

КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ:
КЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ $K3$, $K4$, $K5$, $K7$, $K8$ ДЛЯ САМОСБОРКИ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}\text{-}mC90$,
 $\text{Te}_4\text{Lu}_{28}\text{-}oC32$, $\text{Lu}_3(\text{TeLu}_3)\text{Lu}_2\text{-}hP9$ И $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-}cF8$

© 2023 г. В. Я. Шевченко¹, *, Г. Д. Илюшин², **

¹Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН,
наб. Макарова, 2, Санкт-Петербург, 199034 Россия

²Научно-исследовательский центр “Кристаллография и фотоника”,
Ленинский пр., 59, Москва, 119333 Россия

*e-mail: shevchenko@isc.nw.ru

**e-mail: gdilyushin@gmail.com

Поступила в редакцию 19.12.2022 г.

После доработки 01.02.2023 г.

Принята к публикации 08.02.2023 г.

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-}oF8$ ($Fm\text{-}3m$, $V = 211.0 \text{ \AA}^3$), $\text{Te}_4\text{Lu}_{28}\text{-}oC32$ ($Cmcm$, $V = 908.3 \text{ \AA}^3$), $\text{Lu}_3(\text{TeLu}_3)\text{Lu}_2\text{-}hP9$ ($P\text{-}62m$, $V = 908.3 \text{ \AA}^3$), $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}\text{-}mC90$ ($C12/m1$, $V = 2467.2 \text{ \AA}^3$). Для кристаллической структуры $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-}oF8$ установлены кластеры-прекурсоры $K8 = 0@Te_4Lu_4$ с симметрией $\text{-}43m$, для $\text{Te}_4\text{Lu}_{28}\text{-}oC32$ – тетраэдрические кластеры-прекурсоры $K4 = 0@Lu_4$ и $K4 = 0@TeLu_3$ с симметрией 2 и m , для $\text{Lu}_3(\text{TeLu}_3)\text{Lu}_2$ – кластеры-прекурсоры $K7 = 0@Lu_3(\text{TeLu}_3)$ с симметрией $3m$ и спейсеры Lu . Для кристаллической структуры $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}\text{-}mC90$ установлены кластеры-прекурсоры в виде пирамиды $K5 = 0@Lu_5$ с симметрией 2, тетраэдры $K4 = 0@Lu_4$ с симметрией 2, тетраэдры $K4 = 0@TeLu_3$ и тетраэдры $K4 = 0@Te_2Lu_2$, и кольца $K3 = 0@TeLu_2$, участвуют в образовании супракластеров-тримеров. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь $\rightarrow$ $\rightarrow$ слой $\rightarrow$ каркас.

Ключевые слова: интерметаллиды $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-}oF8$, $\text{Te}_4\text{Lu}_{28}\text{-}oC32$, $\text{Lu}_3(\text{TeLu}_3)\text{Lu}_2\text{-}hP9$ и $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}\text{-}mC90$, самосборка кристаллической структуры, кластеры-прекурсоры $K3$, $K4$, $K5$, $K7$, $K8$

DOI: 10.31857/S0132665122600947, EDN: SLCWBB

ВВЕДЕНИЕ

В двойных системах $A\text{--}T$ ($T = \text{Se}, \text{Te}$) установлено образование 623 селенидов и 614 теллуридов A_xT_y с атомами $A = \text{Sc}, \text{Y}, \text{Zr}, \text{U}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$, лантанидами $Ln = \text{La--Lu}$ [1, 2]. Наиболее многочисленным является кристаллохимическое семейство $A_2T_2\text{-}cF8$ с пр. группой $Fm\text{-}3m$, насчитывающее 36 селенидов и 37 теллуридов.

В системе $Lu\text{--}Te$ (табл.1) интерметаллиды $\text{LuTe}_3\text{-}oC16$ [3], $\text{LuTe}_2\text{-}tP6$ [3], $\text{Lu}_2\text{Te}_3\text{-}oF80$ [4] и $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-}cF8$ [5] имеют кристаллохимических аналогов среди интерметаллидов Sc_xTe_y (табл. 2, [9–14]) и интерметаллидов Y_xTe_y (табл. 3, [15–17]) и среди других интерметаллидов с большими атомами A .

Таблица 1. Система Lu–Te. Кристаллографические данные

Соединение	Группа симметрии	Параметры элементарной ячейки в Å, угол в градусах	$V, \text{Å}^3$
LuTe ₃ -oC16 [3]	<i>Cmcm</i>	4.277, 25.137, 4.278	459.9
LuTe ₂ -tP6 [3]	<i>P4/nmm</i>	4.222, 4.222, 8.807	157.0
Lu ₂ Te ₃ -oF80 [4]	<i>Fddd</i>	12.022, 8.499, 25.497	2605.2
Lu ₄ Te ₄ -cF8 [5]	<i>Fm-3m</i>	5.953, 5.953, 5.953	211.0
Lu ₈ Te- <i>hP9</i> [6]	<i>P-62m</i>	9.000, 9.000, 3.687	258.6
Te ₄ Lu ₂₈ -oC32 [6]	<i>Cmcm</i>	3.742, 12.278, 19.770	908.3
Lu ₆₆ Te ₂₄ -mC90 [7]	<i>C12/m1</i>	30.412, 3.950, 21.073, 102.96	2467.2
Lu- <i>cI2</i> [8]	<i>Im-3m</i>	3.900, 3.900, 3.900	59.32

Таблица 2. Система Sc–Te. Кристаллографические данные

Соединение	Группа симметрии	Параметры элементарной ячейки в Å, угол в градусах	$V, \text{Å}^3$
Sc ₂ Te ₃ -oF80 [10]	<i>Fddd</i>	8.222, 11.629, 24.608	2353.0
Sc ₄ Te ₄ -cF8 [1]	<i>Fm-3m</i>	5.817, 5.817, 5.817	196.8
ScTe- <i>hP4</i> [1]	<i>P6₃/mmc</i>	4.130, 4.130, 6.749	99.7
ScTe- <i>hP8</i> [11]	<i>P6₃/mmc</i>	4.097, 4.097, 13.602	197.7
Sc ₂ Te- <i>oP36</i> [12]	<i>Pnma</i>	20.178, 3.919, 10.675	844.1
Sc ₈ Te ₃ -mC88 [13]	<i>C12/m1</i>	28.842, 3.852, 22.352, 122.51	2094.0
Sc ₉ Te ₂ -oC88 [14]	<i>Cmc2₁</i>	7.758, 15.654, 17.283	2098.8

Три кристаллические структуры Te₄Lu₂₈-oC32 (TeLu₇, *Cmcm*, $V = 908.3 \text{ Å}^3$) [6], Lu₃(TeLu₃)Lu₂-*hP9* (TeLu₈, *P-62m*, $V = 908.3 \text{ Å}^3$) [6], Lu₆₆Te₂₄-mC90 (Lu₁₁Te₄, *C12/m1*, $V = 2467.2 \text{ Å}^3$) [7] не имеют кристаллохимических аналогов.

Кристаллические структуры TeLu₇-oC32 и TeLu₈-*hP9* рассмотрены в [6] как новые варианты замещения атомов в металлическом литеции Lu [8].

Кристаллическая структура Lu₆₆Te₂₄-mC90 в [7] интерпретирована как слоистая и проведено ее сравнение со слоистыми структурами Sc₈Te₃-mC88 [13] и Ti₁₁Se₄-mS90 [18].

В настоящей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллических структур Lu₂Te₂-cF8, TeLu₇-oC32, TeLu₈-*hP9*, Lu₆₆Te₂₄-mC90. Установлены кластеры-прекурсоры *K3*, *K4*, *K5*, *K7*, *K8* участвующие в самосборке кристаллических

Таблица 3. Система Y–Te. Кристаллографические данные

Соединение	Группа симметрии	Параметры элементарной ячейки в Å	$V, \text{Å}^3$
YTe ₃ -oC16 [15]	<i>Cmcm</i>	4.303, 25.490, 4.303	472.0
YTe ₂ -tP6 [3]	<i>P4/nmm</i>	4.291, 4.291, 8.912	164.1
Y ₂ Te ₃ -oF80 [4]	<i>Fddd</i>	12.228, 8.645, 25.935	2741.6
YTe-cF8 [16]	<i>Fm-3m</i>	6.095, 6.095, 6.095	226.4
Y ₇ Te ₂ -oP36 [17]	<i>Pnma</i>	21.328, 4.056, 11.401	986.3

Таблица 4. $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-}cF8$. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Te1	6 Lu	6	50	138	296	404
Lu1	6Te + 12Lu	18	74	170	306	482

Таблица 5. $\text{Te}_4\text{Lu}_{28}\text{-}oC32$. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Te1	2Te + 9Lu	11	42	93	176	279
Lu1	1Te + 11Lu	12	45	105	183	291
Lu2	2Te + 11Lu	13	46	102	182	287
Lu3	12Lu	12	47	103	185	290
Lu4	3Te + Lu1	13	46	99	188	289

структур. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь → слой → каркас.

Работа продолжает исследования [19–23] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супраполиэдрическом уровне и геометрического и топологического анализа кристаллических структур с применением современных компьютерных методов.

МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ *TorosPro* [24], 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 $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-}cF8$, $\text{Te}_4\text{Lu}_{28}\text{-}oC32$, $\text{Lu}_3(\text{TeLu}_3)\text{Lu}_2\text{-}hP9$, $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}\text{-}mC90$, приведены в табл. 4–7.

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.

СИММЕТРИЙНЫЙ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ КОД (ПРОГРАММА) САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Использованный нами метод моделирования кристаллической структуры основан на определении иерархической последовательности ее самосборки в кристаллографи-

Таблица 6. $\text{TeLu}_8\text{-}hP9$. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Te1	2Te + 9Lu	11	41	110	191	305
Lu1	2Te + 12Lu	14	50	114	198	314
Lu2	1Te + 12Lu	13	49	112	201	311
Lu3	11Lu	11	47	104	197	311

Таблица 7. $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}\text{-}mC90$. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Te1	4Te + 8Lu	12	47	107	200	316
Te2	2Te + 9Lu	11	47	106	197	319
Te3	4Te + 7Lu	11	46	108	200	320
Te4	5Te + 7Lu7	12	45	114	200	331
Te5	3Te + 9Lu	12	46	109	210	336
Te6	4Te + 8Lu	12	44	106	201	317
Lu1	4Te + 10Lu	14	52	116	207	337
Lu2	3Te + 10Lu	13	51	111	207	338
Lu3	5Te + 12Lu	17	55	119	212	336
Lu4	3Te + 11Lu	14	51	117	209	339
Lu5	4Te + 11Lu	15	55	118	207	342
Lu6	2Te + 12Lu	14	57	123	227	348
Lu7	1Te + 13Lu	14	53	130	238	356
Lu8	4Te + 10Lu	14	50	121	216	340
Lu9	4Te + 10Lu	14	50	118	209	337
Lu10	4Te + 9Lu	13	54	122	219	347
Lu11	2Te + 12Lu	14	54	118	215	331
Lu12	3Te + 11Lu	14	53	118	214	339
Lu13	2Te + 12Lu	14	51	117	208	336
Lu14	1Te + 13Lu	14	50	119	217	343
Lu15	4Te + 11Lu	15	51	118	216	340
Lu16	2Te + 12Lu	14	52	114	208	335
Lu17	14Lu	14	52	112	204	328

ческом 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-ой уровень) и затем из слоя — трехмерного каркаса структуры (3-й уровень).

Кристаллическая структура $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-oF8}$

Пространственная группа $Fm-3m$ (но. 225) характеризуется набором элементов с точечной симметрией $g = m-3m, -43m, mmm$ и др. Индекс Пирсона соответствует $cF8$, т.е. в элементарной ячейке находится 8-ми атомный кластер $K8$. Атомы Lu и Te занимают позиции $4a$ (0, 0, 0) и $4b$ (1/2, 1/2, 1/2) с симметрией $m-3m$.

Кластер-прекурсор $K8 = 0@Te_4(Lu_4)$ представляет собой тетраэдр Lu_4 на гранях которого находятся атомы Te (рис. 1). Длины связей атомов $Lu-Lu$ в тетраэдре 4.209 Å и $Lu-Te = 3 \times 2.977$ Å (рис. 1). В локальном окружении атома Te находятся 6 атомов Lu, атома Lu — 12 атомов Lu и 6Te (табл. 5).

В элементарной ячейке $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-oF8}$ находится один атомный кластер $K8$. Центр кластера расположен в позиции $8c$ (1/4, 1/4, 3/4) с симметрией $-43m$.

Первичная цепь S_3^1 . Первичная цепь S_3^1 формируется в результате связывания кластеро-прекурсоров $K8 + K8$ с индексом связности $P_c = 8$.

Самосборка слоя S_3^2 . Образование микрослоя $S_3^2 = S_3^1 + S_3^1$ происходит связыванием параллельно расположенных цепей. При связывании первичных цепей индекс связности $P_c = 8 + 8 + 2$ (рис. 1).

Самосборка каркаса S_3^3 . Микрокаркас структуры S_3^3 формируется при упаковке (без сдвига) микрослоев. Расстояние между микрослоями соответствует значению параметра кубической ячейки.

Кристаллическая структура $\text{Te}_4\text{Lu}_{28}\text{-oC32}$

В элементарной ячейке $\text{Te}_4\text{Lu}_{28}$ находятся 32 атома. В локальном окружении атома Te находятся 11 атомов (2Te + 9Lu), атома Lu1 находятся 12 атомов (1Te + 11Lu), атома Lu2 находятся 13 (2Te + 11Lu), атома Lu3 — 12 Lu, атома Lu4 — 3Te + 10Lu (табл. 5). Длины связей атомов в кристаллической структуре приведены на рис. 2, 3.

Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры из образующих упаковки 4-атомных тетраэдрических кластеро-прекурсоров $K4(2) = 0@Lu_4$ и $K4(m) = 0@TeLu_3$ с симметрией 2 и m (рис.2).

Первичная цепь S_3^1 . Самосборка первичных цепей из кластеро-прекурсоров $K4(2)$ и $K4(m)$ происходит в направлении кратчайшей оси a с индексом связанности кластеро-прекурсоров $P_c = 8$ (равному числу связей: 1 Te—Te + 7 Lu—Lu) и 8 Lu—Lu (рис. 3). Расстояние между центрами кластеро-прекурсоров $K4(2)$ и $K4(m)$ соответствует значению вектора трансляции $a = 3.742$ Å.

Самосборка слоя S_3^2 . Образование микрослоя S_3^2 происходит при связывании первичных цепей в плоскости элементами симметрии $g = -1$.

Самосборка каркаса S_3^3 . Микрокаркас структуры формируется при связывании двух микрослоев S_3^2 в направлении оси X (рис. 3).

Кристаллическая структура $\text{Lu}_3(\text{TeLu}_3)\text{Lu}_2\text{-hP9}$

В элементарной ячейке $\text{Lu}_3(\text{TeLu}_3)\text{Lu}_2$ находятся 9 атомы. В локальном окружении атома Te находятся 11 атомов (2Te + 9Lu), атома Lu1 находятся 15 атомов (2Te + 10Lu), атома Lu2 — 13 (1Te + 12Lu), атома Lu3 — 11Lu (табл. 6). Длины связей атомов в кристаллической структуре приведены на рис. 4.

Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры из образующих упаковки 7-атомных кластеро-прекурсоров $K7 = 0Lu_3(\text{TeLu}_3)$ с участием атомоспейсеров Lu2 (рис. 4).

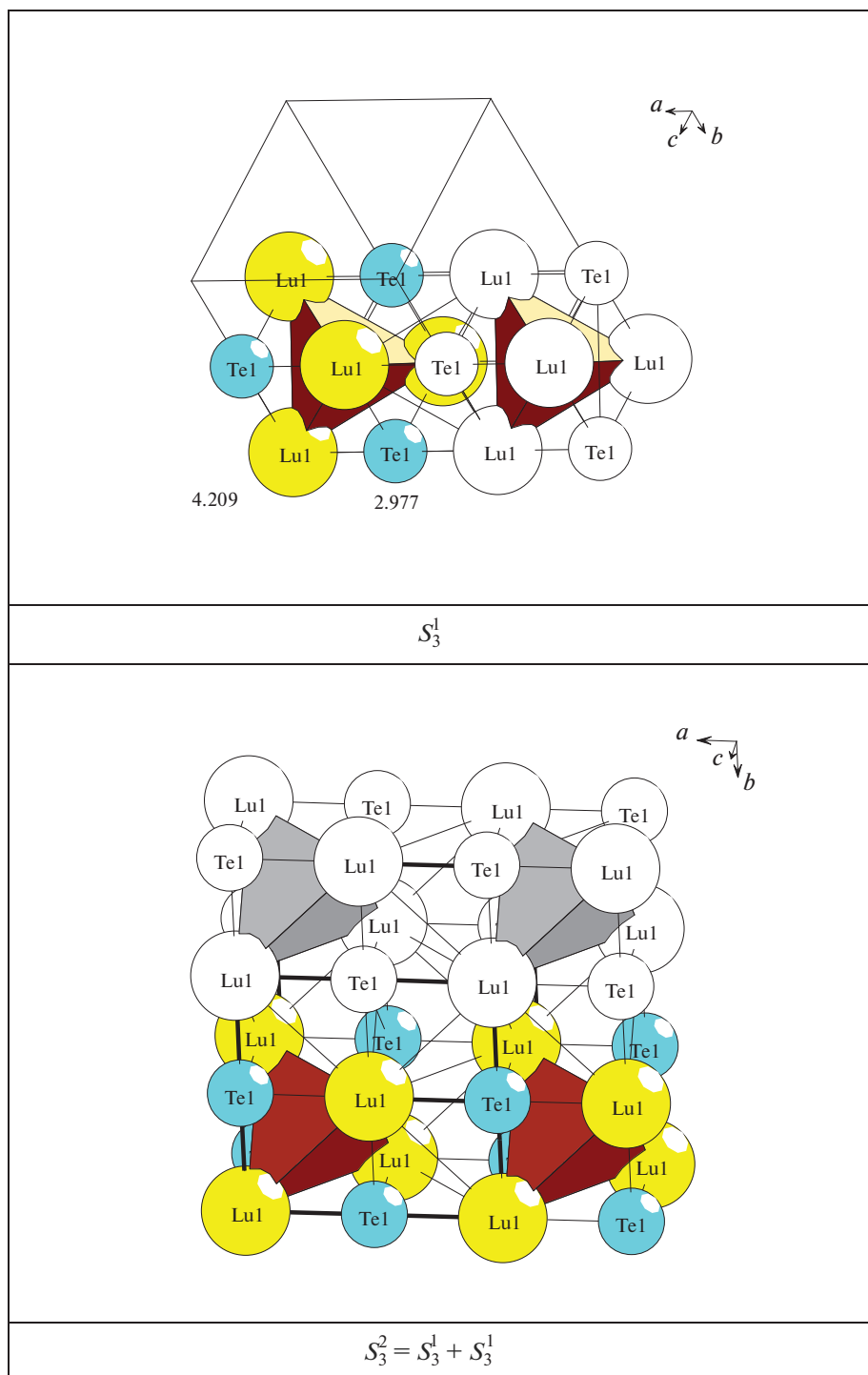


Рис. 1. Кристаллическая структура $\text{Te}_4\text{Lu}_4\text{-cF8}$.

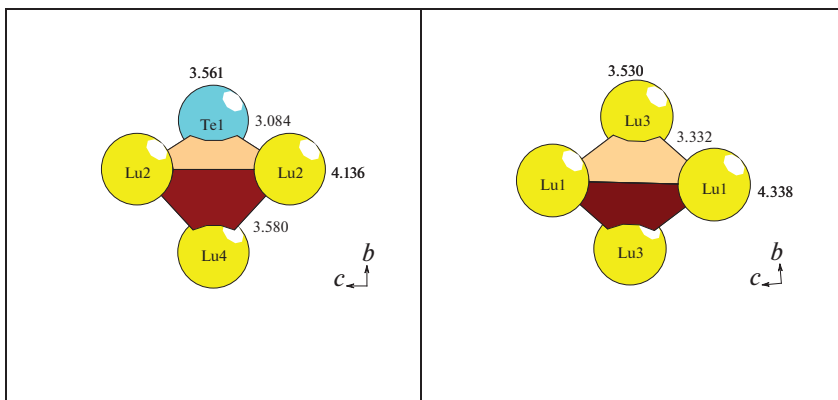


Рис. 2. Кристаллическая структура $\text{Lu}_7\text{Te}-\sigma\text{C}_{32}$.

Кластер-прекурсор. Центр кластера-прекурсора $K7$ находится в частной позиции $2e$ ($0, 0, 1/8$) с симметрией $g = 3m$ (рис. 4). На трех гранях тетраэдра TeLu_3 расположены большие атомы Lu2 (с КЧ = 15), образующие связи с атомом Te и двумя атомами Lu1. Атомы-спейсеры Lu3 связаны с атомами Lu1 и Lu2.

Первичная цепь S_3^1 . Самосборка первичных цепей из кластеров $K7$ происходит в направлении кратчайшей оси Z с индексом связанности кластеров $P_c = 9$ (рис. 4). Атомы-спейсеры Lu3, расположенные между кластерами $K7$, увеличивают индекс связанности кластеров P_c до $9 + 4 = 13$ (рис. 4). Расстояние между центрами кластеров $K7$ соответствует значению вектора трансляции $c = 3.687 \text{ \AA}$.

Самосборка слоя S_3^2 . Образование микрослоя происходит при связывании первичных цепей в плоскости XZ (рис. 4). Расстояние между центрами кластеров $K7$ из соседних цепей в направлении осей X соответствует значению вектора трансляции $a = 9.000 \text{ \AA}$.

Самосборка каркаса S_3^3 . Микрокаркас структуры формируется при связывании двух микрослоев S_3^2 (рис. 4). Многократная 3D-конденсация микрокаркаса из восьми кластеров-прекурсоров приводит к самосборке макрокристаллической структуры.

Кристаллическая структура $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}-m\text{C}_{90}$

Пространственная группа $C12/m1$ (№ 12) с симметрией частных позиций $2/m$ ($2a, 2b, 2c, 2d$), -1 ($4e, 4f$), 2 ($4g, 4h$), m ($4i$).

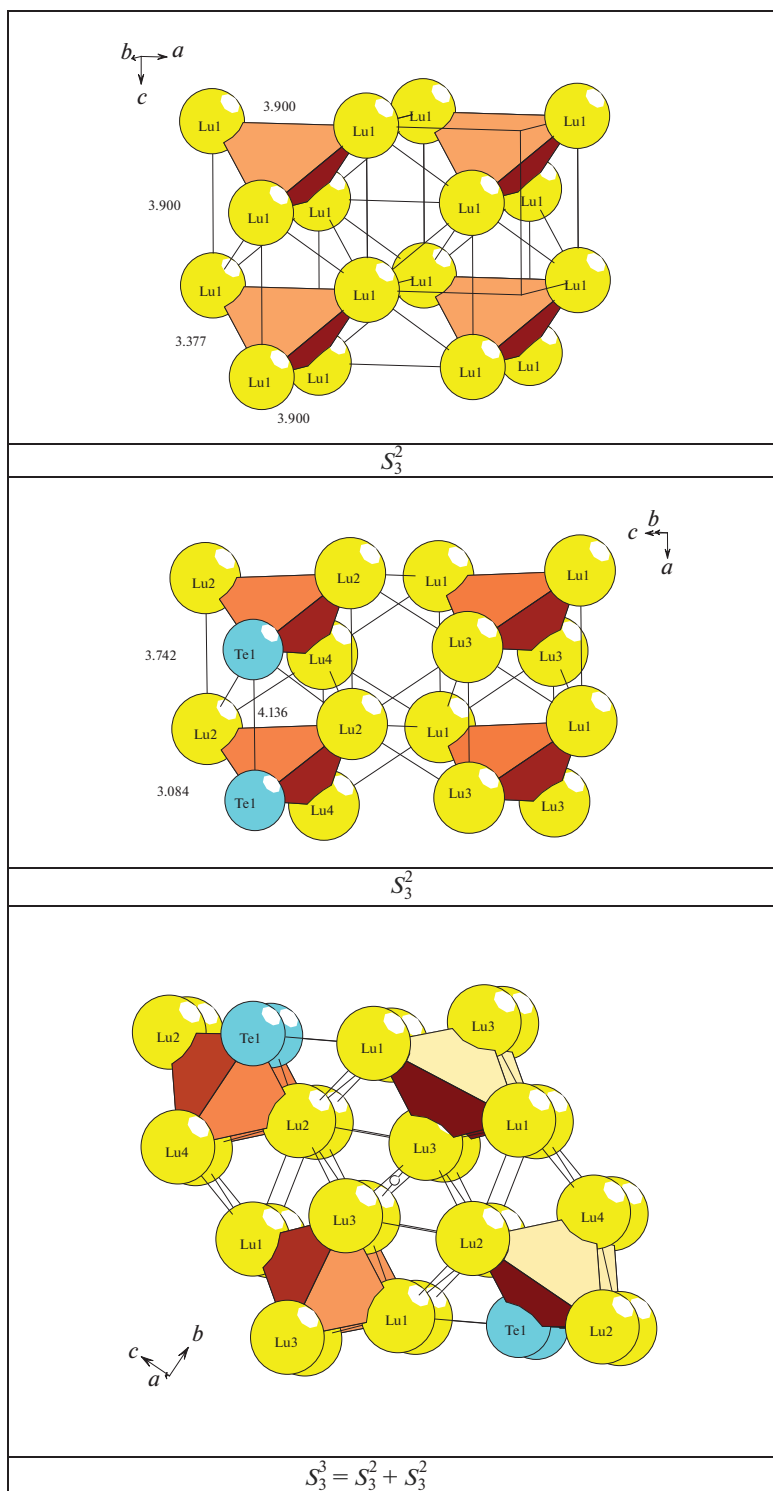
В элементарной ячейке $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}-m\text{C}_{90}$ находятся 90 атомов.

Установлены значения КЧ атомов Te равные 11 (2 атома) и 12 (4 атома), и КЧ атомов Lu равные 13 (2 атома), 14 (12 атомов), 15 (2 атома), 17 (1 атом) (табл. 7).

Из 23 кристаллографически независимых атомов, только атом Lu17 занимает позицию $2a$ ($0, 0, 0$) с симметрией $2/m$, все остальные — 16 атомов Lu и 6 атомов Te находятся в плоскостях m в позиции $4i$ ($x, 0, z$).

Определены 7 кристаллографически независимых полиэдров в виде пирамиды $K5(2) = 0@Lu_5$ с симметрией 2, тетраэдра $K4(2) = 0@Lu_4$ с симметрией 2, тетраэдра $K4-1 = 0@TeLu_3$, тетраэдра $K4-2 = 0@TeLu_3$, тетраэдра $K4-3 = 0@Te_2Lu_2$, тройных колец $K3-1 = @TeLu_2$ и $K3-2 = @TeLu_2$ (рис. 5).

Выделены супраполиэдрические кластеры — тримеры — образованные из трех кластеров (рис. 5):

Рис. 3. Кристаллическая структура Lu7Te-*o*C32 и Lu-*c*/2.

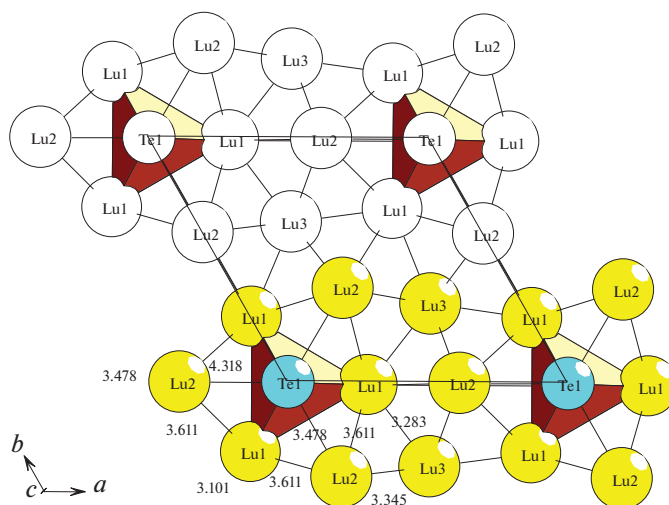
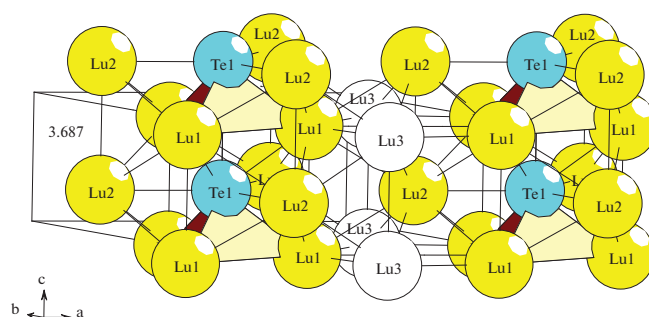


Рис. 4. Кристаллическая структура $\text{Lu}_3(\text{TeLu}_3)\text{P}_2\text{-hP9}$. Слой (сверху) и каркас (снизу).

SSU-1 = пирамида $0@\text{Lu}_5$ + 2 кольца $@\text{TeLu}_2$,

SSU-2 = тетраэдр $0@\text{Lu}_4$ + 2 кольца $@\text{TeLu}_2$,

SSU-3 = 2 тетраэдра $0@\text{TeLu}_3$ + тетраэдр $0@\text{Te}_2\text{Lu}_2$

SSU-4 = 2 тетраэдра $0@\text{TeLu}_3$ + тетраэдр $0@\text{Te}_2\text{Lu}_2$.

Самосборка слоя S_3^2 . Образование микрослоя происходит при связывании тримеров в плоскости XZ (рис. 5). Удвоенное расстояние между центром пирамиды $0@\text{Lu}_5$ и

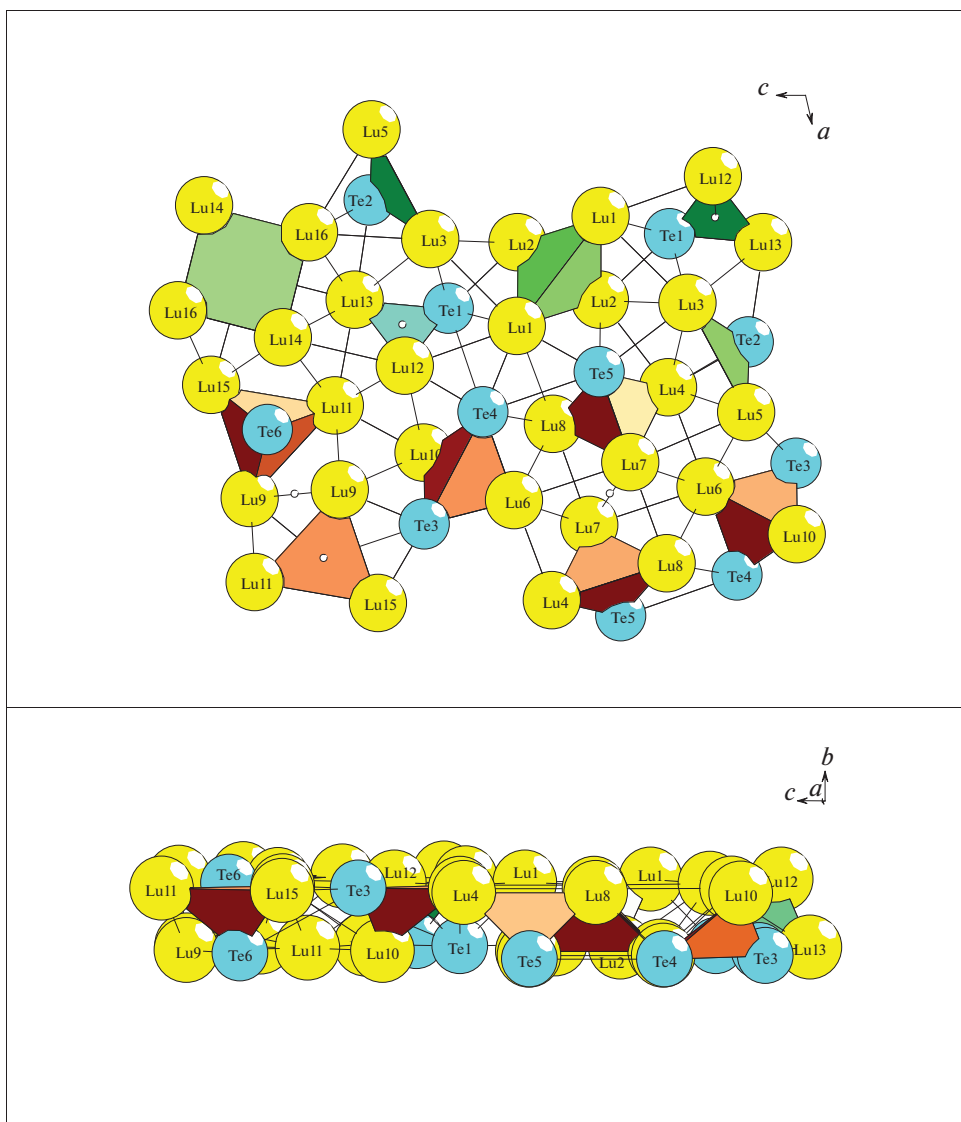


Рис. 5. Кристаллическая структура $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}\text{-}m\text{C90}$. Слой.

центром тетраэдра $0@Lu_4$ в направлении оси Z соответствует значению вектора трансляции $c = 21.073 \text{ \AA}$.

Самосборка каркаса S_3^3 . Микрокаркас структуры формируется при связывании двух микрослоев S_3^2 в направлении оси Y . Расстояние между слоями соответствует значению вектора трансляции $b = 3.950 \text{ \AA}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-}cF8$, $\text{TeLu}_7\text{-}oC32$ и $\text{TeLu}_8\text{-}hP9$ $\text{Lu}_{66}\text{Te}_{24}\text{-}m\text{C90}$. Для

кристаллической структуры $\text{Lu}_4\text{Te}_4\text{-}oF8$ установлены тетраэдрические кластеры-прекурсоры $K4 = 0@Te_2Lu_2$ с симметрией $-43m$, для $Te_4Lu_{28}\text{-}oC32$ – кластеры-прекурсоры $K4 = 0@Lu_4$ и $K4 = 0@TeLu_3$ с симметрией 2 и m , для кристаллической структуры $Lu_3(TeLu_3)Lu_2$ – кластеры-прекурсоры $K7 = 0@Lu_3(TeLu_3)$ с симметрией $3m$ и атомы-спейсеры Lu. Для кристаллической структуры $Lu_{66}Te_{24}\text{-}mC90$ установлены кластеры-прекурсоры в виде пирамиды $K5 = 0@Lu_5$ с симметрией 2, тетраэдры $K4 = 0@Lu_4$ с симметрией 2, тетраэдры $K4 = 0@TeLu_3$ и тетраэдры $K4 = 0@Te_2Lu_2$, и кольца $K3 = @TeLu_2$, участвующие в образовании супракластеров-тримеров. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь $\rightarrow$ слой $\rightarrow$ каркас.

Анализ самосборки кристаллических структур выполнен 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).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Inorganic crystal structure database (ICSD). Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ), Germany and US National Institute of Standard and Technology (NIST), USA.
2. Villars P., Cenzual K. Pearson's Crystal Data-Crystal Structure Database for Inorganic Compounds (PCDIC) ASM International: Materials Park, OH.
3. Cannon J.F., Hall H.T. High-pressure, high-temperature syntheses of selected lanthanide-tellurium compounds // Inorganic Chemistry. 1970. V. 9. P. 1639–1643.
4. Flahaut Jean, Laruelle Pierre, Pardo Marie Paule, Guittard Micheline. Les sulfures, seleniures et tellures L_2X_3 de terres rares, d'yttrium et descendant orthorhombiques du type Sc_2S_3 // Bulletin de la Societe Chimique de France. 1965. V. 1965. P. 1399–1404.
5. Hulliger F., Hull G.W.Jr. Superconductivity in rocksalt-type compounds // Solid State Communications. 1970. V. 8. P. 1379–1382.
6. Chen Ling, Corbett J.D. Lu_8Te and Lu_7Te . Novel substitutional derivatives of lutetium metal // J. Am. Chem. Soc. 2003. V. 125. P. 7794–7795.
7. Chen Ling, Xia Shengqing, Corbett J.D. Metal-rich chalcogenides. Synthesis, structure and bonding of the layered $Lu_{11}Te_4$. Comparison with the similar Sc_8Te_3 and $Ti_{11}Se_4$ // Inorg. Chem. 2005. V. 44. P. 3057–3062.
8. Miller A.E., Daane A.H. The High-Temperature Allotropy of Some Heavy Rare-Earth Metals // Transactions of the Metallurgical Society of AIME. 1964. V. 230. P. 568–572.
9. White J.G., Dismukes J.P. The Crystal Structure of Scandium Sesquitelluride // Inorg. Chem. 1965. V. 4. P. 1760–1763.
10. Assoud A., Kleinke H. The sesquitelluride Sc_2Te_3 // Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online 2006. V. 62. P. i17–i18.
11. Chai P., Corbett J.D. Two new compounds, $\beta\text{-ScTe}$ and Y_3Au_2 , and a reassessment of Y_2Au . // Acta Crystallogr., Sect. C. V. 67. P. i53–i55.
12. Maggard P.A., Corbett J.D. Sc_2Te : A novel example of condensed metal polyhedra in a metal-rich but relatively electron-poor compound // Angewandte Chemie (Edition international). 1997. V. 36. P. 1974–1976.
13. Maggard P.A., Corbett J.D. The synthesis, structure, and bonding of Sc_8Te_3 and Y_8Te_3 . Cooperative matrix and bonding effects in the solid state // Inorg. Chem. 1998. V. 37. P. 814–820.
14. Gupta S., Maggard P.A., Corbett J.D. A bismuth-stabilized metal-rich telluride $Lu_9Bi \sim 1.0Te \sim 1.0$ - Synthesis and characterization // European J. Inorganic Chemistry. 2010. V. 18. P. 2620–2625.
15. Pardo M.P., Flahaut J. Les tellures superieures des terres rares, de formules L_2Te_5 et LT_2 // Bulletin de la Societe Chimique de France. 1967. V. 1967. P. 3658–3664.
16. Brixner L.H. Structure and electrical properties of some new rare earth arsenides, antimonides and tellurides // J. Inorganic and Nuclear Chemistry. 1960. V. 15. P. 199–201.
17. Castro-Castro L.M., Chen Ling, Corbett J.D. Condensed rare-earth metal-rich tellurides. Extension of layered (Sc_6PdTe_2) -type compounds to yttrium and lutetium analogues and to Y_7Te_2 , the limiting binary member // J. Solid State Chem. 2007. V. 180. P. 3172–3179.

18. Weirich T.E., Ramlau R., Simon A., Hovmoeller S., Zou X.-D. A crystal structure determined to 0.02 Å accuracy by electron crystallography // *Nature (London)*. 1996. V. 382. P. 144–146.
19. Shevchenko V.Y., Blatov V.A., Ilyushin G.D. Structural Chemistry of Intermetallic Compounds: Geometric and Topological Analysis; Cluster Precursors K_4 , K_6 , and K_{21} ; and Self-Assembly of Crystal Structure Cs_2Hg_2 -*aP8*, Cs_2Hg_4 -*oI12*, and $Cs_{10}Hg_{38}$ -*tI48* // *Glass Physics and Chemistry*. 2022. V. 48. P. 155–162.
20. Ilyushin G.D. Intermetallic compounds Li_kM_n ($M = Ag, Au, Pt, Pd, Ir, Rh$): Geometrical and topological analysis, tetrahedral cluster precursors, and self-assembly of crystal structures // *Crystallography Reports*, 2020. V. 65. P. 202–210.
21. Shevchenko V.Y., Blatov V.A., Ilyushin G.D. Cluster self-organization of intermetallic systems: New two-layer nanocluster precursors $K_{64} = 0@8(Sn_4Ba_4)@56(Na_4Sn_{52})$ and $K_{47} = Na@Sn_{16}@Na_{30}$ in the crystal structure of $Na_{52}Ba_4Sn_{80}$ -*cF540* // *Glass Physics and Chemistry*. 2020. V. 46. P. 448–454.
22. 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.
23. 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.
24. 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.