

**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

**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

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Сенник 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. Farady 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. Faraday 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. Mikhilchenko, FTT **45** (3), 429 (2003).
21. V. S. Urusov, *Theoretical crystal chemistry*. (Publishing House of Moscow State University, Moscow, 1987).