

Werkgroep 9 Fysica van de Vaste Stof– 3 febr 2011

Opgave 1: Nulpuntsenergie van LiF

Bereken in LiF de correctie van de nulpuntenergie (kinetische) energie tot cohesie energie, zoals verkregen door alleen de potentiële energie mee te nemen.

De benodigde gegevens staan in Tabel 7 in Kittel, pag 66.

Gebruik de exponentiële vorm voor de afstoting.

Opgave 2: De parameters in de intermoleculaire potentiaal worden veelal verkregen uit experimentele grootheden.

Voor NaCl geldt dat de bulkmodulus

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} = 2.4 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$$

en de roosterconstante (naaste buur afstand) is $a = 0.282 \text{ nm}$.

V is het volume, en $P = -\partial U / \partial V$ is de druk

Als de intermoleculaire potentiaal wordt gegeven door

$$U_{ij} = \frac{C}{r_{ij}^n} \pm \frac{q^2}{r_{ij}},$$

Beschrijf dan nauwkeurig hoe de parameters C en n verkregen kunnen worden uit de experimentele gegevens, geef de vergelijkingen daarvoor, en bereken zo mogelijk de waarden.

U mag voor het gemak de benadering gebruiken dat voor de afstotende term in de potentiaal alleen over de naaste buren gesommeerd hoeft te worden, maar het kan ook zonder die benadering.