

УДК 548.736.6

А. Л. КОСОЙ

## СТРУКТУРА БАБИНГТОНИТА

Структура бабингтонита,  $\text{Fe}^{3+}\text{Fe}^{2+}\text{Ca}_2\text{Si}_5\text{O}_{14}(\text{OH})$ ,  $P1$ ,  $a=12,18(1)$ ,  $b=6,68(1)$ ,  $c=7,50(1)$  Å,  $\alpha=93^\circ 59'(5)$ ,  $\beta=112^\circ 19'(5)$ ,  $\gamma=86^\circ 3'(5)$ , определена и уточнена до  $R=5,9\%$ . Конформация тетраэдрических цепей в бабингтоните с периодом в пять тетраэдров существенно отличается от цепей в родоните. Три тетраэдра в цепи ( $\text{Si}2$ ,  $\text{Si}3$ ,  $\text{Si}4$ ) образуют «полукольцо», скрепленное сильной водородной связью. Катионы размещены упорядоченно, в октаэдре  $\text{Fe}1-\text{Fe}^{2+}(2,15 \text{ Å})$ , в октаэдре  $\text{Fe}2-\text{Fe}^{3+}(2,04 \text{ Å})$ , в октаэдре  $\text{Ca}1-\text{Ca}(2,40 \text{ Å})$  и в 8-вершиннике  $\text{Ca}2-\text{Ca}(2,48 \text{ Å})$ . Отклонения от центросимметричности заключаются в сдвигах некоторых атомов на расстояния до 0,1 Å от симметричных положений.

Большое сходство химического состава и размеров элементарной ячейки бабингтонита и родонита ( $\text{Mn, Ca})_5\text{Si}_5\text{O}_{15}$ ,  $P1$ ,  $a=12,234$ ,  $b=6,707$ ,  $c=7,682$  Å,  $\alpha=93^\circ 58'$ ,  $\beta=111^\circ 32'$ ,  $\gamma=85^\circ 15'$  [1] позволяло предположить [2-5], что структуры этих минералов весьма близки или идентичны.

Кристаллы бабингтонита из Норильского месторождения получены от Э. Н. Елисеева. Два химических анализа этого бабингтонита [6] можно приближенно представить в виде  $\text{Ca}_2\text{Fe}^{2+}\text{Fe}^{3+}\text{Si}_5\text{O}_{14}(\text{OH})$ , примеси Mg, Mn, Al к октаэдрическим катионам и Al к тетраэдрическим не превышают 0,1.

Кристаллы измерены на дифрактометре ДРОН-1, переоборудованном для монокристаллов. При предварительном фотографическом изучении отобрали монокристалл призматической формы  $0,05 \times 0,08 \times 0,15$  мм, вытянутый в направлении, близком к оси  $c$ . Размеры ячейки определены на  $\text{MoK}_{\alpha 1}$ . Интенсивности около 3000 узлов измерялись по методу перпендикулярного пучка и  $\omega$ -сканирования на  $\text{MoK}_{\alpha}$  с Zr  $\beta$ -фильтром.

При вычислениях использовались комплексы программ P-4 и P-70 Тарнопольского и Андрианова [7, 8]. Применялись атомные факторы рассеяния по [9] с поправками на аномальное рассеяние по [10], поглощение не учитывалось из-за малого размера кристалла.

На рис. 1 схематически изображены наиболее сильные пики функции Патерсона для бабингтонита. Заметно большое сходство и даже совпадение многих сильных пиков при сравнении с родонитом [1-5]. Однако попытка использовать координаты атомов Mn и Si родонита в качестве начального приближения для бабингтонита приводила к невозможному  $R=80\%$  [11].

Функция Патерсона содержит многочисленные тройки пиков [12], в том числе несколько вырожденных (с начальным пиком). Использование рекомендаций «теоремы о тройках» [12] также не привело к решению структуры —  $R$ -фактор, равный 50—55%, не улучшался при последующих синтезах Фурье.

На рис. 2 и 3 представлены результаты статистического изучения обратного пространства. Согласно рис. 2, статистика  $F^2$  носит ярко выраженный сверхцентричный характер. Так, параметр  $\rho$  равен 0,54 для рефлексов в интервале  $S$  0,3—0,4 (теоретические величины 0,637 для  $P1$  и 0,785 для  $P1$  [13]). Сильные осцилляции на графике Вильсона (рис. 3, 2) и вспомогательном графике Роджерса (рис. 3, 3) еще больше, чем предполагаемые теоретически [13] для случая сильных корреляционных связей в положе-

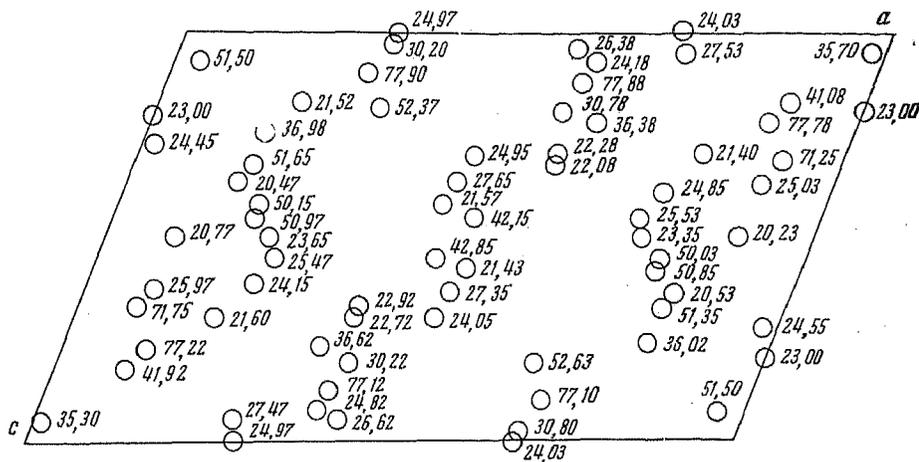


Рис. 1. Схематическое изображение наиболее сильных пиков функции Патерсона для бабингтонита в проекции вдоль оси  $b$

Первое число — относительная величина максимума, второе — координата  $y$  в сотых долях  $b$

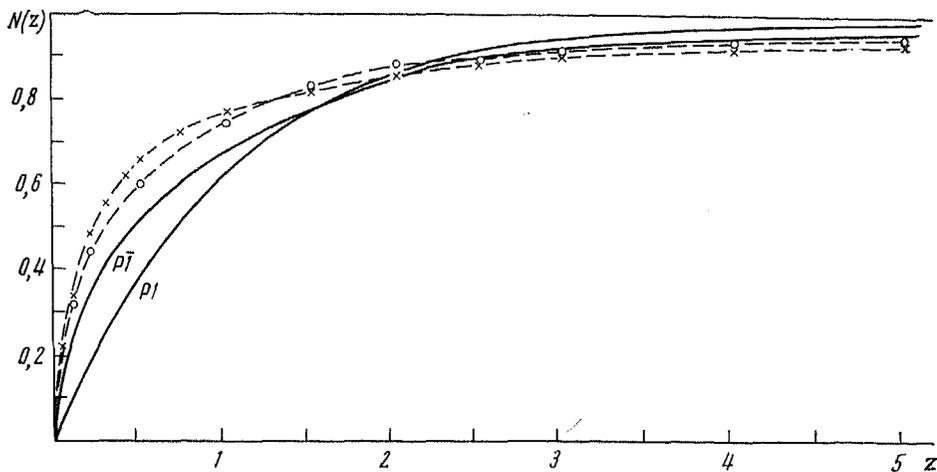


Рис. 2. График статистического распределения  $F^2$

Крестики — значения для интервала  $S$  0,3—0,4, кружки — для всех отражений.  $P_1$  и  $\bar{P}_1$  — теоретические кривые по [13]

ниях атомов, не связанных симметрией. Градуировка высот пиков функции Патерсона показала, что 10 наиболее сильных пиков, соответствующих векторам между катионами, имеют кратность 8, кратности пиков катион — кислород достигают 12, так что проявление пиков катион — катион кратности 1 и 2 представлялось маловероятным.

На рис. 4, 5 выделены 18 атомов Fe, Ca и Si, приходящихся на ячейку. Помимо обозначенной системы псевдоцентров, связывающих достаточно точно все 18 атомов, можно наметить десятки систем центров, связывающих 8 и больше тяжелых атомов. При таком обилии псевдоцентров применение «теоремы о тройках» приносит скорее вред, как в случае с родонитом [3], чем пользу.

При отыскании исходной модели после исключения пиков, отстоящих от начала на расстояниях меньших 2,5 Å, построена функция минимализации  $M_{16}$  для  $P_1$  [14]. В качестве ключевых использовали наиболее сильные пики кратности 8; 15 пиков функции  $M_{16}$  занимали приемлемые для катионов положения. При использовании этой модели как начальной ( $R =$

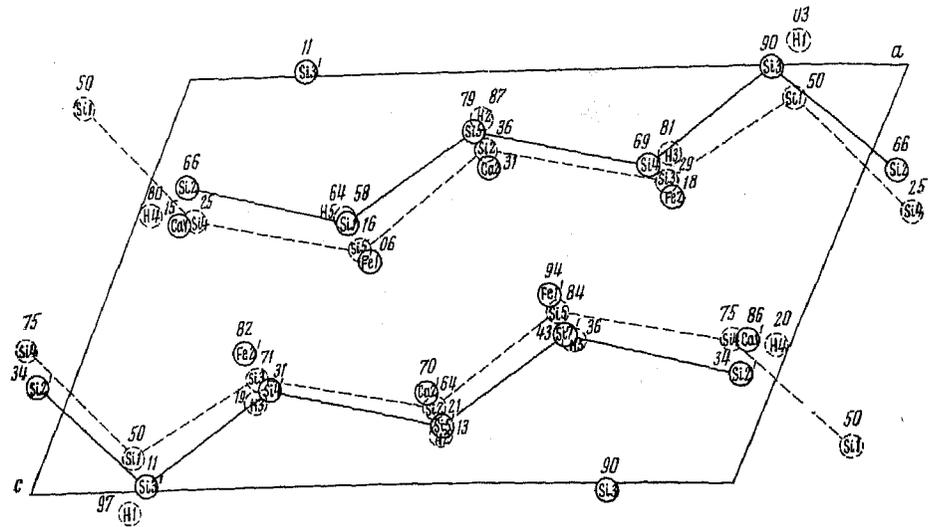


Рис. 6. Сравнение расположения катионов в ячейках бабингтонита (сплошные кружки и линии) и родонита (пунктиры)

Ячейки выбраны в аналогичной установке, различия в параметрах ячейки не учитывались, обозначены координаты  $y$  в сотых долях  $b$

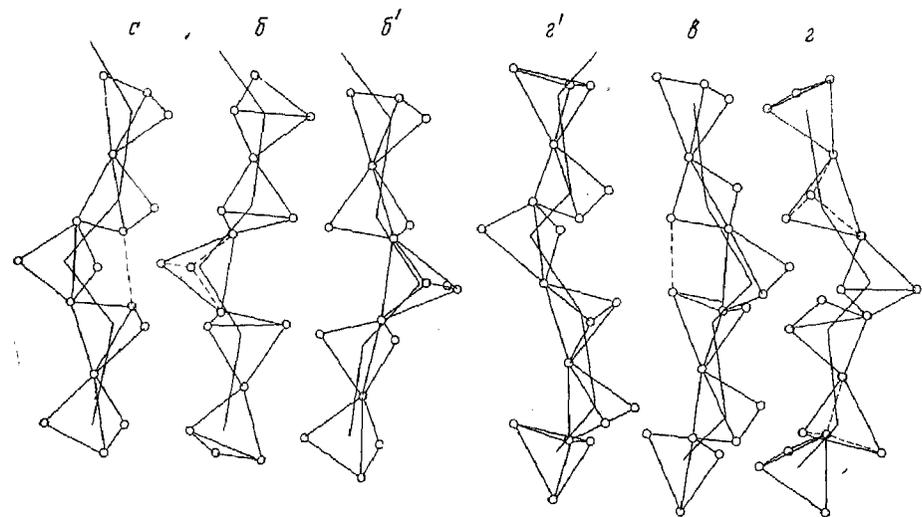


Рис. 7. Сравнение конформаций кремнекислородных цепей бабингтонита и родонита  
Проекция вдоль  $b$  —  $a, b, b'$ ; проекция вдоль  $c$  —  $g, g', g$ ;  $a, g$  — бабингтонит;  $b, g$  — родонит  
при таком расположении цепей, когда положения Si в цепи родонита могут быть наиболее точно совмещены при сдвигах с положениями Si в бабингтоните;  $b', g'$  — перевернутые цепи родонита

большой близости расположения катионов в цепях двух структур расположение атомов O и конформационные особенности цепей (сочленение полиэдров и их взаимные повороты) резко различаются для родонита и бабингтонита (рис. 7 и табл. 3 для тетраэдрических цепей). Расстояния Si—O (табл. 2) изменяются в весьма широких пределах 1,56—1,68 Å для модели P1 и 1,54—1,72 Å для P1. В этом смысле модель P1 предпочтительнее, однако необычные сочленения Si-тетраэдров, при которых расстояния мостикового кислорода от двух атомов Si резко различаются, встречаются в обеих моделях структуры (табл. 2).

В табл. 4 приведен список катионов, с которыми связаны атомы O. Четыре катиона структуры различаются по химизму или валентности или коор-

Координаты атомов для двух моделей бабингтонита

	P1				P1̄			
	x	y	z	B	x	y	z	B
Fe1	0,3563	0,0596	0,4476	0,75 (2)	0,3562 (1)	0,0602 (1)	0,4496 (2)	0,77 (1)
Fe1'	0,6434 (1)	0,9384 (2)	0,5478 (2)	0,73 (2)				
Fe2	0,7653 (1)	0,1844 (2)	0,3062 (2)	0,61 (2)	0,7645 (1)	0,1839 (1)	0,3117 (2)	0,69 (1)
Fe2'	0,2364 (1)	0,8165 (2)	0,6828 (2)	0,57 (2)				
Ca1	0,0571 (1)	0,1453 (3)	0,3392 (3)	0,81 (3)	0,0583 (1)	0,1430 (2)	0,3395 (2)	0,86 (2)
Ca1'	0,9404 (1)	0,8592 (3)	0,6590 (3)	0,80 (3)				
Ca2	0,4804 (1)	0,3079 (3)	0,2170 (3)	0,84 (3)	0,4793 (1)	0,3037 (2)	0,2172 (2)	0,87 (2)
Ca2'	0,5217 (1)	0,7009 (3)	0,7820 (3)	0,86 (3)				
Si1	0,3099 (2)	0,5768 (3)	0,3484 (4)	0,42 (3)	0,3131 (1)	0,5754 (2)	0,3524 (3)	0,55 (2)
Si1'	0,6835 (2)	0,4272 (3)	0,6431 (4)	0,48 (3)				
Si2	0,0546 (2)	0,6571 (3)	0,2706 (4)	0,50 (3)	0,0532 (1)	0,6594 (2)	0,2657 (3)	0,59 (2)
Si2'	0,9487 (2)	0,3382 (4)	0,7388 (4)	0,55 (3)				
Si3	0,8362 (2)	0,8939 (3)	0,0095 (4)	0,50 (3)	0,8355 (1)	0,8940 (2)	0,0081 (3)	0,66 (2)
Si3'	0,1651 (2)	0,1067 (4)	0,9923 (4)	0,50 (3)				
Si4	0,7144 (2)	0,6886 (4)	0,2267 (4)	0,51 (3)	0,7132 (1)	0,6893 (2)	0,2265 (3)	0,56 (2)
Si4'	0,2877 (2)	0,3093 (4)	0,7739 (4)	0,53 (3)				
Si5	0,4443 (2)	0,7935 (3)	0,1396 (4)	0,54 (3)	0,4449 (1)	0,7905 (2)	0,1384 (3)	0,51 (2)
Si5'	0,5546 (2)	0,2125 (3)	0,8634 (4)	0,44 (3)				
O1	0,3713 (5)	0,6260 (10)	0,1965 (11)	0,69 (8)	0,3702 (3)	0,6275 (6)	0,1911 (8)	0,85 (6)
O1'	0,6302 (5)	0,3721 (10)	0,8145 (12)	0,75 (9)				
O2	0,3813 (5)	0,3675 (10)	0,4318 (12)	0,91 (9)	0,3796 (3)	0,3661 (6)	0,4299 (7)	0,71 (6)
O2'	0,6222 (5)	0,6384 (9)	0,5715 (11)	0,57 (8)				
O3	0,3334 (5)	0,7582 (9)	0,5225 (11)	0,42 (8)	0,3378 (3)	0,7545 (6)	0,5207 (8)	0,73 (6)
O3'	0,6570 (5)	0,2491 (10)	0,4796 (12)	0,68 (9)				
O4	0,1721 (5)	0,5619 (10)	0,2389 (12)	0,75 (9)	0,1711 (3)	0,5635 (6)	0,2390 (8)	0,82 (6)

Таблица 1 (продолжение)

	P1				P1			
	x	y	z	B	x	y	z	B
04'	0,8308 (5)	0,4345 (10)	0,7635 (11)	0,65 (9)				
05	0,0755 (5)	0,8171 (9)	0,4469 (11)	0,68 (9)	0,0801 (3)	0,8150 (6)	0,4509 (7)	0,79 (6)
05'	0,9168 (5)	0,1854 (9)	0,5470 (11)	0,44 (9)				
06	0,9849 (6)	0,4644 (10)	0,2869 (12)	0,92 (9)	0,9871 (4)	0,4655 (7)	0,2889 (8)	0,89 (6)
06'	0,0108 (5)	0,5322 (10)	0,7089 (12)	0,76 (9)				
07	0,7417 (5)	0,7453 (10)	0,0360 (12)	0,80 (9)	0,7366 (3)	0,7489 (6)	0,0339 (8)	0,90 (6)
07'	0,2682 (5)	0,2474 (10)	0,9681 (12)	0,76 (9)				
08	0,8577 (5)	0,0810 (9)	0,1698 (12)	0,72 (9)	0,8573 (3)	0,0821 (6)	0,1618 (8)	0,76 (6)
08'	0,1431 (5)	0,9173 (10)	0,8464 (12)	0,72 (9)				
09	0,7951 (5)	0,9389 (10)	0,7852 (12)	0,76 (9)	0,7982 (3)	0,9436 (6)	0,7895 (7)	0,88 (6)
09'	0,1996 (5)	0,0515 (10)	0,2040 (12)	0,85 (9)				
010	0,7789 (5)	0,4764 (10)	0,3010 (12)	0,71 (9)	0,7789 (3)	0,4794 (6)	0,3017 (7)	0,68 (6)
010'	0,2206 (5)	0,5169 (9)	0,6974 (11)	0,64 (9)				
011	0,7581 (5)	0,8739 (10)	0,3815 (12)	0,70 (9)	0,7554 (3)	0,8752 (6)	0,3837 (7)	0,62 (5)
011'	0,2467 (5)	0,1262 (10)	0,6154 (11)	0,82 (9)				
012	0,5709 (5)	0,6592 (10)	0,1474 (11)	0,75 (9)	0,5683 (3)	0,6615 (6)	0,1429 (7)	0,56 (5)
012'	0,4343 (4)	0,3379 (8)	0,8612 (10)	0,24 (7)				
013	0,4737 (5)	0,9658 (9)	0,2975 (11)	0,54 (8)	0,4752 (3)	0,9734 (6)	0,2973 (7)	0,74 (6)
013'	0,5227 (5)	0,0182 (9)	0,7028 (11)	0,57 (8)				
014	0,3878 (5)	0,8405 (9)	0,9218 (11)	0,53 (8)	0,3853 (3)	0,8430 (6)	0,9175 (7)	0,84 (6)
014'	0,6173 (5)	0,1562 (10)	0,0877 (12)	0,72 (9)				
015	0,9648 (5)	0,7735 (10)	0,0748 (12)	0,83 (9)	0,9672 (3)	0,7764 (6)	0,0698 (8)	0,82 (6)
015'	0,0301 (5)	0,2220 (10)	0,9326 (12)	0,77 (9)				
H					0,891 (8)	0,463 (15)	0,277 (16)	3,3 (1,8)

Таблица 2

## Межатомные расстояния

Fe1			
	Fe1 (P1)	Fe1' (P1)	Fe1 (P1)
Fe1-O2	2,118 (7)	2,067 (7)	2,107 (4)
Fe1-O3	2,192 (7)	2,204 (7)	2,195 (4)
Fe1-O9'	2,064 (6)	2,004 (6)	2,029 (4)
Fe1-O11'	2,171 (9)	2,213 (9)	2,184 (5)
Fe1-O13	2,178 (8)	2,222 (8)	2,197 (5)
Fe1-O13'	2,194 (6)	2,190 (6)	2,195 (4)
Ср.	2,153	2,150	2,151
Fe2			
	Fe2 (P1)	Fe2' (P1)	Fe2 (P1)
Fe2-O3'	2,191 (8)	1,993 (8)	2,094 (6)
Fe2-O5'	2,016 (6)	2,065 (6)	2,030 (4)
Fe2-O8	1,867 (9)	2,030 (9)	1,946 (6)
Fe2-O10	1,973 (7)	2,038 (7)	2,003 (4)
Fe2-O11	2,204 (7)	2,187 (7)	2,188 (5)
Fe2-O14'	1,915 (6)	2,014 (6)	1,967 (4)
Ср.	2,028	2,054	2,038
Ca1			
	Ca1 (P1)	Ca1' (P1)	Ca1 (P1)
Ca1-O5	2,355 (7)	2,348 (7)	2,360 (5)
Ca1-O5'	2,717 (9)	2,691 (9)	2,708 (6)
Ca1-O6	2,250 (7)	2,292 (7)	2,267 (5)
Ca1-O8	2,314 (6)	2,359 (6)	2,334 (4)
Ca1-O9'	2,360 (9)	2,329 (9)	2,330 (6)
Ca1-O11'	2,429 (6)	2,379 (6)	2,407 (4)
Ca1-O15	3,054 (7)	3,033 (7)	3,042 (5)
Ca1-O15'	3,013 (10)	3,105 (10)	3,045 (6)
Ср.	2,406	2,399	2,401 (2,574)
Ca2			
	Ca2 (P1)	Ca2' (P1)	Ca2 (P1)
Ca2-O1	2,409 (7)	2,462 (7)	2,438 (5)
Ca2-O2	2,360 (10)	2,348 (9)	2,354 (6)
Ca2-O3'	2,312 (6)	2,385 (6)	2,354 (4)
Ca2-O7'	2,569 (6)	2,635 (6)	2,599 (4)
Ca2-O12	2,323 (8)	2,902 (7)	2,366 (5)
Ca2-O12'	0,523 (8)	2,598 (9)	2,555 (6)
Ca2-O13	2,418 (7)	2,242 (7)	2,336 (5)
Ca2-O14	2,376 (8)	2,371 (8)	2,376 (5)
Ср.	2,474	2,505	2,485
Si1			
	Si1 (P1)	Si1' (P1)	Si1 (P1)
Si1-O1	1,649 (10)	1,721 (10)	1,680 (6)
Si1-O4	1,561 (6)	1,668 (6)	1,607 (4)
Si1-O2	1,622 (7)	1,576 (7)	1,593 (4)
Si1-O3	1,671 (7)	1,601 (8)	1,630 (5)
Ср.	1,626	1,641	1,628
Si2			
	Si2 (P1)	Si2' (P1)	Si2 (P1)
Si2-O4	1,621 (8)	1,604 (8)	1,610 (5)
Si2-O15	1,657 (8)	1,619 (8)	1,647 (5)
Si2-O5	1,592 (8)	1,636 (8)	1,618 (5)
Si2-O6	1,627 (8)	1,616 (8)	1,626 (5)
Ср.	1,624	1,619	1,624
Si3			
	Si3 (P1)	Si3' (P1)	Si3 (P1)
Si3-O15	1,619 (6)	1,672 (7)	1,644 (4)
Si3-O7	1,648 (8)	1,691 (8)	1,673 (5)
Si3-O8	1,633 (8)	1,580 (8)	1,607 (5)
Si3-O9	1,601 (9)	1,540 (9)	1,574 (6)
Ср.	1,625	1,621	1,625

Таблица 2 (продолжение)

Si4			
	Si4 (P1)	Si4' (P1)	Si4 (P1)
Si4-O7	1,663 (10)	1,648 (10)	1,657 (7)
Si4-O12	1,633 (6)	1,664 (6)	1,645 (4)
Si4-O10	1,598 (7)	1,583 (7)	1,590 (4)
Si4-O11	1,603 (7)	1,606 (7)	1,615 (5)
Ср.	1,624	1,625	1,627

Si5			
	Si5 (P1)	Si5' (P1)	Si5 (P1)
Si5-O12	1,712 (7)	1,632 (6)	1,670 (4)
Si5-O1	1,651 (8)	1,604 (8)	1,627 (6)
Si5-O13	1,546 (7)	1,665 (7)	1,602 (5)
Si5-O14	1,551 (8)	1,612 (8)	1,581 (5)
Ср.	1,615	1,628	1,620

Водородная связь для модели P1			
O6-H	1,13 (10)	O6-H-O10	167 (6)°
H-O10	1,44 (11)	Si2-O6-H	121 (7)°

Таблица 3

## Характеристика Si-цепей бабингтонита и родонита

Si	Расстояния Si-Si			
	бабингтонит			родонит
	P1	P1'	P1	P1
1	2,948 (4)	3,048 (4)	2,992 (3)	3,003
2	3,032 (4)	2,981 (4)	3,011 (3)	3,058
3	3,036 (4)	3,040 (5)	3,045 (3)	3,004
4	3,131 (4)	3,083 (4)	3,105 (3)	3,126
5	3,143 (5)	3,149 (5)	3,143 (3)	3,096

Углы Si-O-Si				
1	135,7 (5)	137,4 (5)	136,7 (3)	130,3
2	135,5 (6)	129,8 (5)	132,6 (3)	137,2
3	133,2 (4)	130,9 (4)	132,1 (2)	130,2
4	138,7 (4)	138,8 (3)	139,0 (2)	146,0
5	144,5 (4)	142,6 (4)	143,5 (3)	138,3

Углы O-O-O				
1	124,5 (4)	122,0 (4)	123,2 (2)	153,0
2	136,0 (4)	134,5 (4)	135,5 (2)	161,7
3	155,2 (4)	155,0 (4)	155,5 (2)	144,5
4	167,2 (4)	166,5 (4)	167,0 (2)	172,7
5	175,5 (3)	176,0 (3)	175,8 (2)	159,7

динации, и соответственно все 15 атомов O также оказываются разными по кристаллохимическому положению. Этим обстоятельством можно объяснить широкие колебания расстояний, наличие некоторых Si-O<sub>мост.</sub> более коротких, чем Si-O<sub>конц.</sub>, несбалансированность связей Si-O-Si.

Для всех атомов O при поисках H-связи оценивались суммы кратностей (валентностей) связей с катионами по методу Донней и Альманн [16]. Эти суммы равны для O6 1,36-1,38 и для O10 1,61-1,63 (без учета H-связи). Для остальных атомов O они близки к 2 (табл. 4). Наиболее значительные отклонения от 2 часто сопровождаются необычно короткими расстояниями между атомами O, не связанными с одним катионом. Например, O2-O12'=3,01 Å, O2'-O12=3,04 Å при сумме кратностей связей для O2 около 1,75 и O12 - 2,20. Аналогичные укороченные контакты между атома-

Таблица 4

Баланс валентностей						Сумма кратностей связей для P1
O4	Si1	Si2				2,07
O1	Si1	Si5	Ca <sub>s</sub>			2,15
O7	Si3	Si4	Ca <sub>s</sub> '			2,04
O15	Si2	Si3	Ca <sub>s</sub>	Ca <sub>s</sub> '		2,01
O12	Si4	Si5	Ca <sub>s</sub>	Ca <sub>s</sub> '		2,20
O6	Si2		Ca <sub>s</sub>	H		1,11
O10	Si4		Fe <sup>3+</sup>	H		1,90
O2	Si1		Fe <sup>2+</sup>	Ca <sub>s</sub>		1,75
O9	Si3		Fe <sup>2+</sup> '	Ca <sub>s</sub> '		1,93
O14	Si5		Fe <sup>3+</sup> '	Ca <sub>s</sub>		1,96
O8	Si3		Fe <sup>3+</sup>	Ca <sub>s</sub>		2,02
O5	Si2		Fe <sup>3+</sup> '	Ca <sub>s</sub>	Ca <sub>s</sub> '	2,03
O13	Si5		Fe <sup>2+</sup>	Fe <sup>2+</sup> '	Ca <sub>s</sub>	1,90
O3	Si1		Fe <sup>2+</sup>	Fe <sup>3+</sup> '	Ca <sub>s</sub> '	2,00
O11	Si4		Fe <sup>2+</sup> '	Fe <sup>3+</sup>	Ca <sub>s</sub> '	1,92

ми О порядка 3,0—3,1 Å отмечаются для пар O7—O14', O7'—O14, O6—O6', O4—O15', O4'—O15.

Автор благодарит Э. Н. Елисеева, предоставившего для изучения кристаллы бабингтонита, Л. Г. Латышеву, принимавшую участие в измерениях кристаллов и Ю. И. Смолина за полезное обсуждение результатов.

## Литература

1. D. R. Peacor, N. Niizeki. Z. Kristallogr., 119, 98, 1963.
2. W. Hilmer, F. Liebau, E. Thile. K. Dornberger-Schiff. Naturwissenschaften, 43, 177, 1956.
3. X. С. Мамедов. Докл. АН АзербССР, 14, 445, 1958.
4. F. Liebau, W. Hilmer, G. Lindemann. Acta crystallogr., 15, 622, 1962.
5. F. Liebau, W. Hilmer, G. Lindemann. Acta crystallogr., 12, 182, 1959.
6. М. П. Габинет, Э. Н. Елисеев. Минералог. сб. Львовск. геол. о-ва, 16, 430, 1962.
7. Б. Л. Тарнопольский, В. И. Андрианов. Ж. структурн. химии, 4, 434, 1963.
8. В. И. Андрианов, Б. Л. Тарнопольский, Р. П. Шибасва. Ж. структурн. химии, 10, 116, 1969.
9. D. T. Cromer, J. V. Mann. Acta crystallogr., A24, 321, 1968.
10. D. T. Cromer, Acta crystallogr., 18, 17, 1965.
11. Г. Липсон, В. Кокрен. Определение структуры кристаллов. Изд-во ин. лит., М., 1956.
12. X. С. Мамедов, Н. В. Белов. Докл. АН СССР, 106, 462, 1956.
13. D. Rogers. Statistical properties of reciprocal space. The scaling of intensities. In: Computing methods in crystallography. Oxford, Pergamon press, 1965.
14. М. Бюргер. Структура кристаллов и векторное пространство. Изд-во ин. лит., М., 1961.
15. W. C. Hamilton. Acta crystallogr., 18, 502, 1965.
16. G. Denny, R. Allmann. Amer. Mineralogist, 55, 1003, 1970.

Всесоюзный институт  
целлюлозно-бумажной промышленности

Поступила в редакцию  
16.VII.1974