

УДК 539.213:539.264:548.734

## ФРАГМЕНТАРНАЯ МОДЕЛЬ КАК МЕТОД ФАЗОВОГО АНАЛИЗА ДИФРАКЦИОННО-АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ

© 2009 К.Б. Алейникова, Е.Н. Зинченко\*

Воронежский государственный университет

Статья поступила 16 декабря 2008 г.

Изложены основные теоретические положения фрагментарной модели. Показано, что при построении модельных функций радиального распределения атомов не используются параметры экспериментальной функции радиального распределения, и модель может быть использована для идентификации дифракционно-аморфных нанодисперсных материалов, анализа атомной структуры классических стекол, фазового анализа аморфных материалов. Методика проста в применении, не требует громоздких расчетов, отсутствует необходимость в проведении релаксации.

**Ключевые слова:** дифракционно-аморфные нанодисперсные материалы, стекла, структурный анализ, идентификация, фрагментарная модель.

### ВВЕДЕНИЕ

Структуру аморфных материалов изучают с помощью моделей, которые базируются на случайному распределении структурных элементов. Это сетки Захариазена в стеклах, полиэдры Бернала в металлах, даже кристаллитные модели — и те базируются на случайному распределении дефектов, что в результате приводит к согласию с экспериментом не более чем в трехчетырех координационных сферах. В настоящее время все шире используется метод Уоррена—Финбека, опирающийся при построении модельных функций радиального распределения атомов (ФРРА) на структурные данные [1—3]. Однако до сих пор не существует общепринятого метода анализа атомной структуры аморфных веществ с большой (~1 нм) областью упорядочения, не использующего при построении модельной ФРРА параметры экспериментальной.

В настоящей статье представлены результаты наших многолетних исследований фазового анализа нанодисперсных дифракционно-аморфных материалов и стекол, проведенного в рамках предложенной нами фрагментарной модели [4—8]. В этом методе модельная ФРРА строится по полным кристаллоструктурным данным кристалла-аналога, далее экспериментальная ФРРА сравнивается с модельными кривыми по положению и относительному наполнению максимумов. При проведении фазового анализа предполагается, что исследуемое аморфное вещество состоит из фрагментов структур тех кристаллических фаз, образование которых возможно при его элементном составе.

### ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ

Метод фазового анализа аморфных материалов включает в себя две большие задачи. Одна из них — получение экспериментальной ФРРА с большой областью упорядочения, другая — построение модели, способной интерпретировать полученные в эксперименте результаты. Известно, что дифракционная картина от поликристалла с размерами кристаллитов в 1 нм даже для металлов с малым параметром элементарной ячейки будет полностью аналогична дифрак-

\* E-mail: zinchenko@phys.vsu.ru

ционной картине от аморфного материала. Дифракционные линии на дебаеграмме вырождаются в диффузные гало, и доказать, что в образце присутствуют нанодисперсные частицы какого-либо известного кристалла, обычными порошковыми методами не представляется возможным. Фурье-преобразование обработанной определенным образом кривой интенсивности позволяет получить экспериментальную ФРРА, максимумы которой отвечают наиболее вероятным межатомным расстояниям в исследуемом веществе. Экспериментальная ФРРА рассчитывается по формуле [ 9, 10 ]:

$$4\pi r^2 \rho(r) = 4\pi r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_0^{S_{\max}} S \cdot i(S) \sin(Sr) dS, \quad (1)$$

где  $i(S)$  — интерференционная функция [ 9 ], связанная с нормированной экспериментальной

интенсивностью  $I^H(S)$  выражением:  $i(S) = \frac{I^H(S) - \sum f_j^2(S)}{\sum f_{\text{ед.}}^2(S)}$ . Являясь интегралом от интен-

сивности, экспериментальная ФРРА представляет собой линейное сечение функции межатомных расстояний или функции Патерсона, которая в случае аморфного вещества будет сферически-симметричной.

В качестве модели аморфного вещества будем рассматривать нанодисперсный поликристалл с областями когерентного рассеяния (кристаллитами)  $\sim 1$  нм. Для каждого нанодисперсного кристаллита функция Патерсона дискретна, но так как в облучаемом объеме таких кристаллитов бесконечно много, а их ориентация идеально хаотична, то каждый межатомный вектор с весом  $f_i \cdot f_j$  на конце опишет сферу. Линейное сечение этой сферы будет представлять собой ФРРА нанодисперсного аналога монокристалла. Дискретная функция Патерсона в классическом структурном анализе дает возможность определить атомную структуру монокристаллов. Линейное сечение сферически-симметричной функции Патерсона позволит нам идентифицировать кристалл-аналог в нанодисперсном дифракционно-аморфном состоянии. Такое сечение можно построить, используя полные структурные данные монокристалла. Эта мысль легла в основу фрагментарной модели. В данном случае под фрагментом структуры мы понимаем всю элементарную ячейку кристалла, но, как будет показано ниже, из нее можно выделять отдельные части.

Чтобы продемонстрировать возможность сравнения рассчитываемой нами модельной ФРРА с экспериментом, нами были сделаны преобразования известной формулы Дебая. Для изотропного аморфного вещества формула Дебая имеет вид [ 11 ]

$$I(S) = F^2 = \sum_i \sum_j f_i f_j \frac{\sin(Sr_{ij})}{Sr_{ij}}.$$

Перенося в левую часть равенства все члены двойной суммы с  $i = j$  и заменяя в правой части атомную амплитуду на относительную рассеивающую способность атомов  $K$  в соответствии с [ 9 ], преобразуем выражение к виду:

$$S \frac{I^H(S) - \sum f_j^2(S)}{\sum f_{\text{ед.}}^2(S)} = \frac{1}{M} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{1}{r_{ij}} K_i K_j \sin(Sr_{ij}),$$

где  $M$  — число формульных единиц в атомном скоплении. Умножим левую и правую части полученного уравнения на  $\frac{2r}{\pi} \sin(Sr)$ , проинтегрируем обе части по  $S$  и добавим к левой части член  $4\pi r^2 \rho_0$ , определяющий малоугловое рассеяние. Получим выражение

$$4\pi r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_0^{S_{\max}} S \cdot i(S) \sin(Sr) dS = \frac{2r}{\pi M} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{1}{r_{ij}} K_i K_j \int_0^{S_{\max}} \sin(Sr_{ij}) \sin(Sr) dS. \quad (2)$$

Его левая часть представляет собой формулу для расчета экспериментальной ФРРА. Правую

часть мы используем для вычисления модельной ФРРА по кристаллоструктурным данным кристалла-аналога, т.е. радиального сечения сферически-симметричной функции Патерсона.

По формуле в правой части ур. (2) можно рассчитать ФРРА для любой модели, если известны все межатомные расстояния  $r_{ij}$ . Для каждого значения  $r_{ij}$  должна быть рассчитана парная функция, т.е. в каждой точке  $r$  вычисляется интеграл, а так как каждое межатомное расстояние повторяется дважды, то парную функцию удваивают. Парные функции, рассчитанные для всех  $r_{ij}$ , складывают и получают модельную ФРРА. Чтобы иметь возможность сравнивать положения максимумов модели с экспериментальной ФРРА в области упорядочения  $\sim 1$  нм, необходимо учитывать межатомные расстояния до 1,5 нм. Внутри сферы радиусом 1,5 нм может находиться от нескольких сотен до полутора тысяч атомов, и расчет модельной ФРРА в строгом соответствии с правой частью ур. (2) для случайной группировки атомов разного сорта становится чрезвычайно сложным.

Если аморфное вещество представляет собой нанодисперсный поликристалл, когда в линейных размерах кристаллитов укладывается 2—3 элементарные ячейки, то наличие кристаллической симметрии позволяет нам сделать этот расчет достаточно простым. Все атомы, связанные элементами симметрии (кристаллохимически зависимые), имеют абсолютно одинаковое окружение. Поэтому из каждой группы кристаллохимически зависимых атомов достаточно выбрать один, ближайший к началу координат, и для него провести расчеты всех межатомных расстояний от минимального до 1,5 нм.

В структурном анализе аморфных веществ расчет экспериментальной ФРРА проводят для единицы состава (одной формульной единицы). Определим число идентичных межатомных расстояний  $r_{ij}$ , приходящихся на единицу состава в кристаллическом бинарном соединении  $A_xB_y$ . Идентичными назовем межатомные расстояния, одинаковые по величине и типу. В двухкомпонентном соединении имеются три типа межатомных расстояний:  $A—A$ ,  $A—B$  и  $B—B$ . Пусть в кристаллической структуре соединения  $A_xB_y$  имеются  $q_t^i$  и  $q_t^j$  независимых атомов сорта A и B соответственно, каждый из которых находится в позиции кратностью  $k_t^i$  и  $k_t^j$ . Если у  $q_t^i$  независимых атомов сорта A с кратностью позиций  $k_t^i$  имеется  $n_l^i$  одинаковых межатомных расстояний  $r_{lj}$ , то число этих межатомных расстояний, приходящихся на одну элементарную ячейку, будет  $\sum_{l=1}^{q_t^i} n_l^i k_l^i$ . Всего атомов сорта A в элементарной ячейке  $\sum_{t=1}^{q_t^i} k_t^i$ . На один атом

А в элементарной ячейке приходится  $\sum_{l=1}^{q_t^i} n_l^i k_l^i \Big/ \sum_{t=1}^{q_t^i} k_t^i$  межатомных расстояний  $r_{ij}$ , а на  $x$  атомов

сорта A в формульной единице  $x \cdot \sum_{l=1}^{q_t^i} n_l^i k_l^i \Big/ \sum_{t=1}^{q_t^i} k_t^i$ . Учтены все идентичные межатомные расстояния от атома A к B; число их равно  $N_{ij}$ . Рассуждая аналогичным образом, получим число

идентичных межатомных расстояний  $r_{ij}$  от атома B к A равным  $y \cdot \sum_{l=1}^{q_t^j} n_l^j k_l^j \Big/ \sum_{t=1}^{q_t^j} k_t^j$ . Этих рас-

стояний должно быть тоже  $N_{ij}$ . Равенство значений  $N_{ij}$ , полученных в первом и во втором случаях, говорит об отсутствии потерь межатомных расстояний и, следовательно, о правильности расчетов, так как соблюден принцип замкнутости связей. Таким образом, формула для расчета числа идентичных межатомных расстояний, приходящихся на единицу состава, будет иметь вид:

$$2N_{ij} = x \frac{\sum_{l=1}^{q_t^i} n_l^i k_l^i}{\sum_{t=1}^{q_t^i} k_t^i} + y \frac{\sum_{l=1}^{q_t^j} n_l^j k_l^j}{\sum_{t=1}^{q_t^j} k_t^j}.$$

При расчете числа расстояний, приходящихся на одну формульную единицу, между атомами одного сорта пользуемся только первым (A—A) или только вторым (B—B) членом формулы.

Несмотря на то что межатомные расстояния мы рассчитываем только для одного из каждой группы кристаллохимически зависимых атомов, число различных межатомных расстояний может достигать десяти тысяч. Для сокращения времени расчетов модельной ФРРА одинаковые по типу и близкие по величине межатомные расстояния объединяем гауссианой, следя за тем, чтобы ее дисперсия была значительно меньше тепловых колебаний атомов, свойственных данной структуре. Тепловую поправку  $\exp(-\alpha^2 S^2)$  можно при необходимости внести отдельно.

Среднее значение  $\bar{r}_{ij}$  рассчитываем по формуле  $\bar{r}_{ij} = \frac{\sum r_{ij}^p \cdot 2N_{ij}^p}{\sum_p 2N_{ij}^p}$ , а дисперсию —  $\sigma_{ij}^2 = \frac{\sum (r_{ij}^p - \bar{r}_{ij})^2 \cdot 2N_{ij}^p}{\sum_p 2N_{ij}^p}$ . Объединяя межатомные расстояния, их  $2N_{ij}$  складываем. Функцию пар атомов рассчитываем для каждого  $\bar{r}_{ij}$ . Сортировка межатомных расстояний по типам (A—A, A—B, B—B) позволяет учесть парциальный вклад каждого типа межатомных расстояний в модельную ФРРА, которую получаем суммированием всех рассчитанных парных функций. Учитывая все вышеизложенное и заменяя  $\rho_0$  в соответствии с [9], получим:

$$\begin{aligned} 4\pi r^2 \frac{d}{M_{\text{ усл.ед.}} m_H} \left( \sum_{\text{ ф.ед.}} K_j \right)^2 + \frac{2r}{\pi} \int_0^{S_{\max}} S \cdot i(S) \sin(Sr) dS = \\ = \frac{2r}{\pi} \sum_{ij} \sum_l \frac{2N_{ij}^l}{\bar{r}_{ij}^l} K_i K_j \int_0^{S_{\max}} \sin(S \bar{r}_{ij}^l) \sin(Sr) \exp\left(-\frac{\sigma_{ij}^{l2} S^2}{2}\right) dS. \end{aligned} \quad (3)$$

Множитель  $1/M$  в правой части отсутствует, так как расчеты проведены для одной формульной единицы, а не для всего атомного скопления. Суммирование по  $ij$  идет по типам межатомных расстояний, а суммирование по  $l$  ведется по количеству межатомных расстояний  $\bar{r}_{ij}$  одного типа. Для однокомпонентной системы  $K_i = K_j$  в правой части выражения (3) останется суммирование только по  $l$ . Полученная модельная ФРРА характеризует гипотетический нанодисперсный поликристалл, в котором сохраняются свойственные монокристаллу межатомные расстояния и их число, приходящееся на одну формульную единицу. Расчет межатомных расстояний  $r_{ij}$  с их  $2N_{ij}$  в кристаллической структуре, их сортировка, вычисление модельной и экспериментальной ФРРА проводится по комплексу программ, разработанному авторами.

В окончательном варианте мы сравниваем две кривые, полученные независимо друг от друга. Это экспериментальная ФРРА (левая часть выражения (3)), полученная из дифракционного эксперимента, и модельная (правая часть (3)), рассчитанная по структурным данным кристалла-аналога. Если все средние межатомные расстояния (радиусы координационных сфер) у обеих кривых совпадают, то можно утверждать, что исследуемое аморфное вещество есть нанодисперсный аналог кристалла, по структурным данным которого построена модель. Модельная ФРРА может быть построена для кристаллических структур любой сложности, содержащих произвольное количество компонент.

На рис. 1 приведена модельная ФРРА, построенная по структурным данным  $\beta$ -ZnP<sub>2</sub>. Она колеблется вокруг параболы  $4\pi r^2 \rho_x$ , где  $\rho_x$  вычисляется из рентгеновской плотности  $\beta$ -ZnP<sub>2</sub>. Плотность аморфного вещества  $\rho_0$  (входит в малоугловой член) всегда меньше  $\rho_x$ . Чтобы модельную и экспериментальную ФРРА было удобнее сравнивать, модельную ФРРА приводили к плотности экспериментальной.

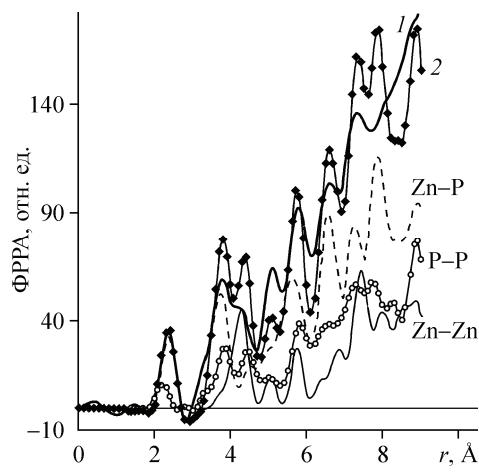


Рис. 1. Экспериментальная (1) и модельная (2) ФРРА  $\beta$ -ZnP<sub>2</sub>

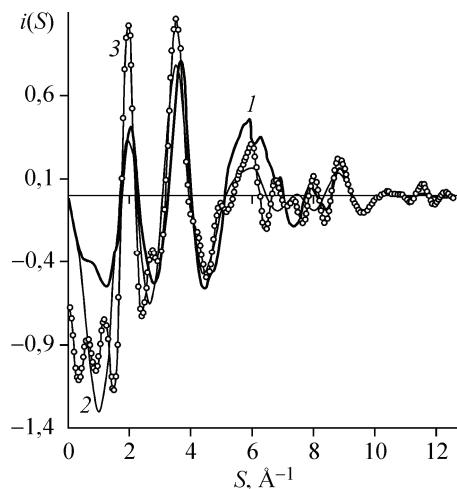


Рис. 2. Экспериментальная интерференционная функция тонкой аморфной пленки на основе  $\beta$ -ZnP<sub>2</sub> (1) и модельные  $i(S)$ , вычисленные при верхнем пределе интегрирования по  $r$ , равному 5 Å (2) и 11 Å (3)

При расчете модельной ФРРА "область упорядочения" определяется последними самыми большими значениями рассчитанных  $r_{ij}$  и формально ограничивается желанием и возможностями экспериментатора. Проводя обратное Фурье-преобразование с разными значениями верхнего предела интегрирования по  $r$ , можно проследить, какие изменения будут происходить в модельной интерференционной функции и на что следует обращать особое внимание при проведении эксперимента и обработке экспериментальной кривой интенсивности.

На рис. 2 приведены две модельные  $i(S)$ , построенные для "области упорядочения" 5 и 11 Å модельной ФРРА для  $\beta$ -ZnP<sub>2</sub>. Из рисунка видно, что с увеличением "области упорядочения" модельная интерференционная функция структурируется. На гладких максимумах, которые получаются при верхнем пределе интегрирования по  $r = 5$  Å, появляется тонкая структура в виде дополнительных максимумов, наплывов. То есть большую область упорядочения можно получить, выявляя в реальном эксперименте тонкую структуру диффузных максимумов. Получить информативную экспериментальную кривую в области малых  $S$  можно на мягком излучении, а для того чтобы повысить разрешение экспериментальной ФРРА и уменьшить влияние волн обрыва, лучше использовать коротковолновое излучение. Эксперимент проводили на двух излучениях ( $\text{Cu}K_\alpha$  и  $\text{Mo}K_\alpha$ ), а затем "сшивали" нормированные интерференционные функции, максимально сохраняя информацию, полученную на мягкому излучении.

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Согласно рис. 1 положения максимумов модельной и экспериментальной ФРРА хорошо совпадают во всей области упорядочения. Следовательно, можно утверждать, что в тонкой аморфной пленке, полученной лазерным испарением в вакууме монокристаллов  $\beta$ -ZnP<sub>2</sub>, содержатся нанодисперсные кристаллиты исходной фазы. Модельная ФРРА строится по межатомным расстояниям идеального кристалла, и ее максимумы должны быть выше, чем максимумы экспериментальной кривой реального образца. В рассматриваемом случае исключением является четвертый максимум экспериментальной ФРРА, который оказался выше модельного, а третий максимум уменьшился больше чем другие. В кристалле по этим межатомным расстояниям проходит плоскость скола, и это наиболее вероятная граница нанодисперсных кристаллитов в аморфной пленке [ 7 ].

Фрагментарная модель была применена нами для идентификации аморфного осадка, полученного при растворении в воде оксофторниобата калия  $K_{2-x}\text{Nb}_4\text{O}_3(\text{O},\text{F})_3\text{F}$ , композитная струк-

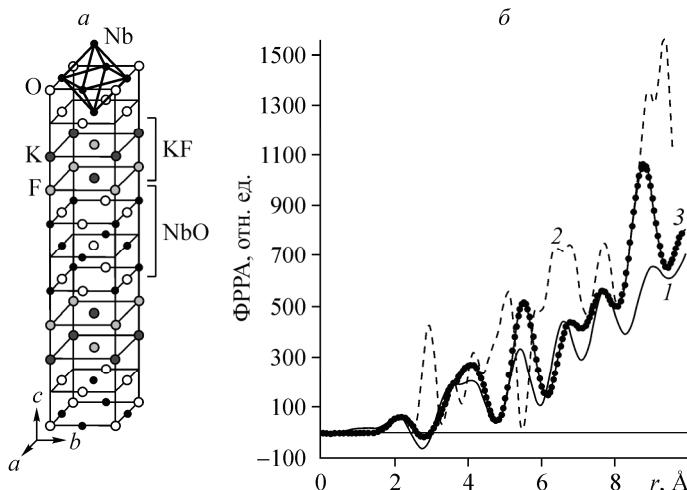


Рис. 3. Кристаллическая структура  $K_{2-x}Nb_4O_3(O,F)_3F$ ; в верхней части рисунка выделен октаэдр  $Nb_6$  — *а*; экспериментальная ФПРА аморфного осадка (1) и модельные ФПРА кристаллов-аналогов  $K_{2-x}Nb_4O_3(O,F)_3F$  (2) и  $N\text{-Nb}_2\text{O}_5$  (3) — *б*

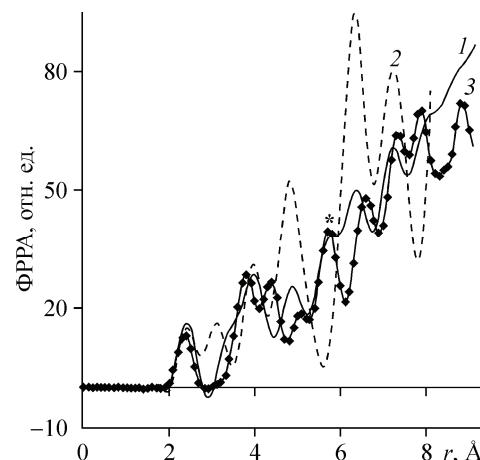


Рис. 4. Экспериментальная ФПРА (1) тонкой пленки на основе  $Zn_3P_2$  и модельные ФПРА кристаллов-аналогов  $Zn_3P_2$  (2) и  $\beta\text{-ZnP}_2$  (3). \* — максимум экспериментальной ФПРА при 5,7 Å

тура которого состоит из блоков оксида ниобия NbO и слоев KF (рис. 3, *a*). Предполагалось, что KF растворяется, а в осадок выпадают блоки оксида ниобия. Было показано [5], что при растворении оксидные блоки изменяют структуру, превращаясь в *N*-форму  $Nb_2O_5$ , в которой отсутствуют октаэдры  $Nb_6$ . Наиболее заметны различия между модельной ФПРА кристаллолов-аналога  $N\text{-Nb}_2\text{O}_5$  и экспериментальной кривой аморфного осадка во втором максимуме (см. рис. 3, *б*). Эти максимумы образованы межатомными расстояниями Nb—Nb, находящимися в соседних октаэдрах  $NbO_6$ . В кристалле октаэдры преимущественно связаны вершинами и лишь немногие — ребрами. Увеличение в аморфной фазе числа октаэдров, связанных ребрами, приводит к раздвоению второго максимума экспериментальной кривой.

Двухфазной оказалась тонкая аморфная пленка, полученная лазерным распылением монокристаллов  $Zn_3P_2$ . Модельная ФПРА, построенная по структурным данным  $Zn_3P_2$ , не позволяла объяснить максимум экспериментальной ФПРА при 5,7 Å (рис. 4). Его удалось объяснить, наложив на экспериментальную ФПРА две модельные кривые: одну, построенную по структурным данным  $Zn_3P_2$ , другую — по структурным данным  $\beta\text{-ZnP}_2$ . Чтобы иметь возможность сравнивать модельные и экспериментальные ФПРА соединений разных составов, кривые приводили к одному усредненному атому простым делением на число атомов в формульной единице. При разрушении монокристаллического  $Zn_3P_2$  увеличиваются расстояния между атомами цинка, находящимися в соседних тетраэдрах из атомов фосфора в алмазоподобной избыточной тетраэдрической фазе, которой принадлежит структура нормального фосфида цинка. Вследствие этого второй максимум экспериментальной ФПРА имеет наплыв со стороны малых *r*, в то время как на модели 2-й и 3-й максимумы хорошо разрешены [7].

Особенно интересным оказалось применение фрагментарной модели к анализу атомной структуры классических стекол  $SiO_2$  и  $As_2S_3$ . Согласно нашим данным [6], структура спектрально-чистого кварцевого стекла, которое служило подложкой для кремниевых пластин при проведении диффузионных процессов, состояла из нанодисперсных частиц  $\beta$ -кварца. Стеклование происходит из-за переключения направления спиральных цепей, состоящих из тетраэдров  $SiO_4$ . В кристалле эти цепи ориентированы строго вдоль оси *c*. Совсем по другому принципу построена структура стеклообразного  $As_2S_3$ . Для ее описания микрокристаллитная, а точнее нанокристаллитная, модель в том виде, в котором она использовалась нами до сих пор, оказалась непригодной. В структуре стеклообразного  $As_2S_3$  [8] сохраняются гофрированные слои,

присущие структуре аурипигмента, но все межслоевые расстояния разрушаются. В стекле гофрированные слои скреплены молекулами, характерными для структуры  $\text{As}_4\text{S}_5$ , с теми межатомными расстояниями, которые соответствуют упаковке молекул по оси  $b$ . Чтобы объяснить экспериментальную ФРРА из всего комплекса межатомных расстояний, рассчитанных для структур аурипигмента и  $\text{As}_4\text{S}_5$ , пришлось выделить те, которые соответствуют отдельным частям (фрагментам) структур кристаллов-аналогов.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Модельная ФРРА — основа фрагментарной модели — строится с использованием всех межатомных расстояний кристалла-аналога и представляет собой радиальное сечение сферически-симметричной функции Патерсона идеального бездефектного кристалла. Как дискретная функция Патерсона позволяет определить кристаллическую структуру, так и радиальное сечение сферически-симметричной функции Патерсона позволяет идентифицировать этот же кристалл в нанодисперсном состоянии. Фрагментарная модель не требует минимизации по энергии, так как межатомные расстояния в кристалле, по которым производится расчет модельной ФРРА, уже соответствуют этому минимуму. Для этой модели не существует проблемы учета обрыва связей на границе атомного скопления, так как расчет межатомных расстояний ведется только для независимых атомов ближайших к началу координат, учет остальных производится умножением на кратность позиций. При построении модельных ФРРА не используются экспериментальные данные, и кривые могут быть просчитаны заранее, т.е. возникает возможность создания независимой от эксперимента базы данных. Модельные и экспериментальные ФРРА никогда не совпадают полностью, так как модель строится для идеального бездефектного кристалла, а экспериментальная ФРРА строится для реального образца, содержащего и дефекты, и границы разделы нанодисперсных кристаллитов. Сравнение этих кривых позволяет найти наиболее вероятные места разрушений кристаллической структуры.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мороз Э.М., Зюзин Д.А., Шефер К.И. // Журн. структур. химии. – 2007. – **48**, № 2. – С. 269. (*Moroz E.M., Zyuzin D.A., Shefer K.I.* // *J. Struct. Chem.* – 2007. – **48**, N 2. – P. 262.)
2. Мороз Э.М., Зюзин Д.А., Шефер К.И. и др. // Журн. структур. химии. – 2007. – **48**, № 4. – С. 753. (*Moroz E.M., Zyuzin D.A., Shefer K.I. et al.* // *J. Struct. Chem.* – 2007. – **48**, N 4. – P. 704.)
3. Алешина Л.А., Фофанов А.Д., Осауленко Р.Н. и др. // Кристаллография. – 2005. – **50**, № 3. – С. 428. (*Aleshina L.A., Fofanov A.D., Osaulenko R.N. et al.* // *Crystallogr. Rep.* – 2005. – **50**, N 3. – P. 384.)
4. Алейникова К.Б., Лесовой М.В., Перин Ю.Н. // Докл. РАН. Физ. химия. – 1993. – **329**, № 3. – С. 308.
5. Алейникова К.Б., Зинченко Е.Н., Аракчеева А.В. и др. // Кристаллография. – 2002. – **47**, № 4. – С. 612. (*Aleynikova K.B., Zinchenko E.N., Arakcheeva A.V. et al.* // *Crystallogr. Rep.* – 2002. – **47**, N 4. – P. 555.)
6. Алейникова К.Б., Лихач Н.И. // Физика и химия стекла. – 2005. – **31**, № 5. – С. 888. (*Aleynikova K.B., Likhach N.I.* // *Glass Phys. Chem.* – 2005. – **31**, N 5. – P. 648.)
7. Алейникова К.Б., Зинченко Е.Н., Лесовой М.В. // Кристаллография. – 2007. – **52**, № 2. – С. 354. (*Aleynikova K.B., Zinchenko E.N., Lesovoi M.V.* // *Crystallogr. Rep.* – 2007. – **52**, N 2. – P. 338.)
8. Алейникова К.Б., Лихач Н.И., Зинченко Е.Н. // Физика и химия стекла. – 2008. – **34**, № 3. – С. 360. (*Aleynikova K.B., Likhach N.I., Zinchenko E.N.* // *Glass Phys. Chem.* – 2008. – **34**, N 3. – P. 274.)
9. Вайнштейн Б.К. // Кристаллография. – 1957. – **2**, № 1. – С. 29.
10. Алейникова К.Б., Зинченко Е.Н., Лихач Н.И. // Зав. лаб. Диагностика материалов. – 2005. – **71**, № 4. – С. 27.
11. Татаринова Л.И. Электронография аморфных веществ. – М.: Наука, 1972.