

Кристалл	g_{\parallel}	g_{\perp}	МГц								γ , град
			a_{\parallel}	a_{\perp}	A_{\parallel}	A_{\perp}	A_x	A_y	A_z		
CdF_2	1.9221 ± 0.0002	2.5314 ± 0.0005	12 ± 1	30 ± 3	719 ± 5	40 ± 5	9 ± 3	88 ± 6	10 ± 4	52 ± 2	
CaF_2	1.9071 ± 0.0002	2.5840 ± 0.0005	0 ± 2	28 ± 3	702 ± 5	55 ± 5	8 ± 3	87 ± 4	9 ± 4	50 ± 2	
SrF_2	1.9235 ± 0.0002	2.5780 ± 0.0005	21 ± 1	33 ± 3	692 ± 5	32 ± 5	8 ± 3	85 ± 4	8 ± 4	47 ± 2	

Примечание. A_{\parallel} , A_{\perp} — компоненты тензоров $A^{(I-2)}$; A_x , A_y , A_z — компоненты диагонализированных тензоров $A^{(3-3)}$.

гранник в виде искаженного по оси C_3 куба из восьми ионов F^- . При этом орбитальная функция основного состояния магнитного электрона комплекса $[\text{AgF}_8]^{6-}$ состоит главным образом из $|3z^2-r^2\rangle$ -функции центрального иона (система координат согласно рис. 1) с некоторой примесью s - и p -функций лигандных ионов. Причиной искажения, по-видимому, является эффект Яна—Теллера.

Л и т е р а т у р а

[1] Заринов М. М., Уланов В. А., Фалин М. Л. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 7. С. 2193—2195.

Казанский физико-технический институт КФ АН СССР
Казань

Поступило в Редакцию
11 августа 1988 г.

УДК 548.4

Физика твердого тела. том 31, в. 2, 1989
Solid State Physics. vol. 31, № 2, 1989

О ФОРМЕ КУЛОНОВСКОГО ПОТЕНЦИАЛА, ИСПОЛЬЗУЕМОГО ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ НА ЭВМ ДЕФЕКТОВ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТАТИКИ

А. Н. Вараксин

Одним из распространенных методов моделирования на ЭВМ энергетики образования, миграции и других свойств дефектов в кристаллах является метод молекулярной статки (называемый иначе методом атом-атомных потенциалов, методом статки решетки и т. п.). В этом методе энергия кристалла с дефектом выражается суммой энергий парных взаимодействий (парных потенциалов) частиц, составляющих кристалл. Для ионных кристаллов энергия парного взаимодействия конструируется обычно из короткодействующей части V_{sh} (в виде, например, Борна—Майера) и кулоновской составляющей

$$V_k(r) = Z_i Z_j / r, \quad (1)$$

где Z_i — заряды ионов, r — расстояние между ними.

Потенциал $V(r) = V_k(r) + V_{sh}(r)$, используемый в расчетах методом молекулярной статки, должен удовлетворять ряду требований [1], основные из которых — равновесность и стабильность (идеальный кристалл, в котором ионы взаимодействия по закону $V(r)$, должен обладать минимальной энергией для заданного значения параметра решетки и быть устойчивым по отношению к изменениям координат ионов). На

сегодняшний день опубликованы данные о значительном количестве потенциалов $V(r)$, обладающих всеми необходимыми свойствами (см. библиографию [1]).

В последнее время стали появляться работы [2-5], в которых кулоновская составляющая энергии представляется в виде

$$V_k(r) = Z_i Z_j / \epsilon r, \quad (2)$$

где ϵ — нормировочный коэффициент. По нашему мнению, это очевидная ошибка.

Использование неправильной формы для $V_k(r)$ приводит к неверным результатам, среди которых отметим следующие.

1. Известно, что при образовании вакансии в ионных кристаллах ближайšie к вакансии ионы смещаются наружу (от вакансии). Использование $V_k(2)$ при $\epsilon \sim 4$ приводит к обратному эффекту [5].

2. В расчете [2] при введении примеси замещения Γ^- в кристалле KCl были обнаружены сближенные пары типа $(\Gamma^- - \text{Cl}^-)$ и $(\text{Cl}^- - \text{Cl}^-)$. Появление в [2] сближенных пар является следствием потери устойчивости кристалла (кулоновская часть V_k была уменьшена в ϵ раз, а короткодействующая часть V_{sh} осталась без изменений). Выполненный нами аналогичный расчет с $V_k(1)$ по программе [6] показал, что никаких сближенных пар анионов не наблюдается.

3. Энергии образования E_{int} междоузельных ионов, вычисленные с $V_k(2)$, оказываются положительными (например, для KCl при $\epsilon = 4.49 E_{int}^+ = +2.08$, $E_{int}^- = +2.32$ эВ [7]), в то время как расчеты с потенциалом (1) дают отрицательные значения: для KCl $E_{int}^+ = -1.47$, $E_{int}^- = -0.58$ эВ [8].

4. Следствием неверного расчета E_{int} является неверный (с точки зрения расчетов методом молекулярной статистики) вывод в том, что в ионных кристаллах ионам энергетически выгоднее занимать вакансию противоположного знака, чем междоузлие [3, 4].

Перечисленные результаты убедительно показывают невозможность введения нормировки $V_k(r)$ в виде (2) без достаточных оснований. Если такие основания имеются (например, не чисто ионный тип связи), необходимо обязательное согласование кулоновской и короткодействующей частей энергии парного взаимодействия ионов для сохранения устойчивости и равновесности кристалла.

Л и т е р а т у р а

- [1] Stoneham A. M. // Physica. 1985. V. 131B. N 1. P. 69—73.
- [2] Корепанов В. И., Лисцын В. М., Стрех В. В. и др. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 3052—3056.
- [3] Анненков Ю. М., Оловянишникова А. М. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 3099—3101.
- [4] Анненков Ю. М., Оловянишникова А. М., Притулов А. М. // ФТТ. 1986. т. 28. № 5. С. 1511—1514.
- [5] Оловянишникова А. М., Анненков Ю. М. // Деп. ВИНТИ. 1984. № 4973-84. Деп. 25 с.
- [6] Варакин А. Н., Колмогоров Ю. Н. // Деп. ВИНТИ. 1985. № 1878-85. Деп. 35 с.
- [7] Анненков Ю. М., Оловянишникова А. М. // Изв. вузов. Физика. 1984. № 6. С. 107—108.
- [8] Rowell D. K., Sangster M. J. L. // J. Phys. C. 1981. V. 14. N 21. P. 2909—2921.

Уральский политехнический
институт им. С. М. Кирова
Свердловск

Поступило в Редакцию
24 июня 1987 г.
В окончательной редакции
19 августа 1988 г.