261
Ge3	4Zn + 3Lu	7	42	101	177	282
Ge4	2Zn + 1Ge + 6Lu	9	38	81	175	265
Ge5	5Zn + 4Lu		43	96	166	278
Ge6	4Zn + 4Lu	8	40	88	168	287
Lu1	3Zn + 7Ge + 2Lu	12		99	174	283
Lu2	5Zn + 6Ge + 2Lu	13	45	106	181	292
Lu3	7Zn + 6Ge + 1Lu	14	41	107	181	282
Lu4	5Zn + 7Ge + 3Lu	15	42	101	183	281

Таблица 4. Ba₈Ir₁₆In₅₂-oS76. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение атома	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
In1	8In + 2Ba + 2Ir	12	42	110	197	333
In2	8In + 2Ba + 2Ir		44	113	208	356
In3	8In + 2Ba + 2Ir		43	103	187	335
In4	8In + 2Ba + 2Ir		45	100	199	332
In5	10In + 3Ir	13	43	105	198	348
In6	7In + 3Ba + 2Ir		45	111	214	356
In7	8In + 2Ba + 2Ir		42	105	211	327
In8	8In + 2Ba + 2Ir		47	105	197	337
In9	7In + 1Ba + 4Ir	12	42	110	211	338
In10	8In + 2Ba + 2Ir		54	123	224	366
In11	6In + 3Ba + 3Ir		53	126	238	372
In12	6In + 3Ba + 3Ir		45	115	212	353
In13	6In + 3Ba + 3Ir	14	54	124	237	370
Ba1	14In		52	104	215	343
Ba2	13In + 2Ba + 4Ir		64	142	254	398
Ir1	9In		35	100	187	304
Ir2	7In + 2Ba	9	44	114	221	352
Ir3	9In + 1Ir		34	87	179	292
Ir4	7In + 2Ba + 1Ir	10	44	117	219	354

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, образующих каркас структуры, пустоты в котором заполняют спейсеры; кластеры-прекурсоры занимают высокосимметричные позиции; набор нанокластеров-прекурсоров и спейсеров включает в себя все атомы структуры.

**СИММЕТРИЙНЫЙ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ КОД (ПРОГРАММА)
САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР**

Использованный метод моделирования кристаллической структуры основан на определении иерархической последовательности ее самосборки в кристаллографическом пространстве. На первом уровне самоорганизации системы определяется

механизм формирования первичной цепи структуры из нанокластеров 0-го уровня, сформированных на темплатной стадии эволюции системы, далее — механизм самосборки из цепи слоя (2-й уровень) и затем из слоя — трехмерного каркаса структуры (3-й уровень).

Кристаллическая структура $Y_8Rh_{12}Sn_{20}-oS40$

Параметры элементарной ячейки: $a = 4.387 \text{ \AA}$, $b = 26.212 \text{ \AA}$, $c = 7.155 \text{ \AA}$, $V = 822.77 \text{ \AA}^3$. Пространственная группа $Cmc2_1(36)$ с частными $4a$ позициями в плоскости m (0, y , z). Кратность общего положения $8b$ (x , y , z). Индекс Пирсона $oS40$. Последовательность Вайкоффа a^{10} .

Значения координационных чисел для атомов $Y = 14$, 13 , атомов $Rh = 9$ и атомов $Sn = 14$ и 12 (4 атома) (см. табл. 2).

Установлены 18 вариантов выделения кластерных структур с числом кластеров $N = 1$ (1 вариант), 2 (11 вариантов), 3 (6 вариантов) (табл. 5).

Таблица 5. $Y_8Rh_{12}Sn_{20}-oS40$. Варианты кластерного представления кристаллической структуры с 1, 2, и 3 структурными единицами

Одна структурная единица
1: Sn1(1)(1@14)
Две структурные единицы
2: Rh1(1)(1@9) Sn2(1)(1@12)
2: Rh2(1)(1@9) Sn3(1)(1@12)
2: Rh2(1)(1@9) Sn4(1)(1@12)
2: Sn2(1)(1@12) Sn3(1)(1@12)
2: Sn2(1)(1@12) Sn4(1)(1@12)
2: Sn4(1)(1@12) Sn5(1)(1@12)
2: Y1(1)(1@14) Rh1(1)(1@9)
2: Y1(1)(1@14) Y2(1)(1@13)
2: Y2(1)(1@13) Rh2(1)(1@9)
2: Y2(1)(1@13) Sn2(1)(1@12)
2: Y2(1)(1@13) Sn5(1)(1@12)
Три структурные единицы
3: Rh1(0)(1) Rh2(1)(1@9) Rh3(1)(1@9)
3: Rh1(0)(1) Rh3(1)(1@9) Sn5(1)(1@12)
3: Rh1(1)(1@9) Rh2(1)(1@9) Rh3(0)(1)
3: Rh1(1)(1@9) Rh2(1)(1@9) Rh3(1)(1@9)
3: Rh1(1)(1@9) Rh3(0)(1) Sn5(1)(1@12)
3: Rh1(1)(1@9) Rh3(1)(1@9) Sn5(1)(1@12)

Примечание. Указан центральный атом полиэдрического кластера, число его оболочек (в первых скобках) и количество атомов в оболочке (во вторых скобках).

Таблица 5. $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$. Варианты кластерного представления кристаллической структуры с 1, 2, и 3 структурными единицами

Две структурные единицы
2: Lu1(1)(1@12) Lu3(1)(1@14)
Три структурные единицы
3: Ge1(0)(1) Ge3(1)(1@7) Lu4(1)(1@15)
3: Ge1(1)(1@7) Ge3(1)(1@7) Lu4(1)(1@15)
3: Ge2(1)(1@8) Ge5(1)(1@9) Lu3(1)(1@14)
3: Ge4(1)(1@9) Ge5(1)(1@9) Lu2(1)(1@13)
3: Ge5(1)(1@9) Lu2(1)(1@13) Lu3(1)(1@14)
3: Zn1(0)(1) Zn2(1)(1@10) Lu1(1)(1@12)
3: Zn1(1)(1@11) Zn2(1)(1@10) Ge4(1)(1@9)
3: Zn1(1)(1@11) Zn2(1)(1@10) Lu1(1)(1@12)
3: Zn1(1)(1@11) Zn2(1)(1@10) Zn3(1)(1@11)
3: Zn1(1)(1@11) Zn3(1)(1@11) Ge6(1)(1@8)
3: Zn1(1)(1@11) Zn3(1)(1@11) Zn5(1)(1@9)
3: Zn2(1)(1@10) Ge2(1)(1@8) Ge5(1)(1@9)
3: Zn2(1)(1@10) Ge4(1)(1@9) Ge5(1)(1@9)
3: Zn2(1)(1@10) Zn3(0)(1) Lu4(1)(1@15)
3: Zn2(1)(1@10) Zn3(1)(1@11) Ge2(1)(1@8)
3: Zn2(1)(1@10) Zn3(1)(1@11) Lu4(1)(1@15)
3: Zn3(1)(1@11) Ge1(1)(1@7) Lu4(1)(1@15)
3: Zn4(0)(1) Zn5(1)(1@9) Lu2(1)(1@13)
3: Zn4(1)(1@11) Ge2(1)(1@8) Ge6(1)(1@8)
3: Zn4(1)(1@11) Ge2(1)(1@8) Lu3(1)(1@14)
3: Zn4(1)(1@11) Ge4(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)
3: Zn4(1)(1@11) Ge4(1)(1@9) Lu2(1)(1@13)
3: Zn4(1)(1@11) Lu2(1)(1@13) Lu3(1)(1@14)
3: Zn4(1)(1@11) Zn5(1)(1@9) Ge2(1)(1@8)
3: Zn4(1)(1@11) Zn5(1)(1@9) Lu2(1)(1@13)
Четыре структурные единицы
4: Zn1(1)(1@11) Ge3(0)(1) Ge4(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)
4: Zn1(1)(1@11) Ge3(1)(1@7) Ge4(0)(1) Ge6(1)(1@8)
4: Zn1(1)(1@11) Ge3(1)(1@7) Ge4(1)(1@9) Ge6(0)(1)
4: Zn1(1)(1@11) Ge3(1)(1@7) Ge4(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)
4: Zn1(1)(1@11) Zn5(0)(1) Ge3(1)(1@7) Lu1(1)(1@12)
4: Zn1(1)(1@11) Zn5(1)(1@9) Ge3(0)(1) Lu1(1)(1@12)
4: Zn1(1)(1@11) Zn5(1)(1@9) Ge3(1)(1@7) Lu1(0)(1)

Таблица 5. (окончание)

4: Zn1(1)(1@11) Zn5(1)(1@9) Ge3(1)(1@7) Lu1(1)(1@12)
4: Zn3(1)(1@11) Ge1(0)(1) Ge2(1)(1@8) Ge6(1)(1@8)
4: Zn3(1)(1@11) Ge1(1)(1@7) Ge2(0)(1) Ge6(1)(1@8)
4: Zn3(1)(1@11) Ge1(1)(1@7) Ge2(1)(1@8) Ge6(1)(1@8)
4: Zn3(1)(1@11) Zn5(1)(1@9) Ge1(0)(1) Ge2(1)(1@8)
4: Zn3(1)(1@11) Zn5(1)(1@9) Ge1(1)(1@7) Ge2(0)(1)
4: Zn3(1)(1@11) Zn5(1)(1@9) Ge1(1)(1@7) Ge2(1)(1@8)
4: Zn5(0)(1) Ge1(1)(1@7) Ge3(0)(1) Lu1(1)(1@12)
4: Zn5(0)(1) Ge1(1)(1@7) Ge3(1)(1@7) Lu1(1)(1@12)
4: Zn5(1)(1@9) Ge1(0)(1) Ge2(1)(1@8) Ge3(1)(1@7)
4: Zn5(1)(1@9) Ge1(1)(1@7) Ge2(1)(1@8) Ge3(1)(1@7)
4: Zn5(1)(1@9) Ge1(1)(1@7) Ge3(0)(1) Lu1(1)(1@12)
4: Zn5(1)(1@9) Ge1(1)(1@7) Ge3(1)(1@7) Lu1(1)(1@12)

Пять структурных единиц	
5: Ge1(0)(1) Ge2(1)(1@8) Ge3(0)(1) Ge5(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(0)(1) Ge2(1)(1@8) Ge3(1)(1@7) Ge5(0)(1) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(0)(1) Ge2(1)(1@8) Ge3(1)(1@7) Ge5(1)(1@9) Ge6(0)(1)	
5: Ge1(0)(1) Ge2(1)(1@8) Ge3(1)(1@7) Ge5(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(0)(1) Ge3(0)(1) Ge4(1)(1@9) Ge5(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(0)(1) Ge3(1)(1@7) Ge4(1)(1@9) Ge5(1)(1@9) Ge6(0)(1)	
5: Ge1(0)(1) Ge3(1)(1@7) Ge4(1)(1@9) Ge5(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge2(1)(1@8) Ge3(0)(1) Ge5(1)(1@9) Ge6(0)(1)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge2(1)(1@8) Ge3(0)(1) Ge5(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge2(1)(1@8) Ge3(1)(1@7) Ge5(0)(1) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge2(1)(1@8) Ge3(1)(1@7) Ge5(1)(1@9) Ge6(0)(1)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge2(1)(1@8) Ge3(1)(1@7) Ge5(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge3(0)(1) Ge4(1)(1@9) Ge5(0)(1) Ge6(0)(1)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge3(0)(1) Ge4(1)(1@9) Ge5(0)(1) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge3(0)(1) Ge4(1)(1@9) Ge5(1)(1@9) Ge6(0)(1)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge3(0)(1) Ge4(1)(1@9) Ge5(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge3(1)(1@7) Ge4(1)(1@9) Ge5(0)(1) Ge6(0)(1)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge3(1)(1@7) Ge4(1)(1@9) Ge5(0)(1) Ge6(1)(1@8)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge3(1)(1@7) Ge4(1)(1@9) Ge5(1)(1@9) Ge6(0)(1)	
5: Ge1(1)(1@7) Ge3(1)(1@7) Ge4(1)(1@9) Ge5(1)(1@9) Ge6(1)(1@8)	

Примечание. Указан центральный атом полиэдрического кластера, число его оболочек (в первых скобках) и количество атомов в оболочке (во вторых скобках).

Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки кластеров-прекурсоров в виде сдвоенных тетраэдров $K6 = 0@6(YSn_3Rh_2)$ и тетраэдров $K4 = 0@4(YSn_2Rh)$.

Слой S_2^3 . Образование слоя S_2^3 происходит в плоскости YZ при комплементарном связывании тетрамеров из кластеров $K6 + 2K4 + K6$ в направлении оси Y (рис. 1). Расстояние между центрами кластеров-прекурсоров $K6$ соответствует значению вектора трансляции $c = 7.155 \text{ \AA}$.

Самосборка пакета S_3^3 . Микроаркас структуры формируется при связывании двух микрослоев S_3^3 . Расстояние между слоями соответствует значению вектора трансляции $a = 4.387 \text{ \AA}$.

Самосборка слоя S_3^3 . Формирование слоя S_3^3 происходит при связывании пакетов (со сдвигом) в направлении оси X . Удвоенное расстояние между центрами кластеров-прекурсоров $K6$ первичных цепей S_1^1 соответствует значению вектора трансляции $b = 26.212 \text{ \AA}$ (см. рис. 1).

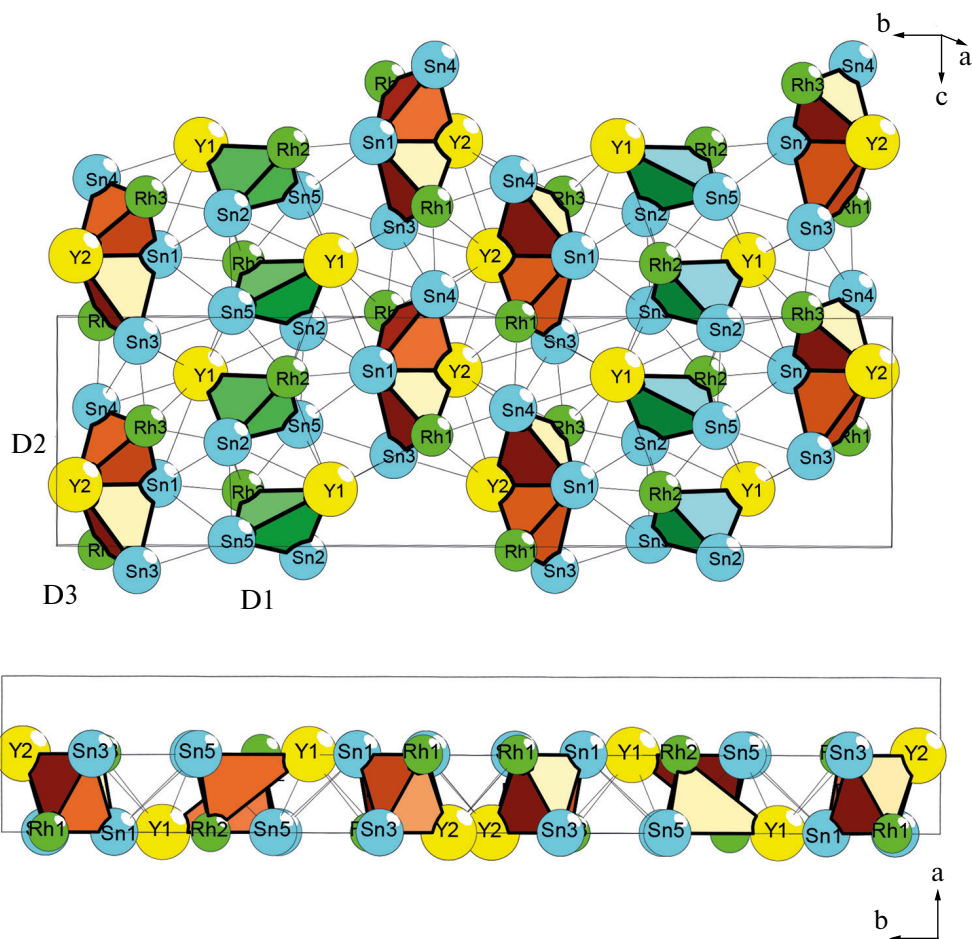


Рис. 1. $Y_8Rh_{12}Sn_{20}$ -oS40. Слой из образующих упаковки кластеров-прекурсоров в виде сдвоенных тетраэдров $K6 = 0@6(YSn_3Rh_2)$ и тетраэдров $K4 = 0@4(YSn_2Rh)$.

Кристаллическая структура $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS60}$

Параметры элементарной ячейки: $a = 4.179 \text{ \AA}$, $b = 18.368 \text{ \AA}$, $c = 15.050 \text{ \AA}$, $V = 1155.24 \text{ \AA}^3$. Индекс Пирсона oS60. Последовательность Вайкоффа a^{15} .

Значения координационных чисел 4 атомов Lu = 12, 13, 14, 15, атомов Zn = 9, 10, 11 (3 атома), атомов Ge – 7 (2 атома), 8 (2 атома), 9 (2 атома) (см. табл. 3).

Установлены 66 вариантов выделения кластерных структур с числом кластеров $N = 1$ (1вариант), 2 (25 вариантов), (20 вариантов) и 4 (20 вариантов) (табл. 6).

Таблица 6. $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$. Варианты кластерного представления кристаллической структуры с 1, 2, и 3 структурными единицами

Три структурные единицы
3: In1(1)(1@12) In11(1)(1@12) Ir3(1)(1@10)
3: In1(1)(1@12) In12(1)(1@12) In13(1)(1@12)
3: In1(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir3(1)(1@10)
3: In1(1)(1@12) In7(1)(1@12) In13(1)(1@12)
3: In1(1)(1@12) In9(1)(1@12) In11(1)(1@12)
3: In1(1)(1@12) In9(1)(1@12) Ir2(1)(1@9)
3: In1(1)(1@12) Ir2(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
3: In2(1)(1@12) In3(1)(1@12) In9(1)(1@12)
3: In2(1)(1@12) In3(1)(1@12) Ir4(1)(1@10)
3: In2(1)(1@12) In4(1)(1@12) Ir4(1)(1@10)
3: In2(1)(1@12) In5(1)(1@13) In7(1)(1@12)
3: In2(1)(1@12) In7(1)(1@12) In13(1)(1@12)
3: In2(1)(1@12) In7(1)(1@12) Ir4(1)(1@10)
3: In2(1)(1@12) In8(1)(1@12) In9(1)(1@12)
3: In2(1)(1@12) In8(1)(1@12) Ir4(1)(1@10)
3: In3(0)(1) In5(1)(1@13) In6(1)(1@12)
3: In3(1)(1@12) In10(1)(1@12) In12(1)(1@12)
3: In3(1)(1@12) In5(1)(1@13) In6(1)(1@12)
3: In3(1)(1@12) In5(1)(1@13) Ir2(1)(1@9)
3: In3(1)(1@12) In6(1)(1@12) In13(1)(1@12)
3: In3(1)(1@12) In9(1)(1@12) In11(1)(1@12)
3: In4(1)(1@12) In10(1)(1@12) In12(1)(1@12)
3: In5(1)(1@13) Ba1(1)(1@14) Ir2(1)(1@9)
3: In5(1)(1@13) In11(1)(1@12) Ba1(1)(1@14)
3: In6(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir3(1)(1@10)
3: In6(1)(1@12) In8(1)(1@12) In9(1)(1@12)
3: In6(1)(1@12) In8(1)(1@12) Ir4(1)(1@10)
3: In6(1)(1@12) In9(1)(1@12) Ir1(1)(1@9)
3: In7(1)(1@12) In11(1)(1@12) Ir1(1)(1@9)
3: In7(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir1(1)(1@9)
3: In8(1)(1@12) In11(1)(1@12) In12(1)(1@12)
3: In8(1)(1@12) In11(1)(1@12) Ir3(1)(1@10)
3: In8(1)(1@12) In9(1)(1@12) In11(1)(1@12)
3: In8(1)(1@12) In9(1)(1@12) Ir2(1)(1@9)
3: In8(1)(1@12) Ir2(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
3: In8(1)(1@12) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)

Таблица 6. (продолжение)

Четыре структурные единицы	
4:	Ba1(0)(1) Ir1(1)(1@9) Ir2(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
4:	Ba1(1)(1@14) Ir1(1)(1@9) Ir2(0)(1) Ir4(1)(1@10)
4:	Ba1(1)(1@14) Ir1(1)(1@9) Ir2(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
4:	Ba1(1)(1@14) Ir1(1)(1@9) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4:	In1(0)(1) In5(1)(1@13) In7(1)(1@12) In11(1)(1@12)
4:	In1(0)(1) In5(1)(1@13) In7(1)(1@12) Ir2(1)(1@9)
4:	In1(1)(1@12) In5(0)(1) In11(1)(1@12) In12(1)(1@12)
4:	In1(1)(1@12) In5(0)(1) In7(1)(1@12) In11(1)(1@12)
4:	In1(1)(1@12) In5(1)(1@13) In11(0)(1) In12(1)(1@12)
4:	In1(1)(1@12) In5(1)(1@13) In11(1)(1@12) In12(1)(1@12)
4:	In1(1)(1@12) In5(1)(1@13) In7(0)(1) Ir2(1)(1@9)
4:	In1(1)(1@12) In5(1)(1@13) In7(1)(1@12) In11(1)(1@12)
4:	In1(1)(1@12) In5(1)(1@13) In7(1)(1@12) Ir2(1)(1@9)
4:	In1(1)(1@12) In7(0)(1) Ir2(0)(1) Ir4(1)(1@10)
4:	In1(1)(1@12) In7(0)(1) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4:	In1(1)(1@12) In7(1)(1@12) Ir2(0)(1) Ir4(1)(1@10)
4:	In1(1)(1@12) In7(1)(1@12) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4:	In10(1)(1@12) Ba1(0)(1) Ir2(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
4:	In10(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir2(0)(1) Ir3(1)(1@10)
4:	In10(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir2(0)(1) Ir4(1)(1@10)
4:	In10(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir2(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
4:	In10(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4:	In11(1)(1@12) Ba1(0)(1) Ir1(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
4:	In11(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir1(0)(1) Ir3(1)(1@10)
4:	In11(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir1(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
4:	In13(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir1(0)(1) Ir3(0)(1)
4:	In13(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir1(0)(1) Ir3(1)(1@10)
4:	In13(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir1(1)(1@9) Ir3(0)(1)
4:	In13(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir1(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
4:	In2(0)(1) In3(1)(1@12) In12(1)(1@12) In13(1)(1@12)
4:	In2(0)(1) In8(1)(1@12) In12(1)(1@12) In13(1)(1@12)
4:	In2(1)(1@12) In3(0)(1) In5(1)(1@13) In12(1)(1@12)
4:	In2(1)(1@12) In3(1)(1@12) In12(0)(1) In13(1)(1@12)
4:	In2(1)(1@12) In3(1)(1@12) In5(1)(1@13) In12(0)(1)
4:	In2(1)(1@12) In3(1)(1@12) In5(1)(1@13) In12(1)(1@12)
4:	In2(1)(1@12) In4(1)(1@12) In12(0)(1) In13(1)(1@12)
4:	In2(1)(1@12) In4(1)(1@12) In12(1)(1@12) In13(0)(1)
4:	In2(1)(1@12) In4(1)(1@12) In12(1)(1@12) In13(1)(1@12)
4:	In2(1)(1@12) In8(0)(1) In13(0)(1) Ir3(1)(1@10)
4:	In2(1)(1@12) In8(0)(1) In13(1)(1@12) Ir3(1)(1@10)
4:	In2(1)(1@12) In8(1)(1@12) In12(1)(1@12) In13(0)(1)
4:	In2(1)(1@12) In8(1)(1@12) In12(1)(1@12) In13(1)(1@12)
4:	In2(1)(1@12) In8(1)(1@12) In13(0)(1) Ir3(1)(1@10)
4:	In2(1)(1@12) In8(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir3(1)(1@10)
4:	In3(0)(1) In6(1)(1@12) In9(1)(1@12) In10(1)(1@12)
4:	In3(1)(1@12) In10(0)(1) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)

Таблица 6. (окончание)

4: In3(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4: In3(1)(1@12) In5(0)(1) In11(1)(1@12) In12(1)(1@12)
4: In3(1)(1@12) In5(1)(1@13) In11(1)(1@12) In12(0)(1)
4: In3(1)(1@12) In5(1)(1@13) In11(1)(1@12) In12(1)(1@12)
4: In3(1)(1@12) In6(1)(1@12) In10(0)(1) Ir4(1)(1@10)
4: In3(1)(1@12) In6(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir4(1)(1@10)
4: In3(1)(1@12) In6(1)(1@12) In9(1)(1@12) In10(0)(1)
4: In3(1)(1@12) In6(1)(1@12) In9(1)(1@12) In10(1)(1@12)
4: In3(1)(1@12) In9(1)(1@12) In10(0)(1) Ir2(1)(1@9)
4: In3(1)(1@12) In9(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir2(1)(1@9)
4: In4(0)(1) In11(1)(1@12) In12(1)(1@12) Ir1(1)(1@9)
4: In4(0)(1) In12(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir1(1)(1@9)
4: In4(0)(1) In6(1)(1@12) Ir1(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4: In4(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir2(1)(1@9) Ir4(0)(1)
4: In4(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4: In4(1)(1@12) In11(1)(1@12) In12(0)(1) Ir1(0)(1)
4: In4(1)(1@12) In11(1)(1@12) In12(0)(1) Ir1(1)(1@9)
4: In4(1)(1@12) In11(1)(1@12) In12(1)(1@12) Ir1(0)(1)
4: In4(1)(1@12) In11(1)(1@12) In12(1)(1@12) Ir1(1)(1@9)
4: In4(1)(1@12) In12(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir1(1)(1@9)
4: In4(1)(1@12) In6(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir4(0)(1)
4: In4(1)(1@12) In6(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir4(1)(1@10)
4: In4(1)(1@12) In6(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir1(0)(1)
4: In4(1)(1@12) In6(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir1(1)(1@9)
4: In4(1)(1@12) In6(1)(1@12) Ir1(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4: In4(1)(1@12) Ir1(1)(1@9) Ir2(1)(1@9) Ir4(0)(1)
4: In4(1)(1@12) Ir1(1)(1@9) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4: In6(1)(1@12) In13(0)(1) Ir1(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
4: In6(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir1(1)(1@9) Ir3(1)(1@10)
4: In6(1)(1@12) In8(1)(1@12) In13(0)(1) Ir3(1)(1@10)
4: In6(1)(1@12) In8(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir3(0)(1)
4: In6(1)(1@12) In8(1)(1@12) In13(1)(1@12) Ir3(1)(1@10)
4: In7(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir2(0)(1) Ir4(0)(1)
4: In7(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir2(0)(1) Ir4(1)(1@10)
4: In7(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir2(1)(1@9) Ir4(0)(1)
4: In7(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4: In7(1)(1@12) Ir1(1)(1@9) Ir2(0)(1) Ir4(1)(1@10)
4: In7(1)(1@12) Ir1(1)(1@9) Ir2(1)(1@9) Ir4(0)(1)
4: In7(1)(1@12) Ir1(1)(1@9) Ir2(1)(1@9) Ir4(1)(1@10)
4: In9(1)(1@12) Ba1(0)(1) Ir1(1)(1@9) Ir2(1)(1@9)
4: In9(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir1(1)(1@9) Ir2(1)(1@9)
4: In9(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir2(0)(1)
4: In9(1)(1@12) In10(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir2(1)(1@9)
4: In9(1)(1@12) In11(1)(1@12) Ba1(0)(1) Ir1(1)(1@9)
4: In9(1)(1@12) In11(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir1(0)(1)
4: In9(1)(1@12) In11(1)(1@12) Ba1(1)(1@14) Ir1(1)(1@9)

Примечание. Указан центральный атом полиэдрического кластера, число его оболочек (в первых скобках) и количество атомов в оболочке (во вторых скобках).

Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки пяти трехатомных кластеров-прекурсоров:

- $K3(D1) = 0@3(\text{LuGe}_2)$;
- $K3(D5) = 0@3(\text{GeZn}_2)$;
- $K3(D2) = 0@3(\text{LuZnGe})$;
- $K3(D3) = 0@3(\text{LuZnGe})$;
- $K3(D4) = 0@3(\text{LuZnGe})$.

Первичная цепь S_3^1 . Первичная цепь $S_3^1(A)$ образована из кластеров $K3(D1)–K3(D2)–K3(D1)–K3(D2)$ чередующихся в направлении оси Z . Первичная цепь $S_3^1(B)$ образована из кластеров $K3(D3)–K3(D4)–K3(D5)$ чередующихся в направлении оси Z . Длина цепей $S_3^1(A)$ и $S_3^1(B)$ соответствует значению вектора трансляций $c = 15.050 \text{ \AA}$ (рис. 2).

Слой S_3^2 . Образование слоя $S_3^2(BAB)$ из трех первичных цепей проходит в плоскости YZ при комплементарном связывании центральной цепи $S_3^1(A)$ с двумя боковыми цепями $S_3^1(B)$. В элементарной ячейке в плоскости YZ находятся два

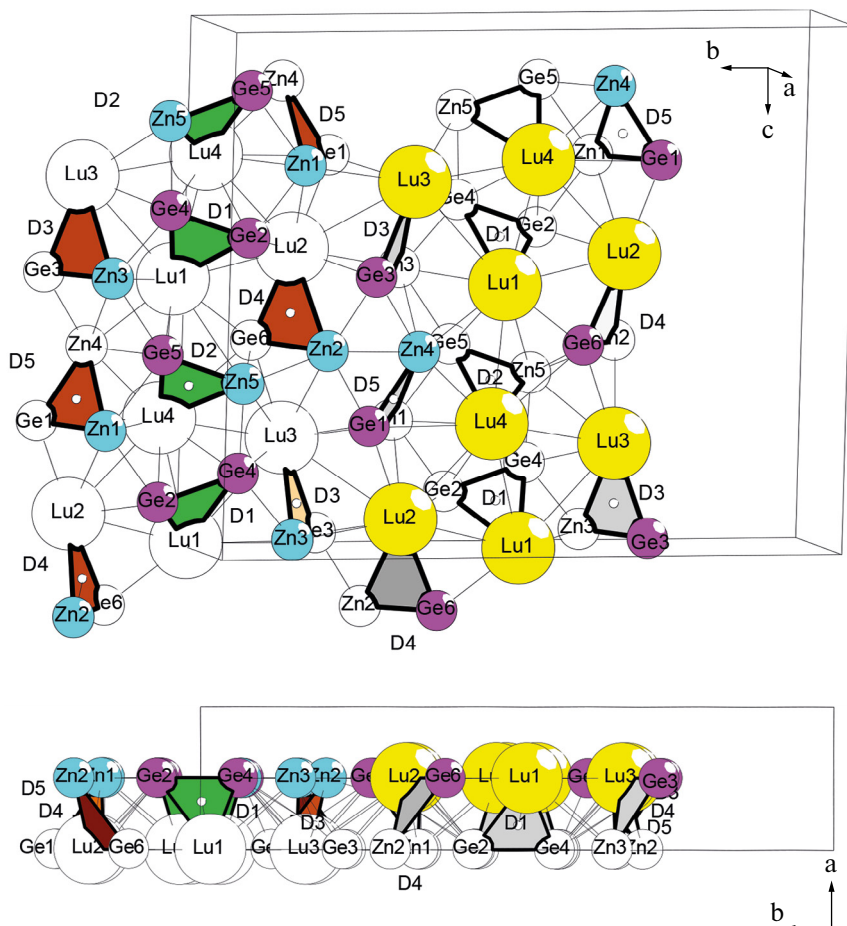


Рис. 2. $\text{Lu}_{16}\text{Zn}_{20}\text{Ge}_{24}\text{-oS}_{60}$. Слой S_3^2 из образующих упаковки пяти трехатомных кластеров-прекурсоров $K3(D1) = 0@3(\text{LuGe}_2)$, $K3(D5) = 0@3(\text{GeZn}_2)$, $K3(D2) = 0@3(\text{LuZnGe})$, $K3(D3) = 0@3(\text{LuZnGe})$, $K3(D4) = 0@3(\text{LuZnGe})$.

симметрически-связанных слоя S_3^2 (BAB), которые определяют значению вектора трансляций $b = 18.368 \text{ \AA}$ (см. рис. 2).

Каркас S_3^3 . Микрокаркас структуры формируется при связывании микрослоев $S_3^2 + S_3^2$. Расстояние между слоями соответствует значению вектора трансляции $a = 4.179 \text{ \AA}$ (см. рис. 2).

Кристаллическая структура $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$

Параметры элементарной ячейки: $a = 4.485 \text{ \AA}$, $b = 29.052 \text{ \AA}$, $c = 13.687 \text{ \AA}$, $V = 1783.63 \text{ \AA}^3$. Индекс Пирсона oS76. Последовательность Вайкоффа a^{19} .

Значения координационных чисел для атомов Ba = 14, 19, атомов Ir = 9 (2 атома), 10 (2 атома) и атомов In – 12 (13 атомов) (см. табл. 4).

Установлены 129 вариантов выделения кластерных структур с числом кластеров $N = 2$ (36 вариантов) и $N = 3$ (103 варианта) (см. табл. 6).

Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки кластеров-прекурсоров:

- пентагональных пирамид $K6 = 0@6(\text{BaIn}_5)$;
- тетраэдров $K4-1 = 0@4(\text{BaRhIn}_2)$;
- тетраэдров $K4-2 = 0@4(\text{Rh}_2\text{In}_2)$;
- колец $K3 = 0@3(\text{RhIn}_2)$;
- и атомов-спейсеров In3 и In12 (рис. 3).

Первичная цепь S_3^1 . Образование цепи происходит в плоскости YZ при комплексном связывании тетрамеров $K6 + K4-1 + K4-2 + K3$ в направлении оси Z (см. рис. 3). При этом происходит локализация атомов-спейсеров In3 и In12. Удвоенное

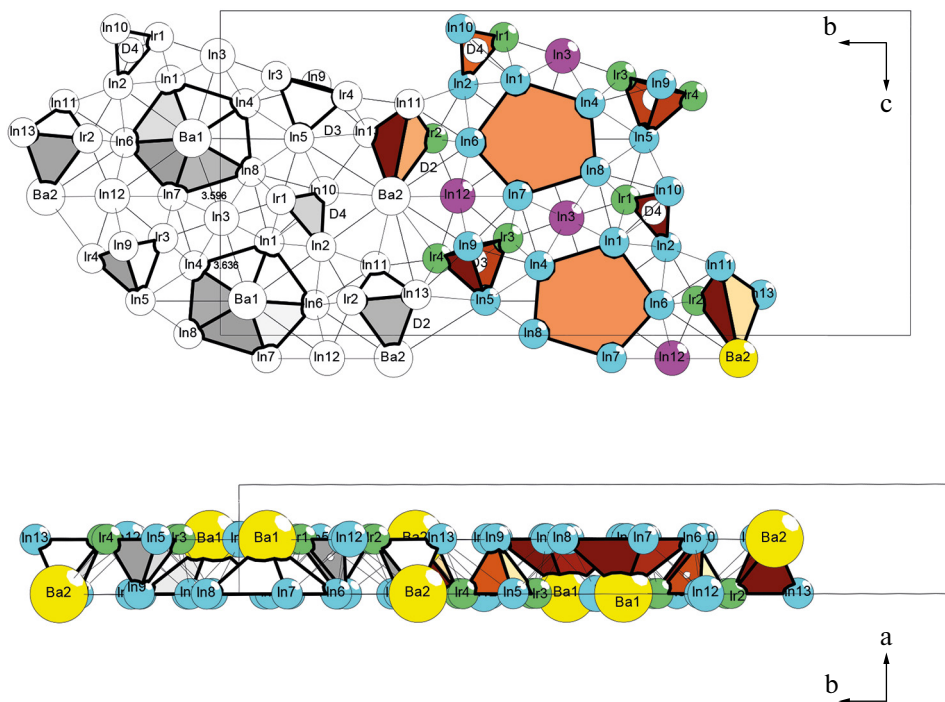


Рис. 3. $\text{Ba}_8\text{Ir}_{16}\text{In}_{52}\text{-oS76}$. Слой S_3^3 из образующих упаковки кластеров-прекурсоров в виде пентагональных пирамид $K6 = 0@6(\text{BaIn}_5)$, тетраэдров $K4-1 = 0@4(\text{BaRhIn}_2)$, тетраэдров $K4-2 = 0@4(\text{Rh}_2\text{In}_2)$, колец $K3 = 0@3(\text{RhIn}_2)$ и атомов-спейсеров In3 и In12.

расстояние между центрами кластеров-прекурсоров $K6$ определяет значение вектора трансляции $c = 13.687 \text{ \AA}$.

Слой S_3^2 . Образование микрослоя S_3^2 происходит в плоскости YZ при комплементарном связывании тетрамеров в направлении оси Y . Удвоенное расстояние между центрами кластеров-прекурсоров $K6$ соответствует значению вектора трансляции $b = 29.052 \text{ \AA}$ (см. рис. 3).

Каркас S_3^3 . Образование каркаса происходит при связывании слоев $S_3^2 + S_3^2$ в направлении оси X (см. рис. 3). Расстояние между двухслойными пакетами соответствует значению вектора трансляции $a = 4.485 \text{ \AA}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода разложения 3D-атомной сетки на кластерные структуры (пакет программ ToposPro) получены данные о комбинаторно возможных типах кластеров, участвующих в образовании кристаллических структур $Y_8Rh_{12}Sn_{20}$ -oS40, $Lu_{16}Zn_{20}Ge_{24}$ -oS60, $Ba_8Ir_{16}In_{52}$ -oS76 с пространственной группой $Cmc2_1(36)$ и атомами, занимающими только частные $4c$ -позиции в плоскости m .

Для $Y_8Rh_{12}Sn_{20}$ -oS40 установлены 18 вариантов выделения кластеров. Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки кластеров-прекурсоров в виде сдвоенных тетраэдров $K6 = 0@6(YSn_3Rh_2)$ и тетраэдров $K4 = 0@4(YSn_2Rh)$.

Для $Lu_{16}Zn_{20}Ge_{24}$ -oS60 установлены 66 вариантов выделения кластеров. Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки кластеров-прекурсоров $K3 = 0@3(LuGe_2)$, $K3 = 0@3(GeZn_2)$, $K3 = 0@3(LuZnGe)$, $K3 = 0@3(LuZnGe)$, $K3 = 0@3(LuZnGe)$.

Для $Ba_8Ir_{16}In_{52}$ -oS76 установлены 129 вариантов выделения кластеров. Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием пентагональных пирамид $K6 = 0@6(BaIn_5)$, тетраэдров $K4a = 0@4(BaRhIn_2)$ и тетраэдров $K4b = 0@4(Rh_2In_2)$, колец $K3 = 0@4(RhIn_2)$ и атомов-спейсеров In.

Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки кристаллической структуры $Y_8Rh_{12}Sn_{20}$ -oS40, $Lu_{16}Zn_{20}Ge_{24}$ -oS60, $Ba_8Ir_{16}In_{52}$ -oS76 из кластеров-прекурсоров $K3$, $K4$, $K6$ в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Моделирование самосборки кристаллических структур выполнено при поддержке Минобрнауки России в рамках выполнения работ по государственному заданию НИЦ "Курчатовский институт", кластерный анализ выполнен при поддержке Российского научного фонда (РНФ № 21-73-30019).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Inorganic crystal structure database (ICSD). Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ), Germany and US National Institute of Standard and Technology (NIST), USA.
2. Pearson's Crystal Data: Crystal Structure Database for Inorganic Compounds. ASM International, Materials Park, Ohio, USA.
3. 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. <https://topospro.com/>

4. Wang Jian, Xia Sheng-Qing, Tao Xu-Tang, Schafer Marion C., Bobev Svilen. New ternary phosphides and arsenides. Syntheses, crystal structures, physical properties of Eu_2ZnP_2 , $\text{Eu}_2\text{Zn}_2\text{P}_3$ and $\text{Eu}_2\text{Cd}_2\text{As}_3$ // *Inorg Chem.* 2013. V. 205. P. 116–121.
5. Wang Jian, Yang Min, Pan Mingyan, Xia Shengqing, Tao Xutang, He Hua, Darone G., Bobev S. Synthesis, crystal and electronic structures, and properties of the new pnictide semiconductors A_2CdPn_2 ($\text{A} = \text{Ca, Sr, Ba, Eu}$; $\text{Pn} = \text{P, As, Sb}$) // *Inorg. Chem.* 2011. V. 50. P. 8020–8027.
6. Xia S., Bobev S. Cation–Anion Interactions as Structure Directing Factors: Structure and Bonding of Ca_2CdSb_2 and Yb_2CdSb_2 // *Journal of the American Chemical Society.* 2007. V. 129. P. 4049–4057.
7. Meot Meyer M., Venturini G., Malaman B., Steinmetz J., Roques B. Des nouveaux stannures ternaires de rhodium et d'elements des terres rares: $\text{TR}_2\text{Rh}_3\text{Sn}_6$ ou $\text{TR} = \text{Y, Gd, Tb, Dy, Ho}$. Structures cristallines et magnetiques des $\text{Y}_2\text{Rh}_3\text{Sn}_5$ // *Materials Research Bulletin.* 1984. V. 19. P. 1181–1186.
8. Kranenberg C., Johrendt D., Mewis A. Neue ternäre Germanide: die Verbindungen $\text{Ln}_4\text{Zn}_5\text{Ge}_6$ (Ln: Gd, Tm, Lu) // *Z. Anorg. Allg. Chem.* 2001. V. 627. P. 539–544.
9. Jang Gyung-Joo, Yun Hoseop. Hafnium germanium telluride // *Acta Cryst.* 2008. V. E64. i27.
10. Lee Changho, Jang Gyung-Joo, Yun Hoseop. Stoichiometric ZrGeTe_4 . *Acta Cryst.* 2007. V. E63. i182.
11. Zhang F.X., Xu F.F., Mori T., Liu Q.L., & Tanaka T. Novel rare-earth borosilicide $\text{RE}_{1-x}\text{B}_{12}\text{Si}_{3.3-\delta}$ ($\text{RE} = \text{Y, Gd–Lu}$) ($0 \leq x \leq 0.5$, $\delta \approx 0.3$): synthesis, crystal growth, structure analysis and properties // *Journal of Solid State Chemistry.* 2003. V. 170. P. 75–81.
12. Zhuraleva M.A., Salvador J., Bilc D., Mahanti S.D., Ireland J., Kannewurf C.R., Kanatzidis M.G. Intermetallics as zintl phases: $\text{Yb}_2\text{Ga}_4\text{Ge}_6$ and $\text{RE}_3\text{Ga}_4\text{Ge}_6$ ($\text{RE} = \text{Yb, Eu}$): Structural response of a $[\text{Ga}_4\text{Ge}_6]_4$ — framework to reduction by two electrons // *Chemistry.* 2004. V. 10. P. 3197–3208.
13. Avzuragova V.A., Nesterenko S.N., Tursina A.I. LaRhA_4 , $\text{La}_3\text{Rh}_3\text{A}_{14}$, and $\text{Ce}_5\text{Rh}_5\text{A}_{16}$ as a new family of ternary aluminides // *Russian Journal of Physical Chemistry.* 2017. V. 91(2). P. 252–254.
14. Palasyuk A.M., Corbett J.D. Ba IrIn_4 and $\text{Ba}_2\text{Ir}_4\text{In}_{13}$: Two In-rich polar intermetallic structures with different augmented prismatic environments about the cations. *Inorg Chem.* 2008. V. 47. № 20. P. 9344–9350.
15. 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. P. 975–1043.
16. Shevchenko V.Ya., Medrish I.V., Ilyushin G.D., Blatov V.A. From clusters to crystals: Scale chemistry of intermetallics // *Structural Chemistry.* 2019. V. 30. P. 2015–2027.
17. Shevchenko V.Ya., Ilyushin G.D. Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: Clusters-Precursors K3, K4, K6 for the Self-Assembly of $\text{RbNa}_8\text{Ga}_3\text{As}_6$ -aP72, $\text{Sr}_2\text{Ca}_4\text{In}_3\text{Ge}_6$ -oP56, and $\text{Sr}_8\text{Li}_4\text{In}_4\text{Ge}_8$ -oP24 Crystal Structures // *Glass Physics and Chemistry.* 2024. V. 50. P. 87–100.
18. Shevchenko V.Ya., Ilyushin G.D. Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: Cluster-Precursors K13, K11, K4, and K3 for the Self-Assembly of Crystal Structures $\text{Ce}_{56}\text{Ni}_{24}\text{Si}_{44}$ -mS124 and $\text{Ba}_{10}\text{La}_2\text{Si}_{12}$ -oP48 // *Glass Physics and Chemistry.* 2024. V. 50. P. 1–9.
19. Shevchenko V.Ya., Ilyushin G.D. Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: New Clusters-Precursors K6 and K3 for the Crystal Structures of the $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}$ -oP52, $\text{Sr}_2\text{LiInGe}_2$ -oP24, and $\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2$ -oP12 Family // *Glass Phys Chem.* 2023. V. 49 (Suppl 1). P. S17–S27.