

# Энергия Маделунга

$$U_{ij} = \left\{ \begin{array}{l} \lambda \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) - \frac{q^2}{R} \quad \text{для ближайших пар ионов} \\ \pm \frac{1}{p_{ij}} \frac{q^2}{R} \quad \text{для всех других пар ионов} \end{array} \right\}$$

## Постоянная Маделунга

$$\alpha_m = \sum_j \frac{(\pm)}{p_{ij}}$$

## Энергия кристаллической решетки из $2N$ ионов

$$U = -\frac{N\alpha_m q^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

6  
6  
6  
6