

УДК 538.931—405; 548.4

© 1992

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕЖДУ ДЕФЕКТАМИ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ СЛАБОЛЕГИРОВАННЫХ ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ

А. Н. Вараксин

Методом Монте-Карло проведены расчеты электропроводности щелочно-галлоидных кристаллов с малой концентрацией двухвалентных катионов замещения (слаболегированные ЩГК). На основе этих расчетов проанализирована электропроводность слаболегированных ЩГК в моделях ассоциации без блокирования и с блокированием. Показано, что данные модели описывают два предельных случая электропроводности реальных ЩГК. Выведено соотношение для определения энергии взаимодействия катионной вакансии с двухвалентным катионом замещения из данных по электропроводности ЩГК в области примесной проводимости и в области комплексообразования.

Щелочно-галлоидные кристаллы (ЩГК), будучи выращенными без специальных добавок, содержат двухвалентные ионы замещения в концентрации $C_M = 10^{-3} \div 10^{-6}$. Кристаллы такого типа будем называть слаболегированными. Двухвалентные примеси даже в столь малых концентрациях оказывают существенное влияние на электропроводность кристаллов. Так, экспериментальные исследования электропроводности (диффузии) слаболегированных ЩГК позволили выявить [1] как минимум три характерные температурные области (рис. 1): область I, в которой энергия активации электропроводности E_σ равна

$$E_\sigma(\text{I}) = E_M + \frac{1}{2} E_S \quad (1)$$

(область собственной проводимости); область II, в которой

$$E_\sigma(\text{II}) = E_M \quad (2)$$

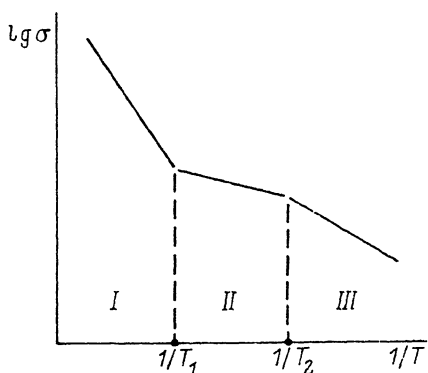
(область примесной проводимости); область III — область комплексообразования, когда

$$E_\sigma(\text{III}) = E_M + f(E_{\text{int}}). \quad (3)$$

В формулах (1)—(3) E_M — энергия миграции катионных вакансий (анионные вакансии дают вклад только вблизи температуры плавления и здесь не рассматриваются), E_S — энергия образования пары Шоттки, E_{int} — энергия взаимодействия (связи) катионной вакансии с двухвалентными катионами замещения Me^{2+} .

Концентрация замещения определяет температуру T_1 перехода от области I к области II, а энергия взаимодействия E_{int} между вакансией и двухвалентной примесью определяет энергию активации электропроводности E_σ в области III — формула (3). В области III обычно предполагается [1, 2], что $f(E_{\text{int}})$ в формуле (3) равна

Рис. 1. Характерная температурная зависимость электропроводности слаболегированного ЦГК [1].



$$f(E_{\text{int}}) = \frac{1}{2} E_{\text{int}} \quad (4)$$

Следует отметить, что строгого обоснования формулы (4) не существует. Между тем она широко используется для экспериментального определения энергии взаимодействия катионной вакансии с двухвалентным катионом замещения по наклону графика зависимости $\lg(\Sigma T) - 1/T$ в области III и является принципиально важной [1-3].

Цель настоящей работы — построение микроскопической модели взаимодействия катионных вакансий с двухвалентной примесью Me^{2+} и определение соотношения для энергии активации электропроводности слаболегированных ЦГК в пределе $C_M \rightarrow 0$.

Рассмотрим вначале электропроводность кристалла с ловушками в нескольких простых ситуациях, моделирующих слаболегированный ЦГК.

1. Электропроводность слаболегированного ЦГК в модели ассоциации без блокирования

Пусть имеется ЦГК с малой концентрацией двухвалентных примесей замещения. Будем считать, что замещения Me^{2+} распределены по кристаллу случайным образом, не взаимодействуют друг с другом (малая концентрация Me^{2+}) и неподвижны (подвижность Me^{2+} много меньше подвижности катионных вакансий V_K [4]). В силу условия электронейтральности в кристалле имеются катионные вакансии с концентрацией $C_V = C_M$ (рассматриваются температурные области II и III, где концентрация термических вакансий много меньше C_M). Катионные вакансии блуждают по кристаллу и при встрече с примесью образуют комплекс ($V_K - \text{Me}^{2+}$). Вероятность развала комплекса считается равной

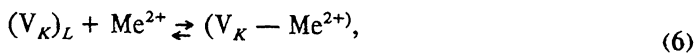
$$W_p = \exp(-E_{\text{int}} / kT), \quad (5)$$

где E_{int} — энергия взаимодействия (энергия связи комплекса). Предполагается, что одна примесь Me^{2+} может захватить любое количество вакансий (модель без блокирования), причем энергия связи любой вакансии с Me^{2+} будет одинаковой вне зависимости от количества захваченных вакансий.

Электропроводность σ кристалла в такой модельной ситуации определяется концентрацией C_{VL} свободных (не захваченных примесью Me^{2+}) вакансий и их подвижностью μ

$$\sigma \sim C_{VL}\mu.$$

Для определения концентрации свободных вакансий C_{VL} напомним упрощенное квазихимическое уравнение процесса ассоциации V_K и Me^{2+} и диссоциации комплекса ($V_K - \text{Me}^{2+}$) в виде



откуда по закону действующих масс [2]

$$\frac{C_a}{C_{VL}C_M} = K_a(T), \quad (7)$$

где $(V_K)_L$ — свободная вакансия, C_a — концентрация комплексов $(V_K - Me^{2+})$, C_M — концентрация примесей Me^{2+} , $K_a(T)$ — константа ассоциации

$$K_a(T) = K_a^0 \exp(E_{int}/kT), \quad (8)$$

где K_a^0 — предэкспоненциальный множитель, E_{int} — энергия взаимодействия из формулы (5). Отсюда при низких температурах, когда $C_a \approx C_M$ (степень ассоциации V_K и Me^{2+} близка к единице), получаем

$$C_{VL}(T) = C_{VL}^0 \exp(-E_{VL}/kT), \quad (9)$$

где

$$E_{VL} = E_{int}, \quad (10)$$

т. е. концентрация свободных вакансий экспоненциально зависит от температуры с энергией активации, равной E_{int} .

Если предположить также, что подвижность свободных вакансий $\mu(T) \sim \exp(-E_M/kT)$, то в этой модели для области III

$$E_\sigma = E_M + E_{int}. \quad (11)$$

Результаты, получаемые с помощью простейших представлений (6)–(8), нуждаются в количественной проверке методами моделирования на ЭВМ. Для расчета электропроводности в модели ассоциации без блокирования мы использовали метод Монте-Карло (МК) и ЭВМ-программу MСARLO [5]. Моделирование производилось на кристаллите, содержащем 10 976 узлов в катионной подрешетке кристалла типа NaCl, а также 10 примесей замещения Me^{2+} и 10 катионных вакансий. Вакансии, находящиеся вдали от примесей Me^{2+} , на каждом МК-шаге с вероятностью $W_M = 1$ совершали скачок в одном из 12 возможных направлений (направление скачка задавалось датчиком случайных чисел). При попадании вакансии в первую координационную сферу Me^{2+} образовывался комплекс, развал которого осуществлялся с вероятностью W_p (5). В процессе существования комплекса вакансия могла совершать скачки вокруг Me^{2+} (вероятность такого скачка равнялась единице). Также вакансиям не ррзешалось сближаться на расстояние ближайших соседей.

В данной модели методом Монте-Карло для ряда значений энергии взаимодействия «примесь—вакансия»

$$\begin{aligned} E_{int} &= 0.1 \text{ эВ,} \\ E_{int} &= 0.2 \text{ эВ,} \\ E_{int} &= 0.6 \text{ эВ} \end{aligned} \quad (12)$$

производился расчет температурной зависимости концентрации комплексов C_a , концентрации свободных вакансий C_{VL} и коэффициента диффузии $D(T)$ или коэффициента электропроводности $\sigma(T)$; при расчете $D(T)$ по формуле $\langle R^2(t) \rangle = 6D(T)t$ полагалось $a_0 = 1$ и $E_M = 0$, $R(t)$ — смещение вакансии за время t . Результаты расчетов для $E_{int} = 0.1$ эВ приведены на рис. 2. Для остальных значений E_{int} из набора (12) графики зависимостей $C_a(T)$, $C_{VL}(T)$ и $D(T)$ в координатах $(\lg A - 1/T)$ при различных E_{int} являются подобными, а в координатах $(\lg A - E_{int}/T)$ совпадают.

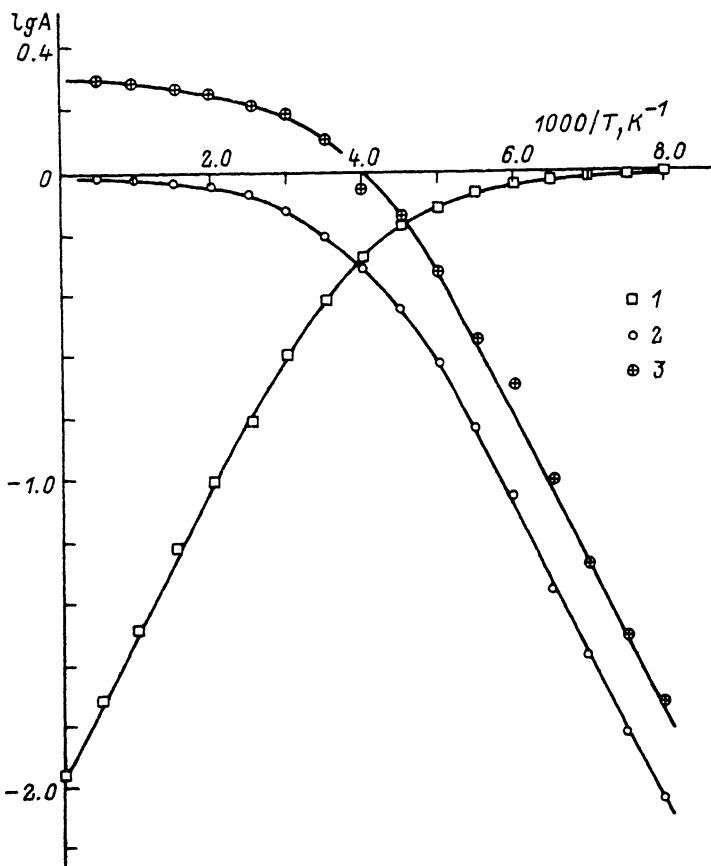


Рис. 2. Температурная зависимость концентрации комплексов, концентрации свободных вакансий и коэффициента диффузии в модели ассоциации без блокирования (расчеты методом Монте-Карло при $C_M = 9.11 \cdot 10^{-4}$).

1 — концентрация C_a комплексов ($V_K - Me^{2+}$), 2 — концентрация C_{VL} свободных вакансий, 3 — коэффициент диффузии.

Анализ графиков зависимостей C_a , C_{VL} и D от температуры позволяет заключить следующее.

1) При низких температурах (при температурах области III; рис. 1) концентрация свободных вакансий описывается формулой типа (9), где энергия E_{VL} составляет примерно 96% от E_{int} (12), (5).

2) Зависимость коэффициента диффузии от температуры $D(T)$ во всем интервале температур в точности повторяет зависимость от T концентрации свободных вакансий $C_{VL}(T)$. Это означает, что в области низких T энергия активации электропроводности (диффузии) $E_\sigma = E_M + E_{VL}$ (ср. с (11)); подобные графики $C_{VL}(T)$ и $D(T)$ при различных E_{int} означает, что μ не зависит от E_{int} .

3) В области высоких температур концентрация комплексов ($V_K - Me^{2+}$), которая, по определению, равна

$$C_a = C_M - C_{VL}, \quad (13)$$

также подчиняется закону Аррениуса

$$C_a = C_a^0 \exp(E_a/kT), \quad (14)$$

причем энергия активации

$$E_a = E_{VL}, \quad (15)$$

а предэкспоненциальный множитель (вероятность встречи V_K и Me^{2+} при случайных блужданиях вакансий)

$$C_a^0 = nC_M, \quad (16)$$

где $n = 12$ — число ближайших соседей Me^{2+} в катионной подрешетке, C_M — концентрация примесей Me^{2+} (для рассмотренного случая $C_M = 10/10976 = 9.11 \cdot 10^{-4}$).

Отклонение энергий E_{VL} и E_a от энергии взаимодействия E_{int} наводит на мысль о возможной зависимости этих энергий от размера кристалла. Речь идет, конечно, не о поверхностных эффектах (использовались периодические граничные условия), а о зависимости энергий от концентрации примесей C_M . Для проверки мы провели расчеты на кристаллите, содержащем 864 и 4000 узлов в катионной подрешетке на 10 примесей и 10 вакансий. Результаты расчетов приведены в табл. 1 и на рис. 3. Данные табл. 1 показывают, что при $C_M \rightarrow 0$ энергии E_{VL}

Таблица 1
Зависимость энергии E_{VL} от концентрации примесей C_M

Концентрация примесей C_M	(E_{VL}/E_{int}) 100, %
$1.16 \cdot 10^{-2}$	82
$2.50 \cdot 10^{-3}$	92
$9.11 \cdot 10^{-4}$	96

и E_a стремятся к E_{int} в согласии с (6)—(10). Однако в отличие от расчетов, основанных на законе действующих масс (7), монте-карловские расчеты показывают, что при отклонении от бесконечно разбавленного раствора ($C_M \rightarrow 0$) энергии E_{VL} и E_a становятся функциями C_M (E_{VL} и E_a всегда меньше E_{int} и уменьшаются с увеличением C_M).

Из результатов, следующих из рис. 3, отметим, что 1) формула (16) количественно подтверждается для всех C_M ; 2) для всех значений C_M прямолинейный (аррениусовский) участок зависимости C_{VL} от температуры наблюдается при концентрации свободных вакансий C_{VL} , меньшей 25% (логарифм C_{VL} меньше — 0.6), т. е. при концентрации комплексов C_a , большей 75% C_M .

2. Модель ассоциации с блокированием

Модель ассоциации без блокирования описывает предельный случай одинаковой энергии связи произвольного количества вакансий с одной примесью замещения. Другой предельный случай — модель ассоциации с блокированием — соответствует случаю, когда одна примесь замещения может связывать только одну катионную вакансию (вакансия блокирует примесь замещения), т. е. энергия взаимодействия второй, третьей и т. д. вакансии с комплексом ($V_K - Me^{2+}$) полагается равной нулю. Именно этой моделью пользуются обычно при обработке экспериментальных данных по электропроводности слабелегированных ШГК и при определении энергии взаимодействия E_{int} вакансии с двухвалентными примесями замещения.

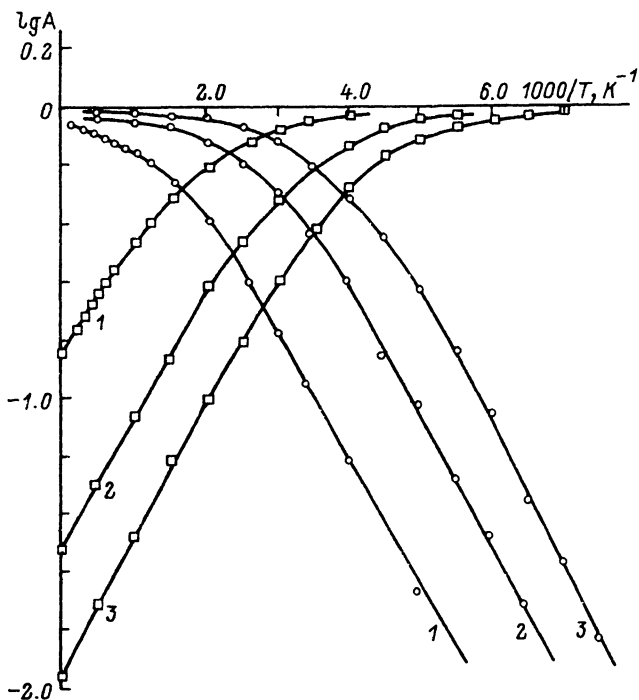
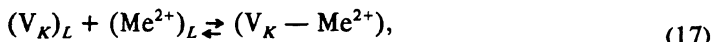


Рис. 3. Температурные зависимости $C_a(T)$ и $C_{VL}(T)$ при различных концентрациях примесей Me^{2+} в модели ассоциации без блокирования.
 $C_M = 1.16 \cdot 10^{-2}$ (1), $2.50 \cdot 10^{-3}$ (2), $9.11 \cdot 10^{-4}$ (3).

Соответствующее квазихимическое уравнение ассоциации—диссоциации имеет вид



где $(V_K)_L$ и $(Me^{2+})_L$ — соответственно свободная катионная вакансия и свободная примесь замещения. По закону действующих масс

$$\frac{C_a}{C_{VL}C_{ML}} = K_a(T), \quad (18)$$

где C_{ML} — концентрация свободных (не связанных с вакансией) примесей замещения.

Поскольку

$$C_{ML} = C_M - C_a = C_{VL}, \quad (19)$$

из (18) при $C_a \approx \text{const}$ (низкие температуры) следует формула (9) при

$$E_{VL} = \frac{1}{2} E_{int}, \quad (20)$$

т. е. результат (4).

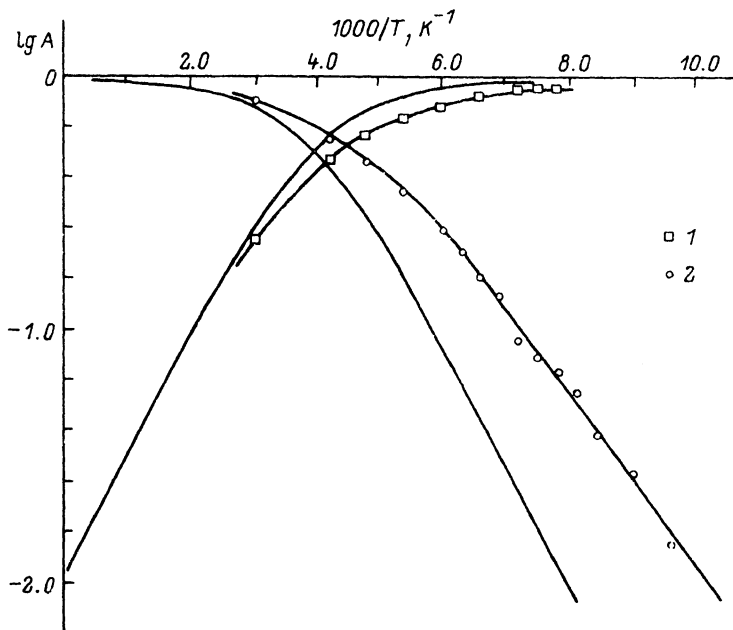


Рис. 4. Сравнение результатов расчета в моделях ассоциации с блокированием и без блокирования ($C_M = 9.11 \cdot 10^{-4}$).

Сплошные линии — модель ассоциации без блокирования (рис. 2); точки 1 и 2 — концентрации $C_a(T)$ и $C_{VL}(T)$ соответственно в модели ассоциации с блокированием.

Как и ранее, проведем проверку выводов, основанных на законе действующих масс, с помощью компьютерных расчетов по микроскопической модели ассоциации с блокированием.

Результаты расчетов C_{VL} , C_a и D методом Монте-Карло для трех значений энергии взаимодействия E_{int} (12) и двух значений концентрации примесей замещения ($C_M = 1.16 \cdot 10^{-2}$ и $C_M = 9.11 \cdot 10^{-4}$) позволяют сделать следующие выводы.

1) При высоких температурах и низкой концентрации примесей замещения ($C_M < 10^{-3}$) концентрация комплексов C_a описывается формулами (14)—(16), где $E_a = E_{int}$ (рис. 4; т. е. тот же результат, что и в модели ассоциации без блокирования); при высоких концентрациях примесей замещения $C_M > 10^{-2}$ наблюдается отклонение от соотношения (16), что указывает на наличие в модели ассоциации с блокированием более сильных концентрационных эффектов, чем в модели ассоциации без блокирования. С другой стороны, выполнение соотношения (16) для $C_M < 10^{-3}$ в модели ассоциации с блокированием показывает, что при $C_M < 10^{-3}$ концентрационными эффектами можно пренебречь.

2) Зависимости $C_{VL}(T)$ и $D(T)$ являются совершенно подобными; энергия E_{VL} (и равная ей E_D при $E_M = 0$) для минимальной из рассмотренных C_M составляет порядка 65% от E_{int}

$$E_{VL} = 0.65E_{int} \quad (21)$$

Таким образом, компьютерная модель не подтверждает результат (20) теории квазихимических реакций; вместо (20) для данного предельного случая (модель ассоциации с блокированием) вводится ограничение снизу (21).

3. Взаимодействие катионной вакансии с двухвалентным катионом замещения в щелочно-галогидных кристаллах

Проанализируем теперь характер взаимодействия двухвалентных катионов замещения Me^{2+} и катионных вакансий V_K в реальном ЦГК. Эффективный (на фоне идеальной решетки) заряд двухвалентной примеси равен $+1$, а катионной вакансии -1 ; следовательно, пара дефектов V_K и Me^{2+} взаимодействует в кристалле аналогично двум зарядам в диэлектрике. Детальные расчеты энергий взаимодействия E_{int} между V_K и примесями Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Mn^{2+} , Cd^{2+} и Pb^{2+} в кристаллах NaCl, KCl и KBr проведены в [6, 7]. Оказалось, что энергия взаимодействия Me^{2+} и V_K , находящейся в первой координационной сфере Me^{2+} , равна $0.5-0.6$ эВ (характер взаимодействия — притяжение).

Пара (V_K-Me^{2+}) образует электронейтральный комплекс, который на больших расстояниях не должен взаимодействовать с другими заряженными дефектами решетки. Однако на малых расстояниях благодаря пространственной структуре пары (V_K-Me^{2+}) взаимодействие существует.

Методом молекулярной статики [8] с использованием ЭВМ-программы MOLSTAT [9] мы провели расчет энергий взаимодействия диполя ($V_{K1}-Me^{2+}$) с катионной вакансией V_{K2} , находящейся в положениях 1, 2 и 3 (рис. 5) для кристалла KBr и примесей замещения Mg^{2+} и Cd^{2+} (примесь Mg^{2+} имеет наименьший радиус, а примесь Cd^{2+} — наибольший радиус среди всех примесей, рассмотренных в [6, 7]). Во всех положениях 1, 2 и 3 катионная вакансия V_{K2} является ближайшим соседом примеси Me^{2+} , но находится на различных расстояниях от V_{K1} . Для ионов решетки использованы потенциалы межионного взаимодействия Сангстера—Атвуда [10], а для примесей — потенциалы [6, 7].

Результаты представлены в таблице 2. Видно, что в наиболее благоприятном случае (ситуация 3) энергия взаимодействия (притяжения) V_{K2} с диполем ($V_{K1}-Cd^{2+}$) составляет около трети энергии взаимодействия между V_{K1} и Cd^{2+} (-0.61 эВ по данным [6, 7]).

Таким образом, двухвалентная примесь Me^{2+} в ЦГК может служить ловушкой для катионной вакансии V_{K1} с достаточно высокой (~ 0.6 эВ) энергией связи, а также захватывать вторую вакансию V_{K2} с меньшей (и зависящей от ориентации) энергией связи. Если предположить, что вакансии, располагающиеся вокруг Me^{2+} , не являются ближайшими соседями (т. е. не сближаются на расстояния, меньшие, чем $R = 2a_0$; табл. 2), то присоединение третьей вакансии к комплексу ($V_{K1}-Me^{2+}-V_{K2}$) кажется маловероятным.

Следовательно, в реальном ЦГК характер взаимодействия между Me^{2+} и V_K не соответствует ни в одной из моделей, рассмотренных выше в разделах 2, 3, а является промежуточным между крайними случаями, описываемыми моделями ассоциации с блокированием и без блокирования.

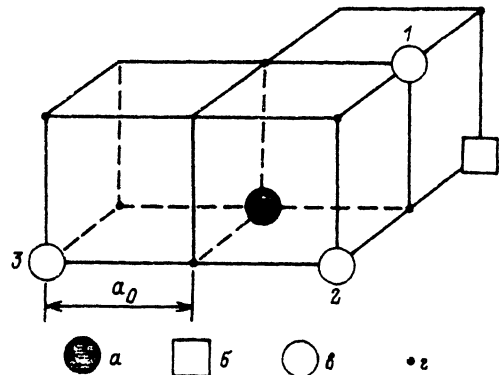


Рис. 5. Взаимное расположение диполя ($V_{K1}-Me^{2+}$) и катионной вакансии V_{K2} .

a — двухвалентный катион замещения, b — катионная вакансия V_{K1} , c — возможные положения вакансии V_{K2} , z — анионы.

Таблица 2

Энергия взаимодействия диполя ($V_{K1}-Me^{2+}$) с катионной вакансией V_{K2} в KBr (расчет по программе MOLSTAT)

Положение V_{K2}	Расстояние $V_{K2}-Me^{2+}$, a_0	Расстояние $V_{K1}-V_{K2}$, a_0	Энергия взаимодействия V_{K2} с ($V_{K1}-Me^{2+}$), эВ	
			Mg^{2+}	Cd^{2+}
1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	-0.03	+0.03
2	$\sqrt{2}$	2	-0.13	-0.08
3	$\sqrt{2}$	$2\sqrt{2}$	-0.15	-0.22

4. Определение энергии взаимодействия катионной вакансии

с двухвалентным катионом замещения

из данных по электропроводности слаболегированных ЦГК

Измерение энергии активации электропроводности E_σ слаболегированного ЦГК в областях II и III (рис. 1) используется для экспериментального определения энергии взаимодействия катионной вакансии с двухвалентной примесью замещения. В настоящее время процедура определения E_{int} выглядит следующим образом [2].

Предполагается, что энергия активации электропроводности E_σ (II) в области II равна энергии миграции E_M катионной вакансии в чистом ЦГК: $E\delta$ (II) = E_M . Далее, согласно модели ассоциации с блокированием, энергия E_σ (III) активации электропроводности в области III равна $E\delta$ (III) = E_M (1/2) E_{int} , откуда энергия взаимодействия

$$E_{int} = 2\Delta E_\sigma, \quad (22)$$

где $\Delta E_\sigma = E_\sigma$ (III) - E_σ (II).

Проведенный нами детальный микроскопический анализ электропроводности слаболегированного ЦГК в модели ассоциации с блокированием показывает, что

$$E_{int} = \nu \Delta E_\sigma, \quad (23)$$

где коэффициент $\nu = 1.54 = (0.65)^{-1}$ следует из формулы (21).

Заметим теперь, что модель ассоциации с блокированием не отражает реального характера взаимодействия катионных вакансий с примесями Me^{2+} : наличие притяжения между V_{K2} и комплексом ($V_{K1}-Me^{2+}$) при некоторых взаимных ориентациях V_{K2} и ($V_{K1}-Me^{2+}$) (на табл. 2) приводит к частичному снятию блокирования. Поэтому уравнение (3), содержащее единственную энергию взаимодействия E_{int} , должно быть заменено на уравнение, содержащее как минимум две энергии взаимодействия $E_{int,1}$ и $E_{int,2}$ (энергию взаимодействия V_{K1} с примесью Me^{2+} и энергию взаимодействия V_{K2} с комплексом ($V_{K1}-Me^{2+}$))

$$E_\sigma = E_M + f(E_{int,1}; E_{int,2}). \quad (24)$$

Поскольку снятие блокирования, согласно разделу 2, приводит к уменьшению коэффициента ν в (23) до значения $\nu = 1$, то, если говорить об энергии $E_{int,1}$,

мы можем указать лишь возможные пределы изменения $E_{\text{int},1}$ в зависимости от степени снятия блокирования

$$1.0\Delta E_{\sigma} < E_{\text{int},1} < 1.54\Delta E_{\sigma}. \quad (25)$$

Таким образом, значения энергий взаимодействия V_K с Me^{2+} , определенные по одним и тем же экспериментальным данным E_{σ} (II) и E_{σ} (III), но интерпретируемые по двум различным моделям, могут различаться в 1.5—2.0 раза.

Возникает вопрос: возможно ли в конкретном случае данного кристалла с данной примесью замещения Me^{2+} сузить пределы определения $E_{\text{int},1}$ (25)? Ответ на этот вопрос отрицательный. Для того чтобы сузить пределы (25), необходимо а priori знать хотя бы соотношение между энергиями $E_{\text{int},1}$ и $E_{\text{int},2}$, т. е. знать степень снятия блокирования. Поскольку экспериментально степень снятия блокирования неизвестна (теоретические расчеты здесь не могут быть использованы), следует сделать вывод: энергия взаимодействия катионной вакансии с двухвалентной примесью замещения в слабелегированном ШГК принципиально не может быть определена точнее, чем это позволяет формула (25).

Итак, методом молекулярной статистики проведены расчеты энергий взаимодействия катионной вакансии V_{K2} с диполем ($V_{K1}-\text{Me}^{2+}$) при различных ориентациях диполя относительно вакансии. Показано, что энергия взаимодействия V_{K2} с диполем ($V_{K1}-\text{Me}^{2+}$) может достигать 30% от энергии взаимодействия V_{K1} с Me^{2+} . Присоединение третьей вакансии к комплексу ($V_{K1}-\text{Me}^{2+}-V_{K2}$) оказывается маловероятным.

В модели ассоциации без блокирования методом Монте-Карло проведены расчеты электропроводности ШГК, слабелегированных двухвалентными катионами замещения. Показано, что в пределе $C_M \rightarrow 0$ микроскопические расчеты полностью подтверждают феноменологическую модель, основанную на законе действующих масс. При конечных концентрациях примесей замещения ($C_M > 10^{-3}$) наблюдается зависимость энергии активации электропроводности E_{σ} от C_M (E_{σ} уменьшается с ростом C_M).

В модели ассоциации с блокированием расчетами методом Монте-Карло показано, что в области комплексообразования энергия активации электропроводности определяется как $E_{\sigma} = E_M + 0.65 E_{\text{int},1}$, что не согласуется феноменологическими расчетами (формулы (3), (4)).

Анализ электропроводности реального слабелегированного ШГК показывает, что энергия активации электропроводности E_{σ} (III) в области комплексообразования зависит как минимум от двух энергий взаимодействия: энергии $E_{\text{int},1}$ взаимодействия V_{K1} с Me^{2+} и энергии $E_{\text{int},2}$ взаимодействия V_{K2} с диполем ($V_{K1}-\text{Me}^{2+}$). При двух неизвестных энергиях $E_{\text{int},1}$ и $E_{\text{int},2}$ и одной известной энергии E_{σ} (III) можно определить интервал изменения энергии $E_{\text{int},1}$ в виде соотношения (25).

Автор благодарит Т. М. Родионову за помощь в проведении расчетов, А. П. Хайменова и Ю. Н. Колмогорова за обсуждение результатов.

Список литературы

- [1] Мурин А. Н. Химия несовершенных кристаллов. Л., 1975. 270 с.
- [2] Хладик Дж. Физика электролитов. М.: ИЛ, 1978. 545 с.
- [3] Jacobs P. W. M., Pantelis P. // Phys. Rev. B. 1971. V. 4. N 10. P. 3757—3772.
- [4] Bannon N. M., Catlow C. R. A., Corish J., Fredericks W. J., Jacobs P. W. M. // Physica. 1985. V. 131B. N 1—3. P. 126—135.
- [5] Колмогоров Ю. Н., Варакин А. Н., Горбич Л. Г. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 12. С. 3618—3625.
- [6] Catlow C. R. A., Corish J., Quigley J. M., Jacobs P. W. M. // J. Phys. Chem. Sol. 1980. V. 41. N 2. P. 231—241.
- [7] Bannon N. M., Corish J., Jacobs P. W. M. // Phil. Mag. A. 1985. V. 51. N 6. P. 797—814.

- [8] Norgett M. J. // Harwell report AERE-7650. 1974. 49 p.
[9] Колмогоров Ю. Н., Вараксин А. Н. // Журн. структ. химии. 1991. Т. 32. № 4. С. 162—165.
[10] Sangster M. J. L., Atwood R. M. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1978. V. 11. N 8. P. 1541—1555.

Научно-инженерный центр
экологической безопасности УрО РАН
Екатеринбург

Поступило в Редакцию
30 марта 1992 г.
