ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

УДК 548.4

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСЕЙ НА СВОБОДНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ α-Al₂O₃

© 2019 г. В. А. Кисленко^{*a*, *b*}, М. С. Власкин^{*a*}, С. А. Кисленко^{*a*, *}

^аОбъединенный Институт Высоких Температур РАН 125412 Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, Россия ^bМосковский Физико-Технический Институт (НИУ) 141701 Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, Россия *E-mail: kislenko@ihed.ras.ru Поступила в редакцию 26.11.2018 г. После доработки 21.12.2018 г. Принята к публикации 25.12.2018 г.

С помощью молекулярно-механического моделирования была исследована сегрегация двух- и трехвалентных примесей на поверхностях (00.1), (01.2) и (11.3) α -Al₂O₃. Основное внимание было уделено расчету энергии сегрегации в зависимости от размера примесного иона, расстояния до поверхности и степени ее заполнения. Была показана анизотропия сегрегации. Энергия сегрегации на наиболее устойчивой поверхности (00.1) имеет наименьшее по модулю значение для всех рассматриваемых примесей. Для трехвалентных примесей на поверхности (01.2) зависимость энергии сегрегации от степени заполнения имеет минимум, соответствующий упорядоченному расположению примесных атомов. На поверхности (11.3) была обнаружена многослойная сегрегация, в то время как на поверхностях (00.1) и (01.2) применима модель монослойной сегрегации.

Ключевые слова: сегрегация, оксид алюминия, примеси, атомистическое моделирование **DOI:** 10.1134/S0023119319030094

Благодаря уникальным свойствам корунд $(\alpha$ -Al₂O₃) используется при производстве абразивов, катализаторов, подложек для светодиодов, твердотельных лазеров. Широкое использование α -Al₂O₃ обуславливает необходимость в тщательном изучении его физико-химических свойств. Особый интерес представляет эффект сегрегации примесей, поскольку он существенно влияет на многие технологически важные процессы: рост зерен при спекании керамик [1], коррозионная стойкость [2], высокотемпературная ползучесть [3].

Наиболее изучена сегрегация на границах зерен поликристаллического алюминия. Так, например, показано уменьшение пластичности корунда при сегрегации редкоземельных примесей Y и La [4]. Обнаружено, что сегрегированный Mg улучшает спекание керамики и ингибирует рост зерен [5], в то время как Са и Si способствуют обратному эффекту [6]. Основываясь на подобных данных, методами атомистического моделирования преимущественно исследовалась сегрегация примесей на границах зерен с целью объяснения экспериментальных эффектов. С помощью атомистического моделирования Гальмарини обнаружил образование упорядоченных 2D структур при сегрегации Y на некоторых гранях, что, по мнению автора, может замедлять диффузию и уменьшать пластичность [7]. Отметим также работы с применением экспериментальных методов с высоким пространственным разрешением, которые внесли большую ясность в атомную структуру допированных границ зерен α -Al₂O₃ и частично верифицировали результаты моделирования [8, 9].

Сегрегация на свободных поверхностях корунда изучена не так хорошо. Экспериментальные работы в основном относятся к 80-м годам, где анализируется сегрегация ограниченного набора примесей (Mg, Ca, Y) только на двух поверхностях - (00.1) и (10.0) [10, 11]. При этом, осмысление полученных результатов затруднено рядом обстоятельств. Во-первых, зачастую точный примесный состав образцов не исследован, а указываемая суммарная концентрация остальных примесей превышает концентрацию исследуемой примеси. К тому же взаимодействие примесей существенно влияет на компонентный состав поверхности [9, 10]. Во-вторых, исследования свободной поверхности при высоких температурах затруднены испарением примесей, скорость которого зависит от состава атмосферы и граничных условий, что создает трудности в достижении равновесия между объемом и поверхностью кристалла.

Наш интерес к сегрегации примесей на свободных гранях корунда обусловлен работами по разработке новой технологии получения высокочистого оксида алюминия [12, 13]. Технология состоит из нескольких стадий, последняя из которых представляет собой высокотемпературную обработку "грязного" корунда в вакууме, в результате которой наблюдается падение содержания примесей до ~30 ррт. Несмотря на достигнутый эффект очистки, данная технология демонстрирует недостаточную эффективность по отношению к некоторым примесям (Cr, V, Ti, Fe), что приводит к превышению допустимого порога чистоты по этим элементам для использования в ряде приложений. Так как очистка происходит за счет испарения сегрегированной примеси со свободной поверхности микрокристаллических образцов, необходимы систематические данные по сегрегации для интерпретации экспериментальных результатов и поиска путей дальнейшего совершенствования технологии.

ДЕТАЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Свободные поверхности α -Al₂O₃. Ввиду анизотропии сегрегации [14, 15], важным моментом является выбор релевантных поверхностей для исследования. Преобладающие свободные поверхности в микрокристаллическом образце в общем случае должны зависеть от параметров синтеза и примесного состава. В данной работе рассмотрены три поверхности: (00.1), (01.2), (11.3). Выбор основан на том, что эти поверхности имеют наименьшую поверхностную энергию и составляют большую площадь поверхности равновесного кристалла беспримесного корунда [16]. Это согласуется с результатами DFT расчетов [17].

Параметры моделирования. Все вычисления были проведены с помощью программного пакета DL_POLY. Был использован метод молекулярной механики для оптимизации кристаллической структуры α-Al₂O₃. Для описания взаимодействия ионов в решетке был использован парный потенциал Букингема и кулоновский потенциал:

$$E_{ij} = \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + A_{ij} \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho_{ij}}\right) - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6},$$

где q_i и q_j — заряды ионов, r_{ij} — расстояние между ними, A, ρ и c — параметры потенциала для пары ионов i и j. Поляризуемость ионов кислорода была учтена с помощью модели ядро оболочка (core-shell model). Заряд оболочки был равен —2.04|e|, константа упругости равнялась 6.3 Å⁻². Параметры потенциала были взяты в работе [18]. Использовались периодические граничные условия. Линейный размер кристалла и расстояние между периодическими образами в направлении, перпендикулярном поверхности, составляли 5 и 10 нм соответственно. Метод Эвальда с радиусом обрезания 15 Å использовался для расчета электростатического взаимодействия. Радиус обрезания для взаимодействия сил Ван-дер-Ваальса также составлял 15 Å.

Энергия сегрегации. Исходя из фононной теории, энергия Гиббса может быть выражена следующим образом [19]:

$$G = U_{lat} + PV + \frac{1}{2} \int hvg(v) dv + \int g(v) k_B T \ln\left(1 - \exp\left\{-\frac{hv}{k_B T}\right\}\right) dv,$$

где U_{lat} — минимальная энергия решетки, когда все атомы находятся в положении равновесия, g(v) — плотность фононных состояний. Согласно [20, 21], вклад колебательной составляющей в энергию сегрегации мал и им можно пренебречь. То есть, энергия сегрегации ΔG_{segr} может быть рассчитана, как разница между статическими конфигурационными энергиями кристалла в случае нахождения примеси на поверхности и в объеме:

$$\Delta G_{segr} \simeq \Delta H_{segr} = U_{lat}^{surf} - U_{lat}^{bulk}.$$

Для оценки равновесной доли примесных атомов на поверхности X_i (в зависимости от их доли в объеме X_b) было использовано уравнение Макродта и Таскера, которое позволяет учесть изменение энергии сегрегации при изменении степени заполнения поверхности [22]:

$$X_{i} = X_{b} \exp\left\{-\frac{1}{k_{B}T}\left(\Delta H_{segr} + X_{i}\left(X_{i}+1\right)\frac{\partial\Delta H_{segr}}{\partial X_{i}}\right)\right\}.$$

$$\Delta H_{segr}(n) = \frac{1}{n} (H(n) - H(0) - n\Delta H_b)$$
, где $H(n)$ – кон-
фигурационная энергия системы, содержащей *n*
примесных атомов на поверхности, ΔH_b – измене-
ние энергии при добавлении примесного иона в

пле эпертии при досавлении примесного иона в объем кристалла. Были рассмотрены как случайные, так и упорядоченные варианты расположения примесных атомов на поверхности при каждом X_i и найдены энергетически наиболее выгодные конфигурации.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Сегрегация трехвалентных примесей. На рис. 1а показана зависимость энергии сегрегации трехвалентных примесей от радиуса в случае малых поверхностных концентраций, когда можно пренебречь взаимодействием примесей друг с другом. Видно, что энергия сегрегации примесей с радиусом, близким к радиусу иона Al, таких как

ХИМИЯ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ том 53 № 3 2019

Сг или Fe, близка к нулю. Это означает отсутствие выраженного эффекта сегрегации, что хорошо согласуется с высокой растворимостью данных элементов в корунде [23]. Также это подтверждается невысокой эффективностью удаления хрома из оксида алюминия путем высокотемпературного вакуумного прокаливания [12]. С ростом размера примеси энергия сегрегации уменьшается, и сегрегация становится энергетически более выгодной. Для достаточно больших примесных атомов, таких как Y или La, расчеты предсказывают ярко выраженную сегрегацию и невысокую растворимость в объеме, что подтверждается экспериментально [23]. Такое поведение может быть объяснено тем фактом, что ион большого размера приводит к сушественным искажениям локальной кристаллической структуры решетки, и его перемещение на поверхность способно значительно понизить энергию системы. Данные рис. 1а хорошо аппроксимируются параболической зависимостью, что согласуется с моделью МакЛина [24] (энергия сегрегации пропорциональна $(R - R_{Al})^2$, где R_{Al} – радиус иона алюминия) и предыдущими расчетами для Fe₂O₃ [19, 20]. Энергия сегрегации на поверхности (01.2) больше на 0.5-1 эВ по абсолютным значениям, чем на поверхности (00.1) для всех примесей. Зависимость ΔH_{segr} имеет более крутой наклон для поверхности (11.3), чем для (00.1) и (01.2). Предварительно, основываясь на значении ΔH_{segr} , можно сделать вывод, что примеси небольшого размера имеют тенденцию сегрегировать преимущественно на поверхность (01.2), большого – на (01.2) и (00.1).

На рис. 2 показана зависимость энергии сегрегации трехвалентных примесей от расстояния до исследуемой свободной поверхности. По оси ОХ отложены номера алюминиевых слоев, где первый слой соответствует поверхностным атомам Al. Для поверхности (00.1) зависимость имеет осциллирующий вид с минимумами в 1, 3 и 5–6 слоях (рис. 2а). Для In и примесей большего размера можно говорить о монослойной сегрегации, так как энергия системы при нахождении примесного атома на поверхности значительно меньше, чем при любой другой конфигурации.

Из-за недостатка литературных данных сравнение полученных результатов возможно только для Ү. Энергия сегрегации Ү, полученная в данной работе, составляет —1.9 и —2.7 эВ на поверхностях (00.1) и (01.2) соответственно, что количественно согласуется с расчетами [7] и противоречит более ранней работе [22]. Экспериментальное значение, составляющее примерно —0.5 эВ, проблематично сопоставить с результатами моделирования напрямую, так как оно получено для образца с поликристаллической поверхностью и избыточной концентрацией других примесей (Ca, Mg, Fe) [25].



Рис. 1. (а) Зависимость энергии сегрегации трехвалентных примесей на поверхностях (00.1), (01.2), (11.3) от их размера; (б) зависимость энергии сегрегации кластера $\left[2X'_{Al}:V_{\ddot{O}}\right]$ на поверхностях (00.1), (01.2), (11.3) от размера примесного иона X'_{Al} .

Для поверхности (01.2) зависимость энергии от расстояния качественно отличается (рис. 26). Наиболее выгодные положения примесных ионов по отношению к объему наблюдаются в первом и втором слое. Если для примесей малого радиуса (Cr, Ga, Fe) сегрегация в первых двух слоях энергетически эквивалентна, то для больших примесей, начиная с In, справедливо приближение монослойной сегрегации. Для поверхности (11.3) модель монослойной сегрегации не применима для всего спектра рассматриваемых примесей. Например, для Sc наблюдаются два близких по величине минимума в 5 и 9 слоях, при этом в первом слое локальный минимум отсутствует. Для Yb. Y. Sm наблюдаются энергетически близкие значения минимумов в 1 и 5 слоях.

Процесс переноса примеси из объема на поверхность требует преодоления энергетических барьеров (рис. 2а и 2в), величина которых растет с ростом размера примесного иона. Мы предполагаем, что данные барьеры не оказывают влияния на скорость испарения примесей, так как их величина сравнима с энергией миграции примесей



Рис. 2. Зависимость энергии сегрегации от расстояния до поверхности (00.1) (а), (01.2) (б), (11.3) (в).

в объеме [26]. Таким образом, объемная диффузия определяет кинетические ограничения скорости испарения.

Для поверхностей (00.1) и (01.2) и достаточно больших ионов, сегрегацию которых можно описать в монослойном приближении, получены зависимости энергии сегрегации от заполнения поверхности (рис. За и Зб). Это позволяет рассчитать равновесную поверхностную концентрацию примесей при заданной объемной концентрации в соответствии с формулой Макродта и Таскера. На поверхности (00.1) ΔH_{segr} монотонно растет, выходя на плато. Формально, все конфигурации системы при малых степенях заполнения (менее чем ~1/2) соответствуют упорядоченному расположению примесей. Хотя эти структуры более энергетически выгодны, чем при случайном рас-



Рис. 3. Зависимость энергии сегрегации трехвалентных примесей от степени заполнения поверхности (00.1) (а) и (01.2) (б).

положении, различие в энергии системы незначительно. То есть эффект двухмерной упорядоченности не имеет принципиальной важности для данного типа поверхности. Единственным исключением является La, для которого наблюдается минимум при заполнении поверхности 1/2. В случае поверхности (01.2) энергия сегрегации имеет минимум. Это согласуется с расчетами для Y, Yb, Gd, La [7, 14] и трехвалентными примесями на поверхности α-Fe₂O₃ [20]. В работе [14] минимум обнаружен при величине заполнения ~1/3. Наши расчеты предсказывают плоский широкий минимум в диапазоне степеней заполнения 1/3–1/2 для маленьких примесей и минимум при значении 1/2 для больших. Также эффект двумерной упорядоченности для У обнаружен экспериментально [8].

Как мы уже отмечали, примесям большого размера, таким как Y, соответствуют большие абсолютные значения ΔH_{segr} и небольшая относительная разница между различными поверхностями (рис. 1а). При этом чем меньше размер примеси, тем более значимый вклад в сегрегацию имеет тип

кристаллографической поверхности (рис. 4). При объемной концентрации У ~ 10 ррт равновесная поверхностная плотность примесных атомов на различных поверхностях отличается в 2 раза. Существенные различия появляются только при экстремально малых объемных концентрациях (менее 1 ppm). Для меньшего по размеру иона Yb анизотропия сегрегации выше, и плотность примесей на поверхностях (00.1) и (01.2) отличается на порядок в диапазоне 1–10 ppm. Для таких примесей, как Cr или Fe, наличие поверхности (01.2) является критичным для проведения очистки, так как хром и трехвалентное железо не сегрегируют на поверхности (00.1) и (11.3). В этой связи важно изучить возможность управлять соотношением различных поверхностей в образцах микрокристаллического корунда за счет варьирования параметров синтеза с целью улучшения эффективности технологии очистки.

Сегрегация двухвалентных примесей. Так как алиовалентные примеси имеют заряд, отличный от заряда ионов алюминия в кристаллической решетке, то их присутствие требует образования дополнительных дефектов для выполнения условия электронейтральности. Ранее было по-казано, что наиболее энергетически выгодным механизмом растворения двухвалентных примесей является формирование одной кислородной вакансии V_{\bullet} на два примесных атома замещения

 X'_{Al} [18]. Общепринятый подход к моделированию сегрегации двухвалентных ионов в α -Al₂O₃ подразумевает рассмотрение нейтрального кластера $\left[2X'_{Al}:V_{\ddot{O}}\right]$ [14, 22, 27]. В данной работе использован аналогичный подход.

На рис. 1б показана энергия сегрегации единичного кластера $\begin{bmatrix} 2X'_{Al} : V_{\ddot{O}} \end{bmatrix}$ на поверхностях (00.1), (01.2) и (11.3) в зависимости от размера двухвалентного иона X'_{Al} . Зависимость схожа с аналогичной, полученной для трехвалентных примесей. Модуль энергии сегрегации растет при увеличении размера иона, и наименьшее значение $|\Delta H_{segr}|$ наблюдается на поверхности (00.1). Энергия сегрегации кластеров $\begin{bmatrix} 2Mg'_{Al} : V_{\ddot{O}} \end{bmatrix}$ и $\begin{bmatrix} 2Ca'_{Al} : V_{\ddot{O}} \end{bmatrix}$ на поверхности (00.1) равна –1.6 и –4.6 эВ соответственно, что согласуется со значениями –1.6 и –3.3 эВ, полученными в предыдущих работах [22, 27]. Как мы уже отмечали, непосредственное сравнение с экспериментами затруднительно, но, тем не менее, хотим отметить хорошее согласие с экспериментальным значением –1.9 эВ для Мg на базальной поверхности корунда [28].

На рис. 5 показана зависимость энергии сегрегации кластера от расстояния до поверхности. В



Рис. 4. Отношение поверхностных концентраций примесей на поверхностях (01.2) и (00.1).

качестве расстояния до поверхности показан номер слоя атомов кислорода, который содержит кислородную вакансию, входящую в состав кластера. При каждом фиксированном расстоянии от вакансии до поверхности была найдена наиболее энергетически выгодная конфигурация кластера $\left[2X'_{Al}:V_{\ddot{O}}\right]$. Поиск оптимальных позиций дефектов замещения X'_{Al} проводился перебором всех возможных конфигураций в пределах 3 Å от вакансии.

Для поверхностей (00.1) и (01.2) обнаружен глобальный минимум энергии, когда вакансия, входящая в кластер, находится в первом кислородном слое (рис. 5а и 5б). При этом алюминиевые позиции, занятые двухвалентными примесями, могут различаться. В случае поверхности (01.2) оба примесных иона находятся в первом алюминиевом слое. Для поверхности (00.1) такое расположение наблюдается для Ca, Sr, Ba; для

остальных примесей один дефект Х'_{Аl} находится в первом алюминиевом слое, второй – в третьем. Экспериментальные измерения поверхности (00.1) показали, что ионы Мд и Са находятся в непосредственной близости к поверхности, что подтверждает монослойность сегрегации. В случае поверхности (11.3) все кислородные атомы сгруппированы в слои, расстояние между которыми порядка 1.6 Å. При этом каждый такой слой содержит 6 неэквивалентных кислородных позиций. Следовательно, на рис. 5в представлен набор из шести точек для каждого кислородного слоя. Кластеры, кислородные вакансии которых находятся в 1 и 2 слоях, имеют близкие энергии сегрегации, а позиции примесных ионов, соответствующие данным конфигурациям, принадлежат довольно широкому поверхностному слою, что указывает на многослойную сегрегацию.



Рис. 5. Зависимость энергии сегрегации кластера $\left[2X'_{Al}:V_{\ddot{O}}\right]$ от расстояния до поверхности (00.1) (a), (01.2) (6), (11.3) (в).

выводы

Было проведено молекулярно-механическое моделирование сегрегации примесей различного размера на свободных гранях (00.1), (01.2), (11.3) α -Al₂O₃. Для трехвалентных примесей на поверхности (01.2) зависимость энергии сегрегации от заполнения имеет минимум, который соответствует двухмерно упорядоченному расположению примесных ионов, в то время как для поверхности (00.1) эффект упорядоченности не столь значим. На поверхности (11.3) обнаружена многослойная сегрегация как для двух-, так и для трехвалентных примесей. На поверхностях (00.1) и (01.2) применима модель монослойной сегрегации, Показано наличие анизотропии сегрегации,

которая приводит к различному вкладу различных кристаллографических плоскостей в процесс вакуумного высокотемпературного удаления примесей. Мы предполагаем, что один из возможных путей дальнейшего снижения уровня примесей с помощью данного метода состоит в изменении процентного соотношения различных граней в микрокристаллических образцах корунда за счет варьирования параметров синтеза.

Исследование выполнено за счета гранта Российского Научного Фонда № 14-50-00124. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова и вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Bae I.-J., Baik S. // J. Am. Ceram. Soc. 1997. V. 80. № 5. P. 1149.
- Schacht M., Boukis N., Dinjus E. // J. Mater. Sci. 2000. V. 35. № 24. P. 6251.
- 3. Cho J., Wang C.M., Chan H.M., Rickman J.M., Harmer M.P. // Acta Mater. 1999. V. 47. № 15. P. 4197.
- Cho J., Harmer M.P., Chan H.M., Rickman J.M., *Thompson A.M.* // J. Am. Ceram. Soc. 1997. V. 80. № 4. P. 1013.
- 5. *Bennison S.J., Harmer M.P.* // J. Am. Ceram. Soc. 1983. V. 66. № 5. P. C-90.
- 6. *Bae I.S., Baik S.* // J. Am. Ceram. Soc. 1993. V. 76. № 4. P. 1065.
- Galmarini S., Aschauer U., Bowen P., Parker S.C. // J. Am. Ceram. Soc. 2008. V. 91. № 11. P. 3643.
- Buban J.P., Matsunaga K., Chen J., Shibata N., Ching W.Y., Yamamoto T., Ikuhara Y. // Science 2006. V. 311. № 5758. P. 212.
- Thomas G., Stefan N., Wolfgang K., Manfred R. // J. Am. Ceram. Soc. 2003. V. 86. № 4. P. 590.
- 10. Baik S., Fowler D.E., Blakely J.M., Raj R. // J. Am. Ceram. Soc. 1985. V. 68. № 5. P. 281.
- Sunggi B. // J. Am. Ceram. Soc. 1986. V. 69. № 5. P. C- 101.
- Zhuk A.Z., Vlaskin M.S., Grigorenko A.V., Kislenko S.A., Shkolnikov E.I. // J. Ceram. Process. Res. 2016. V. 17. № 9. P. 910.
- Zhuk A.Z., Vlaskin M.S. // Mater. Today Proc. 2017. V. 4. № 11. P. 11580.
- Galmarini S., Aschauer U., Tewari A., Aman Y., Van Gestel C., Bowen P. // J. Eur. Ceram. Soc. 2011. V. 31. № 15. P. 2839.
- Baik S., White C.L. // J. Am. Ceram. Soc. 1987. V. 70. № 9. P. 682.
- Choi J.-H., Kim D.Y., Hockey B.J., Wiederhorn S.M., Handwerker C.A., Blendell J.E., Carter W.C., Roosen A.R. // J. Am. Ceram. Soc. 1997. V. 80. № 1. P. 62.
- Marmier A., Parker S.C. // Phys. Rev. B 2004. V. 69. № 11. P. 115409.

177

- Atkinson K.J.W., Grimes R.W., Levy M.R., Coull Z.L., English T. // J. Eur. Ceram. Soc. 2003. V. 23. № 16. P. 3059.
- Parker S.C., de Leeuw N.H., Bourova E., Cooke D.J. // Rev. Mineral. Geochemistry. 2001. V. 42. №. P. 63.
- 20. Cooke D.J., Redfern S.E., Parker S.C. // Phys. Chem. Miner. 2004. V. 31. № 8. P. 507.
- Masri P., Tasker P.W., Hoare J.P., Harding J.H. // Surf. Sci. 1986. V. 173. № 2. P. 439.
- 22. *Mackrodt W.C., Tasker P.W.* // MRS Symp. Proc. 1986. V. 60. P. 291.
- 23. Gülgün M.A., Voytovych R., Maclaren I., Rühle M., Cannon R.M. // Interface Sci. 2002. V. 10. № 1. P. 99.

- 24. *McLean D.* // Grain boundaries in metals. Oxford: Clarendon Press, 1957.
- 25. *McCune R.C., Donlon W.T., Ku R.C.* // J. Am. Ceram. Soc. 1986. V. 69. № 8. P. 196.
- 26. *Kislenko S.A., Vlaskin M.S., Zhuk A.Z.* // Solid State Ionics. 2016. V. 293. P. 1.
- 27. Davies M.J., Kenway P.R., Lawrence P.J., Parker S.C., MacKrodt W.C., Tasker P.W. // J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2 Mol. Chem. Phys. 1989. V. 85. № 5. P. 555.
- 28. Mukhopadhyay S.M., Jardine A.P., Blakely J.M., Baik S. // J. Am. Ceram. Soc. 1988. V. 71. № 5. P. 358.