

Temat 5. Kryształy jonowe. Stała Madelunga.

Zadanie 5.1

Wykazać, że wartość krytyczna stosunku promieni $r^> / r^<$ (promień większego jonu / promień mniejszego jonu) jest równa:

- $\sqrt{2} + 1 \approx 2,41$, dla struktury NaCl,
- $\frac{1}{2}(\sqrt{3} + 1) \approx 1,37$, dla struktury CsCl,
- $2 + \sqrt{6} \approx 4,45$, dla struktury blendy cynkowej ZnS.

Zadanie 5.2

Potencjał oddziaływania pomiędzy dwoma molekułami dany jest wzorem postaci

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}, \quad (5.1)$$

gdzie α i β są stałymi dodatnimi. Wykaż, że aby mogło powstać wiązanie pomiędzy tymi molekułami, musi być spełniony warunek $m > n$.

Zadanie 5.3

Energię potencjalną kryształu jonowego w funkcji odległości między jonami R opisano wyrażeniem

$$U(R) = Nu_i = N \left(\frac{b}{R^n} - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right), \quad (5.2)$$

gdzie N jest liczbą par jonów, zaś n , α oraz b są stałymi znanymi dla danego kryształu. Dopasować stałe w analogicznym wyrażeniu według modelu **Borna-Mayera** dla najlepszej zgodności w okolicach minimum energii U

$$U(R) = N \left[\lambda \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right]. \quad (5.3)$$

Zadanie 5.4

Wyznaczyć współczynnik ściśliwości liniowej $k = -\frac{1}{L} \frac{\partial L}{\partial F}$ jednowymiarowego kryształu jonowego, gdzie L jest długością kryształu. Przyjąć, że energia potencjalna w funkcji odległości między sąsiednimi jonami R jest dana wzorem

$$U = Nu_i = N \left(\frac{b}{R^n} - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right), \quad (5.4)$$

gdzie N jest liczbą jonów, zaś n , α oraz b są stałymi znanymi dla danego sieci krystalicznej.

Zadanie 5.5

Wykazać, że moduł ściśliwości objętościowej kryształów jonowych o strukturze NaCl dany jest

wyrażeniem $B = \frac{1}{18R_0} \left. \frac{d^2 u}{dR^2} \right|_{R=R_0}$ w przybliżeniu dla temperatury $T = 0K$, gdzie R_0 jest

równowagową odległością między najbliższymi sąsiadami, u jest energią jednej pary jonów.