

**КЛАСТЕРНАЯ САМООРГАНИЗАЦИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ:
КЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ K3, K4, K5, K6, K13 ДЛЯ САМОСБОРКИ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР $U_8Ni_{10}Al_{36}-mC54$, $U_{20}Ni_{26}-mC46$, И U_8Co_8-cI16**

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

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

²Федеральный научно-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 16.03.2023 г.

После доработки 04.04.2023 г.

Принята к публикации 06.04.2023 г.

С помощью компьютерных методов (пакет программ ToposPro) осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур $U_8Ni_{10}Al_{36}-mC54$ ($a = 15.5470 \text{ \AA}$, $b = 4.0610 \text{ \AA}$, $c = 16.4580 \text{ \AA}$, $\beta = 120.00^\circ$, $V = 899.89 \text{ \AA}^3$, $C m$), $U_{20}Ni_{26}-mC46$ ($a = 7.660 \text{ \AA}$, $b = 13.080 \text{ \AA}$, $c = 7.649 \text{ \AA}$, $\beta = 108.88^\circ$, $V = 725.26 \text{ \AA}^3$, $C 2/m$), U_8Co_8-cI16 ($a = 6.343 \text{ \AA}$, $V = 255.20 \text{ \AA}^3$, $I 2_13$). Для кристаллической структуры $U_8Ni_{10}Al_{36}-mC54$ установлены 960 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц 5, 6, 7. Определены 6 кристаллографически независимых структурных единиц в виде пирамиды $K5 = 0@Al(U_2Al_2)$, пирамиды $K6A = 0@U(NiAl_4)$, пирамиды $K6B = 0@U(NiAl_4)$, колец $K3A = 0@NiAl_2$, $K3B = 0@NiAl_2$, $K3C = 0@Al_3$. Для кристаллической структуры $U_{20}Ni_{26}-mC46$ определены структурные единицы $K5 = Ni(Ni_2U_2)$ и икосаэдры $K13 = Ni@Ni_6U_6$. Для кристаллической структуры U_2Co_2-cI16 определены структурные единицы – тетраэдры $K4 = U_2Co_2$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь $\rightarrow$ слой $\rightarrow$ каркас.

Ключевые слова: $U_8Ni_{10}Al_{36}-mC54$, $U_{20}Ni_{26}-mC46$, U_8Co_8-cI16 , самосборка кристаллической структуры, кластерные прекурсоры K3, K4, K5, K6, K13

DOI: 10.31857/S0132665123600176, **EDN:** OAKMAG

ВВЕДЕНИЕ

В двойных системах $A-B$ с участием 73 химических элементов установлено образование 7736 интерметаллидов A_nB_m . Из них наибольшее число интерметаллидов 524, 538 и 555 образуется с небольшими атомами $B = Ni, Al, Ge$.

В двойных системах $U-B$ установлена кристаллизация 132 соединений U_nB_m . Кристаллохимические семейства интерметаллидов U_nB_m с атомами $B = Ni, Co, Fe, Mn$ приведены в табл. 1. Структурные типы Ni-содержащих соединений $U_2(Ni_4)-hP12$ [3], $UNi(Ni_4)-cF24$ [3], UNi_5-hP6 [4], $U_{11}Ni_{16}-hR162$ [5, 6], как и $U_8Ni_{10}Al_{36}-mC54$ [7] не

Таблица 1. Кристаллографические данные интерметаллидов [1, 2]

Интерметаллид	Группа симметрии	Параметры ячейки, Å и градусы	$V, \text{Å}^3$
$(\text{U}_4\text{Ni})_2(\text{U}_4)$	$I4/mcm$	10.384, 10.384, 5.156	556.0
$(\text{U}_4\text{Co})_2(\text{U}_4)$	$I4/mcm$	10.360, 10.360, 5.210	559.2
$(\text{U}_4\text{Fe})_2(\text{U}_4)$	$I4/mcm$	10.290, 10.290, 5.240	554.8
$(\text{U}_4\text{Mn})_2(\text{U}_4)$	$I4/mcm$	10.290, 10.290, 5.240	554.8
$(\text{Pu}_4\text{Co})_2(\text{Pu}_4)$	$I4/mcm$	10.475, 10.475, 5.340	585.9
$(\text{Np}_4\text{Fe})_2(\text{U}_4)$	$I4/mcm$	10.224, 10.224, 5.238	547.5
$(\text{Pu}_4\text{Fe})_2(\text{Pu}_4)$	$I4/mcm$	10.410, 10.410, 5.359	580.7
$(\text{Ti}_4\text{Ni})_2(\text{Bi}_4)$	$I4/mcm$	10.554, 10.554, 4.814	536.2
$(\text{Ti}_4\text{Co})_2(\text{Bi}_4)$	$I4/mcm$	10.506, 10.506, 4.882	538.9
$(\text{Ti}_4\text{Fe})_2(\text{Bi}_4)$	$I4/mcm$	10.486, 10.486, 4.933	542.4
$(\text{Ti}_4\text{Mn})_2(\text{Bi}_4)$	$I4/mcm$	10.491, 10.491, 4.978	547.9
$\text{U}_2(\text{Co}_4)$	$Fd-3m$	6.978, 6.978, 6.978,	339.8
$\text{U}_2(\text{Fe}_4)$	$Fd-3m$	7.065, 7.065, 7.065,	352.6
$\text{U}_2(\text{Mn}_4)$	$Fd-3m$	7.160, 7.160, 7.160,	367.0
$\text{U}_2(\text{Ir}_4)$	$Fd-3m$	7.495, 7.495, 7.495,	421.1
$\text{U}_2(\text{Os}_4)$	$Fd-3m$	7.512, 7.512, 7.512,	424.0
$\text{U}_2(\text{Al}_4)$	$Fd-3m$	7.766, 7.766, 7.766,	468.4
$\text{U}_2(\text{Ni}_4)$	$P6_3/mmc$	4.970, 4.970, 8.253	176.5
$\text{UNi}(\text{Ni}_4)$	$F-43m$	6.796, 6.796, 6.796	313.8
UNi_5	$P6/mmm$	4.846, 4.846, 4.045	82.3
$\text{U}_{20}\text{Ni}_{26}$	$C12/m1$	7.660, 13.080, 7.650, 108.88,	725.3
$\text{U}_{11}\text{Ni}_{16}$	$R-3$	11.779, 11.779, 20.749	2492.9
$\text{U}_8\text{Ni}_{10}\text{Al}_{36}$	$C1m1$	15.547, 4.061, 16.458, 120.00,	899.9

имеют аналогов в системах с атомами $B = \text{Co}, \text{Fe}, \text{Mn}$. Интерметаллид $\text{U}_6\text{Ni}-tI28$ [3] входит в кристаллохимическое семейство $\text{U}_6B-tI28$ (табл. 1).

Три Co-содержащих интерметаллид входят в кристаллохимические семейства UCo_3-hR12 [8], $\text{U}_2(\text{Co}_4)-cF24$ [2], $\text{U}_6\text{Co}-tI28$ [2]. Два интерметаллида $\text{U}_3\text{Co}_{15}-hR18$ [9] и $\text{U}_8\text{Co}_8-cI16$ [10] не имеют аналогов среди интерметаллидов.

Два Fe-содержащих интерметаллида $\text{U}_6\text{Fe}-tI28$ [11] и UFe_2-F24 [12], как и $\text{U}_6\text{Mn}-tI28$ [11] и UMn_2-F24 [11], входят в кристаллохимические семейства $\text{U}_6\text{Co}-tI28$ [2] и $\text{U}_2(\text{Co}_4)-cF24$ [2]. В [13] исследована низкотемпературная модификации UMn_2-oI12 с пр. группой $Imma$.

В тройных системах $A-B-C$ с участием 69 различных атомов установлено образование 14667 интерметаллидов $A_nB_mC_k$. Из них наибольшее число интерметаллидов 2385, 2704 и 2890 также образуются с небольшими атомами $B = \text{Ni}, \text{Ge}, \text{Al}$. С участием ато-

мов U установлена кристаллизация 462 соединений. В системе U–Ni–Al установлено образование 7 соединений [1, 2]. Наиболее кристаллографически сложными интерметаллидами являются $U_8Ni_{10}Al_{36}$ -*mS54* [14] с 27 атомами в позициях типа a^{29} и $U_{12}Ni_{20}Al_{76}$ -*oC108* [15] с 15 атомами в позициях типа $f^{12}c^3$.

В настоящей работе проведен геометрический и топологический анализ кристаллических структур $U_8Ni_{10}Al_{36}$ -*mC54*, $U_{20}Ni_{26}$ -*mC46*, U_8Co_8 -*cI16*. Установлены кластеры-прекурсоры *K3*, *K4*, *K5*, *K6*, *K13* участвующие в самосборке кристаллических структур. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь → слой → каркас.

Работа продолжает исследования [16–21] в области моделирования процессов самоорганизации систем на супраполиэдрическом уровне и геометрического и топологического анализа кристаллических структур с применением современных компьютерных методов [22].

МЕТОДИКИ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ КОМПЬЮТЕРНОМ АНАЛИЗЕ

Геометрический и топологический анализ осуществляли с помощью комплекса программ *TorosPro* [22], 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 $U_8Ni_{10}Al_{36}$ -*mC54*, $U_{20}Ni_{26}$ -*mC46*, U_8Co_8 приведены в табл. 2, 3.

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 высоко симметричные позиции; набор кластеров-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 химической эволюции системы, далее — механизм самосборки из цепи слоя (2-ой уровень) и затем из слоя — трехмерного каркаса структуры (3-й уровень).

Кристаллическая структура $U_8Ni_{10}Al_{36}$ -mC54

Параметры моноклинной ячейки: $a = 15.5470 \text{ \AA}$, $b = 4.0610 \text{ \AA}$, $c = 16.4580 \text{ \AA}$, $\beta = 120.00^\circ$, $V = 899.89 \text{ \AA}^3$. Пространственная группа $C1m1$ (по. 8). Кратность позиции общего положения 4. Последовательность Вайкоффа a^{29} .

Таблица 2. $U_8Ni_{10}Al_{36}$ -*mC54*. Локальное окружение и координационные последовательности атомов в кристаллической структуре

Атом	Локальное окружение атома	Координационные последовательности				
		N1	N2	N3	N4	N5
Al1	8Al + 4U	12	52	113	196	317
Al2	7Al + 2Ni + 3U	12	48	109	192	303
Al3	8Al + 4U	12	52	112	206	328
Al4	7Al + 3Ni + 2U	12	44	99	194	298
Al5	8Al + 5Ni + 2U	15	45	105	204	315
Al6	8Al + 4U	12	52	117	196	322
Al7	8Al + 2Ni + 2U	12	47	104	184	309
Al8	8Al + 1Ni + 3U	12	48	109	189	311
Al9	8Al + 3Ni + 1U	12	43	104	197	308
Al10	7Al + 2Ni + 3U	12	45	106	190	295
Al11	6Al + 3Ni + 3U	12	42	99	195	315
Al12	8Al + 1Ni + 3U	12	48	109	193	320
Al13	7Al + 2Ni + 3U	12	45	104	195	306
Al14	6Al + 3Ni + 3U	12	45	104	201	312
Al15	6Al + 3Ni + 3U	12	42	101	195	307
Al16	7Al + 2Ni + 3U	12	44	101	197	302
Al17	7Al + 3Ni + 2U	12	44	96	186	307
Al18	8Al + 2Ni + 2U	12	43	104	184	298
Ni1	7Al + 2U	9	37	93	186	296
Ni2	8Al + 1U	9	37	92	179	292
Ni3	9Al	9	35	90	170	287
Ni4	7Al + 1Ni + 2U	10	42	95	184	304
Ni5	7Al + 1Ni + 2U	10	42	96	184	292
U1	13Al + 2Ni	15	50	112	196	321
U2	13Al + 2Ni	15	50	112	196	321
U3	13Al + 2Ni	15	47	113	204	318
U4	13Al + 2Ni	15	47	113	205	318

Позиции в плоскости *m* занимают 18 атомов Al, 5 атомов Ni и 4 атома U. Определены КЧ атомов Al = 15 (1 атом) и 12 (17 атомов), атомов Ni – 9 (3 атома) и 10 (2 атома), всех атомов U = 15. (табл. 1).

Установлены 960 вариантов кластерного представления 3D атомной сетки с числом структурных единиц 4 (114 вариантов), 5 (488 вариантов), 6 (358 варианта).

Определены 6 кристаллографически независимых структурных единиц в виде пирамиды $K5 = 0@Al(U_2Al_2)$ с центром (0, 0.40, 0), пирамиды $K6A = 0@U(NiAl_4)$ с центром (0.42, 0.42, 0.66), пирамиды $K6B = 0@U(NiAl_4)$ с центром (0.56, 0.44, 0.34), колец

Таблица 3. Локальное окружение и координационные последовательности атомов в кристаллических структурах интерметаллидов

Интерметаллид	Атом	Локальное окружение атома	Координационные последовательности				
			N1	N2	N3	N4	N5
$U_{20}Ni_{26}-mC46$	Ni1	4Ni + 9U9	13	51	111	204	318
	Ni2	5Ni + 8U8	13	47	108	198	303
	Ni3	5Ni + 8U8	13	49	110	197	323
	Ni4	6Ni + 6U6	12	56	116	216	330
	Ni5	4Ni + 8U8	12	49	107	197	318
	U1	10Ni + 4U4	14	47	112	195	316
	U2	11Ni + 4U4	15	51	112	202	323
	U3	11Ni + 3U3	14	48	112	200	317
U_2Co_2-cI16	Co1	3Co + 8U	11	47	110	194	302
	U1	8Co + 6U	14	50	110	194	302

$K3A = 0@NiAl_2$ с центром (0.17, 0.33, 0.66), $K3(B) = 0@NiAl_2$ с центром (0.22, 0.33, 0.96), $K3C = 0@Al_3$ с центром (0.34, 0.17, 0.34) (рис. 1).

Ниже рассмотрен вариант самосборки с участием гексамеров из шести связанных структурных единиц $K5 + K6A + K6B + K3A + K3B + K3C$ с участием атомов-спейсеров Ni1 (рис. 2).

Слой S_3^2 . Образование слоя происходит при связывании гексамеров в направлении оси X (рис. 3).

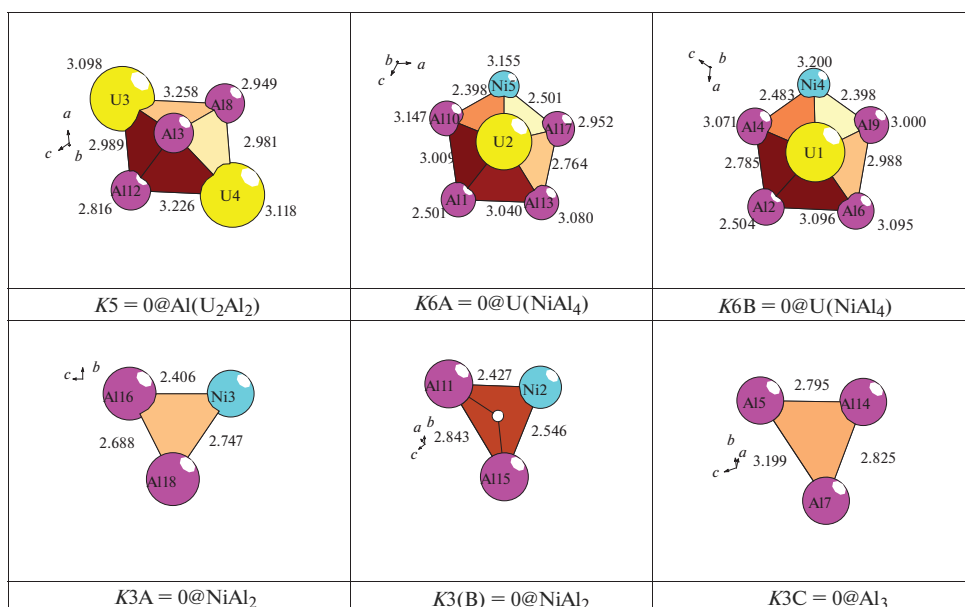


Рис. 1. $U_8Ni_{10}Al_{36}-mC54$. Кластеры-прекурсоры.

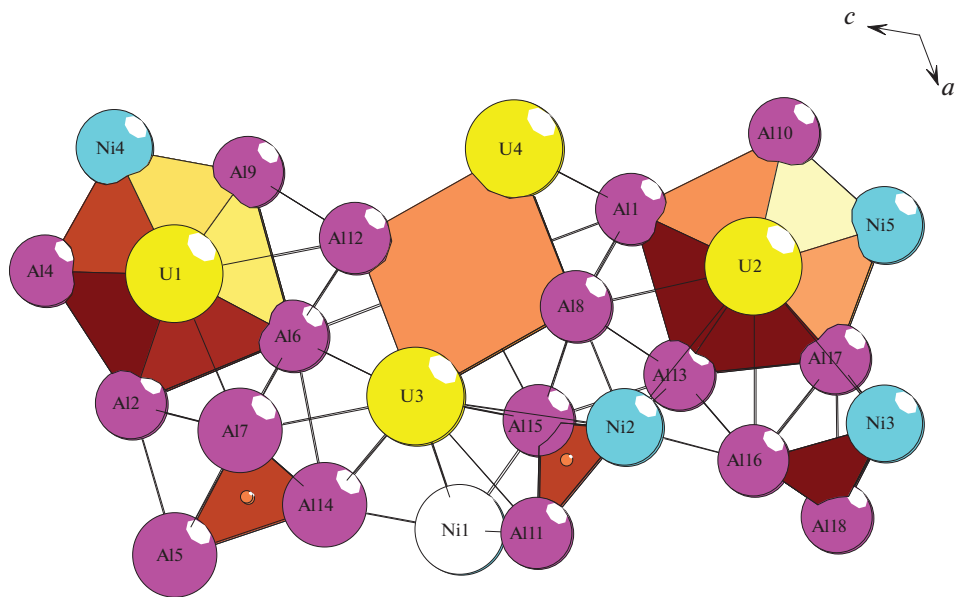


Рис. 2. $U_8Ni_{10}Al_{36}$ -mC54. Гексамер S_3^1 .

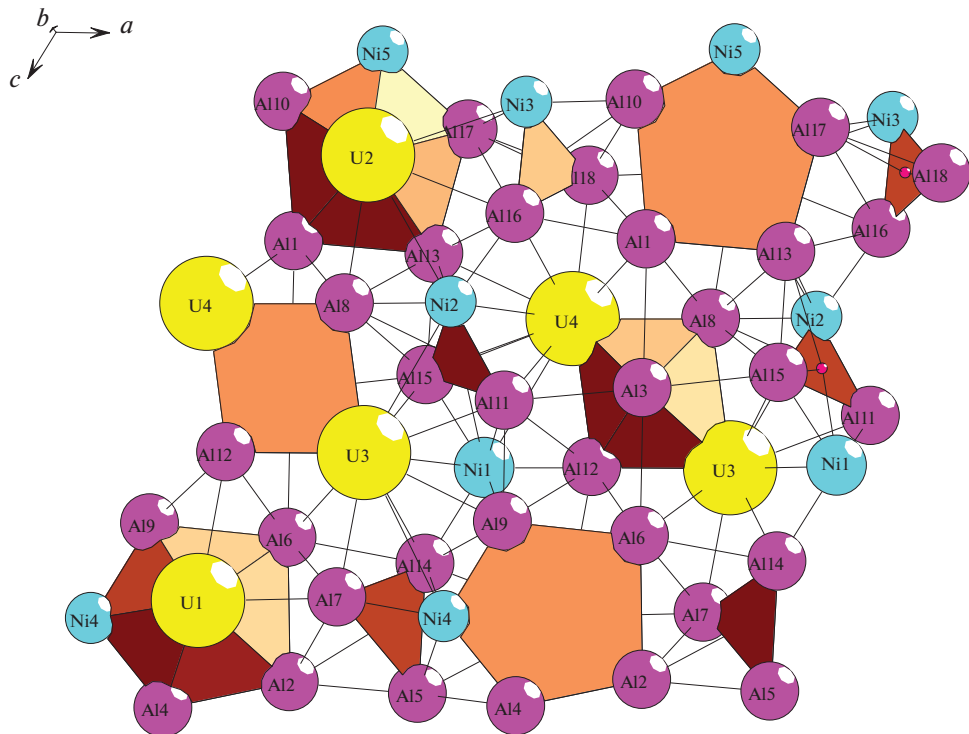


Рис. 3. $U_8Ni_{10}Al_{36}$ -mC54. Слой $S_3^2 = S_3^1 + S_3^1$.

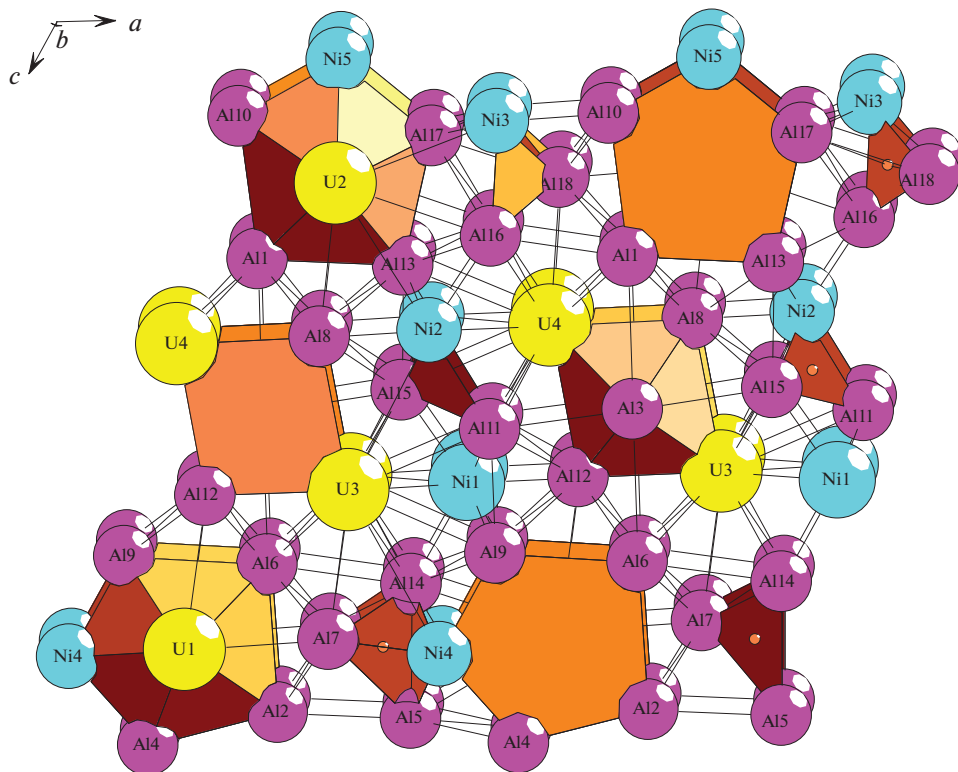


Рис. 4. $U_8Ni_{10}Al_{36}$ -mC54. Каркас $S_3^3 = S_3^2 + S_3^2$.

Самосборка каркаса S_3^3 . Образование каркаса S_3^3 происходит при связывании слоя $S_3^2 + S_3^2$ в направлении оси Y (рис. 4).

Кристаллическая структура $U_{20}Ni_{26}$ -mC46

Параметры моноклинной ячейки: $a = 7.660 \text{ \AA}$, $b = 13.080 \text{ \AA}$, $c = 7.649 \text{ \AA}$, $\beta = 108.88^\circ$, $V = 725.26 \text{ \AA}^3$. Пространственная группа $C12/m1$ с симметрией частных позиций $2/m$ (2a, 2b, 2c, 2d), -1 (4e, 4f), 2 (4g, 4h), m (4i). Кратность позиции общего положения 8. Последовательность Вайкоффа $f^4 i^3 a$.

Атом Ni4 занимает позицию 2a с симметрией $2/m$, атомы Ni2, Ni5, U3 — позиции в плоскости m , Ni1, атомы Ni3, U1, U2 — в общем положении 8j.

В табл. 3 приведено локальное окружение атомов U и Ni и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке. Установлены значения КЧ атомов Ni — 12 (2 атома) и 13 (3 атома) и атомов U — 14 (2 атома) и 13.

Определены структурные единицы в виде икосаэдра $K13(2a) = Ni@Ni_6U_6$ с центром в позиции 2a и симметрией $2/m$, и $K5(4i) = Ni(Ni_2U_2)$ с центральным атомом Ni5, общим для двух 3-х колец, лежащих в плоскости m (рис. 5).

Самосборка первичных цепей S_3^1 . Первичная цепь S_3^1 формируется в результате связывания кластеров $K13 + K13$ с участием кластеров $K5$ (рис. 6).

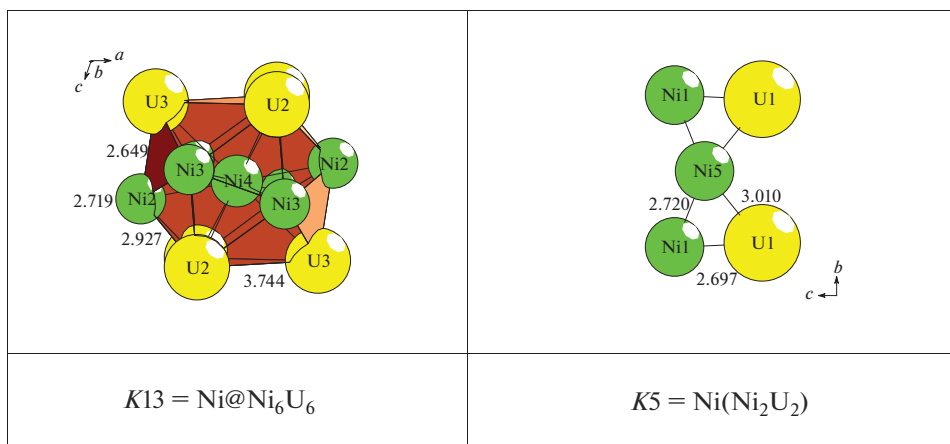


Рис. 5. $\text{U}_{20}\text{Ni}_{26}\text{-mC46}$. Кластер $K13$ (слева) и $K5$ (справа).

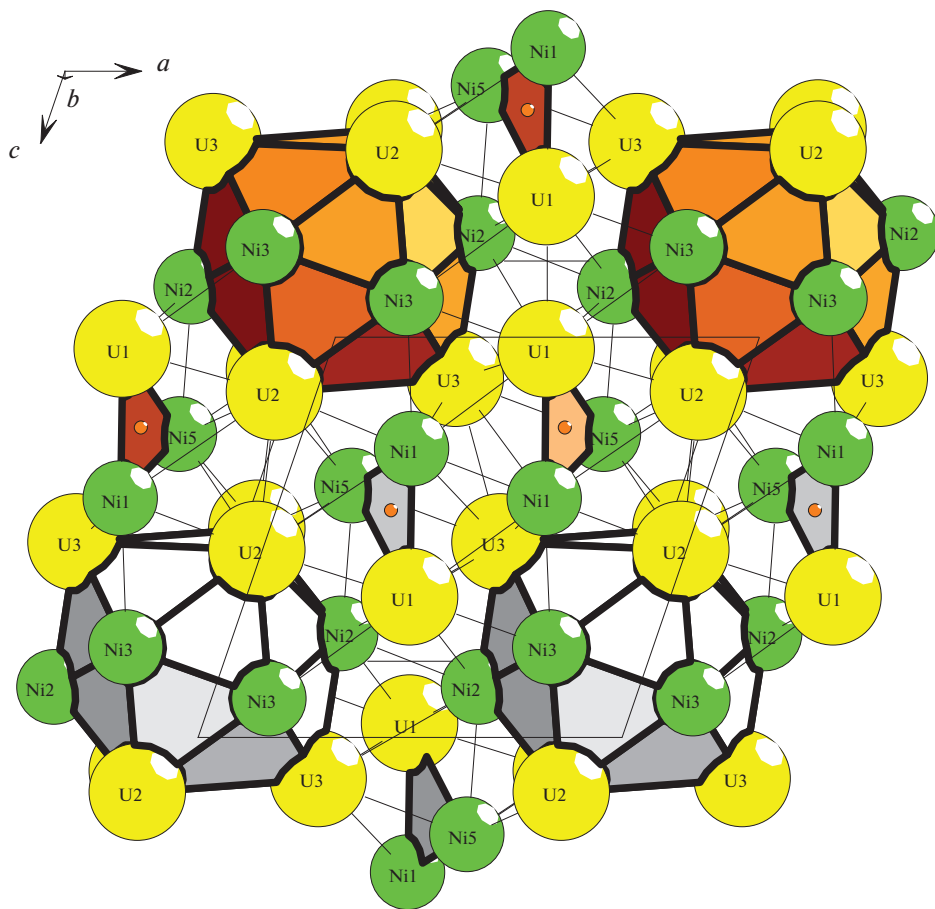


Рис. 6. $\text{U}_{20}\text{Ni}_{26}\text{-mC46}$. Слой $S_3^2 = S_3^1 + S_3^1$.

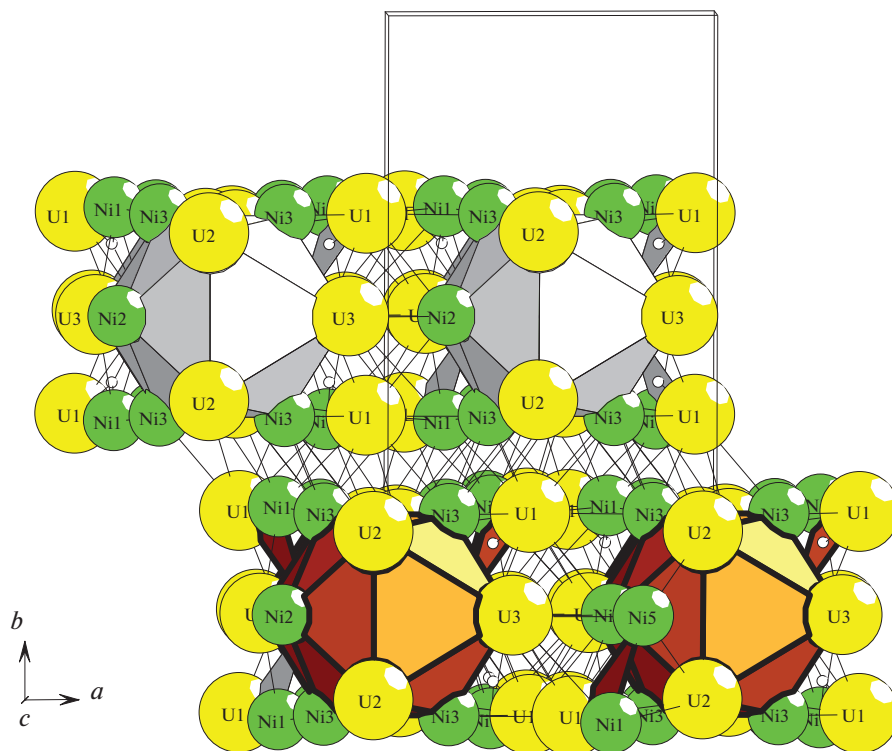


Рис. 7. $U_{20}Ni_{26-m}C_{46}$. Каркас $S_3^3 = S_3^2 + S_3^2$.

Самосборка слоя S_3^2 . Образование слоя S_3^2 происходит при связывании цепей S_3^1 (рис. 6).

Самосборка каркаса S_3^3 . Каркас структуры S_3^3 формируется при упаковке слоев со сдвигом (рис. 7).

Кристаллическая структура $U_8Co_8 - cI16$

Пространственная группа $I 2_13$ (по. 199) с симметрией частных позиций 3 (8a), 2(12b), Кратность позиции общего положения 24.

Атомы U и Co занимают частные позиции 8a с симметрией 3.

В табл. 3 приведено локальное окружение атомов U и Ni и значения их координационных последовательностей в 3D атомной сетке. Определены КЧ атома Ni – 11, атома U – 14.

Установлены структурные единицы в виде тетраэдров $K4 = 0@U_2Co_2$.

Самосборка первичных цепей S_3^1 . Первичная цепь S_3^1 формируется в результате связывания тетраэдров $K4$ с индексом связанности $Pc = 6$. Удвоенное расстояния между центрами тетраэдров $K4$ определяет значение вектора трансляции $a = 6.343 \text{ \AA}$ (рис. 8).

Самосборка слоя S_3^2 . Образование слоя S_3^2 происходит за счет связывания цепей с индексом связанности $Pc = 9$ (рис. 8).

Самосборка каркаса S_3^3 . Каркас структуры S_3^3 формируется при упаковке слоев $S_3^2 + S_3^2$ (рис. 9).

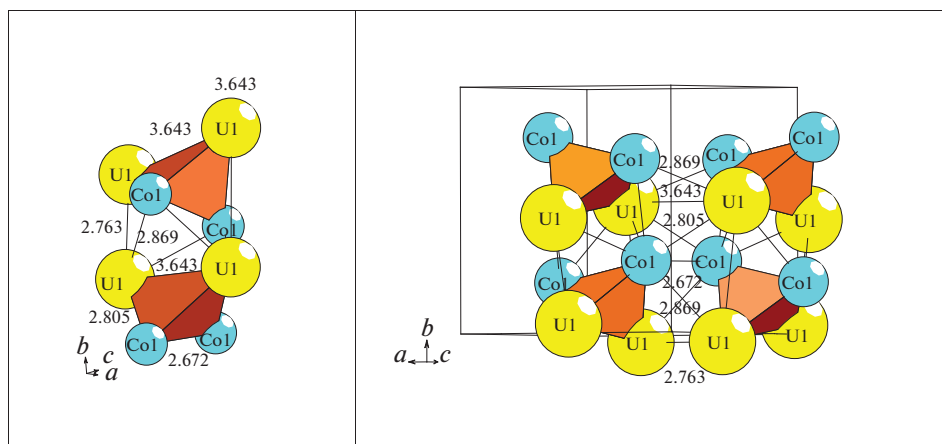


Рис. 8. $U_8Co_8-c/16$. Первичная цепь S_3^1 (слева) и слой S_3^2 (справа).

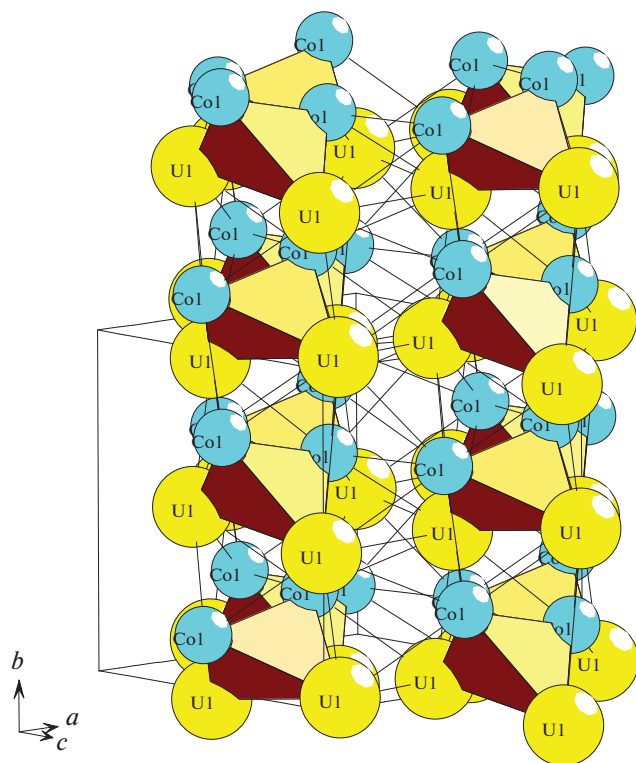


Рис. 9. $U_8Co_8-c/16$. Каркас $S_3^3 = S_3^2 + S_3^2$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур $U_8Ni_{10}Al_{36}-mC54$, $U_{20}Ni_{26}-mC46$, U_8Co_8-cI16 . Для кристаллической структуры $U_8Ni_{10}Al_{36}-mC54$ определены 6 структурных единиц в виде пирамиды $K5 = 0@Al(U_2Al_2)$, пирамиды $K6A = 0@U(NiAl_4)$, пирамиды $K6B = 0@U(NiAl_4)$, колец $K3A = 0@NiAl_2$, $K3B = 0@NiAl_2$, $K3C = 0@Al_3$. Для кристаллической структуры $U_{20}Ni_{26}-mC46$ определены структурные единицы $K5 = Ni(Ni_2U_2)$ и икосаэдры $K13 = Ni@Ni_6U_6$. Для кристаллической структуры U_8Co_8-cI16 определены структурные единицы – тетраэдры $K4 = U_2Co_2$. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь $\rightarrow$ слой $\rightarrow$ каркас.

Анализ самосборки кристаллической структуры выполнен при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения работ по государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, нанокластерный 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. Perricone A., Noel H. Crystal structure refinements and magnetic behavior of U_6Ni , UNi_5 , UNi_2 and the substitution derivative $U_{Ni_{1.7}Si_{0.3}}$ // Chemistry of Metals and Alloys. 2008. V. 1. P. 54–57.
4. Perricone A., Noel H. Crystal structure and magnetic properties of the binary uranium-nickel alloy UNi_4 // Intermetallics 2002. V. 10. P. 519–521.
5. Perricone A., Noel H. Characterization of the new uranium–nickel alloy $U_{10}Ni_{13}$ // J. Nucl. Mater. 2001. V. 299. P. 260–263.
6. Perricone A., Potel M., Noel H. Crystal structure and magnetic properties of the binary uranium – nickel alloy $U_{11}Ni_{16}$ // J. Alloys Compd. 2002. V. 340. P. 39–42.
7. Grin Y.N., Rogl P., Akselrud L.G., Pertlik F. X-ray studies in the systems $ZrNi_5-xO_x$ and UNi_5-xAl_x // Zeitschrift fuer Kristallographie. 1989. V. 188. P. 271–277.
8. Dwight A.E. The unit-cell constants of some $PuNi_3$ -type compounds // Acta Crystallographica B. 1968. V. 24 P. 1395–1396.
9. Dommann A., Brandle H., Hulliger F., Fischer P. Crystal structure and magnetic order of UCo_5 // J. Less-Common Metals. 1990. V. 158. P. 287–294.
10. Baenziger N.C., Rundle R.E., Snow A.I., Wilson A.S. Compounds of Uranium with the Transition Metals of the First Long Period // Acta Crystallog. 1950. V. 3. P. 34–40.
11. Kimball C.W., Vaishnava P.P., Dwight A.E. Phonon anomalies and local atomic displacements in the exchange-enhanced superconductor U_6Fe // Physical Review, Serie 3. B – Condensed Matter. 1985. V. 32. P. 4419–4425.
12. Lebech B., Wulff M., Lander G.H., Rebizant J., Spirlet J.C., Delapalme A. Neutron diffraction studies of the crystalline and magnetic properties of UFe_2 // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1. P. 10229–248.
13. Lawson A.C. Jr., Smith J.L., Willis J.O., O'Rourke J.A., Faber J., Hitterman R.L. Orthorhombic structure of UMn_2 at low temperatures // J. Less-Common Metals 1985. V. 107. P. 243–248.
14. Richter C.G., Jeitschko W., Kuennen B., Gerdes M.H. The ternary titanium transition metal bismuthides Ti_4TbBi_2 with $T = Cr, Mn, Fe, Co$ and Ni // J. Solid State Chem. 1997. V. 133. P. 400–406.
15. Bauer E.D., Sidorov V.A., Bobev S., Mixson D.J., Thompson J.D., Sarrao J.L., Hundley M.F. High-pressure investigation of the heavy-fermion antiferromagnet $U_3Ni_5Al_{19}$ // Physical Review, Serie 3. B – Condensed Matter. 2005. V. 71. P. 1–12.
16. Shevchenko V.Ya., Ilyushin G.D., Blatov V.A. Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: New Two-Layer Nanocluster-Precursor $K44 = 0@8(U_2Ni_6) @36(U_{12}Ni_{24})$ in the Crystal Structure $U_{66}Ni_{96}-hR162$ // Glass Physics and Chemistry. 2021. V. 47. P. 525–532.

17. *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. № 6. P. 975–1043.
18. *Shevchenko V.Ya., Medrish I.V., Ilyushin G.D., Blatov V.A.* From clusters to crystals: scale chemistry of intermetallics // *Struct. Chem.* 2019. V. 30. P. 2015–2027
19. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds K_nM_m ($M = \text{Ag, Au, As, Sb, Bi, Ge, Sn, Pb}$): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports.* 2020. V. 65. № 7. P. 1095–1105.
20. *Ilyushin G.D.* Intermetallic Compounds Na_kM_n ($M = \text{K, Cs, Ba, Ag, Pt, Au, Zn, Bi, Sb}$): Geometrical and Topological Analysis, Cluster Precursors, and Self-Assembly of Crystal Structures // *Crystallography Reports.* 2020. V. 65. № 4. P. 539–545.
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.