

Г. С. БОКУН, В. С. ВИХРЕНКО, И. М. ЖАРСКИЙ, Н. П. ИВАНОВА

**РАСЧЕТ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ
В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ**

В рамках одноэлектронной задачи для решения системы разностных уравнений относительно коэффициентов разложения волновой функции по атомным орбиталям (амплитуд атомных функций) предложен метод, явно не опирающийся на технику функций Грина. Метод содержит в себе одновременно идею кластерных и зонных расчетов и дает существенные преимущества при анализе локализованных состояний, что показано на примере описания как одиночных примесей, так и их комплексов в ионных кристаллах со структурой флюорита. Рассмотрен случай периодического распределения дефектов.

В развиваемом методе решение исходной системы уравнений записывается в форме, характерной для идеального кристалла, но с включением дополнительных параметрических функций, позволяющих выделить область, относящуюся к кластеру. Последний может отличаться от остальной системы по своим физическим свойствам либо описываться на иной концептуальной базе. Граничные условия выражаются через названные параметрические функции общего решения, содержащие произвольные константы. Последние определяются из условий «сшивки» по границе кластер — среда. Это приводит к согласованному описанию всего кристалла и его фрагмента.

*Белорусский технологический институт
им. С. М. Кирова*

Рукопись депонирована в ВИНТИ 28.08.86, № 6244-B86. (Статья поступила в редакцию 21.03.86. Полный текст 1,2 а. л., ил. 2, библиогр.— 21 назв.)

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК БССР № 1
серия химических наук

Тэхнічны рэдактар Т. В. Лецьен

Дня выдання ў набор 05.12.86. Падысана ў друк 30.01.87. АТ 16614. Фармат 70×108^{1/16}. Высокі друк. Ум. друк арк. 11,30. Ум. фарб.-адб. 11,72. Ул.-выд. арк. 12,0. Тыраж 465 экз. Зак. № 1523

Выдавецтва «Навука і тэхніка» Акадэміі навук БССР і Дзяржаўнага камітэта БССР па справах выданняў, поліграфіі і кніжнага гандлю, 220600, Мінск, Ленінскі праспект, 68. Друкарня імя Фрунзева Савярскага выданняў «Навука і тэхніка», 220600, Мінск, Ленінскі праспект, 68