

תרגיל 1

(א) אם היון הגדול נמצא בראשית, עם הרדיוס $r_>$, אז היון השכן (שמטענו הפוך ושרדיוסו $r_<$) נמצא בנקודה $(1/4, 1/4, 1/4) \cdot a$. אם הם משיקים זה לזה אז המרחק ביניהם שווה לרבע אלכסון הקוביה,

היון הגדול יותר גם במרכז (זהו סריג $R_0 = r_< + r_> = a\sqrt{3}/4$. כל פאה של תא היחידה מכילה את

(FCC), ולכן אלכסון הפאה חייב לקיים $a\sqrt{2} > 4r_>$. מכאן, $r_>/r_< < 2 + \sqrt{6} \approx 4.45$.

(ב) במבנה מלח הבישול, כאשר $2.414 < r_>/r_<$, שני היונים בעלי המטענים ההפוכים אינם יכולים להשיק זה לזה. במקום זה, היונים השליליים הגדולים משיקים זה לזה, ולכן המרחק בין

היונים במבנה מלח הבישול עובר מ- $R_0 = r_< + r_>$ אל מחצית קבוע הסריג, $R_0 = a/2 = \sqrt{2}r_>$. כתוצאה,

האנרגיה הקולומבית של המבנה הזה עוברת להיות $-N\alpha_{NaCl}q^2/(\sqrt{2}r_>)$. לחילופין, האנרגיה במבנה של

צינן בלנדה היא $-N\alpha_{ZB}q^2/(r_> + r_<)$. אנרגיה זו האחרונה "פנצחת" רק כאשר

$r_>/r_< > 1/[(\alpha_{ZB}/\alpha_{NaCl})\sqrt{2} - 1] \approx 3.047$. בטווח $2.414 < r_>/r_< < 3.047$ ימשיך להתקיים המבנה של מלח

בישול אלא אם כן יוכנסו שיקולים נוספים. ואכן, לגביש של מגנזיום גופרתי (MgS) יש מבנה של

מלח בישול, אף על פי שקיים עבורו $r_>/r_< \approx 2.83 > 2.414$.

(א) המרחק בין היונים שווה לרבע האלכסון, $R_0 = a\sqrt{3}/4 \approx 2.35 \text{ \AA}$

(ב) באריזה צפופה, אלכסון הפאה שווה ל-4 רדיוסי היון הגדול, ולכן $r_> = a\sqrt{2}/4 \approx 1.92 \text{ \AA}$. סכום

הרדיוסים שווה למרחק בין היונים השכנים, ולכן $r_< = R_0 - r_> \approx 0.43 \text{ \AA}$. היחס בין הרדיוסים הוא לכן

$$r_>/r_< = 2 + \sqrt{6} \approx 4.45$$

4.47, קרוב אך מעט מעל לערך הגבולי

(ג) במבנה הוורצית, כמו במבנה הצינקה בלנדה, יוני האבץ מפלאים את החלל במרכז הטטרהדרון שנוצר על ידי יוני הגופרית. הצלע של הטטרהדרון הזה היא קבוע הסריג a של סריג ה-HCP. לכן,

גם מתקיים מושלם, שהסריג כיון $a = R_0\sqrt{8/3} \approx 1.633R_0 \approx 3.84 \text{ \AA}$

(ד) תא היחידה הקובי מכיל ארבע יחידות בסיסיות, ולכן $c = a\sqrt{8/3} = 8R_0/3 \approx 1.633R_0 \approx 6.27 \text{ \AA}$

הנפח לכל יחידה הוא $a^3/4 \approx 40(\text{\AA})^3$. תא היחידה במבנה ההכסגונלי מכיל שתי יחידות בסיסיות, ולכן

הנפח ליחידה הוא $a^2c\sqrt{3}/4 \approx 40(\text{\AA})^3$. כיון ששני המבנים מהווים אריזות צפופות, אין להתפלא שקיבלנו תשובות זהות עבור הצפיפויות שלהם (ראו גם שאלה 2.6.1).