

МЕТОД МАТРИЦ ПЕРЕДАЧИ И ДИНАМИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ТОЛСТОГО КРИСТАЛЛА В ПОВЕРХНОСТНОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ

© 1994 г. С. А. Степанов

Институт ядерных проблем, Минск

Поступила в редакцию 26.04.93 г.

Разработан метод моделирования кривых скользящей (поверхностной) дифракции рентгеновских лучей на многослойных кристаллических структурах и сверхрешетках. Метод основан на решении задачи динамической рентгеновской дифракции в каждом слое, вычислении 4×4 матриц передачи слоев и динамическом выборе приближения толстого кристалла. Проведены расчеты на ЭВМ и показано, что метод устойчиво работает для числа слоев до $\approx 10^2$ и более. Поэтому он может оказаться чрезвычайно полезным при моделировании исследований сложных поверхностных структур с помощью поверхностной дифракции рентгеновских лучей.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы поверхностная дифракция рентгеновских лучей (ПД) эффективно применялась для изучения совершенства многослойных структур [1 - 7]. Однако до настоящего времени теоретические модели были разработаны только для нескольких частных случаев этих измерений. Например, в [1] предложен способ интерпретации ПД для серии аморфных слоев на поверхности кристалла, в [2] – для кристаллических слоев, но только для предельно асимметричного случая ПД, в [5] – для идеально периодических сверхрешеток. В [8] предложен метод моделирования на основе кинематической теории дифракции, однако в силу исходных приближений он не может удовлетворительно описывать рассеяние в совершенных структурах. В [9 - 10] выведены дифференциальные уравнения ПД в матричной форме, однако их решение настолько трудоемко и неустойчиво для толстых кристаллов, что делает эти уравнения практически неприменимыми для обработки экспериментов. Наконец, в [3] получена система уравнений для произвольной последовательности поверхностных кристаллических и аморфных слоев и предложено решать эту систему численно методом Гаусса. К сожалению, этот метод не работает на практике для числа слоев более 5 - 6 вследствие ошибок округления при численном решении системы из $4 \times N_{\text{сл}}$ уравнений. Таким образом, до настоящего времени численный анализ экспериментальных данных ПД в многослойных структурах в общем случае был невозможен.

В настоящей работе предлагается развитие метода [3], которое позволит упростить вычисления на компьютере до операций с матрицами 4×4

и тем самым улучшить точность вычислений и распространить их на случай структур с большим числом слоев (раздел 2). В разделе 3 обсуждается процедура выбора динамического приближения толстого кристалла при моделировании ПД в многослойных структурах и ее использование.

2. МАТРИЧНЫЙ МЕТОД

Рассмотрим ПД в многослойной структуре, образованной произвольной последовательностью аморфных и кристаллических слоев. Будем считать, что период решетки одинаков для всех кристаллических слоев поверхности, что имеет место для большинства случаев.¹ В приближении динамической дифракции волновое поле в вакууме перед поверхностью кристалла и в каждом слое для обеих поляризаций может быть записано в следующей форме (см., например, [3]):

– в вакууме

$$E_{\nu}(r) = \{E_0 \exp(ix\Phi_0 z) + E_s \exp(-ix\Phi_0 z)\} \times \exp(ix_{\perp} r_{\perp}) + \{E_h \exp(ix\Phi_h z)\} \exp(i(x+h)_{\perp} r_{\perp}), \quad (1)$$

– в кристаллических слоях

$$D_c^k(r) = \left\{ \sum_{j=1}^4 D_j^k \exp(ixu_j^k z) \right\} \exp(ix_{\perp} r_{\perp}) + \left\{ \sum_{j=1}^4 V_j^k D_j^k \exp(ix(u_j^k + \psi) z) \right\} \exp(i(x+h)_{\perp} r_{\perp}), \quad (2)$$

¹ Следует отметить, что кристаллические слои с периодом, отличающимся на $\Delta d/d > 10^{-4}$, не дают вклада в дифракцию и могут рассматриваться как аморфные.

– в аморфных слоях

$$D_a^k(r) = \{D_0^k \exp(ixu_0^k z) + D_{0s}^k \exp(-ixu_0^k z)\} \exp(ix_1 r_1) + \{D_h^k \exp(ixu_h^k z) + D_{hs}^k \exp(-ixu_h^k z)\} \exp(i(x+h)_1 r_1). \quad (3)$$

Здесь $E_0 = 1$, E_s , E_h – амплитуды падающей, зеркально отраженной и дифрагированной волн соответственно. Индекс $k = 1, \dots, N$ указывает номер слоя в многослойной структуре; x – волновой вектор рентгеновских лучей ($x = |x|$); h – вектор обратной решетки, на котором имеет место ПД; Φ_0 , Φ_h – угол падения и угол выхода дифрагированной волны относительно поверхности; u_j^k – решения дисперсионного уравнения 4-го порядка динамической дифракции в k -м кристаллическом слое ($j = 1, \dots, 4$):

$$(u_j^k - \Phi_0^2 - \chi_0^k) ((u_j^k + \psi)^2 - \Phi_h^2 - \chi_0^k) = \chi_h^k \chi_h^k, \quad (4)$$

$\chi_0^k, \chi_h^k, \chi_h^k$ – рентгеновские поляризуемости для k -го слоя, $\psi = 2\delta \sin(\theta_B)$, δ – угол разориентации вектора h относительно поверхности, $V_j^k = (u_j^k - \Phi_0^2 - \chi_0^k) / \chi_h^k$ – отношения амплитуд дифрагированных и проходящих волн для j -го решения (4), $u_{0,h}^k = \sqrt{\Phi_{0,h}^2 + \chi_0^k}$.

Мы видим, что в каждом слое возбуждаются четыре волновых поля. Как показано в [11], уравнение (4) всегда имеет два решения, затухающих в глубь кристалла, и два возрастающих (характеризующихся решениями $\text{Im} u_j > 0$ и $\text{Im} u_j < 0$ соответственно). Возрастающие решения интерпретируются как отраженные от нижней границы слоя. Поэтому для последнего слоя (подложки) волны с $\text{Im} u_j < 0$ считаются очень слабыми и исключаются из формул (2) – (3) (так называемое приближение толстого кристалла).

Таким образом, в случае структуры, состоящей из N слоев, мы имеем $4N$ неизвестных амплитуд волн: 2 в вакууме (E_s, E_h) и $4(N-1) + 2$ в кристалле. Чтобы найти эти амплитуды, необходимо использовать систему из $4N$ граничных условий для полей и их производных на N границах между слоями [3]. В частности, уравнения на границе между вакуумом и первым кристаллическим слоем записываются следующим образом:

$$E_0 + E_s = \sum_{j=1}^4 D_j^1, \quad E_h = \sum_{j=1}^4 V_j^1 D_j^1, \quad (5)$$

$$\Phi_0(E_0 - E_s) = \sum_{j=1}^4 u_j^1 D_j^1, \quad -\Phi_h E_h = \sum_{j=1}^4 w_j^1 D_j^1.$$

Уравнения на границах между двумя кристаллическими и двумя аморфными слоями соответственно имеют форму

$$\sum_{j=1}^4 f_j^k D_j^k = \sum_{j=1}^4 D_j^{k+1}, \quad \sum_{j=1}^4 f_j^k V_j^k D_j^k g_k = \sum_{j=1}^4 V_j^{k+1} D_j^{k+1},$$

$$\sum_{j=1}^4 f_j^k u_j^k D_j^k = \sum_{j=1}^4 u_j^{k+1} D_j^{k+1}, \quad (6)$$

$$\sum_{j=1}^4 f_j^k w_j^k D_j^k g_k = \sum_{j=1}^4 w_j^{k+1} D_j^{k+1};$$

$$f_0^k D_0^k + f_0^{k-1} D_{0s}^k = D_0^{k+1} + D_{0s}^{k+1},$$

$$f_h^k D_h^k + f_h^{k-1} D_{hs}^k = D_h^{k+1} + D_{hs}^{k+1},$$

$$u_0^k (f_0^k D_0^k + f_0^{k-1} D_{0s}^k) = u_0^{k+1} (D_0^{k+1} + D_{0s}^{k+1}),$$

$$u_h^k (f_h^k D_h^k + f_h^{k-1} D_{hs}^k) = u_h^{k+1} (D_h^{k+1} + D_{hs}^{k+1}),$$

и т.д. Здесь использованы следующие обозначения:

$$f_j^k = \exp(ixr^k u_j^k), \quad g^k = \exp(ixr^k \psi), \quad f_{0,h}^k = \exp(ixr^k u_{0,h}^k),$$

r^k – толщина k -го слоя.

Как мы уже упоминали, в [3] предлагалось решать систему из $4N$ граничных уравнений методом Гаусса. В данной работе мы предлагаем другой путь.

Перепишем уравнения на каждой границе в матричной форме. Введем для этого 4-компонентные векторы D^k и матрицы a^k и b^k размером 4×4 для правой и левой частей граничных уравнений:

$$D_{\text{кр}}^k = \begin{pmatrix} D_1^k \\ D_2^k \\ D_3^k \\ D_4^k \end{pmatrix}, \quad D_{\text{ам}}^k = \begin{pmatrix} D_0^k \\ D_h^k \\ D_{0s}^k \\ D_{hs}^k \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$a_{\text{кр}}^k = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ V_1^k & V_2^k & V_3^k & V_4^k \\ u_1^k & u_2^k & u_3^k & u_4^k \\ w_1^k & w_2^k & w_3^k & w_4^k \end{pmatrix}, \quad a_{\text{ам}}^k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ u_0^k & 0 & -u_0^k & 0 \\ 0 & u_h^k & 0 & -u_h^k \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$b_{\text{кр}}^k = G^k a_{\text{кр}}^k F^k, \quad b_{\text{ам}}^k = a_{\text{ам}}^k F^k, \quad (10)$$

где

$$F_{ij}^k = f_j^k \delta_{ij}, \quad G_{ij}^k = g_j^k \delta_{ij}, \quad g_i^k = \begin{cases} 1, & \text{если } i = 1, 3 \\ g_k, & \text{если } i = 2, 4. \end{cases}$$

Для подложки в соответствии с приближением толстого кристалла вектор D^k содержит только две компоненты и матрица a^k – только два столбца.

Введем также для полей в вакууме над поверхностью кристалла 4-компонентный "падающий" вектор E^i , 2-компонентный "вакуумный" вектор E^v и 2×4 "вакуумную" матрицу b^v :

$$E^i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \Phi_0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad E^v = \begin{pmatrix} E_s \\ E_h \end{pmatrix}, \quad b^v = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -\Phi_0 & 0 \\ 0 & -\Phi_h \end{pmatrix} \quad (11)$$

С помощью введенных матриц граничные условия переписываются следующим образом:

$$\begin{aligned} b^v E^v + E^i &= a^1 D^1, \\ b^1 D^1 &= a^2 D^2, \\ &\dots\dots\dots, \\ b^k D^k &= a^{k+1} D^{k+1}, \\ &\dots\dots\dots, \\ b^{N-1} D^{N-1} &= a^N D^N, \end{aligned} \quad (12)$$

где $D^N \equiv D^s$ и $a^N \equiv a^s$ - 2-компонентный вектор и 2×4 матрица подложки.

Таким образом, мы видим, что полная система уравнений является квазидиагональной

$$\begin{pmatrix} b^v & -a^1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b^1 & -a^2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b^2 & -a^3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b^3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -a^{N-2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b^{N-2} & -a^{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b^{N-1} & -a^N \end{pmatrix} \times \quad (13)$$

$$\times \begin{pmatrix} E^v \\ D^1 \\ D^2 \\ D^3 \\ \dots \\ D^{N-2} \\ D^{N-1} \\ D^N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -E^i \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Поэтому решение (12) может быть значительно упрощено. Если решение (12) начать с последней строки, то мы придем к следующему уравнению:

$$b^v + E^i = a^1 (b^1)^{-1} \dots a^{N-1} (b^{N-1})^{-1} a^N D^N \quad (14)$$

или

$$b^v + E^i = (T^1 \dots T^{N-1} a^N) D^N.$$

Назовем произведения $T^k = a^k (b^k)^{-1}$ - матрицами передачи или T -матрицами слоев. Из (10) следует, что

$$T_{кр}^k = a^k (F^k)^{-1} (a^k)^{-1} G^k, \quad T_{ам}^k = a^k (F^k)^{-1} (a^k)^{-1}. \quad (15)$$

Здесь $(F^k)_{ij}^{-1} = (f_i^k)^{-1} \delta_{ij}$, $(G^k)_{ij}^{-1} = (g_i^k)^{-1} \delta_{ij}$.

Если толщина слоя стремится к нулю, то

$$F^k \rightarrow I, \quad G^k \rightarrow I, \quad T^k \rightarrow (a^k (a^k)^{-1}) \rightarrow I,$$

т.е. T -матрица бесконечно тонкого слоя стремится к единичной диагональной матрице.

Уравнение (14) имеет простую физическую интерпретацию. Если все $t^k = 0$, оно совпадает с уравнением ПД для совершенного кристалла. Если на поверхности кристалла есть слои, то матрица подложки модифицируется произведением T -матриц всех слоев:

$$\tilde{a}^s = T^1 \dots T^{N-1} a^s. \quad (16)$$

Уравнение (14) с учетом (16) есть система из 4 уравнений относительно 4 неизвестных амплитуд: E_0, E_s, D_1^s и D_2^s

$$\tilde{a}^s D^s - b^v E^v = E^i \quad (17)$$

или

$$\begin{cases} \tilde{a}_{11}^s D_1^s + \tilde{a}_{12}^s D_2^s - E_s = 1, \\ \tilde{a}_{21}^s D_1^s + \tilde{a}_{22}^s D_2^s - E_h = 0, \\ \tilde{a}_{31}^s D_1^s + \tilde{a}_{32}^s D_2^s - \Phi_0 E_s = \Phi_0, \\ \tilde{a}_{41}^s D_1^s + \tilde{a}_{42}^s D_2^s - \Phi_h E_h = 0. \end{cases} \quad (17a)$$

Система (17) может быть решена любым методом, который предпочитает читатель.

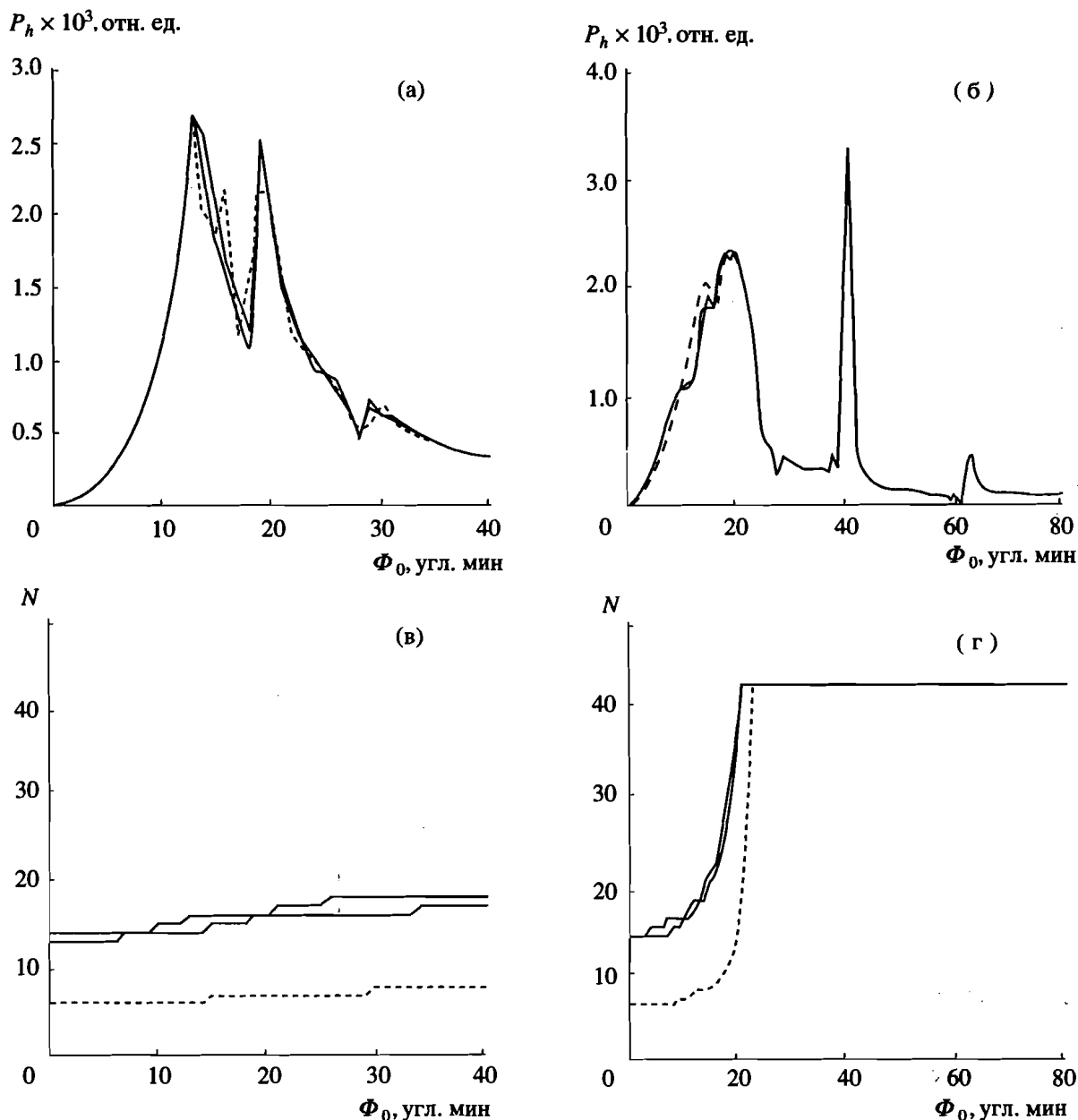
Таким образом, предлагаемый подход имеет то преимущество, что он не требует никаких операций с матрицами больше, чем 4×4 . Поэтому предполагается, что он будет устойчивым при компьютерных вычислениях.

Чтобы практически реализовать предлагаемый алгоритм, необходимо: вычислить матрицы a^k ; найти обратные им матрицы любым стандартным методом численной алгебры; вычислить матрицы T^k и их произведение; решить систему уравнений (17) методом Гаусса или другим способом.

Коэффициенты отражения вычисляются по стандартным формулам:

$$P_s = |E_s|^2, \quad (18)$$

$$P_h = (\Phi_h / \Phi_0) |E_h|^2. \quad (19)$$



Кривые рентгеновской поверхностной дифракции на сверхрешетке из 20 периодов 70 Å AlAs и 150 Å GaAs, рассчитанные матричным методом (а, б), и диаграммы динамического выбора числа отражающих слоев (в, г). а, в – угол падения 10 угл. мин, б, г – 20 угл. мин. Сплошные линии отвечают порогам приближения толстого кристалла 10^{13} и 10^{14} , штриховые – 10^5 .

Во многих экспериментах измерения P_h часто выполняются в зависимости от угла Φ_h . В этом случае правая часть (19) должна быть домножена на $2\Phi_h$ (см. [12]).

3. ДИНАМИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ТОЛСТОГО КРИСТАЛЛА

Пусть многослойная структура является достаточно толстой, например 10^4 Å. В то же время известно, что при ПД рентгеновское поле затухает

в кристалле на глубине порядка 10^2 Å. Вопрос, который мы ставим в этом разделе: будет ли достигнута максимальная точность вычислений, если пытаться учитывать вклады в ПД отражений от всех слоев? Мы увидим, что в большинстве случаев ответ будет отрицательным.

Чтобы прояснить ситуацию, применим формально алгоритм, изложенный в предыдущем разделе, к многослойной структуре, состоящей из N идентичных слоев, т.е. к совершенному кристаллу. Для простоты предположим, что $\psi = 0$ и

поэтому $G^k = I$. Тогда из уравнений (14) и (15) получаем

$$\begin{aligned} \tilde{a}^s &= \underbrace{(aF^{-1}a^{-1})(aF^{-1}a^{-1}) \dots (aF^{-1}a^{-1})}_{(N-1) \text{ раз}} a^s = \\ &= a(F^{-1})^{N-1}(a^{-1}a^s) = a^s(F^{-1})^{N-1}, \end{aligned} \quad (20)$$

где $(F^{-1})^{N-1}$ – диагональная матрица, содержащая две растущие экспоненты, соответствующие двум затухающим решениям с $\text{Im}u_j > 0$

$$((F^{-1})^{N-1})_{jl} = \delta_{jl} \exp(-ix(N-1)tu_j), \quad j, l = 1, 2. \quad (21)$$

Из (20) и (21) следует, что если суммарная толщина слоев $t_{\text{сум}} = (N-1)t$ мала или сравнима с глубиной затухания рентгеновских полей при ПД ($t_{\text{зат}} = \max(x \text{Im}u_j)^{-1}$), то элементы матриц \tilde{a}^s и a^s имеют один порядок, и численное решение (17) не составит проблемы. Если же $t_{\text{сум}} \gg t_{\text{зат}}$, то экспоненты в (21) становятся большими и $\|\tilde{a}^s\| \gg \|a^s\|$.

Как следует из (17), решения $D_1^s(t_{\text{сум}})$ и $D_2^s(t_{\text{сум}})$ в этом случае должны быть малыми. Это действительно так, поскольку согласно (2)

$$D_j^s(t_{\text{сум}}) = D_j^s(0) \exp(ixt_{\text{сум}}u_j). \quad (22)$$

Использование подстановки (22) позволяет погасить большие экспоненты в (21) и перейти к уравнениям для совершенного кристалла. Однако при попытке решить уравнения (17) на компьютере без использования перенормировки возникнут ошибки типа “потери точности” из-за большой разницы порядков \tilde{a}^s и b^v . Например, если $t_{\text{сум}} = 10^4 \text{ \AA}$ и $t_{\text{зат}} = 50 \text{ \AA}$, то экспоненты в (19) достигают 10^{100} !

Возможны два решения проблемы потери точности.

1. Попытаться перенормировать амплитуды в каждом слое многослойной структуры с учетом затухания, как сделано в предыдущем примере. Однако этот путь ясен для совершенного кристалла, но не очевиден при наличии многих слоев с различным затуханием в каждом слое.

2. Более физический подход состоит в том, чтобы учитывать дифракцию только в верхних слоях многослойной структуры, в которых рентгеновские поля имеют существенные амплитуды, и пренебрегать вкладом отражений от более глубоких слоев. Этот подход соответствует стандартному приближению толстого кристалла в рентгеновской дифракции.

Практически выбор приближения толстого кристалла может быть реализован следующим образом. При вычислении произведения T -матриц в (16), начиная с первого слоя от поверхности, необходимо следить за максимальным элементом матрицы-произведения после ее домножения на T -матрицу каждого следующего слоя. Когда произведение становится очень большим (скажем,

$10^{10} - 10^{15}$), это означает, что рентгеновское поле в соответствующем слое очень мало и можно пренебречь отражением рентгеновских волн от нижней границы этого слоя и от слоев, лежащих под ним. Иными словами, можно считать этот слой бесконечно толстой подложкой и учитывать в нем только волны с $\text{Im}u_j > 0$.

Поскольку глубина затухания рентгеновских волн в кристалле при ПД сильно зависит от углов Φ_0 и Φ_h , число учитываемых слоев будет изменяться от точки к точке на дифракционной кривой (см. рисунок). Поэтому можно назвать предлагаемую процедуру динамическим приближением толстого кристалла.

На рисунке приведены примеры кривых ПД на сверхрешетке AlAs/GaAs, рассчитанных с помощью матричного метода и динамического приближения толстого кристалла. Параметры расчета: рефлекс (220), CuK_α -излучение, π -поляризация, $\psi = 0$. Подложка: кристалл GaAs, сверхрешетка: 20 периодов по 70 \AA AlAs и 150 \AA GaAs. Рисунки а, б демонстрируют дифракционные кривые (а – для угла падения $\Phi_0 = 10$ угл. мин, б – для $\Phi_0 = 20$ угл. мин). На рисунках в, г отложены соответствующие зависимости числа динамически учитываемых слоев.

Хорошо видно, что метод правильно воспроизводит картину ПД на сверхрешетке, а именно наличие брэгговских пиков отражений различных порядков от периодической слоистой структуры (ср., например, [6, 7]). При угле падения $\Phi_0 = 10$ угл. мин, когда рентгеновское поле проникает в кристалл на малую глубину, учитывается не более 8 - 18 слоев из 41, и поэтому брэгговские пики сверхрешетки выражены на этом угле слабо. При угле падения $\Phi_0 = 20$ угл. мин почти на всей дифракционной кривой учитываются отражения от всех слоев сверхрешетки и наблюдаются яркие брэгговские пики.

Рисунки а, б демонстрируют также сопоставление дифракционных кривых, вычисленных с различными порогами приближения толстого кристалла (10^5 , 10^{13} и 10^{14}) при точности компьютера 18 значащих цифр. Мы видим, что изменение порога на 9 порядков не изменяет качественно картину расчета. Поэтому можно сделать заключение об устойчивости метода.

Таким образом, разработан алгоритм моделирования ПД рентгеновских лучей на сверхрешетках и других многослойных структурах. В отличие от [3], алгоритм устойчиво работает для большого числа слоев, а в отличие от [6], применим не только для строго периодических слоистых структур. В частности, метод позволяет проводить расчеты для произвольных распределений $\chi_0(z)$, $\chi_h(z)$ и $\delta t(z)$, т.е. описывать неоднородности в сверхрешетках. Поэтому он может использоваться в исследованиях поверхностных структур с помощью ПД рентгеновских лучей.

Автор благодарит д-ра Питча из университета г. Потсдама за привлечение внимания к проблеме и полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Головин А.Л., Имамов Р.М., Меликян О.Г. // ЖТФ. 1989. Т. 9. С. 95.
2. Golovin A.L., Imanov R.M., Melikyan O.G. // J. Appl. Cryst. 1989. V. 2. P. 406.
3. Rhan H., Pietsch U. // Z. Phys. B. 1990. B. 80. S. 347.
4. Pietsch U., Rhan H., Golovin A.L., Dmitriev Yu. // Semicond. Sci. Technol. 1991. V. 6. P. 743.
5. Pietsch U. // Proc. 2d. Intern. Conf. on X-ray and Neutr. Scatt. Bad Honnef, Germany, 1991. P. 53.
6. Меликян О.Г., Имамов Р.М., Новиков Д.В. // ФТТ. 1992. Т. 4. С. 1572.
7. Pietsch U., Baumbach G.T., Martin D. // HASYLAB'92 Annual Report. Hamburg, Germany, 1992. P. 114.
8. Меликян О.Г. // Кристаллография. 1991. Т. 6. С. 549.
9. Andreeva M.A., Rosete C., Kharachev Yu.P. // Phys. Status Solidi A. 1985. V. 88. P. 455.
10. Андреева М.А. // Вестн. МГУ. Сер. 3. 1986. Т. 27. С. 86.
11. Александров П.А., Афанасьев А.М., Степанов С.А. // Поверхность. 1985. Т. 3. С. 222.
12. Aleksandrov P.A., Afanas'ev A.M., Golovin A.L. et al. // J. Appl. Cryst. 1985. V. 18. P. 27.
13. Александров П.А., Мелконян М.К., Степанов С.А. // Кристаллография. 1984. Т. 29. С. 376.