

---

**ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
КРИСТАЛЛОВ**


---

УДК 548.312

**ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПСЕВДОБИНАРНЫХ  
СПЛАВОВ  $(\text{GeTe})_m-(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$** 
© 2019 г. В. Г. Орлов<sup>1</sup>, Г. С. Сергеев<sup>1,\*</sup><sup>1</sup> Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

\* E-mail: Sergeev\_GS@nrcki.ru

Поступила в редакцию 17.05.2017 г.

После доработки 27.10.2017 г.

Принята к публикации 15.11.2017 г.

Для соединений  $\text{GeTe}$ ,  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{GeSb}_2\text{Te}_4$  и  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ , принадлежащих классу псевдобинарных сплавов  $(\text{GeTe})_m-(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ , которые переходят из кристаллического состояния в аморфное и совершают обратный переход под действием лазерного излучения или импульса электрического тока за необычайно короткие времена порядка 1–100 нс, методом функционала электронной плотности выполнены расчеты электронной зонной структуры с помощью программного комплекса WIEN2k. Проведен подробный анализ параметров критических точек (максимумов, минимумов, точек перегиба) в распределении электронной плотности, располагающихся в точках высокой симметрии кристаллической структуры. Выявлены характерные значения параметров критических точек в распределении электронной плотности для данного класса материалов.

DOI: 10.1134/S0023476119030214

**ВВЕДЕНИЕ**

Псевдобинарные сплавы  $(\text{GeTe})_m-(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$  являются функциональными материалами, обладающими рядом свойств, используемых в практических приложениях. Конечные соединения  $\text{GeTe}$  и  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  на линии  $\text{GeTe}-\text{Sb}_2\text{Te}_3$  тройной фазовой диаграммы  $\text{Ge}-\text{Sb}-\text{Te}$  [1, 2] известны как узкозонные полупроводники с высокой термоэлектрической эффективностью [3].  $\text{GeTe}$  обладает ферроэлектрическими свойствами в низкотемпературной ромбоэдрической  $\alpha$ -фазе (пр. гр.  $R\bar{3}m$ ) [4], в то время как в высокотемпературной  $\beta$ -фазе со структурой типа  $\text{NaCl}$  (пр. гр.  $Fm\bar{3}m$ ) является параэлектриком [5, 6].

В последние годы псевдобинарные сплавы  $(\text{GeTe})_m-(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$  привлекли внимание вследствие их использования для изготовления различных видов оптической дисковой памяти и потенциальной возможности создания на их основе энергонезависимой электронной памяти [1, 2, 7]. Востребованность данного класса материалов обусловлена рядом уникальных свойств, в частности короткими (1–100 нс) временами перехода под действием лазерного излучения или импульса электрического тока из кристаллического состояния в аморфное и столь же короткими временами рекристаллизации. За данную способность

они получили название “phase change materials” (PCM). При этом у PCM в аморфном и кристаллическом состояниях заметно различаются оптические характеристики [8] и электросопротивление [9, 10].

Уникальность свойств PCM на основе сплавов  $(\text{GeTe})_m-(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$  ставит вопрос об особенностях электронного строения, отличающих данный класс материалов. С целью получения ответа на этот вопрос с помощью программного комплекса WIEN2k [11] были проведены расчеты электронной зонной структуры ряда стехиометрических соединений, входящих в класс PCM:  $\alpha$ - и  $\beta$ - $\text{GeTe}$ ,  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{GeSb}_2\text{Te}_4$  и  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ . В расчетах использовали модифицированный Траном и Блахой обменно-корреляционный потенциал Беке–Джонсона [12], который позволяет получать корректные значения диэлектрической щели в полупроводниках и оксидах [13]. Извлеченное из результатов зонных расчетов пространственное распределение электронной плотности (ЭП)  $\rho(\mathbf{r})$  было проанализировано с помощью программы CRITIC2 [14], предназначенной для топологического анализа скалярных полей в периодических структурах. Кристаллографическим аспектам результатов анализа особенностей в распределении электронной плотности в PCM посвящена данная работа.

Таблица 1. Параметры кристаллических решеток

Соединение	$\alpha$ -GeTe	$\beta$ -GeTe	Sb <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	GeSb <sub>2</sub> Te <sub>4</sub>	Ge <sub>2</sub> Sb <sub>2</sub> Te <sub>5</sub>
Параметры решетки, Å	$a_h = 4.165$ $c_h = 10.670$ $a_{rh} = 4.293$ $\alpha = 58.03^\circ$	$a = 6.003$	$a_h = 4.264$ $c_h = 30.458$ $a_{rh} = 10.447$ $\alpha = 23.55^\circ$	$a_h = 4.210$ $c_h = 40.60$ $a_{rh} = 13.75$ $\alpha = 17.61^\circ$	$a = 4.224$ $c = 17.229$
Пр. гр.	$R\bar{3}m$	$Fm\bar{3}m$	$R\bar{3}m$	$R\bar{3}m$	$P\bar{3}m1$
Литература	[6]	[6]	[18]	[19]	[20]

### МЕТОД НАХОЖДЕНИЯ КРИТИЧЕСКИХ ТОЧЕК В РАСПРЕДЕЛЕНИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В КРИСТАЛЛАХ

В качестве основы в программе CRITIC2 [14] взят широко используемый метод нахождения особенностей в распределении ЭП  $\rho(\mathbf{r})$  молекул, получивший название “Квантовой теории атомов в молекулах” (Quantum theory of atoms in molecules (QTAIM)) [15], основанный на анализе матрицы вторых производных ЭП по координатам, называемой матрицей Гессе или гессианом:

$$(\partial^2 \rho / \partial x_i \partial x_j), \quad (1)$$

где  $i, j = 1, 2, 3$ ,  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ ,  $x_3 = z$ . Точки  $\mathbf{r}_c$ , в которых градиент ЭП обращается в ноль,  $\nabla \rho(\mathbf{r}_c) = 0$ , называются критическими. В этих точках ЭП обладает экстремальными свойствами (имеет минимум или максимум, а также может быть седловой точкой). Диагонализуя симметричную матрицу Гессе  $\rho$ , можно найти ее собственные значения  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) (главные значения кривизны) и координатные оси – главные оси кривизны. Знак и величина лапласиана ЭП  $\nabla^2 \rho = \partial^2 \rho / \partial x^2 + \partial^2 \rho / \partial y^2 + \partial^2 \rho / \partial z^2$  в критической точке являются важными признаками типа химической связи [15]. Собственные значения  $\lambda_i$  матрицы Гессе действительны и могут иметь любой знак, а также равняться нулю. Классификация особых точек  $\rho$  проводится по рангу  $\omega$  – числу ненулевых главных значений кривизны, и сигнатуре  $\sigma$  – алгебраической сумме их знаков:  $(\omega, \sigma)$ . Локальные максимумы  $\rho$  ЭП на ядрах, называемые nucleus, рассматриваются как критические точки с параметрами  $(3, -3)$  [15]. Критическая точка  $(3, +3)$  представляет собой локальный минимум в распределении ЭП и носит название клетки (cage). Из двух седловых критических точек:  $(3, +1)$  – кольцо (ring) и  $(3, -1)$  – связь (bond) –

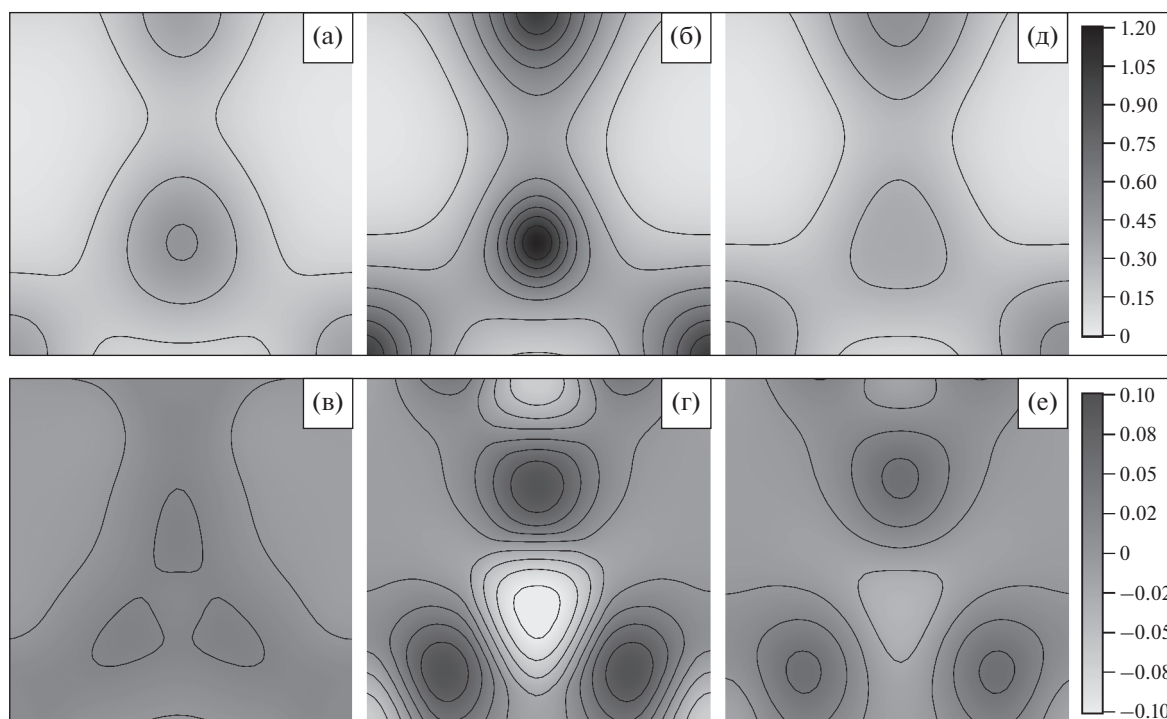
последняя играет важную роль в классификации типа химической связи.

Метод критических точек в распределении ЭП кристаллов используется для анализа природы химической связи в них столь же успешно [16, 17], как и в химии молекул. В простейшем варианте классификации типов химической связи в кристаллах в качестве параметров рассматриваются знак и величина лапласиана ЭП  $\nabla^2 \rho_b$  в седловой критической точке типа bond  $(3, -1)$ , знаки и соотношения абсолютных величин главных значений кривизны  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) в данной критической точке, величина заряда  $\rho_b$ , а также характер распределения ЭП в межатомной области кристалла. В частности, ковалентная связь характеризуется отрицательным знаком лапласиана  $\nabla^2 \rho_b < 0$ , отрицательными значениями  $\lambda_{1,2} < 0$ , большими по абсолютной величине  $|\lambda_{1,2}| > \lambda_3$ , большим значением ЭП в критической точке  $\rho_b$ . В то время как для ионной связи  $\nabla^2 \rho_b > 0$ ,  $|\lambda_{1,2}| \ll \lambda_3$ ,  $\rho_b$  мало, зарядовая плотность концентрируется в основном в местах расположения атомов [15–17].

В расчетах параметры кристаллических решеток, приведенные в табл. 1, брались из экспериментальных данных. Указанные в таблице параметры решеток веществ, кроме  $\beta$ -GeTe, были измерены при комнатной температуре. Параметр решетки  $\beta$ -GeTe был взят из [6] и соответствовал температуре 686 К. Для кристаллов ромбоэдрической симметрии параметры решеток даны в двух установках: гексагональной ( $a_h, c_h$ ) и ромбоэдрической ( $a_{rh}, \alpha$ ).

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты поиска критических точек в распределении ЭП кристаллов стехиометрических соединений  $\alpha$ - и  $\beta$ -GeTe, Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, GeSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> и



**Рис. 1.** Распределение электронной плотности в плоскостях кристаллов  $\alpha$ -GeTe (а–г) и  $\beta$ -GeTe (д, е), содержащих критические точки типа bond. Верхний ряд (а, б, д) – полная электронная плотность, нижний ряд (в, г, е) получен методом CDD. Размерность шкал для верхнего и нижнего рядов –  $\text{э}/\text{Å}^3$ .

$\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  приведены в табл. 2. В частности, дана информация о типах критических точек, позициях Уайкова, в которых они находятся, указаны координаты (в параметрах решетки) одной из критических точек каждого типа, величины главных значений кривизны  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) распределения ЭП в данной критической точке, значения лапласиана  $\nabla^2 \rho_c$  и величина ЭП  $\rho_c$  в критической точке. У веществ со структурами, описываемыми пр. гр.  $R3m$  и  $R\bar{3}m$ , координаты критических точек приведены в параметрах решетки в ромбоэдрических осях  $a_{\text{th}}$ . Для критических точек типа nucleus указаны расположенные в них атомы, но параметры не приведены в силу их нефизичности. Для критических точек типа bond указаны атомы, между которыми находится критическая точка.

Пространственная группа кристалла накладывает ограничения на типы и позиции критических точек. У всех исследованных веществ критические точки располагаются в позициях высокой симметрии [21], указанных в табл. 1. При этом количество критических точек в элементарной ячейке удовлетворяет соотношению Морзе [16, 17, 22]:

$$\begin{aligned} n - b + r - c = 0; \quad c \geq 1, \quad r \geq 3, \\ b \geq 3, \quad n \geq 1, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $n$ ,  $b$ ,  $r$  и  $c$  – количества критических точек типа nucleus, bond, ring и cage соответственно.

Из табл. 2 следует, что для всех веществ, за исключением  $\alpha$ -GeTe, лапласиан ЭП в критических точках типа bond имеет положительный знак  $\nabla^2 \rho_b > 0$ , что свидетельствует о выталкивании ЭП из областей вблизи данных критических точек [15–17].

Сравнение величин главных значений кривизны  $|\lambda_{1,2}|$  и  $\lambda_3$  для критических точек типа bond у всех исследованных соединений позволяет сделать вывод о том, что химическую связь в них нельзя классифицировать ни как ковалентную, ни как ионную. В химии молекул был введен еще один тип связи, получивший название “charge-shift bonding”, для которого флуктуации ЭП играют важную роль [23–25]. Представляется весьма вероятным, что флуктуационные процессы в электронной подсистеме РСМ, стимулированные лазерным облучением или импульсами электрического тока, могут служить движущей силой для структурных фазовых превращений типа “кристалл–аморфное состояние–кристалл”.

На рис. 1 в качестве примера показаны картины распределения ЭП в плоскостях кристаллов  $\alpha$ -GeTe и  $\beta$ -GeTe, содержащих критические точки

Таблица 2. Позиции и параметры критических точек кристаллов

Тип критической точки	Символ Уайкова	Атом, связи	x	y	z	$\lambda_1, \text{э/Å}^5$	$\lambda_2, \text{э/Å}^5$	$\lambda_3, \text{э/Å}^5$	$\nabla^2 \rho_c, \text{э/Å}^5$	$\rho_c \text{э/Å}^3$
$\alpha$ -GeTe										
nucleus	1a	Te	0.000	0.000	0.000					
nucleus	1a	Ge	0.472	0.472	0.472					
bond	3b	Ge–Te	0.260	0.712	0.260	–1.00	–0.99	1.96	–0.04	0.36
bond	3b	Ge–Te	0.718	0.255	0.718	–0.43	–0.43	1.44	0.58	0.18
ring	3b		0.490	0.490	0.930	–0.11	0.19	0.39	0.47	0.06
ring	3b		0.987	0.987	0.520	–0.10	0.17	0.38	0.46	0.06
cage	1a		0.749	0.749	0.749	0.04	0.09	0.09	0.22	0.02
cage	1a		0.237	0.237	0.237	0.06	0.06	0.09	0.21	0.02
$\beta$ -GeTe										
nucleus	4a	Ge	0.000	0.000	0.000					
nucleus	4b	Te	0.500	0.500	0.500					
bond	24e	Ge–Te	0.000	0.000	0.229	–0.66	–0.66	1.71	0.39	0.26
ring	24d		0.750	0.250	0.000	–0.11	0.16	0.41	0.46	0.06
cage	8c		0.750	0.250	0.750	0.07	0.07	0.07	0.21	0.02
$\text{Sb}_2\text{Te}_3$										
nucleus	1a	Te <sub>1</sub>	0.00	0.000	0.00					
	2c	Te <sub>2</sub>	0.211	0.211	0.211					
	2c	Sb	0.400	0.400	0.400					
bond	6h	Sb–Te <sub>2</sub>	0.416	0.890	0.416	–0.88	–0.88	1.79	0.03	0.34
	6h	Sb–Te <sub>1</sub>	0.208	0.208	0.687	–0.56	–0.55	1.58	0.46	0.23
	3d	Te <sub>2</sub> –Te <sub>2</sub>	0.500	0.000	0.000	–0.21	–0.20	0.99	0.58	0.10
ring	6h		0.618	0.099	0.099	–0.11	0.25	0.32	0.46	0.06
	3e		0.500	0.500	1.000	–0.09	0.09	0.41	0.41	0.05
	6h		0.276	0.875	0.276	–0.06	0.14	0.23	0.31	0.04
cage	2c		0.096	0.096	0.096	0.01	0.09	0.09	0.19	0.02
	2c		0.302	0.302	0.302	0.04	0.07	0.07	0.18	0.02
	1b		0.500	0.500	0.500	0.03	0.04	0.04	0.10	0.01
$\text{GeSb}_2\text{Te}_4$										
nucleus	1a	Ge	0.000	0.000	0.000					
	2c	Sb	0.144	0.144	0.144					
	2c	Te <sub>1</sub>	0.290	0.290	0.290					
	2c	Te <sub>2</sub>	0.432	0.432	0.432					
bond	6h	Sb–Te <sub>2</sub>	0.718	0.198	0.718	–0.78	–0.76	1.61	0.07	0.31
	3d	Sb–Sb	0.500	1.000	1.000	–0.72	–0.70	1.46	0.04	0.29
	6h	Ge–Te <sub>1</sub>	0.131	0.131	0.678	–0.70	–0.69	1.58	0.20	0.27
	6h	Te <sub>1</sub> –Te <sub>2</sub>	0.928	0.429	0.429	–0.46	–0.44	1.48	0.58	0.20
ring	6h		0.858	0.354	0.354	–0.12	0.28	0.34	0.49	0.07
	3e		0.000	0.500	0.500	–0.12	0.20	0.39	0.47	0.06
	6h		0.772	0.307	0.772	–0.09	0.11	0.39	0.42	0.05
	6h		0.086	0.548	0.086	–0.09	0.16	0.36	0.43	0.05
cage	1b		0.500	0.500	0.500	0.06	0.08	0.08	0.22	0.02
	2c		0.217	0.217	0.217	0.02	0.09	0.09	0.20	0.02
	2c		0.644	0.644	0.644	0.03	0.08	0.08	0.19	0.02
	2c		0.928	0.928	0.928	0.03	0.06	0.06	0.16	0.01

Таблица 2. Окончание

Тип критической точки	Символ Уайкова	Атом, связи	$x$	$y$	$z$	$\lambda_1, \text{э}/\text{Å}^5$	$\lambda_2, \text{э}/\text{Å}^5$	$\lambda_3, \text{э}/\text{Å}^5$	$\nabla^2 \rho_c, \text{э}/\text{Å}^5$	$\rho_c \text{э}/\text{Å}^3$
$\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$										
nucleus	1a	Te <sub>3</sub>	0.000	0.000	0.000					
	2d	Te <sub>2</sub>	0.333	0.666	0.783					
	2d	Te <sub>1</sub>	0.333	0.666	0.450					
	2d	Ge	0.333	0.666	0.108					
	2c	Sb	0.000	0.000	0.333					
bond	3f	Te <sub>1</sub> –Te <sub>1</sub>	0.000	0.500	0.500	–0.80	–0.78	2.25	0.67	0.31
	6i	Sb–Te <sub>1</sub>	0.160	0.320	0.389	–0.62	–0.61	1.43	0.20	0.26
	6i	Te <sub>2</sub> –Sb	0.839	0.678	0.278	–0.58	–0.57	1.56	0.41	0.24
	6i	Te <sub>3</sub> –Ge	0.181	0.362	0.059	–0.57	–0.57	1.49	0.35	0.23
	6i	Te <sub>2</sub> –Ge	0.029	0.515	0.158	–0.56	–0.55	1.47	0.36	0.23
ring	6i		0.326	0.163	0.445	–0.11	0.22	0.40	0.50	0.06
	3e		0.000	0.500	0.000	–0.10	0.11	0.43	0.43	0.06
	6i		0.168	0.335	0.218	–0.10	0.11	0.43	0.43	0.06
	6i		0.995	0.498	0.332	–0.10	0.20	0.30	0.40	0.05
	6i		0.833	0.167	0.109	–0.09	0.18	0.30	0.39	0.05
cage	1b		0.000	0.000	0.500	0.05	0.08	0.08	0.21	0.02
	2d		0.333	0.667	0.613	0.03	0.08	0.08	0.19	0.02
	2d		0.333	0.667	0.278	0.03	0.07	0.07	0.18	0.02
	2d		0.333	0.667	0.941	0.04	0.06	0.06	0.17	0.02
	2c		0.000	0.000	0.159	0.04	0.07	0.07	0.17	0.02

типа bond. На рис. 1а, 1б и 1д изображено распределение полной ЭП от валентных электронов Ge и Te, а на рис. 1в, 1г и 1е – распределение ЭП, полученное с помощью метода CDD (charge density difference), в котором из полной ЭП соединения вычитается ЭП, рассчитанная для отдельных атомов. На рис. 1а, 1б, 1в и 1г распределение ЭП в  $\alpha$ -GeTe показано в плоскостях, параллельных базовой плоскости гексагональной ячейки с координатами  $z = 0.41$  (б, г) и  $0.56$  (а, в). В этих плоскостях расположены критические точки типа bond со значениями  $\rho_b = 0.36$  и  $\rho_b = 0.18 \text{ э}/\text{Å}^3$  соответственно (табл. 2). На рис. 1д и 1е показано распределение ЭП для  $\beta$ -GeTe в плоскости, удаленной от вершины ячейки на  $0.13a$  ( $a$  – параметр кубической ячейки) и перпендикулярной главной диагонали куба. Данная плоскость содержит критические точки типа bond, в которых  $\rho_b = 0.26 \text{ э}/\text{Å}^3$ . Выбор плоскости обусловлен необходимостью сравнения результатов расчетов для  $\alpha$ - и  $\beta$ -GeTe. Локальные максимумы в распределении ЭП на рис. 1а, 1б и 1д наблюдаются у атомов Ge и Te, расположенных выше и ниже плоскостей. На рис. 1г и 1е отчетливо видны положения трех кри-

тических точек типа bond, в то время как по рис. 1в можно сделать вывод, что в данной плоскости  $\alpha$ -GeTe значения ЭП в критических точках типа bond и их окрестностях различаются незначительно.

Отметим, что в исследованных РСМ не только характеристики критических точек типа bond ( $\lambda_i, \nabla^2 \rho_b, \rho_b$ ) относительно слабы по сравнению с типичными параметрами для ковалентных и ионных соединений [16, 17], но и характеристики седловых точек типа ring, играющих заметную роль при структурных превращениях [15–17], имеют весьма малые значения.

По данным табл. 2 можно сделать вывод о том, что точки высокой симметрии в кристаллических структурах играют важную роль, поскольку в них располагаются как атомы вещества, так и критические точки в распределении ЭП кристалла. Информация о параметрах критических точек представляется весьма существенной для понимания особенностей физических свойств веществ и возможности их использования в практических приложениях.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Найдены параметры критических точек в распределении электронной плотности ряда соединений, принадлежащих к классу псевдобинарных сплавов  $(\text{GeTe})_m-(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$ , обладающих свойствами РСМ. Отличительной особенностью исследованных соединений является положительный знак лапласиана ЭП в критических точках типа bond, что свидетельствует о выталкивании ЭП из области вблизи данных критических точек. Относительно маленькими оказались найденные значения параметров седловых критических точек как типа bond, так и типа ring, что, вероятно, способствует высокой скорости структурных фазовых превращений типа “кристалл—аморфное состояние—кристалл” при локальном воздействии на РСМ лазерным облучением или импульсом электрического тока.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wuttig M., Yamada N.* // Nature Mater. 2007. V. 6. P. 824.
2. *Siegrist T., Merkelbach P., Wuttig M.* // Ann. Rev. Condens. Matter Phys. 2012. V. 3. P. 215.
3. *Wood C.* // Rep. Prog. Phys. 1988. V. 51. P. 459.
4. *Stegmeier E.F., Harbeke G.* // Solid State Commun. 1970. V. 8. P. 1275.
5. *Chattopadhyay T., Boucherle J.X., von Schnering H.G.* // J. Phys. C: Solid State Phys. 1987. V. 20. P. 1431.
6. *Chatterji T., Kumar C.M.N., Wdowik U.D.* // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. P. 054110.
7. *Deringer V.L., Dronkowski R., Wuttig M.* // Adv. Funct. Mater. 2015. V. 25. P. 6343.
8. *Yamada N., Ohno E., Nishiuchi K. et al.* // J. Appl. Phys. 1991. V. 69. P. 2849.
9. *Lankhost M.H., Ketelaars B.W., Wolters R.A.* // Nature Mater. 2005. V. 4. P. 347.
10. *Xiong F., Liao A.D., Estrada D., Pop E.* // Science. 2011. V. 232. P. 568.
11. *Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H. et al.* WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties / Ed. Schwarz K. Vienna: Techn. Univ. Wien, 2001.
12. *Tran F., Blaha P.* // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 102. P. 226401.
13. *Dixit H., Saniz R., Cottenier S. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2012. V. 24. P. 205503.
14. *Otero-de-la-Roza A., Johnson E.R., Luaña V.* // Comput. Phys. Commun. 2014. V. 185. P. 1007.
15. *Bader R.F.W.* Atoms in Molecules. A Quantum Theory. International Series of Monographs on Chemistry V. 22. Oxford: Clarendon Press, 1990. 458 p.
16. *Gatti C.* // Z. Kristallogr. 2005. B. 220. S. 399.
17. The Quantum Theory of Atoms in Molecules. From Solid State to DNA and Drug Design / Eds. Matta C.F., Boyd R.J. Weinheim: Wiley-VCH, 2007. 527 p.
18. *Anderson T.L., Krause H.B.* // Acta Cryst. B. 1974. V. 30. P. 1307.
19. *Агаев К.А., Талыбов А.Г.* // Кристаллография. 1966. Т. 11. Вып. 3. С. 454.
20. *Karpinskii O.G., Shelimova L.E., Kretova M.A., Fleuriel J.P.* // J. Alloys Compd. 1998. V. 268. P. 112.
21. Int. Tables for Crystallography, Vol. A. Space-group symmetry, 5th ed. Ed. Hahn Th. Springer, 2005. 911 p.
22. *Morse M., Cairns S.S.* Critical point theory in global analysis and differential geometry. New York: Academic Press, 1969. 389 p.
23. *Shaik S., Maitre P., Sini G., Hiberty P.C.* // J. Am. Chem. Soc. 1992. V. 114. P. 7861.
24. *Shaik S., Danovich D., Silvi B. et al.* // Chem. Eur. J. 2005. V. 11. P. 6358.
25. *Zhang L., Ying F., Wu W. et al.* // Chem. Eur. J. 2009. V. 15. P. 2979.