

## 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  $\alpha$  i  $\beta$  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

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

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

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

### 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  $n$ ,  $\alpha$  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.