

UNIVERSITATEA TEHNICA CLUJ-NAPOCA

Fizica Superioara

Seminar #4

11/04/2007

Mihai Gabor (e-mail: Mihai.Gabor@phys.utcluj.ro)

Traian Petrisor (e-mail: traian.petrisorjr@phys.utcluj.ro)

G. Baritiu, nr. 26, sala P06

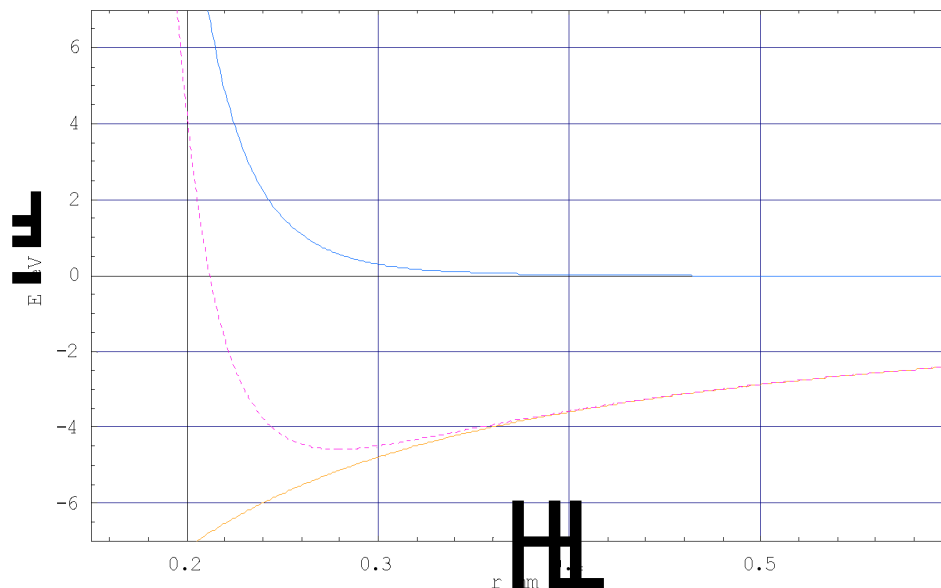
1. Energia repulsiva si atractiva pentru perechea ionica K^+-Cl^-

Pentru o perechea ionica K^+-Cl^- energia repulsiva si atractiva au urmatoarea dependenta in functie de distanta dintre ioni (r):

$$E_A = -\frac{1.436}{r};$$
$$E_R = \frac{5.86 \times 10^{-6}}{r^9};$$

Unde energiile sunt exprimate in eV iar distanta r in nm.

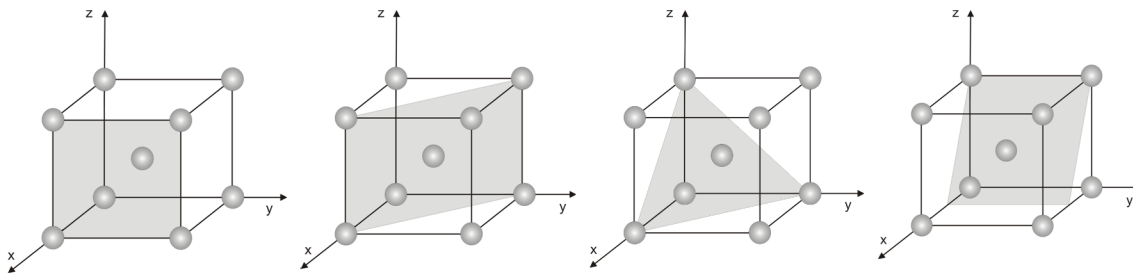
- Trasati pe acelasi grafic E_A , E_R si E_N (suma energiilor atractiva si repulsiva);
- Pe baza graficului obtinut gasiti (i) distanta de echilibru r_0 dintre cei doi ioni, si (ii) valoarea energiei de legatura E_0 corespunzatoare;
- Determinati prin calcul valorile r_0 si E_0 utilizand expresia energiei totale.



2. Plane atomice si indici Miller pentru Litiu

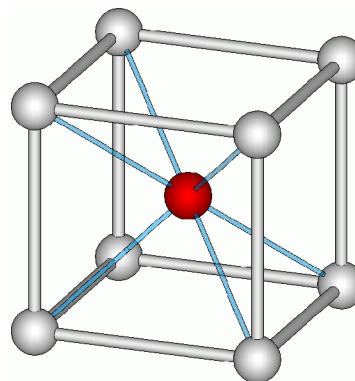
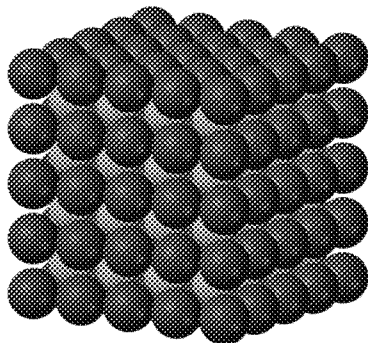
Reteaua Bravais a Li este cubica cu volum centrat avand o constanta de retea $a=3,48\text{\AA}$.

- Indicati indicii Miller ai planelor marcate in figura de mai jos;
- Reprezentati distributia atomilor pe fetele de la punctul a), presupunand ca atomii au „forma” sferica si ca sunt in contact de-a lungul directiei [111] ;
- Determinati vectorii elementari si unghiul dintre acestia pentru distributiile bidimensionale gasite la punctul b);
- Determinati concentratia atomica si densitatea masica a Li ($A(\text{Li}) \approx 7$)

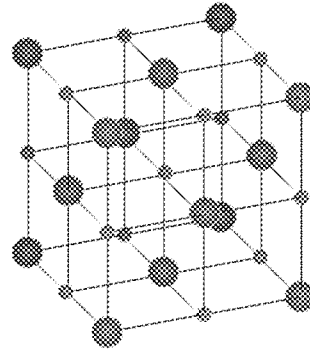
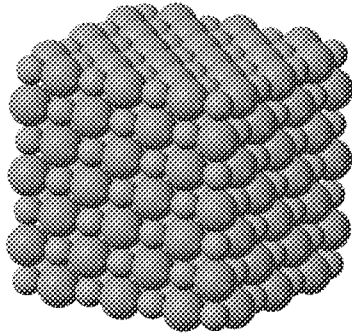


3. Structura cristalina a Si si GaAs (baza si retea)

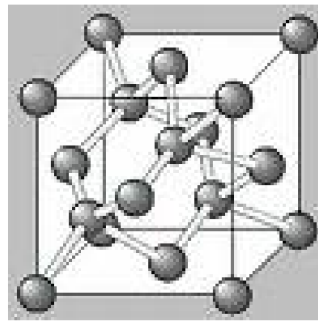
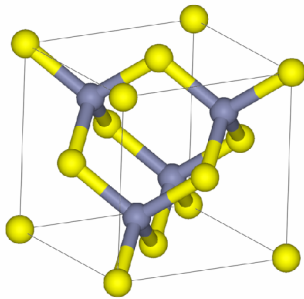
- In figura de mai jos este reprezentata structura cristalina pentru CsCl, precizati care este tipul de retea cristalina;



- In figura de mai jos este reprezentata structura cristalina pentru NaCl, precizati care este tipul de retea cristalina;



- c) In figura de mai jos este reprezentata structura cristalina pentru GaAs si Si, precizati care este tipul de retea cristalina;



4. Raze ionice si stabilitatea structurilor cristaline

In halogenurile alcaline putem asimila ionii unor sfere de raza r_+ (cation) si r_- (anion).

- Ce inegalitate trebuie sa satisfaca raportul r_+/r_- astfel incat, in retea cubica simpla de tip CsCl, ionii $+$ sa fie in contact cu ionii $-$, de-a lungul diagonalei, fara ca ionii mai mari, de acelasi semn, din colturile cubului sa se intersecteze. Care este gradul de umplere in acest caz?
- Care este inegalitatea ce trebuie satisfacuta de raportul r_+/r_- , pentru ca in structura cubica cu fete centrate de tip NaCl, ionii de semn opus situati pe directia $[100]$ sa se atinga, fara ca ionii mai mari de acelasi semn, dispusi de-a lungul directiei $[110]$, sa se intersecteze. Care este in acest caz gradul de umplere?
- Presupunem ca CsCl poate cristaliza fie intr-o structura cubica simpla a), fie intr-o structura cubica cu fete centrate b); evaluati pentru cele doua cazuri distanta de echilibru r_0 intre cei mai apropiati vecini de semn opus, latura „a” a cubului, precum si gradele de umplere corespunzatoare. Aceeasi intrebare si pentru NaCl. Discutie.

Se dau: $r_+(Na^+) = 0.98 \text{ \AA}$, $r_-(Cl^-) = 1.81 \text{ \AA}$, $r_+(Cs^+) = 1.67 \text{ \AA}$

d) Energia de coeziune, E_c , in cazul halogenurilor alcaline are urmatoarea

forma aproximativa: $E_c = (\alpha e^2 / 4\pi\epsilon_0 r_0) \left(1 - \frac{\rho}{r_0}\right)$, cu α -constanta lui

Madelung si $\rho=0.345 \text{ \AA}$. Evaluati numeric pentru CsCl raportul $\frac{E_c(c.s)}{E_c(c.f.c)}$,

a energiilor de coeziune ce corespund ipotezelor enuntate mai sus. Aceeasi intrebare pentru NaCl.

$\alpha(c.s)=1.7626$, $\alpha(c.f.c)=1.7476$