

ОСОБЛИВОСТІ МОДЕЛЮВАННЯ СПЕКТРІВ ЯМР  
КВАДРУПОЛЬНИХ ЯДЕР У НЕІДЕАЛЬНИХ КРИСТАЛАХО. В. ЯЦЕНКО, О. М. МАКСИМОВА, М. О. СЕРГЄЄВ<sup>1</sup>УДК 539.143:537.228.5  
© 1999 р.Сімферопольський державний університет  
(333036 Сімферополь 36, вул. Ялтинська, 4)<sup>1</sup>Щецинський університет (Щецин, 70 — 451, Польща)

Розглянуто методи моделювання спектрів ядерного магнітного резонансу (ЯМР) квадрупольних ядер у кристалах з недосконалою структурою на прикладі ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  у конгруентному ніобаті літію. Показано, що у разі відносно великої концентрації власних дефектів врахування ймовірності одночасного впливу кількох дефектів на параметри тензора градієнта електричного поля (ГЕП) на ядрах вибраного типу забезпечує кращу якість відповідності змодельованих та експериментальних спектрів ЯМР. Підкреслено, що під час моделювання бажано враховувати локальні спотворення кристалічної структури дефектами, а для сегнетоелектричних кристалів — неоднорідність макроскопічної компоненти внутрішньокристалічного електричного поля. Зроблено висновок, що домінуючим типом власних дефектів у кристалах  $\text{LiNbO}_3$  конгруентного складу є дефектні комплекси  $(\text{Nb}_{\text{Li}} + 3\text{V}_{\text{Li}})$  та незалежні вакансії літію  $\text{V}_{\text{Li}}$  у співвідношенні 1:1.

## Вступ

Метод ЯМР широко використовується для дослідження монокристалічних сполук. Зокрема вивчення ЯМР ядер, що мають власний електричний квадрупольний момент, дає найбільше інформації про структуру кристала завдяки великій чутливості параметрів спектра до неоднорідностей внутрішньокристалічного електричного поля [1].

Аналіз тільки експериментального вивчення ЯМР у кристалах з неідеальною структурою не завжди дає необхідну інформацію про природу дефектів, особливо в разі можливості існування кількох варіантів дефектної структури. Саме така ситуація має місце для кристалів ніобату літію  $\text{LiNbO}_3$  конгруентного складу [2]. Так, наприклад, застосування до вивчення ЯМР  $^7\text{Li}$  та  $^{93}\text{Nb}$  надзвичайно потужної методики обертання під магнічним кутом, яка дозволяє різко підвищити роздільну здатність методу ЯМР за рахунок майже повного пригнічення магнітних диполь-дипольних взаємодій, не дозволило однозначно ідентифікувати дефекти у катіонній підґратці [3]. Аналіз інтенсивності додаткових ліній у спектрах ЯМР без з'ясування природи їх виникнення теж може привести до принципово хибних висновків [4].

Моделювання спектрів ЯМР квадрупольних ядер та наступне порівняння цих спектрів з експеримен-

тальними є, мабуть, одним з найбільш інформативних шляхів вивчення власних дефектів у іонних кристалах та в кристалах з іонно-ковалентним зв'язком. У цій роботі розглядаються деякі принципи особливості цього методу та його застосування до кристалів  $\text{LiNbO}_3$  конгруентного складу.

## Моделювання спектрів ЯМР квадрупольних ядер у дефектній структурі

В основі методу лежать розрахунки параметрів тензора ГЕП для всіх імовірних позицій ядер вибраного типу у гіпотетичній дефектній структурі кристала. Такі розрахунки можна проводити у трьох наближеннях:

1. У припущенні, що на параметри тензора ГЕП на вибраному ядрі впливає тільки один заряджений діамagnetний дефект чи дефектний комплекс, а самі дефекти рівномірно розподілені по кристалу — модель "ізованих" дефектів.
2. У припущенні, що на параметри тензора ГЕП можуть впливати одночасно кілька дефектів та дефектних комплексів, а самі дефекти та дефектні комплекси локалізовані у структурі кристала випадковим чином.
3. Додатково до припущення про можливість одночасного впливу кількох дефектів на ГЕП враховуються локальні спотворення структури кристала в околі дефектів.

Істотно, що перше наближення є найбільш простим для реалізації, але його коректне застосування обмежене випадками, коли об'ємна концентрація дефектів відповідно невелика. Таке наближення може бути вжито і для більшої концентрації дефектів, тоді ефекти "перекривання" впливу кількох дефектів можуть бути враховані шляхом розгляду отриманих параметрів тензора ГЕП як математичних очікуваних з введенням певної дисперсії розподілу для кожного параметра; але такий підхід є лише наближенням [5, 6].

Розглянемо алгоритм врахування одночасного впливу кількох дефектів на параметри тензора ГЕП на прикладі ядер  $^{93}\text{Nb}$  у  $\text{LiNbO}_3$ .

1. Всередині сфери радіусом  $R_1 = 3$  нм з центром на ядрі  $^{93}\text{Nb}$  випадковим чином розміщуємо дефекти

та дефектні комплекси згідно з їх об'ємною концентрацією для відповідної моделі дефектної структури кристала.

2. Зважаючи на сформовану дефектну підгратку, звичайним чином [5] розрахуємо ГЕП на всіх ядрах  $^{93}\text{Nb}$ , що попадають у концентричну сферу радіусом  $R_2 = 1,2$  нм (105 ядер). Структура кристала за межами першої сфери вважається ідеальною.

Для отримання задовільно великого набору реалізацій тензора ГЕП ця процедура багаторазово повторювалася в умовах постійного випадкового перерозташування дефектів у першій сфері. Стандартний набір реалізацій тензора ГЕП дорівнював 21000.

Використовуючи результати розрахунків тензора ГЕП та стандартні вирази для квадрупольного розщеплення та зсуву центра ваги пар сателітів відносно ларморівської частоти  $\nu_0$  [7], обчислювали набори базових компонент спектра ЯМР для фіксованих орієнтацій кристала у зовнішньому магнітному полі  $B_0$ . Компоненти кожного набору поширюються у відповідності з диполь-дипольною шириною лінії для цієї орієнтації кристала і їх суперпозиція з модельним спектром ЯМР. Повне моделювання повинно також враховувати тензор хімічного зсуву для розглядуваних ядер у структурі, що вивчається.

#### Моделювання спектрів ЯМР $^{93}\text{Nb}$ у кристалах $\text{LiNbO}_3$

Попередні дослідження ймовірних власних дефектів у кристалах  $\text{LiNbO}_3$  конгруентного складу проводили у наближенні "ізолюваних" дефектів [5, 6]. Незважаючи на використання у розрахунках ГЕП на ядрах  $^{93}\text{Nb}$  двох суттєво різних комбінацій ве-

Таблиця 1. Ймовірні реалізації дефектної структури у кристалах  $\text{LiNbO}_3$  конгруентного складу

Структурна формула	Варіанти реалізації дефектної структури (на 100 форм. од.)	
$\text{Li}_{0,9371}\text{NbO}_{2,9686}$	Незалежні $6V_{\text{Li}}$ та $3V_{\text{O}}$	a
	3 комплекси ( $V_{\text{O}} + 2V_{\text{Li}}$ на найближчих відстанях)	b
$[\text{Li}_{0,947}\text{Nb}_{0,0106}]\text{NbO}_3$	Незалежні $\text{Nb}_{\text{Li}}$ та $4V_{\text{Li}}$	c
	Комплекс ( $\text{Nb}_{\text{Li}} + 3V_{\text{Li}}$ на найкоротших відстанях над $\text{Nb}_{\text{Li}}$ ) та незалежна $V_{\text{Li}}$	d
	Комплекс ( $\text{Nb}_{\text{Li}} + 3V_{\text{Li}}$ на найкоротших відстанях під $\text{Nb}_{\text{Li}}$ ) та незалежна $V_{\text{Li}}$	e
	Комплекс ( $\text{Nb}_{\text{Li}} + 2V_{\text{Li}}$ на найкоротших відстанях над та під $\text{Nb}_{\text{Li}}$ ) та 2 незалежні $V_{\text{Li}}$	f
$[\text{Li}_{0,947}\text{Nb}_{0,053}]\text{Nb}_{0,9576}\text{O}_3$	4 комплекси ( $\text{Nb}_{\text{Li}} + V_{\text{Nb}}$ ) та незалежний $\text{Nb}_{\text{Li}}$	g

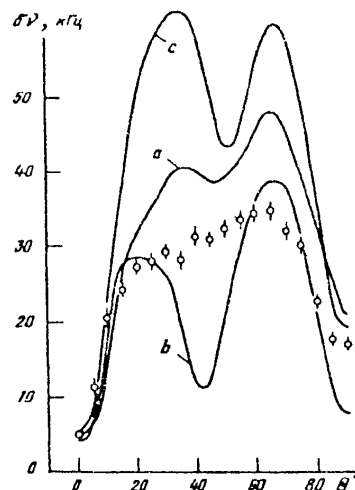


Рис. 1. Кутові залежності  $\delta\nu$  центрального переходу спектра ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  для моделей a, b, c та експериментальні дані (частота 14,568 МГц [5])

личини квадрупольного момента ядер  $^{93}\text{Nb}$  та значень ефективних зарядів іонів кристалічної ґратки, у [5, 6] було отримано однакові висновки про певну перевагу існування дефектних комплексів типу  $(\text{Nb}_{\text{Li}} + 3V_{\text{Li}})$ , де  $\text{Nb}_{\text{Li}}$  — іон  $\text{Nb}^{5+}$  на місці іона  $\text{Li}^+$ , а  $V_{\text{Li}}$  — вакансія іонів  $\text{Li}^+$  на найкоротшій відстані від  $\text{Nb}_{\text{Li}}$ .

Коло дефектів, що аналізуються нижче, трохи розширено у порівнянні з [5, 6]. Замість узагальнених комплексів  $(\text{Nb}_{\text{Li}} + 3V_{\text{Li}})$  розглядали три їх модифікації: 1) всі три  $V_{\text{Li}}$  лежать під  $\text{Nb}_{\text{Li}}$  (модель d); 2) всі три  $V_{\text{Li}}$  лежать над  $\text{Nb}_{\text{Li}}$  (модель e) та 3) рівноімовірна локалізація всіх трьох  $V_{\text{Li}}$  як під, так і над  $\text{Nb}_{\text{Li}}$  (модель d/e), а також модель зигзагоподібних комплексів типу  $V_{\text{Li}} - \text{Nb}_{\text{Li}} - V_{\text{Li}}$  [8] (модель f). Типи досліджуваних дефектів наведено у табл.1.

Розрахунки параметрів тензора ГЕП на ядрах  $^{93}\text{Nb}$  проведено у припущенні одночасного впливу кількох дефектів, але без врахування локальних спотворень структури. Квадрупольний момент ядер  $^{93}\text{Nb}$   $Q_{\text{Nb}}$  взято рівним  $0,37 \cdot 10^{-24}$  см<sup>2</sup> [9], а ефективні заряди іонів брали згідно з [10]:  $q_{\text{Li}} = 0,98 |e|$ ,  $q_{\text{Nb}} = 3,67 |e|$ ,  $q_{\text{O}} = -1,55 |e|$  ( $|e|$  — модуль заряду електрона). Параметрами, що аналізувалися, були ширина  $\delta\nu$  та другий момент

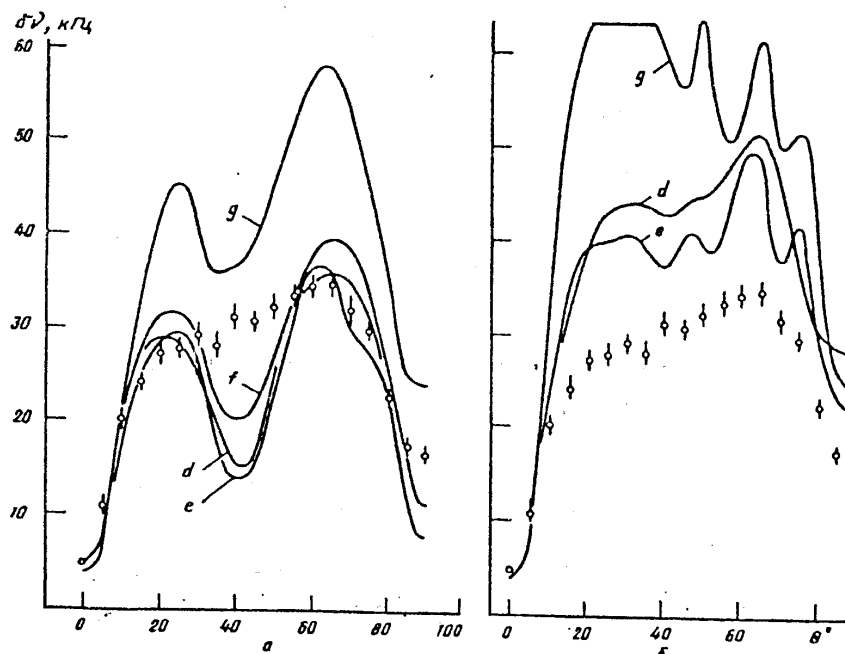


Рис. 2. Те ж саме, що і на рис. 1, для моделей  $d + g$  (а) та тих самих моделей у наближенні "ізолюваних" дефектів [6] (б)

$M_2$  лінії центрального переходу у спектрі ЯМР  $^{93}\text{Nb}$ . Моделювання велося для значення  $B_0 = 1,4000$  Т. Для кожної розглянутої моделі дефектної структури визначали залежності  $\delta\nu$  та  $M_2$  від кута  $\theta$  між віссю симетрії 3-го порядку кристала С та напрямком  $B_0$ . Кутові залежності  $\delta\nu$  для моделей дефектності, що аналізуються, подано на рис. 1 та 2, а.

На рис. 2, б наведено також деякі кутові залежності  $\delta\nu$ , що їх було отримано при моделюванні спектрів ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  у припущенні "ізолюваних" дефектів при тих самих значеннях ефективних зарядів іонів та  $Q_{\text{Nb}}$  [6]. З рис. 1 та 2, а видно, що ті моделі, які розглядають присутність кисневих вакансій, та модель  $g$ , що припускає виникнення ільменітоподібної структури, виразно суперечать експериментальним даним. У той же час моделі  $d$ ,  $e$ ,  $d/e$  та  $f$  досить добре відповідають даним експерименту, за винятком діапазонів  $25^\circ \leq \theta \leq 55^\circ$  та  $\theta \approx 90^\circ$ . Ідентичні кутові залежності, змодельовані у наближенні "ізолюваних" дефектів (рис. 2, б), мають систематичне відхилення у бік збільшення для всього кутового діапазону. Для порівняння результатів моделювання та даних експерименту було обчислено середньо-квадратичне відносне відхилення  $\sigma_r$  розра-

хункової ширини лінії  $\delta\nu_p$  від експериментального значення  $\delta\nu_e$ :

$$\sigma_r = \left[ \sum_{i=1}^n \beta_i^2 / n \right]^{1/2}$$

де  $\beta_i = (\delta\nu_p - \delta\nu_e) / \delta\nu_e$ , а  $n$  — кількість експериментальних точок залежності  $\delta\nu(\theta)$ . Значення  $\sigma_r$  для моделей дефектної структури  $\text{LiNbO}_3$ , що аналізувалися, наведено у табл. 2. Як видно, врахування одночасного впливу кількох дефектів за-

Таблиця 2. Середньоквадратичне відносне відхилення ширини змодельованої лінії переходу ( $\pm 1/2 \leftrightarrow \mp 1/2$ ) спектра ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  від експериментального значення у діапазоні  $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$  для різних моделей дефектної структури  $\text{LiNbO}_3$

$\sigma'$	a	b	c	d	e	d/e	f	g
*	0,469	0,406	0,458	0,385	0,456	—	—	0,817
**	0,337	0,287	0,667	0,247	0,256	0,254	0,189	0,447
***	—	—	—	0,257	0,247	0,255	0,208	0,543
0,02	—	—	—	—	—	0,159	—	—
0,03	—	—	—	—	—	0,107	—	—

\* — модель "ізолюваних" дефектів,  $\sigma' = 0$ ;

\*\* — одночасний вплив кількох дефектів,  $\sigma' = 0$ ;

\*\*\* — моделювання з врахуванням дії квадрупольних сателітів,  $\sigma' = 0$

безпечує кращу відповідність усіх без винятку моделей дефектної структури експериментальним даним, що свідчить про перевагу цього наближення у порівнянні з наближенням "ізолюваних" дефектів.

Завдяки великому розкиду параметрів тензора ГЕП на ядрах  $^{93}\text{Nb}$  квадрупольні сателіти спектра ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  мають велику ширину [5] і їх вплив на форму лінії центрального переходу, що експериментально реєструється, не може бути суттєвим. Відповідні результати моделювання (модель  $d/e$ ) для деяких значень куту  $\theta$  показано на рис.3. Порівняння розрахункових та експериментальних спектрів свідчить про досить добру відповідність ширини і локалізації змодельованих сателітів експериментальним даним та про задовільну якість відповідності загального виду спектрів. Параметр  $\sigma$ , для такого моделювання також наведено у табл.2.

Як видно з наведених вище даних, жодна з моделей дефектної структури  $\text{LiNbO}_3$ , що розглядалися, не забезпечує повного збігу розрахункових та експериментальних спектрів ЯМР. На рис.4 наведено інтегральну та диференціальну форми центральної лінії спектра ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  (модель  $d/e$ ). Розкид параметрів тензора ГЕП у дуже широкому діапазоні приводить до того, що у форму лінії центрального переходу, що реально спостерігається, дають внесок не більше 70% від загальної кількості ядер  $^{93}\text{Nb}$ . Наслідком цього є різке зменшення експериментальних значень  $M_2$  [5], тому кутові залежності  $M_2$  тут не аналізуються. Найбільш суттєвою причиною цих розбіжностей є нехтування локальними деформаціями структури кристала власними дефектами. Розрахунки локальних деформацій — складна задача, яку для  $\text{LiNbO}_3$  ще не розв'язано. Але спрощений аналіз вказує на те, що в разі врахування таких деформацій розкид параметрів тензора ГЕП зменшується за рахунок часткового екранування дії заряджених дефектів і це приводить до суттєвого збільшення значень  $M_2$  для більшості орієнтацій кристала відносно  $V_0$ .

Існує ще одне ймовірне джерело розширення ліній ЯМР квадрупольних ядер у сегнетоселектриках типу зміщення — неоднорідність макроскопічної компоненти локального електричного поля  $E_{\text{loc}}$  на ядрах вибраного типу. На користь цього свідчить як залежність так званого поля Лоренца від форми рівномірно поляризованого кристала [11], так і безперечна неоднорідність поля деполіризації [12].

Наші попередні розрахунки також свідчать про суттєву неоднорідність макроскопічної компоненти  $E_{\text{loc}}$  у  $\text{LiNbO}_3$ . Методом рентгеноструктурного аналізу було встановлено [13], що зовнішнє електричне поле, прикладене у напрямку осі Z (Z||C) кристала  $\text{LiNbO}_3$ , спричинює зміщення катіонів

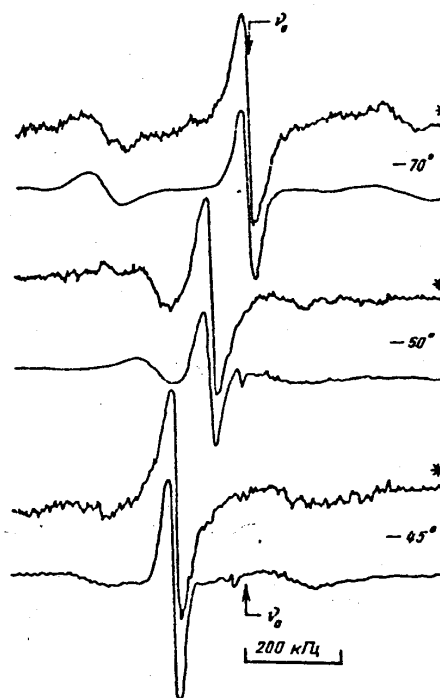


Рис.3. Експериментальні та змодельовані (модель  $d/e$ ) повні спектри ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  для деяких значень куту  $\theta$

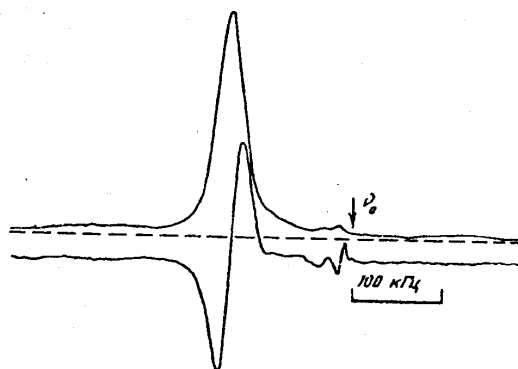


Рис.4. Інтегральна та диференціальна форми центральної лінії спектра ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  (модель  $d/e$ ) при  $\theta = 35^\circ$ . Штрихами позначено розрахунковий "нуль" для інтегральної лінії

відносно кисневої підґратки. З використанням даних роботи [13] проведено наближені розрахунки впли-

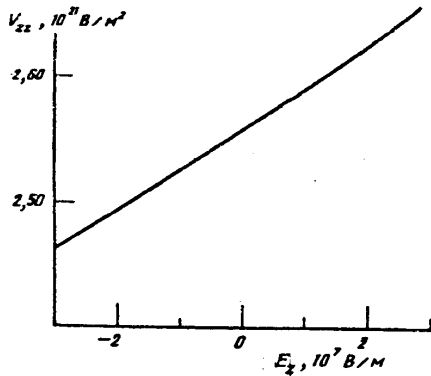


Рис.5. Залежність головної компоненти тензора ГЕП  $V_{zz}$  на ядрах  $^{93}\text{Nb}$  у  $\text{LiNbO}_3$  від зовнішнього електричного поля  $E_z$

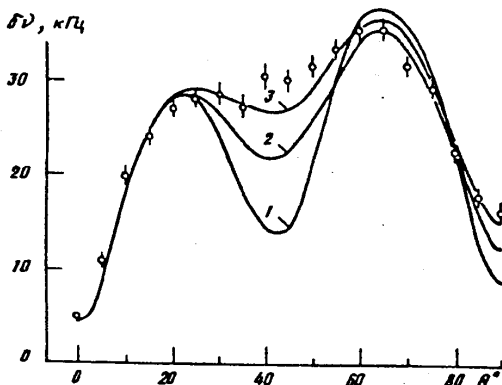


Рис.6. Кутові залежності  $\delta\nu$  центрального переходу спектра ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  з врахуванням неоднорідності макроскопічної компоненти  $E_{loc}$ : 1 —  $\sigma' = 0$ , 2 —  $\sigma' = 2\%$ , 3 —  $\sigma' = 3\%$

ву напруженості зовнішнього електричного поля  $E_z$  на головну компоненту тензора ГЕП  $V_{zz}$  на ядрах  $^{93}\text{Nb}$  у ідеальній структурі  $\text{LiNbO}_3$ , які ілюструються рис.5. Зважаючи на майже лінійну залежність  $V_{zz}$  від  $E_z$ , компонента  $(V_{zz})_j$   $j$ -ї випадкової реалізації тензора ГЕП може бути записана у вигляді

$$(V_{zz})_j = [V_{zz}^e(1 - R) + (V_{zz}^i + V_{zz}^d)(1 - \gamma_\infty)]_j + V_{zz}^f,$$

де  $V_{zz}^e$  — ковалентний,  $V_{zz}^i$  — іонний,  $V_{zz}^d$  — дипольний внески у  $j$ -ту реалізацію ГЕП у наближенні одночасної дії кількох дефектів,  $R$  та  $\gamma_\infty$  — сталі

екранування, а  $V_{zz}^f$  — додатковий внесок у ГЕП за рахунок накладення зовнішнього поля  $E_z$ .

Очевидно, що макроскопічна компонента внутрішньокристалічного електричного поля якісно діє таким саме чином, однак за рахунок неоднорідності  $E_{loc}$  значення  $V_{zz}^f$  має бути випадковим. Якщо для спрощення обмежитися розглядом макроскопічної неоднорідності  $E_{loc}$  тільки вздовж осі  $Z$  кристала, то додатковий внесок у ГЕП може бути описаний як розподіл Гаусса з нульовим математичним очікуванням:

$$P(V_{zz}^f) = \frac{1}{\sigma(2\pi)^{-1/2}} \exp\left[-\frac{V_{zz}^f{}^2}{2\sigma^2}\right],$$

де  $\sigma$  — дисперсія,  $P(V_{zz}^f)$  — щільність розподілу. Зручно ввести до розгляду відносну дисперсію  $\sigma' = \sigma(V_{zz}^0)^{-1}$ , де  $V_{zz}^0$  — середньоквадратичне значення компоненти  $V_{zz}$  для масиву реалізацій тензора ГЕП, що розглядається. На рис.6 зображено кутові залежності ширини лінії центрального переходу спектра ЯМР  $^{93}\text{Nb}$ , розраховані для трьох значень  $\sigma'$  (модель  $d/e$  з врахуванням дії сателітів). Відповідні значення параметра  $\sigma'$  наведено у табл.2. Слід підкреслити, що значенню  $\sigma' = 0,01$  приблизно відповідає  $E_z \approx 1,1 \cdot 10^7$  В/м, що дуже близько до поля деполаризації (величина порядку  $10^7$  В/м) у кристалах  $\text{LiNbO}_3$  [14], а неоднорідність  $E_{loc}$  за рахунок крайових ефектів може бути значно більшою. З тих моделей, що розглядалися, найкращий збіг експериментальних та розрахункових значень  $\delta\nu$  дає саме модель  $d/e$ .

### Висновки

Підкреслимо найбільш суттєві аспекти моделювання спектрів ЯМР у сегнетоелектриках типу зміщення. По-перше, з огляду на порівняно велику щільність власних дефектів розрахунки ГЕП повинні вестися у наближенні випадкового розподілу дефектів та дефектних комплексів поблизу (в околі приблизно 1,8 нм) ядер вибраного типу. По-друге, дуже бажано по мірі можливості враховувати як локальні деформації структури кристала дефектами, так і ефекти, пов'язані з неоднорідністю макроскопічної компоненти  $E_{loc}$ .

Моделювання спектрів ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  у кристалах  $\text{LiNbO}_3$  конгруентного складу виявило, що найбільш імовірним типом власних дефектів є дефектні комплекси  $(\text{Nb}_{Li} + 3\text{V}_{Li})$  з рівноімовірним розташуванням  $\text{V}_{Li}$  як над, так і під  $\text{Nb}_{Li}$  та незалежні  $\text{V}_{Li}$  у співвідношенні приблизно 1:1.

1. Бузник В. М. Ядерный резонанс в ионных кристаллах. — Новосибирск: Наука, 1981.
2. Shirmer O. F., Thiemann O., Wöhlecke M. // J. Phys. Chem. Solids. — 1991. — 52, N1. — P.185 — 200.
3. Blümel J., Born E., Metzger Th. // Ibid. — 1994. — 55, N7. — P.589 — 593
4. Маловичко Г. И., Грачев В. Г., Габриелян В. Т., Коканян Э. П. // ФТТ. — 1986. — 28, вып.9. — С.2593 — 2596.
5. Иванова Е. М., Сергеев Н. А., Яценко А. В. // УФЖ. — 1997. — 42, №1. — С.47 — 51.
6. Yatsenko A. V., Ivanova N. M., Sergeev N. A. // Phys. B. — 1997. — 240. — P.254 — 262.
7. Jellison G. E., Jr., Feller S. A., Bray P. J. // J. Magn. Reson. — 1977. — 27. — P.121 — 132.
8. Zotov N., Frey F., Boysen H. et al. // Acta crystallogr. B. — 1995. — 51. — P.961 — 972.
9. Hennel J. W., Klinowski J. // Fundamentals of Nuclear Magnetic Resonance (Longman Scientific and Technical, Harlow, 1993).
10. Ching W. Y., Gu Zong-Quan, Xu Yong-Nian. // Phys. Rev. B. — 1994. — 50, N3. — P.1992 — 1995.
11. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. — М.: Наука, 1978.
12. Фридкин В. М. Фотосегнетоэлектрики. — М.: Наука, 1979.
13. Fujimoto I. // Acta crystallogr. A. — 1982. — 38. — P.337 — 345.
14. Кузьминов Ю. С. Электрооптический и нелинейно оптический кристалл ниобата лития. — М.: Наука, 1987.

Одержано 23.06.98

#### ОСОБНОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПЕКТРОВ ЯМР КВАДРУПОЛЬНЫХ ЯДЕР В НЕИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ

А. В. Яценко, Е. М. Максимова, Н. А. Сергеев

#### Резюме

Рассматриваются методы моделирования спектров ЯМР квадрупольных ядер в кристаллах с несовершенной структурой на примере ЯМР  $^{93}\text{Nb}$  в кристаллах  $\text{LiNbO}_3$  конгруэнтного состава. Показано, что в случае относительно большой концентрации соб-

ственных дефектов учет возможности одновременного влияния нескольких дефектов на параметры тензора ГЭП на ядрах выбранного типа приводит к качественно лучшему соответствию моделированных и экспериментальных спектров ЯМР. Подчеркивается, что при моделировании желательнее учитывать локальные искажения структуры дефектами, а в случае сегнетоэлектриков — неоднородность макроскопической компоненты внутрикристаллического электрического поля. Делается вывод, что преобладающим типом собственных дефектов в кристаллах  $\text{LiNbO}_3$  конгруэнтного состава являются дефектные комплексы  $(\text{Nb}_{\text{Li}} + 3\text{V}_{\text{Li}})$  и независимые вакансии лития  $\text{V}_{\text{Li}}$  в соотношении 1:1.

#### PECULIARITIES OF THE COMPUTER SIMULATION OF NMR SPECTRA OF QUADRUPOLE NUCLEI IN NONIDEAL CRYSTALS

А. V. Yatsenko, H. M. Maksimova, N. A. Sergeev

Simferopol State University  
(4, Yaltynska Str., Simferopol 333036, Ukraine)

#### S u m m a r y

The methods of quadrupolar nuclei NMR spectra computer simulation for disordered crystals are considered with application to  $^{93}\text{Nb}$  NMR in  $\text{LiNbO}_3$  congruent crystals. It is shown that if the concentration of intrinsic defects is relatively high, the taking into account of the common action of some defects on the tensor EFG for nuclei of the chosen type leads to the best agreement of experimental and simulated NMR spectra. It is concluded that the additional structure distortion caused by intrinsic defects (for ferroelectric crystals — nonuniformity of the macroscopic component of the intracrystalline electric field) must be also considered if possible. It is concluded that basic intrinsic defects in congruent  $\text{LiNbO}_3$  are the defect complexes  $(\text{Nb}_{\text{Li}} + 3\text{V}_{\text{Li}})$  and independent vacancies  $\text{V}_{\text{Li}}$  at the ratio 1:1.