

Zad. 1. Zbadaj przebieg funkcji danej potencjałem Lennarda-Jonesa:

$$U_{tot} = 4 \frac{1}{2} N \varepsilon \left[\sum_{i,j} \left(\frac{\sigma}{p_{ij} R} \right)^{12} - \sum_{i,j} \left(\frac{\sigma}{p_{ij} R} \right)^6 \right]$$

Znajdź położenie minimum energii i oblicz wartość energii w minimum dla struktury fcc.

Wskazówki:

Aby znaleźć położenie minimum, skorzystaj z warunku $\frac{dU_{tot}}{dR} = 0$ i w oparciu o niego, wyznacz wartość R (wyrażoną poprzez σ). Wstaw tę wartość do wyrażenia na energię i wykorzystaj wartości p_{ij}^{-12} , p_{ij}^{-6} ze wstępu teoretycznego.

Zad.2. Wyprowadź równanie Borna-Landego

Wskazówki:

Zacznij od wzoru (2.16), wyznacz pojawiającą się w nim stałą C w oparciu o warunek $\frac{dU_{tot}}{dR} = 0$ i wstaw wynik do równania (2.16). Uprość otrzymane równanie do postaci (2.17)

Zad. 3. Oblicz energię kohezji w przeliczeniu na mol dla ksenonu krystalizującego w strukturze bcc i fcc. W obliczeniach przyjmij:

$$\sum_{i,j} p_{ij}^{-12} = 9,11, \quad \sum_{i,j} p_{ij}^{-6} = 12,25 \quad \text{- dla struktury bcc}$$

$$\sum_{i,j} p_{ij}^{-12} = 12,13, \quad \sum_{i,j} p_{ij}^{-6} = 14,45 \quad \text{- dla struktury fcc}$$

oraz $\varepsilon = 0.0200$ [eV],

Następnie:

- określ, która struktura jest bardziej stabilna i dlaczego,
- wprowadź uzyskane wyniki do bazy CES EduPack i przedstaw je na wykresie razem z energiami kohezji dla innych pierwiastków tam zebranych. Z czego wynika obserwowana dysproporcja wartości?
- porównaj obliczone wartości z wartościami tablicowymi

np.: http://www.knowledgedoor.com/2/elements_handbook/cohesive_energy.html

Wyjaśnij, czym można uzasadnić obserwowane odchyłki.

Zad. 4. Wykorzystując bazę CES EduPack stwórz wykresy:

- cohesive energy vs melting temperature
- cohesive energy vs Young's modulus

Dla obu przypadków wyznacz współczynnik korelacji R^2 . Skomentuj wyniki.

Zad. 5. Wykorzystując bazę <https://www.webelements.com/>, wprowadź na trójkąty Jensena i Goerlicha poniższe związki (wykorzystaj elektroujemność w skali Paulinga): MgZn, CrFe, AlNi, CN, SiN,

AIN, NaCl, LiAl. W przypadku trójkąta Goerlicha, oblicz liczbowe udziały poszczególnych typów wiązań.

Wskazówki:

Wykorzystaj trójkąty wiązań zamieszczone w plikach na stronie.