

Räkneövningen hålls måndag 20.9. kl. 12.30 i D115.

1. Hur stor är den attraktiva kraften mellan en Ca^{2+} och en O^{2-} jon, ifall avståndet mellan dem är 1.25 nm?
2. Potentialenergin mellan två närbelägna joner kan ges som

$$E_N(r) = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^n}.$$

r är avståndet mellan jonerna medan n , A och B är specifika konstanter för materialet ifråga. Ge bindningsenergin E_0 med hjälp av konstanterna n , A och B .

3. För ett $\text{Na}^+ - \text{Cl}^-$ jonpar kan den attraktiva (E_A) och repulsiva (E_R) delen av potentialenergin ges som en funktion av avståndet mellan jonerna (r):

$$E_A(r) = -\frac{1.436}{r}$$

och

$$E_R(r) = \frac{7.32 \times 10^{-6}}{r^8}.$$

Energierna är givna i eV per jonpar och avståndet mellan jonerna är givet i nm. Potentialenergin är $E_N = E_A + E_R$.

- (a) Teckna E_N , E_A och E_R som en funktion av r i samma bild upp till 1,0 nm.
 - (b) På basis av bilden, bestäm (i) jämviktsavståndet r_0 och (ii) bindningsenergin E_0 mellan jonerna.
 - (c) Jämför resultaten i (b) med motsvarande numeriska resultat baserade på uppgift 2.
4. Anta ett endimensionellt gitter med $2N \gg 1$ joner, vilka har en alternerande laddning $\pm q$ och en repulsiv potential A/r^n mellan närbelägna joner. Visa att kohesionsenergin är

$$U = -\frac{(2 \ln 2) N q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right),$$

där r_0 är jämviktsavståndet mellan jonerna.¹

5. Ge en förklaring till varför material som uppvisar kovalent bindning ofta har en lägre densitet än material vilka uppvisar jonisk eller metallisk bindning.
6. Man kan bestämma ett ämnes kohesionsenergi t.ex. utgående från CRC:s tabell standard thermodynamic properties" (se tabellen på nästa sida). Den ger formationsenthalpier så att det termodynamiska grundtillståndet för varje ämne vid rumstemperatur har värdet 0. Negativa värden anger bundna tillstånd. För föreningar ges värden som referens till grundtillståndet av grundämnena. Bestäm med hjälp av CRC:s tabeller kohesionsenergin för (a) Ga, (b) As, (c) Si, (d) GaAs, (e) SiO_2 , (f) Ga_2O_3 i enheter av eV/atom. Tips: kom ihåg att även för föreningar bör jämförelsen göras med avseende på de fria atomerna i gasfasen.

¹Tips: $\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} (x^n/n)$

Molecular formula	Name	Crystal					Liquid					Gas				
		$\Delta_f H^\circ$ kJ/mol	$\Delta_f G^\circ$ kJ/mol	S° J/mol K	C_p J/mol K	$\Delta_f H^\circ$ kJ/mol	$\Delta_f G^\circ$ kJ/mol	S° J/mol K	C_p J/mol K	$\Delta_f H^\circ$ kJ/mol	$\Delta_f G^\circ$ kJ/mol	S° J/mol K	C_p J/mol K	$\Delta_f H^\circ$ kJ/mol	$\Delta_f G^\circ$ kJ/mol	S° J/mol K
As	Arsenic (gray)	0.0		35.1	24.6				302.5	261.0	174.2	20.8				
As	Arsenic (yellow)	14.6														
AsGa	Gallium arsenide	-71.0	-67.8	64.2	46.2											
Ga	Gallium	0.0	0.0	40.8	26.1	5.6			272.0	233.7	169.0	25.3				
Ga ₂ O ₃	Gallium(III) oxide	-1089.1	-998.3	85.0	92.1											
O	Oxygen (atomic)								249.2	231.7	161.1	21.9				
O ₂ Si	Silicon dioxide (α -quartz)	-910.7	-856.3	41.5	44.4											
Si	Silicon	0.0		18.8	20.0				-322.0	450.0	405.5	168.0	22.3			