ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 548.1 ТИПЫ КАТИОННОГО ПОРЯДКА В ОКТАЭДРИЧЕСКИХ ПОЗИЦИЯХ КРИСТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ ШПИНЕЛЕЙ

^{1,2}Широков В.Б., ¹Таланов В.М.

¹Южно-Российский государственный технический университет, Новочеркасск; ²Южный научный центр Российской академии наук, Новочеркасск, e-mail: valtalanov@mail.ru

Теоретико-групповым методом исследовано атомное упорядочение в структуре шпинели. Установлена возможность существования 320 фаз с упорядочением катионов в октаэдрических позициях 16(d) структуры шпинели. В их числе 8 бинарных и 11 тройных катионных сверхструктур. Проведено сопоставление теоретических результатов и экспериментальных данных.

Ключевые слова: структура шпинели, тетраздрические позиции, упорядоченные фазы, сверхструктуры

TYPES OF CATION ORDER IN OCTAHEDRAL SPINEL POSITIONS

^{1,2}Shirokov V.B., ¹Talanov V.M.

South-Russian State Technical University, Novocherkassk\$ South Scientific Center, Russian Academy of Sciences, e-mail: valtalanov@mail.ru

Group-theoretical methods are used to enumerate the structures of ordered spinels. The possibility of existence of 320 phases with different types of order in octahedral spinel positions 16(d) (including 8 binary and 11 ternary cation substructures) is determined. Comparison of theoretical results and experimental data is made.

Keywords: spinel structure, tetrahedral positions, ordered phases, superstructures

Для семейства кристаллов со структурой шпинели характерен очень широкий спектр различных физических и химических свойств, открывающих значительные возможности для важных применений [1-7]. Многие свойства шпинелей существенно зависят от упорядочения атомов в их структуре [8-23]. В этой статье мы рассмотрим возможные типы упорядочения атомов (возможные сверхструктуры) в октаэдрических позициях структуры шпинели. Ранее уже проводилось исследование катионного упорядочения в октаэдрических узлах шпинели [24]. Простой геометрический перебор возможных сверхструктур с порядком типа 1:1 в октаэдрической подрешетке шпинели привел к 12870 вариантам [24]. Если ограничиться только

изучением ячеек, содержащих центрированные грани, то останется только 198 случаев. Авторы [24] обсуждают возможности реального существования этих сверхструктур и после ряда предположений физического характера пришли к выводу о существовании двух сверхструктур с порядком 1:1 в октаэдрической подрешетке шпинели. Нами использован теоретико-групповой метод термодинамической теории фазовых переходов, детально описанный в [25-37]. Нами получены результаты, существенно отличные от выводов, полученных в [24].

Представление упорядочения, построенное на позиции 16(d) имеет размерность 52. Оно состоит из следующих неприводимых представлений

$$\mathbf{k}_{8}(\tau_{1}+\tau_{2}) + \mathbf{k}_{9}(\tau_{1}+t_{4}+t_{5}) + \mathbf{k}_{10}(\tau_{1}+\tau_{3}) + \mathbf{k}_{11}(\tau_{1}(\mathbf{A}_{1g}) + t_{7}(\mathbf{F}_{2g}))$$
(1)

Обозначения волновых векторов и неприводимых представления даны по книге О.В. Ковалева [38]. Приводимый параметр порядка (ПП) (1) генерирует 320 низкосимметричных упорядоченных фаз, включая фазу, индуцированную единичным представлением $\mathbf{k}_{11}\tau_1(\mathbf{A}_{1g})$. Среди этих фаз имеется 6 бинарных (фазы 1-6) и 9 тройных (фазы 7-15) сверхструктур (таблица). Так же, как и в подрешетке 8(а), такие упорядоченные структуры могут быть описаны ПП, преобразующимся по одному неприводимому представлению.

Упорядочение в бинарных сверхструктурах происходит по типам 1:1 и 1:3, а тройных – по типам 1:1:6, 2:3:3 и 1:1:2. Среди возможных сверхструктур имеются четыре пары энантиоморфных модификаций упорядоченных шпинелей.

Наиболее распространенными типами катионного упорядочения в позициях 16(d) шпинели являются структуры с пространственными группами Р4 22 (параметр порядка (0, 0, 0, 0, 0, j), $\mathbf{k}_{10}^{1(3)}\tau_1$), Р4 32 (параметр порядка (0, j, 0, j, 0, -j), $\mathbf{k}_{10}^{3(1)}\tau_1$) и Іbmm (параметр порядка (0, x, 0), $\mathbf{k}_{11}(t_7)$).

№ п/п	Параметры порядка	Символ про- странственной группы	V'/V	Трансля- ции при- митивной ячейки	Структурная формула
1	$(x, -x, x)^7$	D _{3d} ⁵ =(N166)	1	a_{1}, a_{2}, a_{3}	$A^{(c)}\underline{B^{(b)}_{1/2}B^{(e)}_{3/2}}X^{(c)}X^{(h)}_{3}$
2	(j, 0, j, 0, j, 0) ³	$T_{d}^{1} = (N215)$	4	$a_1 + a_2 + a_3, 2a_2, 2a_3$	$A_{1/8}^{(a)}A_{3/8}^{(c)}A_{1/2}^{(e)}\underline{B}_{1/2}^{(e)}\underline{B}_{3/2}^{(i)}X_{1/2}^{(e)}X_{1/2}^{(e)}X_{3/2}^{(i)}X_{3/2}^{(i)}$
3	$(0, x, 0)^7$	$\frac{D_{2h}^{28}=Imma}{(N74)}$	1	a_{1}, a_{2}, a_{3}	$\mathbf{A}^{(e)}\underline{\mathbf{B}^{(b)}\mathbf{B}^{(d)}}\mathbf{X}_{2}^{(h)}\mathbf{X}_{2}^{(i)}$
4	$(0, j, 0, j, 0, -j)^1$	$O^{6}=P4_{3}32(N212)$ $O^{7}=P4_{1}32(N213)$	4	$a_1 + a_2 + a_3, 2a_2, 2a_1$	$A^{(c)}\underline{B^{(a)}_{1/2}}\underline{B^{(d)}_{3/2}}X^{(c)}X^{(e)}_{3}$
5	$(0, j, 0, 0, 0, 0)^3$	D _{2d} ⁵ =(N115)	2	$a_1 + a_3, a_2, 2a_1$	$A_{1/4}^{(a)}A_{1/4}^{(c)}A_{1/2}^{(g)}\underline{B}^{(j)}\underline{B}^{(k)}\underline{X}^{(j)}X^{(j)}X^{(k)}X^{(k)}$
6	$(0, 0, 0, 0, 0, j)^1$	$D_4^{3}=P4_122(N91)$ $D_4^{47}=P4_3^{1}22(N95)$	2	$a_2 + a_3, 2a_2, a_1$	$\mathbf{A^{(c)}}\underline{\mathbf{B^{(a)}}}\overline{\mathbf{B^{(b)}}}\overline{\mathbf{X}_2^{(d)}}\overline{\mathbf{X}_2^{(d)}}$
7	$(0, j, 0, 0, j, 0)^1$ $(0, 0, 0, j, 0, 0)^3$ sec.	D _{2d} ³ =(N113)	4	$a_1 + a_2 + a_3, 2a_2, 2a_1$	$A^{(b)}_{1/4}A^{(c)}_{1/2}A^{(e)}_{1/2}\underline{B^{(e)}_{1/2}B^{(e)}_{1/2}B^{(f)}}X^{(e)}_{1/2}X^{(e)}_{1/2}X^{(e)}_{1/2}X^{(e)}_{1/2}X^{(f)}_{1/2}X^{(f)}$
8	$(0, 0, j, j, 0, 0)^1 (0, x, 0)^7$ sec.	D_{2h}^{7} =Pbmn(N53)	2	$a_1 + a_3, a_2, a_3, a_2, a_1$	$A^{(h)}\underline{B^{(b)}_{1/2}B^{(c)}_{1/2}B^{(g)}}X^{(h)}X^{(h)}X^{(i)}_2$
9	$(0, 0, h, 0)^4(x, -x, x)^7$ sec.	D _{3d} ⁵ =(N166)	2	$a_{1}, a_{3}, 2a_{2}$	$A_{1/2}^{(c)}A_{1/2}^{(c)}\underline{B}_{1/4}^{(a)}B_{1/4}^{(b)}B_{3/2}^{(h)}X_{1/2}^{(c)}X_{1/2}^{(c)}X_{3/2}^{(h)}X_{3/2}^{(h)}$
10	$(0, 0, h, 0)^{1}(x, -x, x)^{7}$ sec.	D _{3d} ⁵ =(N166)	2	$a_{1}, a_{3}, 2a_{2}$	$A_{1/2}^{(c)}A_{1/2}^{(c)}\underline{B}_{1/2}^{(c)}B_{3/4}^{(d)}B_{3/4}^{(c)}X_{1/2}^{(c)}X_{1/2}^{(c)}X_{3/2}^{(h)}X_{3/2}^{(h)}$
11	$(j, 0, 0, 0, 0, -j)^3$ (0, 0, j, 0, 0, 0) ¹ sec.	$\begin{array}{c} D_{4}^{3}=P4_{1}22(N91)\\ D_{4}^{4}=P4_{3}^{1}22(N95) \end{array}$	4	$a_1 + a_2 + a_3, 2a_2, 2a_3$	$A_{1/2}^{(a)}A_{1/2}^{(b)}\underline{B_{1/2}^{(c)}B_{1/2}^{(c)}B^{(d)}}X^{(d)}X^{(d)}X^{(d)}X^{(d)}$
12	$(0, \phi_1, 0, \phi_2, 0, -\phi_1)^1$	$\begin{array}{c} D_{4}^{4} = P4_{1}2_{1}2(N92) \\ D_{4}^{8} = P4_{3}2_{1}^{2}2(N96) \end{array}$	4	$a_1 + a_2 + a_3, 2a_2, 2a_1$	$A^{(b)}\underline{B^{(a)}_{1/2}B^{(a)}_{1/2}B^{(b)}}X^{(b)}X^{(b)}X^{(b)}X^{(b)}$
13	$(\xi_1, -\xi_1, \xi_2)^7$	$C_{2h}^{3} = C2/m(N12)$	1	a_{1}, a_{2}, a_{3}	$A^{(i)}\underline{B^{(b)}_{1/2}B^{(d)}_{1/2}B^{(e)}}X^{(i)}X^{(i)}X^{(j)}_2$
14	$(j, j, 0, 0, 0, 0)^3$ $(0, 0, x)^7$ sec.	D _{2h} ⁵ =Pcmm(N51)	2	$a_1 + a_2, a_3, a_3, 2a_1$	$A_{1/2}^{(e)}A_{1/2}^{(f)}\underline{B_{1/2}^{(b)}B_{1/2}^{(e)}B^{(k)}}X^{(k)}X^{(k)}X^{(k)}X^{(k)}X^{(k)}$
15	$(\phi_1, 0, \phi_2, 0, -\phi_2, 0)^3$	D _{2d} ¹ =(N111)	4	$a_1 + a_2 + a_3, 2a_2, 2a_1$	$A_{1/8}^{(a)}A_{1/8}^{(d)}A_{1/4}^{(f)}A_{1/2}^{(n)}\underline{B}_{1/2}^{(n)}\underline{B}_{1/2}^{(n)}B^{(o)}$
16	$(0, 0, q, q, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^1$	$D_{2d}^{12} = (N122)$	4	$a_1 + a_2 - a_3, a_1 + a_2, a_1 + a_3$	$A^{(a)}_{1/4}A^{(b)}_{1/4}A^{(d)}_{1/2}\underline{B^{(e)}B^{(e)}}X^{(e)}X^{(e)}X^{(e)}X^{(e)}$
17	$\begin{array}{c} (0,0,0,0,0,0,q,0,0,0,0)^{1} \\ (j,0,0,0,0,0)^{3} \text{sec.} \end{array}$	$D_{2d}^{11} = (N121)$	4	$a_1 + a_2 - a_3, a_1 + a_2, a_1 + a_3$	$A_{1/8}^{(a)}A_{1/8}^{(b)}A_{1/4}^{(d)}A_{1/2}^{(i)}\underline{B_{1/2}^{(i)}B_{1/2}^{(i)}}B^{j}X_{1/2}^{(i)}X_{1/2}^{(i)}X_{1/2}^{(i)}X_{1/2}^{(i)}X_{1/2}^{(j)}X_{1/2}^$
18	$(0, q, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^2$ $(0, j, 0, 0, 0, 0)^3$ sec.	$D_{2d}^{11} = (N121)$	4	$a_1 + a_2 - a_3, a_1 + a_2, a_1 + a_3$	$A_{1/4}^{(c)}A_{1/4}^{(e)}A_{1/2}^{(j)}\underline{B_{1/2}^{(i)}B_{1/2}^{(i)}B^{j}}X_{1/2}^{(i)}X_{1/2}^{(i)}X_{1/2}^{(i)}X_{1/2}^{(i)}X_{1/2}^{(j)}X_{1/2}^$
19	$(0, 0, q, q, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^2$	$D_{2d}^{12} = (N122)$	4	$a_1 + a_2 - a_3,$ $2a_1 + a_2 + a_3,$	$A_{1/2}^{(d)}\overline{A_{1/2}^{(c)}} \underline{B}^{(e)} \underline{B}^{(e)} \overline{X}^{(e)} \overline{X}^{(e)} \overline{X}^{(e)} \overline{X}^{(e)}$

Бинарное и тройное катионное упорядочение в вайковой позиции 16(d) структуры шпинели

Примечание. Обозначения для ПП: **k**_g **q**, **k**₉ **- h**; **k**₁₀ **- j**, **k**₁₁ **- x**. Верхний индекс после круглой скобки – номер представления по Ковалеву [38], V'/V – изменение объема примитивной ячейки в результате структурного фазового превращения. Верхний индекс в стехиометрической формуле – обозначение типа позиции по интернациональным таблицам.

Особенностью строения упорядоченных энантиоморфных Р4 22- и Р4 22- фаз, а также Р4 32- и Р4 32- фаз является то, что среди элементов¹ симметрии пространственной группы её структуры нет инверсии и плоскостей симметрии, а есть только оси симметрии. Такие кристаллы могут существовать в правой и левой модификациях, являющихся зеркальными отражениями друг друга. По физическим свойствам они не различимы (исключая оптическую активность). В кристаллах LiFe O они существуют в одном образце как⁵ различные домены [39].

Структуры упорядоченных шпинелей с энантиоморфными пространственными группами P4 22 и P4 22. Эти структуры образуются в результате фазового перехода с критическим параметром порядка, преобразующимся по шестимерному НП $k_{10}\tau_1$. Упорядочение катионов типа 1:1, расположенных в октаэдрических позициях структуры кубической шпинели, сопровождается смешениями тетраэдрических и октаэдрических катионов, а также смещениями анионов. В низкосимметричной фазе упорядочиваются и анионы (тип порядка 1:1). Структурная формула низкосимметричной фазы А^{4(c)}В^{4(a)}В^{4(a)}Х^{8(d)}, Х^{8(d)}, Структуру Р4 22-фаз имеют LiZnNbO₄, Li TeO₅, A TiO (где A=Zn, Mn, Mg); Zn GeO₄), $L_{1}^{2}MnNbO_{4}, Zn_{0.8}Co_{1.2}GeO_{4}.$

Структуры упорядоченных шпинелей с энантиоморфными пространственными группами Р4.32 и Р4.32. Это один из наиболее распространенных типов упорядоченных шпинельных структур. Критическое НП $\mathbf{k}_{10}\tau_1$. входит как в перестановочное (на позициях 16(d) и 32(e)), так и в механическое (на позициях 8(а), 16(d), 32(е)) представления кристалла и поэтому понижение симметрии кристаллов обусловлено смещениями всех типов атомов и упорядочениями октаэдрических катионов и анионов. В низкосимметричной фазе упорядочиваются октаэдрические катионы и анионы (тип порядка 1:3 в обоих случаях). Струкнизкосимметричной турная формула турная формула низкосимметричной фазы $A^{8(c)}B^{4(B)}B^{12(d)}X^{8(c)}X^{24(e)}$. Структуру упорядоченной P4 32 (O⁶⁽⁷⁾)-фазы име-ют модификации ^{3(L}LiM O (M=Al, Ga), Zn₃Ni₂TeO₈, Zn₂Co₃TeO₈ ⁸CuMg_{0.5}Mn_{1.5}O₄, Cu_{1.5}Mn_{1.5}O₄, Zn₂Mn₃O₈, ZnMGe₃O₈ M=Mn, Mg, M₂Ge₃O₈ M=Zn, Co, ZnMTi₃O₈ M= Mn, Cd MTi O M=Zn Mn Co V Co O Mn, Cd, $M_2Ti_3O_8$ M=Zn, Mn, Co, $V_2Co_3O_8$, Li₂Mn₃CoO₂, Li_{0.5+0.5x} Fe_{2.5-1.5x} Ti₂O₄ (0³ x ³ 0.4, 1.2 ³ x ³ 1.57), Na₄Ir₃O₈, LiMnTiO₄, Na₄Sn₃O₈, $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_{4}$ $LiFe_{5-x}Mn_xO_8$ $(0 \le x \le 1),$

LiFe O₈, LiMg_{0.1}Ni_{0.4}Mn_{1.5}O₄, LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O₄, LiNi_{0.5}⁵Mn_{1.5}O₄, Li_{1.25}Fe_{0.25}Ti_{1.5}O₄, Li₂Mn₃MO₈ (M=Mg, Zn), LiMg_{0.5}Mn_{1.5}O₄, CuMg_{0.5}Mn_{1.5}O₄, Li_xMg_{1.2x}Fe_{2+x}O₄ x ³ 0.40, LiMg_xMn_{2.x}O₄ (x>1), Li₂CoTi₃O₈, Li₂Zn₃O₈, Li₂Ge₃O₈, LiM_{0.5}Ti_{1.5}O₄, LiM_{0.5}Ge_{1.5}O₄ (M=Mg, Co, Ni, Zn), Li_{1.33x}Co_{2-2x}Ti_{1+0.67}xO₄, Li_{1-0.5x}Fe_{2.5x}Mn_{2-2x}O₄, LiMn_{2-y}Ti_yO₄ (y>1), LiFe_{0.5}Ti_{1.5}O₄ и другие.

Структура упорядоченной шпинели с пространственной группой Ітта. Критическое НП $\mathbf{k}_{11}\mathbf{t}_7$ входит в механическое представление кристалла на позициях 8(а) и 32(е) и в перестановочное представление на позициях 16(d) и 32(e). Следовательно, низкосимметричная модификация Ітта-фазы образуется в результате смещений тетраэдрических катионов и анионов, а также упорядочения октаэдрических катионов и анионов (в обоих случаях образуется порядок типа 1:1). Структурная формула низкосимметричной фазы A^{4(e)}B^{4(a)} В^{4(d)}X^{8(h)}, X⁸⁽ⁱ⁾, Структуру упорядоченной Imma -фазы имеют низкосимметричные модификации шпинелей Li₂CoCl₄, Li₂MnBr₄, Li₂MgBr₄, LiVCuO₄,

$$Li_{1-x}CuVO_4$$
 ($0 \le x \le 0.2$), $LiSbZnO_4$, Li_2FeCl_4 .

Результаты работы получены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания на проведение НИОКР, шифр заявки № 6.8604.2013.

Список литературы

1. Крупичка С. Физика ферритов и родственных им материалов. – М.: Мир, 1976. – 353 с.

2. Таланов В.М. Энергетическая кристаллохимия многоподрешеточных кристаллов (модель упругих катион-анионных связей). – Ростов н/Д: Изд-во РГУ, 1986. – 158 с.

3. Talanov V.M, Shirokov V.B. // Acta Crystallographica A. - 2012. - V. 68. - P.595-606.

4. Таланов В.М., Воробьев Ю.П., Мень А.Н. // Геохимия. – 1976. – N7. – С. 1021-1037.

5. Talanov V.M. // J. Solid State Chemistry. – 1983. -V. $48.-P.\,86\text{-}92.$

6. Муковнин А.А., Таланов В.М. // Журнал физической химии, 2012. – № 12, с. 1920–1925.

7. Mukovnin A.A., Talanov V.M. // Solid State Communications. – 2012. –V.152 – P. 2013-2017

8. Таланов В.М. // Кристаллография. – 1986. – Т. 31, вып. 2. – С. 385-386.

9.Езикян В.И., Ерейская Г.П., Таланов В.М., Ходарев О.Н. // Электрохимия. – 1988. – Т. 24. – В.12. – С.1599 – 1604.

10. Таланов В.М., Широков В.Б., Торгашев В.И., Бергер Г.А., Бурцев В.А. // Физика и химия стекла. – 2007. – Т.33, N6. – С. 822–834.

11. Горяга А.Н., Таланов В.М., Борлаков Х.Ш. // В кн.: Сегнетомагнитные вещества – М.: Наука, 1990. – с. 79-85.

12. Таланов В.М., Безруков Г.В., Третьяков Ю.Д. // Докл. АН СССР. – 1987. – Т. 293, N 5. – С. 1160-1162.

13. Talanov V.M., Bezrukov G.V. // Solid State Commun. – 1985. – V. 56, N 10. – P. 905-908.

14. Talanov V.M., Bezrukov G.V. // Solid State Communications. – 1990. – V. 75, N 7. – P. 601-604.

15. Talanov V.M., Bezrukov G.V. // Physica. Status. Solidi. A. Applied Research. – 1986. – V. 96. – P. 475-482.

16. Talanov V.M., Bezrukov G.V. // Physica. Status. Solidi. A. Applied Research. – 1986. – V. 97. – P. 111-119.

17. Talanov V.M., Bezrukov G.V., Men A.N. // Physica. Status. Solidi. A. Applied Research. – 1989. – V. 116. – P. 603-613.

18. Таланов В.М., Безруков Г.В. // Изв. Сев. – Кавк. науч. центра высш. шк. Естеств. науки. – 1988. – № 2. – С. 109-112.

19. Таланов В.М., Безруков Г.В., Борлаков Х.Ш. // Журн. физ. химии. – 1986. – Т.10, N 9. – С. 2127-2132.

20. Таланов В.М., Безруков Г.В. // Журн. физ. химии.-1986. – Т. 10, N 9. – С. 2133-2137.

21. Таланов В.М., Безруков Г.В. // Журн. физ. химии. – 1989. – Т. 63, вып. 10. – С. 2807-2810.

22. Таланов В.М., Безруков Г.В. // Журн. физ. химии. – 1990. – Т. 64, N 9. – С. 2574-2576.

23. Таланов В.М., Безруков Г.В. // Журн. физ. химии. – 1985. – Т. 59, N 1. – С. 27-31.

24. Billet Y., Morgenstern-Badarau I., Michel A. // Bull Soc. fr. Mineral. Cristallogra.-1967.- V.90, N1- P.8-19.

25. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. – М.: Наука. – 1976. – 584с.

26. Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. – М.: Наука, 1982. – 304с.

27. Сахненко В.П., Таланов В.М., Чечин Г.М. Возможные фазовые переходы и атомные смещения в кристаллах с пространственной группой Oh7. 1 / Ред. журн. Изв. вузов.

Физика. – Томск, 1981. – 26с. – Деп. в ВИНИТИ 23.11.81, N 638-82.

28. Сахненко В.П., Таланов В.М., Чечин Г.М., Ульянова С.Н. Возможные фазовые переходы и атомные смещения в кристаллах с пространственной группой Oh7. 2. Анализ механического и перестановочного представлений / Ред. журн. Изв. вузов. Физика. – Томск, 1983. – 61с. – Деп. в ВИ-НИТИ 30.11.83, N 6379-83.

29. Сахненко В.П., Таланов В.М., Чечин Г.М. // Физика металлов и металловедение. – 1986. – Т. 62, вып. 5. – С. 847-856.

30. Talanov V.M. // Phys. Stat.Sol (a). -1989. – V.115. – P.K.1-4.

31. Talanov V.M. // Physica. Status. Solidi. B. – 1990. – V. 162. – P. 339-346.

32. Talanov V.M. // Physica. Status. Solidi. B. - 1990. - V. 162. - P. 61-73.

33. Talanov V.M. // Физика и химия стекла. – 2007. – Т. 33, N6. – С. 852-870.

34. Таланов В.М., Чечин Г.М. // Кристаллография. – 1990. – Т.35, в.4.- С.1008-1011.

35. Таланов В.М. // Журн. структ. химии. – 1986. – Т.31, вып. 2. – С.172-176.

36. Таланов В.М. // Кристаллография. – 1996. – N6. – С.979 – 997.

37. Таланов В.М. // Физика и химия стекла. — 2005. — Т. 31, N3. — С. 431-434.

38. Ковалев О.В. Неприводимые представления пространственных групп. – Киев: Издательство АН УССР, 1961 – 155с.

39. Omer Van der Biest, Thomas G. // Acta Crystallogr. – 1975. – V.A31. – P.70 – 76.