УДК 531.19; 538.911

Студ. А.А. Кулеш, студ.Л.Н. Протасеня, студ. И.В. Шевчик
Науч. рук. проф. И.И. Наркевич, ст. преп. Е.В. Фарафонтова
(кафедра физики, БГТУ)

РАЗРАБОТКА ЭЛЕКТРОСТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ИОННОГО КРИСТАЛЛА

В работе разрабатываются основные положения электростатической модели ионного кристалла на примере макроскопического монокристалла NaCl, которые базируются на следующих четырех исходных положениях:

1. Ионы Na^+иCl^-рассматриваются как материальные точечные заряды, находящиеся в непрерывном хаотическом движении в окрестности узлов простой кубической решетки.

2. Амплитуды колебаний катионов и анионов имеют разные значения ($A_{Na} \neq A_{Cl}$).

3. Предполагается, что заряды ионов равномерно распределены внутри сфер с радиусами, равными их амплитудам колебаний, значения которых составляют порядка 10% от параметра кристаллической решетки.

4. Взаимодействие между точечными зарядами ионов описывается с помощью закона Кулона.

В качестве первого шага рассчитываются объемы шаров в сферической системе координат. Это позволяетв качестве второго шага, записать выражение для потенциальной энергии взаимодействия иона одного знака (q_1) с ионом другого знака (q_2), заряд которого равномерно распределен в соответствующем сферическом объеме радиуса R, центр которого находится на расстоянии r от фиксированного заряда q_1 ($r > R$).

Объем шара радиуса R сферической системы координат рассчитывается по формуле:

$$V = \int_V dV = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \int_0^{\theta_{\max}} \int_0^{2\pi} x^2 \sin\theta d\theta d\varphi dx, \quad x_{\max} = x_{\min} + 2R. \tag{1}$$

Потенциальная энергия взаимодействия фиксированного заряда q_1 с элементарным зарядом dq_2 в объеме dV внутри шара радиуса R определяется:

$$d\Pi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{q_1\, dq_2}{x}. \tag{2}$$

Учитывая свойство аддитивности, рассчитывается полная потенциальная энергия точечного заряда q_1 с зарядомq_2 равномерно распределенным в объеме шара радиуса R ($\rho_2 = q_2/V_2$ – объемная плотность заряда):

$$\Pi(r,\theta,\varphi) = \frac{q_1}{4\pi\varepsilon_0} \int_V \frac{\rho_2}{x} dV = \frac{q_1\rho_2}{4\pi\varepsilon_0} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} x dx \int_0^{\theta_{\max}} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \tag{3}$$