

# Poglavje 1

## Ocena Madelungove konstante za kristal NaCl z metodo vsoto po nevtralnih plasteh

Med sosednjimi atomi v kristalu deluje sila, ki je lahko odbojna ali privlačna. Tako lahko potencial med sosednjima atomoma zapišemo kot:

$$U = -\frac{e_1 e_2}{4\pi\epsilon_0 r_{1,2}} \quad (1.1)$$

kjer  $e_1, e_2$  predstavljata naboja sosednjih atomov  $r_{1,2}$  pa razdaljo med njima. Če sedaj želimo izračunati skupen potencial, ki deluje na določen atom kristala, moramo v principu izračunati vsoto potencialov vseh preostalih atomov.

$$U_1 = \sum_{i=2}^N -\frac{e_1 e_i}{4\pi\epsilon_0 r_{1,i}} \quad (1.2)$$

S to vsoto, pri kateri seštevamo po vseh atomih razen izbranega, dobimo vsoto potencialov, na dan atom. Za skupen potencial kristala pa moramo le še sešteti ta potencial po vseh atomih. Zdaj lahko definiramo brezdimenzijske enote za lažji izračun.

$$e = \frac{e_i}{e_2}$$
$$p_{1,i} = \frac{r_{1,i}}{a}$$

Te brezdimenzijske enote so normirane na par nasprotno nabitih atomov kar pomeni, da  $e$  predstavlja relativni naboj in  $p_{1,i}$  relativno oddaljenost glede na razdaljo med najbližjima atomoma  $a$ .

Tako lahko zdaj zapišemo potencial kot:

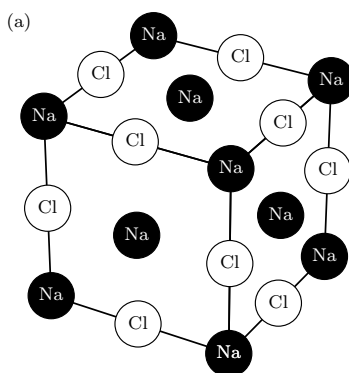
$$U_1 = -\frac{e_1 e_2}{4\pi\epsilon_0 a} \sum_{i=2}^N \frac{e}{p_{1,i}} \quad (1.3)$$

To vsota predstavlja definicijo Madelungove konstante  $\alpha_M = \sum_{i=2}^N \frac{e}{p_{1,i}}$ . Za izračun skupnega potenciala je potrebno le še izračunati vrednost te konstante pri čemer pa se izkaže pride do težav. Vsote ki se pojavljajo v klasičnih mrežah konvergirajo le pogojno in so njihovi seštevki odvisni od vrstnega reda seštevanja. Ker vemo, da ti kristali obstajajo, divergenca teh vsot fizikalno ni smiselna. Zato moramo uporabiti neko metodo, ki nam te vrste sešteje v pravilnem zaporedju.

Ena izmed možnih načinov seštevanja je metoda nevtralnih plasti. S to metodo za vsak bolj natančen približek Madelungove konstante izberemo lupino, ki ima skupno nevtralni naboj. Fizikalno je ta metoda smiselna, ker vemo da mora biti celoten kristal skupno nevtralen.

## 1. nevtralna lupina

Za prvi približek Madelungove konstante poiščemo prvo nevtralno lupino. To predstavlja kar osnovna celica kristala pri kateri moramo upoštevati tudi deleže vsebovanih atomov. NaCl kristal je sestavljen iz dveh F.C.C mrež, ki skupaj sestavljata osnovno celico.



Slika 1.1: Slika prikazuje primitivno celico kristala NaCl.

Prispevke prve lupine lahko sedaj zapišemo v tabelo,

Tabela 1.1: Atomi prve nevtralne lupine

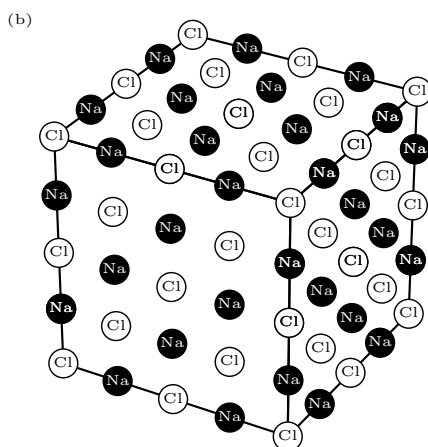
	št. atomov	delež atomov	e	p
Na	6	1/2	1	1
Cl	12	1/4	-1	$\sqrt{2}$
Na	8	1/8	1	$\sqrt{3}$

iz katere izračunamo prvi približek Madelungove konstante.

$$\alpha_1 = 6 \times \frac{1}{2} \times \frac{1}{1} + 12 \times \frac{1}{4} \times \frac{-1}{\sqrt{2}} + 8 \times \frac{1}{8} \times \frac{1}{\sqrt{3}} = 1,4560 \quad (1.4)$$

## 2. nevtralna lupina

Če želimo bolj točno vrednost moramo sešteti po večji lupini. To dobimo če v vseh smereh osnovne celice dodamo naslednji atom, ki se nahaja na razdalji a.



Slika 1.2: Slika prikazuje drugo nevtralno lupino kristala NaCl.

Tabela 1.2: My caption

	št. atomov	delež atomov	e	p
Na	6	$1/2$	1	1
Cl	12	$3/4$	-1	$\sqrt{2}$
Na	8	$7/8$	1	$\sqrt{2}$
Cl	6	$1/2$	-1	2
Na	24	$1/2$	1	$\sqrt{5}$
Cl	12	$1/4$	-1	$2\sqrt{2}$
Na	8	$1/8$	1	$2\sqrt{3}$
Cl	24	$1/2$	-1	$\sqrt{6}$
Na	24	$1/4$	1	3

Iz te lupino dobimo popravek  $\alpha_{delni} = 0,2957$  in skupno vrednost  $\alpha_2 = \alpha_1 + \alpha_{delni} = 1,7517$ . Ta postopek sedaj lahko nadaljujemo za poljubno natančnost vendar vidimo, da se že pri upoštevanju druge lupine dobro približamo izmerjeni vrednosti  $\alpha_M = 1.7476$