

מבוא למצב מוצק תשפ"ג: תרגיל בית 4

1. נתון פוטנציאל אינטראקציה בין שני אטומים :

$$\phi(r) = \phi_0 \left[e^{-2(r-r_0)/\lambda} - 2e^{-(r-r_0)/\lambda} \right]$$

- (א) מצאו את המרחק בין שני אטומים אלו בשיווי משקל, במצב היסוד.
- (ב) נתון גביש קובי פשוט תלת-מימדי (לכל אטום 6 שכנים קרובים ביותר) המורכב מ- N אטומים, שבו האינטראקציה הינה בין שכנים קרובים ביותר בלבד, והיא נתונה על ידי הפוטנציאל הנ"ל. חשבו את אנרגיית הקשר פר-אטום של גביש זה, במצב היסוד.
2. נתונה שרשרת חד-מימדית אינסופית של אטומים זהים, כשהמרחק בין אטומים סמוכים קבוע לאורך השרשרת. האינטראקציה בין האטומים היא מצורת לנארד-ג'ונס. חשבו את ערכו של הקבוע המספרי A_6 אם בסכימה על המיקומים $\mathbf{R} \neq 0$ (האטומים שאינם בראשית) לוקחים בחשבון
- (א) רק את השכנים הקרובים ביותר של האטום בראשית.
- (ב) רק את השכנים מסדר ראשון ומסדר שני של האטום בראשית.
- (ג) את כל האטומים בשרשרת; תוכלו להשתמש בתוצאה $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^6} = \frac{\pi^6}{945}$. באיזו מידה התוצאה שונה מאלו שהתקבלו בשני הסעיפים הקודמים?
3. במסגרת מודל מדלונג, אנרגיית הקשר הכוללת של גביש יוני, פר זוג יונים, נתונה כפונקציה של המרחק הבין-אטומי r על ידי

$$u(r) = \frac{C}{r^m} - \frac{\alpha q^2}{r}$$

כאשר α הוא קבוע מדלונג ו- C, m פרמטרים פנומנולוגיים. המרחק הבין אטומי r_0 בשיווי משקל נקבע מתוך הדרישה למינימיזציה של u . בתרגיל זה נראה כיצד ניתן לחלץ את m מתוך מדידה של מודול הנפח (bulk modulus) של החומר, גודל פיזיקלי שמודד את התנגדות החומר לדחיסה (כאן P הוא הלחץ ו- V הוא הנפח):

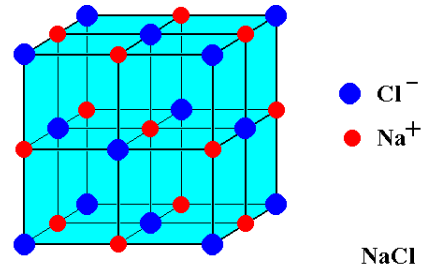
$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T$$

(א) הראו שב- $T = 0$ מקבלים

$$B = v \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)$$

כאשר $v = V \cdot \frac{2}{N}$ הוא הנפח פר זוג יונים (בניסוי אמיתי צריך כמובן להתחשב גם בתיקונים שנובעים מטמפרטורה סופית).

(ב) נתבונן בגביש יוני תלת-מימדי בעל מבנה קובי פשוט עם מטענים $\pm q$ (המבנה של מלח שולחן, NaCl).



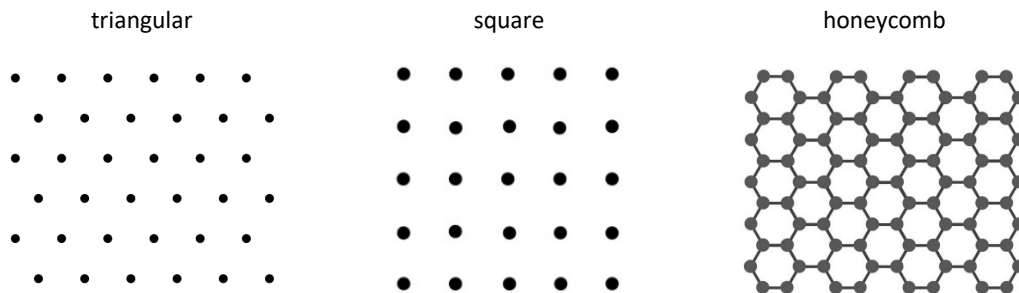
בגביש כזה מתקיים $v(r) = 2r^3$ עבור מרחק בין-אטומי r . השתמשו בכך כדי להראות שבשיווי משקל ניתן לבטא את B בתור

$$B = \frac{1}{18r_0} u''(r_0)$$

כאשר $u''(r) = d^2u/dr^2$

(ג) בעזרת תוצאת סעיף (ב), הביעו את m כפונקציה של α, q, r_0 וערך שיווי המשקל של B (ללא תלות ב- C).

4. נתון חומר דו-מימדי שבו האינטראקציה שקושרת בין האטומים היא אינטראקציית לנארד-ג'ונס עם פרמטרים אופייניים נתונים σ, ε . בתרגיל זה נבחן את ההבדלים בין שלושה מבנים אפשריים של הגביש (ראו איור): גביש משולש (המשולשים שווים צלעות), גביש ריבועי וגביש חלת-דבש (המשולשים משוכללים).



(א) עבור כל אחד מהמבנים האפשריים, חשבו את המרחק r_0 בין שכנים קרובים ביותר אם לוקחים

בחשבון את האינטראקציות גם עם השכנים הקרובים ביותר וגם עם השכנים מסדר שני.

(ב) עבור כל אחד מהמבנים האפשריים, חשבו את אנרגיית הקשר פר-אטום בשיווי משקל. איזה מבין המבנים עדיף אנרגטית?

5. נתון גביש יוני ריבועי דו-מימדי, שבו לכל יון מטען הפוך ביחס ליונים הסמוכים לו, בדומה לגביש שראינו בתרגול. בתרגול חישבנו את קבוע מדלונג עבור גודל תא 3×3 וגודל תא 5×5 . כעת נחשב עבור גודל תא 7×7 :

(א) סדרו בטבלה את השכנים בתא זה: סמנו ב- k את סדר השכן, ב- N_k את מספר השכנים מסדר k , וב- R_k את המרחק לכל שכן מסדר k . בנוסף, כתבו לכל k את סימן המטען של השכן מסדר k ביחס ליון שבמרכז התא, ואת הפקטור $1/n$ שבו צריך לכפול את המטען של השכן מסדר k עקב העובדה שהוא מטען משותף ל- n תאים.

(ב) חשבו את קבוע מדלונג עבור תא 7×7 .