

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3

ЦЕЛЬ РАБОТЫ: для заданного ионного вещества определить свойства кристалла и молекулы

ЗАДАЧИ:

1. Для кристалла рассчитать:
 - Равновесное расстояние R_0 (как сумму ионных радиусов)
 - Отношение R_0/ρ ;
 - Константы ρ и λ ;
 - Значение энергии Маделунга;
 - Энергию кристаллической решетки;
 - По циклу Борна-Габера определить энергию кристаллической решетки и относительную погрешность ее определения;
2. Для молекулы рассчитать (используя значения констант ρ и λ , полученные для кристалла):
 - Равновесное расстояние R_1 ;
 - Отношение R_1/ρ ;
 - Значение энергии связи в молекуле;
 - По циклу Борна-Габера определить энергию связи в молекуле и относительную погрешность ее определения;
 - Степень ионности связи (через значения дипольного момента)
3. Построить график зависимости энергии кристаллической решетки и энергии связи в молекуле в безразмерных координатах.
4. Сопоставить полученные данные со справочными величинами