

# MADELUNGOVA KONSTANTA: VSOTA PO VSEH NEVTRALNIH PLASTEH

Gregor Šmit

10. januar 2008

FIZIKA TRDNE SNOVI

*Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani*

## 1 Madelungova konstanta: vsota po nevtralnih plasteh

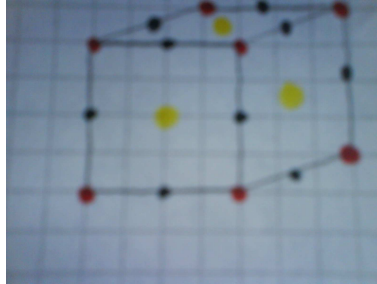
Potencial sosednjih atomov v kristalu opišemo z enačbo:

$$U = -\frac{Z^2 e_0^2}{4\pi\epsilon_0 d} \alpha.$$

V tej enačbi je Madelungova konstanta definirana kot:  $\alpha = \sum_{j \neq i} \pm \frac{1}{p_{ij}}$ ; kjer je  $r_{ij} = dp_{ij}$ ,  $d$  pa je razdalja med atomi.

## 1.1 Madelungova konstanta za prvo lupino

Za natrijev kristal, ki ima osnovno celico:



Slika 1: kristal

se  $\alpha$  za prvo lupino izračuna tako, da pogledamo število atomov ki kaže v osnovno celico. Imamo šest atomov v centru vsake ploskve, dvanajst atomov na stranicah in osem atomov v ogliščih.

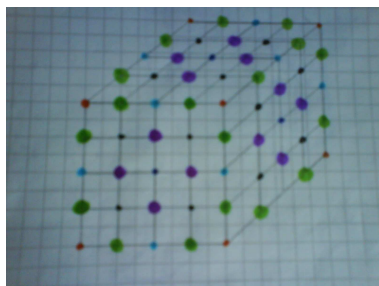
število atomov	naboj	razdalja od središča
6. rumenih	$1/2$	1
12. črnih	$-1/4$	$\sqrt{2}$
8. rdečih	$1/8$	$\sqrt{3}$

Tako je  $\alpha$  enak:

$$\alpha_1 = \frac{6 \left(\frac{1}{2}\right)}{1} + \frac{12 \left(\frac{-1}{4}\right)}{\sqrt{2}} + \frac{8 \left(\frac{1}{8}\right)}{\sqrt{3}} = 1.4560.$$

## 1.2 Madelungova konstanta za drugo lupino

Pri drugi lupini pa kristal izgleda takole:



Slika 2: kristal

in njegova pripadajoča tabela:

število atomov	naboj	razdalja od središča
6	$1/2$	1
12	$-3/4$	$\sqrt{2}$
8	$7/8$	$\sqrt{3}$
6. temno modrih	$-1/2$	2
24. vijolčnih	$1/2$	$\sqrt{5}$
12. svetlo modrih	$-1/4$	$2\sqrt{2}$
8. oranžnih	$-1/8$	$2\sqrt{3}$
24. črnih	$-1/2$	$\sqrt{6}$
24. zelenih	$1/4$	3

V tabeli so upoštevani atomi ki kažejo iz osnovne celice in v kristal. Tako lahko, z enakim postopkom kot prej, izračunamo še prispevek druge lupine, ki znaša:  $\alpha_2 = 0.2957$ . Vsota prispevkov je:  $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 = 1.7517$ . Točen rezultat:  $\alpha = 1.7476$ .