

## Параметры потенциала отталкивания и эффективные заряды ионов в бинарных ионных кристаллах с кубическим типом решетки

Е. П. Пахомов, И. М. Ярцев

*Определены параметры потенциала «некулоновского» (борновского) отталкивания ионов с использованием ионной модели химической связи из равновесных межъядерных расстояний в бинарных кристаллах и в соответствующих им двухатомных молекулах. Используя эти параметры и сжимаемость кристаллов, найдены эффективные заряды ионов и соответствующие им ионности химической связи. Получена зависимость ионности связи от структурных параметров кристалла, а также от разности электроотрицательностей и от валентности исходных атомов.*

*Ключевые слова:* электроотрицательность, ионные соединения, тип решетки кристалла и координационное число, межъядерные расстояния в кристаллах и молекулах, потенциал борновского отталкивания, эффективный заряд ионов.

DOI: 10.51368/1996-0948-2022-5-67-74

### Введение

Обладая уникальными физическими свойствами, ионные кристаллы, реализующиеся при большой разности электроотрицательностей атомов –  $\Delta X$ , успешно используются при создании перспективных классов новых материалов в различных технических приложениях, например, в области инфракрасной техники [1, 2] или высокотемпературной сверхпроводимости [3].

Для успешного развития приложений важны не только локальные преимущества, но и целый комплекс физических свойств, определяющих практическое использование кристаллов [1–3]. Это требует более глубокого знания базовых величин, определяющих эти свойства, в том числе, параметров Борновского (некулоновского) потенциала отталкивания ионов (ПО), а также эффективных зарядов

ионов в кристаллах –  $Z_{\text{eff}}$ . Знание параметров ПО и  $Z_{\text{eff}}$  позволяет определить базовые физические свойства кристалла, например, энергию решетки и упругие характеристики [4, 5]. При этом для аналитического анализа свойств кристаллов до сих пор используются простые степенные, или экспоненциальные ПО вида  $E_n = b_n/r^n$  или  $E_p = b \exp(-r/\rho)$  [5–8], где  $\rho$  – эффективный радиус взаимодействия.

Параметры ПО и пространственные распределения электронного заряда в кристаллах в принципе можно найти современными квантовомеханическими методами [8–10]. Однако, из-за сложности этих методов, полученные расчетные данные охватывают в настоящее время сравнительно небольшое число кристаллов. Поэтому до сих пор широко применяются эмпирические методы определения параметров ПО и величин  $Z_{\text{eff}}$ , основанные на описании различных свойств кристаллов в приближении ионной модели химической связи. Для определения параметров ПО наиболее часто используется сжимаемость –  $\chi$  [5, 6, 11], а для нахождения  $Z_{\text{eff}}$  – диэлектрические характеристики кристаллов [12–15].

Известные данные о параметрах ПО и величинах  $Z_{\text{eff}}$  в кристаллах ограничены по числу соединений и недостаточно системати-

---

Пахомов Евгений Пантелеевич, в.н.с., д.т.н.

E-mail: evg-pakhomov@yandex.ru

Ярцев Иван Михайлович, вед. инженер, к.т.н.

Объединенный институт высоких температур РАН.

Россия, 125412, Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2.

Статья поступила в редакцию 09 августа 2022 г.

---

© Пахомов Е. П., Ярцев И. М., 2022

зированы. Так, до сих пор нет установившихся эмпирических методов оценки  $Z_{\text{eff}}$  в кристаллах.

В [6, 16] была разработана методика определения параметров ПО из равновесных межъядерных расстояний в бинарных кристаллах АВ –  $r_{0c}$  и в соответствующих им молекулах АВ –  $r_{0m}$ . Данные об  $r_{0c}$  и  $r_{0m}$  более точны и многочисленны, чем, например, данные о сжимаемости кристаллов, что позволило получить в [6] параметры ПО для большого числа кристаллов с решеткой типа В1 (NaCl) с первым координационным числом (числом ближайших соседей)  $k = 6$ .

Используя найденные параметры ПО и известные данные о сжимаемости кристаллов, в [6, 16] были определены также эффективные заряды ионов  $Z_{\text{eff}}$ . В отличие от многопараметрического описания диэлектрических свойств кристаллов в [12–15] в данной работе использовалось более простое описание упругих свойств кристалла (в рамках ионной модели).

Основными задачами данной работы, являющейся продолжением работы [6], было получение параметров ПО и эффективных зарядов ионов  $Z_{\text{eff}}$  для кристаллов с другими кубическими решетками: типа В2 (ОЦК) с  $k = 8$  и типа В3 (типа сфалерит) с  $k = 4$ , а также исследование влияния на  $Z_{\text{eff}}$  таких параметров, как координационное число решетки кристалла  $k$ , разность электроотрицательностей атомов кристалла  $\Delta X$  и их валентность  $\nu$  в кристаллическом соединении.

### Расчетные соотношения и исходные данные

В соответствии с [6] для экспоненциального ПО определялись: эффективный радиус взаимодействия  $\rho$  из совместного решения уравнений (1) и (2), энергетическое отношение  $b_0 = b/Z_{\text{eff}}$  из уравнения (3), и величина  $Z_{\text{eff}}$  (в единицах заряда электрона) из (4).

$$\rho / (r_{0c} - r_{0m}) = \left[ \ln \left[ (B/A) (r_{0c}/r_{0m})^2 \right] \right]^{-1}. \quad (1)$$

$$B = k + N_i \exp \left\{ -r_{0c} / \left[ \rho (r_i - 1) \right] \right\} + \dots \quad (2)$$

$$b_0 = \rho (A/B) e^2 / r_{0c}^2 \exp(r_{0c} / \rho). \quad (3)$$

$$Z_{\text{eff}} = \left\{ 9sr_{0c}^4 / \left[ \chi A (r_{0c} / \rho - 2) \right] \right\}^{0.5} / e. \quad (4)$$

Здесь  $A$  – постоянная Маделунга или решеточная сумма для кулоновского потенциала взаимодействия ионов,  $B$  – аналогичная сумма для ПО,  $N_i$  – число ионов на  $i$ -й координационной сфере кристалла,  $r_i$  – нормированный на  $r_{0c}$  радиус этой сферы,  $s$  – структурный параметр, зависящий от типа кристаллической решетки,  $e$  – заряд электрона.

Для степенного ПО использовались выражения (5) и (6) для  $n$  и  $B_n$  из [16]:

$$n = 1 + \left[ \ln(B_n/A) \right] / \left[ \ln(r_{0c}/r_{0m}) \right] \quad (5)$$

$$B_n = k + N_i / (r_i)^n + \dots \quad (6)$$

Поскольку для рассмотренных кристаллов крутизна ПО, характеризуемая величинами  $r_{0c}/\rho$  и  $n$  – достаточно велика ( $r_{0c}/\rho > 7$  и  $n > 5$ ), то при нахождении параметров ПО в суммах  $B$  и  $B_n$  учитывались только первые 3 координационные сферы.

Отметим, что хотя были определены параметры степенного, и экспоненциального ПО, для практического использования обычно более пригоден экспоненциальный ПО. По сравнению со степенным он физически более обоснован [4, 5]. Кроме того, в нашем случае систематическая погрешность определения его параметров меньше из-за более быстрой сходимости суммы  $B$  по сравнению с  $B_n$ .

Данные о равновесных расстояниях в кристаллах –  $r_{0c}$  и в молекулах –  $r_{0m}$  брались из [15, 17] и [15, 19], соответственно. Сжимаемость кристаллов определялась по объемным модулям упругости  $\chi$  из [19, 20]. Необходимые параметры решеток приведены в табл. 1. Данные об электроотрицательности атомов  $X$  по Поллингу брались из [4, 5].

С учетом [6] было рассмотрено около 120 кристаллов. В табл. 1 приведены полученные сводные данные для всех кристаллов, включая данные [6], а в табл. 2 – новые полученные данные.

Таблица 1

**Используемые параметры решеток и сводные данные о диапазонах изменения параметров потенциала отталкивания ионов, включая данные [6]\***

Тип решетки кристалла	B3 (сфалерит)	B1 (NaCl)	B2 (CsCl)
Параметры $-k/A/s$	4/1,64/3,08	6/1,75/2	8/1,76/1,54
$N_2/r_2$	12/1,633	12/2 <sup>0,5</sup>	6/1,154
$N_2/r_3$	8/1,915	8/3 <sup>0,5</sup>	12/1,633
Диапазон $\rho$ /среднее	(0,2–0,28)/0,25	(0,2–0,4)/0,3	(0,2–0,4)/0,3
Диапазон $\rho/(r_{0c} - r_{0m})$	(0,74–0,9)	(0,49–0,65)	(0,45–0,54)
Диапазон $n$ /среднее	(6–9,6)/8,3	(5–10)/7,5	(5–10)/8
Диапазон $I_p$	(0,5–0,7)	(0,55–1,05)	(0,8–1,06)
Диапазон $I$	(0,5–0,83)	(0,47–0,99)	(0,9–0,99)

\* Обозначения:  $k$  – координационное число,  $A$  – постоянная Маделунга и  $s$  – структурный параметр, соответственно;  $N_2$  и  $r_2$  – число ионов и относительный радиус 2-й координационной сферы, соответственно,  $N_3$  и  $r_3$  – то же для 3-й сферы,  $\rho$  [А] – параметр экспоненциального ПО,  $\rho/(r_{0c} - r_{0m})$  – нормированный параметр экспоненциального ПО,  $n$  – параметр степенного ПО,  $I_p$  – ионность химической связи по Полингу и  $I$  – ионность связи, соответствующая эффективному заряду ионов.

Таблица 2

**Новые данные для кристаллов\*\***

Соед.	$k$	$\Delta X$	$r_{0c}, \text{А}$	$r_{0c}/r_{0m}$	$n$	$\rho, \text{А}$	$b_0 \times 10^{-4},$ кДж/моль	$\chi \times 10^{11},$ Па	$Z_{\text{eff}}$	$I$	$E,$ кДж/моль
BeS	2/4	1,01	2,104	1,208	6,49	0,28	10,85	0,95	1,66	0,83	2557
BeSe	–	0,98	2,2	1,158	7,69	0,25	31,41	1,08	1,52	0,76	2141
BeTe	–	0,53	2,404	1,139	8,28	0,25	54,1	1,5	1,48	0,74	1851
ZnS	–	0,93	2,348	1,118	9,3	0,22	151,11	1,31	1,4	0,70	1737
ZnSe	–	0,90	2,451	1,14	8,27	0,26	51,65	1,56	1,5	0,75	1886
ZnTe	–	0,45	2,634	1,126	8,91	0,26	90,24	2	1,48	0,74	1686
CdS	–	0,89	2,525	1,132	8,59	0,26	69,13	1,56	1,56	0,78	1986
CdSe	–	0,86	2,629	1,124	9,02	0,26	100,72	1,82	1,52	0,76	1820
CdTe	–	0,41	2,781	1,117	9,37	0,26	136,42	2,29	1,48	0,74	1640
HgS	–	0,89	2,544	1,131	8,66	0,26	73,79	1,46	1,64	0,82	2147
HgSe	–	0,65	2,634	1,126	8,9	0,26	90,24	1,86	1,52	0,76	1814
HgTe	–	0,20	2,76	1,117	9,33	0,26	133,18	2,2	1,5	0,75	1675
AlP	3/4	0,58	2,352	1,147	7,98	0,26	41,37	1,16	1,64	0,55	2323
AlAs	–	0,57	2,438	1,139	8,29	0,26	53,53	1,3	1,64	0,55	2224
AlSb	–	0,39	2,66	1,122	9,06	0,26	105,52	1,79	1,56	0,52	1906
GaP	–	0,38	2,359	1,145	8,06	0,26	44,39	1,14	1,68	0,56	2373
GaAs	–	0,37	2,445	1,137	8,37	0,26	58,1	1,33	1,6	0,53	2161
GaSb	–	0,19	2,654	1,125	8,95	0,26	94,56	1,79	1,56	0,52	1919
InP	–	0,40	2,543	1,13	8,67	0,26	75,37	1,37	1,68	0,56	2276

Окончание таблицы 2

Соед.	$k$	$\Delta X$	$r_{0c}$ , А	$r_{0c}/r_{0m}$	$n$	$\rho$ , А	$b_0 \times 10^{-4}$ , кДж/моль	$\chi \times 10^{11}$ , Па	$Z_{eff}$	$I$	$E$ , кДж/моль
InAs	–	0,39	2,624	1,126	8,86	0,26	88,34	1,72	1,56	0,52	1940
InSb	–	0,21	2,806	1,113	9,57	0,26	164,76	2,17	1,52	0,51	1733
CsCl	1/6	2,37	3,47	1,192	8,6	0,35	41,66	9	0,95	0,95	564
CsBr	–	2,17	3,615	1,178	9,09	0,34	63,52	10,16	0,94	0,94	536
CsI	–	1,87	3,83	1,154	10,07	0,33	151,29	11,8	0,92	0,92	494
NaF	1/8	3,05	2,36	1,223	8,76	0,22	73,27	1,29	0,98	0,98	889
NaCl	–	2,23	3	1,271	7,72	0,31	20,86	4,16	0,94	0,94	640
KF	–	3,16	2,78	1,281	7,55	0,3	19,13	2,93	0,97	0,97	736
KCl	–	2,34	3,28	1,228	8,62	0,31	45,72	5,16	0,95	0,95	604
KBr	–	2,14	3,46	1,227	8,66	0,33	44,99	6,51	0,94	0,94	560
KI	–	1,84	3,76	1,233	8,51	0,36	35,95	9,62	0,92	0,92	495
RbF	–	3,16	2,95	1,3	7,26	0,33	13,72	3,89	0,97	0,97	688
RbCl	–	2,34	3,41	1,222	8,78	0,32	51,47	5,9	0,95	0,95	583
RbBr	–	2,14	3,57	1,21	9,12	0,32	68,49	6,94	0,94	0,94	549
RbI	–	1,84	3,84	1,208	9,19	0,35	68,8	9,57	0,92	0,92	490
CsCl	–	2,37	3,566	1,225	8,7	0,34	45,35	5,49	1,08	1,08	722
CsBr	–	2,17	3,72	1,212	9,07	0,34	62,83	6,37	1,07	1,07	679
CsI	–	1,87	3,956	1,192	9,72	0,34	112,33	8,13	1,03	1,03	598
KH	–	1,38	2,96	1,321	6,96	0,34	10,34	5,01	0,88	0,88	562
RbH	–	1,38	3,16	1,184	10,02	0,26	189,34	4,25	0,9	0,9	566
CsH	–	1,41	3,312	1,33	6,85	0,38	8,36	7,97	0,88	0,88	503
CaO	2/8	2,44	2,52	1,339	6,75	0,3	9,97				
SrO	–	2,49	2,65	1,38	6,33	0,33	6,45				
BaO	–	2,55	2,96	1,526	5,37	0,41	2,49				
CaS	–	1,58	3	1,293	7,36	0,33	14,79				
SrS	–	1,63	3,125	1,28	7,56	0,33	17,26				
BaS	–	1,69	3,37	1,344	6,69	0,4	7,06				
CuCl+	1/4	1,26	2,346	1,144	8,11	0,25	46,83	2,54	1,09	1,09	1036
CuBr+	–	1,06	2,464	1,134	8,5	0,25	65,97	2,58	1,16	1,16	1121
TlCl+	–	1,36	3,16	1,269	6,96	0,38	10,16	4,26	1,22	1,22	1011
TlBr+	–	1,16	3,297	1,258	7,14	0,39	11,33	4,63	1,23	1,23	985
TlI+	–	0,86	3,47	1,235	7,57	0,39	15,91	5,85	1,2	1,2	898
AgF+	1/6	2,05	2,465	1,24	7,47	0,28	11,75	1,64	1,22	1,22	1298
AgCl+	–	1,23	2,798	1,227	7,74	0,31	20,84	2,27	1,31	1,31	1326

\*\* Обозначения:  $\nu/k$  – валентность атомов, отнесенная к координационному числу решетки,  $r_{0c}$  – равновесное расстояние между ионами,  $r_{0c}/r_{0m}$  – отношение равновесных расстояний в кристалле и в соответствующей молекуле,  $n$  – показатель степени в степенном потенциале отталкивания (ПО),  $\rho$  – размерный параметр экспоненциального ПО,  $b_0$  – силовой параметр экспоненциального ПО,  $\chi$  – сжимаемость кристалла,  $Z_{eff}$  – эффективный заряд иона в единицах заряда электрона,  $I$  – соответствующая  $Z_{eff}$  ионность связи в кристалле и  $E$  – энергия решетки кристалла. Кристаллы с повышенным зарядом ( $Z_{eff}/\nu$ ) > 1 отмечены знаком +.

### Параметры потенциала отталкивания и эффективные заряды ионов

Крутизна степенного и экспоненциального ПО, т. е. величина  $n$  или  $r_{0c}/\rho$ , зависит в основном от отношения  $r_{0c}/r_{0m}$  и уменьшаются с ростом его величины. Диапазон изменения крутизны для разных кристаллов в целом не зависит от типа решетки или величины  $k$ , что обеспечивается соответствующим изменением отношений  $r_{0c}/r_{0m}$  при изменении  $k$ . Найденная для данного кристалла крутизна экспоненциального ПО на (1,5–2) единицы больше, чем степенного, что согласуется с данными [4, 5] об неэквивалентности описания свойств кристаллов с использованием разных видов ПО. Как тенденцию можно отметить также рост величин  $n$  и  $r_{0c}/\rho$  с увеличением  $r_{0c}$ , особенно для кристаллов с решеткой ВЗ.

Интересно, что при данном  $k$  диапазон изменения величины  $\rho_0 = \rho/(r_{0c} - r_{0m})$  для разных кристаллов заметно меньше, чем  $\rho$ . Это означает, величина  $\rho$  или эффективный радиус взаимодействия экспоненциального ПО неплохо коррелирует с разностью ( $r_0 - r_{0m}$ ).

Кристаллы с  $k = 8$  в табл. 2 (за исключением галогенидов Cs и Tl) являются полиморфными модификациями кристаллов с  $k = 6$  из [6], реализующимися при высоких давлениях ( $> 10^9$  Па). Найденные параметры ПО для этих модификаций в пределах погрешности на уровне (10 %) совпадают между собой, что косвенно подтверждает достоверность используемой методики определения параметров ПО.

Полученный и представленный в табл. 1, диапазон изменения параметров ПО совпадает с известными данными [5, 21]. При большой ионности связи – при  $\Delta X > (1,5-2)$  – полученные величины  $r_{0c}/\rho$  в целом соответствуют литературным данным для конкретных кристаллов, например, данным из [7, 8], а также прямым оценкам величины  $r_{0c}/\rho$  из уравнения (4) по данным о сжимаемости кристаллов в предположении  $Z_{\text{eff}} = \nu$ , т. е. в чисто ионном приближении.

При меньшей ионности связи  $Z_{\text{eff}} < \nu$ . В этом случае обычная чисто ионная оценка величины  $r_{0c}/\rho$  в ПО по уравнению (4) в предположении  $Z_{\text{eff}} = \nu$ , занижает значения  $r_{0c}/\rho$  и завышает значения  $\rho$ . Аналогичная оценка  $n$  также занижает величину  $n$ . Это затрудняет прямое сопоставление полученных и известных параметров ПО при пониженной ионности связи.

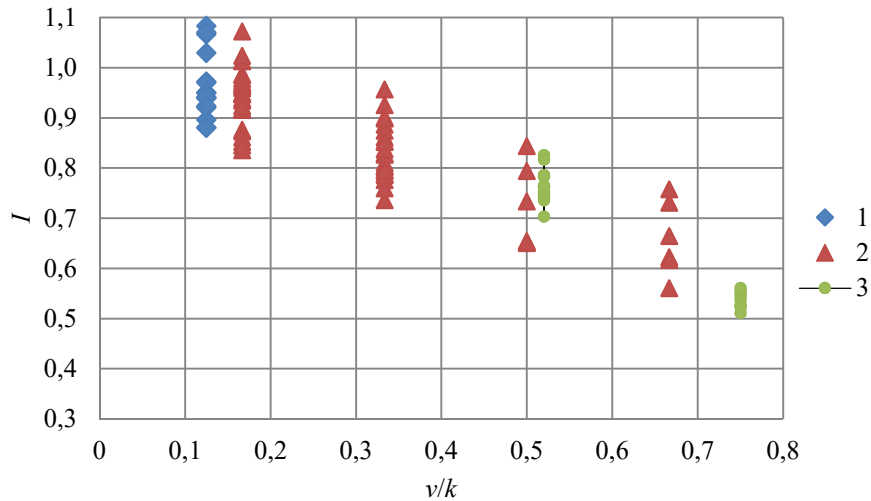
Полученные по (4), т. е. с использованием найденных  $\rho$  и известных данных о сжимаемости кристаллов –  $\chi$  эффективные заряды ионов  $Z_{\text{eff}}$ , отнесенные к заряду электрона, для новых кристаллов, представлены в табл. 2, а для кристаллов с решеткой В1 приведены в [6]. В соответствии с [4, 5, 21] была найдена основанная на  $Z_{\text{eff}}$  ионность связи в кристалле  $I = Z_{\text{eff}}/\nu$ , которая позволяет сравнивать между собой значения  $Z_{\text{eff}}$  в кристаллах с разной валентностью атомов  $\nu$ , в качестве которой для всех кристаллов использовалась стехиометрическая валентность атомов, реализуемая в соответствующих кристаллу двухатомных молекулах.

Полученные значения  $I$  сравнивались с аналитической оценкой ионности связи в кристаллах по Поллингу [4, 15, 21]

$$I_p = 1 - (\nu/k) \exp(-\Delta X^2/4), \quad (8)$$

которая основана на учете ковалентности связи в соответствующей кристаллу двухатомной молекуле –  $\exp(-\Delta X^2/4)$ , а также отношения  $\nu/k$  (степени локализации химической связи в кристалле). В соответствии с (8) при малых значениях  $\Delta X$  величина  $I_p$  стремится к конечному значению  $(1 - \nu/k)$ , что является характерной особенностью этой оценки, ограничивающей ее применение при малых  $\Delta X$ .

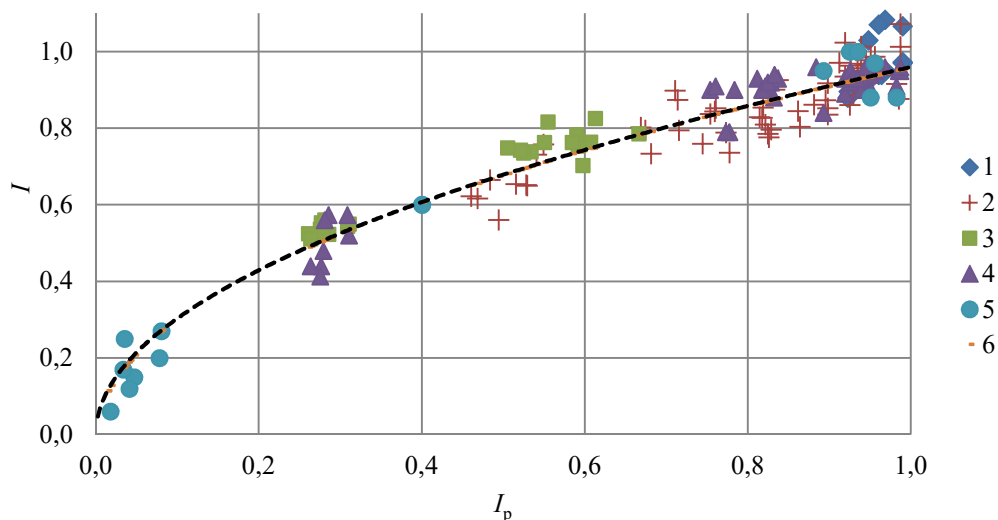
Как видно из рис. 1, с ростом  $\nu/k$  полученная ионность связи  $I$  в среднем уменьшается, а при каждом фиксированном значении  $\nu/k$  изменяется для разных кристаллов в сравнительно малом диапазоне (около  $\pm 0,1$  ед. относительно среднего значения). Этот диапазон определяется диапазоном изменения  $\Delta X$  и качественно согласуется с уравнением (8) для  $I_p$ .



**Рис. 1.** Зависимость полученной ионности связи в кристаллах –  $I$  от отношения валентности атомов к координационному числу решетки кристалла –  $v/k$  при значениях  $k = 8, 6$  и  $4$  – 1, 2 и 3, соответственно. Для наглядности для кристаллов с  $k = 4$  и  $v = 2$  значение  $v/k = 0,5$  увеличено на  $0,02$  ед.

Наряду с  $I_p$  полученные величины  $I$  сопоставлялись с физически наиболее обоснованными рентгеноструктурными данными из [15], полученными из измерений пространственных распределений электронной плотности в кристаллах, а также с наиболее известными данными Филлипса [13, 14], найденными из параметров зонной структуры кристаллов.

Как видно из рис. 2, полученные значения  $I$  в пределах погрешности и естественного разброса (около  $(0,5-1)$  ед.) согласуются с данными Филлипса и с рентгеноструктурными данными, что косвенно подтверждает достоверность полученных величин  $\rho/r_{0c}$  для ПО, а ионность по Поллингу  $I_p$  систематически меньше полученных значений  $I$ .



**Рис. 2.** Зависимость ионности связи в кристаллах –  $I$  от аналитической ионности связи по Поллингу –  $I_p$ . Наши данные для кристаллов с  $k = 8, 6$  и  $4$  – 1, 2 и 3, соответственно. Данные Филлипса и рентгеноструктурные данные – 4 и 5, соответственно. Зависимость наших данных об  $I$  от  $I_p$  вида –  $I = 0,96 I_p^{0,5}$  – штриховая линия – 6

Оказалось, что между найденными величинами  $I$  и ионностью по Полингу  $I_p$  существует степенная зависимость, которую можно представить в виде  $I = 0,96I_p^{0,5}$ . Из этой зависимости следует, что величина  $I_p$  соответствует не найденным значениям  $I$ , а квадрату этих значений, и что различие величин  $I_p$  и  $I$  уменьшается с ростом ионности связи. Для наиболее ионных кристаллов (при  $I_p > 0,75$ ) это различие не превышает 10 %, соответствующих естественному разбросу полученных данных, что для кристаллов с решеткой В1 отмечалось в [6].

Отметим, что кристаллы моногалогенидов Cu, Ag и Tl, представленные в табл. 2, имеют повышенные значения  $I$  ( $> 1$ ), что по данным [14] может быть обусловлено дополнительным участием внутренних  $d$ -электронов в валентных связях.

С использованием найденных величин  $\rho$  и  $Z_{\text{eff}}$  по уравнению Борна-Майера [5, 21] определена представленная в табл. 2 энергия решетки кристалла  $E = AZ_{\text{eff}}^2 e^2 / r_{0c} (1 - \rho / r_{0c})$ , которая по ионной модели характеризуют энергию химической связи и соответствует затратам энергии, необходимым для распада решетки кристалла на составляющие ее ионы.

Таким образом, по межъядерным расстояниям в кристаллах с кубической решеткой  $-r_{0c}$  и в соответствующим им двухатомных молекулах  $-r_{0m}$  найдены параметры экспоненциального  $b \exp(-r/\rho)$  и степенного  $b_n/r^n$  потенциала отталкивания ионов (ПО) при изменении координационного числа решетки кристаллов  $-k$  от 4 до 8, валентности атомов  $-v$  от 1 до 4 и разности электроотрицательности атомов  $-\Delta X$  от 0,2 до 3,2.

Используя найденные параметры ПО и известные данные о сжимаемости, определены эффективные заряды ионов  $-Z_{\text{eff}}$ , и соответствующая им ионность химической связи в кристаллах  $-I = Z_{\text{eff}}/v$ . Показано, что в среднем с ростом отношения  $v/k$  ионность  $I$  уменьшается.

Установлена связь между полученными значениями  $I$  и аналитической оценкой ионнос-

ти связи по Поллингу  $I_p = 1 - (v/k) \exp(-\Delta X^2/4)$  вида  $I = 0,96I_p^{0,5}$ , что позволяет оценивать значения  $I$  и  $Z_{\text{eff}}$  для ионных кристаллов с кубической решеткой по табличным параметрам  $\Delta X$  и  $v/k$  и, тем самым, учесть совокупное влияние этих параметров на искомые величины.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Сеник Б. Н. // Прикладная физика. 2007. № 3. С. 136.
2. Жукова Л. В., Львов А. Е. и др. // Оптика и спектроскопия. 2018. Т. 125. Вып. 6. С. 763.
3. Мицен К. В., Иваненко О. М. // УФН. 2017. Т. 187. № 4. С. 431.
4. Паулинг Л. Природа химической связи. – М.–Л.: Госхимиздат, 1947.
5. Бокий Г. Б. Кристаллохимия. – М.: Наука. 1971.
6. Пахомов Е. П., Ярцев И. М. // Прикладная физика. 2020. № 2. С. 5.
7. Atkinson K. J. W., Robin W. et al. // J. of The European Ceramic Society. 2003. Vol. 23. P. 3059.
8. Ларин А. В., Кислов А. Н., Никифоров А. Е., Попов С. Э. // Физика твердого тела. 2008. Т. 50. Вып. 9. С. 1687.
9. Максимов Е. Г., Зинченко Н. Г., Замкова Н. Г. // УФН. 2004. Т. 174. № 11. С. 1145.
10. Журавлев Ю. Н., Поплавной А. С. // ФТТ. 2002. Т. 45. Вып. 1. С. 37.
11. Магомедов М. Н. Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах. – М.: Физматгиз, 2010.
12. Szigeti B. // Trans. Faraday Soc. 1949. Vol. 45. P. 155.
13. Phillips J. S. // Modern Phys. 1970. Vol. 42. № 3. P. 317.
14. Бацанов С. С. // Успехи химии. 1982. Т. 51. Вып. 7. С. 1201.
15. Бацанов С. С. Структурная химия. Факты и зависимости. – М.: Диалог МГУ, 2000.
16. Пахомов Е. П., Ярцев И. М. // ТВТ. 2016. Т. 54. № 1. С. 154.
17. Бацанов С. С. // Журнал структурной химии. 2010. Т. 51. № 2. С. 295.
18. Молекулярные постоянные неорганических соединений. Спр. под ред. Краснова К. С. – Ленинград: Химия, Лен. отд., 1979. С. 444.
19. Бацанов С. С. // Журнал структурной химии. 2008. Т. 49. № 2. С. 309.
20. Михальченко В. П. // ФТТ. 2003. Т. 45. Вып. 3. С. 429.
21. Урусов В. С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: Изд-во МГУ, 1987.

## Repulsion potential parameters and effective ion charges in binary crystals with cubic crystal lattice

*E. P. Pakhomov and I. M. Yartsev*

Joint Institute for High Temperatures Russian Academy of Science  
Bd. 2, 13 Izhorskaya st., Moscow, 125412, Russia  
E-mail: evg-pakhomov@yandex.ru

*Received August 09, 2022*

***Using an ionic model of chemical bonding from equilibrium internuclear distances in binary crystals and in their corresponding diatomic molecules, the parameters of the potential of the "non-Coulomb" (Born) repulsion of ions are determined. Using these parameters and the compressibility of crystals, the effective charges of ions and the corresponding ionic chemical bond are found. The dependence of the ionic bond on the structural parameters of the crystal, as well as on the electronegativity difference and on the valence of the initial atoms is obtained.***

***Keywords:*** electronegativity, ionic compounds, crystal lattice type and coordination number, internuclear distances in crystals and molecules, Born repulsion potential, effective ion charge.

DOI: 10.51368/1996-0948-2022-5-67-74

### REFERENCES

1. B. N. Senin, Applied Physics, No. 3, 136 (2007) [in Russian].
2. L. V. Zhukova, A. E. Lvov et al., Optics and Spectroscopy **125** (6), 763 (2018).
3. K. V. Mitsen and O. M. Ivanenko, UFN **187** (4), 431 (2017).
4. L. Pauling, *The nature of chemical bonding*. (Goskhimizdat, M-L., 1947).
5. G. B. Bokiy, *Crystal Chemistry*. (Nauka, Moscow, 1971).
6. E. P. Pakhomov and I. M. Yartsev, Applied Physics, No. 2, 5 (2020) [in Russian].
7. K. J. W. Atkinson, W. Robin, et al., J. of The European Segamis Society **23**, 3059 (2003).
8. A. V. Larin, A. N. Kislov, A. E. Nikiforov, and S. E. Popov, Solid State Physics **50** (9), 1687 (2008).
9. E. G. Maksimov, N. G. Zinchenko, and N. G. Zamkova, UFN **174** (11), 1145 (2004).
10. Yu. N. Zhuravlev and A. S. Poplavnoy, FTT **45** (1), 37 (2002).
11. M. N. Magomedov, *Study of interatomic interaction, vacancy formation and self-diffusion in crystals*. (Fizmatgiz, Moscow, 2010).
12. B. Szigeti, Trans. Farady Soc. **45**, 155 (1949).
13. J. S. Phillips, Modern Phys. **42** (3), 317 (1970).
14. S. S. Batsanov, Successes of chemistry **51** (7), 1201 (1982).
15. S. S. Batsanov, *Structural chemistry. Facts and dependencies*. (Dialog MSU, Moscow, 2000).
16. E. P. Pakhomov and I. M. Yartsev, TVT **54** (1), 154 (2016).
17. S. S. Batsanov, Journal of Structural Chemistry **51** (2), 295 (2010).
18. *Molecular constants of inorganic compounds*. Spr. ed. Krasnova K. S. (Chemistry, Leningrad. ed. Leningrad, 1979). p. 444.
19. S. S. Batsanov, Journal of Structural Chemistry **49** (2), 309 (2008).
20. V. P. Mikhailchenko, FTT **45** (3), 429 (2003).
21. V. S. Urusov, *Theoretical crystal chemistry*. (Publishing House of Moscow State University, Moscow, 1987).