

Zadanie 5.1. Zbadaj przebieg funkcji danej potencjałem Lennarda-Jonesa. Oblicz stosunek energii wiązania neonu krystalizującego w strukturze BCC i FCC. Która z tych struktur jest bardziej stabilna?

W obliczeniach przyjmij: $\sum_{i,j} p_{ij}^{-12} = 9,11$, $\sum_{i,j} p_{ij}^{-6} = 12,25$ - dla struktury BCC; $\sum_{i,j} p_{ij}^{-12} = 12,13$, $\sum_{i,j} p_{ij}^{-6} = 14,45$ - dla struktury FCC

Zadanie 5.2. Wyprowadź równanie Borna-Landego

Zadanie 5.3. Energia oddziaływania między atomami w cząsteczce zależy od odległości według wzoru:

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

Pokaż, że wykładniki potęgowe n i m muszą spełniać nierówność: $m > n$

Zadanie 5.4. Jak zmieniłyby się:

- a) Odległość równowagowa R_0
- b) Energia sieci

dla NaCl, jeśli ładunki obu jonów uległyby podwojeniu?

Zadanie 5.5. Rozważ liniowy układ $2N$ jonów o ładunku równym na przemian $\pm q$. Wyprowadź stałą Madelunga dla takiego układu. Zakładając, że energia potencjalna odpychania między najbliższymi sąsiadami ma postać AR^{-n} , pokaż, że dla odległości równowagowej, energia potencjalna takiego kryształu wynosi:

$$U(R_0) = -\frac{2Nq^2 \ln 2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$