

ТЕХНОЛОГИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ/TECHNOLOGY OF INORGANIC SUBSTANCES

DOI: <https://doi.org/10.60797/CHEM.2025.5.2>РАСЧЕТ ГОМОЛОГИЧЕСКИХ СЕРИЙ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ СИСТЕМ $\{Li^+ - Fe^{2+} - (PO_4)^{3-}, (La^{3+} - Sr^{2+} - Ti^{4+} - O^{2-}), (Bi^{3+} - Sr^{2+} - Ca^{2+} - Cu^{2+} - O^{2-})\}$

Научная статья

Ундалов Ю.К.^{1,*}¹ Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Российская Федерация

* Корреспондирующий автор (undal[at]yandex.ru)

Аннотация

В работе рассмотрен упрощенный способ расчета формул гомологических серий химических соединений трех-, четырех- и пяти компонентных систем ионов химических элементов. В упрощенном способе расчета для определения формулы гомологической серии достаточно на основе базового (известного) химического соединения рассчитать гомологическую разницу. Вычитание максимально возможного количества раз формулы гомологической разницы из формулы базового кластера определит формулу искомой гомологической серии, которой принадлежит известное химическое соединение. Рассчитаны гомологические серии следующих систем: $\{Li^+ - Fe^{2+} - (PO_4)^{3-}\}$ в направлении Fe_2O_3 , $(La^{3+} - Sr^{2+} - Ti^{4+} - O^{2-})$ в направлении SrO , $(Bi^{3+} - Sr^{2+} - Ca^{2+} - Cu^{2+} - O^{2-})$ в направлении SrO .

Ключевые слова: гомологические серии, химические соединения, формулы гомологических серий, положение химического соединения в гомологической серии.

CALCULATION OF HOMOLOGOUS SERIES OF CHEMICAL COMPOUNDS OF SYSTEMS $\{Li^+ - Fe^{2+} - (PO_4)^{3-}, (La^{3+} - Sr^{2+} - Ti^{4+} - O^{2-}), (Bi^{3+} - Sr^{2+} - Ca^{2+} - Cu^{2+} - O^{2-})\}$

Research article

Undalov Y.K.^{1,*}¹ Ioffe Institute, Russian Academy of Sciences, Saint-Petersburg, Russian Federation

* Corresponding author (undal[at]yandex.ru)

Abstract

The paper considers a simplified method for calculating formulas for homologous series of chemical compounds of three-, four- and five-component systems of ions of chemical elements. In a simplified calculation method, to determine the formula of a homological series, it is sufficient to calculate the homological difference based on a basic (known) chemical compound. Subtracting the homological difference formula as many times as possible from the base cluster formula will determine the formula of the desired homological series to which the known chemical compound belongs. Homological series of the following systems are calculated: $\{Li^+ - Fe^{2+} - (PO_4)^{3-}\}$ in the direction of Fe_2O_3 , $(La^{3+} - Sr^{2+} - Ti^{4+} - O^{2-})$ in the direction of SrO , $(Bi^{3+} - Sr^{2+} - Ca^{2+} - Cu^{2+} - O^{2-})$ in the direction of SrO .

Keywords: homological series, chemical compounds, formulas of homological series, position of chemical compound in homological series.

Введение

Известно, что любое химическое соединение (ХС) является членом гомологической серии (ГС) с $n \geq 1$. Гомологическим сериям ХС характерна важная особенность: фундаментальные свойства ее членов изменяются закономерно [1], [2]. Эту особенность исследователи могут использовать при поиске новых ХС, фундаментальные свойства которых были бы характерны какому-нибудь известному (базовому) $(ХС_{n(bas)})$, но обладали бы более приемлемыми характеристиками по сравнению с $ХС_{n(bas)}$.

Так, опубликованы формулы ГС, полученных на основе (только!) экспериментов для некоторых систем химических элементов (ХЭ): для систем $(Mo - O)$, $(W - O)$, $(Ti - O)$, $(V - O)$ [3], [4], [5]; $(Fe - O)$ [6]; $(La - Ni - O)$ [7], [8], [9], [10]; $(Li - Ti - O)$ [11]; $(Ba - Cu - O)$ [12]; $(Sr - Ti - O)$ [13]; $(Y - Ba - Cu - O)$ [14], [15]; $(Ba - Sr - Ca - Cu - O)$ [16], $(La - Cu - O)$ [17] и $(Ti - Ca - Ba - Cu - O)$ [18], [19], [20].

Однако в случае, например, «фаз Магнели» все опубликованные в [3], [4] и [5] формулы ГС следует считать не двух-, а трех компонентными: Me_nO_{3n-1} [3] $\equiv Me^{5+}_2Me^{6+}_{n-2}O_{3n-1}$, где $(Me \equiv Mo, W)$ и $n = 8-12, 14$; или Me_nO_{2n-1} [4], [5] $\equiv Me^{3+}_2Me^{4+}_{n-2}O_{2n-1}$, где $(Me \equiv Ti, V)$ и $n = 4-10$; или W_nO_{3n-2} [5] $\equiv W^{5+}_4W^{6+}_{n-4}O_{3n-2}$, где $n = 20, 38-40$.

Аналогично, учитывая необходимость электро нейтральности формул ХС, ГС для системы $(La - Ni - O)$ [7], [8], [9], [10] следует считать четырех компонентными:

$La_nNi_nO_{3n-1}$ [7] $\equiv La_nNi^{2+}_2Ni^{3+}_{n-2}O_{3n-1}$, $La_{n+1}Ni_nO_{3n+1}$ [8] $\equiv La_{n+1}Ni^{2+}Ni^{3+}_{n-1}O_{3n+1}$, $La_{n+1}Ni_nO_{3n+1}$ [9] $\equiv La_{n+1}Ni^{2+}Ni^{3+}_{n-1}O_{3n+1}$ и $La_{2n-4}Ni_nO_{4n-5}$ [10] $\equiv La_{2n-4}Ni^{2+}_{n-2}Ni^{3+}_2O_{4n-5}$.

Кроме этого, ГС для системы $(Y - Ba - Cu - O)$ следует считать не четырех-, а пяти компонентной: $Y_2Ba_4Cu_6O_{14+n}$ [14], [15] $\equiv Y_2Ba_4Cu^{2+}_{4+n}Cu^{3+}_2O_{14+n}$.

Из-за отсутствия знаний закона формирования ГС обобщения полученных в работах [3], [4], [5], [6], [7], а также в [8], [9], [10], [11], [15] формул ХС только на основе экспериментов ошибочно принимались за ГС.

Авторы работы [11] получили на основе эксперимента формулу ГС системы $(M^+ - Ti^{4+} - O^{2-})$: $M^+_4Ti^{4+}_nO_{2(n+1)}$, где $M^+ \equiv Li^+, Na^+, K^+, Rb^+$. Для системы $(Ti^{3+} - Ca^{2+} - Ba^{2+} - Cu^{2+} - O^{2-})$ опубликованы три формулы ГС:

$Tl_mBa_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2(n+1)m}$ ($m = 1, 2; n = 1, 2, 3$) [18] и $Tl_1Ba_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+3}$ ($n = 1, 2, 3$) [19] и $Tl_2Ba_2Ca_{n-1}Cu_nO_{2n+4}$ ($n = 1, 2, 3$) [20].

Согласно авторам для системы $(Bi^{3+} - Sr^{2+} - Ca^{2+} - Cu^{2+} - O^{2-})$ [18] на основе экспериментов получена формула ГС: $Bi^{3+}_2Sr^{2+}_2Ca^{2+}_{n-1}Cu^{2+}_nO^{2-}_{4+2n}$.

В работах [21], [22] впервые были разработаны основы формирования формул ГС для трех компонентных систем ионов ХЭ ($A^{a+} - B^{b+} - C^{c-}$), который впоследствии был развит в обобщенном виде для использования для трех компонентных систем ($A^{a+} - B^{b+} - C^{c-}$) [23], [24], [25], [26], [27], для четырех компонентных систем ($A^{a+} - B^{b+} - D^{d+} - C^{c-}$) [24], [25] и для пяти компонентных систем ($A^{a+} - B^{b+} - D^{d+} - F^{f+} - C^{c-}$) [26], [27]. Кроме этого, для четырех- и пяти компонентных систем в работе [28] показано, что ГС могут развиваться только в сторону двух компонентных ХС (ДХС), а в сторону трех компонентных ХС (ТХС) – нет.

Используя разработанный в работах [21], [22], [26], [27], [28] способ расчета, были получены формулы ГС для следующих систем ХЭ: $(Li^+ - Ti^{4+} - O^{2-})$, $(Na^+ - Ti^{4+} - O^{2-})$, $(K^+ - V^{5+} - O^{2-})$, $(Ba^{2+} - Cu^{2+} - O^{2-})$, $\{Li^+ - Fe^{2+} - (PO_4)^{3-}\}$ – [21], [22]; $(Zn^{2+} - Ge^{4+} - P^{3-})$ – [23]; $(Li^+ - Ni^{3+} - Mn^{3+} - O^{2-})$ – [24]; $(La^{3+} - Ni^{2+} - Ni^{3+} - O^{2-})$ – [25].

Цель работы: разработать упрощенный способ расчета формул ГС на основе заданного (базового) ХС ($XC_{n(bas)}$).

Обоснование и решение поставленной задачи

В работе задача решается в обобщенном варианте. По этой причине, когда в написании уравнения реакции не используются концентрации реагентов, вместо знака равенства используется стрелка, которая указывает на направление взаимодействия. Все составы кластеров при необходимости определяются составом конкретного базового кластера ($XC_{n(bas)}$). Искомые формулы кластеров всех приводимых в работе реакций выделяются жирным шрифтом. Схема определения состава заряженных кластеров (ЗК), которые состоят только из катионов, описана в работах [21], [22], [23], [24], [25], а также в работах [26], [27], [28] и здесь для краткости она не приводится. Кластеры, представленные на рисунках и в тексте в виде точек обозначены, например, так: т. 1. Способ расчета формул ГС, основанный на использовании треугольника и треугольной пирамиды для представления системы ионов химических элементов (ХЭ), обладает очень важной особенностью: независимо от сложности системы ионов ХЭ схема расчета одинакова. Покажем это. Вид формул базового ХС ($XC_{n(bas)}$) в обобщенном виде можно представить так:

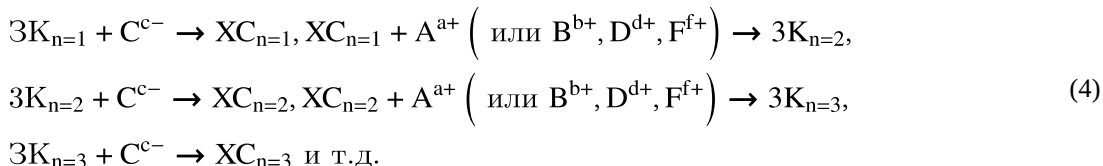
$$tbA_cC_a + raB_cC_b = A_{tb}B_{rac}C_{(t+r)ab} = TXC_{n(bas)} \quad (1)$$

$$tbdA_cC_a + radB_cC_b + wabD_cC_d = A_{tbd}B_{rad}D_{wab}C_{(t+r+w)abd} = ЧXC_{n(bas)} \quad (2)$$

$$tbdA_cC_a + radB_cC_b + wabD_cC_d + vabF_cC_f = A_{tbd}B_{rad}D_{wab}F_{vab}C_{(t+r+w+v)abd} = ПXC_{n(bas)} \quad (3)$$

где $(0 < t, r, w, v)$, четырех компонентное ХС (**ЧХС**), пятикомпонентное ХС (**ПХС**).

Формирование ГС независимо от сложности системы ионов ХЭ происходит по схеме:



Формула ГС в обобщенном виде выглядит так:

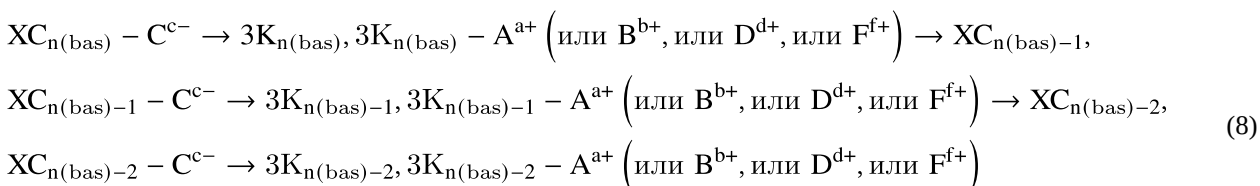
$$(\text{ветвь } XC \equiv XC_n) = XC_{n=1} + (n-1) \cdot \Delta \quad (5)$$

Для того чтобы определить формулу ГС, необходимо рассчитать формулы $XC_{n=1}$ и Δ в зависимости от формулы $XC_{n(bas)}$:

$$\Delta = XC_{n(bas)+1} - XC_{n(bas)} = 3K_{n(bas)+1} - 3K_{n(bas)} \quad (6)$$

$$XC_{n=1} = XC_{n(bas)} - k \cdot \Delta = XC_{n(bas)} - (n_{(bas)} - 1) \cdot \Delta \quad (7)$$

Чтобы определить величину k , которая связана с положением базового кластера в его ГС, нужно пройти в обратном направлении схему формирования ГС (4) в направлении от $XC_{n(bas)}$ и $3K_{n(bas)}$ к кластерам $XC_{n=1}$ и $3K_{n=1}$:



и т.д. до получения $XC_{n(bas)-k} = XC_{n=1}$ и $3K_{n(bas)-k} = 3K_{n=1}$

Однако, для определения k можно использовать более простую схему:

$$XC_{n(bas)} - \Delta \rightarrow XC_{n(bas)-1}, XC_{n(bas)-1} - \Delta \rightarrow XC_{n(bas)-2}, XC_{n(bas)-2} - \Delta \quad (9)$$

и т.д. до получения $XC_{n(bas)-k} = XC_{n=1}$

Так как $n > 0$, то в данном случае $\{(n_{(bas)} - k) > 0\}$ и $n_{(bas)} > k$. Анализ для систем любой сложности свойственна следующая зависимость:

$$k = n_{(\text{bas})} - 1 \quad (10)$$

Тогда, учитывая зависимость (7), формула ветви ХС гомологической серии будет выглядеть так:

$$\begin{aligned} (\text{ВЕТВЬ } \text{XC} \equiv \text{XC}_n) &= \text{XC}_{n+1} + (n-1) \cdot \Delta = \text{XC}_{n(\text{bas})} - k \cdot \Delta + (n-1) \cdot \Delta = \\ &= \text{XC}_{n(\text{bas})} + (n-k-1) \cdot \Delta = \text{XC}_{n(\text{bas})} + (n-n_{(\text{bas})}) \cdot \Delta \end{aligned} \quad (11)$$

Основная часть

3.1. Система $(A^{a+} - B^{b+} - C^{c-}) \equiv \{Li^+ - Fe^{2+} - (PO_4)^{3-}\}$. Направление $B_c C_b \equiv Fe_2O_3$

Пусть базовым кластером будет $(Li^+_{12}Fe^{2+}_{15}(PO_4)^{3-}_{14})$ [24] $\equiv \text{TXC}_{n(\text{bas})} = A_{\text{thc}}B_{\text{rac}}C_{(t+r)\text{ab}} = \text{т. 20}$ – рис. 1. Тогда $A^{a+} \equiv Li^+$, $B^{b+} \equiv Fe^{2+}$, $C^{c-} \equiv (PO_4)^{3-}$. $A_c C_a \equiv Li_3(PO_4)$, $B_c C_b \equiv Fe_3(PO_4)_2$.

В системе $\{Li^+ - Fe^{2+} - (PO_4)^{3-}\}$ кластеры в виде т. 1 и т. 2 образуются согласно [21] по реакциям – рис. 1:

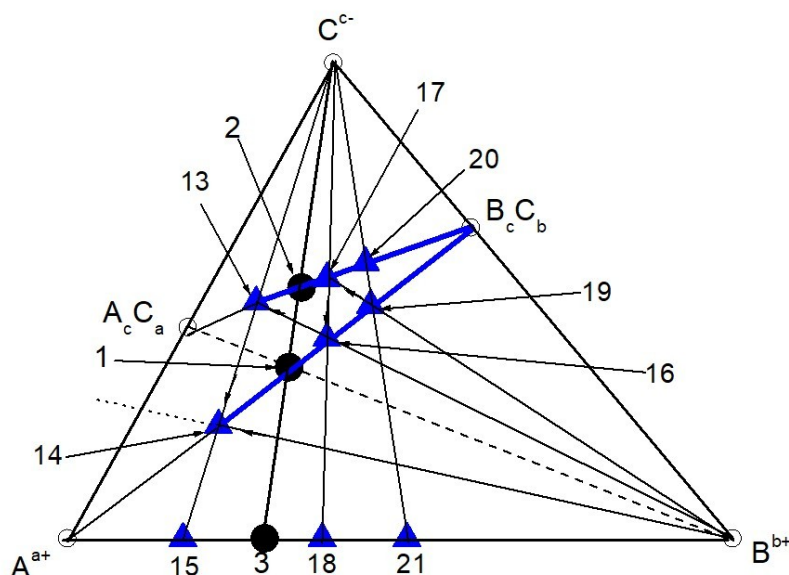
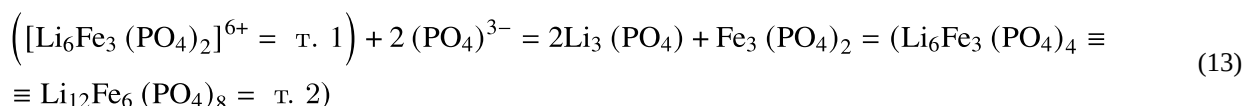
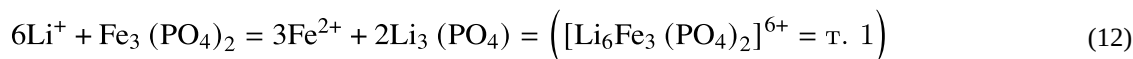


Рисунок 1 - Система $(A^{a+} - B^{b+} - C^{c-}) \equiv \{Li^+ - Fe^{2+} - (PO_4)^{3-}\} - \beta m\text{-ГС}$
DOI: <https://doi.org/10.60797/CHEM.2025.5.2.1>

На рисунке 1:

т. 1 = $[Li_6Fe_3(PO_4)_2]^{6+}$; т. 2 = $Li_{12}Fe_6(PO_4)_8$;

т. 3 = $[Li_6Fe_3]^{12+}$; т. 13 = $Li_{12}Fe_3(PO_4)_6$;

т. 14 = $[Li_{12}Fe_3(PO_4)_2]^{12+}$; т. 15 = $[Li_{12}Fe_3]^{18+}$;

т. 16 = $[Li_{12}Fe_9(PO_4)_6]^{12+}$; т. 17 = $Li_{12}Fe_9(PO_4)_{10}$;

т. 18 = $[Li_{12}Fe_9]^{30+}$; т. 19 = $\text{TЗK}_{n(\text{bas})} = [Li_{12}Fe_{15}(PO_4)_{10}]^{12+}$;

т. 20 = $\text{TXC}_{n(\text{bas})} = Li_{12}Fe_{15}(PO_4)_{14}$.

Формула $(\text{TЗK}_{n(\text{bas})} = \text{т. 19})$, $\text{TЗK}_{n(\text{bas})+1}$ и $\text{TXC}_{n(\text{bas})+1}$ определяются так:

$$\begin{aligned} \left\{ (\text{TЗK}_{n(\text{bas})} = \text{т. 19} = [Li_{12}Fe_{15}(PO_4)_{10}]^{12+} \right\} &= 12Li^+ + 5Fe_3(PO_4)_2 + 4(PO_4)^{3-} = \\ &= 4Li_3(PO_4) + 5Fe_3(PO_4)_2 = (\text{TXC}_{n(\text{bas})} \equiv \text{т. 20} \equiv Li^+_{12}Fe^{2+}_{15}(PO_4)^{3-}_{14}) \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \left\{ \text{TXC}_{n(\text{bas})} = \text{т. 20} = Li_{12}Fe_{15}(PO_4)_{14} \right\} &+ 6Fe^{2+} = 12Li^+ + 7Fe_3(PO_4)_2 = \\ &= (\text{TЗK}_{n(\text{bas})+1} = [Li_{12}Fe_{21}(PO_4)_{14}]^{12+}) \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \left(\text{TЗK}_{n(\text{bas})+1} \equiv [\text{Li}_{12}\text{Fe}_{21}(\text{PO}_4)_{14}]^{12+} + 4(\text{PO}_4)^{3-} = 4\text{Li}_3(\text{PO}_4) + 7\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 = \right. \\ \left. = (\text{Li}_{12}\text{Fe}_{21}(\text{PO}_4)_{18} = \text{TXC}_{n(\text{bas})+1}) \right) \end{aligned} \quad (16)$$

Согласно (5) получим формулу Δ :

$$\Delta = \text{TXC}_{n(\text{bas})+1} - \text{TXC}_{n(\text{bas})} = \text{Li}_{12}\text{Fe}_{21}(\text{PO}_4)_{18} - \text{Li}_{12}\text{Fe}_{15}(\text{PO}_4)_{14} = \text{Fe}_6(\text{PO}_4)_4 \quad (17)$$

Для того чтобы определить формулу $\text{TXC}_n = 1$, необходимо из формулы $\text{TXC}_{n(\text{bas})}$ вычесть Δ максимальное количество раз при условии сохранения Fe^{2+} в получаемой таким образом формуле ТХС. Как видно, чтобы избежать потерю Fe^{2+} в формуле ТХС, из формул ($\text{TXC}_{n(\text{bas})} = \text{т. 20} = \text{Li}_{12}\text{Fe}_{15}(\text{PO}_4)_{14}$) и ($\text{TЗK}_{n(\text{bas})} = \text{т. 19} = [\text{Li}_{12}\text{Fe}_{15}(\text{PO}_4)_{10}]^{12+}$) можно вычесть ($\Delta = \text{Fe}_6(\text{PO}_4)_4$) только 2 раза, что соответствует $k = 2$ и $n_{(\text{bas})} = k + 1 = 3$. В результате получим: ($\text{TXC}_{n=1} = \text{т. 13} = \text{Li}_{12}\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_6$) и ($\text{TЗK}_{n=1} = \text{т. 14} = [\text{Li}_{12}\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2]^{12+}$). При этом, следует обратить внимание на то, что в формуле ($\text{TXC} = \text{т. 2} = \text{Li}_{12}\text{Fe}_6(\text{PO}_4)_8 = 4\text{Li}_3(\text{PO}_4) + 2\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$) соотношение ($\text{Li}_3(\text{PO}_4)/\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 = 2$), а в формуле ($\text{TXC}_{n=1} = \text{т. 13} = \text{Li}_{12}\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_6 \equiv 4\text{Li}_3(\text{PO}_4) + \text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$) соотношение ($\text{Li}_3(\text{PO}_4)/\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 = 4$).

Следовательно, ($\text{TXC}_{n=1} = \text{т. 13} = \text{Li}_{12}\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_6$) находится на отрезке ($\text{т. 2} - \text{Li}_3(\text{PO}_4)$), а $\{\text{TЗK}_{n=1} = \text{т. 14} = [\text{Li}_{12}\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2]^{12+}\}$ — на отрезке ($\text{т. 1} - \text{Li}^+$). Важно также отметить, что продолжение отрезка $\{\text{Fe}^{2+} - (\text{TЗK}_{n=1} = \text{т. 14} = [\text{Li}_{12}\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2]^{12+})\}$ не пересекается с отрезком $\{\text{Li}_3(\text{PO}_4) - \text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2\}$ указывая тем самым на отсутствия ТХС, который бы следовал за ($\text{TXC} = \text{т. 13}$) в сторону $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$. Сказанное графически подтверждает, что ($\text{TЗK} = \text{т. 14}$) и ($\text{TXC} = \text{т. 13}$) является первыми членами в ГС, третьим гомологом которой является ($\text{TXC}_{n(\text{bas})} = \text{т. 20} = \text{Li}_{12}\text{Fe}_{15}(\text{PO}_4)_{14}$).

$$\begin{aligned} (\text{ветвь } \text{XC} \equiv \text{TXC}_n = \text{TXC}_{n=1} + (n-1) \cdot \Delta = \text{TXC}_{n(\text{bas})} + (n - n_{(\text{bas})}) \cdot \Delta = \\ = \{(\text{TXC}_{n(\text{bas})} = \text{Li}_{12}\text{Fe}_{15}(\text{PO}_4)_{14}\} + (n-1)\text{Fe}_6(\text{PO}_4)_4 = \text{Li}_{12}\text{Fe}_{6n+9}(\text{PO}_4)_{4n+10} \end{aligned} \quad (18)$$

3.2. Система ($\text{A}^{a+} - \text{B}^{b+} - \text{D}^{d+} - \text{C}^{c-}$) $\equiv (\text{La}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ti}^{4+} - \text{O}^{2-})$

Рассмотрим расчет ГС на примере системы ($\text{La}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ti}^{4+} - \text{O}^{2-}$). Тогда $\text{A}^{a+} \equiv \text{La}^{3+}$, $\text{B}^{b+} \equiv \text{Sr}^{2+}$, $\text{D}^{d+} \equiv \text{Ti}^{4+}$, $\text{C}^{c-} \equiv \text{O}^{2-}$, $\text{A}_c\text{C}_a \equiv \text{La}_2\text{O}_3$, $\text{B}_c\text{C}_b \equiv \text{SrO}$, $\text{D}_c\text{C}_d \equiv \text{TiO}_2$.

Пусть базовым кластером будет ($\text{La}^{3+}_2\text{Sr}^{2+}_4\text{Ti}^{4+}_6\text{O}^{2-}_{19}$ [38] = $\text{ЧХC}_{n(\text{bas})} = \text{A}_{bdc}\text{B}_{radc}\text{D}_{wabc}\text{C}_{(t+r+w)abd} = \text{т. 1}$) — рис. 2, 3.

Формулы кластеров, которые характеризуют систему ($\text{A}^{a+} - \text{B}^{b+} - \text{D}^{d+} - \text{C}^{c-}$) $\equiv (\text{La}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ti}^{4+} - \text{O}^{2-})$ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} (\text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19} = \text{A}_{t bdc}\text{B}_{radc}\text{D}_{wabc}\text{C}_{(t+r+w)abd} = \text{т. 1}) = \text{La}_2\text{O}_3 + (\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{16} = \text{B}_{rdc}\text{D}_{wbc}\text{C}_{(r+w)bd} = \text{т. 2}) = \\ = 4\text{SrO} + (\text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15} = \text{A}_{tdc}\text{D}_{wac}\text{C}_{(t+w)ad} = \text{т. 3}) = \\ = 6\text{TiO}_2 + (\text{La}_2\text{Sr}_4\text{O}_7 = \text{A}_{t bdc}\text{B}_{radc}\text{C}_{(t+r)ab} = \text{т. 4}) \end{aligned} \quad (19)$$

$$(\text{т. 5} = [\text{Sr}_4\text{Ti}_6]^{32+} \equiv [\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}]^{96+}) + 16\text{O}^{2-} = (\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{16} = \text{т. 2}) \quad (20)$$

$$(\text{т. 6} = [\text{La}_2\text{Ti}_6]^{30+}) + 15\text{O}^{2-} = (\text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15} = \text{т. 3}) \quad (21)$$

$$(\text{т. 7} = [\text{La}_2\text{Sr}_4]^{14+}) + 7\text{O}^{2-} = (\text{La}_2\text{Sr}_4\text{O}_7 = \text{т. 4}) \quad (22)$$

$$\begin{aligned} & \left(\text{т. 5} = [\text{Sr}_4\text{Ti}_6]^{32+} \right) + 2\text{La}^{3+} = \left(\text{т. 6} = [\text{La}_2\text{Ti}_6]^{30+} \right) + 4\text{Sr}^{2+} = \left(\text{т. 7} = [\text{La}_2\text{Sr}_4]^{14+} \right) + 6\text{Ti}^{4+} = \\ & = \left([\text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6]^{38+} = \text{т. 8} \right) \end{aligned} \quad (23)$$

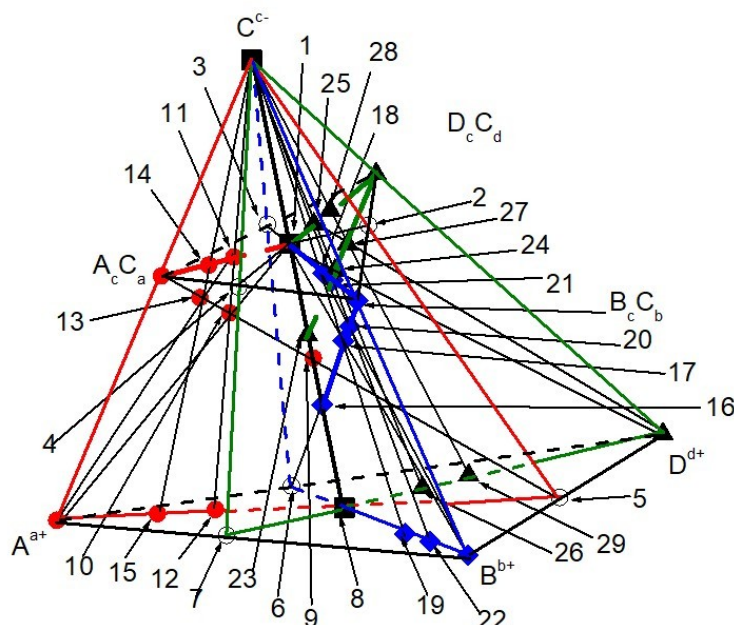


Рисунок 2 - Система $(A^{a+} - B^{b+} - D^{d+} - C^{c-}) \equiv (\text{La}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ti}^{4+} - \text{O}^{2-})$
DOI: <https://doi.org/10.60797/CHEM.2025.5.2.2>

На рисунке 2:

- т. 1 = $\text{ЧХС}_{n(\text{bas})} = \text{La}^{3+}_2\text{Sr}^{2+}_4\text{Ti}^{4+}_6\text{O}^{2-}_{19} \equiv \text{La}_6\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_{57}$;
 т. 2 = $\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{16}$; т. 3 = $\text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15}$;
 т. 4 = $\text{La}_2\text{Sr}_4\text{O}_7$; т. 5 = $[\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}]^{96+}$;
 т. 6 = $[\text{La}_2\text{Ti}_6]^{30+}$; т. 7 = $[\text{La}_2\text{Sr}_4]^{14+}$;
 т. 8 = $[\text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6]^{38+}$; т. 9 = $\text{ЧЗК}_{n(\text{bas})} = [\text{La}_6\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_9]^{96+}$;
 т. 10 = $[\text{La}_{38}\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_{57}]^{96+}$; т. 11 = $\text{La}_{38}\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_{105}$;
 т. 12 = $[\text{La}_{38}\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}]^{210+}$; т. 13 = $[\text{La}_{70}\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_{105}]^{63+}$;
 т. 14 = $\text{La}_{70}\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_{153}$; т. 15 = $[\text{La}_{70}\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}]^{306+}$;
 т. 16 = $\text{ЧЗК}_{n(\text{bas})} = [\text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_4]^{30+}$; т. 17 = $[\text{La}_2\text{Sr}_{19}\text{Ti}_6\text{O}_{19}]^{30+}$;
 т. 18 = $\text{La}_6\text{Sr}_{27}\text{Ti}_{18}\text{O}_{72}$; т. 19 = $[\text{La}_6\text{Sr}_{27}\text{Ti}_{18}]^{144+}$;
 т. 20 = $[\text{La}_6\text{Sr}_{27}\text{Ti}_{18}\text{O}_{27}]^{90+}$; т. 21 = $\text{La}_6\text{Sr}_{42}\text{Ti}_{18}\text{O}_{87}$;
 т. 22 = $[\text{La}_6\text{Sr}_{42}\text{Ti}_{18}]^{174+}$; т. 23 = $\text{ЧЗК}_{n(\text{bas})} = [\text{La}_4\text{Sr}_8\text{Ti}_{12}\text{O}_{24}]^{28+}$;
 т. 24 = $[\text{La}_4\text{Sr}_8\text{Ti}_{19}\text{O}_{38}]^{28+}$; т. 25 = $\text{La}_4\text{Sr}_8\text{Ti}_{19}\text{O}_{52}$;
 т. 26 = $[\text{La}_4\text{Sr}_8\text{Ti}_{19}]^{104+}$; т. 27 = $[\text{La}_4\text{Sr}_8\text{Ti}_{26}\text{O}_{52}]^{28+}$;
 т. 28 = $\text{La}_4\text{Sr}_8\text{Ti}_{26}\text{O}_{66}$; т. 29 = $[\text{La}_4\text{Sr}_8\text{Ti}_{26}]^{132+}$;
 т. 30 = $\text{La}_{32}\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_{48}]^{96+}$; т. 31 = $\text{La}_{32}\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_{96}$;
 т. 32 = $[\text{La}_{32}\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}]^{192+}$; т. 35 = $[\text{La}_2\text{Sr}_{15}\text{Ti}_6]^{60+}$.

3.2.1. Подсистема $(B^{b+} - \text{т. 6} - \text{O}^{2-}) \equiv (\text{Sr}^{2+} - [\text{La}_2\text{Ti}_6]^{30+} - \text{O}^{2-})$. Направление $B_c C_b \equiv \text{SrO}$

Для того чтобы рассчитать формулу ГС, которой принадлежит $(\text{ЧХС}_{n(\text{bas})} = \text{т. 1} = \text{La}^{3+}_2\text{Sr}^{2+}_4\text{Ti}^{4+}_6\text{O}^{2-}_{19})$, в подсистеме $(B^{b+} - \text{т. 6} - C^{c-}) \equiv (\text{Sr}^{2+} - \text{т. 6} - \text{O}^{2-})$ нужно определить значение Δ , $n(\text{bas})$ и рассчитать формулы $\text{ЧЗК}_{n(\text{bas})}$, $\text{ЧЗК}_{n(\text{bas})+1}$ и $\text{ЧХС}_{n(\text{bas})+1}$ следующим образом:

$$\begin{aligned} & \left\{ \left(\text{т. 6} = [\text{La}_2\text{Ti}_6]^{30+} \right) + \text{SrO} = \left([\text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_4]^{30+} = \text{ЧЗК}_{n(\text{bas})} = \text{т. 6} \right) \right\} + 16\text{O}^{2-} = \\ & = \text{SrO} + (\text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15} = \text{т. 3}) = (\text{ЧХС}_{n(\text{bas})} = \text{т. 1} = \text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19}) \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} & \left\{ (\text{ЧХС}_{n(\text{bas})} = \text{т. 1} = \text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19}) + 15\text{Sr}^{2+} = \left(\text{т. 6} = [\text{La}_2\text{Ti}_6]^{30+} \right) + 19\text{SrO} \right\} = \\ & = (\text{ЧЗК}_{n(\text{bas})+1} = \text{т. 17} = [\text{La}_2\text{Sr}_{19}\text{Ti}_6\text{O}_{19}]^{30+}) \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \left(\text{ЧЗК}_{n(\text{bas})+1} = \text{т. 16} = [\text{La}_2\text{Sr}_{19}\text{Ti}_6\text{O}_{19}]^{30+} \right) + 15\text{O}^{2-} &= 19\text{SrO} + (\text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15} = \text{т. 3}) = \\ &= (\text{ЧХС}_{n(\text{bas})+1} = \text{т. 18} = \text{La}_2\text{Sr}_{19}\text{Ti}_6\text{O}_{34}) \end{aligned} \quad (26)$$

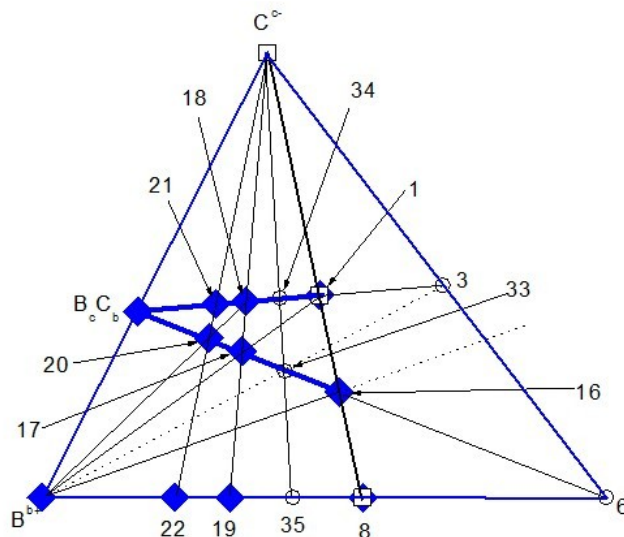


Рисунок 3 - Подсистема ($B^b - \text{т. 6} - C^c \equiv (\text{Sr}^{2+} - [\text{La}_2\text{Ti}_6]^{30+} - \text{O}^{2-})$). Направление $B_c C_b \equiv \text{SrO}$
DOI: <https://doi.org/10.60797/CHEM.2025.5.2.3>

На рисунке 3:

т. 1 = $\text{ЧХС}_{n(\text{bas})} = \text{La}^{3+}_2\text{Sr}^{2+}_4\text{Ti}^{4+}_6\text{O}^{2-}_{19} = \text{La}_6\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_{57}$;
т. 3 = $\text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15}$; **т. 6** = $[\text{La}_2\text{Ti}_6]^{30+}$; **т. 8** = $[\text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6]^{38+}$;
т. 16 = $\text{ЧЗК}_{n(\text{bas})} = [\text{La}_6\text{Sr}_{12}\text{Ti}_{18}\text{O}_{12}]^{90+}$; **т. 17** = $[\text{La}_6\text{Sr}_{27}\text{Ti}_{18}\text{O}_{27}]^{90+}$;
т. 18 = $\text{La}_6\text{Sr}_{27}\text{Ti}_{18}\text{O}_{72}$; **т. 19** = $[\text{La}_6\text{Sr}_{27}\text{Ti}_{18}]^{144+}$;
т. 20 = $[\text{La}_6\text{Sr}_{27}\text{Ti}_{18}\text{O}_{27}]^{90}$; **т. 21** = $\text{La}_6\text{Sr}_{42}\text{Ti}_{18}\text{O}_{87}$;
т. 22 = $[\text{La}_6\text{Sr}_{42}\text{Ti}_{18}]^{174+}$; **т. 33** = $[\text{La}_2\text{Sr}_{15}\text{Ti}_6\text{O}_{15}]^{30+}$;
т. 34 = $\text{La}_2\text{Sr}_{15}\text{Ti}_6\text{O}_{30}$; **т. 35** = $[\text{La}_2\text{Sr}_{15}\text{Ti}_6]^{60+}$.

Согласно (6) получим формулу Δ :

$$\Delta = \text{ТХС}_{n(\text{bas})+1} - \text{ТХС}_{n(\text{bas})} = \text{La}_2\text{Sr}_{19}\text{Ti}_6\text{O}_{34} - \text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19} = \text{Sr}_{15}\text{O}_{15} \quad (27)$$

$$\text{ЧХС}_{n=1} = \text{ЧХС}_{n(\text{bas})} - k \cdot \Delta = \text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19} - k \cdot \text{Sr}_{15}\text{O}_{15} \quad (28)$$

Для того чтобы определить формулу $\text{ЧХС}_{n=1}$, необходимо из формулы $\text{ЧХС}_{n(\text{bas})}$ вычесть Δ максимальное количество раз при условии сохранения Sr^{2+} в получаемой таким образом формуле ТХС. Как видно, из формул ($\text{ЧХС}_{n(\text{bas})} = \text{т. 1} = \text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19}$) нельзя вычитать ($\Delta = \text{Sr}_{15}\text{O}_{15}$), что соответствует $k = 0$ и $n_{(\text{bas})} = 1$. В результате подтвердится, что: $\text{ЧХС}_{n=1} = \text{т. 1} = \text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19}$ и ($\text{ЧЗК}_{n=1} = \text{т. 16} = [\text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_4]^{30+}$). При этом, следует обратить внимание на то, что в формуле ($\text{т. 34} = \text{La}_2\text{Sr}_{15}\text{Ti}_6\text{O}_{30} = 15\text{SrO} + \text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15}$) соотношение $\text{SrO} / \text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15} = 15/1$, а в формуле ($\text{ЧХС}_{n=1} = \text{т. 1} = \text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19}$) соотношение ($\text{SrO} / \text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15} = 4/1$). Следовательно, ($\text{ЧХС}_{n=1} = \text{т. 1} = \text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19}$) находится на отрезке ($\text{т. 3} - \text{т. 34}$), а ($\text{ЧЗК}_{n=1} = \text{т. 16} = [\text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_4]^{30+}$) – на отрезке ($\text{т. 6} - \text{т. 33}$), где:

$$\begin{aligned} 15\text{Sr}^{2+} + (\text{ТХС} = \text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15} = \text{т. 3}) &= 15\text{SrO} + (\text{т. 6} = [\text{La}_2\text{Ti}_6]^{30+}) = \\ &= (\text{т. 33} = [\text{La}_2\text{Sr}_{15}\text{Ti}_6\text{O}_{15}]^{30+}) \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} (\text{т. 33} = [\text{La}_2\text{Sr}_{15}\text{Ti}_6\text{O}_{15}]^{30+}) + 15\text{O}^{2-} &= 15\text{SrO} + (\text{ТХС} = \text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15} = \text{т. 3}) = \\ &= (\text{т. 34} = \text{La}_2\text{Sr}_{15}\text{Ti}_6\text{O}_{30}) \end{aligned} \quad (30)$$

Важно также отметить, что продолжение отрезка $\{\text{Sr}^{2+} - (\text{ТЗК}_{n=1} = \text{т. 16} = [\text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_4]^{30+})\}$ не пересекается с отрезком ($\text{SrO} - \text{т. 3}$) указывая тем самым на отсутствия ТХС, который бы следовал за ($\text{ТХС} = \text{т. 1}$) в сторону ($\text{La}_2\text{Ti}_6\text{O}_{15}$

= т. 3). Сказанное графически подтверждает, что $(\text{ТЗК}_{n(\text{bas})} = 1 = \text{т. 16})$ и $(\text{ТХС}_{n(\text{bas})} = 1 = \text{т. 1})$ являются первыми членами в ГС. Тогда в соответствии с(11) получим:

$$\begin{aligned} (\text{ветвь } \text{XC} \equiv \text{ЧХС}_n = \text{ЧХС}_{n=1} + (n-1) \cdot \Delta = \text{ЧХС}_{n(\text{bas})} + (n - n_{(\text{bas})}) \cdot \Delta = \\ = (\text{ЧХС}_{n(\text{bas})} = \text{La}_2\text{Sr}_4\text{Ti}_6\text{O}_{19}) + (n-1)\text{Sr}_{15}\text{O}_{15} = \text{La}_2\text{Sr}_{15n-11}\text{Ti}_6\text{O}_{15n+4} \end{aligned} \quad (31)$$

3.3. Система $(\text{A}^{3+} - \text{B}^{b+} - \text{D}^{d+} - \text{F}^{f+} - \text{C}^{c-}) \equiv (\text{Bi}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ca}^{2+} - \text{Cu}^{2+} - \text{O}^{2-})$. Подсистема $(\text{B}^{b+} - \text{D}^{d+} - [\text{A}_{\text{tf}}\text{F}_{\text{va}}]^{(t+v)\text{af}+} - \text{C}^{c-}) \equiv (\text{Sr}^{2+} - \text{Ca}^{2+} - [\text{Bi}^{3+}_2\text{Cu}^{2+}_3]^{12+} - \text{O}^{2-})$

Рассчитаем формулу ГС на примере системы $(\text{Bi}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ca}^{2+} - \text{Cu}^{2+} - \text{O}^{2-})$. Тогда $\text{A}^{3+} \equiv \text{Bi}^{3+}$, $\text{B}^{b+} \equiv \text{Sr}^{2+}$, $\text{D}^{d+} \equiv \text{Ca}^{2+}$, $\text{F}^{f+} \equiv \text{Cu}^{2+}$, $\text{C}^{c-} \equiv \text{O}^{2-}$, $\text{A}_c\text{C}_a \equiv \text{Bi}_2\text{O}_3$, $\text{B}_c\text{C}_b \equiv \text{SrO}$, $\text{D}_c\text{C}_d \equiv \text{CaO}$, $\text{F}_c\text{C}_f \equiv \text{CuO}$. Для конкретизации подсистем $(\text{B}^{b+} - \text{D}^{d+} - [\text{A}_{\text{tf}}\text{F}_{\text{va}}]^{(t+v)\text{af}+} - \text{C}^{c-})$ и $\{([\text{A}_{\text{tdf}}\text{D}_{\text{waf}}\text{F}_{\text{vad}}]^{(t+w+v)\text{adf}+} = \text{т. 5}) - \text{B}^{b+} - \text{C}^{c-}\}$ рассчитаем формулы кластеров в виде т. 2, т. 3, т. 5, $[\text{A}_{\text{tf}}\text{F}_{\text{va}}]^{(t+v)\text{af}+}$ и $\text{A}_{\text{tfc}}\text{F}_{\text{vac}}\text{C}_{(t+v)\text{af}}$ применительно к системе $(\text{Bi}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ca}^{2+} - \text{Cu}^{2+} - \text{O}^{2-})$. Пусть базовым кластером будет $(\text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{26}) = \text{A}_{\text{tdfc}}\text{B}_{\text{radfc}}\text{D}_{\text{wabfc}}\text{F}_{\text{vabdc}}\text{C}_{(t+r+w+v)\text{abdf}} = \text{ТХС}_{n(\text{bas})} = \text{т. 14}$ – рис. 4, 5.

$$\begin{aligned} (\text{ПХС}_{n(\text{bas})} = \text{т. 14} = \text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{26} = \text{A}_{\text{tdfc}}\text{B}_{\text{radfc}}\text{D}_{\text{wabfc}}\text{F}_{\text{vabdc}}\text{C}_{(t+r+w+v)\text{abdf}} = 18\text{SrO} + \\ + (\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8 = \text{A}_{\text{tdfc}}\text{D}_{\text{wafc}}\text{F}_{\text{vadfc}}\text{C}_{(t+w+v)\text{adf}} = \text{т. 2}) \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \left(\left(c [\text{A}_{\text{tdf}}\text{D}_{\text{waf}}\text{F}_{\text{vad}}]^{(t+w+v)\text{adf}+} = \text{т. 5} = [\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3]^{16+} \right) + 8\text{O}^{2-} = \right. \\ \left. = (\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8 = \text{A}_{\text{tdfc}}\text{D}_{\text{wafc}}\text{F}_{\text{vadfc}}\text{C}_{(t+w+v)\text{adf}} = \text{т. 2}) \right. \end{aligned} \quad (33)$$

Формулы кластеров в виде $[\text{A}_{\text{tf}}\text{F}_{\text{va}}]^{(t+v)\text{af}+}$ и $\text{A}_{\text{tfc}}\text{F}_{\text{vac}}\text{C}_{(t+v)\text{af}}$ определяются так:

$$\begin{aligned} (\text{wafD}_c\text{C}_d = 2\text{CaO}) + (\text{dA}_{\text{tfc}}\text{F}_{\text{vac}}\text{C}_{(t+v)\text{af}} = \text{Bi}_2\text{Cu}_3\text{O}_6) = \\ = (\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8 = \text{A}_{\text{tdfc}}\text{D}_{\text{wafc}}\text{F}_{\text{vadfc}}\text{C}_{(t+w+v)\text{adf}} = \text{т. 2}) \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} (\text{wafD}^{d+} = 2\text{Ca}^{2+}) + (\text{d} [\text{A}_{\text{tf}}\text{F}_{\text{va}}]^{(t+v)\text{af}+} = [\text{Bi}_2\text{Cu}_3]^{12+}) = \\ = ([\text{A}_{\text{tdf}}\text{D}_{\text{waf}}\text{F}_{\text{vad}}]^{(t+w+v)\text{bdf}+} = \text{т. 5} = [\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3]^{16+}) \end{aligned} \quad (35)$$

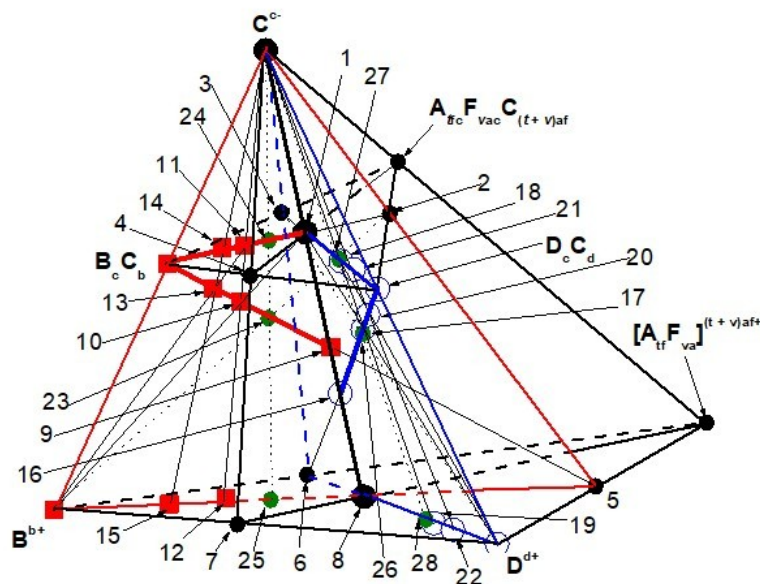


Рисунок 4 - Система $(\text{B}^{b+} - \text{D}^{d+} - [\text{A}_{\text{tf}}\text{F}_{\text{va}}]^{(t+v)\text{af}+} - \text{C}^{c-}) \equiv (\text{Bi}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ca}^{2+} - \text{Cu}^{2+} - \text{O}^{2-})$

DOI: <https://doi.org/10.60797/CHEM.2025.5.2.4>

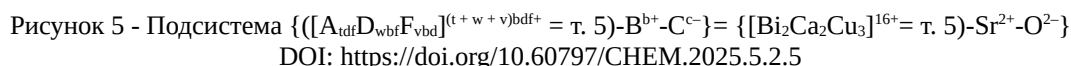
На рисунке 4:

- т. 1 = $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$; т. 2 = $\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$; т. 3 = $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$;
 т. 4 = $\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{O}_4$; т. 5 = $[\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3]^{16+}$; т. 6 = $[\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Cu}_3]^{16+}$;
 т. 7 = $[\text{Sr}_2\text{Ca}_2]^{8+}$; т. 8 = $[\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3]^{20+}$; т. 9 = $[\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_2]^{16+}$;
 т. 10 = $[\text{Bi}_2\text{Sr}_{10}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}]^{16+}$; т. 11 = $\text{Bi}_2\text{Sr}_{10}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{18}$;
 т. 12 = $[\text{Bi}_2\text{Sr}_{10}\text{Ca}_2\text{Cu}_3]^{36+}$; т. 13 = $\text{ПХС}_{n(\text{bas})} = [\text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{18}]^{16+}$;
 т. 14 = $\text{ПХС}_{n(\text{bas})} = \text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{26}$; т. 15 = $[\text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3]^{52+}$;

3.3.1. Подсистема $\{([A_{\text{tdf}}D_{\text{waf}}F_{\text{vad}}]^{(t+w+v)\text{adf}+} = \text{т. 5}) - B^{b+} - C^{c-}\} \equiv [Bi_2Ca_2Cu_3]^{16+} = \text{т. 5}) - Sr^{2+} - O^{2-}$. Направление $B_c C_b \equiv$

Для того чтобы рассчитать формулу ГС, которой принадлежит $(\text{ПХС}_{\text{n(bas)}} = \text{т. 14})$, применительно к подсистеме $\{([\text{A}_{\text{adf}}\text{D}_{\text{waf}}\text{F}_{\text{vad}}]^{(\text{t} + \text{w} + \text{v})\text{adf}+} = \text{т. 5})\text{-B}^{+3}\text{-C}^{-3}\} \equiv [\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3]^{16+} = \text{т. 5})\text{-Sr}^{2+}\text{-O}^{2-}\}$ нужно определить значение Δ , $\text{n}_{(\text{bas})}$ и рассчитать формулы $\text{ПЗК}_{\text{n(bas)}}$, $\text{ПЗК}_{\text{n(bas)} + 1}$ и $\text{ПХС}_{\text{n(bas)} + 1}$ следующим образом:

$$\text{PXC}_{n=1} = \text{PXC}_{n(\text{bas})} - k \cdot \Delta = \text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{26} - k \cdot \text{Sr}_8\text{O}_8 \quad (40)$$



Для того чтобы определить формулу $\text{PXC}_n = 1$, необходимо из формулы $\text{PXC}_{n(\text{bas})}$ вычесть Δ максимальное количество раз при условии сохранения Sr^{2+} в получаемой таким образом формуле PXC . Как видно, из формул ($\text{PXC}_{n(\text{bas})} = \text{т. 14} = \text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{26}$) можно вычесть ($\Delta = \text{Sr}_8\text{O}_8$) только два раза, что соответствует $k = 2$ и $n_{(\text{bas})} = 3$. В

результате получим: $(\text{ПХС}_{n(\text{bas})=1} = \text{т. } 1 = \text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10})$ и $(\text{ПЗК}_{n(\text{bas})=1} = \text{т. } 9 = [\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_2]^{16+})$. При этом, следует обратить внимание на то, что в формуле $(\text{т. } 24 = \text{Bi}_2\text{Sr}_8\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{16}) = 8\text{SrO} + \text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ соотношение $\text{SrO}/\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8 = 8$, а в формуле $(\text{ПХС}_{n=1} = \text{т. } 1 = \text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10} = 2\text{SrO} + \text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8)$ соотношение $(\text{SrO}/\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8 = 2)$. Следовательно, $(\text{ПХС}_{n=1} = \text{т. } 14 = \text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{26})$ находится на отрезке $(\text{т. } 2 - \text{т. } 24)$, а $\{\text{ПЗК}_{n=1} = \text{т. } 9 = [\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_2]^{16+}\}$ – на отрезке $(\text{т. } 5 - \text{т. } 23)$, где:

$$8\text{Sr}^{2+} + (\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8 = \text{т. } 2) = 8\text{SrO} + \left(\text{т. } 5 = [\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3]^{16+} \right) = (\text{т. } 23 = [\text{Bi}_2\text{Sr}_8\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8]^{16+}) \quad (41)$$

$$\left(\text{т. } 23 = [\text{Bi}_2\text{Sr}_8\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8]^{16+} \right) + 8\text{O}^{2-} = 8\text{SrO} + (\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8 = \text{т. } 2) = (\text{т. } 24 = \text{Bi}_2\text{Sr}_8\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{16}) \quad (42)$$

Важно также отметить, что продолжение отрезка $\{\text{Sr}^{2+} - (\text{ПЗК}_{n=1} = \text{т. } 9 = [\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_2]^{16+})\}$ не пересекается с отрезком $(\text{SrO} - \text{т. } 2)$ указывая тем самым на отсутствия ПХС, который бы следовал за $(\text{ПХС} = \text{т. } 1)$ в сторону $(\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8 = \text{т. } 2)$. Сказанное графически подтверждает, что $(\text{ПЗК}_{n(\text{bas})=1} = \text{т. } 9)$ и $(\text{ПХС}_{n(\text{bas})=1} = \text{т. } 1)$ являются первыми членами в ГС, которой принадлежит $(\text{ПХС}_{n(\text{bas})} = \text{т. } 14 = \text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{26})$. Тогда в соответствии с (11) при $n(\text{bas}) = 3$ получим:

$$\begin{aligned} (\text{ветвь } \text{XC} \equiv \text{ПХС}_n = \text{ПХС}_{n+1} + (n-1) \cdot \Delta = \text{ПХС}_{n(\text{bas})} + (n - n(\text{bas})) \cdot \Delta = \\ = (\text{ПХС}_{n(\text{bas})} = \text{Bi}_2\text{Sr}_{18}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{26}) + (n-3)\text{Sr}_8\text{O}_8 = \text{Bi}_2\text{Sr}_{8n-6}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8n+2} \end{aligned} \quad (43)$$

Заключение

Разработанный способ позволяет достаточно просто рассчитать формулу ГС много компонентных систем ионов ХЭ. Для этого достаточно определить формулу гомологической разницы Δ и положение базового кластера в искомой ГС. Вычитание максимального количества раз формулы гомологической разницы из формулы базового кластера при условии сохранения в ХС минимального количества катиона, входящего в состав Δ , определяет формулу искомой ГС. В результате рассчитаны формулы ГС четырех систем ионов ХЭ: $\{\text{Li}^+ - \text{Fe}^{2+} - (\text{PO}_4)^{3-}\}$ в направлении Fe_2O_3 , $(\text{La}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ti}^{4+} - \text{O}^{2-})$ в направлении SrO и $(\text{Bi}^{3+} - \text{Sr}^{2+} - \text{Ca}^{2+} - \text{Cu}^{2+} - \text{O}^{2-})$ в направлении Bi_2O_3 : $\text{Li}_{12}\text{Fe}_{6n+9}(\text{PO}_4)_{4n+10}$, $\text{La}_2\text{Sr}_{15n-11}\text{Ti}_6\text{O}_{15n+4}$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_{8n-6}\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8n+2}$.

Анализ расположения членов одной и той же ГС в геометрических фигурах, которые представляют систему ионов ХЭ, выявил важную особенность: независимо от сложности системы гомологи $\text{XC}_{n=1}$ и $\text{XC}_{n>1}$ располагаются всегда на разных отрезках.

Конфликт интересов

Не указан.

Рецензия

Все статьи проходят рецензирование. Но рецензент или автор статьи предпочли не публиковать рецензию к этой статье в открытом доступе. Рецензия может быть предоставлена компетентным органам по запросу.

Conflict of Interest

None declared.

Review

All articles are peer-reviewed. But the reviewer or the author of the article chose not to publish a review of this article in the public domain. The review can be provided to the competent authorities upon request.

Список литературы / References

1. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия / В.С. Урусов. — Москва : Изд-во МГУ, 1987. — 275 с.
2. Ковба Л.М. Стехиометрия, дефекты в кристаллах и структурная гомология / Л.М. Ковба. — Москва : Изд-во МГУ, 1988. — 32 с.
3. Magneli A. Studies on molybdenum and molybdenum wolfram oxides of the homologous series $\text{Me}_n\text{O}_{3n-1}$ / A. Magneli, B. Blomberg, H.L. Kihlberg [et al.] // Acta Chemica Scandinavica. — 1955. — Vol. 9, № 8. — P. 1382–1390. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.09-1382.
4. Andersson S. Phase analysis studies on the titanium-oxygen system / S. Andersson, B. Collen, U. Kuylensstierna [et al.] // Acta Chemica Scandinavica. — 1957. — Vol. 11, № 10. — P. 1641–1652. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.11-1641.
5. Gado P. Wolfram tantalum and wolfram niobium oxides of the $\text{M}_n\text{O}_{3n-2}(\text{ReO}_3)$ series / P. Gado, B. Holmberg, A. Magneli // Acta Chemica Scandinavica. — 1965. — Vol. 19, № 8. — P. 2010–2011. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.19-2010.
6. Bykova T. Structural complexity of simple Fe_2O_3 at high pressures and temperatures / T. Bykova, L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaya [et al.] // Nature Communications. — 2016. — Vol. 7. — Art. 10661. DOI: 10.1038/ncomms10661.
7. Gay P.L. Vacancy ordering in anion deficient LaNiO_3 / P.L. Gay, C.N.R. Rao // Zeitschrift für Naturforschung A. — 1975. — Vol. 30, № 18. — P. 1092–1093.
8. Li Z. Epitaxial growth and electronic structure of Ruddlesden-Popper nickelates $(\text{La}_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}, n=1-5)$ / Z. Li, W. Guo, N.N. Zhang [et al.] // APL Materials. — 2020. — Vol. 8. — Art. 091112. DOI: 10.1063/5.0018934.
9. Drennan J. An electron microscope investigation of phases in the system Ln-Ni-O / J. Drennan, C.P. Tavares, B.C.H. Steele // Materials Research Bulletin. — 1982. — Vol. 17, № 5. — P. 621–631. DOI: 10.1016/0025-5408(82)90044-7.
10. Savchenko V.F. / V.F. Savchenko, I.Ya. Lyubkina // Inorganic Materials. — 1986. — Vol. 22, № 9. — P. 1483–1486.

11. Du M.-H. Zero-dimensional metal oxide Li_4TiO_4 / M.-H. Du // Journal of Materials Chemistry C. — 2019. — Vol. 7, № 19. — P. 5710–5715. DOI: 10.1039/C9TC001.
12. Klinkova L.A. On the existence of a homologous series of $\text{Ba}_m\text{Cu}_{m+n}\text{O}_y$ oxides with the cubic structure of the BaCuO_2 oxide / L.A. Klinkova, N.V. Barkovskii, V.K. Fedotov [et al.] // Physica C: Superconductivity. — 2010. — Vol. 470. — P. 206–212. DOI: 10.1016/j.physc.2010.09.013.
13. Ruddlesden S.N. The compound $\text{Sr}_3\text{Ti}_2\text{O}_7$ and its structure / S.N. Ruddlesden, P. Popper // Acta Crystallographica. — 1958. — Vol. 11, № 1. — P. 54–55. DOI: 10.1107/S0365110X58000128.
14. Harris D.C. Determination of $\text{Cu}^{3+}/\text{Cu}^{2+}$ ratio in the superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8-x}$ / D.C. Harris, T.A. Hewston // Journal of Solid State Chemistry. — 1987. — Vol. 69, № 1. — P. 182–185. DOI: 10.1016/0022-4596(87)90025-9.
15. Kaldis E. Superconductors in the $\text{Y}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_{6+n}\text{O}_{14+n}$ family thermodynamics, structure and physical characterization / E. Kaldis, J. Karpinski // European Journal of Solid State and Inorganic Chemistry. — 1990. — Vol. 27, № 1/2. — P. 143–190.
16. Strobel P. / P. Strobel, W. Korczak, Th. Fournier [et al.] // Physica C. — 1989. — Vol. 161, № 2. — P. 167–174.
17. Davies A.H. New layer structures in the La-Cu-O system / A.H. Davies, R.J.D. Tilley // Nature. — 1987. — Vol. 326, № 6116. — P. 859–861.
18. Parkin S.S.P. Model family of high-temperature superconductors: $\text{Tl}_m\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2(n+1)m}$ ($m = 1, 2$; $n = 1, 2, 3$) / S.S.P. Parkin, V.Y. Lee, A.I. Nazzari [et al.] // Physical Review B. — 1988. — № 38(10). — P. 6531–6537.
19. Parkin S.S.P. $\text{Tl}_1\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+3}$ ($n = 1, 2, 3$): a new class of crystal structures exhibiting volume superconductivity at up to ≈ 110 K / S.S.P. Parkin, V.Y. Lee, A.I. Nazzari [et al.] // Physical Review Letters. — 1988. — Vol. 61, № 10. — P. 750–753. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.750.
20. Gopinath C.S. Comparative photoemission studies of $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4}$ ($n = 1, 2, 3$) / C.S. Gopinath, S. Subramanian, M. Paranthaman [et al.] // Physical Review B. — 1993. — Vol. 48, № 21. — P. 15999–16005. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.15999.
21. Undalov Yu.K. Forecasting formulas for multinary chemical compounds: ternary systems; homologous series of compounds / Yu.K. Undalov // Russian Journal of Inorganic Chemistry. — 1998. — Vol. 43, № 9. — P. 1447–1450.
22. Ундалов Ю.К. Гомологические серии $(\text{Li}^+-\text{Ti}^{4+}-\text{O}^{2-})$, $(\text{Na}^+-\text{Ti}^{4+}-\text{O}^{2-})$, $(\text{K}^+-\text{V}^{5+}-\text{O}^{2-})$, $(\text{Ba}^{2+}-\text{Cu}^{2+}-\text{O}^{2-})$ и четырехкомпонентная система $\{\text{Li}^+-\text{Fe}^{2+}-\text{(PO}_4\text{)}^{3-}\}$ / Ю.К. Ундалов, Е.И. Теруков, Д.В. Агафонов [и др.] // Известия СПбГТИ(ТУ). — 2021. — № 59(84). — С. 26–36. DOI: 10.36807/1998-9849-2021-59-85-26-36.
23. Ундалов Ю.К. Гомологические серии химических соединений в трехкомпонентных системах $(\text{A}^{a+}-\text{B}^{b+}-\text{C}^{c-})$ и $(\text{Zn}^{2+}-\text{Ge}^{4+}-\text{P}^{3-})$ в обобщенном виде / Ю.К. Ундалов // CIFRA. Химия. — 2024. — № 1(1). DOI: 10.18454/CHEM.2024.1.1.
24. Ундалов Ю.К. Гомологические серии химических соединений системы $(\text{Li}^+-\text{Ni}^{3+}-\text{Mn}^{3+}-\text{O}^{2-})$ / Ю.К. Ундалов, Е.И. Теруков, Д.В. Агафонов [и др.] // Известия СПбГТИ(ТУ). — 2022. — № 60(86). — С. 11–17. DOI: 10.36807/1998-9849-2022-60-86-11-17.
25. Undalov Yu.K. Calculation of formulas of homologous series of chemical compounds (in generalized form): four-component systems $(\text{A}^{a+}-\text{B}^{b+}-\text{D}^{d+}-\text{C}^{c-})$ and $(\text{La}^{3+}-\text{Ni}^{2+}-\text{Ni}^{3+}-\text{O}^{2-})$ / Yu.K. Undalov // Practice Oriented Science: UAE-RUSSIA-INDIA. Materials of International University Scientific Forum. September 19, Pt. 2. — 2023. — P. 93–109. DOI: 10.34660/inf.2023.32.28.229.
26. Undalov Yu.K. Calculation of formulas of homologous series of chemical compounds (in generalized form): five-component systems $(\text{A}^{a+}-\text{F}^{f+}-[\text{B}_{rd}\text{D}_{wb}]^{(r+w)bd+}-\text{C}^{c-})$ and $(\text{Li}^+-\text{Fe}^{4+}-[\text{Sr}_3\text{La}_2]^{12+}-\text{O}^{2-})$ / Yu.K. Undalov // Practice Oriented Science: UAE-RUSSIA-INDIA. Materials of International University Scientific Forum. September 19, Pt. 2. — 2023. — P. 110–125. DOI: 10.34660/inf.2023.53.27.230.
27. Ундалов Ю.К. Гомологические серии химических соединений в системах $(\text{A}^{a+}-\text{F}^{f+}-[\text{B}_{rd}\text{D}_{wb}]^{(r+w)bd+}-\text{C}^{c-})$ и $(\text{Bi}^{3+}-\text{Cu}^{2+}-[\text{SrCa}]^{4+}-\text{O}^{2-})$ в обобщенном виде / Ю.К. Ундалов // CIFRA. Химия. — 2024. — № 1(1). DOI: 10.18454/CHEM.2024.1.3.
28. Undalov Yu.K. On the question of the direction of development of homologous series of chemical compounds / Yu.K. Undalov // Practice Oriented Science: UAE-RUSSIA-INDIA. Materials of International University Scientific Forum. December 30, 2024. Pt. 1. — P. 110–125.

Список литературы на английском языке / References in English

1. Urusov V.S. Teoreticheskaya kristalloghiya [Theoretical Crystal Chemistry] / V.S. Urusov. — Moscow : Moscow State University Press, 1987. — 275 p. [in Russian]
2. Kovba L.M. Stekhiometriya, defekty v kristallakh i strukturnaya gomologiya [Stoichiometry, Crystal Defects and Structural Homology] / L.M. Kovba. — Moscow : Moscow State University Press, 1988. — 32 p. [in Russian]
3. Magneli A. Studies on molybdenum and molybdenum wolfram oxides of the homologous series $\text{Me}_n\text{O}_{3n-1}$ / A. Magneli, B. Blomberg, H.L. Kihlberg [et al.] // Acta Chemica Scandinavica. — 1955. — Vol. 9, № 8. — P. 1382–1390. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.09-1382.
4. Andersson S. Phase analysis studies on the titanium-oxygen system / S. Andersson, B. Collen, U. Kuylenstierna [et al.] // Acta Chemica Scandinavica. — 1957. — Vol. 11, № 10. — P. 1641–1652. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.11-1641.
5. Gado P. Wolfram tantalum and wolfram niobium oxides of the $\text{M}_n\text{O}_{3n-2}(\text{ReO}_3)$ series / P. Gado, B. Holmberg, A. Magneli // Acta Chemica Scandinavica. — 1965. — Vol. 19, № 8. — P. 2010–2011. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.19-2010.
6. Bykova T. Structural complexity of simple Fe_2O_3 at high pressures and temperatures / T. Bykova, L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaya [et al.] // Nature Communications. — 2016. — Vol. 7. — Art. 10661. DOI: 10.1038/ncomms10661.
7. Gay P.L. Vacancy ordering in anion deficient LaNiO_3 / P.L. Gay, C.N.R. Rao // Zeitschrift für Naturforschung A. — 1975. — Vol. 30, № 18. — P. 1092–1093.

8. Li Z. Epitaxial growth and electronic structure of Ruddlesden-Popper nickelates ($\text{La}_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{3n+1}$, $n=1-5$) / Z. Li, W. Guo, N.N. Zhang [et al.] // *APL Materials*. — 2020. — Vol. 8. — Art. 091112. DOI: 10.1063/5.0018934.
9. Drennan J. An electron microscope investigation of phases in the system Ln-Ni-O / J. Drennan, C.P. Tavares, B.C.H. Steele // *Materials Research Bulletin*. — 1982. — Vol. 17, № 5. — P. 621–631. DOI: 10.1016/0025-5408(82)90044-7.
10. Savchenko V.F. / V.F. Savchenko, I.Ya. Lyubkina // *Inorganic Materials*. — 1986. — Vol. 22, № 9. — P. 1483–1486.
11. Du M.-H. Zero-dimensional metal oxide Li_4TiO_4 / M.-H. Du // *Journal of Materials Chemistry C*. — 2019. — Vol. 7, № 19. — P. 5710–5715. DOI: 10.1039/C9TC001.
12. Klinkova L.A. On the existence of a homologous series of $\text{BaCu}_{m+n}\text{O}_y$ oxides with the cubic structure of the BaCuO_2 oxide / L.A. Klinkova, N.V. Barkovskii, V.K. Fedotov [et al.] // *Physica C: Superconductivity*. — 2010. — Vol. 470. — P. 206–212. DOI: 10.1016/j.physc.2010.09.013.
13. Ruddlesden S.N. The compound $\text{Sr}_3\text{Ti}_2\text{O}_7$ and its structure / S.N. Ruddlesden, P. Popper // *Acta Crystallographica*. — 1958. — Vol. 11, № 1. — P. 54–55. DOI: 10.1107/S0365110X58000128.
14. Harris D.C. Determination of $\text{Cu}^{3+}/\text{Cu}^{2+}$ ratio in the superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8-x}$ / D.C. Harris, T.A. Hewston // *Journal of Solid State Chemistry*. — 1987. — Vol. 69, № 1. — P. 182–185. DOI: 10.1016/0022-4596(87)90025-9.
15. Kaldis E. Superconductors in the $\text{Y}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_{6+n}\text{O}_{14+n}$ family thermodynamics, structure and physical characterization / E. Kaldis, J. Karpinski // *European Journal of Solid State and Inorganic Chemistry*. — 1990. — Vol. 27, № 1/2. — P. 143–190.
16. Strobel P. / P. Strobel, W. Korczak, Th. Fournier [et al.] // *Physica C*. — 1989. — Vol. 161, № 2. — P. 167–174.
17. Davies A.H. New layer structures in the La-Cu-O system / A.H. Davies, R.J.D. Tilley // *Nature*. — 1987. — Vol. 326, № 6116. — P. 859–861.
18. Parkin S.S.P. Model family of high-temperature superconductors: $\text{Tl}_m\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2(n+1)m}$ ($m = 1, 2$; $n = 1, 2, 3$) / S.S.P. Parkin, V.Y. Lee, A.I. Nazzari [et al.] // *Physical Review B*. — 1988. — № 38(10). — P. 6531–6537.
19. Parkin S.S.P. $\text{Tl}_1\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+3}$ ($n = 1, 2, 3$): a new class of crystal structures exhibiting volume superconductivity at up to ≈ 110 K / S.S.P. Parkin, V.Y. Lee, A.I. Nazzari [et al.] // *Physical Review Letters*. — 1988. — Vol. 61, № 10. — P. 750–753. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.750.
20. Gopinath C.S. Comparative photoemission studies of $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4}$ ($n = 1, 2, 3$) / C.S. Gopinath, S. Subramanian, M. Paranthaman [et al.] // *Physical Review B*. — 1993. — Vol. 48, № 21. — P. 15999–16005. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.15999.
21. Undalov Yu.K. Forecasting formulas for multinary chemical compounds: ternary systems; homologous series of compounds / Yu.K. Undalov // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. — 1998. — Vol. 43, № 9. — P. 1447–1450.
22. Undalov Yu.K. Gomologicheskie serii ($\text{Li}^+-\text{Ti}^{4+}-\text{O}^{2-}$), ($\text{Na}^+-\text{Ti}^{4+}-\text{O}^{2-}$), ($\text{K}^+-\text{V}^{5+}-\text{O}^{2-}$), ($\text{Ba}^{2+}-\text{Cu}^{2+}-\text{O}^{2-}$) i chetyrehkomponentnaya sistema $\{\text{Li}^+-\text{Fe}^{2+}-(\text{PO}_4)^{3-}\}$ [Homologous series ($\text{Li}^+-\text{Ti}^{4+}-\text{O}^{2-}$), ($\text{Na}^+-\text{Ti}^{4+}-\text{O}^{2-}$), ($\text{K}^+-\text{V}^{5+}-\text{O}^{2-}$), ($\text{Ba}^{2+}-\text{Cu}^{2+}-\text{O}^{2-}$) and four-component system $\{\text{Li}^+-\text{Fe}^{2+}-(\text{PO}_4)^{3-}\}$] / Yu.K. Undalov, E.I. Terukov, D.V. Agafonov [et al.] // *Izvestiya SPbGTI(TU)* [Proceedings of St. Petersburg State Institute of Technology (Technical University)]. — 2021. — № 59(84). — P. 26–36. DOI: 10.36807/1998-9849-2021-59-85-26-36. [in Russian]
23. Undalov Yu.K. Gomologicheskie serii khimicheskikh soedineniy v trekhkomponentnykh sistemakh ($\text{A}^{a+}-\text{B}^{b+}-\text{C}^{c-}$) i ($\text{Zn}^{2+}-\text{Ge}^{4+}-\text{P}^{3-}$) v obobshchennom vide [Homologous series of chemical compounds in three-component systems ($\text{A}^{a+}-\text{B}^{b+}-\text{C}^{c-}$) and ($\text{Zn}^{2+}-\text{Ge}^{4+}-\text{P}^{3-}$) in generalized form] / Yu.K. Undalov // *CIFRA. Khimiya* [CIFRA. Chemistry]. — 2024. — № 1(1). DOI: 10.18454/CHEM.2024.1.1. [in Russian]
24. Undalov Yu.K. Gomologicheskie serii khimicheskikh soedineniy sistemy ($\text{Li}^+-\text{Ni}^{3+}-\text{Mn}^{3+}-\text{O}^{2-}$) [Homologous series of chemical compounds in the system ($\text{Li}^+-\text{Ni}^{3+}-\text{Mn}^{3+}-\text{O}^{2-}$)] / Yu.K. Undalov, E.I. Terukov, D.V. Agafonov [et al.] // *Izvestiya SPbGTI(TU)* [Proceedings of St. Petersburg State Institute of Technology (Technical University)]. — 2022. — № 60(86). — P. 11–17. DOI: 10.36807/1998-9849-2022-60-86-11-17. [in Russian]
25. Undalov Yu.K. Calculation of formulas of homologous series of chemical compounds (in generalized form): four-component systems ($\text{A}^{a+}-\text{B}^{b+}-\text{D}^{d+}-\text{C}^{c-}$) and ($\text{La}^{3+}-\text{Ni}^{2+}-\text{Ni}^{3+}-\text{O}^{2-}$) / Yu.K. Undalov // *Practice Oriented Science: UAE-RUSSIA-INDIA. Materials of International University Scientific Forum*. September 19, Pt. 2. — 2023. — P. 93–109. DOI: 10.34660/inf.2023.32.28.229.
26. Undalov Yu.K. Calculation of formulas of homologous series of chemical compounds (in generalized form): five-component systems ($\text{A}^{a+}-\text{F}^{f+}-[\text{B}_{rd}\text{D}_{wb}]^{(r+w)bd+}-\text{C}^{c-}$) and ($\text{Li}^+-\text{Fe}^{4+}-[\text{Sr}_3\text{La}_2]^{12+}-\text{O}^{2-}$) / Yu.K. Undalov // *Practice Oriented Science: UAE-RUSSIA-INDIA. Materials of International University Scientific Forum*. September 19, Pt. 2. — 2023. — P. 110–125. DOI: 10.34660/inf.2023.53.27.230.
27. Undalov Yu.K. Gomologicheskie serii khimicheskikh soedineniy v sistemakh ($\text{A}^{a+}-\text{F}^{f+}-[\text{B}_{rd}\text{D}_{wb}]^{(r+w)bd+}-\text{C}^{c-}$) i ($\text{Bi}^{3+}-\text{Cu}^{2+}-[\text{SrCa}]^{4+}-\text{O}^{2-}$) v obobshchennom vide [Homologous series of chemical compounds in systems ($\text{A}^{a+}-\text{F}^{f+}-[\text{B}_{rd}\text{D}_{wb}]^{(r+w)bd+}-\text{C}^{c-}$) and ($\text{Bi}^{3+}-\text{Cu}^{2+}-[\text{SrCa}]^{4+}-\text{O}^{2-}$) in generalized form] / Yu.K. Undalov // *CIFRA. Khimiya* [CIFRA. Chemistry]. — 2024. — № 1(1). DOI: 10.18454/CHEM.2024.1.3. [in Russian]
28. Undalov Yu.K. On the question of the direction of development of homologous series of chemical compounds / Yu.K. Undalov // *Practice Oriented Science: UAE-RUSSIA-INDIA. Materials of International University Scientific Forum*. December 30, 2024, Pt. 1. — P. 110–125.