BÖLÜM 2-Kristalde Bağlanma-Sorular

- Q: For a face-centered cubic lattice as an inert gas solid at
- low temperature, the cohesive

BÖLÜM 2-İyonik kristallerde bağlanma-Örnek 3

- **Problem:** Bir örgünün enerjisi $U(r) = -N\left(\frac{\alpha q^2}{r} - ae^{-r/2}\right)$ şeklindedir. Bu enerjideki itici potansiyel terimi D/r^2 olarak alındığında, örgü enerjilerinin aynı olduğu örgü noktaları arasındaki r_0 denge uzaklığını bulunuz.

- **Çözüm**: $U(r) = -N\left(\frac{\alpha q^2}{r} - ae^{-r/2}\right)$ potansiyeli ile temsil edilen sistemin kararlı/denge durumunda örgü noktalarındaki iyonlar arasındaki en uygun uzaklık

$\frac{\partial U}{\partial r}\Big|_{r=r_0} = 0 = -N\left(-\frac{\alpha q^2}{r^2} + \frac{2D}{r^3}\right) = 0$ ile hesaplanabilir. Gerekli düzenlemeler yapılırsa

$N\frac{\alpha q^2}{r^2} = \frac{N2D}{r^3}$; $r_0 = \frac{2D}{\alpha q^2}$ olduğu görülür

BÖLÜM 2-İyonik kristallerde bağlanma-Örnek 4

- **Problem:** $\pm\boldsymbol{q}$ yüklerinden oluşan 2N iyonlu bir örgü sisteminin iyonlar arasındaki itici etkileşme terimi $\frac{A}{\mathrm{R^n}}$ şeklindedir. Sistemin denge halindeki potansiyel enerjisini denge konumu değeri R cinsinden yeniden yazınız.

- **Çözüm:** $U_T(\mathrm{R}) = N\left(Z\lambda \mathrm{e}^{-\mathrm{R}/\rho} - \frac{\alpha q^2}{R}\right)$ şeklindedir. Bu enerjideki itici potansiyel terimi $\frac{A}{\mathrm{R^n}}$ ile değiştirilir

$$U_T(\mathrm{R}) = N\left(Z\lambda \frac{A}{\mathrm{R^n}} - \frac{\alpha q^2}{R}\right)$$

ve sistemin kararlı/denge durumunda olduğu kabul ediliyorsa,

$$\frac{dU_T}{dR}|_{R_0} = 0$$

eşitliğinden potansiyelin türevi alınıp sıfıra eşitlenirse kararlı haldeki sistemin $U_T(\mathrm{R})$ toplam potansiyel enerjisi R_0 cinsinden yazılabilir.

$$\frac{d}{dR}\left\{N\left(Z\lambda \frac{A}{\mathrm{R^n}} - \frac{\alpha q^2}{R}\right)\right\}|_{R_0} = 0 = \left(-Z\lambda n \frac{A}{R_0^{n+1}} + \frac{\alpha q^2}{R_0^2}\right)$$

BÖLÜM 2-İyonik kristallerde bağlanma-Örnek 4

$$\frac{d}{dR}\left\{N\left(Z\lambda\frac{A}{\mathrm{R^n}}-\frac{\alpha q^2}{R}\right)\right\}|_{R_0}=0=\left(-Z\lambda n\frac{A}{R_0^{n+1}}+\frac{\alpha q^2}{R_0^2}\right)$$

$$Z\lambda n\frac{A}{R_0^{n+1}}=\frac{\alpha q^2}{R_0^2}$$

$Z\lambda n\frac{A}{R_0^n}=\frac{\alpha q^2}{R_0}$ ve $Z\lambda\frac{A}{R_0^n}=\frac{\alpha q^2}{nR_0}$ eşitliğini toplam potansiyel ifadesinde kullanırsak,

$$U_T(\mathrm{R})=N\left(Z\lambda\frac{A}{R_0^n}-\frac{\alpha q^2}{R_0}\right),\ U_T(\mathrm{R})=N\left(\frac{\alpha q^2}{nR_0}-\frac{\alpha q^2}{R_0}\right)\ ,\ U_T(\mathrm{R})=N\frac{\alpha q^2}{R_0}\left(\frac{1}{n}-1\right)$$

$$U_T(\mathrm{R})=-N\frac{\alpha q^2}{R_0}\left(1-\frac{1}{n}\right)$$