

УДК 548.736

## КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ: КЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ $K_3$ , $K_4$ , $K_6$ ДЛЯ САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР $Li_{28}Cu_4Si_8-oP40$ , $La_{12}Rh_{12}Al_{16}-oP40$ , $Ca_8Pt_{12}Sn_{20}-oP40$

© 2025 В. Я. Шевченко<sup>1</sup>, Г. Д. Илюшин<sup>2,\*</sup>

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

<sup>2</sup>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  $Li_{28}Cu_4Si_8-oP40$  ( $a = 7.969 \text{ \AA}$ ,  $b = 4.449 \text{ \AA}$ ,  $c = 17.244 \text{ \AA}$ ,  $V = 611.46 \text{ \AA}^3$ ),  $La_{12}Rh_{12}Al_{16}-oP40$  ( $a = 26.949 \text{ \AA}$ ,  $b = 4.218 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.267 \text{ \AA}$ ,  $V = 826.05 \text{ \AA}^3$ ),  $Ca_8Pt_{12}Sn_{20}-oP40$  ( $a = 27.701 \text{ \AA}$ ,  $b = 4.614 \text{ \AA}$ ,  $c = 9.371 \text{ \AA}$ ,  $V = 1198.02 \text{ \AA}^3$ ), с пространственной группой  $Pnma$ . Для  $Li_{28}Cu_4Si_8-oP40$  рассмотрена самосборка кристаллической структуры с участием супракластеров-тримеров из кластеров  $K6(4a) = 0@6(Li_4Cu_2)$  и двух кластеров  $K6(8d) = 0@6(CuLi_5)$  и атомов-спейсеров Si. Для  $La_{12}Rh_{12}Al_{16}-oP40$  рассмотрена самосборка кристаллической структуры с участием кластеров  $K3(8d) = 0@3(LaRhAl)$ , кластеров  $K6(4a) = 0@6(La_2Rh_2Al_2)$  из связанных кластеров LaRhAl и кластеров  $K4(8d) = 0@4(LaRhAl_2)$ . Для  $Ca_8Pt_{12}Sn_{20}-oP40$  рассмотрена самосборка кристаллической структуры с кластерами-прекурсорами в виде сдвоенных тетраэдров  $K6 = 0@6(CaSn_3Pt_2)$  и тетраэдров  $K4 = 0@4(CaSn_2Pt)$ . Реконструирован симметрийный и топологический код процессов самосборки  $Li_{28}Cu_4Si_8-oP40$ ,  $La_{12}Rh_{12}Al_{16}-oP40$ ,  $Ca_8Pt_{12}Sn_{20}-oP40$  из кластеров-прекурсоров  $K3$ ,  $K4$ ,  $K6$  в виде: первичная цепь → слой → каркас.

**Ключевые слова:**  $Li_{28}Cu_4Si_8-oP40$ ,  $La_{12}Rh_{12}Al_{16}-oP40$ ,  $Ca_8Pt_{12}Sn_{20}-oP40$ , самосборка кристаллической структуры, кластерные прекурсоры  $K3$ ,  $K4$ ,  $K6$

**DOI:** 10.31857/S0132665125010024, **EDN:** DZZNAX

### ВВЕДЕНИЕ

В базах данных кристаллических структур неорганических соединений [1–3] большее число двойных интерметаллидов  $A_nB_n$  и тройных интерметаллидов  $A_nB_nC_n$  характеризуются пространственной группой  $P2_1/n2_1/m2_1/a$  ( $Pnma$ ). Структурные данные для кристаллохимического семейства  $A_nB_nC_n$  и  $A_nB_n$  с 40 атомами в элементарной ячейке, занимающими только частные  $c$ -позиции в плоскости  $m$ , приведены в табл. 1. В выделенном семействе интерметаллидов  $A_nB_n$  и  $A_nB_nC_n$  с  $oP40$

все кристаллические структуры характеризуются небольшими значениями векторов трансляций от 3.587 Å до 4.455 Å, которые соответствуют толщине двухслойных пакетов. Среди интерметаллидов кристаллохимических аналогов не имеют кристаллические структуры  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8$  [4] с параметрами ячейки  $a = 7.969 \text{ \AA}$ ,  $b = 4.449 \text{ \AA}$ ,  $c = 17.244 \text{ \AA}$  и  $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}$  [5] с параметрами ячейки  $a = 26.949 \text{ \AA}$ ,  $b = 4.218 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.267 \text{ \AA}$  и образующие кристаллохимическое семейство интерметаллиды  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}$  [6] с параметрами ячейки  $a = 7.348 \text{ \AA}$ ,  $b = 4.455 \text{ \AA}$ ,  $c = 26.348 \text{ \AA}$  и  $\text{Yb}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}$  [7] с параметрами ячейки  $a = 7.295 \text{ \AA}$ ,  $b = 4.422 \text{ \AA}$ ,  $c = 26.252 \text{ \AA}$ . Тип каркас-образующих кластеров-прекурсоров, образующих упаковки, для интерметаллидов соединений не известен.

**Таблица 1.** Кристаллохимические данные соединений.

Соединение	Параметры элементарной ячейки, Å	V, Å <sup>3</sup>
$\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8$ [4]	7.969, 4.450, 17.244	611.5
$\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}$ [5]	26.949, 4.218, 7.267	826.0
$\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}$ [6]	7.348, 4.455, 26.348	862.5
$\text{Yb}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}$ [7]	7.295, 4.422, 26.252	846.8
$\text{Li}_{12}\text{Na}_4\text{Si}_{24}$ [8, 9]	17.972, 3.788, 10.299	701.1
$\text{Hf}_{12}\text{Pd}_{16}\text{P}_{12}$ [10]	16.340, 3.787, 9.954	615.9
$\text{Zr}_{12}\text{Pd}_{16}\text{P}_{12}$ [10]	16.387, 3.826, 9.979	625.6
$\text{Hf}_3\text{Nb}_4\text{As}_3$ [11]	17.964, 3.587, 11.262	725.7
$\text{Y}_{20}\text{Ga}_6\text{Co}_{14}$ [12]	23.558, 3.924, 9.610	888.4
$\text{La}_{20}\text{Ga}_6\text{Co}_{14}$ [[12]]	24.500, 4.197, 10.050	1033.4
$\text{Na}_{32}\text{Sn}_4$ [13]	9.820, 5.570, 22.790	1246.6
$\text{Zr}_8\text{Cu}_8\text{Te}_{24}$ [14]	10.891, 3.972, 24.000	1038.2
$\text{Ba}_8\text{Au}_4\text{Tl}_{28}$ [15]	21.919, 5.193, 10.447	1189.1

В нашей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллических структур  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8$ -oP40,  $\text{La}_3\text{Rh}_3\text{Al}_4$ -oP40,  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}$ -oP40. Установлены кластеры-прекурсоры  $K_3$ ,  $K_4$ , и  $K_6$ , участвующие в образовании супракластеров-прекурсоров кристаллических структур. Реконструирован симметрийный и топологический код процессов самосборки кристаллических структур из супракластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь → слой → каркас.

Работа продолжает исследования [16–20] 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 ToposPro [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  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8-oP40$ ,  $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}-oP40$ ,  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}-oP40$ . В табл. 5–7 представлены варианты выделения кластеров-прекурсоров кристаллических структур  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8-oP40$ ,  $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}-oP40$ ,  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}-oP40$ .

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 нами 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-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 $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8-oP40$**

Значения координационных чисел для атомов Li равны 10 (1 атом), 11 (2 атома), 12 (2 атома), 13 (2 атома), атомов Si – 11 (1 атом), 13 (2 атома), и атома Cu – 12 (табл. 2).

**Таблица 2.**  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8-oP40$ . Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре.

Атом	Локальное окружение атома	Координационные последовательности				
		$N1$	$N2$	$N3$	$N4$	$N5$
Li1	7Li + 4Si	11	40	96	174	271
Li2	7Li + 3Si + 3Cu	13	46	97	181	275
Li3	7Li + 3Si	10	42		172	272
Li4	7Li + 4Si	11	41	96	172	267
Li5	7Li + 2Si + 3Cu		44	98	171	275
Li6	7Li + 3Si + 2Cu	12		97	172	274
Li7	8Li + 3Si + 2Cu	13	43	101	177	280
Si1	10Li + 1Cu	11	43	92	171	266
Si2	12Li + 1Cu	13	44	95	176	275
Cu1	10Li + 2Si	12	43	99	174	279

**Таблица 3.**  $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}$ -*oP40*. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение атома	Координационные последовательности				
		<i>N</i> 1	<i>N</i> 2	<i>N</i> 3	<i>N</i> 4	<i>N</i> 5
Al1	4Al + 3Rh + 5La	12	44	105	185	301
Al2	3Al + 4Rh + 5La		42	99	189	292
Al3	2Al + 3Rh + 7La		49	101	190	305
Al4	3Al + 4Rh + 5La		43	102	187	288
Rh1	5Al + 4La	9	40	99	176	280
Rh2	6Al + 3La		38	94	179	285
Rh3	3Al + 6La		47	98	188	297
La1	6Al + 5Rh + 3La	14	47	114	189	301
La2	8Al + 4Rh + 2La		46	103	195	303
La3	8Al + 4Rh + 1La	13	44	103	182	302

**Таблица 4.**  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}$ -*oP40*. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение атома	Координационные последовательности				
		<i>N</i> 1	<i>N</i> 2	<i>N</i> 3	<i>N</i> 4	<i>N</i> 5
Ca1	10Sn + 5Pt5	15	44	107	194	311
Ca2	2Ca + 8Sn + 5Pt		50	116	209	325
Sn1	5Ca + 3Sn + 4Pt	12	47	115	197	322
Sn2	4Ca + 5Sn + 3Pt		50	111	198	320
Sn3	3Ca + 7Sn + 4Pt	14	48	102	199	313
Sn4	3Ca + 6Sn + 3Pt			104	188	306
Sn5	3Ca + 5Sn + 4Pt		44	100	190	310
Pt1	5Ca + 5Sn	10	50	110	194	318
Pt2	3Ca + 6Sn	9	43	103	185	311
Pt3	2Ca + 7Sn		42	98	174	296

Установлены 8 вариантов выделения кластерных структур с числом кластеров  $N = 2$  (табл. 5).

Рассмотрен вариант самосборки с участием супракластеров-тримеров из шестиатомных кластеров  $K6(4a) = 0@6(\text{Li}_4\text{Cu}_2)$  и двух шестиатомных кластеров  $K6(8d) = 0@6(\text{CuLi}_5)$  и атомов-спейсеров Si1.

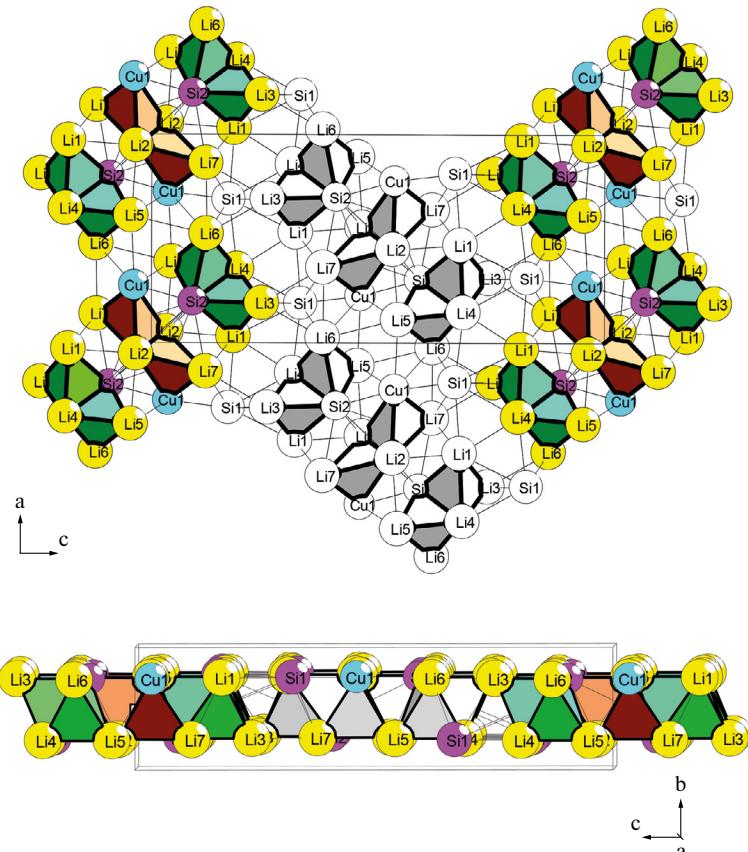
**Таблица 5.**  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8$ -*oP40*. Варианты кластерного представления кристаллической структуры

## Две структурные единицы

- 2: Li1(1)(1@11) Cu1(1)(1@13)  
 2: Li1(1)(1@11) Li6(1)(1@14)  
 2: Li3(1)(1@11) Cu1(1)(1@13)  
 2: Li4(0)(1) Li7(1)(1@14)  
 2: Li4(1)(1@11) Cu1(1)(1@13)  
 2: Li4(1)(1@11) Li7(1)(1@14)  
 2: Si1(0)(1) Si2(1)(1@13)  
 2: Si1(1)(1@12) Si2(1)(1@13)

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

*Первичная цепь  $S_3^1$ .* Образование первичной цепи происходит в плоскости  $XZ$  при комплементарном связывании тримеров  $K6(4a) + 2K6(8d)$  направлении оси  $X$  (рис. 1). Расстояние между центрами кластеров-прекурсоров  $K6(4a)$  соответствует значению вектора трансляции  $a = 7.969 \text{ \AA}$ .

**Рис. 1.**  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8$ -*oP40*. Слой  $S_3^1$ . Проекция на плоскости  $XZ$  и  $YZ$ .

*Самосборка слоя  $S_3^2$ .* Образование микрослоя происходит в плоскости  $XZ$  при связывании цепей со сдвигом в направлении оси  $Z$  (рис. 1). При этом между первичными цепями происходит локализация атомов-спейсеров  $\text{Si}1$ . Удвоенное расстояние между осями первичных цепей  $S_3^1$  соответствует значению вектора трансляции  $c = 17.244 \text{ \AA}$ .

*Самосборка каркаса  $S_3^3$ .* Микрокаркас структуры формируется при связывании микрослоев  $S_3^2$ . Расстояние между слоями соответствует значению вектора трансляции  $b = 4.449 \text{ \AA}$ .

### Кристаллическая структура $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}-oP40$

Значения координационных чисел для атомов La равны 14 (2 атома) и 13 (1 атом), атомов Rh – 9 (3 атома), атомов Al – 12 (3 атома) (см. табл. 3).

Установлены 11 вариантов выделения кластерных структур с числом кластеров  $N = 1$  (1 вариант),  $N = 2$  (4 варианта),  $N = 3$  (6 вариантов) (табл. 6).

**Таблица 6.**  $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}-oP40$ . Варианты кластерного представления кристаллической структуры с 1, 2 и 3 структурными единицами

Одна структурная единица
1: $\text{La}2(1)(1@14)$
Две структурные единицы
2: $\text{Al}2(1)(1@12) \text{Al}3(1)(1@12)$
2: $\text{Al}2(1)(1@12) \text{Rh}1(1)(1@9)$
2: $\text{Al}3(1)(1@12) \text{Rh}2(1)(1@9)$
2: $\text{Rh}1(1)(1@9) \text{La}3(1)(1@13)$
Три структурные единицы
3: $\text{Al}1(1)(1@12) \text{Rh}1(0)(1) \text{Rh}3(1)(1@9)$
3: $\text{Al}1(1)(1@12) \text{Rh}1(1)(1@9) \text{Rh}3(0)(1)$
3: $\text{Al}1(1)(1@12) \text{Rh}1(1)(1@9) \text{Rh}3(1)(1@9)$
3: $\text{Rh}1(0)(1) \text{Rh}2(1)(1@9) \text{Rh}3(1)(1@9)$
3: $\text{Rh}1(1)(1@9) \text{Rh}2(1)(1@9) \text{Rh}3(0)(1)$
3: $\text{Rh}1(1)(1@9) \text{Rh}2(1)(1@9) \text{Rh}3(1)(1@9)$

Далее рассмотрен наиболее вариант самосборки с участием:

- колец  $K3(8d) = 0@3(\text{LaRhAl})$ ;
- удвоенных тетраэдров  $K6(4a) = 0@6(\text{La}_2\text{Rh}_2\text{Al}_2)$  из симметрически связанных кластеров  $K3(8d) = 0@3(\text{LaRhAl})$ ;
- тетраэдров  $K4(8d) = 0@4(\text{LaRhAl}_2)$ .

*Первичная цепь  $S_3^1$ .* Образование первичной цепи  $S_3^1$  проходит в плоскости  $XZ$  при связывании пентамеров из кластеров  $1K6(4a) + 2K4(8d) + 2K3(8d)$  направлении оси  $Z$  (рис. 2). Расстояние между центрами кластеров  $K6(4a)$  соответствует значению вектора трансляции  $c = 7.267 \text{ \AA}$ .

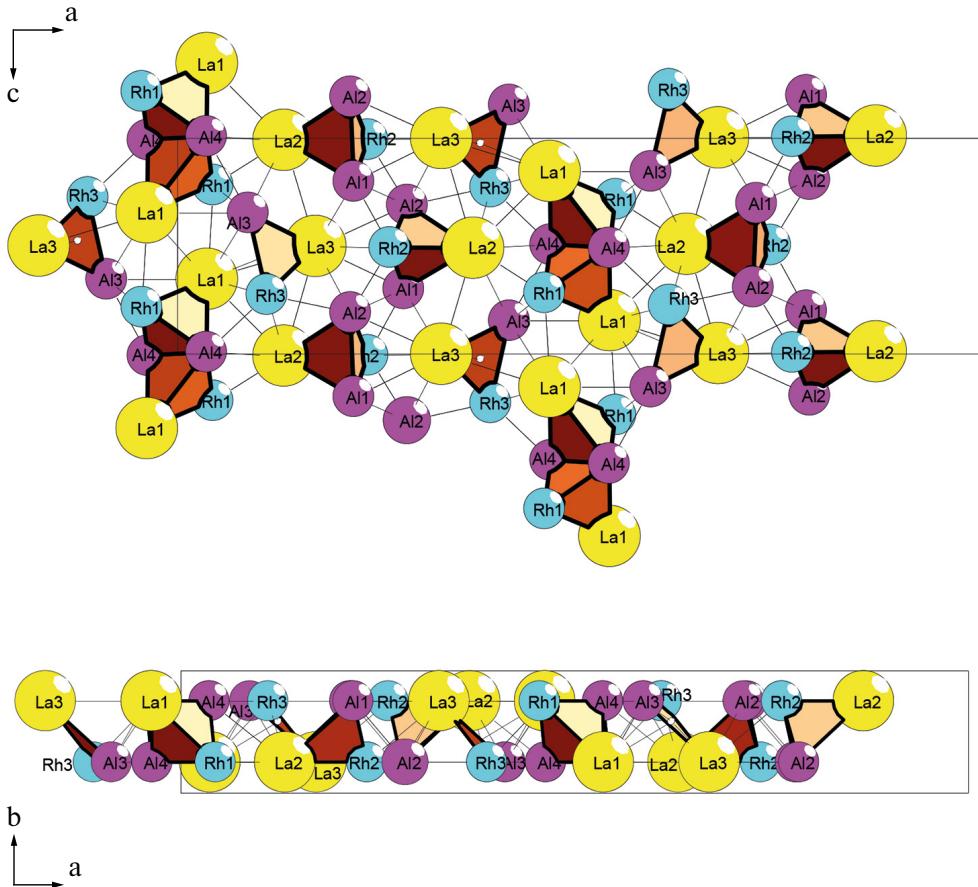


Рис. 2.  $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}$ -*oP40*. Слой  $S_3^2$ . Проекция на плоскости  $XZ$  и  $XY$ .

*Самосборка слоя  $S_3^2$ .* Образование микрослоя происходит в плоскости  $XZ$  при связывании цепей  $S_3^1$  со сдвигом в направлении оси  $Z$  (см. рис. 2). Удвоенное расстояние между осями первичных цепей  $S_3^1$  соответствует значению вектора трансляции  $c = 17.244 \text{ \AA}$ .

*Самосборка каркаса  $S_3^3$ .* Микрокаркас структуры формируется при связывании микрослоев  $S_3^2$ . Расстояние между слоями соответствует значению вектора трансляции  $b = 4.449 \text{ \AA}$ .

### Кристаллическая структура $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}$ -*oP40*

Значения координационных чисел для атомов Ca равны 15 (2 атома), атомов Sn – 12 (4 атома) и 14 (1 атом) и трех атомов Pt – 9, 9, 10.

Установлены 6 вариантов выделения кластерных структур с числом кластеров  $N = 1$  (1 вариант),  $N = 2$  (2 варианта),  $N = 3$  (3 варианта) (табл. 7).

Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки кластеров-прекурсоров в виде сдвоенных тетраэдров  $K6 = 0@6(\text{CaSn}_3\text{Pt}_2)$  и тетраэдров  $K4 = 0@4(\text{CaSn}_2\text{Pt})$  (рис. 3).

**Таблица 7.**  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}$ -*oP40*. Варианты кластерного представления кристаллической структуры с 1, 2, и 3 структурными единицами

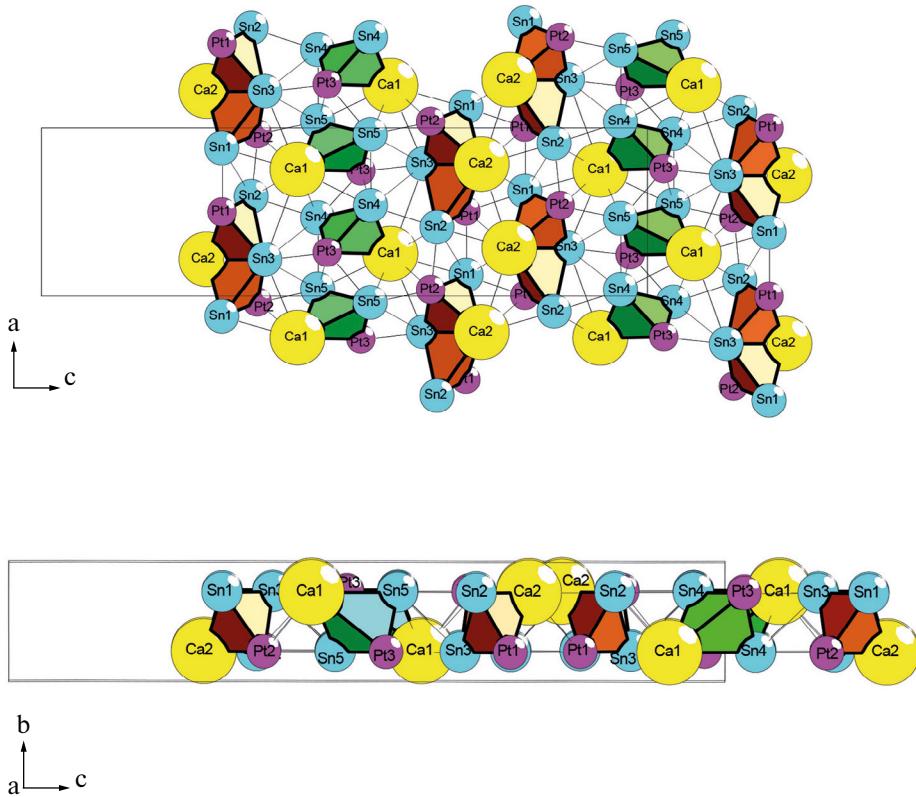
Одна структурная единица  
1: Sn3(1)(1@14)

Две структурные единицы  
2: Sn1(1)(1@12) Pt3(1)(1@9)  
2: Sn2(1)(1@12) Pt3(1)(1@9)

Три структурные единицы  
3: Pt1(0)(1) Pt2(1)(1@9) Pt3(1)(1@9)  
3: Pt1(1)(1@10) Pt2(0)(1) Pt3(1)(1@9)

**Слой  $S_3^2$ .** Образование микрослоя  $S_3^2$  происходит в плоскости  $XZ$  при комплементарном связывании тетramerов  $K6 + 2K4 + K6$  в направлении оси  $X$  (см. рис. 3). Расстояние между центрами кластеров-прекурсоров  $K6$  соответствует значению вектора трансляции  $c = 7.348 \text{ \AA}$  (см. рис. 1).

*Самосборка пакета  $S_3^3$ .* Микрокаркас структуры формируется при связывании микрослоев  $S_3^2$ . Расстояние между слоями соответствует значению вектора трансляции  $b = 4.455 \text{ \AA}$ .



**Рис. 3.**  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}$ -*oP40*. Слой  $S_3^2$ . Проекция на плоскости  $XZ$  и  $YZ$ .

*Самосборка слоя  $S_3^3$ .* Формирование слоя происходит при связывании пакетов  $S_3^2$  в направлении оси  $X$  (см. рис. 3). Удвоенное расстояние между центрами кластеров-прекурсоров  $K6$  первичных цепей  $S_3^1$  соответствует значению вектора трансляции  $c = 26.348 \text{ \AA}$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием метода разложения 3D-атомной сетки на кластерные структуры (пакет программ ToposPro) получены данные о комбинаторно возможных типах кластеров, участвующих в образовании кристаллических структур  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8-oP40$ ,  $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}-oP40$ ,  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}-oP40$ .

Для  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8-oP40$  рассмотрена самосборка кристаллической структуры с участием тримеров из шестиатомных кластеров  $K6(4a) = 0@6(\text{Li}_4\text{Cu}_2)$  и двух шестиатомных кластеров  $K6(8d) = 0@6(\text{CuLi}_5)$  и атомов-спейсеров Si.

Для кристаллической структуры  $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}-oP40$  рассмотрена самосборка, рассмотрен вариант самосборки с участием колец  $K3(8d) = 0@3(\text{LaRhAl})$ , сдвоенных тетраэдров  $K6(4a) = 0@6(\text{La}_2\text{Rh}_2\text{Al}_2)$  и тетраэдров  $K4(8d) = 0@4(\text{LaRhAl}_2)$ .

Для кристаллической структуры  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}-oP40$  рассмотрен вариант самосборки кристаллической структуры с участием образующих упаковки кластеров-прекурсоров в виде сдвоенных тетраэдров  $K6 = 0@6(\text{CaSn}_3\text{Pt}_2)$  и тетраэдров  $K4 = 0@4(\text{CaSn}_2\text{Pt})$ . Реконструирован симметрийный и топологический код процессов самосборки 3D-структур  $\text{Li}_{28}\text{Cu}_4\text{Si}_8-oP40$ ,  $\text{La}_{12}\text{Rh}_{12}\text{Al}_{16}-oP40$ ,  $\text{Ca}_8\text{Pt}_{12}\text{Sn}_{20}-oP40$  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. Slabon A., Budnyk S., Cuervo-Reyes E., Woerle M., Mensing C., Nesper R. Copper silicides with the highest lithium content:  $\text{Li}_7\text{CuSi}_2$  containing the 16-electron group  $[\text{CuSi}]^{7-}$  and  $\text{Li}_{7.3}\text{CuSi}_3$  with heterographene nets infinite (2)  $[\text{CuSi}]^{(3.3-)}$  // Angew. Chem. Int. ed. 2012. V. 51. P. 594–596.
5. Avzuragova V.A., Nesterenko S.N., Tursina A.I. LaRhAl,  $\text{La}_3\text{Rh}_3\text{Al}_4$ , 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. P. 252–254.
6. Hoffmann R.D., Kussmann D., Rodewald U.C., Poettgen R., Rosenhahn C., Mosel B.D. New stannides  $\text{CaTSn}_2$  ( $T = \text{Rh}, \text{Pd}, \text{Ir}$ ) and  $\text{Ca}_2\text{Pt}_3\text{Sn}_5$  – synthesis, structure and chemical bonding // Zeitschrift fuer Naturforschung, Teil B. Anorganische Chemie, Organische Chemie. 1999. V. 54. P. 709–717.

7. Poettgen R., Lang A., Hoffmann R.D., Kuennen B., Kotzyba G., Muellmann R., Mosel B., Rosenhahn C. The stannides YbPtSn and Yb<sub>2</sub>Pt<sub>3</sub>Sn<sub>5</sub> // Zeitschrift fuer Kristallographie – Crystalline Materials. 1999. V. 214. P. 143–150.
8. Von Schnerring H.G., Schwarz M., Nesper R. The lithium sodium silicide Li<sub>3</sub>NaSi<sub>6</sub> and the formation of allo-silicon // Journal of the Less-Common Metals. 1988. V. 137. P. 297–310.
9. Scherf Lavinia M., Riphaus Nathalie, Faessler Thomas F. Site-specific substitution preferences in the solid solutions Li<sub>12</sub>Si<sub>7-x</sub>Ge<sub>x</sub>, Li<sub>12-y</sub>Na<sub>y</sub>Si<sub>7</sub>, Na<sub>7</sub>LiSi<sub>8-z</sub>Ge<sub>z</sub>, and Li<sub>3</sub>NaSi<sub>6-v</sub>Ge<sub>v</sub> // Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie. 2016. V. 642. P. 1143–1151.
10. Wang M., McDonald R., Mar A. Ternary early-transition-metal palladium pnictides Zr<sub>3</sub>Pd<sub>4</sub>P<sub>3</sub>, Hf<sub>3</sub>Pd<sub>4</sub>P<sub>3</sub>, HfPdSb, and Nb<sub>3</sub>Pd<sub>4</sub>P<sub>4</sub> // Inorganic Chemistry. 2000. V. 39. P. 4936–4941.
11. Chumak I., Warczok P., Richter K.W. The crystal structures of Hf(3+/-delta)Nb(4+/-delta)As<sub>3</sub> and Hf<sub>7.2</sub>Nb<sub>3.8</sub>As<sub>4</sub>: Members of a homologous series combining W-type, Mg-type and Al B2-type building blocks // Journal of Solid State Chemistry. 2010. V. 183. P. 557–564.
12. Yarmolyuk Ya.P., Gladyshevskii E.I. Crystal structure of compounds R<sub>10</sub>Ga<sub>3</sub>Co<sub>7</sub> (R = Y, La) // Kristallografiya. 1979. V. 24. P. 455–460.
13. Mueller W., Volk K. Die Struktur der Phase Na<sub>3.7</sub>Sn (ca. Na<sub>15</sub>Sn<sub>4</sub>) // Zeitschrift fuer Naturforschung, Teil B. Anorganische Chemie, Organische Chemie. 1975. V. 30. P. 494–496.
14. Keane P.M., Ibers J.A. Synthesis and structure of a new ternary telluride, Cu<sub>1.85</sub>Zr<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> // Inorganic Chemistry. 1991. V. 30. P. 3096–3098.
15. Liu Shengfeng, Corbett J.D. Ba<sub>2</sub>AuTl<sub>7</sub>: an intermetallic compound with a novel condensed structure // Inorganic Chemistry. 2004. V. 43. P. 2471–2473.
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 RbNa<sub>8</sub>Ga<sub>3</sub>As<sub>6</sub>-oP72, Sr<sub>2</sub>Ca<sub>4</sub>In<sub>3</sub>Ge<sub>6</sub>-oP56, and Sr<sub>8</sub>Li<sub>4</sub>In<sub>4</sub>Ge<sub>8</sub>-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 Ce<sub>56</sub>Ni<sub>24</sub>Si<sub>44</sub>-mS124 and Ba<sub>10</sub>La<sub>2</sub>Si<sub>12</sub>-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 Sr<sub>12</sub>Mg<sub>20</sub>Ge<sub>20</sub>-oP52, Sr<sub>2</sub>LiInGe<sub>2</sub>-oP24, and Sr<sub>2</sub>Mg<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>-oP12 Family // Glass Phys Chem. 2023. V. 49 (Suppl 1). P. S17–S27.