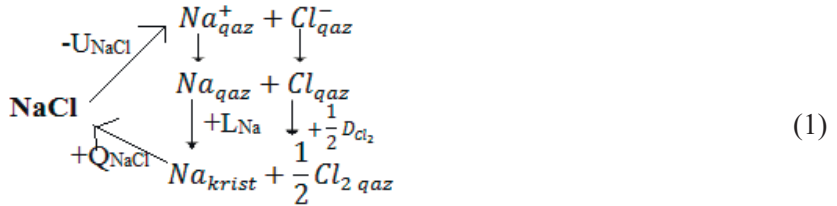


## NaCl KRİSTALININ İLİŞMƏ ENERJİSİNİN HESABLANMASI VƏ DISSOSASIYA ENERJİSİNİN TƏYİNİ

Ş.A.Axundova, A.K.Orucov \*  
Bakı Dövlət Universiteti, Fizika fakültəsi, II kurs

İon kristalı üçün ilişmə enerjisi-U, kristalın əmələgəlmə Q-enerjisinə bərabər deyil, lakin ondan tapıla bilər. Bunun üçün Born və Qaber [1] təklif etdiyi dairəvi prosedən istifadə etmək olar.



Prosesin birinci mərhələsində kristal ion qazına ayrılır. Bunun üçün kristalın  $U_{\text{NaCl}}$  enerjisi qədər enerji tələb edilir. Sonra ion qazının atomar Na və Cl qazına çevrilməsi baş verir. Bu zaman Na atomunun ionlaşma potensialına bərabər  $+J_{\text{Na}}$  enerjisi ayrılır. Cl atomu üçün isə elektronun hərislik enerjisi qədər  $-\varepsilon_{\text{Cl}}$  enerji udulur. Daha sonra isə Na buxarlarının kondensasiya edərək metallik Na əmələ gətirməsinə və 2 atomlu Cl molekulunun yaranmasına baxılır. Hər 2 proses enerjinin ayrılması ilə müşayiət olunur. Na üçün bu enerji kristalın sublimasiya istiliyinə  $+L_{\text{Na}}$  enerjisinə və molekulyar Cl-un dissosiasiya enerjisinin yarısına bərabər olurlar. Prosesin sonu standart şəraitdə götürülmüş komponentlərdən NaCl kristalının əmələ gəlməsi prosesi olur. Bu zaman

NaCl-un əmələ gəlmə istiliyinə bərabər qədər enerji ayrılır  $+Q_{\text{NaCl}}$ . Buradan,

$$U_{\text{NaCl}} = Q_{\text{NaCl}} - \varepsilon_{\text{Cl}} + \frac{1}{2} D_{\text{Cl}_2} + J_{\text{Na}} + L_{\text{Na}} \quad (2)$$

(2) ifadəsində sağ tərəfdəki bütün hədlər məlumdur. Bu imkan verir ki, ion kristalının enerjisini eksperimental təyin etmək mümkün olsun.

Cədvəldə NaCl r üçün enerjinin hesablanmış qiymətləri verilmişdir.

Kristal	U, erq/mol·10 <sup>-12</sup>					U, kkal/mol	
	-Ae <sup>2</sup> /r	C/r <sup>6</sup>	Be <sup>-r</sup> /ρ	ε <sub>0</sub>	U	hesablanmış	Təcrübi eksperiment
NaCl	-14.18	-0.20	+1.63	+0.12	-12.63	-183.1	-181.3

Bu hesablamalarda ionların Kulon qarşılıqlı təsir enerjini, eləcə də Van-der-Vals cəzibmə enerjisi  $c/r^6$ , itələmə enerjisi və sıfırıncı  $\varepsilon_0$  enerjisi nəzərə alınmışdır. Axırncı 2 sütunda hesablamadan və təcrübədən tapılmış qiymətlər verilmişdir.

Bir sıra alimlər, məsələn, A.E. Feresman və A.F. Kapustinski ion kristalının enerjisinin qiymətinin tapılmasına dair sadələşmiş düstur təklif etmişlər. A.F. Kapustinski

$$U_0 = -\frac{Z_1 Z_2 e^2 Na}{r_1} \left( 1 - \frac{1}{n} \right) \quad (3)$$

(3) ifadəsinin köməyi ilə aşağıdakı düsturu vermişdir:

$$U_0 = -287.2 \frac{\sum mZ_1Z_2}{r_A + r_k} \left( 1 - \frac{0.345}{r_A + r_k} \right)$$

$r_A$  və  $r_k$ - ionların radiusları,  $z_1$  və  $z_2$ - isə onların yük ədədləridir.

Atomlardan ion əmələ gəlməsi enerjisi ionlaşma enerjisi ilə hərislik enerjilərinin cəbri cəmi kimi müəyyən edilir. Aşağıda NaCl molekulundan ion əmələ gəlməsi göstərilmişdir:

$$Na + Cl \begin{cases} Na^+ + Cl^- = -5.1 + 3.7 = -1.4eV \\ Na^- + Cl^+ = +0.2 - 13.0 = -12.8eV \end{cases}$$

Hər iki halda ionlar bir-birinə  $2.5 \text{ \AA}$  -ə qədər yaxınlaşdıqda Kulon qarşılıqlı təsir enerjisi eyni olur və

$$U = eV = \frac{e^2}{r} = e \frac{4.8 \cdot 10^{-10}}{2.5 \cdot 10^{-5}} SQSE = 1.9 \cdot 10^{-16} SQSE = 5.7eV$$

olur. NaCl üçün enerjinin bu qiyməti spektroskopik təcrübədə tapılmış qiymətlə eynidir. Bu enerji birinci halda ionların əmələ gəlməsi işindən çoxdur, ikinci halda isə kifayət qədər azdır. İon molekulu neytral atomlara parçalanmaya nəzərən dayanıqsızdır.  $Na^+Cl^-$  ion molekulunun neytral atomlara dissosiasiya enerjisi 4.6 eV olur. Nəzəri şəkildə hesablanmış bu enerjiləri səthi ionlaşma hadisəsinə görə də tapmaq mümkündür. Səthi ionlaşma dedikdə, yüksək temperaturalara qədər qızmış metalın səthində, molekulların dissosiasiya edərək ionlaşması və yaxud atomların ionlaşması başa düşülür. [2]

Metalın səthinə düşən molekulun dissosiasiya enerjisindən molekulun komponentlərinin ionlaşma enerjisindən, səthin çıxış işindən və s. asılıdır. Burada baxılan enerjiləri təyin etmək üçün Şottki tsiklindən istifadə edilir. Şottki tsiklində əgər səthə adsorbsiya etmiş atomun və ya molekulun buxarlanma istilikləri məlum olarsa, onda ionlaşma enerjisini və molekulun dissosiasiya enerjisini tapmaq olar. [2]-də alınan nəticələrdən istifadə edərək NaCl molekulu üçün dissosiasiya enerjisi komponentlərin ionlaşma enerjiləri və adsorbsiya desorbsiya sürətlərini ifadə edən əmsallar, o cümlədən tezlik faktoru da hesablanmışdır.

### **Ədəbiyyat**

1. Оруджов А. К. Диссоциация молекул NaCl на поверхности рения и рения с углеродным покрытием. Вестник БГУ, серия физ-мат.наук, 2005, № 4, с.36-40
2. Жданов Г.С. Физика твердого тела. М., 1962, 498 с.