

مسائل فصل سوم

۱- انرژی خشی نقطه صفر عبارت است از:

$$E = \frac{h^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2$$

طبق فرض مساله، $\frac{\lambda}{2} = L$
 لذا $\lambda = 2L$

$$\Rightarrow E = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{2L} \right)^2 = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2$$

۲- با توجه به رابطه ۱۱ فصل ۳ انرژی تپا سنبه کل یا انرژی \rightarrow بندگی در طرهای بی اثر از رابطه زیر بدست می آید.

$$U_{\text{کل}} = \frac{1}{V} N (VE) \left[\sum_j \left(\frac{\delta}{P_{ij} R} \right)^{12} - \sum_j \left(\frac{\delta}{P_{ij} R} \right)^4 \right]$$

بای مساحت های bcc:

$$\sum_j P_{ij}^{-12} = 9,11418$$

$$\sum_j P_{ij}^{-4} = 12,2533$$

لذا:

$$U_{\text{bcc}}(R) = VNE \left[9,11418 \left(\frac{\delta}{R} \right)^{12} - 12,2533 \left(\frac{\delta}{R} \right)^4 \right] *$$

در حالت تعادل:

$$\left(\frac{\partial U_{\text{bcc}}}{\partial R} \right)_{R=R_0} = 0 \Rightarrow VNE \left[-12 \times 9,11418 \left(\frac{\delta}{R} \right)^{13} + 4 \times 12,2533 \left(\frac{\delta}{R} \right)^3 \right]_{R=R_0} = 0$$

$$\Rightarrow \left(\frac{R_0}{\delta} \right)^4 = 1,411 \rightarrow \left(\frac{\delta}{R_0} \right)^4 = \frac{1}{1,411}$$

با جایزای مقدار فوق در *:

$$\text{SALEH } U_{\text{bcc}}(R_0) = VNE (-2,118)$$

از رابطه ۱۵، انرژی چسبندگی در ساختار fcc:

$$U_{(R)}^{fcc} = 2Ne \left[12,142 \left(\frac{\delta}{R} \right)^{12} - 14,454 \left(\frac{\delta}{R} \right)^6 \right]$$

با توجه به در حالت تعادل، فاصله تعادلی و انرژی چسبندگی با عملیاتی ۵
 مشابه حالت bcc:

$$\left(\frac{R_0}{\delta} \right)^6 = 1,779 \Rightarrow U_{(R_0)}^{fcc} = 2Ne (-4,305)$$

لذا

$$\frac{U_{(R_0)}^{bcc}}{U_{(R_0)}^{fcc}} = 0,954$$

انرژی ساختار fcc منفی تر است بنابراین پایدارتر است (بسیار ساختار bcc)

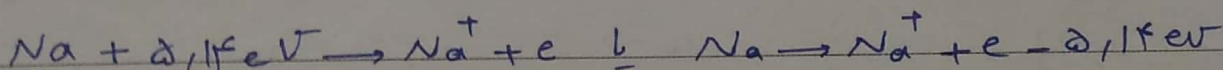
۳- از مثال ۲، انرژی چسبندگی ساختار fcc در حالت تعادل:

$$\begin{aligned} U_{(R_0)}^{fcc} &= 2Ne (-4,305) = 2 (4,02 \times 10^{23}) (50 \times 10^{-17}) (-4,305) \\ &= -25,9 \times 10^9 \text{ erg/mol} \quad (\text{erg} = 10^{-7} \text{ J}) \\ &= -25,9 \times 10^2 \text{ J/mol} = -2,59 \text{ KJ/mol} \end{aligned}$$

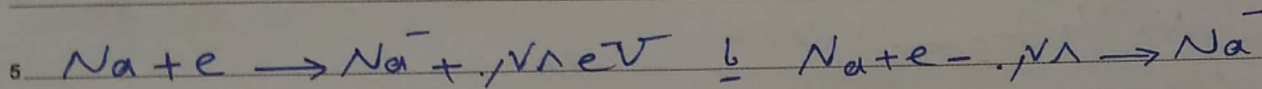
$$|U_{(R_0)}^{fcc}| = 2,59 \text{ KJ/mol}$$

مقدار محاسب شده فوق به مراتب بیش تر از انرژی چسبندگی مشاهده شده (۱,۷۵۱ KJ/mol) است. البته باید در نظر گرفتن تصحیح های کواسیوس، انرژی چسبندگی کاهش چشمگیری خواهد داشت.

۴ - با توجه به جدول ۵ :



و با توجه به فرض ساله در مورد آترونی خواهی بود



با استفاده از رابطه ۲۴ انرژی کل شیده یونی در حالت تعادلی به ازای $2N$ یون (N مولکول Na^+ و N مولکول Na^-)

$$U_{ش} = - \frac{N \alpha q^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

10

لذا انرژی به ازای هر جفت یون سدیم با احتیاط $NaCl$ با Na^+ در جاییه Na^+ و Na^- در جاییه Na^- عبارت از :

$$u = \frac{U_{ش}}{N} = - \frac{\alpha e^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

15

بنابراین اطلاعات فصل اول Na دارای ساختار bcc با ثابت شبکه $a = 4,225 \text{ \AA}$ است، از این رو فاصله نزدیکترین همسایه ها در Na فیزی $R = \frac{\sqrt{3}}{2} a = 3,44 \text{ \AA}$ خواهد بود. همچنین از داده های جدول ۷ در خصوص ساختار $NaCl$ داریم :

$$d = 1,747565 \text{ \AA} \quad \text{و} \quad \rho = 0,132 \text{ \AA}$$

با جایگذاری در u :

20

$$u = - \frac{(1,747565)(4,225 \times 10^{-10})^2}{3,44 \times 10^{-10}} \left(1 - \frac{0,132}{3,44}\right) \text{ erg} = -7,21 \text{ eV}$$

$$1 \text{ esu} = 1 \text{ gr}^{\frac{1}{2}} \text{ cm}^{\frac{3}{2}} \text{ s}^{-1}$$

$$e = 4,8 \times 10^{-10} \text{ esu}$$

بنابراین انرژی چگندگی زوج $Na^+ Na^-$ در بلور فرضی برابر است با :

$$E = (5,14 - 7,78) - 7,21 = -1,85 \text{ eV}$$

یعنی انرژی مربوط به یک جفت یون سدیم مجزا است پس برای یک اتم :

$$SALEH \quad E = -0,925 \text{ eV}$$

با توجه به جدول انرژی جنبشی مشاهده شده برای سدیم فلزی معمولی 113 eV می باشد (این مقدار در جدول با علامت مثبت نوشته شده است ولی در واقع چون مابین انرژی جنبشی است منفی است)

نسبت انرژی این دو ساختار:

$$\frac{E_{Na} (Na^+ Na^-)}{E_{Na} (metal)} = \frac{-0.925 \text{ eV}}{-1.113 \text{ eV}} = 0.831$$

میان برای سدیم در حالت بلور فلزی یا بیرون از حالت بلور یونی است.

۵- رابطه ۲۰:

$$U = N \left(\frac{A}{R^n} - \frac{\alpha q^r}{R} \right)$$

در ساله فرض شده است که بجای جمله دفعی اول عبارت $\frac{A}{R^n}$ قرار گیرد لذا:

$$U(R) = N \left(\frac{A}{R^n} - \frac{\alpha q^r}{R} \right) \quad * \quad \alpha = 2 \text{ m}^2$$

در حالت تعادلی:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial R} \right|_{R=R_0} = 0 \Rightarrow N \left(-\frac{nA}{R_0^{n+1}} + \frac{\alpha q^r}{R_0^2} \right) = 0$$

$$\rightarrow R_0^{n-1} = \frac{nA}{\alpha q^r} \rightarrow R_0^n = \frac{nA}{\alpha q^r} R_0$$

بجایگذاری در * انرژی در حالت تعادلی عبارت خواهد بود با:

$$U(R) = N \left(\frac{A}{\frac{nA}{\alpha q^r} R_0} - \frac{\alpha q^r}{R_0} \right) = \frac{N \alpha q^r}{R_0} \left(\frac{1}{n} - 1 \right)$$

$\alpha = 2 \text{ m}^2$

لذا:

$$U(R) = -\frac{N 2 \text{ m}^2 q^r}{R_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

SALEH

قسمت ب لازم است