Tarea Examen 2: Física Atómica y Materia Condensada

Tomás Ricardo Basile Álvarez 316617194

June 12, 2022

Problema 7.1

Ya resuelto correctamente en la tarea.

Problema 8.2

Ya resuelto correctamente en la tarea.

Problema 9.1, 9.2, 9.4

Ya resueltos correctamente en la tarea.

Problema 10.3

La constante de Madelung para la estructura cúbica de ZnS es 1.638. Calcular la energía de enlace para el ZnS para el que $r_0=0.235nm$ y para el CuCl que tiene la misma estructura con $r_0=0.234nm$. Los valores experimentales son 37.9eV/ molécula para ZnS y 9.81eV / molécula para CuCl.

Según vimos en clase, la energía de enlace por molécula en equilibrio es de:

$$U = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right),\,$$

donde α es la constante de Madelung, r_0 es la separación y n es el parámetro asociado a la fuerza repulsiva propuesta por Born. Como vimos en clase, el parámetro n en general toma un valor de aproximadamente n=9. Por lo tanto, calculamos directamente la energía para cada una de las moléculas:

\bullet CuCl:

En este caso, el problema nos dice nuevamente que $\alpha = 1.638$ y que $r_0 = 0.234nm$, además que usamos n = 9, por lo que nos queda que:

$$\begin{split} U &= -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \\ &= -\frac{(1.638)(1.6 \times 10^{-19}C)^2}{4\pi(8.85 \times 10^{-12}Fm^{-1})(0.234 \times 10^{-9}m)} \left(1 - \frac{1}{9}\right) \\ &= -1.4355 \times 10^{-18}J \\ &= -8.9605eV \end{split}$$

\bullet ZnS:

En este caso, el problema nos dice que $\alpha=1.638$ y que $r_0=0.235nm$, además que usamos nuevamente que n=9. Sin embargo, este caso es diferente al anterior ya que en la molécula ZnS los átomos están doblemente ionizados, es decir, el Zinc tiene carga +2e y el azufre tiene -2e. Entonces, la energía de atracción entre dos de estas partículas ya no es proporcional a e^2 , sino a $(2e)(2e)=4e^2$. Entonces, en la fórmula hay que usar $4e^2$ en lugar de e^2 .

$$\begin{split} U &= -\frac{\alpha 4 e^2}{4\pi \epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \\ &= -\frac{4(1.638)(1.6 \times 10^{-19}C)^2}{4\pi (8.85 \times 10^{-12}Fm^{-1})(0.235 \times 10^{-9}m)} \left(1 - \frac{1}{9}\right) \\ &= 4(-1.42941) \times 10^{-18}J \\ &= 4(-8.92235)eV \\ &= -35.68eV \end{split}$$

Notar que en CuCl del inciso anterior, no hace falta hacer esta corrección de agregar un factor de 4, ya que en esta molécula los átomos están ionizados una sola vez.

Vemos que el resultado da una buena predicción para CuCl (en la que el valor real es 9.81eV y da un resultado de 8.922eV, que tiene un error de alrededor de un 10%) y también es buena para el ZnS, en la que el valor es 37.9eV pero nuestro resultado es 35.6894eV, por lo que hay un error de 6.2%.

Ejercicio 11.2

Ya resuelto correctamente en tarea.