

УДК 548, 546

КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ. НОВЫЕ КЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ K15, K11, K6 ДЛЯ САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}\text{-}t\text{P118}$ © 2024 г. Шевченко В. Я.¹, Илюшин Г. Д.²¹Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН, Россия, 199034, Санкт-Петербург, наб. Макарова, 2²Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника», Россия, 119333, Москва, Ленинский пр., 59

e-mail: gdilyushin@gmail.com, shevchenko@isc.nw.ru

Поступила в редакцию 02.08.2023

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлены комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур интерметаллидов $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}\text{-}t\text{P118}$ ($a = 11.076 \text{ \AA}$, $c = 36.933 \text{ \AA}$, $V = 4530.86 \text{ \AA}^3$, пр. группа $P 4/m\bar{b}m$). Для кристаллической структуры $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}\text{-}t\text{P118}$ установлено 195 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц 5 (24 варианта), 6 (86 вариантов) и 7 (85 вариантов). Рассмотрен вариант наиболее быстрой самосборки с участием трех типов кластеров-прекурсоров, формирующих слои из октаэдров $K6 = 0@6(\text{Yb}_4\text{Sn}_2)$ с симметрией $g = 4/m$, полиэдров $K11 = \text{Sn}@10(\text{Yb}_8\text{Sn}_2)$ с симметрией $g = -1$ и полиэдров $K15 = \text{Yb}@14(\text{Yb}_{10}\text{Sn}_4)$ с симметрией $g = 2\text{ mm}$, а также атомов-спейсеров Yb и Sn. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь \rightarrow слой \rightarrow каркас.

Ключевые слова: интерметаллид $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}\text{-}t\text{P118}$, самосборка кристаллической структуры, кластерные прекурсоры K15, K11, K6

DOI: 10.31857/S0132665124010023, **EDN:** SISIBI

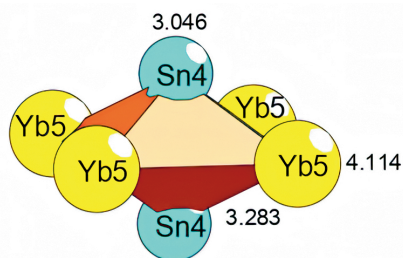
ВВЕДЕНИЕ

В системах Yb- M установлена кристаллизация 204 соединений с участием 37 элементов M [1, 2]. Наибольшее число интерметаллидов Yb_nM_m образуются с участием атомов 4В элементов: Si (10 соединений), Ge (9), Sn (8) (табл. 1, [3–11]).

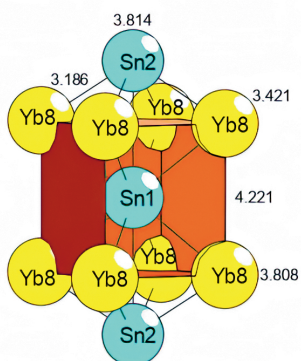
В системе Ca-Sn образуются шесть интерметаллидов, и два из них, $\text{CaSn}_3\text{-}c\text{P4}$ и $\text{Ca}_{36}\text{Sn}_{23}\text{-}t\text{P118}$, не имеют аналогов в системе Yb-Sn (табл. 1).

В четырех системах Yb- M с атомами $M = \text{Os}, \text{Re}, \text{Po}, \text{Be}$ образуется только по одному интерметаллиду $\text{YbOs}_2\text{-}h\text{P12}$ [12], $\text{YbRe}_2\text{-}h\text{P12}$ [13], YbPo-cF8 [14], $\text{YbBe}_{13}\text{-}c\text{F112}$ [15].

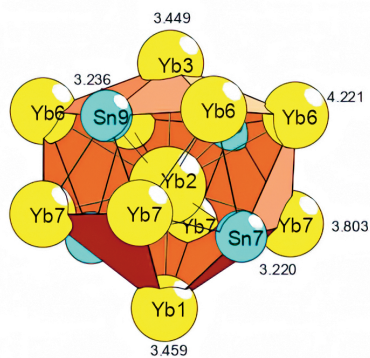
Среди интерметаллидов Yb_nM_m наиболее кристаллохимически сложной является кристаллическая структура $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}\text{-}t\text{P118}$ с параметрами элементарной ячейки: $a = 11.076 \text{ \AA}$, $c = 36.933 \text{ \AA}$, $V = 4530.86 \text{ \AA}^3$, пр. группа $P 4/m\bar{b}m$ [10]. Последовательность Вайкоффа для 17 кристаллографически независимых атомов — 8 атомов Yb и 9 атомов Sn — имеет вид $I^3 k^3 j^2 h g^2 f^3 e^3 b a$. Координационные



SSU K6 (2b, 4/m)



SSU K11(2a, 4/m)



SSU K15 (4f, 2mm)

Рис. 1. Yb72Sn46-tP118. Кластерные прекурсоры. Цифры — длины связей атомов в Å.

числа атомов Yb — 13, 14, 15, атомов Sn — 9, 10, 11. Тип каркас-образующих кластеров-прекурсоров для интерметаллида $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}$ -*tP118* неизвестен.

В настоящей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллической структуры $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}$ -*tP118*. Впервые осуществлена реконструкция процесса самосборки кристаллической структуры из установленных кластеров *K15*, *K11*, *K6* 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 современных компьютерных методов [21].

МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ *TorusPro* [21], 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 интерметаллида $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}$ -*tP118* 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.

Таблица 1. Кристаллохимические данные интерметаллидов

Интерметаллид	Группа симметрии	Параметры элементарной ячейки, Å	V, Å ³
YbSn_3 - <i>cP4</i> [3]	<i>Pm-3m</i>	4.683,4.683,4.683	102.7
CaSn_3 - <i>cP4</i> [4]	<i>Pm-3m</i>	4.742,4.742,4.742	106.6
Yb_3Sn_3 - <i>oC32</i> [5]	<i>Cmcm</i>	10.193,8.167,10.375	863.7
Yb_2Sn_2 - <i>tP4</i> [6]	<i>P4/mmm</i>	4.960,4.960,4.400	108.2
Ca_2Sn_2 - <i>oC8</i> [7]	<i>Cmcm</i>	4.821,11.520,4.349	241.5
Ca_7Sn_6 - <i>oP52</i> [8]	<i>Pnma</i>	7.867,23.818,8.465	1586.1
Yb_5Sn_4 - <i>oP36</i> [6]	<i>Pnma</i>	7.822,15.813,8.280	1024.1
$\text{Ca}_{31}\text{Sn}_{20}$ - <i>tI204</i> [9]	<i>I4/mcm</i>	12.527,12.527,39.912	6262.9
$\text{Yb}_{36}\text{Sn}_{23}$ - <i>tP118</i> [6]	<i>P4/mbm</i>	12.387,12.387,22.935	3519.0
$\text{Ca}_{36}\text{Sn}_{23}$ - <i>tP118</i> [10]	<i>P4/mbm</i>	12.499,12.499,22.883	3574.9
Yb_3Sn_3 - <i>hP16</i> [6]	<i>P6_3/mcm</i>	9.470,9.470,6.900	535.9
Yb_5Sn_3 - <i>tI32</i> [6]	<i>I4/mcm</i>	7.939,7.939,14.686	925.6
Yb_2Sn - <i>hP6</i> [6]	<i>P6_3/mcm</i>	5.371,5.371,7.063	176.5
Ca_2Sn - <i>oP12</i> [11]	<i>Pnma</i>	7.975,5.044,9.562	384.6

СИММЕТРИЙНЫЙ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ КОД (ПРОГРАММА)
САМОСБОРКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}\text{-}t\text{P118}$

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).

Для кристаллической структуры $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}\text{-}t\text{P118}$ установлено 195 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц 5 (24 варианта), 6 (86 вариантов) и 7 (85 вариантов) (табл. 3).

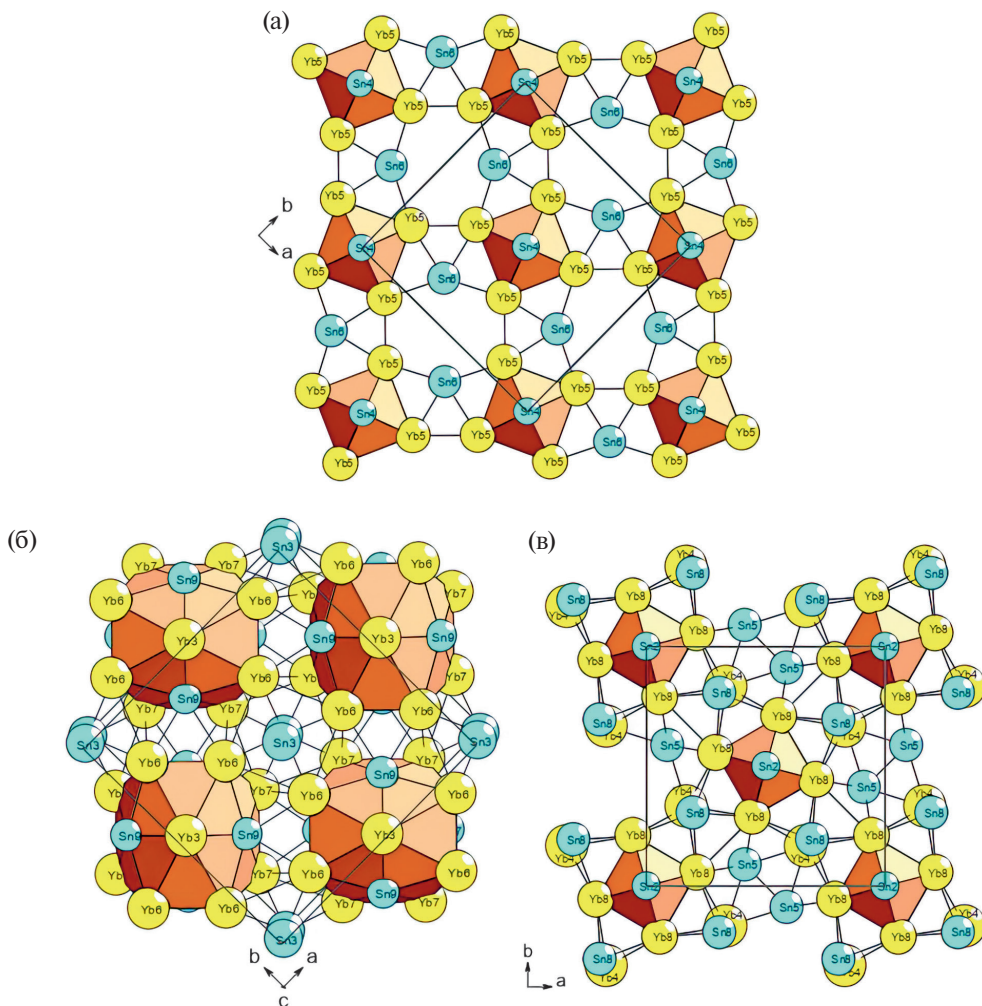


Рис. 2. $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}\text{-}t\text{P118}$: (а) слой $S_3^2\text{-A}$, (б) слой $S_3^2\text{-B}$, (в) слой $S_3^2\text{-C}$.

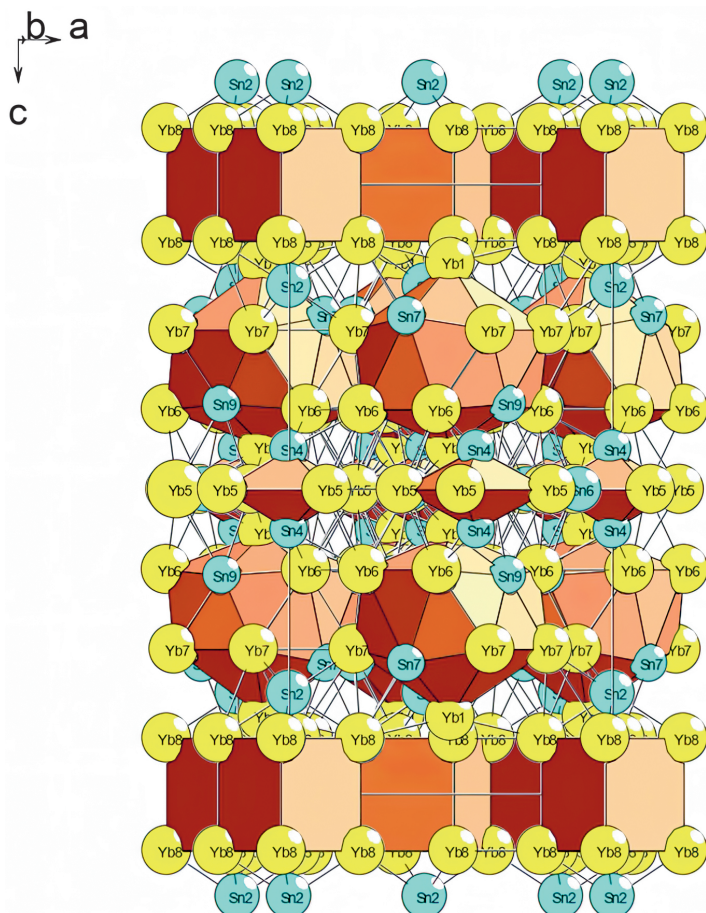


Рис. 3. $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}$ -*t*P118. Каркас S_3^3 .

Рассматривается вариант самосборки кристаллической структуры с участием трех кластеров, формирующих слои: из октаэдров $K6 = 0@6(\text{Yb}_4\text{Sn}_2)$ с симметрией $g = 4/m$ (центр в позиции $2b (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$), из полиэдров $K11 = \text{Sn}@10(\text{Yb}_8\text{Sn}_2)$ с симметрией $g = -1$ (центр в позиции $2a (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$), полиэдров $K15 = \text{Yb}@14(\text{Yb}_{10}\text{Sn}_4)$ с симметрией $g = 2mm$ (центр в позиции $2b (0, \frac{1}{2}, 0.285)$) и атомов-спейсеров Yb6 , Sn2 , Sn4 , Sn5 , Sn7 (рис. 1–3, табл. 3).

Самосборка 3-слойного пакета S_3^2 -А. Трехслойный пакет образован при связывании центрального слоя из полиэдров $K6$ и атомов-спейсеров Sn2 с двумя слоями из полиэдров $K15 = \text{Yb}@14(\text{Yb}_{10}\text{Sn}_4)$ и атомов-спейсеров Sn7 .

Самосборка слоя S_3^2 -В. Происходит при связывании полиэдров $K11$ и атомов-спейсеров Yb6 , Sn4 , Sn5 .

Самосборка каркаса S_3^3 . Каркас структуры S_3^3 формируется при упаковке 4-слойных пакетов S_3^2 -А + S_3^2 -В в направлении оси c . В элементарной ячейке находится 4-слойный пакет. Толщина 4-слойного пакета S_3^3 соответствует значению параметра тетрагональной ячейки $c = 22.883 \text{ \AA}$.

Таблица 2. $Yb_{36}Sn_{23}-tP118$. Координационные последовательности и локальное окружение атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Sn1	2Sn + 8Yb	10	50	110	202	326
Sn2	2Sn + 8Yb	10	46	110	202	326
Sn3	2Sn + 8Yb	10	42	102	198	310
Sn4	2Sn + 8Yb	10	46	110	218	322
Sn5	1Sn + 9Yb	10	45	111	198	322
Sn6	10 Yb	10	51	108	197	338
Sn7	1Sn + 10Yb	11	51	113	213	345
Sn8	1Sn + 8 Yb	9	45	104	200	325
Sn9	10Yb	10	49	109	204	333
Yb1	6Sn + 7Yb	13	50	114	202	346
Yb2	4Sn + 10Yb	14	55	116	212	327
Yb3	4Sn + 10Yb	14	54	115	209	336
Yb4	5Sn + 10Yb	15	52	112	211	330
Yb5	6Sn + 9Yb9	15	52	118	217	341
Yb6	6Sn + 9Yb9	15	50	118	213	334
Yb7	6Sn + 7Yb7	13	47	114	208	333
Yb8	6Sn + 8Yb8	14	50	116	214	343

Таблица 3. $Yb_{72}Sn_{46}-tP118$. Варианты кластерного представления кристаллической структуры с 7 структурными единицами. Указаны центральный атом или центр пустоты полиэдрического кластера, число его оболочек (в первой скобке) и количество атомов в оболочке (во второй скобке). Кристаллографические позиции, соответствующие центрам пустот полиэдрических кластеров, обозначены ZAN

ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(0)(1)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(0)(1)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(0)(1)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(0)(1)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(0)(1)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn3(1)(1@10)	Sn6(0)(1)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(0)(1)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn3(1)(1@10)	Sn6(0)(1)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn3(1)(1@10)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(0)(1)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn3(1)(1@10)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(0)(1)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(0)(1)	Sn3(1)(1@10)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(1)(1@8)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(0)(1)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(0)(1)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(1)(1@8)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(0)(1)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(1)(1@8)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(0)(1)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(1)(1@8)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(0)(1)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(1)(1@8)	Sn2(1)(1@9)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(1)(1@8)	Sn3(1)(1@10)	Sn6(0)(1)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(0)(1)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(1)(1@8)	Sn3(1)(1@10)	Sn6(0)(1)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(1)(1@10)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(1)(1@8)	Sn3(1)(1@10)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(1)(1@11)	Sn9(0)(1)
ZA1(2b)(1)(0@6)	Sn1(1)(1@8)	Sn3(1)(1@10)	Sn6(1)(1@10)	Yb4(1)(1@14)	Sn7(0)(1)	Sn9(1)(1@10)

ZA3(2d)(1)(0@6) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn3(1)(1@10) Sn6(1)(1@10) Sn8(1)(1@9) Sn9(1)(1@10)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(0)(1) Sn2(1)(1@9) Yb2(1)(1@14) Sn8(0)(1)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(0)(1) Sn2(1)(1@9) Yb2(1)(1@14) Sn8(1)(1@9)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(0)(1) Sn2(1)(1@9) Sn7(1)(1@11) Sn9(0)(1)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(0)(1) Sn2(1)(1@9) Sn7(1)(1@11) Sn9(1)(1@10)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(0)(1) Sn2(1)(1@9) Sn8(1)(1@9) Sn9(1)(1@10)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(0)(1) Sn3(1)(1@10) Yb2(1)(1@14) Sn8(1)(1@9)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(0)(1) Sn3(1)(1@10) Sn7(1)(1@11) Sn9(0)(1)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(0)(1) Sn3(1)(1@10) Sn7(1)(1@11) Sn9(1)(1@10)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(0)(1) Sn3(1)(1@10) Sn8(1)(1@9) Sn9(1)(1@10)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn2(1)(1@9) Yb2(1)(1@14) Sn8(0)(1)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn2(1)(1@9) Yb2(1)(1@14) Sn8(1)(1@9)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn2(1)(1@9) Sn7(1)(1@11) Sn9(0)(1)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn2(1)(1@9) Sn7(1)(1@11) Sn9(1)(1@10)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn2(1)(1@9) Sn8(1)(1@9) Sn9(1)(1@10)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn3(1)(1@10) Yb2(1)(1@14) Sn8(0)(1)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn3(1)(1@10) Yb2(1)(1@14) Sn8(1)(1@9)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn3(1)(1@10) Sn7(1)(1@11) Sn9(0)(1)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn3(1)(1@10) Sn7(1)(1@11) Sn9(1)(1@10)
ZA3(2d)(1)(0@6) ZA2(2c)(1)(0@8) ZA1(2b)(1)(0@6) Sn1(1)(1@8) Sn3(1)(1@10) Sn8(1)(1@9) Sn9(1)(1@10)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием метода разложения 3D атомной сетки интерметаллида $\text{Yb}_{72}\text{Sn}_{46}\text{-tP118}$ на кластерные структуры (пакет программ ToposPro) получены данные о комбинаторно возможных типах кластеров, участвующих в образовании кристаллической структуры. Рассмотрен наиболее быстрый вариант самосборки кристаллической структуры с участием трех типов кластеров, формирующих слои из октаэдров $K6 = 0@6(\text{Yb}_4\text{Sn}_2)$, полиэдров $K11 = \text{Sn}@10(\text{Yb}_8\text{Sn}_2)$, полиэдров $K15 = \text{Yb}@14(\text{Yb}_{10}\text{Sn}_4)$ с участием атомов-спейсеров Yb и Sn. Трехслойный пакет S_3^2 -А образован при связывании центрального слоя из полиэдров $K6$ и атомов-спейсеров Sn с слоями из полиэдров $K15 = \text{Yb}@14(\text{Yb}_{10}\text{Sn}_4)$ и атомов-спейсеров Sn. Самосборка слоя S_3^2 -В происходит при связывании полиэдров $K11$ с атомами-спейсерами Yb и Sn.

Каркас структуры S_3^3 формируется при упаковке 4-слойных пакетов S_3^2 . Толщина 4-слойного пакета S_3^3 соответствует значению параметра тетрагональной ячейки $c = 22.883 \text{ \AA}$.

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. *Harris I.R., Raynor G.V.* Rare earth intermediate phases. I. Phases formed with tin and indium // *Journal of the Less-Common Metals*. 1965. V. 9. P. 7–19.
4. *Zintl E., Neumayr S.* Ueber Legierungsphasen vom Typus NaPb_3 // *Zeitschrift fuer Elektrochemie*. 1933. V. 39. P. 86–97.
5. *Ge Minghui, Corbett J.D.* Crystal structure of trytterbium pentastannide Yb_3Sn_5 // *Zeitschrift fuer Kristallographie — New Crystal Structures*. 2011. V. 226. P. 445–446.
6. *Palenzona A., Cirafici S.* The ytterbium-tin system // *Journal of the Less-Common Metals*. 1976. V. 46. P. 321–326.
7. *Eckerlin P., Meyer H.J., Woelfel E.* Die Kristallstruktur von CaSn und CaGe // *Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie*. 1955. V. 281. P. 322–328.
8. *Palenzona A., Manfrinetti P., Fornasini M.L.* Phase diagram of the Ca-Sn system // *Journal of Alloys and Compounds*. 2000. V. 312. P. 165–171.
9. *Ganguli A.K., Guloy A.M., Leon Escamilla E.A., Corbett J.D.* $\text{Ca}_{31}\text{Sn}_{20}$ and related compounds: novel Zintl phases containing dimers and pentamers of tin or lead // *Inorganic Chemistry*. 1993. V. 32. P. 4349–4353.
10. *Leon Escamilla E.A., Corbett J.D.* Solid state compounds with tin-tin bonding. $\text{Yb}_{36}\text{Sn}_{23}$: A novel compound containing oligomeric tin anions // *Inorganic Chemistry*. 1999. V. 38. P. 738–743.
11. *Migas D.B., Miglio L., Shaposhnikov V.L., Borisenko V.E.* Comparative study of structural, electronic and optical properties of Ca_2Si , Ca_2Ge , Ca_2Sn , and Ca_2Pb // *Physical Review, Serie 3. B — Condensed Matter*. 2003. V. 67. P. 205203–1–205203–7.
12. *Iandelli A., Palenzona A.* Das Verhalten des Ytterbiums mit den Metallen der achten Gruppe desperiodischen Systems // *Revue de Chimie Minerale*. 1976. V. 13. P. 55–61.
13. *Elliott R. P.* Laves phases of the rare earths with transition elements // *Rare Earths in Modern Science and Technology (Rare Earth Res. Conf.)*. 1965. P. 215–245.
14. *Kershner C.J., de Sando R.J., Heidelberg R.F., Steinmeyer R.H.* Rare earth polonides // *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*. (1966), 28(*), 1581–1588.
15. *Bonville P., Imbert P., Jehanno G.* Low-temperature Mossbauer study of ^{170}Yb in YbBe_{13} // *Journal of Physics F*. 1986. V. 16. P. 1873–1883.
16. *Ilyushin G.D.* New Cluster Precursors — K5 Pyramids and K4 Tetrahedra — for Self-Assembly of Crystal Structures of $\text{Mn}_4(\text{ThMn}_4)(\text{Mn}_4)\text{-tI26}$, $\text{Mn}_4(\text{CeCo}_4)(\text{Co}_4)\text{-tI26}$, and $\text{MoNi}_4\text{-tI10}$ Families // *Crystallography Reports*. 2022. V. 67. P. 1088–1094.
17. *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.
18. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds Na_kM_n ($M = \text{K}, \text{Cs}, \text{Ba}, \text{Ag}, \text{Pt}, \text{Au}, \text{Zn}, \text{Bi}, \text{Sb}$): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65. № 4. P. 539–545.
19. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds K_nM_m ($M = \text{Ag}, \text{Au}, \text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports*. 2020. V. 65. № 7. P. 1095–1105.
20. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds Cs_nM_k ($M = \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Pt}, \text{Au}, \text{Hg}, \text{Te}$): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports*. 2022 Vol. 67. Issue 7. P. 1075–1087.
21. *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.