УДК 539.184

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИОНА ТРЕХВАЛЕНТНОГО ХРОМА В НИОБАТЕ ЛИТИЯ

***Тумаев Е. Н.*[1], *Авадов К. С.*[2]**

SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF TRIVALENT CHROMIUM ION IN A LITHIUM NIOBATE

Tumayev E. N., Avadov K. S.

Deformation octahedral environment of niobium position of crystal lattice $LiNbO_3$ under its occupation with a Cr^{3+} ion has been researched in this article. Corrections to the components of crystal potential has been calculated. Positions of energy levels for chromium ion that coincides with results of spectroscopic measurements has been determined.

Keywords: lithium niobate, impurity ions, crystal field theory, environmental deformation, energy levels.

В [1, 2] проведен расчет уровней энергии оптических электронов примесного иона хрома в литиевой позиции кристалла $LiNbO_3$, при этом уравнения теории кристаллического поля [3] были переформулированы для случая тригональной симметрии. Данная работа продолжает это исследование, используя приведенную в [1] формулировку теории кристаллического поля для низкосиметричных позиций кристаллической решетки.

Кристаллы $LiNbO_3$ с примесью хрома имеют зеленый цвет, ионы Cr^{3+} замещают в них почти исключительно ионы Li^+. Однако если вместе с хромом добавлять и магний как примесь, то, начиная с некоторой концентрации магния, кристалл приобретает розовый цвет, а его спектр показывает, что кроме центров хрома в литиевых позициях Cr^{3+}_{Li} появляются и ионы хрома, вошедшие в позицию Nb^{5+} [4, 5]. Эта критическая концентрация зависит от состава кристалла и для близкого к стехиометрии $LiNbO_3$ соответствует приблизительно двум молярным процентам MgO. Cr^{3+} входит в ниобиевую позицию лишь в том случае, когда соседний вакантный кислородный октаэдр оккупируется ионом Mg^{2+}, что вызывает искажение кислородного октаэдра, окружающего ниобиевую позицию.

Об уровнях энергии хрома в ниобиевой позиции $(Cr^{3+})_{Nb}$ известно значительно меньше, чем об уровнях $(Cr^{3+})_{Li}$. Это обусловлено тем, что в кристалле состава Cr, Mg: $LiNbO_3$ спектр $(Cr^{3+})_{Nb}$ накладывается на спектр $(Cr^{3+})_{Li}$. К числу установленных фактов относится то, что расщепление основного уровня $^4A_2$ иона $(Cr^{3+})_{Nb}$ пренебрежимо мало [6]. Хотя бесфононный переход $^4T_2 \rightarrow {}^4A_2$ иона хрома в ниобиевой позиции и не удается наблюдать, в [7] приведена оценка, согласно которой приблизительная энергия возбужденного уровня $^4T_2$ равна 12 440 см$^{-1}$. Эта оценка подтверждается результатами экспериментов по изучению спектра кристаллов под давлением. Аналогично получено приближенное положение другого возбужденного уровня ^2E, равное 13 595 см$^{-1}$. Расщепление уровня ^2E равно 36,5 см$^{-1}$ [6].

Теоретические расчеты положений уровней энергии иона хрома в ниобиевой позиции в присутствии иона двухвалентного магния как иона-компенсатора в соседней катионной позиции, также выполнены частично с применением моделей, содержащих большое число подгоночных параметров. В связи с этим представляет интерес расчет положений уровней энергии иона Cr^{3+} в рамках

[1]Тумаев Евгений Николаевич, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры экспериментальной физики Кубанского государственного университета; e-mail: tumayev@phys.kubsu.ru.

[2]Авадов Константин Сергеевич, аспирант кафедры экспериментальной физики Кубанского государственного университета; e-mail: avadov@mail.ru.

развитой в [1] теории кристаллического поля для низкосимметричных позиций.

Введем сферическую и связанную с ней правую декартову прямоугольную системы координат в ниобиевой позиции. Начало координат свяжем с ионом хрома. Ось Oz направим по гексагональной оси так, чтобы в точке с координатами $R = 2,999$ Å, $\phi = 0$, $\theta = 2\pi$ располагался ион лития. Оси Ox и Oy направим так, чтобы шесть ионов кислорода, образующих ближайшее окружение иона хрома, имели координаты, приведенные в таблице.

Угол ϕ отсчитывается от оси Ox в направлении оси Oy. Принятые нами и приведенные в таблице координаты ионов кислорода имеют малое отличие от координат реальных положений этих ионов: углы ϕ атомов O_1, O_2, O_3 на 1,24° меньше своих действительных значений. Такое приближение незначительно искажает уровни энергии системы, но позволяет работать с позицией, имеющей группу симметрии C_{3v}, вместо более низкой реальной симметрии C_3.

Попытки нахождения деформации ниобиевого октаэдра ионом хрома были предприняты в [6], где предлагались две различные модели. В модели I предполагается, что вхождение хрома в позицию ниобия не меняет расстояния от центрального иона до ионов кислорода, а изменяет только полярные углы θ_i лигандов. Модель II предполагает, что ион Cr^{3+} смещается относительно положения Nb^{5+} вдоль тригональной оси к центру октаэдра. Понятно, что такую деформацию можно считать смещением всех ионов кислорода в обратном направлении.

В рамках модели I установлено, что полярный угол атомов O_1, O_2, O_3 увеличивается на 0,31°, а полярный угол атомов O_4, O_5, O_6 уменьшается на 1,87°. При такой деформации ниобиевый октаэдр растягивается вдоль оси z на 0,06 Å. Очевидно, эта деформация не может быть сведена лишь к растяжению, поскольку изменяется длина сторон треугольников $\Delta O_1O_2O_3$ и $\Delta O_4O_5O_6$. Смещение в модели II равняется 0,1353 Å. В [6] предпочтение отдается модели I, как наиболее точно описывающей экспериментальные данные.

Однако, на наш взгляд, реальную деформацию ниобиевого октаэдра можно более адекватно описать следующим образом. Предположим, что ионы кислорода O_4, O_5, O_6 ниобиевой позиции, соседние с ионом магния, смещаются вдоль положительного направления оси Oz (то есть к иону Mg^{2+}) на расстояние d. Несмещенные лиганды O_i, $i = 4, 5, 6$, имеют сферические координаты R_i, ϕ_i, θ_i. В результате смещения их сферические координаты принимают следующие значения:

$$\varphi_i' = \varphi_i,$$

$$\theta_i' = \operatorname{arcctg}\left(\frac{R_i\cos\theta_i + d}{R_i\sin\theta_i}\right),$$

$$R_i' = \frac{R_i\sin\theta_i}{\sin\theta_i'}.$$

Предположим, что ион Mg^{2+} находится точно посредине между кислородными плоскостями занимаемого им октаэдра. Тогда его сферические координаты равны

$$\varphi_M = 0,$$

$$\theta_M = 0,$$

$$R_M = R_i'\cos\theta_i' + \frac{1}{2}(l - d),$$

где $l = 2,3027$ Å — расстояние между кислородными плоскостями.

Матричные элементы оператора потенциала кристаллического поля в приближении точечных зарядов находятся численно по формулам, выведенным в [1]. Однако наличие в кристалле $LiNbO_3$ ковалентных связей приводит к необходимости такого выхода за рамки модели точечных зарядов, которое бы учитывало пространственную структуру электронных оболочек лигандов и их деформации при взаимодействии с примесным ионом.

В первом приближении выход за рамки модели точечных зарядов приводит к необходимости учета дипольных моментов лигандов, что является следующим шагом на пути повышения точности модели. Поскольку масса ядер превосходит массу электронов, а размеры электронного облака превышают размеры области, занимаемой ядром, то, в согласии с адиабатическим принципом, ион O^{2-} может приближенно рассматриваться как диполь, образованный смещением центра электронного облака относительно центра ядра за счет электростатического взаимодействия с соседними атомами. Расположение ионов кислорода в ниобате лития лишь незначительно отличается от плотнейшей гексагональной упаковки. Высокая симметрия такой конфигурации позволяет приближенно считать, что взаимодействия иона кислорода с соседними ионами кислорода будут взаимно компенсировать

Координаты ионов хрома и его окружения в ниобиевой позиции

Позиция	R, Å	θ, град.	φ, град.
Cr	0	–	–
O_1	2,125	132,09	−60
O_2	2,125	132,09	180
O_3	2,125	132,09	60
O_4	1,879	61,93	120
O_5	1,879	61,93	0
O_6	1,879	61,93	−120

друг друга, как и взаимодействия с четырьмя ближайшими катионами. Таким образом, поляризацию ионов кислорода в стехиометрическом $LiNbO_3$ считаем пренебрежимо малой по сравнению с поляризацией, вызванной внедрением ионов Mg^{2+} и Cr^{3+}, и учитываем лишь последнюю.

Кроме того, будем пренебрегать деформацией кислородного октаэдра, вызванной вхождением иона хрома, и считать, что поляризация вызвана исключительно изменением потенциала кулоновского взаимодействия. Другими словами, поскольку Cr^{3+} входит в ниобиевую позицию при условии вхождения в соседний пустой октаэдр иона Mg^{2+}, то в указанном приближении это аналогично появлению в позиции Nb^{5+} заряда −2, а в пустом кислородном октаэдре — заряда +2. Поляризуемость иона O^{2-} в ниобате лития равна среднему арифметическому главных компонент тензора дипольной электронной поляризуемости

$$\alpha_0 = \langle \alpha_0 \rangle = \frac{1}{3}\left(\alpha_{11} + \alpha_{22} + \alpha_{33}\right),$$

$\alpha_0 = 2,267 \cdot 10^{-24}(\text{см}^3)$ [8, 9].

Каждый из шести ионов кислорода, окружающих ион хрома, обладает дипольным моментом $\mathbf{p}_i$. Центр электронного облака с зарядом $-10\ e$ смещен относительно центра ядра с зарядом $+8\ e$. Так как в модели точечных зарядов рассматривался заряд $-2\ e$ в центре ядра, то теперь необходимо рассмотреть диполь, образованный зарядами $10\ e$ в центре ядра и $-10\ e$ в центре электронного облака.

Пусть $\Delta\mathbf{r}$ — вектор, направленный из центра ядра в центр электронного облака. Будем считать, что ядро неподвижно и смещается лишь электронное облако. Тогда для дипольного момента можно записать равенство

$$\mathbf{p} = -10\ e\Delta\mathbf{r},$$

откуда следует

$$\Delta\mathbf{r} = -\frac{\mathbf{p}}{10\ e}.$$

Следовательно энергия 3d-электрона Cr^{3+} в поле таких диполей равна

$$V_D(\mathbf{r}) = 10e^2 \sum_{i=1}^{6}\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{|\mathbf{R}_i + \Delta\mathbf{r}|}\left(\frac{r}{|\mathbf{R}_i + \Delta\mathbf{r}|}\right)^k \times \\ \times P_k\left(\cos\left(\omega_i + \delta_i\right)\right) - \\ - 10e^2 \sum_{i=1}^{6}\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{R_i}\left(\frac{r}{R_i}\right)^k P_k\left(\cos\left(\omega_i\right)\right),$$

где $R_i = |\mathbf{R}_i|$, $r = |\mathbf{r}|$, ω_i и $\omega_i + \delta_i$ — углы между вектором $\mathbf{r}$ и векторами $\mathbf{R}_i$ и $\mathbf{R}_i + \Delta\mathbf{r}$ соответственно. Дальнейшее разложение $V_D(\mathbf{r})$ приводит к выражению

$$V_D(\mathbf{r}) = 10e^2 \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{m=-k}^{k}\sum_{i=1}^{6} r^k Y_{k,m}(\theta,\phi) \times \\ \times \frac{4\pi}{2k+1}(-1)^m \times \\ \times \left[\left(\frac{1}{|\mathbf{R}_i + \Delta\mathbf{r}|}\right)^{k+1} Y_{k,-m}\left(\theta_i', \varphi_i'\right) - \\ - \left(\frac{1}{R_i}\right)^{k+1} Y_{k,-m}\left(\theta_i, \varphi_i\right)\right],$$

где θ_i', φ' — сферические углы вектора $\mathbf{R}_i + \Delta\mathbf{r}$. Отсюда

$$V_D(\mathbf{r}) = 10e^2 \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{m=-k}^{k}\sum_{i=1}^{6} r^k Y_{k,m}(\theta,\varphi) \times \\ \times \frac{4\pi}{2k+1}(-1)^m \times$$

$$\times \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \left(\left(\frac{1}{R_i} \right)^{k+1} Y_{k,-m}(\theta_i, \varphi_i) \right) \Delta \mathbf{r} + \right.$$
$$\left. + o(\Delta r) \right],$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор, коллинеарный $\Delta\mathbf{r}$. Поскольку $\Delta r = |\Delta \mathbf{r}|$ мало, отбросим слагаемое $o(\Delta r)$, получим

$$V_D(\mathbf{r}) = -pe \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=-k}^{k} \sum_{i=1}^{6} r^k Y_{k,m}(\theta, \varphi) \times$$
$$\times \frac{4\pi}{2k+1} (-1)^m \times$$
$$\times \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_p} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \right)^{k+1} \times \right.$$
$$\left. \times Y_{k,-m}(\arccos(z\xi_1), \arccos(x\xi_2)) \right] \Delta \mathbf{r} \Bigg|_{\substack{x = R_{ix} \\ y = R_{iy} \\ z = R_{iz}}},$$

где

$$\xi_1 = \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}, \quad \xi_2 = \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}},$$

$\mathbf{n}_p = -\mathbf{n}$ — единичный вектор, сонаправленный вектору $\mathbf{p}$. Пользуясь правилами дифференцирования сферических функций

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = imY_{l,m}(\theta, \varphi),$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} Y_{l,m}(\theta, \varphi) =$$
$$= \frac{1}{2}\sqrt{l(l+1) - m(m+1)} Y_{l,m+1}(\theta, \varphi) e^{-i\varphi} -$$
$$- \frac{1}{2}\sqrt{l(l+1) - m(m-1)} Y_{l,m-1}(\theta, \varphi) e^{i\varphi},$$

можно записать соотношения для энергии взаимодействия 3d электрона Cr^{3+} с дипольной составляющей электростатического поля лигандов в виде

$$V_D(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=-k}^{k} r^k Y_{k,m}(\theta, \varphi) q_{kmD},$$

где

$$q_{kmD} = \sum_{i=1}^{6} e \frac{4\pi}{2k+1} \left(\frac{1}{R_i} \right)^{k+2} \times$$
$$\times \left[Y^*_{k,m}(\theta_i, \varphi_i) \left[\frac{(k+1)(\mathbf{R}_i \mathbf{p})}{R_i} - \right. \right.$$
$$\left. - \frac{im}{\sin\theta_i} (p_x \sin\varphi_i - p_y \cos\varphi_i) \right] +$$
$$+ \left(\frac{1}{2}\sqrt{k(k+1) + m(-m+1)} \times \right.$$
$$\times Y^*_{k,m-1}(\theta_i, \varphi_i) e^{-i\varphi_i} -$$
$$- \frac{1}{2}\sqrt{k(k+1) + m(-m-1)} \times$$
$$\left. \times Y^*_{k,m+1}(\theta_i, \varphi_i) e^{i\varphi_i} \right) \times$$
$$\left. \times (p_x \cos\phi_i \cos\theta_i + p_y \sin\phi_i \cos\theta_i - p_z \sin\theta_i) \right].$$

Полученные формулы дают возможность учесть влияние поляризации решетки, возникающей вследствие ее деформации примесным центром простой заменой параметров q_{km} модели точечных зарядов на сумму $q_{km} + q_{kmD}$, при этом вектор дипольного момента иона O^{2-} при помощи электронной поляризуемости связан с напряженностью кристаллического электростатического поля $\mathbf{E}$ в месте расположения иона

$$\mathbf{p} = \alpha_0 \mathbf{E}.$$

Очевидно, действительная поляризация кислородных ионов будет значительно меньше, поскольку внедрение хрома вызывает смещение лигандов, вследствие чего напряженность электростатического поля, действующего на лиганд, уменьшается. Для учета этого эффекта целесообразно умножить поляризуемость α_0 на безразмерный коэффициент ω_D, величина которого определяется из сопоставления экспериментальных данных с расчетной моделью.

Координаты вектора поляризации, отнесенные к единичному заряду, равны

$$p_x = -2\alpha_0 \sin\theta_i \cos\varphi_i \frac{1}{R_i^2} + 2\alpha_0 \frac{R_i \sin\theta_i \cos\varphi_i}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_M|^3},$$

$$p_y = -2\alpha_0 \sin\theta_i \sin\varphi_i \frac{1}{R_i^2} + 2\alpha_0 \frac{R_i \sin\theta_i \sin\varphi_i}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_M|^3},$$

$$p_z = -2\alpha_0 \cos\theta_i \frac{1}{R_i^2} + 2\alpha_0 \frac{R_i \cos\theta_i - R_M}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_M|^3}.$$

Эффекты, обусловленные перекрыванием волновых функций Cr^{3+} и O^{2-}, учтем с помощью модели, названной в [10] как Simple Overlap Model. Пусть ион хрома испытывает влияние поля эффективных зарядов $\omega_O g_j e \rho_j$ (j — номер лиганда, g_j — заряд лиганда j,

$e < 0$ — заряд электрона, ω_O — коэффициент, определяемый из экспериментальных данных) с радиус-векторами $\mathbf{r}_j = \mathbf{R}_j f_j$, где константа f_j взята равной 1/2, чтобы вводимый заряд делил расстояние R_j на равные отрезки. Такое приближение более обоснованно, чем введенный в [10] достаточно условный множитель $\beta_j = \frac{1}{1 \pm \rho_j}$.

Для $j = 1, \ldots, 6 \quad g_j = 2$, следовательно, введенные эффективные заряды создают дополнительный потенциал

$$V_0(\mathbf{r}) = -\sum_{j=1}^{6} \frac{g_j \rho_j e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}|}.$$

Тогда

$$V_0(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{p=-k}^{k} r^k q_{kpO} Y_{kp}(\theta, \varphi),$$

где $q_{kpO} = -\frac{4\pi g_j \rho_j e^2}{2k+1} \sum\limits_{i=1}^{6} \frac{Y^*_{kp}(\theta_i, \varphi_i)}{r_i^{k+1}}$. Учитывая сказанное выше, коэффициенты q_{kpO} можно привести к виду

$$q_{kpO} = -\frac{8\pi \rho_j e^2}{2k+1} \sum_{i=1}^{6} \frac{Y^*_{kp}(\theta_i, \varphi_i)}{R_i^{k+1} \left(\frac{r_{Cr}}{r_O + r_{Cr}}\right)^{k+1}},$$

где r_O, r_{Cr} — модули радиус-векторов электронов, принадлежащих кислороду и хрому соответственно.

Таким образом, введенные заряды образуют некоторый «дополнительный» кристаллический потенциал, который может быть учтен по формулам приближения точечных зарядов, если вместо параметров кристаллического поля B_p^k использовать сумму $B_p^k + B_{pO}^k$, где

$$B_{pO}^k = q_{kpO} \left\langle r^k \right\rangle.$$

В неискаженном ниобиевом октаэдре интегралы перекрывания, найденные как сумма $\rho_j = \sum\limits_{m=-2}^{2} \rho_{jm}$ интегралов перекрывания орбиталей 3d-электрона с отдельными орбиталями кислорода

$$\rho_{jm} = |2 \langle R_{20} \mid \varphi_m \rangle + 6 \langle R_{21} \mid \varphi_m \rangle| =$$
$$= \left| 2 \int d\tau R_{32}(r) Y_{2m}(\theta, \varphi) R_{20}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|) + \right.$$
$$\left. + 6 \int d\tau R_{32}(r) Y_{2m}(\theta, \varphi) R_{21}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|) \right|,$$

равны

$$\rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = 0,2025,$$

$$\rho_4 = \rho_5 = \rho_6 = 0,3903.$$

Зависимость величины интеграла перекрывания от расстояния между атомами можно учесть с помощью следующей приближенной формулы, приведенной в [10]:

$$\rho = \rho_0 \left(\frac{R_0}{R}\right)^{3.5},$$

где R_0 — расстояние R в неискаженном октаэдре.

Для выполнения численных расчетов была разработана программа, выполняющая следующие действия:

– вычисление всех 120 трехэлектронных волновых функций конфигурации $3d^3$ с симметрией локального окружения C_{3v};

– нахождение матрицы полного гамильтониана для всех этих состояний с учетом влияния кристаллического поля, кулоновского и спин-орбитального взаимодействия, а также поляризации решетки и эффектов перекрывания;

– диагонализация найденной матрицы и сопоставление полученных уровней конкретным электронным состояниям, что позволяет для каждого набора варьируемых параметров находить расчетные положения энергетических уровней;

– минимизация отклонения теоретически получаемых значений от экспериментальных данных путем нахождения оптимальных значений параметров.

Минимизация отклонения расчетных значений от данных эксперимента дает следующие значения параметров задачи:

– величина смещения ионов кислорода O_4, O_5, O_6 $d = 0,1195$ Å;

– параметр спин-орбитального взаимодействия $\zeta = 152,356$ см$^{-1}$;

– эффективный заряд атомного остова иона Cr^{3+} $Z_i = 6,085$, что достаточно близко к значению $Z_i = 6$, которое дает модель точечных зарядов. Отличие объясняется, по-видимому, эффектами пространственного распределения заряда электронной оболочки примесного центра;

– параметры Рака́ $B = 313,232$ см$^{-1}$, $C = 3844,840$ см$^{-1}$;

– введенные выше параметры $\omega_O = 0,0229$, $\omega_D = 0,2006$.

При указанных значениях параметров расщепление основного уровня $^4A_2$ равно

1,236 см$^{-1}$, компоненты расщепленного уровня ^{2}E имеют значения 13599,9 и 13636,4 см$^{-1}$, положение уровня, соответствующего уровню $^4T_2$ в приближении кубической симметрии, равняется 12 442,6 см$^{-1}$, что хорошо согласуется с приведенными в начале статьи экспериментальными данными.

Таким образом, полученная деформация ниобиевого октаэдра, уточняет деформации, описанные в [6]. Данные расчета энергетических уровней для ниобиевой позиции также хорошо согласуются с результатами спектроскопических исследований. Наряду с этими фактами, достоинством разработанной модели деформации окружения примесного иона является также ее зависимость лишь от одного подгоночного параметра, в то время как предложенная в [6] модель деформации может потребовать для своего описания двух параметров.

Литература

1. *Тумаев Е. Н., Авадов К. С.* Расщепление уровней энергии трехвалентного хрома в кристалле ниобата лития // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2009. №2. С. 65–72.
2. *Тумаев Е. Н., Авадов К. С.* Теоретическая модель для объяснения оптических спектров кристаллов ниобата лития с примесью хрома // Оптика и спектроскопия конденсированных сред: Материалы XV Всерос. конф. Краснодар: КубГУ, 2009. С. 20–22.
3. *Sugano S., Tanabe Y., Kamimura H.* Multiplets of Transition-Metal Ions in Crystals. New York and London.: 1970. 331 p.
4. *Jaque F., Han T. P. J., Bermúudez V., Diéguez E.* Optical spectroscopy of Cr^{3+} ions in stoichiometric $LiNbO_3$ crystals and co-doped with MgO // Journal of Luminescence. 2003. Vol. 102–103. May. P. 253–260.
5. *Han T. P. J., Jaque F.* Optical stability of the Cr^{3+} centres in codoped stoichiometric and congruent $LiNbO_3$:Cr:Mg // Optical Materials. 2007. Vol. 29. N. 8. P. 1041–1043.
6. *Yang Z.-Y., Rudowicz C., Qin J.* The effect of disorder in the local lattice distortions on the EPR and optical spectroscopy parameters for a new Cr^{3+} defect center in Cr^{3+}:Mg^{2+}:$LiNbO_3$ // Physica B. 2002. Vol. 318. N. 2-3. P. 188–197.
7. *Basun S. A., Kaplyanskii A. A., Kutsenko A. B., Dierolf V., Troster T., Kapphan S. E., Polgar K.* Dominant Cr^{3+} Centers in $LiNbO_3$ Under Hydrostatic Pressure // ФТТ. 2001. Т. 43. №6. С. 1010–1017.
8. *Шостак Р. И., Яценко А. В.* Особенности электронной поляризуемости ионов кислорода в кристаллах $LiNbO_3$ // Ученые записки Таврического нац. ун-та им. В. И. Вернадского. Серия «Физика». 2007. Т. 20 (59). №1. С. 78–83.
9. *Яценко А. В.* Расчет электронной поляризуемости ионов и параметров межионного отталкивания в кристаллах $LiNbO_3$ // ФТТ. 2000. Т. 42. №9. С. 1673–1677.
10. *Malta O. L., Mauro A. E., Mattioli M. P. D., Sargentelli V., Brito H. F.* A description of ligand field effects in the Di-mu-Azido-Bis [{Azido(N,N-Diethylethylenediamine)}Copper(II)] compound by the simple overlap model // J. Braz. Chem. Soc. 1998. Vol. 9. N. 3. P. 243–247.

Ключевые слова: ниобат лития, примесные ионы, теория кристаллического поля, деформация окружения, уровни энергии.

Статья поступила 23 декабря 2009 г.
Кубанский государственный университет, г. Краснодар
© Тумаев Е. Н., Авадов К. С., 2009