

Ar: kryštalická fáza

⑦

klasický (nehvataný) model pre Ar pri $T=0$:

minimálna potenciálna energia

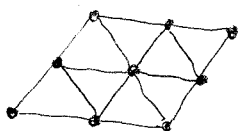
príblženie $U = \frac{1}{2} \sum_{ij} u_{ij} \rightarrow$ atómy $\approx$ bodové gule so statými
príťažlivými interakciami

optimum energie: kryštál (dokazujeme)

argument: v kryštáli sa to deje optimálne
keďže body sú v rovnováhe

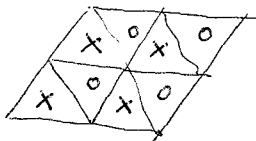
optimum v inom modeli pre Ar: kónformácia guľ-
sypse guľ do škatule.

Prvá vrstva:



... vrstva A

Druhá vrstva:



atómy sedia v jamách

3 konfigurácie = vrstva B

alebo 3 guľčikov = vrstva C

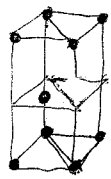
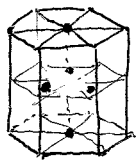
$\rightarrow$ 3 typy vrstiev A, B, C

Radenie vrstiev: 2 prípady, podľa interakcie medzi najbl. vrstvami

• rovnaké vrstvy sa priťahujú: ... ABABAB ...

• rovnaké vrstvy sa odpudzujú: ... ABCABC ...

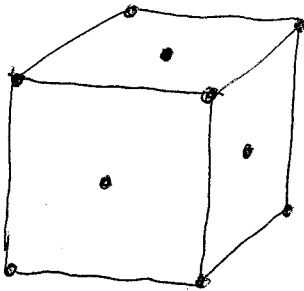
② prípad $ABAB = \text{hcp}$ (hexagonal close packed)



-- vrstva A
-- vrstva B
-- vrstva A

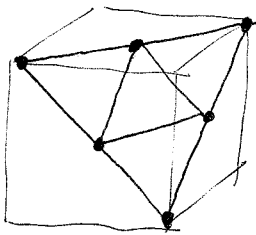
} atómy obzvlášť v jednej rade sú

prípad $ABCABC = \text{fcc}$ (face centered cubic)

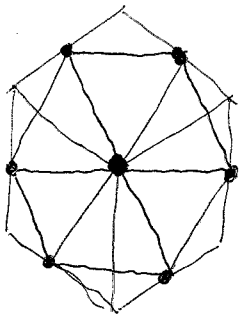


→ vrcholy kocky + stredy stien

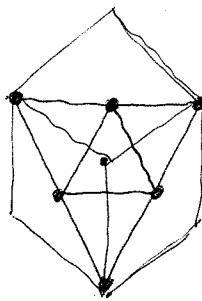
navrh, fcc mriežka obsahuje hexagonálne roviny:



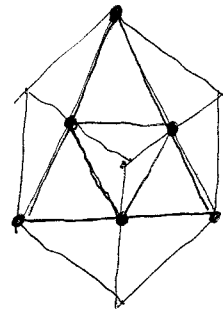
počítaj na kocke podľa klesovej uhlopriečky:



rovina A



rovina B



rovina C

atómy v rovinách A, C sú v jednej rade sú (ako v hcp)

Modelovanie interakčného plynu pomocou Lennard-Jonesových potenciálov ③

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi(R_{ij}) = \frac{N}{2} \sum_{R \neq 0} \varphi(R) \quad (\text{lebo všetky body sú ekvivalentné})$$

$$\frac{E}{N} = 2\varepsilon \sum_{R \neq 0} \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$$

keď a = vzdialenosť najbližších susedov v mriežke

$R = x \cdot a$, x = bezrozmerné

zavedieme $A_n = \sum_{x \neq 0} \frac{1}{|x|^n} \rightarrow$ charakteristika typu mriežky

Potom $\frac{E}{N} = 2\varepsilon \left[A_{12} \left(\frac{\sigma}{a} \right)^{12} - A_6 \left(\frac{\sigma}{a} \right)^6 \right]$

1) Mriežková konštanta $\frac{\partial E}{\partial a} \stackrel{!}{=} 0 \rightarrow \boxed{a = \left(\frac{2A_{12}}{A_6} \right)^{1/6} \sigma}$

2) Kohézna energia na časticu = energia v minimu

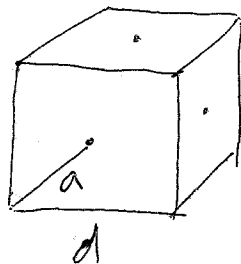
$$\boxed{\frac{E}{N} = - \frac{A_6^2}{2A_{12}} \varepsilon}$$

3) Model objemovej staviteľnosti

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} = -v \frac{\partial P}{\partial v}$$

$$P = - \frac{\partial E}{\partial V} = - \frac{\partial e}{\partial v}$$

$$\boxed{B = v \frac{\partial^2 e}{\partial v^2}}$$



$$a = \frac{d}{\sqrt{2}}$$

$$v = \frac{d^3}{4} = \frac{a^3}{\sqrt{2}}$$

lebo 4 častice v kocke d^3

$$V = v \cdot N \quad v = \text{objem / 1 častica}$$

$$E = e \cdot N \quad e = \text{energia / 1 častica}$$

$$e(v) = \varepsilon \left[\frac{A_{12}}{2} \frac{\sigma^{12}}{v^4} - A_6 \frac{\sigma^6}{v^6} \right]$$

$$\boxed{B = \frac{4\varepsilon}{\sigma^3} \frac{A_6^{5/2}}{A_{12}^{3/2}}}$$

9

Porovnanie s experimentom:

	He	Ne	Ar	Kr	Xe
ε (eV)	0,00086	0,0031	0,0104	0,0104	0,02
σ (Å)	2,56	2,74	3,40	3,65	3,98
$a/(1,09\sigma)$		1,05	1,01	1,00	1,00
$ E /(8,6\varepsilon)$		0,74	0,90	0,92	0,99
$B/(75\varepsilon/\sigma^3)$		0,61	0,85	1,01	0,95

*

porovnali sme hodnoty pre fcc miestku $A_6 \doteq 14,45$

$$A_{12} \doteq 12,13$$

Polom $a \doteq 1,09\sigma$, $E = -8,6\varepsilon$, $B = 75 \frac{\varepsilon}{\sigma^3}$

čím ľahšie porov, tým lepší súlad s experimentom!

QM korekcia: zahrniť do E energiu nulových kvintet atómov
v prípade He nulové kvintety vedú na rozloženie
kvintet!