

III.Fizika BSC
2014/2015 I.félév
Kondenzált anyag fizika
 4. GYAKORLAT
 (2014. Szeptember 30.)

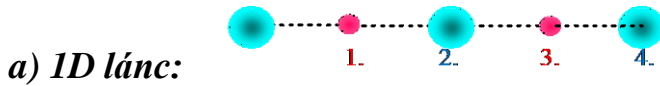
I. A Madelung állandók meghatározása:

- **Alternáló ionos kötésre:**

$$E = (N/2) \left\{ -\frac{\alpha A_M}{R_o} + \frac{\lambda A_n}{R_o^n} \right\}$$

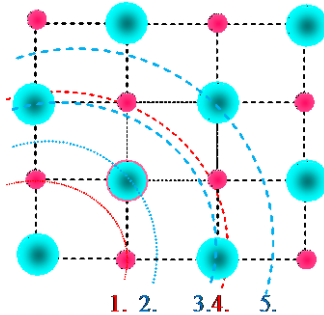
$$A_M = \sum_i \frac{z_i}{p_i} (-1)^{n_i}; \quad A_n = \sum_i \frac{z_i}{p_i^n}$$

- **Egyszerű ionos szerkezetek Madelung állandója (A_M):**



$$A_M^{1D} = \sum_1^{\infty} \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \frac{1}{6} + \dots \right) = \sum_1^{\infty} \left(\frac{1}{1} x - \frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{3} x^3 - \dots \right) = 2 \ln(1+x)_{x=1} = 2 \ln 2$$

- b) **2D sík négyzetrács:**



$$A_M^{2D} = \sum_1^{\infty} \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{4}} - \frac{2}{\sqrt{5}} + \frac{1}{\sqrt{8}} + \dots \right)$$

- c) **3D térrács**

- a) **NaCl rács; (két egymásba tolt FCC)**

$$A_M^{FCC} = \frac{6}{1} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{\sqrt{4}} + \dots = 1.747558$$

6.0 - 8.48 + 4.62 - 3.0

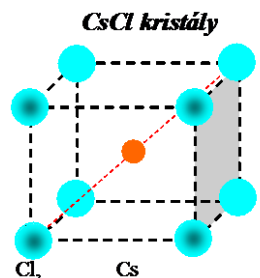
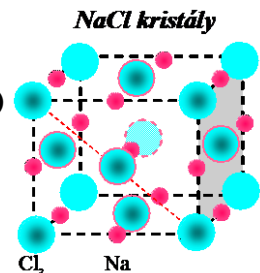
Oscilláló és lassan csökkenő tagok!

- β) **CsCl rács; ((két egymásba tolt SC)**

$$A_M^{CsCl} = \frac{8}{1} - \frac{6}{\sqrt{2}} + \dots = 1.762670 \quad +1\% !$$

8.0 - 4.24 + ...

Oscilláló és lassan csökkenő tagok!



- **Van der Waals kölcsönhatás (kristály), (Lenard -Jones potenciál):**

$$V^{L.J.}(r) = -V_o \left\{ 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right\}; \quad U^{v.w.}(R) = -V_o \left\{ 2 \frac{\sigma^6}{R^6} \sum_{i,j} \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^6 - \frac{\sigma^{12}}{R^{12}} \sum_{i,j} \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^{12} \right\}$$

$$E = (N/2) U(R) = (N/2) \left[-V_o \left\{ 2 \frac{\sigma^6 A_6}{R^6} - \frac{\sigma^{12} A_{12}}{R^{12}} \right\} \right],$$

ahol

$$A_6 = \left\{ \sum_{i,j} \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^6 \right\}; \quad \text{és} \quad A_{12} = \left\{ \sum_{i,j} \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^{12} \right\}$$

$$U^{v.w.}(R) = -\frac{\alpha}{R^6} + \frac{\beta}{R^{12}}$$

Nem oszcilláló és meredeken csökkenő tagok (6, 12 kitevő)!

FCC szerkezetre (nemesgázok ezt preferálják), Z vezérlés:

Z	12	6	24	12	24	8	48	6	12
p_{ij}	1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{4}$	$\sqrt{5}$	$\sqrt{6}$	$\sqrt{7}$	$\sqrt{8}$	$\sqrt{9}$

$$A_6 = 14.2235 \quad ; \quad A_{12} = 12.13 (\approx Z)$$

$$(E/N)_{Ar} = 0.052 \text{ eV} ; \quad R_o = 0.346 \text{ nm} ;$$

$$V_o 2 \sigma^6 = \alpha = 4 \cdot 10^{-5} \text{ eV nm}^6$$

$$T_{forr} = 87.3 \text{ K}^o$$

