

УДК 548, 546

КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ. НОВЫЕ КЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ K6 И K3 ДЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР СЕМЕЙСТВА $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-oP52}$, $\text{Sr}_2\text{LiInGe}_2\text{-oP24}$, $\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-oP12}$

© 2024 г. Шевченко В. Я.¹, Илюшин Г. Д.²

¹Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН,
Россия, 199034, Санкт-Петербург, наб. Макарова, 2
e-mail: shevchenko@isc.nw.ru

²Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника»,
Россия, 119333, Москва, Ленинский пр., 59
e-mail: gdilyushin@gmail.com

Поступила в редакцию 28.08.2023

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлены комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур семейства $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-oP52}$ ($a = 21.707 \text{ \AA}$, $b = 4.483 \text{ \AA}$, $c = 18.456 \text{ \AA}$, $V = 1795.88 \text{ \AA}^3$, Pnma), семейства $\text{Sr}_2\text{LiInGe}_2\text{-oP24}$ ($a = 7.503$, $b = 4.619$, $c = 17.473 \text{ \AA}$, $V = 605.63 \text{ \AA}^3$, Pnma), семейства $\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-oP12}$ ($a = 10.882 \text{ \AA}$, $c = 5.665 \text{ \AA}$, $V = 670.8 \text{ \AA}^3$, Pnma). Для кристаллической структуры $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-oP52}$ установлены 17 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц 2 (5 вариантов), 3 (6 вариантов) и 4 (6 вариантов). Рассматривается вариант самосборки с участием тройных колец $K3 = 0@3(\text{SrMgGe})$ и $K3 = 0@3(\text{Mg}_2\text{Ge})$ и двоянных тетраэдров $K6 = 0@6(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)$ с симметрией -1 , образующих супраполиэдрический кластер-тример А из кластеров $(\text{SrMgGe})(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)(\text{SrMgGe})$ и кластер-тример В из кластеров $(\text{Mg}_2\text{Ge})(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)(\text{Mg}_2\text{Ge})$. Для кристаллической структуры $(\text{Sr}_2\text{Li})_2(\text{InGe}_2)_2\text{-oP24}$ определены каркас-образующие полиэдры в виде двоянных тетраэдров $K6 = 0@6(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)$ и тройные кольца $K3 = 0@3(\text{SrMgGe})$. Для кристаллической структуры $\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-oP12}$ определены каркас-образующие полиэдры в виде двоянных тетраэдров $K6 = 0@6(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D-структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь $\rightarrow$ слой $\rightarrow$ каркас.

Ключевые слова: $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-oP52}$, $\text{Sr}_2\text{LiInGe}_2\text{-oP24}$, $\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-oP12}$, самосборка кристаллической структуры, кластерные прекурсоры K6, K3

DOI: 10.31857/S0132665124010034, **EDN:** SIPGCT

ВВЕДЕНИЕ

Кристаллохимическое семейство Sr-содержащих интерметаллидов насчитывает 1985 соединений, из которых 205, 188 и 184 интерметаллиды образуются с участием атомов Ge, Al и Si [1, 2].

Наиболее кристаллохимически сложное семейство Sr-содержащих интерметаллидов состоит из $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-oP52}$ ($\text{Sr}_{12}(\text{Mg}_{17.9}\text{Li}_{2.1})\text{Ge}_{20}\text{-oP52}$), $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Si}_{20}\text{-oP52}$

($\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{17.8}\text{Li}_{2.2}\text{Si}_{20}\text{-}oP52$), $\text{Eu}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-}oP52$ и $\text{Eu}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Si}_{20}\text{-}oP52$ ([3–14], табл. 1). В элементарной ячейке $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-}oP52$ находятся 52 атома, и для 13 кристаллографически независимых атомов последовательность Вайкоффа имеет вид c^{13} . В частных позициях пространственной группы $Pnma$ в двух плоскостях m (010) на высоте $\frac{1}{4}$ и $\frac{3}{4}$ находится по 26 атомов. Координационные числа трех атомов Sr — 17, 17, 15, пяти атомов Mg — 12, пяти атомов Ge — 9.

Кристаллохимическое семейство четверных интерметаллидов включает в себя интерметаллиды $A_2\text{LiInGe}_2\text{-}oP24$, $A = \text{Yb, Ca, Sr}$ (табл. 1). Последовательность Вайкоффа для 6 кристаллографически независимых атомов имеет вид c^6 . В элементарной ячейке находятся 24 атома — по 12 атомов в плоскостях m (010) на высоте $\frac{1}{4}$ и $\frac{3}{4}$ в позициях $4c$. Значения координационных чисел для атома Li = 12, двух атомов Sr — 15, атома In — 12 и двух атомов Ge — 9.

Кристаллохимически семейство тройных интерметаллидов $A_2B_2C_2\text{-}oP12$ состоит из 189 интерметаллидов [1, 2], среди которых — $\text{Ca}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-}oP12$, $\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-}oP12$, $\text{Eu}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-}oP12$, $\text{Yb}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-}oP12$ (табл. 1). В элементарной ячейке 12 атомов. Последовательность Вайкоффа для 3 кристаллографически независимых атомов имеет вид c^3 . В частных с-позициях пространственной группы $Pnma$ в двух плоскостях m (010) на высоте 0.25 и 0.75 находится по 6 атомов.

В настоящей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллических структур семейства $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-}oP52$, семейства $\text{Sr}_2\text{LiInGe}_2\text{-}oP24$ и семейства $\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-}oP12$. Впервые для кристаллических структур этих интерметаллидов установлены структурные инварианты — кластеры-прекурсоры $K6$ и $K3$ и осуществлена реконструкция процессов самосборки кристаллических структур в виде первичная цепь $\rightarrow$ слой $\rightarrow$ каркас.

Работа продолжает исследования [15–19] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супрамолекулярном уровне, а также

Таблица 1. Кристаллохимические данные тройных и четверных интерметаллидов. Выделены значения коротких векторов трансляций

Интерметаллид	Индекс Пирсона	Группа симметрии	Параметры элементарной ячейки, Å и градусы	$V, \text{\AA}^3$
$\text{Yb}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2$ [3]	$oP12$	$Pnma$	7.474, 4.436 , 8.343	276.6
$\text{Ca}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2$ [4]	$oP12$	$Pnma$	7.502, 4.445 , 8.360	278.8
$\text{Eu}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2$ [3]	$oP12$	$Pnma$	7.741, 4.573 , 8.436	298.6
$\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2$ [4]	$oP12$	$Pnma$	7.800, 4.560 , 8.550	304.1
$\text{Yb}_2\text{LiInGe}_2$ [5]	$oP24$	$Pnma$	7.182, 4.390 , 16.758	528.4
$\text{Ca}_2\text{Li}(\text{InGe}_2)$ [6]	$oP24$	$Pnma$	7.251, 4.438 , 16.902	543.9
$\text{Sr}_2\text{Li}(\text{InGe}_2)$ [6]	$oP24$	$Pnma$	7.503, 4.619 , 17.473	605.6
$(\text{Eu}_2\text{Sr}_6)\text{Li}_4\text{Ge}_{12}$ [7]	$oP24$	$Pnnm$	11.078, 11.862, 4.617	583.6
$\text{Ba}_6(\text{Mg}_{4.9}\text{Li}_{3.1})\text{Ge}_{12}$ [8]	$mC26$	$C2/m$	12.320, 4.626 , 11.499, $\beta=91.89$	655.0
$\text{Eu}_2\text{LiMgSn}_3$ [9]	$oC28$	Cmcm	4.782 , 20.717, 7.743	767.1
$\text{Sr}_2(\text{LiMg})\text{Sn}_3$ [9]	$oC28$	Cmcm	4.843 , 20.923, 7.805	790.9
$\text{Ca}_{6.5}\text{Li}_4\text{Mg}_{15.5}\text{Zn}_{13}$ [10]	$cP39$	$Pm\text{-}3$	9.387, 9.387, 9.387	827.1
$\text{Ba}_8\text{Li}_{13}\text{GaSb}_{12}$ [11]	$mC34$	$C2/m$	18.065, 4.941 , 13.012, $\beta=126.73$	930.8
$\text{Sr}_{12}(\text{Mg}_{18}\text{Li}_2)\text{Ge}_{20}$ [12]	$oP52$	$Pnma$	14.607, 4.518 , 18.634	1229.7
$\text{Ca}_8(\text{Mg}_2\text{Li})\text{Ge}_8$ [13]	$oP76$	$Pnma$	21.998, 4.474 , 18.560	1826.6
$\text{Ba}_4(\text{Li}_2\text{Cd}_3)\text{Sb}_6$ [14]	$oC60$	Cmcm	4.886 , 21.423, 17.968	1880.7

геометрического и топологического анализа кристаллических структур с применением современных компьютерных методов [20].

МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ TorosPro [20], 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 -ой координационной сфере данного атома. Полученные значения координационных последовательностей атомов для $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}$ -*oP52*, $\text{Sr}_2\text{LiInGe}_2$ -*oP24* и $\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2$ -*oP12* приведены в табл. 2.

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 нанокластеров-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.

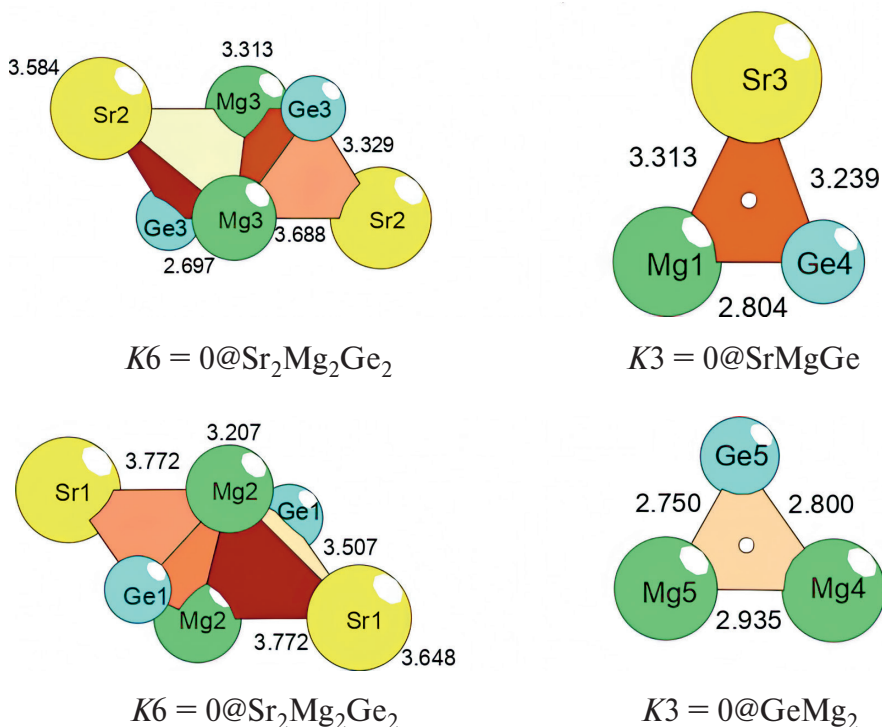
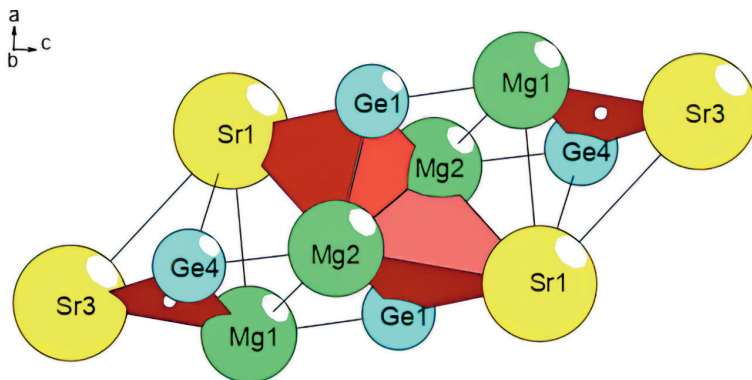
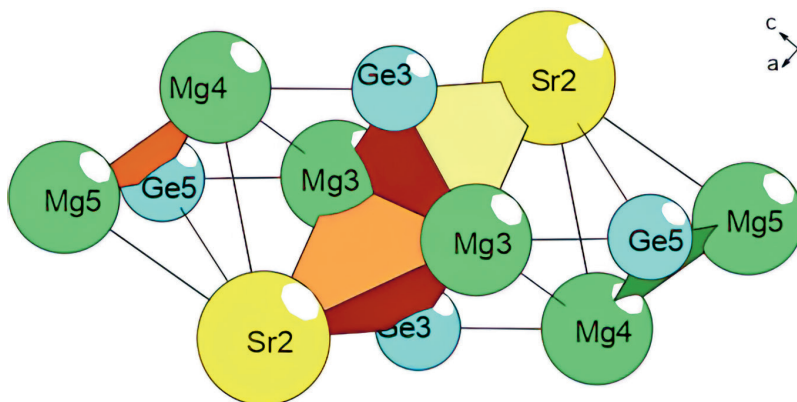


Рис. 1. $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}$ -*oP52*. Кластерные прекурсоры. Цифры — длины связей атомов в Å.



Тример А = $(\text{SrMgGe})(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)(\text{SrMgGe})$



Тример В = $(\text{Mg}_2\text{Ge})(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)(\text{Mg}_2\text{Ge})$

Рис. 2. $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}$ -oP52. Супраполиэдрические кластеры.

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 химической эволюции системы, далее — механизм самосборки из цепи слоя (2-й уровень) и затем из слоя трехмерного каркаса структуры (3-й уровень).

Кристаллическая структура $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}$ -oP52

Для кристаллической структуры $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}$ -oP52 установлено 17 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц 2 (5 вариантов), 3 (6 вариантов) и 4 (6 вариантов) (табл. 3).

Таблица 2. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллических структурах интерметаллидов

Интерметаллид	Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
			N1	N2	N3	N4	N5
$\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-}oP52$	Mg1	4Mg + 4Ge + 4Sr	12	49	118	208	341
	Mg2	4Mg + 4Ge + 4Sr	12	52	116	225	327
	Mg3	4Mg + 4Ge + 4Sr	12	47	103	203	337
	Mg4	3Mg + 4Ge + 5Sr	12	49	107	208	337
	Mg5	3Mg + 4Ge + 5Sr	12	51	107	207	325
	Ge1	4Mg + 1Ge + 4Sr	9	49	109	212	324
	Ge2	3Mg + 2Ge + 6Sr	9	51	107	212	325
	Ge3	4Mg + 1Ge + 4Sr	9	44	100	192	322
	Ge4	5Mg + 4Sr	9	45	115	202	331
	Ge5	6Mg + 3Sr	9	45	104	202	323
	Sr1	8Mg + 7Ge + 2Sr	17	50	131	211	348
	Sr2	8Mg + 8Ge + 1Sr	17	45	120	217	340
$\text{Sr}_2\text{LiInGe}_2\text{-}oP24$	Li1	2Li + 4Ge + Sr5 + 1In	12	44	108	207	329
	Ge1	1Li + 6Sr + 2In	9	47	108	203	331
	Ge2	3Li + 4Sr + 2In2	9	43	108	194	313
	Sr1	3Li + 5Ge + 4Sr + In3	15	50	116	210	340
	Sr2	2Li + 5Ge + 4Sr + 4In4	15	51	121	216	342
	In1	1Li + 4Ge + 7Sr	12	49	107	208	327
$\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-}oP12$	Sr1	6Mg + 5Ge + 4Sr	15	50	111	202	315
	Ge1	4Mg + 5Sr	9	45	108	192	302
	Mg	2Mg + 4Ge + 6Sr	12	47	113	200	313

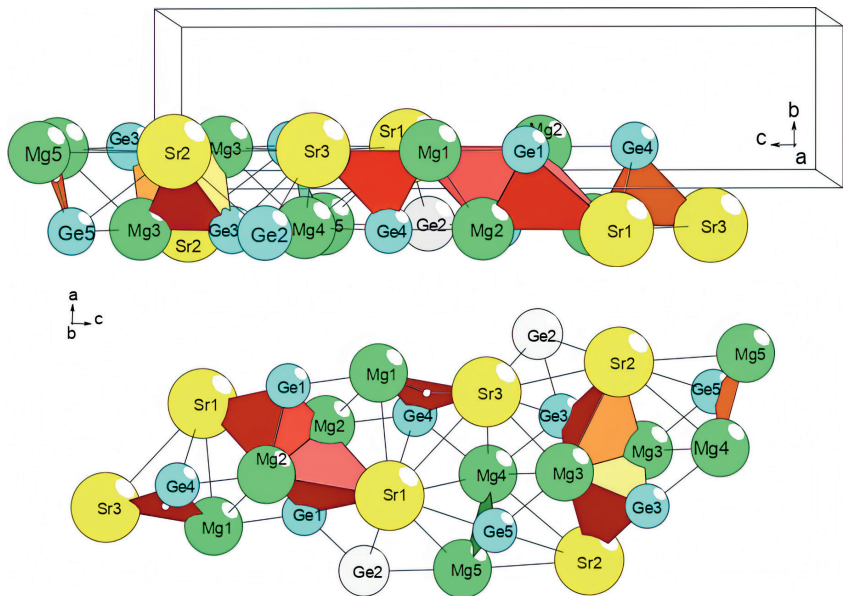


Рис. 3. $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-}oP52$. Первичная цепь S_3^1 из связанных тримеров А и тримеров В. Показаны атомы-спейсеры Ge2.

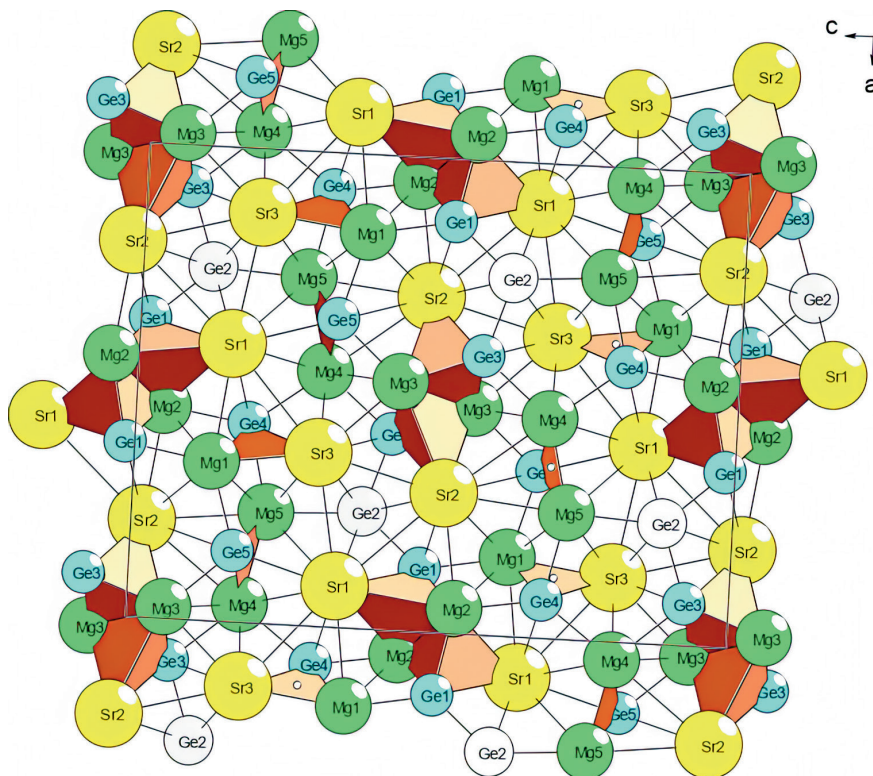


Рис. 4. $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}\text{-}oP52$. Слой S_3^2 .

Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием колец $K3 = 0@\text{SrMgGe}$ (с центром в позиции 8d (0.12, 0.08, 0.70)) и $K3 = 0@\text{Mg}_2\text{Ge}$ (с центром в позиции 8d (0.14, 0.08, 0.19)), а также сдвоенных тетраэдров $K6 = 0@6(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)$ с симметрией -1 и центрами частных позиций 4a (0, 0, 0) и 4b (0, 0, 0.5) (рис. 1).

Установлено два супраполиэдрических кластера — тример А, состоящий из трех чередующихся кластеров $(\text{SrMgGe})(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)(\text{SrMgGe})$, и тример В, состоящий из трех чередующихся кластеров $(\text{Mg}_2\text{Ge})(\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2)(\text{Mg}_2\text{Ge})$ (рис. 2).

Последовательность самосборки кристаллической структуры — следующая.

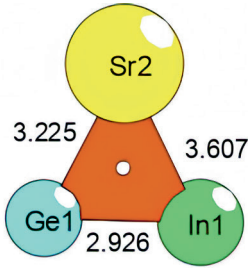
Образование первичной цепи S_3^1 происходит при связывании тримеров А с тримерами В в направлении оси Y с индексом связанности $Pc = 8$ с участием атомов спейсеров Ge2 (рис. 3).

Образование слоя S_3^2 происходит при связывании первичных цепей $S_3^1 + S_3^1$ в направлении оси X (рис. 4).

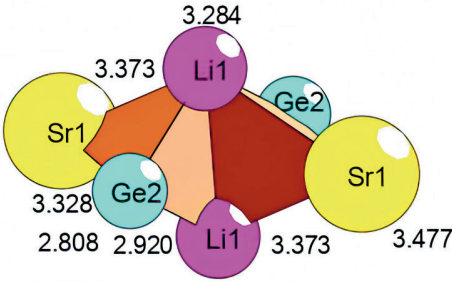
Образование каркаса S_3^2 происходит при связывании слоев $S_3^2 + S_3^2$ в направлении оси Z.

Таблица 3. $\text{Sr}_{12}\text{Mg}_{20}\text{Ge}_{20}$ -*oP52*. Варианты кластерного представления кристаллической структуры с 2, 3, 4 структурными единицами. Указан центральный атом или центр пустоты полиэдрического кластера, число его оболочек (в первой скобке) и количество атомов в оболочке (во второй скобке)

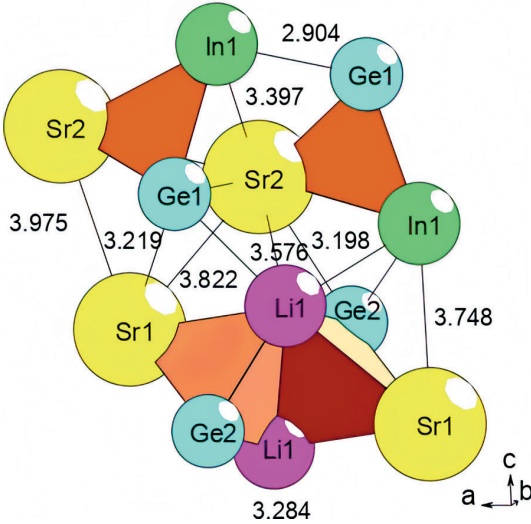
2 структурные единицы	4 структурные единицы
$\text{Ge3}(1)(1@9) \text{Sr1}(1)(1@16)$	$\text{Ge1}(0)(1) \text{Ge3}(1)(1@9) \text{Ge4}(1)(1@9) \text{Ge5}(0)(1)$
$\text{Ge4}(1)(1@9) \text{Sr2}(1)(1@17)$	$\text{Ge1}(0)(1) \text{Ge3}(1)(1@9) \text{Ge4}(1)(1@9) \text{Ge5}(1)(1@9)$
$\text{Mg1}(1)(1@12) \text{Ge3}(1)(1@9)$	$\text{Ge1}(1)(1@9) \text{Ge3}(0)(1) \text{Ge4}(1)(1@9) \text{Ge5}(1)(1@9)$
$\text{Mg4}(1)(1@12) \text{Ge1}(1)(1@9)$	$\text{Ge1}(1)(1@9) \text{Ge3}(1)(1@9) \text{Ge4}(0)(1) \text{Ge5}(1)(1@9)$
$\text{Sr1}(1)(1@16) \text{Sr2}(1)(1@17)$	$\text{Ge1}(1)(1@9) \text{Ge3}(1)(1@9) \text{Ge4}(1)(1@9) \text{Ge5}(0)(1)$
3 структурные единицы	$\text{Ge1}(1)(1@9) \text{Ge3}(1)(1@9) \text{Ge4}(1)(1@9) \text{Ge5}(1)(1@9)$
$\text{Ge1}(1)(1@9) \text{Ge5}(0)(1) \text{Sr3}(1)(1@14)$	
$\text{Ge1}(1)(1@9) \text{Ge5}(1)(1@9) \text{Sr3}(1)(1@14)$	
$\text{Ge2}(1)(1@9) \text{Ge4}(1)(1@9) \text{Ge5}(1)(1@9)$	
$\text{Mg1}(1)(1@12) \text{Mg4}(1)(1@12) \text{Ge2}(0)(1)$	
$\text{Mg1}(1)(1@12) \text{Mg4}(1)(1@12) \text{Ge2}(1)(1@9)$	
$\text{Mg5}(1)(1@12) \text{Ge1}(1)(1@9) \text{Ge3}(1)(1@9)$	



$K3 = 0@ \text{SrInGe}$



$K6 = 0@ \text{Sr}_2\text{Li}_2\text{Ge}_2$



$K6 + 2K3$

Рис. 5. $\text{Sr}_2\text{LiInGe}_2$ -*oP24*. Кластерные прекурсоры.

Кристаллическая структура $Sr_2LiInGe_2$ -oP24

Определены структурные единицы в виде удвоенных тетраэдров $K6 = 0@Sr_2Li_2Ge_2$, с центром в позиции 4a и симметрией -1 , и колец $K3 = 0@SrInGe$, с центром в позиции 8d (0.20, 0.58, 0.23) (рис. 5).

Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием супракластеров-тримеров $A = K6 + 2 K3$ (рис. 5).

Последовательность самосборки кристаллической структуры — следующая.

Самосборка первичных цепей S_3^1 происходит в результате связывания супракластеров-тримеров $A = K6 + 2 K3$ с индексом связывания $Pc = 8$ в направлении оси X (рис. 6).

Самосборка слоя S_3^2 . Образование слоя S_3^2 происходит при связывании цепей $S_3^1 + S_3^1$ в направлении оси Z (рис. 6).

Самосборка каркаса S_3^3 . Каркас структуры S_3^3 формируется при упаковке слоев $S_3^2 + S_3^2$ в направлении оси Y.

Кристаллическая структура $Sr_2Mg_2Ge_2$ -oP12

Для кристаллической структуры интерметаллида $Sr_2Mg_2Ge_2$ -oP12 установлена самосборка с участием удвоенных тетраэдров $K6 = 0@6(Sr_2Mg_2Ge_2)$ с симметрией -1 и центром в частной позиции 4b (0, 0, 0.5) (рис. 7).

Последовательность самосборки кристаллической структуры — следующая.

Образование первичной цепи S_3^1 происходит при связывании кластеров $K6$ с индексом связанности $Pc = 6$ (рис. 7).

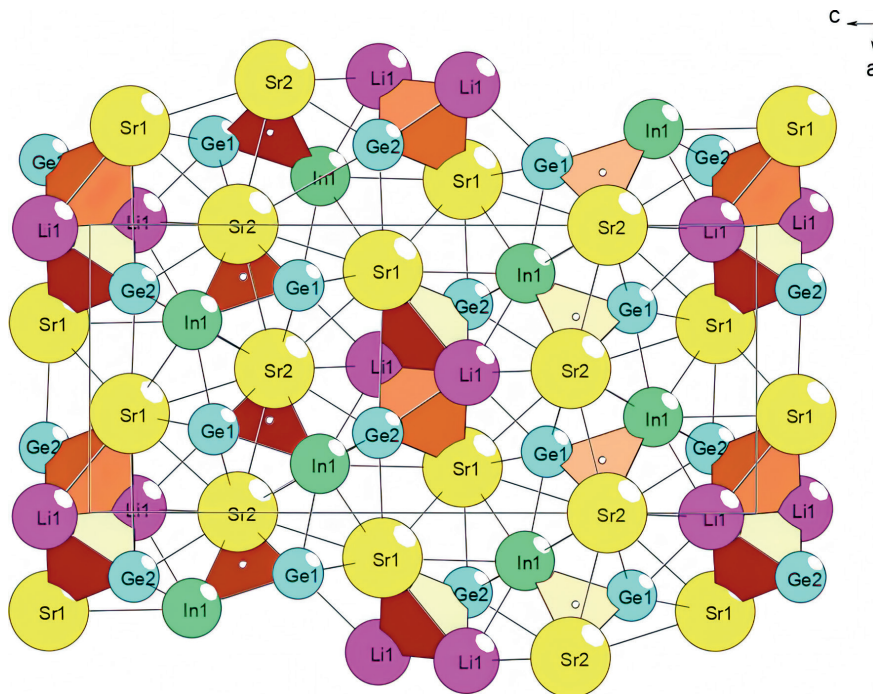


Рис. 6. $Sr_2LiInGe_2$ -oP24. Слой S_3^2 .

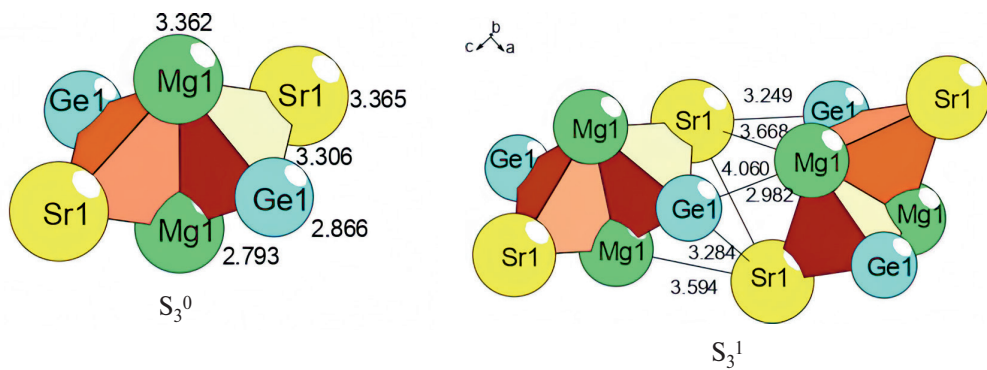


Рис. 7. $\text{Mg}_2\text{Sr}_3\text{Ge}_2\text{-oP12}$. Кластерные прекурсоры.

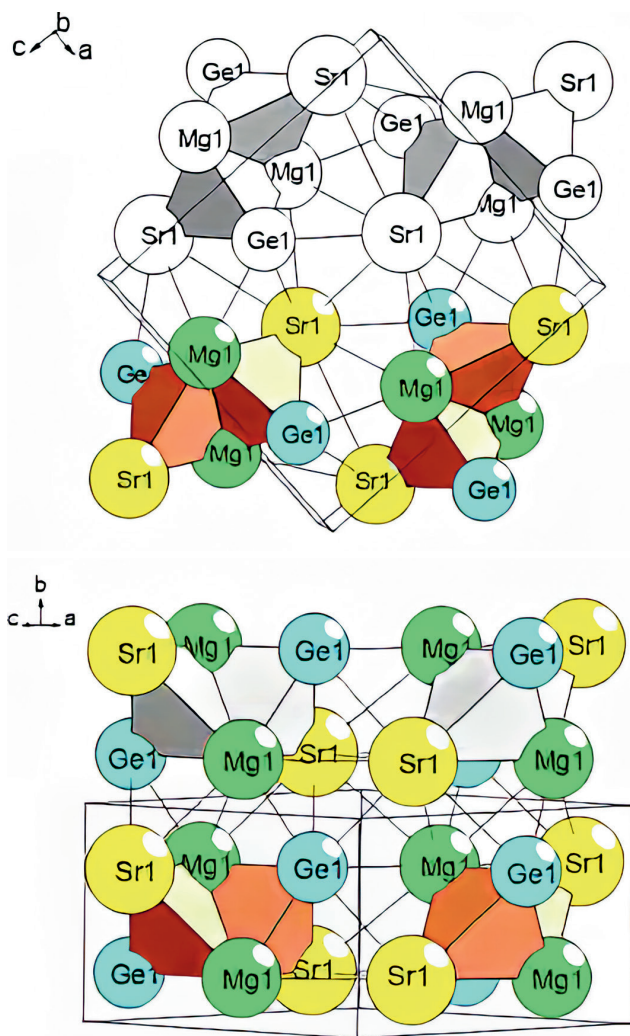


Рис. 8. $\text{Sr}_2\text{Mg}_2\text{Ge}_2\text{-oP12}$. Слои S_3^2 (две проекции).

Образование слоя S_3^2 происходит при связывании первичных цепей $S_3^1 + S_3^1$ с индексом связанности $Pc = 6+6+1 = 13$ (рис. 8).

Образование каркаса S_3^3 происходит при связывании слоев $S_3^2 + S_3^2$ в направлении оси Y.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретически получены данные о комбинаторно возможных типах кластеров с использованием метода разложения в 3D атомной сетке соединений на кластерные структуры (пакет программ TorosPro). Для $Sr_{12}Mg_{20}Ge_{20}$ -oP52 рассматривается самосборка кристаллической структуры с участием структурных инвариантов в виде двоекных тетраэдров $K6 = 0@6(Sr_2Mg_2Ge_2)$ и в виде тройных колец $K3 = 0@3(SrMgGe)$ и $K3 = 0@3(Mg_2Ge)$, образующих супраполиэдрический кластер-тример A из трех кластеров $(SrMgGe)(Sr_2Mg_2Ge_2)(SrMgGe)$ и тример B из трех кластеров $(Mg_2Ge)(Sr_2Mg_2Ge_2)(Mg_2Ge)$. Для кристаллической структуры $Sr_2LiInGe_2$ -oP24 определены каркас-образующие полиэдры в виде двоекных тетраэдров $K6 = 0@6(Sr_2Mg_2Ge_2)$ и тройные кольца $K3 = 0@SrInGe$. Для кристаллической структуры $Sr_2Mg_2Ge_2$ -oP12 определены каркас-образующие полиэдры в виде двоекных тетраэдров $K6 = 0@6(Sr_2Mg_2Ge_2)$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D-структур из кластеров-прекурсоров в виде первичная цепь $\rightarrow$ слой $\rightarrow$ каркас.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Моделирование самосборки кристаллических структур выполнено при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения работ по государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. Кластерный анализ выполнен при поддержке Российского научного фонда (РНФ № 21-73-30019).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

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 (PCDIC)* ASM International: Materials Park, OH.
3. Merlo F., Pani M., Fornasini M.L. RMX compounds formed by alkaline earths, europium and ytterbium. III. Ternary phases with M= Mg, Hg and X= Si, Ge, Sn, Pb // Journal of Alloys and Compounds. 1993. V. 196. P. 145–148.
4. Eisenmann B., Schaefer H., Weiss A. Der Uebergang vom "geordneten" Anti-Pb Cl₂-Gitter zum Anti-Pb F Cl- Gitter: Ternaere Phasen A B X der Erdalkalimetalle mit Elementen der 4. Hauptgruppe (A=Ca, Sr, Ba; B=Mg; X=Si, Ge, Sn, Pb) // Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie. 1972. V. 391. P. 241–254.
5. You Tae-Soo, Bobev S. Diytterbium(II) lithium indium(III) digermanide, $Yb_2LiInGe_2$ // Acta Crystallographica E. Structure Reports Online 2010. V. 66. P. i43.

6. Mao J.-G., Xu Z.-H., Guloy A.M. Synthesis and crystal structure of $Ae_3LiInGe_2$ ($Ae=Ca, Sr$): new Zintl phases with a layered silicate-like network // *Inorg. Chem.* 2001. V. 40. P. 4472–4477.
7. Xie Qinxing, Nesper R. Structural and electronic characterizaion of Eu_2LiSi_3 , Eu_2LiGe_3 and $Eu_{(x)}Sr_{(2-x)}LiGe_3$ // *Z. Anorg. Allg. Chem.* 2006. V. 632. P. 1743–1751.
8. Zuercher F., Nesper R. Crystal structure of hexabarium pentamagnesium trilitiumdodecagermanide, $Ba_6Mg_{4.9}Li_{3.1}Ge_{12}$ // *Zeitschrift fuer Kristallographie — New Crystal Structures.* 2001. V. 216. P. 505–506.
9. You Tae-Soo, Bobev S. cis-trans Germanium chains in the intermetallic compounds $A Li(1-x)In(x)Ge_2$ and $A_2(Li(1-x)In(x))_2Ge_3$ ($A=Sr, Ba, Eu$) — experimental and theoretical studies // *Journal of Solid State Chemistry.* 2010. V. 183. P. 2895–2902.
10. Remennik S., Xu Chun Jie, Brant R., Meshi L., Shechtman D. Crystal structure of a new quaternary Mg-Zn-Ca-Li phase // *Intermetallics.* 2012. V. 22. P. 62–67.
11. Todorov I., Sevov S.C. Synthesis and characterization of $Na_2Ba_4Ga_2Sb_6$ and $Li_{13}Ba_8GaSb_{12}$ // *Zeitschrift fuer Kristallographie.* 2006. V. 221. P. 521–526.
12. Zuercher F., Nesper R. Crystal structure of dodecastrontium octadecamagnesium dilithiumicosagermanide, $Sr_{12}Mg_{17.9}Li_{2.1}Ge_{20}$ // *Z. Kristallogr. New Cryst. Struct.* 1999. V. 214. P. 411–412.
13. Zuercher F., Nesper R. Crystal structure of octacalcium dimagnesium monolithium octasilicide $Ca_8Mg_{2.0}Li_{1.0}Si_8$ and octacalcium dimagnesium monolithiumoctagermanide $Ca_8Mg_{1.82}Li_{1.18}Ge_8$ // *Z. Kristallogr. New Cryst. Struct.* 2001. V. 216. P. 507–509.
14. Makongo Julien P.A., You Tae-Soo, He Hua, Suen Nian-Tzu, Bobev S. New lithium-containing pnictides with 1-d infinite chains of supertetrahedral clusters: synthesis, crystal and electronic structure of $Ba_4LiCd_3Pn_6$ ($Pn = P, As$ and Sb) // *European Journal of Inorganic Chemistry* 2014. V. 2014. P. 5113–5124.
15. Ilyushin G.D. New Cluster Precursors — K5 Pyramids and K4 Tetrahedra — for Self-Assembly of Crystal Structures of $Mn_4(ThMn_4)(Mn_4)-tI26$, $Mn_4(CeCo_4)(Co_4)-tI26$, and $MoNi_4-tI10$ Families // *Crystallography Reports.* 2022. V. 67. P. 1088–1094.
16. Shevchenko V.Y., 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. Ilyushin G.D. Intermetallic Compounds Na_kM_n ($M = K, Cs, Ba, Ag, Pt, Au, Zn, Bi, Sb$): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports.* 2020. V. 65. № 4. P. 539–545.
18. 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.
19. Ilyushin G.D. Intermetallic Compounds Cs_nM_k ($M = Na, K, Rb, Pt, Au, Hg, Te$): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports.* 2022. Vol. 67. Issue 7. P. 1075–1087.
20. 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.