**Лекция 2. Кристаллдық тор энергиясы. Кристаллдық тор энергиясын есептеу үшін Борн моделі.**

**Мақсаты**: студенттерге қатты заттардың кристалдық тор энергиясын есептеудің негізгі әдістерін таныстыру

**1Кристалдық тор энергиясы (Борн әдісі)**

**1.2 Есептеудің негізгі теңдеуін шығару**

Иондық еріткіштердегі иондық қосылыстардың (тұздардың) тәртібі еріген заттың да, полярлы еріткіштің де табиғатына тәуелді. Кристалдық тор энергиясы иондық қосылыстың маңызды сипаттамасы болып табылады.

Кристалдық тор энергиясы кристалл құрамындағы иондарда бір-бірінен шексіз үлкен қашықтыққа ажыратуға жұмсалатын жұмыс. Кристалл тор энергичсын зерттелетін заттың бір моліне есептейді. Бұл энергияны бағалау үшін М. Борн ұсынған әдісті қолданайық. Бір-бірінен r қашықтықта орналасқан және z1e0, z2e0 абсолютті зарядтары бар кристалл торының қабырғасында орналасқан екі қарама-қарсы ионды қарастырайық. Осы иондардаң арасындағы электростатикалық әрекеттесу (тартылыс) күшін Кулон заңымен анықтауға болады:

 (1)

мұнда ε0 – диэлектрлік тұрақтылық, ол 0,88542\*10-11 Ф/м-ге тең.

Бірінші ион r=0 бағытында бекітілген, ал Fэл күші екінші ионға бірінші ион бағытында әсер етеді деп болжауға болады (1-сурет).

Fэл күшінің бағыты r өсінің бағытына қарама-қарсы болғандықтан, Fэл<0 болады. Электрондық қабаттардың әрекеттесуімен анықталатын және иондардаң бір-біріне шексіз жақындауын болдырмайтын Fтеб тебіліс күші де иондарға әсер етеді.



**1-сурет. Екі ион әрекеттесуі потенциалдық энергиясының өзгеруі**

Fтеб күші де екінші ионға берілсін. Бұл күштің бағыты r өсінің бағытымен бірдей болса, онда Fтеб>0. Fтеб-ін мына түрде көрсетуге болады:

 (2)

мұнда В және n - тұрақтылар, n>1.

Иондар әрекеттесуінің жалпы күші (3)-теңдеу түрінде жазылады:

 (3)

Анықтама бойынша, F=-dU/dr, мұнда U – жүйенің потенциалдық энергиясы. Сондықтан, F шамасын кристалдық тордығы иондардың арасындағы тепе-теңдік арақашықтықтан (r0) -ге дейін интегралдау арқылы қарастырылған екі ионды шексіз үлкен қашақтыққа жіберумен тең (1-сурет.) ΔU потенциалдық энергияның өзгерісін табамыз:

 (4)

Тепе-теңдік жағдайда r=r0,F=0 болғандықтан В константасын (3)-теңдеу арқылы есептеп табуға болады. Демек, және (4)-теңдеуді мына түрде беруге болады:

 (5)

(5)-теңдеу иондардың бір жұбы үшін алынған. Заттың 1 моліне есептелген кристалдық тор энергиясын табу үшін ΔU-ін NA Авогадро санына көбейту және барлық иондардың тордың көлемінде өзара орналасуымен анықталатын әрекеттесулерін ескеру қажет. Ал бұл тағы бір А көбейткішті кіргізумен бірдей. А – Моделунг тұрақтысы, ол кристалдың геометриясы мен типін және иондардың өзара әсерлерін ескеретін шама. Мысалы, натрий хлориді үшін А=1,7476.

Сөйтіп, кристалдық тордың еркін энергиясын оны түзетін иондардың әрекеттесуінің потенциалдық энергиясымен байланыстыратын Борн әдісі мына теңдеуді береді:

 (6)

Рентгеноструктуралық талдау кристалдардың геометриясын және А мен г0 параметрлерін анықтауға мүмкіндік береді. n тұрақтысы кристалл сығылуы туралы мәліметтерден анықталады:

 (7)

мұнда β - сығылу коэффициенті. NaCl үшін n=7,5; басқа тұздар үшін n мәні 5-12 аралығында жатады.

(6)-теңдеу бойынша натрий хлориді үшін есептелген кристалдық тор энергиясы ΔG=762 кДж/моль. Осындай шамалар басқа да тұздар үшін алынады [1].