

Tesis de Posgrado

Estudio teórico de propiedades anarmónicas de sólidos

Fracchia, Ricardo Mario

1995

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Químicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Fracchia, Ricardo Mario. (1995). Estudio teórico de propiedades anarmónicas de sólidos. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2726_Fracchia.pdf

Cita tipo Chicago:

Fracchia, Ricardo Mario. "Estudio teórico de propiedades anarmónicas de sólidos". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1995.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2726_Fracchia.pdf

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

**Estudio Teórico de Propiedades
Anarmónicas de Sólidos**

Autor:
Ricardo Mario Fracchia

Directora de Tesis:
Dra. Alicia Batana

Lugar de trabajo:
Grupo de Química Teórica
Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires
Pabellón 2 - Ciudad Universitaria - Buenos Aires

Tesis presentada para optar al título de
Doctor de la Universidad de Buenos Aires

-1995-

A Ruth.

Deseo expresar mi agradecimiento a:

mi Directora, la Dra. Alicia Batana, por su confianza, su paciencia, sus enseñanzas y su estímulo.

mis compañeros del Grupo de Química Teórica durante estos años de trabajo:

Inés (Dra. I. Gómez)

Rosario (Dra. M. R. Soriano)

Alejandro (Lic. A. D. Castillo)

Gustavo (Dr. G. D. Barrera)

Lorena (Dra. L. Tribe)

Jorge (Dr. J. A. O. Bruno)

Guillermo (Lic. G. D. Guberman)

Doris (Dra. D. A. J. Barbiric)

Pablo (Lic. E. P. Isoardi)

Daniel (Lic. D. Bacelo)

por la ayuda permanente, la generosidad de todos los días, la alegría de los buenos momentos y el apoyo incondicional.

mis compañeros del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física por su ayuda, su buena predisposición, su comprensión y su afecto.

Índice General

1	Introducción	1
1.1	Antecedentes	1
1.2	Algunas consideraciones generales	4
1.3	Objetivos del trabajo	6
2	Potenciales de interacción	9
2.1	Potencial electrostático	9
2.2	Potencial de van der Waals	10
2.3	Potencial de repulsión	13
2.4	Parametrización de los potenciales	18
3	Propiedades dieléctricas	20
3.1	La constante dieléctrica	20
3.2	Las relaciones de Szigeti	21
3.2.1	La carga iónica efectiva	28
3.3	Relaciones de Szigeti Ampliadas a altas presiones	31
3.3.1	El parámetro de Grüneisen γ_t	32
4	Modelos	34
4.1	Aproximación dipolar	34
4.2	Modelo de ion rígido	34
4.3	Modelo de dipolos de deformación	35
4.4	Modelo de capas	37
4.5	Modelo de cargas de intercambio	41
4.6	Parámetros de los modelos de capas	44
5	Formalismos desarrollados	46
5.1	Parámetros de los potenciales	46
5.1.1	Potencial de solapamiento extendido a primeros vecinos	46
5.1.2	Potencial de solapamiento extendido a segundos vecinos	49
5.1.3	Energía de red. Variación de la compresibilidad con la presión.	50
5.2	Variación de la carga efectiva con el volumen	50
5.2.1	Modelo de dipolos de deformación	50
5.2.2	Modelos de capas	52
5.3	Obtención del parámetro D para la estructura tipo CsCl	52
5.4	Formalismos a altas presiones	55

5.5	Obtención de γ_t con los modelos de capas	58
6	Parte Computacional	59
6.1	Descripción de los programas	59
7	Resultados	87
7.1	Discusión de los resultados	87
7.1.1	Influencia de la forma del potencial	87
7.1.2	Comparación entre los modelos de capas	89
7.1.3	Importancia de los términos de van der Waals	91
7.1.4	Influencia de la parametrización	92
7.1.5	Inclusión de la interacción a segundos vecinos	96
8	Conclusiones	105
	Apéndice a	108
	Aspectos experimentales relacionados	108
	Propiedades ópticas	108
	Propiedades elásticas	110
	Propiedades dieléctricas	114
	Apéndice b	115
	Datos experimentales	115
	Apéndice c	123
	Salidas de programas.	123
	Bibliografía y Referencias	204

Índice de Tablas

2.1	Valores de los parámetros de van der Waals C y D	12
2.2	Formas de potencial de repulsión entre primeros vecinos.	16
3.1	Valores de la carga efectiva de Szigeti s	31
3.2	Valores experimentales de γ_t .	33
4.1	Parámetros de los modelos de capas.	45
7.1	W_L calculado con siete formas de potencial de repulsión.	87
7.2	$\partial B_t / \partial p$ calculado con siete formas de potencial de repulsión.	88
7.3	γ_t calculado con siete formas de potencial de repulsión.	88
7.4	$1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0 / \partial p$ calculado con siete formas de potencial de repulsión.	89
7.5	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0 / \partial p^2$ calculado con siete formas de potencial de repulsión.	89
7.6	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0 / \partial p^3$ calculado con siete formas de potencial de repulsión.	90
7.7	Comparación entre los modelos de capas (LiF).	90
7.8	Comparación entre los modelos de capas (KBr).	90
7.9	Comparación entre los modelos de capas (CsCl).	91
7.10	Influencia de los términos de van der Waals en el potencial.	91
7.11	Variación de los resultados con los datos de entrada (LiCl).	92
7.12	Variación de los resultados con los datos de entrada (TlBr).	93
7.13	Comparación entre las aproximaciones (I).	94
7.14	Comparación entre las aproximaciones (II).	95
7.15	Comparación entre potenciales a segundos vecinos (LiF).	96
7.16	Comparación entre potenciales a segundos vecinos (KCl).	96
7.17	Comparación entre potenciales a segundos vecinos (RbI).	97
7.18	Comparación entre potenciales a segundos vecinos (CsI).	97
7.19	$\partial B_t / \partial p$	98
7.20	$1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0 / \partial p$	99
7.21	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0 / \partial p^2$	100
7.22	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0 / \partial p^3$	101
7.23	γ_t	102
7.24	$\partial \ln s / \partial \ln V$ calculado a través del modelo de dipolos de deformación.	103
7.25	$\partial \ln s / \partial \ln V$ calculado a través del modelo de cargas de intercambio.	104
10.1	Valores experimentales de la distancia interiónica.	115
10.2	Valores experimentales de la compresibilidad.	116
10.3	Valores experimentales de ϵ_0 y ϵ_∞ .	117

10.4	Valores experimentales de la derivada primera respecto de V de ϵ_0	118
10.5	Valores experimentales de la derivada primera respecto de p de ϵ_0	119
10.6	Valores experimentales de las derivadas de orden superior de ϵ_0	119
10.7	Valores experimentales de la derivada primera respecto de V de ϵ_∞	120
10.8	Valores experimentales de la frecuencia de vibración en el infrarrojo ω_t	121
10.9	Valores experimentales de W_L y $\partial B_t/\partial p$	122

Capítulo 1

Introducción

1.1 Antecedentes

Los haluros alcalinos han sido una de las clases de sólidos más extensamente estudiados tanto desde el punto de vista teórico como experimental. Los primeros intentos de comprender propiedades como sus energías de cohesión teóricamente, datan de los primeros días de la física del estado sólido, específicamente a partir del trabajo de Born y su escuela a comienzos de 1912. De hecho, el cloruro de sodio fue una de las sustancias estudiadas por Von Laue y colaboradores por difracción de rayos X [1] y fue en consecuencia uno de los primeros materiales para los cuales se estableció que poseían una estructura periódica; esta periodicidad es una de las bases fundamentales de la física del estado sólido moderna.

El modelo más antiguo de estos cristales, desarrollado por Born, los consideraba como formados por un conjunto de iones puntuales (positivos y negativos) que no colapsaban bajo su propia atracción coulombica debido a la presencia de interacciones repulsivas de corto alcance que en su forma más simple estaban limitadas a actuar entre vecinos más próximos [2, 3]. Este esquema fue particularmente exitoso por dar cuenta de las energías cohesivas de estos materiales y hasta tuvo su justificación mecanocuántica gracias al trabajo de Löwdin [4]. Sin embargo, este esquema no es adecuado, cuando se desea discutir el comportamiento dinámico de estos materiales. La razón es la siguiente: cuando la red se distorsiona arbitrariamente, los iones dejan de estar en sus posiciones de equilibrio con simetría cúbica y adquieren momentos multipolares, de los cuales el más importante es el componente dipolar. La clave del trabajo teórico en estos cristales es tener en cuenta esta distorsión electrónica.

El primer trabajo extensivo sobre la dinámica de cualquier cristal iónico fue llevado a cabo por Kellermann en 1940 [5] desarrollando lo que se conoció más tarde como el modelo de ion rígido. Su tratamiento se basó en el modelo simple de Born, y tomó en cuenta la naturaleza de largo alcance de las interacciones coulombicas en estos materiales y su efecto sobre la dinámica de la red; esta interacción coulombica aparece, en la energía cohesiva a través del término de Madelung [3]. Cuando la red se distorsiona, los iones desplazados pueden representarse aproximadamente por dipolos localizados en los sitios de la red perfecta. En el cambio de energía aparece, entonces, una interacción dipolo-dipolo sumada sobre todos los sitios en el cristal. No está permitido truncar esta suma en ningún

punto del cristal ya que la interacción es de largo alcance y la suma es condicionalmente convergente. Por lo tanto, dicha suma debe realizarse sobre el cristal completo, lo cual hizo Kellermann utilizando una técnica propuesta en primera instancia por Ewald [6] para el cálculo de la energía de Madelung, extendida al cálculo de la suma dipolo-dipolo.

Además de proveer una forma de calcular efectivamente los coeficientes de acoplamiento de Coulomb para cualquier tipo de distorsión de la red, la técnica brindó los medios para mostrar explícitamente la relación entre la teoría de redes y la teoría dieléctrica macroscópica en el caso de las vibraciones “ópticas” de la red a longitudes de onda muy largas. Esto puede comprenderse mejor como vibraciones moleculares extendidas en las cuales los iones positivos y negativos se mueven en oposición de fases. Es crucial para este argumento que, aunque dicho movimiento debe permanecer casi uniforme hasta distancias del orden de las separaciones interiónicas, tiene no obstante, una onda portadora modulada cuya longitud de onda es pequeña en comparación con las dimensiones del cristal (si este no fuera el caso, los modos del sistema se volverían dependientes de la geometría del espécimen considerado).

Por otra parte, las aproximaciones efectuadas en este modelo hacen que el mismo no pueda dar cuenta de la violación de las relaciones de Cauchy [7], la dispersión de fonones [8], la polarización [9], la carga efectiva de Szigeti [10, 11] y los modos de vibración óptica con longitudes de onda muy largas [12].

Las evidencias circunstanciales hicieron que muchos autores creyeran que las deficiencias mencionadas del modelo de ion rígido podrían mejorarse considerando que los iones constituyentes del cristal son deformables y polarizables. Esto dio lugar al desarrollo de varios modelos teóricos cuyas características más salientes podrían visualizarse si se los clasifica en tres categorías: modelos fenomenológicos, modelos semimicroscópicos y modelos microscópicos. Los más importantes y simples entre los primeros incluyen a dos modelos muy relacionados entre sí: el modelo de capas desarrollado especialmente por Cochran [13] y el modelo de dipolos de deformación debido a Hardy [14]. Entre los segundos podemos mencionar a los desarrollados por Zeyher [15] y Basu y Sengupta [16]. Entre los últimos se incluyen modelos desarrollados sobre la base de consideraciones fundamentales de la mecánica cuántica [17, 18, 19, 20].

La literatura indica que el modelo de capas y de dipolos de deformación han sido utilizados extensamente para el estudio de la dinámica de redes de sólidos binarios [21]. En general, ambos modelos asumen que las capas electrónicas de los iones pueden sufrir deformaciones y/o desplazamientos relativos a sus “carozos” internos. En el esquema del modelo de dipolos de deformación [14], las capas electrónicas no se desplazan como un todo, pero existe una cierta redistribución de cargas en las nubes electrónicas deformadas. En el modelo de capas rígidas se considera el desplazamiento relativo capa-carozo pero no su deformación y tiene en cuenta un efecto de distorsión introducido a través de fuerzas de solapamiento de corto alcance. Esto constituye la mayor diferencia entre ambos modelos. Sin embargo, ambos no dan cuenta de la violación de las relaciones de Cauchy y los modos de fonones ópticos longitudinales a lo largo de la dirección $\langle 111 \rangle$.

En vista de esto, se desarrollaron modelos de capas mejorados permitiendo la inclusión del efecto de deformación de las capas electrónicas. Además se trató de explicar las

violaciones de las relaciones de Cauchy y la carga efectiva de Szigeti. El primero de estas características fue propuesto por Vetelino y Mitra [22] y se denominó modelo de ion rígido modificado. Incluía interacciones de corto alcance centrales y no-centrales y cargas iónicas efectivas (según el concepto de Szigeti). En conjunto requería cinco parámetros. Se aplicó con relativo éxito a sólidos con estructuras tipo NaCl [23], CsCl [24] y ZnS [22] para predecir las curvas de dispersión de fonones y propiedades termofísicas asociadas. Los resultados fueron comparables a los obtenidos por un modelo de capas rígidas de 9 parámetros [25] y un modelo de dipolos de deformación con 11 parámetros [26].

Para explicar las violaciones a las relaciones de Cauchy se propusieron otros modelos. Lundqvist [27] desarrolló un modelo expresando la energía potencial del cristal basado en formalismos debidos a Löwdin bajo un esquema de Heitler-London. La suposición básica del modelo es que el solapamiento de las funciones de onda atómicas introducen un potencial de muchos cuerpos cuyo origen se ha asociado a un cambio en la función de densidad electrónica del cristal. Dicho cambio causa una depresión de carga en la región de solapamiento, la cual a su vez depende de la separación internuclear e interactúa con el resto de las cargas a través de la ley de Coulomb lo cual conduce a interacciones de muchos cuerpos.

La inclusión de tales interacciones en el ámbito del modelo de ion rígido dio lugar a un modelo de ión rígido con fuerzas de tres cuerpos. Este modelo dio resultados acordes con el experimento en lo referido a la violación de las relaciones de Cauchy, en tanto no ocurrió lo mismo con las cargas efectivas de Szigeti, siendo estas últimas menores que las obtenidas con dicho modelo.

Maradudin desarrolló un modelo que introducía al modelo de ion rígido interacciones no-centrales bajo la forma de fuerzas angulares de plegado, las cuales resisten cualquier cambio en los ángulos de unión de 90° entre dos primeros vecinos cualesquiera de un ion. Más tarde, el efecto de estas fuerzas fue incorporado por Jaswal y Hardy [28] y Cunningham [29] en el tratamiento formal de la dinámica de redes cristalinas. Este modelo presentó deficiencias similares que el modelo de ion rígido en cuanto al ajuste de la polarización electrónica.

Entre los modelos microscópicos, además del ya mencionado debido a Lundqvist, podemos incluir a otro debido a Tolpygo y Mashkevich [30]. En este modelo, cada ion es considerado como consistente en un carozo no polarizable unido a una capa esférica compuesta por los electrones más externos. La energía potencial de la red se expresó como una función cuadrática de los desplazamientos nucleares y los momentos dipolares atómicos. Las ecuaciones de movimiento del modelo fueron derivadas de la manera usual empleando las aproximaciones armónica y adiabática. Las expresiones formales resultantes fueron tan complicadas que el modelo debería parametrizarse para tener aplicación práctica. En este último caso, el modelo resultante es completamente equivalente al modelo de capas rígidas tal como fue demostrado por Cowley [134]. La aplicabilidad del modelo de Tolpygo y Mashkevich fue estudiada por Demidenko y colaboradores [32] mediante el cálculo de relaciones de dispersión de fonones en aislantes (NaI, KBr) y semiconductores (Ge). En vista de los cálculos complicados involucrados en el modelo, el grado de acuerdo experimental obtenido no resultó promisorio, ya que una precisión similar puede lograrse con el modelo de capas rígidas, siendo este último modelo más sencillo y adaptable para los cálculos.

En 1969 Martin [33] introdujo un modelo de cargas de unión el cual es el resultado de la generalización del concepto de "cargas de unión" postulado por Phillips [34]. En este modelo la polarización electrónica se asume como proveniente de las cargas de unión, las cuales se sitúan en el centro de las uniones covalentes y se mantienen a mitad de camino entre los átomos durante su movimiento. Estas cargas de unión interactúan con los carozos iónicos y entre sí a través de un potencial de Coulomb. La autointeracción de una carga de unión consigo misma está excluida, por lo que esta suposición es equivalente a la inclusión de efectos de correlación e intercambio. Martin consideró, por conveniencia, a cada carga de unión dividida en dos, con cada mitad moviéndose con uno de los átomos asociados a la unión. Originalmente, este modelo se desarrolló y aplicó a cristales covalentes, pero más recientemente fue aplicado con éxito al cristal de MgO. El modelo requiere cuatro parámetros.

Posteriormente, Sinha derivó un modelo microscópico [35] que da cuenta de los efectos de polarización en términos de funciones de onda cristalinas de la red no perturbada, utilizando la expansión autoconsistente de Born-Oppenheimer [36] para obtener las funciones de onda perturbadas y las energías en potencias de los desplazamientos iónicos. En cuanto a los aspectos físicos, el modelo de Sinha mostró ser similar al modelo de capas rígidas [37]. La única diferencia es que en el modelo de Sinha las suposiciones sobre interacciones dipolo-dipolo fueron generalizadas para incluir correcciones multipolares provenientes del solapamiento de distribuciones dipolares extendidas. El modelo fue aplicado, en una versión simplificada [37], al cálculo de curvas de dispersión de fonones del KCl y KBr con relativo éxito.

Hemos dedicado los últimos tres párrafos a la descripción de modelos microscópicos. La aplicación de los mismos involucra cálculos numéricos muy largos y tediosos [37] y su ejecución no es posible sin recurrir a aproximaciones drásticas. Por ejemplo, el modelo de Sinha requiere cuatro parámetros. Dos de ellos están relacionados a la constante de la red y a suposiciones ad-hoc y los dos restantes han sido tratados como parámetros ajustables. De alguna manera, este proceso de parametrización aleja a estos modelos del espíritu de los cálculos desde primeros principios aunque, de hecho, un cálculo completo y comprensible de las propiedades cristalinas desde primeros principios es, aún hoy, un tema de preocupación y estudio de muchos teóricos.

1.2 Algunas consideraciones generales

El tratamiento de un sólido requiere la consideración de, esencialmente, dos clases de problemas de muchos cuerpos. La primera clase involucra a la dinámica de los electrones de valencia del cristal y necesita el estudio de excitaciones elementales del sistema, provisto que las mismas pudieran ser definidas. La segunda clase, concerniente con el volumen del sistema, involucra la dinámica del movimiento nuclear. Estos dos problemas difieren en un aspecto fundamental: los electrones de valencia están completamente deslocalizados y libres para moverse a través del cristal, mientras que los núcleos están, en primera aproximación, localizados alrededor de los sitios de la red perfecta. Esta diferencia esencial permite el tra-

tamiento, al menos formalmente, del movimiento nuclear con mucha mayor precisión que en el caso del sistema electrónico. Esto se debe a que la localización de los núcleos nos permite mostrar la existencia de excitaciones elementales bien definidas del sistema completo, llamadas "fonones".

Cabe destacar que el desarrollo de la teoría de estas excitaciones elementales precedió al desarrollo de la teoría cuántica moderna ya que fue llevada a cabo entre 1912 y 1914 por Born y Von Kármán [38]. Sin embargo, los resultados de la teoría cuántica no son directamente relevantes al problema de la determinación del espectro de fonones del sistema de núcleos, ya que esta teoría sólo requiere que estas excitaciones estén cuantizadas, lo cual no afecta al espectro en sí mismo. El significado del espectro de excitaciones elementales del sistema de núcleos radica en que dentro de la aproximación armónica, cuya hipótesis básica es que la amplitud de las vibraciones nucleares es pequeña en comparación con el espaciado internuclear promedio, es posible realizar la transformación desde un conjunto de coordenadas cartesianas a un conjunto de coordenadas generalizadas que son combinaciones lineales de los desplazamientos cartesianos. Las así definidas coordenadas normales tienen la propiedad fundamental de estar desacopladas unas de otras. Esta transformación permite la obtención de una solución formal completa de una clase particular de problema de muchos cuerpos. Esto es poco usual, ya que en la mayoría de los casos no es posible obtener tal tipo de solución. Ésta permite examinar la naturaleza exacta de los modos normales de cristales reales con mucho mayor detalle. Esto es distinto al caso donde una separación exacta no es factible y en consecuencia la tendencia es a obtener el modelo teórico más simple posible que ofrezca la posibilidad de obtener una solución lo más exacta posible.

A lo largo de este trabajo consideraremos válida a la aproximación de Born y Oppenheimer. Así, al calcular la función potencial efectiva para el movimiento nuclear, podremos evaluar a la energía del sistema como una función de la configuración nuclear en cualquier instante asumiendo que los electrones se adaptan instantáneamente al movimiento vibracional de los núcleos.

Si tomamos un gran bloque de cristal que tenga las dimensiones de la celda unitaria primitiva correspondiente a la red en consideración, asumimos que esta gran celda tiene L celdas unitarias en cada una de las direcciones de los tres ejes; la celda unitaria contendrá por lo tanto $(L + 1)^3$ celdas unitarias en conjunto. Si imponemos ahora la condición límite de que puntos equivalentes en las caras opuestas de la gran celda tienen el mismo desplazamiento, esto significará que reducimos el número de grados de libertad de la red de $3L^3$ a $3N$ por subred, donde N es el número de átomos. Esta elección de condiciones límite es en parte artificial, pero tiene la ventaja de permitirnos usar coordenadas normales. Esta aproximación es válida tanto si consideramos que las fuerzas interatómicas que actúan son de corto alcance como si son de largo alcance.

Vamos a asumir que la energía potencial del sistema puede ser expandida como serie de potencias, y en este desarrollo vamos a truncar la serie en el término de segundo orden, despreciando órdenes más elevados.

Para cristales iónicos esto es razonablemente válido, particularmente a bajas temperaturas. Esto se debe a que la energía de unión del cristal debe ser mucho mayor que la energía

vibracional del punto cero. Si se considera a la aproximación armónica sólo se tomarán en cuenta los términos de segundo orden en la función potencial; esto es porque dentro de la aproximación armónica el problema de determinar las coordenadas normales independientes es resoluble en forma exacta. La inclusión de términos de órdenes superiores obligaría al uso de aproximaciones.

Si se escribe la energía potencial del sistema como función única de los desplazamientos nucleares, no se toman en consideración los grados de libertad electrónicos del mismo. Cuando se consideren modelos específicos para cristales iónicos deberá incluirse la polarizabilidad del ión en el cristal y estas polarizabilidades y los momentos dipolares electrónicos asociados constituirán, en cierto modo, grados de libertad adicionales. Pero estos grados de libertad pueden ser eliminados ya que las magnitudes de los momentos dipolares electrónicos quedan determinados por la configuración nuclear en un instante dado.

La expresión para la energía potencial de un cristal expandido hasta desplazamientos de segundo orden es:

$$u = u_0 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k k' \\ \alpha \beta}} \mathbf{x}_\alpha \binom{l}{k} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial \mathbf{x}_\alpha \binom{l}{k} \partial \mathbf{x}_\beta \binom{l'}{k'}} \right] \mathbf{x}_\beta \binom{l'}{k'} \quad (1.1)$$

para el caso más general que tiene la posibilidad de contener a más de un tipo de átomo dentro de la celda primitiva. En la ecuación, \mathbf{x} son los desplazamientos, l y k son los índices de la celda primitiva y la subred, respectivamente; α y β son índices de las componentes cartesianas de los desplazamientos, u es la energía total de la red y u_0 es el valor de la energía de la red sin distorsionar; el segundo término corresponde al más bajo orden de los desplazamientos que no es despreciable.

Para una red que contenga N átomos por celda unitaria se obtienen N modos normales para un vector de onda; para un cristal diatómico esto implica seis modos normales. Para un vector de onda pequeño tres de ellos serán vibraciones normales acústicas, que pueden identificarse con ondas sonoras macroscópicas. Las otras tres tienen como propiedad que los átomos de la celda unitaria se mueven en antifase. Son llamadas vibraciones ópticas. Esta nomenclatura tiene por origen el hecho de que en un cristal iónico estas vibraciones tienen un momento dipolar asociado y pueden acoplarse a un campo electromagnético externo. Hay una marcada diferencia entre estas vibraciones para cristales iónicos y no-iónicos. Para materiales iónicos se asocia a las vibraciones longitudinales de tipo óptico un campo eléctrico macroscópico que tiene el efecto de elevar la frecuencia de este tipo de vibraciones con respecto a las transversales; este efecto está ausente en cristales no polares.

1.3 Objetivos del trabajo

El interés de este trabajo está enfocado hacia el estudio de ciertas propiedades anarmónicas de cristales iónicos, tales como el efecto de la presión sobre las propiedades dieléctricas de dichos cristales.

El estudio de propiedades dieléctricas constituye un aspecto importante en la comprensión del comportamiento de los sólidos, ya que ellas están íntimamente relacionadas a las

propiedades estructurales, vibracionales y ópticas, entre otras. Los esfuerzos hechos en este sentido han dado lugar a numerosos y sofisticados modelos, de los cuales algunos han sido descritos en la sección anterior. La derivación de las relaciones de Szigeti a partir de ellos, han mostrado sus capacidades para describir el comportamiento dieléctrico de muchos materiales. La obtención de aquellas relaciones macroscópicas son el resultado de los esfuerzos dedicados al estudio de las causas de las desviaciones de la carga electrónica de su valor formal unitario.

Sin embargo, debemos notar que la gran mayoría de los modelos descritos no han sido aplicados, o lo han sido con poco éxito [21] al estudio de propiedades anarmónicas de cristales como las que nos interesan. Dicho estudio requiere generalmente la evaluación de magnitudes que no han sido medidas experimentalmente en forma directa; ésto de por sí implica un estudio detallado de modelos adecuados para su estimación. Otro hecho importante a tener en cuenta es que casi todos los modelos ignoran los efectos de anarmonicidad a altas temperaturas, lo que requiere su aplicación a $T \rightarrow 0$ K. Esto introduce la complicación de tener que estimar con modelos adecuados diversas propiedades medibles experimentalmente, pero de las cuales no se tienen datos en el límite de bajas temperaturas; un ejemplo de ésto es la estimación del parámetro de Grüneisen γ_t a bajas temperaturas.

Podemos restringir la elección de los modelos a investigar en base a dos consideraciones: que el formalismo involucrado sea físicamente claro debido a nuestro interés de extender el mismo a estructuras más complicadas y sustancias con mayor interés aplicado (polímeros, cerámicos, semiconductores, etc.); y que posea un reducido número de parámetros, debido a que el estudio del efecto de la presión obligará a considerar las derivadas respectivas de los mismos, lo que aumenta considerablemente su número. Esto redundará en la pérdida del sentido físico de dichos parámetros, en contra de lo expresado antes e incrementa el número de datos experimentales necesarios para su ajuste, lo cual es perjudicial para la extensión del modelo al desear aplicarlo a sustancias para las cuales dichos datos no sean accesibles.

En nuestro grupo de investigación se realizaron estudios sobre la aplicación de modelos sencillos al cálculo de propiedades anarmónicas de cristales iónicos y el efecto de diferentes factores sobre los mismos. Se investigó la variación de la carga efectiva en estructuras de NaCl [39], de CsCl [40], de fluorita [41, 42] y blenda de zinc [43]; expansión térmica [44] y el parámetro de Grüneisen γ_t [45] en cristales iónicos. Para ello fue necesario el desarrollo de los programas computacionales correspondientes [46, 47].

En particular se estudiaron los modelos de Szigeti, de dipolos de deformación y el modelo de capas. Se inició el estudio utilizando el modelo de cargas de intercambio que mostró una mejoría con respecto a los anteriores [48, 49].

En base a lo expuesto, este trabajo de tesis tiene como objetivos:

- Obtener estimaciones de la variación con la presión de la carga efectiva de cristales iónicos ($\partial \ln s / \partial \ln V$) a partir del formalismo del modelo de dipolos de deformación, del modelo de capas simple y del modelo de cargas de intercambio, a partir de la inclusión del efecto de altas presiones al formalismo derivado de las relaciones de Szigeti [10, 11], del formalismo propuesto por Hardy [14] y los formalismos derivados del modelo de Dick y Overhauser [9].

- Estudiar la influencia de distintas formas de potencial de interacción en el marco de la utilización de los modelos anteriores, analizando además la importancia del tipo de parametrización de los mismos.
- Aplicar el modelo de cargas de intercambio y de capas simple para estudiar el efecto de altas presiones sobre la constante dieléctrica, calculando las derivadas de orden superior (hasta tercer orden en volumen o presión), estimando sus valores en sales para cuales no hay medidas experimentales en la mayoría de los casos.
- Aplicar el modelo de cargas de intercambio y de capas simple para la estimación a bajas temperaturas del parámetro de Grüneisen γ_t , el cual es requerido para la evaluación de $\partial \ln s / \partial \ln V$, y para el que no se cuentan a la fecha valores experimentales en dicho ámbito de temperaturas.

Todo este trabajo se realizará en cristales esencialmente iónicos con estructuras de cloruro de sodio y cloruro de cesio.

En los siguientes tres capítulos damos una introducción a los temas de interés, que sirven de basamento al trabajo desarrollado.

En el Capítulo 2 hacemos una breve reseña acerca de las principales ideas relacionadas con el desarrollo de potenciales de interacción fenomenológicos, los términos que lo integran, su significado físico y su sustento teórico.

El Capítulo 3 trata sobre las propiedades dieléctricas, y se incluyen en él tópicos del formalismo relacionado con el comportamiento de partículas en campos de longitudes de onda larga, que sirven de base al concepto de la carga efectiva.

El Capítulo 4 contiene una descripción de los modelos utilizados en este trabajo: el modelo de dipolos de deformación, el modelo de capas y el modelo de cargas de intercambio.

En el Capítulo 5 se muestra el formalismo desarrollado para el estudio del efecto de la presión sobre las propiedades dieléctricas.

En el Capítulo 6 se exponen los programas desarrollados para los cálculos involucrados en los formalismos del capítulo anterior.

El Capítulo 6 muestra algunos de los resultados, junto con una discusión sobre los mismos.

En el Capítulo 7 se dan las conclusiones finales.

En el Apéndice A se da una breve descripción de los métodos experimentales de la medición de magnitudes relacionadas con este trabajo.

En el Apéndice b se dan algunas tablas con valores experimentales de magnitudes de interés en este trabajo.

Finalmente, en el Apéndice c se da una lista más completa de los resultados obtenidos.

Capítulo 2

Potenciales de interacción

2.1 Potencial electrostático

La contribución más importante a la energía de un cristal iónico está constituida por interacciones coulómbicas entre cargas puntuales. La energía de interacción entre las cargas $z_p e$ y $z_{p'} e$ pertenecientes al p -ésimo ion en la l -ésima celda unidad y al p' -ésimo ion en la celda de referencia es $Z_p Z_{p'} e^2 / |r_l + r_p - r_{p'}|$. Entonces la correspondiente energía electrostática del cristal por par de iones queda dada por:

$$W_c = \frac{1}{2N} \sum_l' \sum_{p,p'} Z_p Z_{p'} e^2 / |r_l + r_p - r_{p'}| \quad (2.1)$$

donde la prima en el símbolo de sumatoria indica que se excluye el caso $l = 0$ para $p = p'$, N es el número de pares de iones en la celda unidad.

La ecuación (2.1) puede ser expresada en la forma:

$$W_c = -(Ze)^2 \alpha_R / R \quad (2.2)$$

donde Z es el mayor factor común de los Z_p 's y R es la longitud característica de la estructura cristalina (como la raíz cúbica del volumen de la celda unitaria o la distancia entre vecinos más próximos). La cantidad adimensional α_R es la constante de Madelung referida a la longitud característica R , definida como:

$$\alpha_R = -\frac{R}{2N} \sum_{p'} \zeta_{p'} \varphi(r_{p'}). \quad (2.3)$$

Aquí $\zeta_p = Z_p/Z$ y $\varphi(r_{p'}) = \sum_l' \sum_p \zeta_p / |r_l + r_p - r_{p'}|$ es el potencial electrostático en el punto de la red $r_{p'}$, cuando las cargas iónicas están medidas en unidades de Ze y la distancia interiónica en unidades de R .

La constante de Madelung es independiente del valor de las cargas iónicas y del valor de la constante de red, sólo depende de la estructura cristalina. Para cristales compuestos por dos redes de Bravais de iones de cargas iguales y opuestas (como NaCl y CsCl), α_R es el autopotencial electrostático (adimensional) en el sitio de un ion negativo.

La evaluación de la constante de Madelung requiere la evaluación de los autopotenciales electrostáticos para la estructura. La convergencia condicional de las series que expresan

esos autopotenciales impide su evaluación por suma directa. Sin embargo existen varios métodos para llevar a cabo este cálculo; el más conocido es seguramente el método de Ewald [50]; otros métodos son el de Madelung [51] y el de Eijven [52]. El valor de la constante de Madelung cuando R es la distancia entre primeros vecinos es $\alpha_M = 1.74756$ para la estructura de cloruro de sodio y $\alpha_M = 1.76267$ para la estructura de cloruro de cesio.

2.2 Potencial de van der Waals

La existencia de fases condensadas en los gases raros muestra que hay interacciones atractivas entre átomos con capas electrónicas cerradas, que son de naturaleza diferente de las interacciones de Coulomb y de las metálicas. El origen físico de las llamadas fuerzas de van der Waals está vinculado a correlaciones del movimiento electrónico en diferentes átomos. El momento dipolar instantáneo μ de un átomo de capa cerrada induce en un átomo similar a una distancia r un momento dipolar que es proporcional a $\alpha\mu/r^3$ (donde α es la polarizabilidad) y produce en el sitio del primer átomo un campo proporcional a $\alpha\mu/r^6$. El término relacionado con la energía de interacción tiene la forma $-\alpha\overline{\mu^2}/r^6$, donde $\overline{\mu^2}$ es momento dipolar cuadrado medio del primer átomo. Además del término de la energía dipolo-dipolo, la consideración de momentos instantáneos de más alto orden de la distribución de cargas de los átomos da otros términos atractivos, que decaen más rápidamente con el incremento de la distancia interatómica.

La evaluación de la energía de van der Waals en un sólido está sujeta a una considerable cantidad de incertezas.

Las aproximaciones hechas en el tratamiento mecano-cuántico standard entre pares de átomos o iones en su estado fundamental, esféricamente simétrico, limita su validez a distancias interatómicas grandes, de manera tal que la superposición de las funciones de onda de los átomos libres pueda ser despreciada. Esas aproximaciones involucran la expansión multipolar del hamiltoniano de interacción, que es tratado como una perturbación, y el uso de productos de funciones de onda de orden cero. Bajo esta última condición, la expresión de la energía de van der Waals obtenida en teoría de perturbaciones de segundo orden es aditiva, esto es, la energía de van der Waals de un sistema de muchas partículas es la suma de energías de interacción de dos cuerpos.

La expresión para la energía de interacción dipolo-dipolo queda:

$$w_{dd}(r_{12}) = -\frac{c_{12}}{r_{12}^6} = -\frac{6}{r_{12}^6} \sum_{i,j} \frac{(\mu_{1x}^{0i})^2 (\mu_{2x}^{0j})^2}{E_1^{0i} + E_2^{0j}}. \quad (2.4)$$

Aquí la suma es sobre todos los estados excitados de ambos átomos, de energías E_1^{0i} y E_2^{0j} relativas a los respectivos estados fundamentales, y μ_{1x}^{0i} y μ_{2x}^{0j} son los elementos de matriz de la componente x del momento dipolar de cada átomo entre el estado fundamental y los estados excitados. Si se asume que todos los estados excitados con elementos de matriz grandes caen en un rango pequeño de energía, y se usa la fórmula de un nivel para

la polarizabilidad, se obtiene la fórmula de London para c_{12} [53]:

$$c_{12} = \frac{3}{2} \alpha_1 \alpha_2 \frac{E_1 E_2}{E_1 + E_2}. \quad (2.5)$$

Aquí E_1 y E_2 son energías de excitación promedio, que deben ser tomadas en correspondencia a las frecuencias de absorción más fuertes de los átomos.

Las interacciones de van der Waals dipolo-cuadrupolo y cuadrupolo-cuadrupolo de dos átomos idénticos en su esféricamente simétrico estado fundamental, que contribuye con términos de la forma $-d/r^8$ y $-f/r^{10}$, fue tratado en la aproximación de un nivel por Margenau [54]. Para la mayoría de los átomos, el término dipolo-cuadrupolo es sólo una fracción del término dipolo-dipolo, y el término cuadrupolo-cuadrupolo es aún menor, pudiendo ser despreciado en el rango de distancias interiónicas observadas.

Mayer [55] reobtuvo la fórmula de Margenau para el caso de átomos diferentes, haciendo aproximaciones adicionales para expresar los elementos de matriz intervinientes en términos de polarizabilidades. La fórmula de Mayer para la energía dipolo-cuadrupolo queda:

$$w_{12} = -\frac{d_{12}}{r_{12}^8} = -\frac{9}{4} \frac{c_{12}}{e^2} \left(\frac{\alpha_1 E_1}{N_1} + \frac{\alpha_2 E_2}{N_2} \right) \frac{1}{r_{12}^8}. \quad (2.6)$$

Aquí N_1 y N_2 son números efectivos de electrones en los átomos, que Mayer calcula como la media geométrica entre el número teórico de electrones externos y el número efectivo necesario para satisfacer el valor de la polarizabilidad con la fórmula de un nivel,

$$\alpha = pe^2 h^2 / (4\pi^2 m E^2).$$

De acuerdo con el tratamiento mecano-cuántico de la energía de van der Waals, se asume que dicha energía en un cristal puede ser escrita como la suma de energías de van der Waals de dos cuerpos. Entonces la contribución de las interacciones dipolo-dipolo y dipolo-cuadrupolo a la energía de red puede ser escrita:

$$W_{vdW} = -\frac{C_R}{R^6} - \frac{D_R}{R^8} \quad (2.7)$$

donde R es otra vez una longitud característica del cristal, y los coeficientes C_R y D_R son combinaciones lineales de coeficientes de van der Waals para los varios pares de iones pesados por sumas apropiadas sobre la red. En el caso particular de un cristal formado por dos redes de Bravais de iones, se tiene:

$$C_R = c_{+-} S_R^{(6)}(\mathbf{r}_-) + \frac{1}{2}(c_{++} + c_{--}) S_R^{(6)}(\mathbf{0}) \quad (2.8)$$

$$D_R = d_{+-} S_R^{(8)}(\mathbf{r}_-) + \frac{1}{2}(d_{++} + d_{--}) S_R^{(8)}(\mathbf{0}) \quad (2.9)$$

donde \mathbf{r}_- es el vector posición del ion negativo en la celda unidad, tomando el ion positivo en el origen, y las sumas

$$S_R^{(n)}(\mathbf{r}) = \sum_1' \frac{R^n}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^n} \quad (2.10)$$

son sumas sobre la red de Bravais de la estructura cristalina donde el caso $r_1 = 0$ es excluido para $r = 0$.

Varios autores han evaluado los coeficientes de van der Waals utilizando el esquema perturbativo mencionado, estimando por diversos caminos las polarizabilidades y las energías de excitación involucradas. Por ejemplo se pueden mencionar los trabajos de Mayer [55], Hajj [56], Lynch [57], Boswarva [58], Jain, Shanker y Khandelwal [59] y Bakhshi, Goyal y Shanker [60].

Un esquema alternativo es usar el método variacional, a través del procedimiento desarrollado por Slater y Kirkwood [61]. Este método conduce al siguiente resultado para los coeficientes de interacción dipolo-dipolo:

$$c_{ij} = \frac{3}{2} \frac{e\hbar}{m^{1/2}} \frac{\alpha_i \alpha_j}{(\alpha_i/N_i)^{1/2} + (\alpha_j/N_j)^{1/2}} \quad (2.11)$$

mientras que para los coeficientes dipolo-cuadrupolo se tiene [62]:

$$d_{ij} = \frac{27}{8} \frac{\hbar}{m} \alpha_i \alpha_j \frac{[(\alpha_i/N_i)^{1/2} + (\alpha_j/N_j)^{1/2}]^{1/2}}{(\alpha_i/N_i) + (\alpha_j/N_j) + \frac{29}{3}(\alpha_i \alpha_j/N_i N_j)} \quad (2.12)$$

Cabe destacar que (2.11) y (2.12) no involucran parámetros de energía de excitación como en las ecuaciones (2.5) y (2.6) derivadas de la teoría de perturbaciones, con lo cual se evitan las incertezas con que se estiman E_i y E_j .

Parámetros de van der Waals con el esquema variacional fueron obtenidos, por ejemplo, por Narayan [62]; Shanker, Agrawal y Singh [63] y Shanker, Bakhshi y Sharma [64].

La tabla 2.1 muestra valores de los parámetros C y D para algunos cristales.

Tabla 2.1: Valores de los parámetros de van der Waals C y D . (Referencias [63] y [64])

Sal	C / 10^{-60} erg.cm ⁶	D / 10^{-76} erg.cm ⁸	Sal	C / 10^{-60} erg.cm ⁶	D / 10^{-76} erg.cm ⁸
LiF	36	9	RbF	556	204
LiCl	271	81	RbCl	1589	705
LiBr	490	149	RbBr	2237	1010
LiI	1036	328	RbI	2537	1623
NaF	115	37	CsF	963	351
NaCl	492	180	CsCl	3604	1672
NaBr	786	288	CsBr	5356	2363
NaI	1465	539	CsI	7580	3606
KF	370	135	TlCl	6036	2674
KCl	1150	496	TlBr	7492	3316
KBr	1663	723	AgCl	2114	952
KI	2724	1195	AgBr	2709	1214

2.3 Potencial de repulsión

Las condiciones de equilibrio de un sólido se pueden satisfacer sólo si las fuerzas interatómicas se hacen repulsivas a cortas distancias. La repulsión de corto alcance entre átomos está relacionada con el principio de exclusión en el solapamiento de capas electrónicas cerradas. Esto se puede ilustrar de manera simple para el caso de dos átomos de hidrógeno con espines paralelos en su estado fundamental, por comparación entre la energía de estado triplete, computada por teoría de perturbaciones a primer orden, y la correspondiente energía pseudoclásica. Éstos están dados por [65], respectivamente, el valor medio del hamiltoniano molecular sobre el producto antisimetrizado de funciones de onda $1s$

$$W \simeq 2W_H + \frac{e^2}{a_H} \exp\left(-\frac{2r}{a_H}\right) \cdot \frac{1/3(r/a_H) + 5/6(r/a_H)^2 + 2/9(r/a_H)^3}{1 - [1 + (r/a_H) + 1/3(r/a_H)^2]^2 \exp(-2r/a_H)} \quad (2.13)$$

y por el valor medio del hamiltoniano molecular sobre el simple producto de funciones de onda $1s$

$$W \simeq 2W_H + \frac{e^2}{a_H} \exp\left(-\frac{2r}{a_H}\right) \cdot \left[\frac{a_H}{r} + \frac{5}{8} - \frac{3}{4} \frac{r}{a_H} - \frac{1}{6} \left(\frac{r}{a_H}\right)^2 \right]. \quad (2.14)$$

W_H es la energía del átomo de hidrógeno en su estado fundamental, r la distancia interatómica y a_H el primer radio de Bohr.

La figura 2.3 muestra las curvas correspondientes a (2.13) y (2.14). Se ve que la repulsión es principalmente debida a efectos que no son considerados en el cálculo pseudoclásico. Se puede ver que la energía de repulsión en (2.13) en el rango de distancias interatómicas largas donde el tratamiento a primer orden es aplicable, decae casi exponencialmente con el aumento de la distancia. Con el mismo tipo de aproximación el problema fue tratado por Pauling [66] para dos átomos hidrogenoides de cargas netas Z_1e y Z_2e . La fórmula resultante para el estado triplete de la molécula involucra, además de la interacción de Coulomb entre las cargas, la energía repulsiva de la forma encontrada en (2.13) multiplicada por un factor aproximadamente igual a $(1 + Z_1 + Z_2)$. La forma casi exponencial de la energía repulsiva de dos átomos de capas cerradas es consistente también con los resultados de cálculos de perturbaciones de primer orden de interacción de dos átomos de helio o de neón en el estado fundamental [67].

En la mayoría de los trabajos no se trata de evaluar la energía de repulsión en un cristal desde los primeros principios. En lugar de eso se asume una dependencia funcional simple entre la energía de repulsión y la distancia entre los átomos. Los parámetros intervinientes se determinan a través de datos experimentales, generalmente a temperatura ambiente y a presión atmosférica.

En los primeros trabajos sobre la cohesión de cristales iónicos, la energía de repulsión se asumía que variaba como una potencia inversa de la distancia entre iones; la correspondiente contribución a la energía de red es entonces

$$W_{rep} = B_R/R^n. \quad (2.15)$$

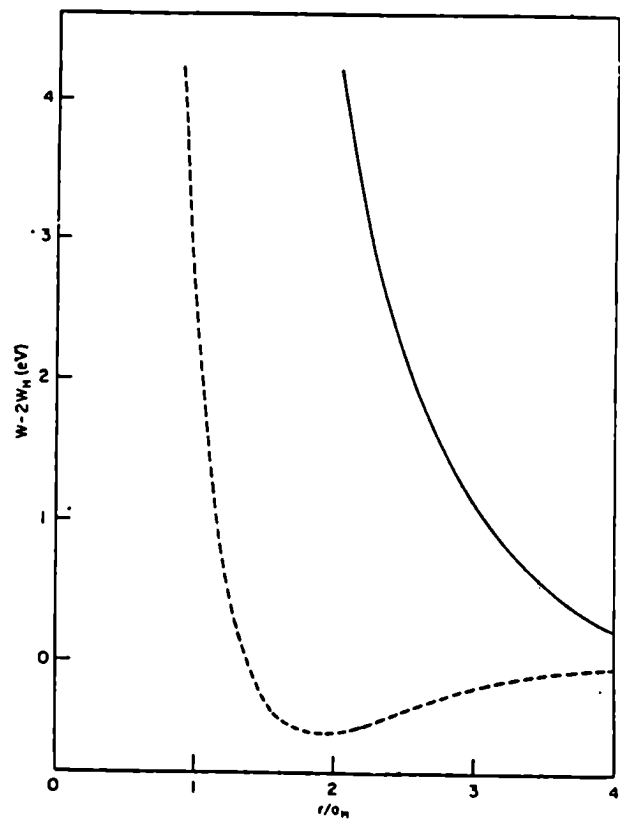


Figura 2.1: Energía de interacción de dos átomos de hidrógeno con espines electrónicos paralelos en el estado fundamental. La curva sólida da la energía del estado triplete, la curva punteada da la energía de interacción pseudoclásica.

Para un cristal compuesto de dos redes de Bravais de iones, la suposición que la energía de repulsión del cristal es la suma de energías de interacción de dos cuerpos, lleva a la siguiente expresión de parámetro B_R

$$B_R = b_{+-} S_R^{(n)}(\mathbf{r}_-) + \frac{1}{2}(\mathbf{b}_{++} + \mathbf{b}_{--}) \mathbf{S}_R^{(n)}(\mathbf{0}) \quad (2.16)$$

Como el efecto de repulsión decae rápidamente con la distancia, en los cristales iónicos, en (2.16) se truncan las sumas y se considera el efecto de hasta primeros o segundos vecinos solamente.

En muchas aplicaciones la energía de repulsión entre iones se asume que varía exponencialmente con la distancia, de acuerdo con los resultados mecano-cuánticos mencionados antes. Entonces, la energía de repulsión en función de la distancia entre primeros vecinos r tiene la forma

$$W_{rep} = B \exp(-r/\rho). \quad (2.17)$$

Si se consideran segundos vecinos, la contribución a la energía de la red por par de iones es

$$W_{rep} = M b_{+-} \exp(-r/\rho) + \frac{1}{2} M' (b_{++} + b_{--}) \exp(-r'/\rho) \quad (2.18)$$

donde M y M' son los números de coordinación para primeros y segundos vecinos, y r' es la distancia entre segundos vecinos.

Hay dos suposiciones básicas en la ecuación (2.18): una es que la energía de repulsión puede ser escrita como la suma de energías repulsivas de dos cuerpos, y la otra es que el parámetro ρ es independiente de las especies iónicas en un dado cristal. El parámetro ρ puede ser determinado teniendo en cuenta la aditividad aproximada de la distancia interiónica en una familia de sales, a través de la introducción de un tamaño característico de cada ion (un radio iónico) de la familia. La distancia interiónica r puede ser expresada como

$$r = r_+ + r_- + \Delta$$

donde r_+ y r_- son longitudes características de los iones positivos y negativos, y Δ varía ligeramente de cristal a cristal en la familia. Si se compara la expresión anterior de r con la que surge de operar sobre (2.18):

$$r = \rho \ln \left[\frac{M b_{+-} \left(1 + \frac{M' r'}{2 M r} \left(\frac{b_{++}}{b_{+-}} + \frac{b_{--}}{b_{+-}} \right) \exp \left(-\frac{r'-r}{\rho} \right) \right)}{-dA/dr} \right]$$

(donde $-A(r)$ es la parte atractiva de la energía de red) se tiene que el coeficiente b_{+-} contiene un factor de la forma $\exp[(r_+ + r_-)/\rho]$. Si el parámetro de proporcionalidad se asume constante en una familia de sales, las causas de la desviación de la aditividad puede adjudicarse a la repulsión entre segundos vecinos y la variación de las fuerzas atractivas y el parámetro de dureza ρ de cristal a cristal. El parámetro b_{+-} es escrito de la forma

$$b_{+-} = \beta_{+-} b \exp[(r_+ + r_-)/\rho]$$

donde b es una constante en la familia de sales y el coeficiente β_{+-} da cuenta de un modo general de la dependencia de la repulsión de los dos iones con sus cargas netas y su configuración electrónica externa. Así se llega a la forma de potencial del tipo

$$W_{rep} = M\beta_{+-}b \exp[(r_+ + r_- - r)/\rho] + \frac{1}{2}M'b[\beta_{++} \exp(2r_+/\rho) + \beta_{--} \exp(2r_-/\rho)] \exp(-r'/\rho). \quad (2.19)$$

Los $\beta_{pp'}$ son llamados los coeficientes de Pauling [66, 68] y tienen la forma

$$\beta_{pp'} = 1 + (Z_p/n_p) + (Z_{p'}/n_{p'})$$

donde Z_p y n_p son la valencia y el número de electrones externos del p -ésimo ion.

Las longitudes características r_+ y r_- , el parámetro b y los parámetros ρ en una familia de sales pueden ser determinados por un ajuste simultáneo de la expresión asumida para la energía de red a la ecuación de estado y su derivada respecto al volumen para todas las sales en una familia suficientemente grande. Esto se puede hacer en sales de haluros alcalinos, donde el número de sales es mayor que el número de especies iónicas componentes.

La forma de potencia inversa y sobre todo la exponencial, extendida a primeros vecinos, son por mucho las más usadas en los trabajos sobre cristales iónicos. Sin embargo, existen variantes utilizadas por numerosos autores. En la tabla 2.2 se muestran algunas de las formas funcionales existentes en la literatura.

Tabla 2.2: Formas de potencial de repulsión entre primeros vecinos.

Potencial	Expresión analítica	Parámetros	Ref.
Born-Landé	A/r^n	A, n	[69]
Born-Mayer	$B \exp -r/\rho$	B, ρ	[70]
Hellmann	$B_1/r \exp -r/\rho_1$	B_1, ρ_1	[71]
Wasastjerna	$C r^7 \exp -\beta r$	C, β	[72]
Varshni-Shukla	$\lambda_1 \exp -k_1 r^2$	λ_1, k_1	[73]
Varshni-Shukla modificado	$\lambda_2 \exp -k_2 r^{3/2}$	λ_2, k_2	[74, 75]
Logarítmico	$a \ln (1 + b/r^9)$	a, b	[76]
Verwey	μr^{-12}	μ	[77]
Thakur	$B \ln (1 + p/r^4)$	B, p	[78]
Alam-Ali-Hasan	$a/r^2 \exp -br^{3/2}$	a, b	[79]

Potenciales a segundos vecinos de la forma expuesta en la ecuación (2.19) han sido desarrollados por Huggins [82], Cubicciotti [83], Tosi y Fumi [84], Boswarva [85], Sangster [86, 87], entre otros.

Una forma similar

$$W(r) = -\frac{(Ze)^2 \alpha_M}{r} - \frac{C}{r^6} - \frac{D}{r^8} + Mb \sum_{ij} \beta_{ij} \exp \frac{r_i + r_j - r_{ij}}{\rho_{ij}} \quad (2.20)$$

tiene el llamado potencial de Hafemeister y Flygare [88], donde los parámetros ρ_{ij} son distintos para la interacción catión-catión, catión-anión y anión-anión, y son obtenidos a través de calcular las integrales de solapamiento utilizando funciones de onda Hartree-Fock de los iones libres.

El llamado potencial de Hafemeister y Zahrt [89] utiliza parámetros ρ_{ij} calculados de la misma manera, y tiene la forma [90, 91]

$$W(r) = -\frac{(Ze)^2\alpha_M}{r} - \frac{C}{r^6} - \frac{D}{r^8} + Mb \sum_{ij} \frac{\beta_{ij}}{r_{ij}} \exp \frac{r_i + r_j - r_{ij}}{\rho_{ij}}. \quad (2.21)$$

Otra variante es la utilizada por Shanker y Agrawal [92]; en ella se considera el parámetro ρ_{ij} cumple con una regla de aditividad, de tal manera

$$\rho_{ij} = \rho_i + \rho_j$$

donde ρ_i y ρ_j son característicos de las especies iónicas individuales; el potencial de repulsión tiene entonces la forma

$$\begin{aligned} W_{rep} = & M\beta_{+-}b\rho_{+-} \exp[(r_+ + r_- - r)/\rho_{+-}] + \\ & + \frac{1}{2}M'\beta_{++}b\rho_{++} \exp[2r_+ - r'/\rho_{++}] + \\ & + \frac{1}{2}M'\beta_{--}b\rho_{--} \exp[2r_- - r'/\rho_{--}] \end{aligned} \quad (2.22)$$

Los parámetros ρ_{ij} son calculados según el modelo de Narayan y Ramaseshan, también conocido como modelo de ion compresible [93]. En dicho modelo se postula que la energía de repulsión en una red cristalina puede considerarse formada por contribuciones independientes de los cationes y aniones. Así, un ion puede ser considerado como una esfera blanda, cuyo radio es una función de la fuerza de compresión que actúa sobre él; el ion tiene entonces una energía interna que es función de su tamaño y la repulsión entre iones proviene del incremento en la energía interna cuando son comprimidos juntos.

$$W_{rep}(r_+, r_-) = W_+(r_+) + W_-(r_-)$$

$$W(r) = -\frac{(Ze)^2\alpha_M}{r} - \frac{C}{r^6} - \frac{D}{r^8} + W_+(r_+) + W_-(r_-)$$

$$\begin{aligned} W_{rep}(r, r_+, r_-) = & n_1[A_+ \exp(-r_+/\rho_+) + A_- \exp(-r_-/\rho_-)] \\ & + n_2[A_+ \exp(-br/2\rho_+) + A_- \exp(-br/2\rho_-)] \end{aligned}$$

r_+ y r_- no son los radios de los iones esféricos, sino la extensión del ion en la dirección del vecino más próximo (mientras que en la dirección de los segundos vecinos, el radio es $\frac{1}{2}br$). Los parámetros A_i y ρ_i son entonces característicos de la especie i , cualquiera sea el compuesto del que forma parte. El modelo de Narayan y Ramaseshan fue aplicado por varios autores para calcular diversas propiedades dieléctricas y ópticas [94, 95, 96].

Otras formas de potenciales fenomenológicos han sido usadas. Así, por ejemplo tenemos el potencial de Woodcock [97] con repulsión hasta primeros vecinos, con cuatro parámetros

determinados de datos moleculares; el propuesto por Romano, Margheritis y Sinistri [98] que es una combinación de exponenciales extendida hasta quintos vecinos; de Hardy y Karo [99]; de Catlow, Diller y Norgett [100]. Todos éstos han sido objeto de una revisión crítica por parte de Eggenhoffner, Murthy y Fumi [101].

Cálculos semiclásicos y mecanocuánticos aproximados son usados para establecer formas del potencial interiónico. Sobre esa línea están los trabajos de Gilbert y Wahl utilizando funciones de Hartree-Fock de configuración simple; y cálculos basados en el método de Thomas, Fermi y Dirac [102] como los de Kim, Gordon y Cohen [103, 104, 105], Murti y Selvarajan [106] y otros.

En varios trabajos (sobre todo en modelos como el de capas con fuerzas de tres cuerpos y otros relacionados) se utilizan formas de potencial que incluyen explícitamente un término que da cuenta de las interacciones de tres cuerpos; éste es estimado a partir de las ideas de Lundqvist [18] y Löwdin [17]. De tal manera, aparece en la expresión de la energía del cristal un término con la forma $M(Ze)^2\alpha_M r^{-1} \cdot f(r)$. El factor $f(r)$ es el parámetro de fuerzas de tres cuerpos y depende de las integrales de solapamiento; a veces se determina asumiendo una dependencia exponencial similar al potencial de repulsión $f = f_0 \exp(-r/\rho)$ [91] fijando su valor y el de su derivada a partir de constantes elásticas [107].

2.4 Parametrización de los potenciales

El modo más frecuente de determinar el potencial de repulsión con dos parámetros como los mencionados en la sección anterior es ajustar dichos parámetros mediante la ecuación de estado del cristal y su primera derivada respecto del volumen. La ecuación de estado de un sólido de simetría cúbica bajo presión hidrostática es

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$$

donde $F(V, T) = W_L(V) + F_{vib}(V, T)$ es la energía libre de Helmholtz, W_L es la energía de red (es decir la energía interna del sólido cuando los iones son tomados en reposo en sus posiciones promedio para una condición termodinámica determinada) y F_{vib} es la energía asociada a las vibraciones de la red.

Si se asume que la contribución de las vibraciones de la red no dependen explícitamente del volumen, como en la aproximación armónica, la ecuación de estado se reduce a

$$\frac{\partial W_L}{\partial V} = -P \quad (2.23)$$

y su derivada respecto al volumen

$$V \frac{\partial^2 W_L}{\partial V^2} = \frac{1}{\chi_t} \quad (2.24)$$

Entonces los datos necesarios para determinar los parámetros del potencial de repulsión son la distancia interiónica de equilibrio r_0 y la compresibilidad χ_t .

Las ecuaciones (2.23) y (2.24) son válidas para un sólido estático. En tratamientos más refinados se toma en consideración la parte vibracional en forma aproximada haciendo suposiciones acerca de la dependencia con la temperatura y el volumen.

Una posibilidad es suponer que la energía vibracional del sólido es una función dependiente sólo de la temperatura, lo que lleva a la llamada ecuación de estado de Hildebrand

$$\frac{\partial W_L}{\partial V} = -P + \frac{T\beta}{\chi_t} \quad (2.25)$$

y su derivada

$$V \frac{\partial^2 W_L}{\partial V^2} = \frac{1}{\chi_t} + \frac{T}{\chi_t^2} \left[\left(\frac{\partial \chi_t}{\partial T} \right)_P + \frac{\beta}{\chi_t} \left(\frac{\partial \chi_t}{\partial P} \right)_T \right] \quad (2.26)$$

donde β es el coeficiente de expansión térmica. Para obtener las ecuaciones (2.25) y (2.26) se hizo uso de las relaciones termodinámicas

$$(\partial S / \partial V)_T = \beta / \chi_t \quad \text{y} \quad V(\partial \beta / \partial V)_T = (1 / \chi_t)(\partial \chi_t / \partial T)_P.$$

Otra posibilidad es asumir que la energía libre vibracional del sólido dividida por su temperatura es función de la razón entre la temperatura y una temperatura característica, puramente dependiente del volumen, como sucede por ejemplo en el modelo de Debye. Se obtiene así la ecuación de estado de Mie-Grüneisen

$$\frac{\partial W_L}{\partial V} = -P + \frac{W_{vib}\beta}{C_V \chi_t} \quad (2.27)$$

y su derivada

$$V \frac{\partial^2 W_L}{\partial V^2} = \frac{1}{\chi_t} + \frac{W_{vib}}{C_V \chi_t^2} \left[\left(\frac{\partial \chi_t}{\partial T} \right)_P + \frac{\beta}{\chi_t} \left(\frac{\partial \chi_t}{\partial P} \right)_T \right] + \frac{V\beta^2}{C_V^2 \chi_t^2} \left[TC_V - W_{vib} - \frac{TW_{vib}}{C_V} \left(\frac{\partial C_V}{\partial T} \right)_V \right]. \quad (2.28)$$

El primer esquema mencionado, a veces llamado aproximación estática, será utilizado en la mayor parte de este trabajo; el segundo o aproximación de Hildebrand, también será utilizado para establecer una comparación con el anterior en el estudio de la influencia de la parametrización en las magnitudes calculadas.

Capítulo 3

Propiedades dieléctricas

3.1 La constante dieléctrica

Uno de los hechos remarcables del comportamiento dieléctrico de los cristales iónicos es que poseen dos constantes dieléctricas distintas que los caracterizan. Una corresponde a la región infrarroja o de bajas frecuencias, y se la conoce como la constante dieléctrica estática (ϵ_0). La otra corresponde a la región visible y ultravioleta o de altas frecuencias, y se la conoce como constante dieléctrica óptica o electrónica (ϵ_∞), y es igual a n^2 donde n es el índice de refracción.

En general, la constante dieléctrica depende de la frecuencia a la que se mide. La dependencia es del tipo

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 - (\omega/\omega_t)^2} \quad (3.1)$$

donde ω_t es la frecuencia de resonancia característica de material. Con más detalle, se puede modificar (3.1) para incluir efectos de no linealidad y anarmonicidad [108]

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 - (\omega/\omega_t)^2 - i(\omega/\omega_t)\eta} \quad (3.2)$$

donde la constante de damping η es mucho menor que la unidad en los haluros alcalinos.

El comportamiento para campos eléctricos dependientes del tiempo puede ser descrito introduciendo una constante dieléctrica compleja [109]

$$\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2. \quad (3.3)$$

Las dos componentes ϵ_1 y ϵ_2 también dependen de la frecuencia ω . Cuando la frecuencia tiende a cero, $\epsilon_2(\omega) \rightarrow 0$ y $\epsilon_1 \rightarrow \epsilon_0$, la constante dieléctrica estática. Y cuando $\omega \rightarrow \infty$, $\epsilon(\omega) \rightarrow \epsilon_\infty$.

Es también importante que ϵ_1 y ϵ_2 no son independientes entre sí, sino que verifican la relación de Kramers-Kronig [109]

$$\epsilon_0 = \epsilon_1(0) = \int_0^\infty \frac{\epsilon_2(\omega)}{\omega} d\omega. \quad (3.4)$$

La constante ϵ_0 se determina tomando el valor de $\epsilon(\omega)$ cuando $\omega \rightarrow 0$, mientras que ϵ_∞ se toma como el valor de $\epsilon(\omega)$ en una región de frecuencias donde ω es grande comparada con todas las frecuencias vibracionales, pero pequeña comparada con las frecuencias de transiciones electrónicas. Como $\epsilon_\infty = n^2$ es dependiente de la frecuencia en el rango en el que n es medido, el valor de ϵ_∞ a partir de los valores experimentales de n deben ser extrapolados.

Los valores experimentales de constantes dieléctricas en cristales iónicos muestran que ϵ_0 es significativamente más grande que ϵ_∞ .

Generalmente se consideran dos tipos de polarizabilidades en los sólidos iónicos. Una es la polarizabilidad electrónica que proviene de la deformación o desplazamiento de los electrones más externos respecto de su propio núcleo; y la otra es la polarizabilidad por desplazamiento que se debe al desplazamiento relativo entre los iones. En la región de bajas frecuencias la polarización incluye las dos contribuciones, pero en la región de frecuencias altas sólo tenemos polarización electrónica, debido a la inercia de los iones. Entonces la polarización por desplazamiento de los iones es responsable de la diferencia entre ϵ_0 y ϵ_∞ . Un estudio del mecanismo de polarización iónica necesita de un conocimiento de las fuerzas de interacción entre los iones [110].

En la tabla 10.3 del Apéndice b se muestran valores de las constantes dieléctricas de algunos sólidos cristalinos; las tablas 10.4, 10.5 y 10.6 muestran valores experimentales de las derivadas primera, segunda y tercera respecto del volumen y de la presión de la constante dieléctrica estática; y la tabla 10.7 valores experimentales de la derivada de la constante dieléctrica de altas frecuencias respecto del volumen.

3.2 Las relaciones de Szigeti

Vamos a considerar las vibraciones ópticas de una red desde el punto de vista macroscópico, para el límite de grandes longitudes de onda. Para describirlas, necesitaremos un parámetro que especifique el desplazamiento relativo entre el catión y el anión, el parámetro más conveniente para describir el movimiento de tipo óptico es el desplazamiento relativo de los iones multiplicado por la raíz cuadrada de la masa efectiva por unidad de volumen, el cual notaremos w . Para cristales iónicos diatómicos, la teoría macroscópica queda descrita por las ecuaciones:

$$\ddot{w} = b_{11}w + b_{12}E \quad (3.5)$$

$$P = b_{21}w + b_{22}E \quad (3.6)$$

donde P y E son la polarización dieléctrica y el campo eléctrico definidos en la teoría de Maxwell. De la condición de isotropía surge que los coeficientes b_{ij} son escalares. Los mismos no son todos independientes. Puede mostrarse [111] que:

$$b_{12} = b_{21} \quad (3.7)$$

Teniendo en cuenta esta relación, podemos expresar los coeficientes b_{ij} en términos de cantidades medibles experimentalmente.

Consideremos soluciones periódicas del tipo:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{w} = \mathbf{w}_0 \\ \mathbf{P} = \mathbf{P}_0 \end{array} \right\} \times \exp(-i\omega t)$$

y de estas ecuaciones obtenemos:

$$-\omega^2 \mathbf{w} = b_{11} \mathbf{w} + b_{12} \mathbf{E},$$

$$\mathbf{P} = b_{21} \mathbf{w} + b_{22} \mathbf{E}.$$

Eliminando \mathbf{w} de estas ecuaciones se encuentra que la relación entre \mathbf{P} y \mathbf{E} está dada por:

$$\mathbf{P} = \left\{ b_{22} + \frac{b_{12}b_{21}}{-b_{11} - \omega^2} \right\} \mathbf{E}.$$

Comparando con la definición del desplazamiento dieléctrico,

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} = \epsilon \mathbf{E},$$

se obtiene la constante dieléctrica

$$\epsilon = 1 + 4\pi b_{22} + \frac{4\pi b_{12}b_{21}}{-b_{11} - \omega^2}, \quad (3.8)$$

que puede ser reescrita como:

$$\epsilon = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 - (\omega/\omega_t)^2} \quad (3.9)$$

Las constantes en esta ecuación son cantidades medibles en forma directa:

- ϵ_0 , la constante dieléctrica estática, es el valor de la constante dieléctrica en un campo estático o alternante de frecuencia muy pequeña comparada con ω_t .
- ϵ_∞ , la constante dieléctrica de alta frecuencia, es el valor de la constante dieléctrica que se deduce de la refracción de ondas electromagnéticas con frecuencias altas comparadas con ω_t de manera tal que puede despreciarse el último término de (3.9).
- ω_t , la frecuencia de dispersión infrarroja, es la frecuencia a la cual el índice de refracción y la constante dieléctrica se hacen infinitas.

Utilizando la relación general (3.7) y comparando (3.8) y (3.9), podemos expresar los coeficientes b_{ij} en términos de las constantes ω_t , ϵ_0 y ϵ_∞ :

$$b_{11} = -\omega_t^2 \quad (3.10)$$

$$b_{12} = b_{21} = \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)^{1/2} \omega_t \quad (3.11)$$

$$b_{22} = \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} \quad (3.12)$$

Desde el punto de vista microscópico, vamos a considerar que los iones son polarizables por campos eléctricos; si bien este efecto puede ignorarse cuando los iones ocupan posiciones de simetría, no es posible hacerlo si está presente un campo eléctrico macroscópico o si los iones están desplazados de sus posiciones simétricas, por lo cual pueden experimentar un campo eléctrico aún en ausencia de un campo macroscópico.

La polarización de los iones puede describirse de la siguiente manera. Cuando un ion está sometido a un campo eléctrico \mathbf{E} su nube electrónica se deforma y adquiere un momento dipolar μ . Si el campo no es excesivamente grande, el momento dipolar inducido resulta proporcional al campo,

$$\mu = \alpha \mathbf{E} \quad (3.13)$$

donde α es la polarizabilidad atómica del ion y será constante mientras el campo no varíe apreciablemente durante un período de movimiento electrónico en el ion.

Cuando una carga iónica Ze se desplaza una cantidad \mathbf{u} , el efecto neto es equivalente a tener una carga $-Ze$ puesta en la posición original para anular su carga y una nueva carga Ze creada en la nueva posición del ion. Por lo tanto, el desplazamiento es equivalente a la adición de un dipolo con momento $Ze\mathbf{u}$. Por otro lado, el momento eléctrico inducido sobre un ion depende del campo que actúa sobre él. En la práctica, este campo nunca es uniforme como se infiere en la ecuación (3.13); en adelante consideraremos el valor del campo en el centro del ion. Este campo, que actúa sobre el ion, se denominará campo efectivo.

Es importante destacar que el campo efectivo es distinto al campo eléctrico macroscópico. Este último no es simplemente el campo total, que incluye al campo del ion en cuestión; es el campo total promediado sobre el espacio ocupado por una celda de la red. Por otro lado, el campo efectivo sobre un ion es el campo total excluyendo la contribución del ion mismo, tomado en el centro de dicho ion.

Por consideraciones de simetría exclusivamente, puede demostrarse [111] que el campo efectivo está relacionado con el campo macroscópico a través de:

$$\mathbf{E}_{ef} = \mathbf{E} + \frac{4\pi}{3}\mathbf{P}. \quad (3.14)$$

Sean \mathbf{u}_{\pm} , $\pm Ze$ y α_{\pm} los desplazamientos, cargas iónicas y polarizabilidades atómicas de los cationes y aniones, respectivamente. Los momentos dipolares efectivos sobre los dos tipos de iones son:

$$Ze\mathbf{u}_{+} + \alpha_{+}\mathbf{E}_{ef} \quad (3.15)$$

$$-Ze\mathbf{u}_{-} + \alpha_{-}\mathbf{E}_{ef} \quad (3.16)$$

Como hay $1/V_a$ pares iónicos por unidad de volumen, la polarización macroscópica \mathbf{P} se obtiene multiplicando la suma de (3.15) y (3.16) por $1/V_a$:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{V_a} [Ze(\mathbf{u}_{+} - \mathbf{u}_{-}) + (\alpha_{+} + \alpha_{-})\mathbf{E}_{ef}] \quad (3.17)$$

eliminando \mathbf{E}_{ef}

$$\mathbf{P} = \frac{1}{1 - (4\pi/3)(\alpha_+ + \alpha_-)/V_a} \left\{ Ze \left(\frac{\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-}{V_a} \right) + \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right) \mathbf{E} \right\} \quad (3.18)$$

El desplazamiento relativo entre el catión y el anión ($\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$) está relacionado con el parámetro \mathbf{w} a través de:

$$\mathbf{w} = \left(\frac{\bar{M}}{V_a} \right)^{1/2} (\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) \quad \left(\bar{M} = \frac{M_+ M_-}{M_+ + M_-} \right) \quad (3.19)$$

Expresando ($\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$) en (3.18) en términos de \mathbf{w} , obtenemos una ecuación estrictamente comparable a (3.6). Esta comparación conduce directamente a los siguientes valores de los coeficientes b_{21} y b_{22} en la ecuación fenomenológica:

$$b_{21} = \frac{Ze \left(\frac{1}{\bar{M} V_a} \right)^{1/2}}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} \quad b_{22} = \frac{\left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} \quad (3.20)$$

Cuando los iones positivos y negativos están desplazados en forma relativa, aparece una fuerza entre ellos debida al efecto del potencial de solapamiento existente. Para desplazamientos pequeños, dicha fuerza puede expresarse como directamente proporcional al desplazamiento relativo ($\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$) entre iones. Por lo tanto,

$$-k(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) \quad \text{y} \quad k(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) \quad (3.21)$$

son, respectivamente, las fuerzas actuantes sobre un ion positivo y un ion negativo. Debido a la condición de simetría tetraédrica, el coeficiente k es un escalar.

Teniendo en cuenta además de las fuerzas debidas al solapamiento, a las fuerzas ejercidas sobre los iones debidas al campo eléctrico efectivo \mathbf{E}_{ef} , podemos escribir las ecuaciones de movimiento para los dos tipos de iones presentes:

$$M_+ \ddot{\mathbf{u}}_+ = -k(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + Ze\mathbf{E}_{ef} \quad (3.22)$$

$$M_- \ddot{\mathbf{u}}_- = k(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) - Ze\mathbf{E}_{ef} \quad (3.23)$$

Multiplicando estas ecuaciones por M_- y M_+ respectivamente, restando y dividiendo luego por $(M_+ + M_-)$ obtenemos:

$$\bar{M}(\ddot{\mathbf{u}}_+ - \ddot{\mathbf{u}}_-) = -k(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + Ze\mathbf{E}_{ef} \quad (3.24)$$

Eliminando \mathbf{E}_{ef} de esta ecuación y expresando luego \mathbf{P} en términos de ($\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$) y \mathbf{E} con ayuda de (3.18) tenemos:

$$\bar{M}(\ddot{\mathbf{u}}_+ - \ddot{\mathbf{u}}_-) = \left[-k + \frac{\frac{4\pi}{3} \frac{(Ze)^2}{V_a}}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} \right] (\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + \left[\frac{Ze}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} \right] \mathbf{E} \quad (3.25)$$

Expresando a $(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-)$ en función del parámetro \mathbf{w} en (3.19), la ecuación (3.25) queda:

$$\ddot{\mathbf{w}} = \left[\frac{k}{M} + \frac{\frac{4\pi}{3} \frac{(Ze)^2}{MV_a}}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} \right] \mathbf{w} + \left[\frac{\frac{Ze}{(MV_a)^{1/2}}}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} \right] \mathbf{E} \quad (3.26)$$

que es la ecuación fenomenológica (3.5) deducida a partir de la teoría atómica. Comparando estas ecuaciones obtenemos valores para los coeficientes b_{11} y b_{12} :

$$b_{11} = -\frac{k}{M} + \frac{\frac{4\pi}{3} \frac{(Ze)^2}{MV_a}}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} \quad (3.27)$$

$$b_{12} = \frac{\frac{Ze}{(MV_a)^{1/2}}}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} \quad (3.28)$$

Comparando (3.28) con (3.20) se verifica el cumplimiento la relación $b_{12} = b_{21}$.

Discutiremos ahora los valores de b_{22} , b_{11} y b_{12} obtenidos de la teoría microscópica comparados con los valores observados dados por las relaciones (3.10), (3.11) y (3.12).

El coeficiente b_{22} se distingue del resto por cuanto no es característico de los cristales iónicos exclusivamente. Notemos que si suprimimos los movimientos iónicos, la red se comportará como una sustancia dieléctrica normal; la constante dieléctrica correspondiente ϵ_∞ está ligada a b_{22} por la relación (3.12),

$$\epsilon_\infty = 1 + 4\pi b_{22} \quad (3.29)$$

La expresión microscópica de b_{22} de hecho conduce a una expresión para la constante dieléctrica ϵ_∞ , típica de cualquier sustancia con átomos polarizables. Entonces, usando (3.20) tenemos:

$$\epsilon_\infty = 1 + \frac{4\pi \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} \quad (3.30)$$

Esta relación puede reordenarse para dar:

$$4\pi(\alpha_+ + \alpha_-) = \left[\frac{\epsilon_\infty - 1}{1 + \frac{1}{3}(\epsilon_\infty - 1)} \right] V_a \quad (3.31)$$

Las ecuaciones anteriores coinciden con las obtenidas por Clausius-Mosotti en relación a la electrostática y por Lorenz y Lorentz en relación a la teoría electromagnética.

Por el momento consideremos sólo el primer término de (3.27) eliminando al segundo término de la manera siguiente: combinando la ecuación (3.11) con la expresión (3.28) para b_{12} tenemos,

$$\omega_t^2 \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right) = b_{12}^2 = \frac{\frac{(Ze)^2}{MV_a}}{\left[1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right) \right]^2}$$

Con esta relación, la expresión de b_{11} dada por (3.27) puede escribirse como:

$$b_{11} = -\frac{k}{M} + \frac{4\pi}{3}\omega_i^2 \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right) \left[1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right) \right]$$

Eliminando las polarizabilidades atómicas con (3.31), la expresión para b_{11} nos queda:

$$b_{11} = -\frac{k}{M} - \frac{\omega_i^2(\epsilon_\infty - \epsilon_0)}{\epsilon_\infty + 2}$$

Usando la relación (3.10) en la que $b_{11} = -\omega_i^2$ podemos encontrar una relación que permite calcular k :

$$k = M\omega_i^2 \left[\frac{\epsilon_0 - 2}{\epsilon_\infty + 2} \right] \quad (3.32)$$

Ahora procedemos a relacionar k con los potenciales de solapamiento entre iones.

Si consideramos un desplazamiento de todos los iones positivos contra los iones negativos, la distancia entre segundos vecinos no se ve alterada (notar que son siempre iones de la misma clase). Por lo tanto, si ignoramos los potenciales de solapamiento entre terceros vecinos y mayores sólo tendremos que considerar fuerzas debidas a dicho solapamiento para los vecinos más próximos. Entonces en esta aproximación nos podemos concentrar sobre un ion positivo, al que consideramos situado en el origen rodeado por sus vecinos más próximos $\mathbf{x}(i)$ ($i = 1, 2, \dots, M$ siendo M el número de coordinación) cuando la red está en equilibrio. El valor de k puede hallarse considerando que si el ion positivo está sujeto a un pequeño desplazamiento \mathbf{x} mientras sus vecinos están fijos, la fuerza que actúa sobre el ion positivo en esta aproximación viene dada por

$$-k\mathbf{x} \quad (3.33)$$

Sea ϕ el potencial de solapamiento entre un ion positivo y uno negativo. El potencial de un ion positivo en cualquier posición \mathbf{x} debido a sus vecinos viene dado por

$$\sum_{i=1}^M \phi(|\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}|)$$

El componente α de la fuerza que actúa sobre el ion es

$$- \sum_{i=1}^M \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \phi(|\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}|) \quad (3.34)$$

Para \mathbf{x} pequeños, podemos expandir esta expresión respecto de \mathbf{x} despreciando los términos de orden superior a 2; por lo tanto dicho componente de la fuerza puede expresarse como:

$$- \sum_{i=1}^M \sum_{\beta=1}^3 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \phi(|\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}|) \right\}_{\mathbf{x}=0} x_\beta$$

o bien

$$- \sum_{i=1}^M \sum_{\beta=1}^3 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \phi(|\mathbf{x}_i|) \right\} x_\beta \quad \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} = - \frac{\partial}{\partial x_\alpha(i)} \right) \quad (3.35)$$

Teniendo en cuenta siempre que la simetría es tetraédrica,

$$\sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha(i) \partial x_\beta(i)} \phi(|\mathbf{x}_i|)$$

debe ser un tensor isotrópico, o sea que la expresión se anula para $\alpha \neq \beta$ y tiene el mismo valor para $\alpha = \beta = 1, 2, 3$. De hecho, comparando (3.35) con (3.33) podemos ver que los elementos diagonales del tensor deben ser iguales a k ; por lo tanto podemos escribir:

$$\sum_{i=1}^M \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha(i) \partial x_\beta(i)} \phi(|\mathbf{x}(i)|) = k \delta_{\alpha\beta}$$

Poniendo $\alpha = \beta$ y sumando sobre α tenemos:

$$\sum_{i=1}^M \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2(i)} \phi(|\mathbf{x}(i)|) = 3k$$

La suma $\sum_{\alpha=1}^3 (\partial^2 / \partial x_\alpha^2(i))$ es el operador Laplaciano en las coordenadas $\mathbf{x}(i)$. Ya que $\phi(|\mathbf{x}(i)|)$ es función sólo de la magnitud radial $|\mathbf{x}(i)|$ la expresión anterior se reduce, escribiendo los Laplacianos en coordenadas polares, a la siguiente:

$$\sum_{i=1}^M \left\{ \phi''(|\mathbf{x}(i)|) + \frac{2}{|\mathbf{x}(i)|} \phi'(|\mathbf{x}(i)|) \right\} = 3k$$

Como todos los iones negativos son equidistantes del origen, $|\mathbf{x}(i)| = r_0$, con r_0 la distancia entre vecinos más cercanos, todos los términos de la suma son iguales, por lo que obtenemos:

$$k = \frac{M}{3} \left\{ \phi''(r_0) + \frac{2}{r_0} \phi'(r_0) \right\} \quad (3.36)$$

Debido a que consideramos potenciales de solapamiento entre primeros vecinos solamente, éstos pueden determinarse a partir de la compresibilidad volumétrica. Pero en vez de calcular k a partir de potenciales determinados de esta forma, expresaremos k directamente en función de la compresibilidad con la ayuda de la ecuación (3.36). Si escribimos a la energía por celda como:

$$u(r) = -\frac{A}{r} + M\phi(r) \quad (3.37)$$

donde el primer término es la energía de Madelung, y teniendo en cuenta que $dv/v = 3 dr/r$, la compresibilidad χ resulta:

$$\frac{1}{\chi} = V_a \left(\frac{d^2 u}{dv^2} \right) = \frac{Mr^2}{9V_a} \left(\phi''(r) + \frac{2}{r} \phi'(r) \right) + \frac{4}{3} p \quad (3.38)$$

donde p es la presión ($p = -du/dv$). Finalmente, combinando esta expresión con las ecuaciones (3.32) y (3.36) se obtiene:

$$\omega_i^2 = \frac{3V_a}{r^2 M} \left[\frac{\epsilon_\infty + 2}{\epsilon_0 + 2} \right] \left(\frac{1}{\chi} - \frac{4}{3} p \right) \quad (3.39)$$

Por simplicidad, en lo sucesivo nos referiremos a la ecuación (3.39) como la Primera relación de Szigeti ampliada, ya que la obtenida por este autor difiere de (3.39) en tanto es válida sólo a presión nula. La ecuación (3.39) contiene solamente cantidades medibles y vincula la compresibilidad con la frecuencia de dispersión.

Para discutir la expresión microscópica del coeficiente b_{12} , dada por (3.28), vamos a expresar el cociente entre el valor observable dado por (3.11) y (3.28). Tendremos entonces:

$$s = \omega_t \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)^{1/2} \left[1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right) \right] \frac{(\overline{M}V_a)^{1/2}}{Ze}$$

Eliminando las polarizabilidades atómicas con la ecuación (3.31) el cociente s resulta:

$$s = \omega_t \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)^{1/2} \left[\frac{3}{\epsilon_\infty + 2} \right] \frac{(\overline{M}V_a)^{1/2}}{Ze} \quad (3.40)$$

esta ecuación es conocida como la Segunda relación de Szigeti. Idealmente, el valor de s dado por (3.40) debería ser igual a 1. Sin embargo, aún para los haluros alcalinos más livianos se observan desviaciones pronunciadas de la unidad, tomando valores entre 0.7 y 0.9, siendo que estas sustancias deberían aproximarse mucho a un modelo iónico ideal. Szigeti mencionó que una de las razones de mayor peso para explicar esta desviación es debida a deformaciones mutuas de los iones vecinos como consecuencia del solapamiento. Más aún, en principio está claro que en parte tales deformaciones deben acompañar al solapamiento entre iones, el cual es responsable de las fuerzas de solapamiento.

3.2.1 La carga iónica efectiva

Como las deformaciones son en esencia reordenamientos de la distribución de cargas, el efecto más importante puede describirse a través del momento dipolar asociado a dicho reordenamiento. Sólo consideraremos las distorsiones que ocurran entre vecinos más próximos. Llamaremos $m(r)$ al momento dipolar asociado a la deformación entre un ion positivo y uno negativo; $m(r)$ es función de su separación y elegimos el signo de forma tal que m es positivo si el momento está dirigido desde el ion negativo hacia el positivo. De la misma forma que hicimos para las fuerzas de solapamiento, consideremos una vez más a un ion positivo situado en el origen rodeado por sus vecinos a distancia $\mathbf{x}(i)$. Cuando el ion positivo está desplazado en una posición \mathbf{x} arbitraria, el momento dipolar total de la distorsión que lo circunda puede escribirse como:

$$\sum_{i=1}^M m(|\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}|) \left[- \left(\frac{\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}}{|\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}|} \right) \right] \quad (3.41)$$

en donde los vectores $-\{(\mathbf{x}(i) - \mathbf{x})/|\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}|\}$ son vectores unitarios que indican las direcciones de los diversos dipolos individuales, los cuales, de acuerdo con nuestra convención de signos, están dirigidos hacia el ion positivo ubicado en \mathbf{x} . Podemos reducir nuestro problema a las mismas consideraciones hechas para el caso de fuerzas debidas al solapamiento, si introducimos una función integral ψ de $-m(r)$, a saber:

$$\psi'(r) = -m(r) \quad (3.42)$$

Puede verificarse que el componente α del momento dipolar de deformación (3.41) se puede escribir en términos de la función ψ como

$$-\sum_{i=1}^M \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \psi(|\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}|) \quad (3.43)$$

Esta ecuación es idéntica a la ecuación (3.34) para la fuerza total debida al solapamiento sobre el ion, aparte del hecho de haber reemplazado a ϕ por ψ . Por consiguiente podemos escribir al momento dipolar de distorsión como

$$-q\mathbf{x}, \quad (3.44)$$

en analogía con (3.33), donde q viene dado por

$$q = \frac{M}{3} \left\{ \psi''(r_0) + \frac{2\psi'(r_0)}{r_0} \right\} = -\frac{M}{3} \left\{ m'(r_0) + \frac{2m(r_0)}{r_0} \right\}, \quad (3.45)$$

la cual es una transcripción directa de (3.36) con el reemplazo de ϕ por ψ . Entonces q está determinado conjuntamente por el momento dipolar de distorsión $m(r_0)$ presente en el estado de equilibrio entre vecinos y por su variación con la separación iónica.

En la derivación de la ecuación de la polarización dieléctrica \mathbf{P} , ahora tenemos que considerar la contribución adicional debida a los dipolos de distorsión. Para el desplazamiento relativo $(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-)$, el momento dipolar total de distorsión alrededor de un ion positivo es, de acuerdo con (3.44),

$$-q(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-). \quad (3.46)$$

Ya que en realidad los dipolos presentes están compartidos entre el ion y sus vecinos, la ecuación anterior da directamente el momento dipolar de distorsión por celda. Por lo tanto, incorporando esta contribución, tendremos en lugar de la ecuación (3.17):

$$\mathbf{P} = \frac{1}{V_a} \{ (Ze - q)(\mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-) + (\alpha_+ + \alpha_-)\mathbf{E}_{ef} \}. \quad (3.47)$$

Puede notarse que la única diferencia con el tratamiento anterior es haber reemplazado Ze por $Ze - q$; quedando el resto igual. De manera tal que el efecto neto de la distorsión en la ecuación para \mathbf{P} es que Ze es reemplazado por la carga efectiva $Ze - q$ en la ecuación (3.20) para b_{21} .

En relación a la derivación de la ecuación de movimiento (3.26) notemos que las fuerzas actuantes sobre los iones debidas al campo \mathbf{E}_{ef} ya no pueden ser expresadas por el producto entre dicho campo y las respectivas cargas iónicas. Las fuerzas verdaderas pueden obtenerse aplicando el principio de trabajo virtual. Cuando un ion positivo es desplazado una distancia \mathbf{x} en presencia de un campo \mathbf{E}_{ef} , el trabajo virtual que involucra a dicho campo es

$$-\mathbf{E}_{ef} \cdot (Ze - q)\mathbf{x}.$$

Por lo tanto, la fuerza correspondiente viene dada por

$$(Ze - q)\mathbf{E}_{ef}.$$

Consideraciones similares pueden hacerse para el caso de desplazar un ion negativo en cuanto a la obtención del momento dipolar de distorsión, con la salvedad de tener en cuenta la convención de signos de $m(r)$. El momento dipolar de distorsión será de igual magnitud y signo contrario al del caso de un ion positivo, o sea qx , y la fuerza ejercida sobre el ion negativo por el campo E_{ef} estará dada por

$$E_{ef}(-Ze + q)$$

Una vez más vemos que el efecto de distorsión es equivalente al reemplazo de Ze por la carga efectiva $Ze - q$. Fuera de este cambio, los detalles de la derivación de la ecuación (3.26) quedan inalterados. El efecto neto sobre los coeficientes b_{11} y b_{12} consiste sólo en el reemplazo de Ze por $Ze - q$.

Ahora supongamos que este es el único efecto responsable de la desviación de la unidad por parte de s . Con esta suposición, cuando reemplazamos Ze por $Ze - q$ en (3.28), la fórmula debería estar exactamente de acuerdo con (3.11), o sea que (ver pág. 25):

$$\frac{\frac{(Ze - q)}{(\overline{M}V_a)^{1/2}}}{1 - \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\alpha_+ + \alpha_-}{V_a} \right)} = \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)^{1/2} \omega_t.$$

Eliminando las polarizabilidades atómicas con la ecuación (3.31) y comparando la ecuación resultante con (3.40), encontramos que

$$q = Ze(1 - s). \quad (3.48)$$

Mediante (3.45), la relación entre $s - 1$ y el momento $m(r)$ resulta:

$$(s - 1)Ze = \frac{M}{3} \left\{ m'(r_0) + \frac{2m(r_0)}{r_0} \right\}. \quad (3.49)$$

Es importante tener en cuenta que $m(r)$ está referido sólo a la deformación debida al solapamiento; en este modelo, las deformaciones debidas a interacciones coulómbicas son tenidas en cuenta por la polarización atómica. Por este motivo, $m(r)$ tenderá a cero para r suficientemente grandes, situación que corresponde a los átomos separados. Esto significa que

$$\int_{r_0}^{\infty} m'(r) dr = m(r) \Big|_{r_0}^{\infty} = -m(r_0). \quad (3.50)$$

Aparentemente no hay motivo para suponer que $m'(r)$ puede cambiar de signo en el rango r_0 a ∞ , por lo que se deduce que en función de (3.50) los dos términos entre llaves de la ecuación 3.49 tienen signos opuestos. Llegado este punto, consideraremos razonable suponer que la distorsión debería variar aproximadamente de la misma forma que las fuerzas de solapamiento [111], por ejemplo, como $e^{-r/\rho}$, donde ρ es un orden menor que r_0 . En ese caso, en (3.49) predominará el término en $m'(r_0)$ y por lo tanto tendrá el mismo signo que $s - 1$. Ya se ha mencionado que los valores calculados de s son siempre menores que la unidad, por lo que $s - 1$ es negativo. Esto naturalmente implica que $m(r_0)$ es positivo y

$m'(r_0)$ es negativo. Teniendo en cuenta nuestra convención de signos para $m(r)$ podemos interpretar que en la configuración de equilibrio la nube electrónica del ion negativo está más fuertemente rechazada que la del ion positivo, resultando en un dipolo dirigido hacia el catión. El signo negativo de $m'(r_0)$ básicamente significa que la magnitud de dicho dipolo aumenta cuando disminuye r , o cuando aumenta el solapamiento. Esto es aceptable, ya que la nube electrónica del ion negativo está mucho más "suelta" que la del ion positivo, de forma tal que la primera se alejará de la región de solapamiento más fácilmente que la segunda. De todos modos, no se llega a dar una forma analítica explícita a $m(r)$, la cual postuló Hardy [14] años después que Szigeti presentara su modelo.

En la tabla 3.1 se dan valores de s obtenidos a través de datos experimentales.

Tabla 3.1: Valores de la carga efectiva de Szigeti s obtenida a partir de datos experimentales. (Referencia [108])

Sal	Bajas temp.	Temp. amb.	Sal	Bajas temp.	Temp. amb.
LiF	0.80	0.81	RbF	0.92	0.95
LiCl	0.77	0.79	RbCl	0.81	0.83
LiBr	0.73	0.73	RbBr	0.78	0.80
LiI	0.68	0.70	RbI	0.74	0.77
NaF	0.82	0.83	CsF	0.93	0.95
NaCl	0.76	0.77	CsCl	0.85	0.85
NaBr	0.73	0.74	CsBr	0.82	0.82
NaI	0.71	0.73	CsI	0.77	0.78
KF	0.88	0.91	TlCl	0.86	0.87
KCl	0.79	0.81	TlBr	0.84	0.84
KBr	0.75	0.78	AgCl	0.68	0.69
KI	0.72	0.74	AgBr	0.67	0.68

3.3 Relaciones de Szigeti Ampliadas a altas presiones

Como quedó expresado en los objetivos del presente trabajo, nuestro interés está en el estudio de la variación de la carga iónica efectiva por efecto de altas presiones (esto es análogo a estudiar esa variación con respecto al volumen del cristal).

Como mencionamos antes, diferenciamos la expresión (3.40) y obtenemos:

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1}{2\chi_t(\epsilon_\infty - \epsilon_0)} \left\{ \frac{\partial \epsilon_0}{\partial p} + \frac{\partial \epsilon_\infty}{\partial p} \left[\frac{\epsilon_\infty - 2\epsilon_0 - 2}{\epsilon_\infty + 2} \right] \right\} + \frac{1}{2} - \gamma_t \quad (3.51)$$

donde χ_t es la compresibilidad volumétrica isotérmica y $\gamma_t = -(\partial \ln \omega_t / \partial \ln v)$ es el parámetro de Grüneisen correspondiente a la frecuencia de dispersión ω_t .

Cuando pueden despreciarse los efectos anarmónicos, esto es, a bajas temperaturas, el modelo subyacente indica que $\partial \ln s / \partial \ln V$ debería ser positivo.

Con el fin de estudiar los efectos de la temperatura en el uso de la Segunda relación de Szigeti diferenciada respecto del volumen para calcular $\partial \ln s / \partial \ln V$, se obtuvieron valores de estas cantidades usando datos a temperatura ambiente y a bajas temperaturas. La derivada $(\partial \epsilon_\infty / \partial p)_{T \rightarrow 0K}$ se calculó a partir de datos a temperatura ambiente considerando que $(\partial \epsilon_\infty / \partial \ln v)_T$ es independiente de la temperatura [112]. Las contribuciones de los distintos términos en los cálculos de $\partial \ln s / \partial \ln V$ con datos a bajas temperaturas muestran un resultado un orden de magnitud menor que el valor de las dos contribuciones principales: el término en γ_t y el término en $(\partial \epsilon_0 / \partial p)_T$, que tienen signos opuestos. Los valores obtenidos son, por lo tanto, muy sensibles a pequeños errores de los datos experimentales que se utilicen en los cálculos, especialmente los de $(\partial \epsilon_0 / \partial p)_T$ y γ_t .

3.3.1 El parámetro de Grüneisen γ_t

El término aditivo de la ecuación (3.51) correspondiente al parámetro de Grüneisen γ_t juega un papel muy importante en el valor final de $\partial \ln s / \partial \ln V$. A diferencia de estas cantidades, γ_t es medible experimentalmente, pero hasta el presente no se conocen mediciones efectuadas a temperaturas suficientemente bajas (cerca del 0K), sino que ha sido medido sólo a temperatura ambiente. Debido a que el formalismo propuesto que conduce a las ecuaciones mencionadas es válido a bajas temperaturas, resulta de interés proponer distintas maneras de estimar al parámetro γ_t para dicho rango de temperaturas. Esto fue realizado previamente en nuestro grupo para las estructuras de NaCl y CsCl en base a derivar expresiones de la frecuencia de dispersión ω_t respecto del volumen utilizando el modelo de ion rígido, el modelo de capas y el modelo de dipolos de deformación [45]. La estructura de fluorita se estudió vía los modelos de dipolos de deformación y de Ganesan y Srinivasan [113].

Partimos entonces de la Primera relación de Szigeti (3.39) ampliada y derivando respecto del volumen, obtenemos una forma de evaluar γ_t a bajas temperaturas, resultando:

$$\gamma_t = \frac{1}{2\chi_t} \left[\frac{d\epsilon_\infty/dp}{\epsilon_\infty + 2} - \frac{d\epsilon_0/dp}{\epsilon_0 + 2} \right] + \frac{1}{2} \frac{d\chi_t^{-1}}{dp} - \frac{5}{6} \quad (3.52)$$

la cual es válida a $p=0$ y se utilizaron derivadas totales porque la teoría se aplica a la red estática.

Esta ecuación es válida para las estructuras de NaCl y CsCl (también blenda de zinc y fluorita). Combinando esta ecuación con (3.51) obtenemos:

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1}{2\chi_t(\epsilon_\infty - \epsilon_0)} \left\{ \frac{\partial \epsilon_0}{\partial p} \left[\frac{\epsilon_\infty + 2}{\epsilon_0 + 2} \right] - \frac{\partial \epsilon_\infty}{\partial p} \left[\frac{\epsilon_0 + 2}{\epsilon_\infty + 2} \right] \right\} - \frac{1}{2} \frac{\partial \chi_t^{-1}}{\partial p} + \frac{4}{3} \quad (3.53)$$

Otro aspecto de interés es el estudio de distintas formas de parametrización del potencial de solapamiento $\phi(r)$ en cuanto a su influencia en las estimaciones de estas propiedades, y recordando que $p = -du/dv$ y $\chi^{-1} = v(d^2u/dv^2)$, con $u(r) = -A/r + M\phi(r)$, podemos expresar γ_t en función de dicho potencial de corto alcance, resultando [114]:

$$\gamma_t = \frac{2\phi'(r) - r[2\phi''(r) + r\phi'''(r)]}{6[2\phi'(r) + r\phi''(r)]} + \frac{M}{\kappa} \frac{2\phi'(r) + r\phi''(r)}{18r^2} \left(\frac{\partial \epsilon_\infty / \partial p}{\epsilon_\infty + 2} - \frac{\partial \epsilon_0 / \partial p}{\epsilon_0 + 2} \right) \quad (3.54)$$

donde M es el número de coordinación, κ una constante para cada estructura que puede tomar los valores 2 para NaCl y $(8/3\sqrt{3})$ para CsCl y $\phi'(r)$, etc., son las correspondientes derivadas del potencial de solapamiento respecto de la distancia interiónica r .

En la tabla 3.2 se dan valores experimentales de γ_t . (En la tabla 10.8 del Apéndice b se dan valores experimentales de la frecuencia de vibración ω_t).

Tabla 3.2: Valores experimentales de γ_t .

Sal	γ_t
LiF	2.35 ± 0.16 [115] 2.6 [116] 2.59 [118]
NaF	2.08 ± 0.18 [115] 2.95 [118] 3.0 [116]
NaCl	2.35 ± 0.16 [115] 2.40 [116]
NaBr	2.37 ± 0.20 [115] 3.0
KCl	2.28 ± 0.18 [115] 2.83 ± 0.1 [119]
KBr	2.06 ± 0.13 [115] 2.46 ± 0.1 [119]
KI	2.20 ± 0.06 [115] 3.1 [120]
RbCl	2.16 ± 0.10 [115]
RbBr	2.39 ± 0.16 [115]
RbI	2.09 ± 0.15 [115] 2.5 [120] 2.55 [117]
CsCl	3.14 ± 0.10 [115] 2.34 ± 0.55 [122]
CsBr	2.74 ± 0.04 [115] 2.15 ± 0.52 [122] 2.1 [121]
CsI	2.42 ± 0.08 [115] 1.90 ± 0.58 [122]
TlCl	3.62 ± 0.20 [115] 3.9 ± 0.8 [122]
TlBr	4.30 ± 0.16 [115] 3.8 ± 0.8 [122]
AgCl	4.34 ± 0.16 [115] 5.0 ± 1.0 [122]
AgBr	4.41 ± 0.19 [115] 5.6 ± 1.1 [122]

Capítulo 4

Modelos

4.1 Aproximación dipolar

Una suposición básica que tienen los siguientes modelos en común es que es adecuado describir la distorsión electrónica usando la aproximación de dipolos puntuales. Esto es, el efecto de distorsión en una red sobre la configuración electrónica puede ser descrito por un dipolo efectivo ubicado en el centro de un dado ion.

4.2 Modelo de ion rígido

Como quedó dicho en la introducción, uno de los primeros modelos, desarrollado por Born [123] veía a los cristales como formados por iones puntuales, mas y menos, que evitan colapsar bajo su mutua atracción coulombica debido a la presencia de una interacción repulsiva de corto rango, que en el modelo más simple se supone que actúa entre primeros vecinos. Esta descripción tuvo éxito para dar cuenta de la energía de cohesión de esos materiales. Sin embargo, esta descripción no es adecuada cuando uno desea discutir el comportamiento dinámico de estos materiales, pues cuando la red es arbitrariamente distorsionada, los iones dejan de estar en sitios de simetría cúbica, y entonces sus distribuciones de carga pueden adquirir momentos multipolares, de los cuales el más importante es el componente dipolar. El primer trabajo extensivo sobre la dinámica de un cristal iónico fue llevado a cabo por Kellermann [5]; su tratamiento estaba basado en el modelo de Born, y tomó en consideración la naturaleza de largo alcance de la interacción de Coulomb, y su efecto en la dinámica de redes. Cuando una red es distorsionada, los iones desplazados pueden ser representados en primera aproximación por dipolos ubicados en sitios de la red perfecta. Aparece un cambio en la energía debido a la interacción dipolo-dipolo sumada sobre todos los sitios del cristal. No se puede trunca esta suma debido a que la interacción es de largo alcance y es sólo condicionalmente convergente. Entonces, Kellermann llevó a cabo esta suma sobre todo el cristal usando la técnica propuesta por Ewald [6] para el cálculo de la energía de Madelung, extendida para el cálculo de la suma de dipolo-dipolo.

4.3 Modelo de dipolos de deformación

Szigeti obtuvo la siguiente relación entre las constantes dieléctricas de baja y alta frecuencias, ϵ_0 y ϵ_∞ , y la frecuencia de absorción en el infrarrojo ω_t :

$$\epsilon_0 - \epsilon_\infty = (\epsilon_\infty + 2)^2 [4\pi(Ze)^2] / 9\mu V \omega_t^2$$

y observó que esta ecuación no es verificada por los datos experimentales. Consecuentemente, introdujo el llamado parámetro de carga efectiva $e^*/e = s$, que queda definido como:

$$Zes = \omega_t \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{3}{\epsilon_\infty + 2} (\mu V)^{\frac{1}{2}} \quad (4.1)$$

Una red de iones esféricos no vibrantes que son polarizables por un campo eléctrico en el centro del ion, no deformable de otro modo, debe corresponder con un valor $s = 1$ (esto vale cuando las interacciones anarmónicas son despreciadas y es entonces aplicable a bajas temperaturas).

Para llegar a esta relación, Szigeti ha hecho dos suposiciones:

- Que el campo efectivo que actúa sobre un ion en un cristal uniformemente polarizado, de polarización P en un campo E es $E + \frac{4}{3}\pi P$
- Que el momento dipolar en el sitio de un ion cuando el ion en cuestión es desplazado una pequeña distancia ξ es $\pm e\xi$ (aparte de la polarización electrónica).

La falla en la relación implicaría que al menos alguna suposición no es válida. Hay motivos para pensar que la primera suposición es acertada, por ejemplo el trabajo de Tessman, Kahn y Shockley [124] donde se obtuvieron polarizabilidades de iones, cuyo valor para un dado ion no depende de su entorno y este trabajo está basado en la suposición de que el campo efectivo es $E + \frac{4}{3}\pi P$. Esto indicaría que la falla se encuentra en la segunda suposición. La aproximación dipolar resulta inadecuada para calcular efectos de distorsión electrónica por fuerzas repulsivas no electrostáticas. La distribución de carga en un desplazamiento no es uniforme sobre todo el ion. Entonces la variación de carga en las regiones de solapamiento y su efecto en las fuerzas repulsivas no guarda relación con el dipolo asociado con la distorsión. Como la relación de Cauchy entre las constantes elásticas se cumple aproximadamente bien para sales de tipo NaCl, y esto vale para fuerzas centrales, esto se puede tomar como un buen argumento para pensar a los iones como esféricamente simétricos. Sin embargo, la falla en la aproximación dipolar para dar cuenta del comportamiento dieléctrico, llevó a Szigeti a sugerir que el comportamiento observado se puede deber a una distorsión en la nube electrónica debido a la interacción de corto alcance entre primeros vecinos. Habría una tendencia para los electrones de los iones a ser excluidos de regiones de relativamente alta densidad de carga. En el cristal sin distorsión, este efecto está esencialmente contenido en la parte de corto alcance de la energía cohesiva, y no afecta realmente la energía electrostática ya que el momento multipolar asociado es de muy alto orden, y esos multipolos actúan sólo a muy cortas distancias. Pero la situación es muy diferente considerando una red distorsionada, donde la distorsión sobre un dado ion tiene una componente antisimétrica. En este caso, un dipolo puede ser inducido sobre el ion y su magnitud puede ser calculada [125]:

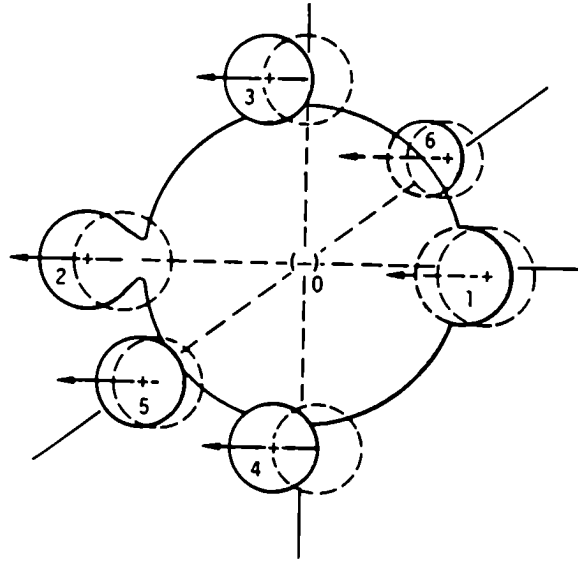


Figura 4.1: Representación esquemática de la distorsión electrónica asociada con un conjunto de desplazamientos iónicos en una red de NaCl.

$$\mu_{d\alpha} = m'(r_o) [(\xi_1^\alpha - \xi_0^\alpha) + \xi_0^\alpha - \xi_2^\alpha] + \frac{m(r_o)}{r_o} \sum_{\delta=3}^6 \xi_\delta^\alpha - \xi_0^\alpha \quad (4.2)$$

Para un desplazamiento uniforme de la subred este dipolo se acopla con el campo externo efectivo sobre el ion y actúa cambiando la carga en una cantidad $q : \pm e \rightarrow \pm(e - q)$ donde $q = -\frac{M}{3} \left[m'(r_o) + \frac{2}{r_o} m(r_o) \right]$ Según la hipótesis de Szigeti uno esperaría que los iones se muevan en fase opuesta como si llevaran efectivamente una carga más pequeña que la carga electrónica total. Cada enlace entre primeros vecinos estaría asociado a un momento dipolar que depende sólo de la separación de los dos iones. Este momento es $m(r)$ y $m'(r)$ es su derivada respecto de r ; r_o es la separación de equilibrio. Así tenemos $e^* = |e| + 2m'(r_o) + \frac{4}{r_o} m(r_o)$ que es equivalente a la fórmula anterior (con M , el número de coordinación, igual a 6 en este caso)[111]. Para determinar $m(r)$ y $m'(r)$ se debe asumir alguna forma particular. Hardy propone que el momento dipolar $m(r)$ es directamente proporcional al potencial de corto alcance, y elige para este último la forma exponencial, esto es $m(r) \exp(-r/\rho)$. Este modelo es una cruda aproximación a la más bien compleja distorsión electrónica que seguramente tiene lugar en realidad. En particular, estos "dipolos de deformación" tienen una localización algo ambigua. Uno espera que la distorsión sea más importante en la periferia del ion, y entonces no es quizás una buena aproximación representar dicha distorsión como un dipolo en el centro del ion. Sin embargo es una aproximación razonable para empezar. Hay dos casos extremos: asumir que los dipolos están en el centro del ion negativo, o que están en el centro del ion positivo. Una cuestión

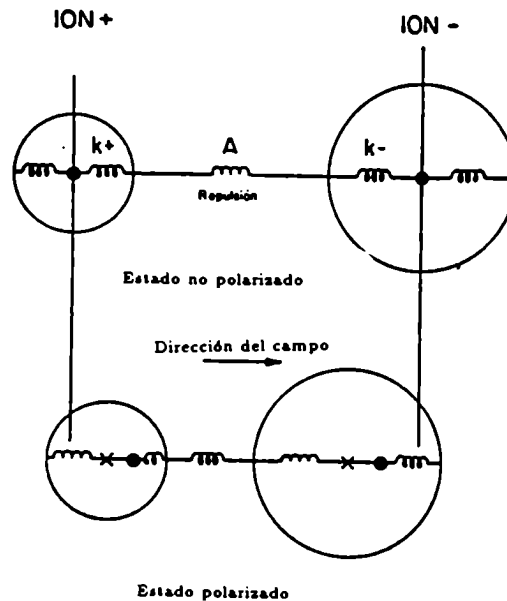


Figura 4.2: Modelo de capas

adicional es cuál de los iones se deforma o si se deforman los dos. Generalmente se supone que sólo se deforma el ion negativo. En algunos casos es adecuado considerar los dipolos de deformación en el centro del ion negativo; en otros, en el centro del ion positivo, por ejemplo en cristales donde el anión es mucho mayor que el catión.

4.4 Modelo de capas

El modelo de capas simple, o de capas rígidas es una simplificación del modelo original de Dick y Overhauser [9], y fue desarrollado por varios investigadores como Havinga [126], Hanlon y Lawson [127] y generalizado por Cochran [128, 129, 130] para calcular las relaciones de dispersión de las vibraciones de la red, es decir la relación entre la frecuencia de vibración ω y los vectores de onda \mathbf{q} .

La idea básica es ver al ion como compuesto de un núcleo central pesado ("carozo" o core), que incluye el núcleo atómico y los electrones más internos, y una capa de electrones externos, esférica, rígida, de masa despreciable. Entre capa y core hay una fuerza restauradora de tipo armónico. Las fuerzas interiónicas de corto alcance se ejercen entre cores, entre capas, y entre cores y capas en el modelo más general; para simplificar se asume a menudo que la interacción de corto alcance se ejerce sólo entre las capas. Llamaremos k_+ y k_- a las constantes de fuerza core-capa, y n_+ y n_- a las cargas de las capas del catión y del anión respectivamente.

Este modelo conduce naturalmente a la aproximación dipolar, pues el efecto de una distorsión de la red sobre la configuración de un dado ion es desplazar el core respecto de la

capa; el resultado de esto, debido a que la capa es esférica, es crear un dipolo en el centro del ion. El modelo de capas lleva a una polarización por interacción de corto alcance. Existe la posibilidad de desplazamientos capa-core producidos por un campo efectivo presente debido a las cargas efectivas de los otros iones en el cristal o debido a otros dipolos inducidos sobre esos iones. Hay entonces dos mecanismos de polarización: inducción por fuerzas de corto alcance e inducción, de largo alcance, por campos eléctricos.

El modelo de capas tiene una cierta fundamentación mecanocuántica. Esto se puede ver mostrando que la energía de red se puede desarrollar aproximadamente como una serie de potencias en los desplazamientos atómicos y componentes dipolares. La forma cuadrática resultante para la energía potencial puede ser usada para derivar ecuaciones de movimiento que son formalmente idénticas a las ecuaciones del modelo de capas, con lo cual el lenguaje de este modelo se convierte en una terminología conveniente y más fácil de manejar. Tolpygo y colaboradores [131] fueron los primeros en desarrollar los fundamentos mecanocuánticos y Yamashita y Kurosawa [132] en su investigación sobre constantes dieléctricas de cristales iónicos usaron un enfoque muy similar. Luego Mashkevitch [133] y Cowley [134] extendieron este trabajo. El tratamiento de Cowley está basado en las siguientes suposiciones:

La aproximación de Born-Oppenheimer.

La aproximación electrostática, que no tiene en cuenta los efectos de retardación.

Las frecuencias de los modos normales se consideran mucho menores que las frecuencias de las transiciones electrónicas (luego este tratamiento no es aplicable a los metales).

El hamiltoniano perturbado del cristal debido a la presencia de un modo normal vibracional es expresable como una suma de términos de desplazamientos de subceldas y momentos multipolares de esas subceldas.

Se obtienen ecuaciones de movimiento como las del modelo de capas cuando los multipolos se limitan a los dipolos.

Muy brevemente, el procedimiento es el siguiente: Se definen las coordenadas del centro de masa de las subceldas rodeando cada núcleo en el cristal, y junto con las coordenadas de los electrones son usadas para expresar el hamiltoniano no perturbado $H^{(0)}$ que contiene la energía cinética y la energía potencial $U^{(0)}$ de los electrones y núcleos cuando los centros de masa de las subceldas no son desplazados. El hamiltoniano para el cristal cuando los centros de masa de las subceldas son desplazados se escribe $H = H^{(0)} + H^{(1)} + \dots$, y $H^{(1)}$ es expandido en términos de desplazamientos del centro de masa y momentos dipolares de las subceldas. Éstos son definidos en términos de funciones perturbadas de primer orden $\Psi^{(1)}$. Asumiendo formas de onda plana para los desplazamientos y dipolos en el cristal la ecuación de Schödinger dependiente del tiempo se puede escribir en primera aproximación:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^{(1)}}{\partial t} - H^{(0)} \Psi^{(1)} = H^{(1)} \Psi^{(0)}$$

$\Psi^{(1)}$ es escrita como una expansión de autofunciones de $H^{(0)}$, y se halla una solución para $\Psi^{(1)}$ en términos de amplitudes de dipolos y desplazamientos. Con esa expresión para $\Psi^{(1)}$

es posible encontrar la fuerza conjugada al dipolo $\mathbf{q}(\mathbf{k})$ de la K -ésima subcelda asociada con el vector de Bravais l :

$$\mathbf{F} = - \int [\Psi^{(0)*} + \Psi^{(1)*}] \frac{\partial U^{(0)}}{\partial \mathbf{q}(\mathbf{k})} [\Psi^{(0)} + \Psi^{(1)}] d\tau$$

Expandiendo $\partial U^{(0)}/\partial \mathbf{q}(\mathbf{k})$ a primer orden y usando la aproximación adiabática que dice que los dipolos de la subcelda están siempre en equilibrio ($\mathbf{F} = \mathbf{0}$), se llega a un conjunto de ecuaciones que en forma matricial se puede escribir como

$$\mathbf{0} = \mathbf{G}\mathbf{U} + \mathbf{H}\mathbf{Q}$$

donde \mathbf{U} y \mathbf{Q} son vectores columna de dimensión $3n$ de componentes de desplazamientos y dipolos y \mathbf{G} y \mathbf{H} son matrices de dimensión $3n \times 3n$ con coeficientes que representan interacciones de dipolos con desplazamientos.

De una manera similar se encuentran las ecuaciones de movimiento de los centros de masa de las subceldas:

$$\omega^2 \mathbf{M}\mathbf{U} = \mathbf{A}\mathbf{U} + \mathbf{J}\mathbf{Q}$$

donde \mathbf{M} es una matriz diagonal de $3n \times 3n$ conteniendo las masas de las subceldas.

Cuando \mathbf{Q} es escrita como $\mathbf{Y}\mathbf{W}$, con \mathbf{Y} una matriz diagonal de $3n \times 3n$ representando las cargas de las capas, las matrices \mathbf{G} , \mathbf{H} , \mathbf{A} y \mathbf{J} separadas en una parte de Coulomb y otra de corto alcance, se obtienen ecuaciones como las del modelo de capas [130]:

$$m\omega^2 \mathbf{U} = (\mathbf{R} + \mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Z})\mathbf{U} + (\mathbf{T} + \mathbf{Z}\mathbf{C}\mathbf{Y})\mathbf{W}$$

$$\mathbf{0} = (\bar{\mathbf{T}} + \mathbf{Y}\mathbf{C}\mathbf{Z})\mathbf{U} + (\mathbf{S} + \mathbf{Y}\mathbf{C}\mathbf{Y})\mathbf{W}$$

donde \mathbf{U} es un vector columna de $3n$ elementos, \mathbf{R} , \mathbf{T} y \mathbf{S} son matrices de $3n \times 3n$ que describen las interacciones de corto alcance, \mathbf{C} es la matriz de coeficientes de Coulomb, y \mathbf{m} , \mathbf{Z} y \mathbf{Y} son matrices diagonales de $3n \times 3n$ que representan las masas iónicas, las cargas iónicas y las cargas de las capas respectivamente.

En principio esta derivación da una conexión entre los parámetros del modelo de capas y las funciones de onda del cristal, pero es sólo formal e involucra muchas expresiones que son muy difíciles de evaluar en la práctica. Esto hace necesario ajustar los parámetros con datos experimentales.

Para estudiar las propiedades dieléctricas vamos a considerar el comportamiento del modo óptico transversal para $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$.

Vamos a llamar x_+ al desplazamiento del núcleo del ion positivo respecto de su posición en el equilibrio y de manera similar x_- será el desplazamiento del núcleo del ion negativo respecto de su posición de equilibrio. Llamaremos X al desplazamiento relativo de los núcleos de los iones, o sea $X = x_+ - x_-$. En cuanto a las capas d_+ será el desplazamiento del centro de la capa del ion positivo respecto de su núcleo y d_- el desplazamiento del centro del ion negativo respecto de su núcleo.

Entonces tenemos las siguientes ecuaciones de movimiento para las capas:

$$n_- e E_{ef} - k_- d_- + A(X - d_- + d_+) = 0$$

$$n_+ e E_{ef} - k_+ d_+ - A(X - d_- + d_+) = 0$$

y para los núcleos

$$-(n_- - Z)e E_{ef} + k_- d_- = -m_- \omega^2 x_-$$

$$-(n_+ + Z)e E_{ef} + k_+ d_+ = -m_+ \omega^2 x_+.$$

Combinando las ecuaciones anteriores se obtiene

$$\bar{m} \omega^2 X = Ze E_{ef} + A(X - d_- + d_+).$$

El momento dipolar por par de iones es

$$p = -ZeX + n_- e d_- + n_+ e d_+$$

y la polarizabilidad

$$\alpha = \left[\frac{[(n_+ + Z)e]^2}{k_+} + \frac{[(n_- - Z)e]^2}{k_-} + \frac{(Ze)^2}{A} - \bar{m} \omega^2 \left(\frac{(n_+ e)^2}{Ak_+} + \frac{(n_- e)^2}{Ak_-} + \frac{[(n_+ + n_-)e]^2}{k_+ k_-} \right) \right] \left[1 - \bar{m} \omega^2 \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right) \right]^{-1}$$

Para valores de frecuencias ω grandes ($\omega \rightarrow \infty$) se obtiene α_∞ que se puede relacionar con la constante dieléctrica ϵ_∞ a través de la fórmula de Lorentz-Lorenz:

$$\alpha_\infty = \frac{3}{4\pi N} \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 2} = \frac{(n_+ e)^2}{k_+} + \frac{(n_- e)^2}{k_-} - \left(\frac{n_+ e}{k_+} - \frac{n_- e}{k_-} \right)^2 \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right)^{-1} \quad (4.3)$$

mientras que para valores de frecuencias ω pequeños ($\omega \rightarrow 0$) se obtiene α_0 que se puede relacionar con la constante dieléctrica ϵ_0 a través de la relación de Clausius-Mosotti:

$$\alpha_0 = \frac{3}{4\pi N} \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 2} = \frac{[(n_+ + Z)e]^2}{k_+} + \frac{[(n_- - Z)e]^2}{k_-} + \frac{(Ze)^2}{A} \quad (4.4)$$

Utilizando las ecuaciones (4.3) y (4.4) se puede obtener la frecuencia de absorción en el infrarrojo

$$\bar{m} \omega_i^2 = \frac{\epsilon_\infty + 2}{\epsilon_0 + 2} \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right)^{-1} \quad (4.5)$$

Combinando lo obtenido para ϵ_0 , ϵ_∞ y ω_i , se obtiene para la carga efectiva de Szigeti s

$$s - 1 = \left(\frac{n_+}{k_+} - \frac{n_-}{k_-} \right) \left(\frac{Z}{A} + \frac{Z}{k_+} + \frac{Z}{k_-} \right)^{-1} \quad (4.6)$$

El modelo es capaz de explicar entonces las desviaciones de la carga efectiva de Szigeti de la carga electrónica total debido al mencionado mecanismo de polarización de corto alcance.

4.5 Modelo de cargas de intercambio

En el modelo de cargas de intercambio tenemos, además de los mecanismos de polarización presentados en el modelo de capas simple, la llamada polarización por cargas de intercambio.

La idea está basada en el cálculo de interacción de dos átomos de capa cerrada (dos átomos de helio), donde las funciones de onda atómicas son tomadas como funciones hidrogenoides 1s. Entonces la energía de interacción W está dada por

$$W + E_a^0 + E_b^0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle / \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle$$

donde E_a^0 y E_b^0 son las energías de dos átomos de helio separados infinitamente, y Ψ_0 es un producto asimetrizado de funciones de onda 1s.

La integral de normalización se puede expresar

$$\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = (1 - S^2)^2$$

donde S es la integral de overlap $\int u_a(1)u_b(1)d\tau_1$.

La integral de interacción W puede ser escrita [135]

$$\begin{aligned} \frac{W}{e^2} = & \frac{4 - 2S^2}{(1 - S^2)^2} \int \frac{u_a^2(1)u_b^2(2)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 - \frac{4Z}{1 - S^2} \int \frac{u_a^2(1)}{r_{b1}} d\tau_1 + \\ & + \frac{Z^2}{R} - \frac{2 - 4S^2}{(1 - S^2)^2} \int \frac{u_a(1)u_a(2)u_b(1)u_b(2)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 + \\ & - \frac{4S}{(1 - S^2)^2} \int \frac{u_a(1)u_b(1)u_a^2(2)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 + \\ & + \frac{4SZ}{1 - S^2} \int \frac{u_a(1)u_b(1)}{r_{b1}} d\tau_1 \end{aligned} \quad (4.7)$$

A los términos en (4.7) se les puede dar una interpretación física en términos de la densidad de carga asociada con la función de onda Ψ_0 . la densidad de carga está dada por

$$\rho(1) = -(|e| / \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle) \int \Psi_0^* \Psi_0 d\tau'$$

donde la integración es sobre todas las coordenadas de spin y todas las coordenadas espaciales excepto una (la coordenada 1). El resultado de esta integración da

$$\rho(1) = -[|e| / (1 - S^2)] [2u_a^2(1) + 2u_b^2(1) - 4Su_a(1)u_b(1)]$$

A primer orden en S^2 los primeros dos términos, son

$$\rho_{el}(1) = -|e| [(1 + S^2)2u_a^2(1) + (1 + S^2)2u_b^2(1)]$$

que puede ser interpretada como las distribuciones de carga esféricamente simétricas de dos átomos de helio no interactuantes incrementadas en un factor de $1 + S^2$. La parte restante, la distribución de carga de intercambio, es

$$\rho_{ex}(1) = |e| 4Su_a(1)u_b(1)$$

y es una distribución de carga positiva, cuya magnitud depende directamente del valor de la integral de overlap.

Integrando se obtiene la carga de intercambio total:

$$q_{ex} \equiv \int \varrho_{ex}(1) d\tau_1 = 4|e|S^2. \quad (4.8)$$

Se pueden interpretar entonces los términos en (4.7). En orden, éstos representan: la interacción de Coulomb entre cargas electrónicas de los dos átomos; la interacción de Coulomb entre las cargas electrónicas y los núcleos, los electrones en a interactuando con el núcleo b y viceversa; la interacción núcleo-núcleo; la interacción de carga de intercambio con sí misma; la interacción de carga de intercambio con la carga electrónica y la interacción entre carga de intercambio y núcleo.

Dick y Overhauser evaluaron las integrales de (4.7) en términos de las funciones tabuladas por Kotani, Amemiya e Ishiguro [136] para conocer la importancia relativa de las contribuciones a W . El resultado final fue

$$W \simeq 2S^2e^2/R = eq_{ex}/2R. \quad (4.9)$$

La ecuación (4.9) muestra que si W es una función conocida de R se tiene una forma de estimar q_{ex} . Además W es proporcional a q_{ex}/R y depende exponencialmente de R . Se asume que lo mismo ocurre cuando interactúan átomos de capa cerrada más complejos y que entonces la energía de interacción de corto alcance para dicho par de átomos puede escribirse

$$W = B \exp(-R/\rho) = \gamma q_{ex}/R \quad (4.10)$$

donde B , ρ y γ son constantes.

Dick y Overhauser calculan la polarización en un cristal de estructura de NaCl y obtienen, teniendo en cuenta (4.10), la polarización por intercambio P_{ex} , a partir del cual definen el parámetro de carga de intercambio D :

$$P_{ex}/N = [(\tau_+ - \tau_-)B \exp(-R/\rho)(R - 4\rho)/\rho\gamma e] x \equiv D x \quad (4.11)$$

donde τ_+ y τ_- son los radios de catión y anión, N es el número de pares de iones en el cristal y x es el desplazamiento relativo de las capas de iones positivos respecto de las capas de iones negativos al aplicar un campo eléctrico.

El momento dipolar por par de iones es

$$p = Ze(x_+ - x_-) - n_-ed_- - n_+ed_+ + D(x_+ + d_+ - x_- - d_-)$$

En este caso tenemos las siguientes ecuaciones de movimiento:

$$\begin{aligned} (-\bar{m}\omega^2 - \frac{4}{3}\pi N(e + D)^2 + A)X + (\frac{4}{3}\pi N(e + D)\beta_- - A)d_- + \\ + (\frac{4}{3}\pi N(e + D)\beta_+ + A)d_+ = (e + D)E_{ef} \end{aligned}$$

$$-\left(\frac{4}{3}\pi N(e+D)\beta_- - A\right)X + \left(\frac{4}{3}\pi N\beta_-^2 - k_- - A\right)d_- + \\ + \left(\frac{4}{3}\pi N\beta_- \beta_+ + A\right)d_+ = \beta_- E_{ef}$$

$$-\left(\frac{4}{3}\pi N(e+D)\beta_+ + A\right)X + \left(\frac{4}{3}\pi N\beta_- \beta_+ + A\right)d_- + \\ + \left(\frac{4}{3}\pi N\beta_+^2 - k_+ - A\right)d_+ = \beta_+ E_{ef}$$

Definiendo

$$\mu = \frac{n_+ e - D}{k_+} - \frac{n_- e + D}{k_-},$$

$$\nu = \frac{(n_+ e - D)^2}{k_+} + \frac{(n_- e + D)^2}{k_-},$$

$$\lambda = \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-}$$

se pueden escribir las ecuaciones anteriores como

$$\Delta X / k_+ k_- E_{ef} = A(e+D)\lambda + e + D + A\mu$$

$$\Delta d_- / E_{ef} = \bar{m}\omega^2 [k_+ \beta_- + A(\beta_- + \beta_+)] + Ak_+(e+D) - Ak_+ \beta_-$$

$$\Delta d_+ / E_{ef} = \bar{m}\omega^2 [k_- \beta_+ + A(\beta_- + \beta_+)] - Ak_-(e+D) - Ak_- \beta_+$$

donde Δ queda definido como

$$\Delta / k_+ k_- = \left\{ \left[A - \frac{4}{3}\pi N(e+D) \right]^2 - A \frac{4}{3}\pi N [\lambda(e+D)^2 + 2(e+D)\mu + \nu] \right\} + \\ - \bar{m}\omega^2 \left[(1+A\lambda) \left(1 - \frac{4}{3}\pi N\nu \right) + A \frac{4}{3}\pi N\mu^2 \right]$$

De manera análoga a lo que se vió para el modelo de capas simple, se tiene para α_0 y α_∞

$$\alpha_\infty = \frac{3V}{4\pi} \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 2} = \frac{(n_+ e - D)^2}{k_+} + \frac{(n_- e + D)^2}{k_-} + \\ - \left(\frac{n_+ e - D}{k_+} - \frac{n_- e + D}{k_-} \right)^2 \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right)^{-1} \quad (4.12)$$

y

$$\alpha_0 = \frac{3V}{4\pi} \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 2} = \frac{(n_+ e - D)^2}{k_+} + \frac{(n_- e + D)^2}{k_-} + 2(e+D) \\ + \left(\frac{n_+ e - D}{k_+} - \frac{n_- e + D}{k_-} \right)^2 + (e+D)^2 \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right) \quad (4.13)$$

La carga efectiva de Szigeti s queda entonces

$$s - 1 = \frac{D}{e} + \frac{1}{D} \left(\frac{n_+ e - D}{k_+} - \frac{n_- e + D}{k_-} \right) \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right)^{-1} \quad (4.14)$$

De manera análoga a lo que sucede en el modelo de dipolos de deformación discutido antes, la localización de la polarización por deformación resulta incierta. Esto haría pensar que la aproximación dipolar a la polarización por deformación es inadecuada. No obstante, el modelo de cargas de intercambio lleva a una descripción en la cual el solapamiento produce una distorsión localizada en algún punto en el enlace entre primeros vecinos; esta distorsión es equivalente a una pequeña carga positiva, que es compensada por un incremento uniforme en la magnitud de la carga negativa de las capas de catión y anión. En la aproximación dipolar, el dipolo efectivo producido es la diferencia entre dipolos opuestos centrados en los dos tipos de ion. En el modelo de dipolos de deformación, éstos son vistos como producidos por distorsiones internas en el ion negativo, el momento dipolar producido en cada enlace es confinado al anión; esto evita la dificultad de tener un dipolo como diferencia entre dos dipolos opuestos.

4.6 Parámetros de los modelos de capas

Como quedó dicho, en los modelos de capas se propone simular a un ion como un “carozo” formado por el núcleo atómico y los electrones más internos y una capa electrónica esférica de carga n , acoplada al “carozo” por una fuerza restauradora de constante k . Estos parámetros del modelo son fijados de diversas maneras en las distintas versiones del modelo según los autores. Una posibilidad, correspondiente con la idea original de Dick y Overhauser es utilizar la polarizabilidad del ion libre y datos de dispersión en el ultravioleta. Se conoce que en los iones con configuración electrónica de capa cerrada la polarizabilidad es debida casi exclusivamente al movimiento de los electrones más externos [137]. La polarizabilidad α de un ion en un campo aplicado de frecuencia angular ω está dada por

$$\alpha = \alpha_0 \frac{1}{1 - (\omega/\omega_0)^2}$$

donde $\alpha_0 = (ne)^2/k$, $\omega_0 = k/nm$, y e y m son la carga y la masa de un electrón. Teniendo en cuenta la relación de Lorentz

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 2} = \frac{4}{3} \pi N \alpha_0$$

y la dependencia con la frecuencia de la constante dieléctrica ϵ_0 para $\omega \ll \omega_0$

$$\epsilon = \epsilon_0 + m(\epsilon_0 - 1)^2 \frac{\omega^2}{4\pi N n e^2}$$

se pueden utilizar estas ecuaciones para obtener k y n . Las constantes dieléctricas y su dependencia con la frecuencia es conocida para gases nobles, no así para los iones de metales alcalinos o halógenos. Sin embargo, es razonable suponer que para un dado ion con

la configuración de un gas noble se puede tomar el mismo n del gas noble y adjudicar la diferencia debida a la distinta carga nuclear a un distinto valor de k .

Con este esquema de trabajo, se tienen parámetros n y k que dependen de cada ion, y en principio son los mismos independientemente de la sal de la que forman parte. Parámetros de este tipo, que fueron usados en los cálculos del presente trabajo, se muestran en la tabla 4.1.

Tabla 4.1: Parámetros de los modelos de capas.

Ion	n	$k / 10^4$ dyn cm	Ion	n	$k / 10^4$ dyn cm
Li ⁺	1.12	847.5	F ⁻	2.40	127.7
Na ⁺	2.40	742.5	Cl ⁻	4.35	119.2
K ⁺	4.35	525	Br ⁻	4.95	118.5
Rb ⁺	4.95	393	I ⁻	5.65	103
Cs ⁺	5.65	305	O ⁻⁻	2.40	34.8
Mg ⁺⁺	2.40	1415	Ag ⁺	5.46	275
Ca ⁺⁺	4.35	930	Tl ⁺	5.85	202
Sr ⁺⁺	4.95	658	Co ⁺⁺	4.68	1175
Mn ⁺⁺	4.62	849	Ni ⁺⁺	4.72	1389

Otra forma de trabajar es obtener los parámetros a través de datos de propiedades dieléctricas, utilizando relaciones como las de Clausius-Mosotti y Lorentz-Lorenz. Así, por ejemplo tenemos para el caso de considerar sólo la polarización del anión [138]

$$\frac{4\pi}{3V} (\alpha_e + \alpha_i) = \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 2}$$

$$\frac{4\pi}{3V} \alpha_e = \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 2}$$

$$\alpha_i = \frac{(Z - d)^2 e^2}{A - (e^2 d^2 / \alpha_e)}$$

$$d = \frac{nA}{k + A}$$

$$\alpha_e = \frac{n^2 e^2}{k + A}$$

De las cinco ecuaciones anteriores se pueden obtener valores de la polarizabilidad electrónica α_e , la polarizabilidad iónica α_i , el parámetro de distorsión iónica d [139], la constante de fuerza k y la carga electrónica de la capa n . Con este esquema de trabajo, los parámetros k y n son propios del compuesto cuyos datos se usaron, esto es, son diferentes para cada sal.

Capítulo 5

Formalismos desarrollados

Daremos a continuación los formalismos que hemos desarrollado para la aplicación de los modelos mencionados en el capítulo anterior para el estudio del efecto de la presión sobre diferentes propiedades de cristales iónicos.

5.1 Parámetros de los potenciales

5.1.1 Potencial de solapamiento extendido a primeros vecinos

Si consideramos la energía potencial de un par de iones en una red $W(r)$ de la forma

$$W(r) = -\frac{(Ze)^2\alpha_M}{r} + M\phi(r) - \frac{C}{r^6} - \frac{D}{r^8} \quad (5.1)$$

según las relaciones termodinámicas mencionadas en el capítulo 2 tenemos la presión p

$$p = -\frac{\partial W}{\partial V} = -\frac{r}{3V} \frac{\partial W}{\partial r} \quad (5.2)$$

y la compresibilidad isotérmica χ_t

$$\frac{1}{\chi_t} = -V \frac{\partial p}{\partial V} = -\frac{r}{3} \frac{\partial p}{\partial r} \quad (5.3)$$

luego

$$p = -\frac{1}{3kr^2} \left(\frac{(Ze)^2\alpha_M}{r^2} + M\phi'(r) + 6\frac{C}{r^7} + 8\frac{D}{r^9} \right) \quad (5.4)$$

y

$$\frac{9kr}{\chi_t} = \left(-4\frac{(Ze)^2\alpha_M}{r^3} + M \left(\phi''(r) - \frac{2}{r}\phi'(r) \right) - 54\frac{C}{r^8} - 88\frac{D}{r^{10}} \right). \quad (5.5)$$

Tomando $p = 0$ en ecuación (5.4),

$$M\phi'(r) = -\frac{(Ze)^2\alpha_M}{r^2} - 6\frac{C}{r^7} - 8\frac{D}{r^9} = \varsigma \quad (5.6)$$

y reemplazando $M\phi$ en ecuación (5.5)

$$M\phi''(r) = \frac{9kr}{\chi t} + 2\frac{(Ze)^2\alpha_M}{r^3} + 42\frac{C}{r^8} + 72\frac{D}{r^{10}} = \vartheta \quad (5.7)$$

obtenemos dos relaciones que se pueden usar para la parametrización de los potenciales de corto alcance ϕ .

Así tenemos, para el potencial de Born-Landé

$$\phi' = -n\frac{A}{r^{n+1}}$$

$$\phi'' = n(n+1)\frac{A}{r^{n+2}}$$

$$n = -\left(\frac{r\vartheta}{\zeta} + 1\right)$$

$$A = r^n \left(-\frac{r\zeta}{nM}\right)$$

para el potencial de Born-Mayer

$$\phi' = -\frac{B}{\rho} \exp(-r/\rho)$$

$$\phi'' = \frac{B}{\rho^2} \exp(-r/\rho)$$

$$\rho = -\frac{\zeta}{\vartheta}$$

$$B = -\rho\zeta \exp(r/\rho)$$

para el potencial de Hellmann

$$\phi' = -\phi \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{\rho_1}\right)$$

$$\phi'' = \phi \left(\frac{2}{r^2} + \frac{2}{r\rho_1} + \frac{1}{\rho_1^2}\right)$$

$$\rho_1 = \frac{-r + \sqrt{r^2 - 4r/\left(\frac{\vartheta}{\zeta} + \frac{2}{r}\right)}}{2}$$

$$B_1 = \frac{r\zeta \exp(r/\rho_1)}{M \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{\rho_1}\right)}$$

para el potencial de Wasastjerna

$$\phi' = -\phi \left(\frac{7 - \beta r}{r} \right)$$

$$\phi'' = \phi \left[\left(\frac{7 - \beta r}{r} \right)^2 - \frac{7}{r^2} \right]$$

$$\beta = \frac{-\left(\frac{r\vartheta}{\zeta} - 14\right) + \sqrt{\left(\frac{r\vartheta}{\zeta} - 14\right)^2 + 28\frac{r\vartheta}{\zeta} - 168}}{2r}$$

$$C = \frac{1}{r^7} \frac{\zeta \exp(\beta r)}{M} \left(\frac{7 - \beta r}{r} \right)^{-1}$$

para el potencial de Varshni-Shukla

$$\phi' = -2k_1 r \phi$$

$$\phi'' = \phi \left[(2k_1 r)^2 - 2k_1 \right]$$

$$k_1 = \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{2} - \frac{r\vartheta}{2\zeta} \right)$$

$$\lambda_1 = -\frac{r\zeta \exp(k_1 r^2)}{2M k_1 r^2}$$

para el potencial de Varshni-Shukla modificado

$$\phi' = -\frac{3}{2} k_2 r^{1/2} \phi$$

$$\phi'' = \phi \left[\frac{9}{4} k_2^2 r - \frac{3}{4} k_2 r^{-1/2} \right]$$

$$k_2 = \frac{1}{r^{3/2}} \left(\frac{1}{3} - \frac{2r\vartheta}{3\zeta} \right)$$

$$\lambda_2 = -\frac{2r\zeta \exp(k_2 r^{3/2})}{3M k_2 r^{3/2}}$$

y para el potencial logarítmico

$$\phi' = -\frac{9ab}{r} \frac{1}{r^9 + b}$$

$$\phi'' = \frac{9ab}{r^9 + b} \left(\frac{1}{r^2} + \frac{9r^7}{r^9 + b} \right)$$

$$b = \frac{-9r^9}{\frac{r\vartheta}{\zeta} + 1} - 1$$

$$a = -\frac{r\zeta}{9M} \left(\frac{1 + b/r^9}{b/r^9} \right)$$

5.1.2 Potencial de solapamiento extendido a segundos vecinos

En el caso de considerar que el potencial de repulsión entre iones se extiende hasta los segundos vecinos, esto es hasta el conjunto de iones más próximos con el mismo signo en las estructuras estudiadas, se utilizó una forma funcional del tipo

$$\begin{aligned}\Phi(r) = & Mb\beta_{+-} \exp[(r_+ + r_- - r)/\rho_{+-}] + \frac{1}{2}M'b\beta_{++} \exp[(2r_+ - \kappa r)/\rho_{++}] + \\ & + \frac{1}{2}M'b\beta_{--} \exp[(2r_- - \kappa r)/\rho_{--}]\end{aligned}\quad (5.8)$$

como en todo el trabajo r es la distancia entre primeros vecinos y consecuentemente κ es $\sqrt{2}$ para la estructura de NaCl y $2/\sqrt{3}$ para la estructura de CsCl. Según las consideraciones hechas en los distintos trabajos los valores de ρ_{+-} , ρ_{++} y ρ_{--} pueden ser distintos o iguales.

En los cálculos se tomaron los parámetros publicados por diversos autores; para mantener una consistencia con todo el conjunto de datos utilizados, se recalculó el valor del factor preexponencial b y se incluyó un factor σ multiplicando a ρ , de manera que estos parámetros ajustaran las derivadas primera y segunda de la energía potencial a los valores de la distancia interiónica de equilibrio y la compresibilidad, de manera similar a lo visto en las ecuaciones (5.6) y (5.7).

Así tenemos

$$\begin{aligned}\Phi(r) = & Mb\beta_{+-} \exp[(r_+ + r_- - r)/\sigma\rho_{+-}] + \\ & + \frac{1}{2}M'b\beta_{++} \exp[(2r_+ - \kappa r)/\sigma\rho_{++}] + \\ & + \frac{1}{2}M'b\beta_{--} \exp[(2r_- - \kappa r)/\sigma\rho_{--}]\end{aligned}\quad (5.9)$$

$$\begin{aligned}\Phi'(r) = & -M\frac{b}{\sigma\rho_{+-}}\beta_{+-} \exp[(r_+ + r_- - r)/\sigma\rho_{+-}] + \\ & - \frac{1}{2}M'\frac{b}{\sigma\rho_{++}}\beta_{++}\kappa \exp[(2r_+ - \kappa r)/\sigma\rho_{++}] + \\ & - \frac{1}{2}M'\frac{b}{\sigma\rho_{--}}\beta_{--}\kappa \exp[(2r_- - \kappa r)/\sigma\rho_{--}]\end{aligned}\quad (5.10)$$

$$\begin{aligned}\Phi''(r) = & M\frac{b}{(\sigma\rho_{+-})^2}\beta_{+-} \exp[(r_+ + r_- - r)/\sigma\rho_{+-}] + \\ & + \frac{1}{2}M'\frac{b}{(\sigma\rho_{++})^2}\beta_{++}\kappa^2 \exp[(2r_+ - \kappa r)/\sigma\rho_{++}] + \\ & + \frac{1}{2}M'\frac{b}{(\sigma\rho_{--})^2}\beta_{--}\kappa^2 \exp[(2r_- - \kappa r)/\sigma\rho_{--}]\end{aligned}\quad (5.11)$$

Para simplificar podemos decir que $\Phi' = -(b/\sigma) \cdot F(\sigma)$ y $\Phi'' = (b/\sigma^2) \cdot G(\sigma)$ donde F y G contienen a σ en las exponenciales; si suponemos inicialmente $\sigma = 1$ en F y G , igualando Φ' y Φ'' a ζ y ϑ como en las ecuaciones (5.6) y (5.7), podemos despejar un valor de b y un

valor de σ ; con este valor de σ volvemos al comienzo y recalculamos los valores hasta hacer σ prácticamente 1. De esa manera se obtienen el factor preexponencial b y un conjunto de valores de ρ ($\rho_{\text{final}} = \rho_{\text{inicial}} \cdot \prod_i^n \sigma_i$ donde n es el número de iteraciones) ajustados por la distancia interiónica de equilibrio y la compresibilidad isotérmica.

5.1.3 Energía de red. Variación de la compresibilidad con la presión.

Los potenciales parametrizados como se indicó antes fueron utilizados para calcular la energía de cohesión de la red según la ecuación (5.1) con $M\phi$ considerado hasta primeros o segundos vecinos, para un mol de pares de iones, y la derivada respecto de la presión del bulk modulus B_t (inversa de la compresibilidad χ_t).

$$\frac{\partial B_t}{\partial p} = -\frac{1}{27VB_t} \left[16 \frac{(Ze)^2 \alpha_M}{r} + M(4r\phi' - 3r^2\phi'' + r^3\phi''') + 486 \frac{C}{r^6} + 968 \frac{D}{r^8} \right] \quad (5.12)$$

o en forma más breve

$$\frac{\partial B_t}{\partial p} = -\frac{1}{27kB_t} \left[\frac{4}{r^2} \Psi' - \frac{1}{r} \Psi'' - \Psi''' \right] + \frac{4}{3} \quad (5.13)$$

tomando como Ψ a $\Phi - C/r^6 - D/r^8$, donde Φ es el potencial de solapamiento, extendido a primeros o segundos vecinos según corresponda (incluyendo el número de coordinación).

En la tabla 10.9 del Apéndice b se dan valores de la energía de cohesión y de $\partial B_t/\partial p$ experimentales.

5.2 Variación de la carga efectiva con el volumen

5.2.1 Modelo de dipolos de deformación

En el capítulo 3 se había obtenido una relación entre el momento de distorsión dipolar $m(r)$ y la carga efectiva de Szigeti

$$(s-1)Ze = \frac{M}{3} \left[m'(r) + \frac{2}{r} m(r) \right] \quad (5.14)$$

evaluado en la distancia interiónica de equilibrio r_0 . En el modelo de dipolos de deformación se postula una proporcionalidad directa entre la magnitud de la distorsión y el solapamiento interiónico ($m(r) \propto \phi(r)$). Reemplazando en (5.14) $m(r)$ y su derivada por $\Upsilon\phi(r)$ y su derivada, donde Υ es una constante, se obtiene

$$s-1 = \frac{\Upsilon M}{3Ze} \left[\phi'(r) + \frac{2}{r} \phi(r) \right]. \quad (5.15)$$

Derivando, teniendo en cuenta que

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{r}{3s} \frac{\partial s}{\partial V}$$

y reemplazando convenientemente, se llega a

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1-s}{3s} \left(1 - \frac{3\phi' + r\phi''}{\frac{2}{r}\phi + \phi'} \right). \quad (5.16)$$

La expresión anterior fue evaluada para siete formas distintas del potencial de solapamiento [140], que llevan a las siguientes expresiones:

· **Potencial de Born-Landé**

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1-s}{3s} (n+1) \quad (5.17)$$

· **Potencial de Born-Mayer**

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1-s}{3s} \left(\frac{r}{\rho} - \frac{2}{\frac{r}{\rho} - 2} \right) \quad (5.18)$$

· **Potencial de Hellmann**

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1-s}{3s} \left(1 + \frac{r_0}{\rho_1} - \frac{1}{r_0/\rho_1 - 1} \right) \quad (5.19)$$

· **Potencial de Wasastjerna**

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1-s}{3s} \left(\frac{\beta}{r} - \frac{9}{\beta/r - 9} - 7 \right) \quad (5.20)$$

· **Potencial de Varshni-Shukla**

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1-s}{3s} \left(2k_1 r^2 - \frac{2}{2k_1 r^2 - 1} - 1 \right) \quad (5.21)$$

Potencial de Varshni-Shukla Modificado

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1-s}{3s} \left(\frac{3}{2} k_2 r^{3/2} - \frac{6}{3k_2 r^{3/2} - 4} - \frac{1}{2} \right) \quad (5.22)$$

· **Potencial Logarítmico**

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{1-s}{3s} \left[\frac{\ln(1 + br^{-9})^2 + \frac{9br^{-9}}{1 + br^{-9}} \left(1 + \frac{9}{1 + br^{-9}} \right)}{\ln(1 + br^{-9})^2 - \frac{9br^{-9}}{1 + br^{-9}}} \right] \quad (5.23)$$

5.2.2 Modelos de capas

Según el formalismo del modelo de cargas de intercambio la carga efectiva de Szigeti se puede calcular como

$$s - 1 = \frac{D}{e} + \frac{1}{D} \left(\frac{n_+ e - D}{k_+} - \frac{n_- e + D}{k_-} \right) \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right)^{-1} \quad (5.24)$$

Diferenciando respecto del volumen la expresión anterior se obtiene

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{V}{Aes} \left\{ \frac{\partial D}{\partial V} + \frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial V} [(s-1)e - D] \right\} \left\{ \frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right\}^{-1} \quad (5.25)$$

Si se desprecian las interacciones con las cargas de intercambio, esto es, tomar D y sus derivadas igual a cero, se obtienen expresiones para el modelo de capas simple.

$$\frac{\partial \ln s}{\partial \ln V} = \frac{V}{Aes} \left\{ \frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial V} (s-1)e \right\} \left\{ \frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right\}^{-1} \quad (5.26)$$

5.3 Obtención del parámetro D para la estructura tipo CsCl

Siguiendo el procedimiento delineado en [9] se supone que hay una relación lineal entre el desplazamiento de los iones y el desplazamiento de las cargas de intercambio al pasar del estado no polarizado al estado polarizado.

Suponiendo que las cargas están en el punto de contacto entre las capas, y que $R = r_+ + r_-$, definimos

- ξ tal que $\frac{\xi}{r_-} = \frac{R+x}{R}$, luego $\xi = r_- + \frac{r_- x}{R}$
- η tal que $\frac{r_-}{R} = \frac{R-\eta}{R-x}$, luego $\eta = r_+ + \frac{r_- x}{R}$
- ζ tal que $\frac{\zeta}{r_-} = \frac{R/3+x}{R}$, luego $\zeta = \frac{r_-}{3} + \frac{r_- x}{R}$
- ζ' tal que $\frac{\zeta'}{r_-} = \frac{R/3-x}{R}$, luego $\zeta' = \frac{r_-}{3} - \frac{r_- x}{R}$

La polarización para una fila de N pares de iones:

$$\begin{aligned} P = & q_1 \{ \xi + [\xi + 2R] + \dots + [\xi + 2R(N-1)] \} + \\ & q_2 \{ [R + \eta] + [(R + \eta) + 2R] + \dots + [(R + \eta) + 2R(N-2)] \} + \\ & 3q_3 \left\{ \left(\frac{2}{3}R + \zeta \right) + \left(\frac{2}{3}R + \zeta + 2R \right) + \dots + \left[\frac{2}{3} + \zeta + 2R(N-1) \right] + \right. \\ & \left. \left(\frac{4}{3}R - \zeta' \right) + \left(\frac{4}{3}R - \zeta' + 2R \right) + \dots + \left[\frac{4}{3} - \zeta' + 2R(N-2) \right] \right\} + \\ & \left(-1 - \frac{1}{2}q_1 - \frac{1}{2}q_2 - 3q_3 \right) [2R + 4R + \dots + 2R(N-1)] + \\ & \left(1 - \frac{1}{2}q_1 - \frac{1}{2}q_2 - 3q_3 \right) [(R+x) + (R+x) + 2R + \dots + (R+x) + 2R(N-2)] + \\ & \left(1 - \frac{1}{2}q_1 - \frac{3}{2}q_3 \right) [R+x + 2R(N-1)] \end{aligned}$$

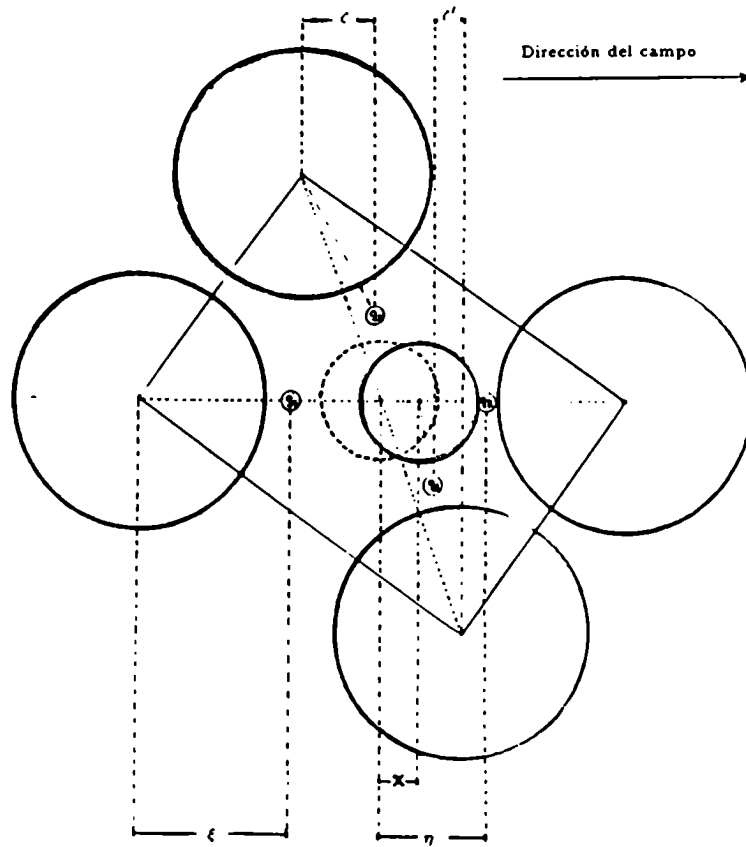


Figura 5.1: Modelo de cargas de intercambio para CsCl

$$\begin{aligned}
P = & q_1\{N\xi + N(N-1)R\} + q_2\{(N-1)(R+\eta) + (N-2)(N-1)R\} + \\
& 3q_3\{N\zeta + \frac{2}{3}NR + N(N-1)R + (\frac{4}{3}(N-1)R - (N-1)\zeta' + (N-2)(N-1)R) + \\
& (-1 - \frac{1}{2}q_1 - \frac{1}{2}q_2 - 3q_3)N(N-1)R + \\
& (1 - \frac{1}{2}q_1 - \frac{1}{2}q_2 - 3q_3)\{(N-1)(R+x) + (N-1)(N-2)R\} + \\
& (1 - \frac{1}{2}q_1 - \frac{3}{2}q_3)\{R+x + 2R(N-1)\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P = & q_1\{N\xi - \frac{1}{2}N(R+x)\} + q_2\{(N-1)\eta - \frac{1}{2}(N-1)(R+x)\} + \\
& 3q_3\{N\zeta - (N-1)\zeta' + \frac{1}{6}R - (N - \frac{1}{2})x\} + N(R+x)
\end{aligned}$$

Dividiendo por el número de pares y desechando términos de orden $1/N$

$$\frac{P}{N} = q_1\{\xi - \frac{1}{2}(R+x)\} + q_2\{\eta - \frac{1}{2}(R+x)\} + 3q_3\{\zeta - \zeta' - x\} + R+x \quad (5.27)$$

Los últimos dos términos representan físicamente la polarización del cristal debido al desplazamiento de los iones y de las nubes electrónicas. Los primeros términos están vinculados a las cargas de intercambio q_1 , q_2 y q_3 y van a conformar la llamada polarización por intercambio P_{exch} . Recordando las definiciones las cargas de intercambio [9]

$$q_1 = q_0 - gx$$

$$q_2 = q_0 + gx$$

$$q_3 = q_0 + O(x^2) \cong q_0$$

Reemplazando q_1 , q_2 y q_3

$$\frac{P_{ex}}{N} = q_0\{\xi + \eta + 3\zeta - 3\zeta' - R - 4x\} + gx\eta - \xi \quad (5.28)$$

Reemplazando ahora ξ , η , ζ y ζ'

$$\begin{aligned}
\frac{P_{ex}}{N} &= q_0\{8\frac{r_-x}{R} - 4x\} + gx\{r_+ - r_-\} \\
&= \{4q_0(\frac{2r_-}{R} - 1) + g(r_+ - r_-)\}x \equiv Dx \quad (5.29)
\end{aligned}$$

Generalizando la ecuación (4.10) para un potencial genérico ϕ tenemos entonces

$$q_0 = \frac{R\phi}{\gamma}$$

y

$$g = -\frac{1}{\gamma}(\phi + R\phi')$$

Teniendo en cuenta ésto, se obtiene

$$D = -\frac{(r_+ - r_-)}{\gamma} (5\phi + r\phi') \quad (5.30)$$

para la estructura de cloruro de cesio. La misma generalización de las ecuaciones de Dick y Overhauser [9] para las sales de estructura de cloruro de sodio llevan a

$$D = -\frac{(r_+ - r_-)}{\gamma} (4\phi + r\phi') \quad (5.31)$$

luego se pueden escribir las ecuaciones anteriores colocando un número n que será tomará los valores 5 ó 4 según el caso,

$$D = \frac{-(r_+ - r_-)}{\gamma} (n\phi + r\phi') \quad (5.32)$$

y que vale cuando se consideran las cargas de intercambio localizadas en la zona de contacto entre las capas.

Si se considera que las cargas de intercambio se encuentran cerca del núcleo del ion positivo, se obtiene

$$D = \frac{-r}{\gamma} (n\phi + r\phi'). \quad (5.33)$$

Una forma alternativa de evaluar el parámetro D es a partir del parámetro de carga efectiva de Szigeti s ; éstos se relacionan según se vió antes en la ecuación (5.24); de esta manera se evita utilizar la constante γ que se calcula a partir de integrales de solapamiento.

5.4 Formalismos a altas presiones

De acuerdo con el formalismo del modelo de cargas de intercambio se obtiene para la constante dieléctrica de bajas frecuencias la siguiente relación

$$\begin{aligned} \frac{3V \epsilon_0 - 1}{4\pi \epsilon_0 + 2} &= (e + D)^2 \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right) + \\ &+ 2(e + D) \left(\frac{n_+ e - D}{k_+} - \frac{n_- e + D}{k_-} \right) + \\ &+ \frac{(n_+ e - D)^2}{k_+} + \frac{(n_- e + D)^2}{k_-}, \end{aligned} \quad (5.34)$$

en tanto que para la constante dieléctrica de altas frecuencias se tiene

$$\begin{aligned} \frac{3V \epsilon_\infty - 1}{4\pi \epsilon_\infty + 2} &= \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right)^{-1} \\ &\cdot \left(\frac{n_+ e - D}{k_+} - \frac{n_- e + D}{k_-} \right)^2 + \frac{(n_+ e - D)^2}{k_+} + \frac{(n_- e + D)^2}{k_-} \end{aligned} \quad (5.35)$$

donde A es la habitualmente llamada constante de fuerza de interacción entre iones, que en este caso suponemos que se ejerce a través de las capas, y tiene la forma que se vió en el capítulo 3, ecuación (3.36).

$$A = \frac{M}{3} \left(\varphi'' + \frac{2}{r} \varphi' \right) \quad (5.36)$$

donde

$$M\varphi = M\phi - \frac{C}{r^6} - \frac{D}{r^8}. \quad (5.37)$$

Derivando respecto del volumen la ecuación (5.34) se obtiene, sucesivamente

$$V \frac{\partial \epsilon_0}{\partial V} = \frac{4\pi}{9} (\epsilon_0 + 2)^2 \left[\frac{e+D}{A^2} \left(2A \frac{\partial D}{\partial V} - (e+D) \frac{\partial A}{\partial V} \right) - \frac{3}{4\pi} \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 2} \right] \quad (5.38)$$

$$\begin{aligned} V^2 \frac{\partial^2 \epsilon_0}{\partial V^2} = & \frac{4\pi V}{9} (\epsilon_0 + 2)^2 \left\{ \frac{(e+D)^2}{A^3} \left[2 \left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)^2 - A \frac{\partial^2 A}{\partial V^2} \right] + \frac{2(e+D)}{A^2} \right. \\ & \cdot \left[A \frac{\partial^2 D}{\partial V^2} - 2 \frac{\partial A}{\partial V} \frac{\partial D}{\partial V} \right] + \frac{2}{A} \left(\frac{\partial D}{\partial V} \right)^2 + \\ & \left. - \frac{9}{2\pi(\epsilon_0 + 2)^3} \frac{\partial \epsilon_0}{\partial V} \left[\epsilon_0 + 2 - V \frac{\partial \epsilon_0}{\partial V} \right] \right\} \quad (5.39) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V^3 \frac{\partial^3 \epsilon_0}{\partial V^3} = & \frac{4\pi V^2}{9} (\epsilon_0 + 2)^2 \left\{ \frac{(e+D)^2}{A^4} \left[-6 \left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)^3 - A^2 \frac{\partial^3 A}{\partial V^3} + 6A \frac{\partial A}{\partial V} \frac{\partial^2 A}{\partial V^2} \right] + \right. \\ & + \frac{6}{A^2} \frac{\partial D}{\partial V} \left[A \frac{\partial^2 D}{\partial V^2} - \frac{\partial A}{\partial V} \frac{\partial D}{\partial V} \right] + \frac{27V}{2\pi(\epsilon_0 + 2)^4} \left(\frac{\partial \epsilon_0}{\partial V} \right)^3 + \\ & \left. \frac{(e+D)}{A^3} \left[2A^2 \frac{\partial^3 D}{\partial V^3} - 6A \frac{\partial^2 D}{\partial V^2} \frac{\partial A}{\partial V} + 6 \frac{\partial D}{\partial V} \left(2 \left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)^2 - A \frac{\partial^2 A}{\partial V^2} \right) \right] \right\} \quad (5.40) \end{aligned}$$

donde las derivadas de la constante de fuerza tienen la forma

$$\frac{\partial A}{\partial V} = \frac{M}{9kr^2} \left(\varphi'''' + \frac{2}{r} \varphi'' - \frac{2}{r^2} \varphi' \right), \quad (5.42)$$

$$\frac{\partial^2 A}{\partial V^2} = \frac{M}{27k^2 r^2} \left(\varphi'''' - \frac{8}{r^2} \varphi'' + \frac{8}{r^3} \varphi' \right), \quad (5.43)$$

$$\frac{\partial^3 A}{\partial V^3} = \frac{M}{81k^3 r^6} \left(\varphi'' - \frac{4}{r} \varphi'' - \frac{8}{r^2} \varphi'''' + \frac{56}{r^3} \varphi'' - \frac{56}{r^4} \varphi' \right). \quad (5.44)$$

En todos los casos

$$\varphi' \equiv \frac{d'\varphi}{dr'}. \quad (5.45)$$

El parámetro de carga de intercambio D fue obtenido a través de la carga efectiva de Szigeti s

$$D = Ae \left[(s-1) \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right) - \frac{n_+}{k_+} + \frac{n_-}{k_-} \right], \quad (5.46)$$

mientras que sus derivadas respecto del volumen, derivando las ecuaciones (5.32) y (5.33), obteniéndose, si se consideran las cargas de intercambio en el punto de contacto entre capas

$$\frac{\partial D}{\partial V} = \frac{D}{3kr^2} \frac{(n+1)\phi' + r\phi''}{n\phi + r\phi'}, \quad (5.47)$$

$$\frac{\partial^2 D}{\partial V^2} = \frac{1}{3kr^2} \left(\frac{D}{3kr^2} \frac{(n+2)\phi'' + r\phi'''}{n\phi + r\phi'} - \frac{2}{r} \frac{\partial D}{\partial V} \right), \quad (5.48)$$

y

$$\frac{\partial^3 D}{\partial V^3} = \frac{1}{3kr^2} \left(\frac{D}{9k^2r^4} \frac{(n+3)\phi''' + r\phi^{(4)}}{n\phi + r\phi'} - \frac{2}{3kr^4} \frac{\partial D}{\partial V} - \frac{6}{r} \frac{\partial^2 D}{\partial V^2} \right); \quad (5.49)$$

en tanto que si se consideran las cargas de intercambio cerca del núcleo del ion positivo

$$\frac{\partial D}{\partial V} = \frac{D}{3kr^2} \left[\frac{1}{r} \frac{(n+1)\phi' + r\phi''}{n\phi + r\phi'} \right], \quad (5.50)$$

$$\frac{\partial^2 D}{\partial V^2} = \frac{1}{3kr^2} \left[\frac{D}{3kr^2} \left(\frac{(n+2)\phi'' + r\phi'''}{n\phi + r\phi'} - \frac{3}{r^2} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial D}{\partial V} \right], \quad (5.51)$$

y

$$\frac{\partial^3 D}{\partial V^3} = \frac{1}{3kr^2} \left[\frac{D}{9k^2r^4} \left(\frac{(n+3)\phi''' + r\phi^{(4)}}{n\phi + r\phi'} + \frac{2}{r^3} \right) - \frac{8}{3kr^4} \frac{\partial D}{\partial V} - \frac{5}{r} \frac{\partial^2 D}{\partial V^2} \right]. \quad (5.52)$$

Para obtener la dependencia con la presión, se vincula con la dependencia con el volumen a través de la compresibilidad

$$\frac{\partial \epsilon_0}{\partial p} = -V \chi_t \frac{\partial \epsilon_0}{\partial V}, \quad (5.53)$$

$$\frac{\partial^2 \epsilon_0}{\partial p^2} = V^2 \chi_t^2 \frac{\partial^2 \epsilon_0}{\partial V^2} + V \frac{\partial \epsilon_0}{\partial V} \left(\chi_t^2 - \frac{\partial \chi_t}{\partial p} \right) \quad (5.54)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 \epsilon_0}{\partial p^3} = & -V^3 \chi_t^3 \frac{\partial^3 \epsilon_0}{\partial V^3} + V^2 \frac{\partial^2 \epsilon_0}{\partial V^2} \left(3\chi_t \frac{\partial \chi_t}{\partial p} - 3\chi_t^3 \right) \\ & + V \frac{\partial \epsilon_0}{\partial V} \left(3\chi_t \frac{\partial \chi_t}{\partial p} - \frac{\partial^2 \chi_t}{\partial p^2} - \chi_t^3 \right) \end{aligned} \quad (5.55)$$

Debido a que en la mayoría de los casos no existen disponibles valores experimentales de $\partial^2\chi_t/\partial p^2$, se calculó con una aproximación utilizada por Fontanella, Andeen y Schuele [116].

$$\frac{\partial^2\chi_t}{\partial p^2} \approx \frac{2}{\chi_t} \left(\frac{\partial\chi_t}{\partial p} \right)^2 \quad (5.56)$$

Finalmente tenemos para ϵ_∞

$$V \frac{\partial\epsilon_\infty}{\partial V} = \frac{4\pi}{9} (\epsilon_\infty + 2)^2 \left[\frac{(s-1)e - D}{A^2} \left(-2A \frac{\partial D}{\partial V} - [(s-1)e - D] \frac{\partial A}{\partial V} \right) - \frac{3}{4\pi} \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 2} \right] \quad (5.57)$$

y

$$\frac{\partial\epsilon_\infty}{\partial p} = -V \chi_t \frac{\partial\epsilon_\infty}{\partial V}. \quad (5.58)$$

5.5 Obtención de γ_t con los modelos de capas

Según el formalismo del modelo de cargas de intercambio, se obtiene la frecuencia vibracional infrarroja ω_t como

$$\omega_t^2 = \frac{A - \frac{4}{3}\pi N (e + D)^2 - \frac{4}{3}\pi N A [(e + D)(\lambda + 2\mu) + \nu]}{\bar{m} \left[(1 + A\lambda) \left(1 - \frac{4}{3}\pi N \nu \right) + \frac{4}{3}\pi N A \mu^2 \right]} \quad (5.59)$$

Derivando respecto del volumen se obtiene γ_t para cristales de estructuras de NaCl y CsCl:

$$\begin{aligned} \gamma_t = & \frac{1}{\frac{4}{3}\pi\mu^2 AN + 2N(1 + A\lambda) + \left(1 - \frac{4}{3}\pi\nu N\right)} \cdot \\ & \cdot \left\{ \left[\frac{\partial A}{\partial V} \left(\lambda - \frac{4}{3}\pi N (\nu\lambda - \mu^2) \right) + \frac{4}{3}\pi AN^2 (\nu\lambda - \mu^2) + \frac{8}{3}\pi\mu N \frac{\partial D}{\partial V} + \right. \right. \\ & - \frac{1}{\bar{m}\omega_t^2} \left[\frac{\partial A}{\partial V} - \frac{4}{3}\pi N (e + D) \left(2 \frac{\partial D}{\partial V} (e + D) N \right) \right] + \\ & \left. \left. - \left[\lambda (e + D)^2 + 2\mu (e + D) + \nu \right] \left(\frac{\partial D}{\partial V} - AN \right) \frac{4}{3}\pi N + \frac{8}{3}\pi\mu AN \frac{\partial D}{\partial V} \right] \right\} \quad (5.60) \end{aligned}$$

Estos formalismos desarrollados para altas presiones serán los utilizados en los cálculos, cuya implementación en programas computacionales se describe en el capítulo siguiente y cuyos resultados se muestran y discuten en los capítulos 7 y 8.

Capítulo 6

Parte Computacional

6.1 Descripción de los programas

Para realizar el trabajo delineado en el capítulo anterior hemos desarrollado los programas de cálculo correspondientes. Éstos poseen las siguientes características:

Están escritos en lenguaje FORTRAN, que es un lenguaje estrictamente normalizado y muy utilizado en programación científica; es además altamente portable a distintas configuraciones de sistemas de cómputos.

Están modulados, lo cual permite tomar bloques de cálculo e incorporarlos a otros programas, o bien integrar nuevas subrutinas ampliando las posibilidades de cálculo sin demasiadas dificultades.

Vamos a describir las características del programa ECM. Éste es similar al que ha sido publicado [141] y sirve de base a otras versiones que con algunas modificaciones permitieron el cálculo de magnitudes no incluidas en éste. Por ejemplo, para el cálculo de γ_t , donde se confeccionó un programa que lo obtiene para las estructuras de fluorita y blenda de zinc además de NaCl y CsCl, con varios modelos [142].

El programa ECM.EXE está construido a partir de un programa principal llamado ECM.FOR vinculado con varias subrutinas. Los datos necesarios para el cálculo son leídos de un archivo de datos de entrada, que además contiene una serie de números que indican el tipo de cálculo y la presentación de los resultados.

El formato del archivo de entrada es el siguiente:

```
Archivo ECM.DAT                               Fecha:26/8/1993
NUMERO DE SALES * 2*      ( HASTA 16 )
*6*      1 NPC 2 CPS 3 SM 4 NPC-CPS 5 NPC-SM 6 CPS-SM 7 NPC-CPS-SM
*2*      1 ESTRUCTURA NaCl , 2 ESTRUCTURA CsCl
*1*      1 s INPUT, 2 s CALCULADO ([W]=1/cm), 3 s CALCULADO ([W]=10-13/s
*2*      1 PARAM.INPUT , 2 PARAM.CALC.ESCR.SALIDA , 3 PAR.CALC.NO ESCR.
*2*      1 VALORES DER.SEGUNDA COMPRES.INPUT, 2 VALORES APROXIMADOS
*3*      1 SALIDA POR SAL , 2 SALIDA POR POTENCIAL , 3 SAL.POR PROPIEDAD
*1*      1 DERIV.CTE.DIELEC. RESP. SOLO DE V, 2 RESP. DE V Y DE P
*1*      1 ESCRIBE LOS DATOS INPUT EN LA SALIDA, 2 NO LOS ESCRIBE
*2*      1 ESCRIBE LOS POT. Y SUS DERIVADAS, 2 NO LOS ESCRIBE
```

```

*2*      1 ESCRIBE A Y SUS DERIVADAS, 2 NO LOS ESCRIBE
*1*      1 ESCRIBE D Y SUS DERIVADAS, 2 NO LOS ESCRIBE
SAL      DIST.  COMPRES.  C.D.O  C.D.IN.  M.R.+  M.R.-  FREC.
          E-8 cm  E-12cm^2/dyn          1/cm o E13/s
CsCl *   3.571*  5.18 *  6.75 *  2.67 * 132.905* 35.453* 106.5 *
CsBr *   3.720*  6.10 *  6.39 *  2.83 * 132.905* 79.909* 78.5 *
          D1COMPR. D2COMPR.  K+      K-      N+      N-      S
          [COMP]^2 [COMP]^3 E7dyn/cm E7dyn/cm
CsCl *-158.04 *          * .305 * .1192 * 5.65 * 4.35 * .85 *
CsBr *-212.47 *          * .305 * .1185 * 5.65 * 4.95 * .82 *
----- PARAMETROS DE LOS POTENCIALES -----
          C      D      n      B/r^n      Ro      B      Ro1      B1
          E-60  E-76  -      E-12erg  E-8 cm  E-12erg  E-8 cm  E-20erg.cm
CsCl *3604.*1672.* 7.3 * 2.6 * .314 * 105.7 * .322 * 109.1 *
CsBr *5356.*2363.* 7.58 * 2.71 * .321 * 126.0 * .369 * 116.2 *
          Beta.r  C.r^7  K1.r^2  Lambda1  K2.r^3/2  Lambda2  b/r^9  a
          dyn.cm          dyn.cm          dyn.cm          dyn.cm
16.13 * 226.6 * 4.68 * 23.6 * 5.91 * 85.0 * .228 * 12.5 *
16.33 * 272.1 * 4.79 * 25.8 * 6.06 * 96.1 * .187 * 14.5 *

```

La primer línea es transcripta como primer línea del archivo de salida, y sirve para colocar un encabezado identificatorio (corresponde a la variable de carácter EN CAB).

Luego en los sucesivos renglones:

N: el número de sales.

NUM1: permite seleccionar el tipo de cálculo (utilizando el modelo de cargas de intercambio considerando dichas cargas en las cercanías del núcleo del ion positivo (NPC) o en el punto de contacto entre las capas (CPS), o utilizando el modelo de capas simple (SM)).

NUM2: selecciona la estructura cristalina (1 para estructura NaCl y 2 para estructura CsCl).

NUM3: sirve para dar la opción de utilizar el parámetro de carga efectiva de Szigeti s como un dato de entrada (dándole el valor 1), o calcularlo a partir de otros datos (valor 2 usando ω_t en cm^{-1} y valor 3 si ω_t se da en unidades de 10^{13} s^{-1}).

NUM4: está relacionado con los parámetros del potencial de repulsión. Colocando el valor 1 se leen como datos de entrada; con el valor 2 se calculan y se escriben en el archivo de salida; con valor 3 son calculados pero no escritos en la salida.

NUM5: tiene que ver con la derivada segunda de la compresibilidad. Si es igual a 1 lee el dato de entrada, si es igual a 2 se utiliza la aproximación dada por Fontanella, Andeen y Schuele.

NUM6: elige la presentación de los resultados en el archivo de salida. Si el valor es 1 se muestran los resultados agrupados para cada sal, si es 2 se agrupan para cada tipo de potencial y si es 3 el agrupamiento es según la magnitud calculada.

NUM7: si se coloca el valor 1 sólo se calculan las derivadas respecto del volumen, si el valor es 2 se calculan también las derivadas respecto de la presión.

NUM8: si es 1 se repiten los datos de entrada en el archivo de salida, si se coloca un 2 esto no sucede.

NUM9: con el valor 1 se escriben en la salida los valores calculados del potencial de solapamiento y sus derivadas, con el valor 2 éstos no se escriben.

NUM10: si es igual a 1 se escriben en el archivo de salida los valores calculados de la constante de fuerza y sus derivadas respecto del volumen y si es igual a 2 no se escriben.

NUM11: con valor 1 se escriben los resultados del cálculo del parámetro de carga de intercambio D y con valor 2 dichos resultados no se escriben en la salida.

Luego hay dos líneas con títulos indicativos y en las N líneas siguientes el primer conjunto de datos. En cada línea (con las unidades correspondientes entre corchetes): el nombre de la sal (almacenado en la variable SAL), la distancia interiónica de equilibrio [10^{-8} cm] (r_0 almacenada en R), la compresibilidad isotérmica [10^{-12} cm² dyn⁻¹] (χ_t en COM), la constante dieléctrica estática (ϵ_0 en CDE), la constante dieléctrica de altas frecuencias (ϵ_∞ en CDI), la masa atómica relativa del catión (M_+ en CAT), la masa atómica relativa del anión (M_- en AN) y la frecuencia de vibración en el infrarrojo [cm⁻¹ o 10^{13} s⁻¹] (ω_t en W).

Luego otras dos líneas con títulos y el segundo conjunto de datos en las N líneas siguientes. En cada línea: el nombre de la sal, la derivada de la compresibilidad respecto de la presión [10^{-24} cm⁴dyn⁻²] ($\partial\chi_t/\partial p$ en COM1), la derivada segunda [10^{-36} cm⁶dyn⁻³] ($\partial^2\chi_t/\partial p^2$ en COM2), la constante de fuerza carozo-capa para el catión [10^7 dyn cm⁻¹] (k_+ en KC), la constante para el anión [10^7 dyn cm⁻¹] (k_- en KA), el número efectivo de electrones en la capa del catión (n_+ en NC), el número efectivo de electrones en la capa del anión (n_- en NA) y la carga efectiva de Szigeti (s en S).

Luego siguen tres líneas con títulos y a continuación el tercer conjunto de datos. El nombre de la sal, el parámetro de van der Waals dipolo-dipolo [10^{-60} erg cm⁶] (C en CVDW), el parámetro de van der Waals dipolo-cuadrupolo [10^{-76} erg cm⁸] (D en DVDW), y luego los parámetros del potencial de solapamiento: n y A/r_0^n [10^{-12} erg] (en ENE y A), ρ [10^{-8} cm] y B [10^{-12} erg] (en RO y B), ρ_1 [10^{-8} cm] y B_1 [10^{-20} erg cm] (en RO1 y B1).

Luego dos líneas contítulos y el cuarto bloque de datos. βr_0 y $C r_0^7$ [10^{-7} erg] (en BETA y C), $k_1 r_0^2$ y λ_1 [10^{-12} erg] (en K1 y L1), $k_2 r_0^{3/2}$ y λ_2 [10^{-12} erg] (en K2 y L2) y b/r_0^{-9} y a [10^{-12} erg] (en BB y AA). Si NUM3 es 1, de manera tal que s es leído como dato pueden dejarse blancos en los lugares correspondientes a ϵ_0 , ϵ_∞ , M_+ , M_- y ω_t ; recíprocamente si NUM3 es 2 o 3 no es necesario dar el valor de s . Si NUM5 es 2, se deja en blanco el lugar de $\partial^2\chi_t/\partial p^2$. Si NUM7 es 1 NUM5 puede ser 1 o 2 indistintamente. Si NUM4 es 2 o 3 pueden dejarse en blanco los campos correspondientes a los parámetros de repulsión.

A continuación se da un listado del programa principal.


```

PROGRAM ECM
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION MR,K1,K2,L1,L2,K,KA,KC,NA,NC
CHARACTER*1 SAL(16,6),ENCAB(72)
CHARACTER*12 ENTRADA, SALIDA
DIMENSION W(16),CDE(16),CDI(16),R(16),COM(16),MR(16),S(16)
DIMENSION CAT(16),AN(16),COM1(16),COM2(16),FZO(16,7)
DIMENSION FIO(16,7),FI1(16,7),FI2(16,7),FI3(16,7),FI4(16,7)
DIMENSION FY0(16,7),FY1(16,7),FY2(16,7),FY3(16,7),FY4(16,7)
DIMENSION FIS(16,7),D0(16,7),D1(16,7),D2(16,7),D3(16,7)
DIMENSION FY5(16,7),P0(16,7),P1(16,7),P2(16,7),P3(16,7)
DIMENSION A0(16,7),A1(16,7),A2(16,7),A3(16,7)
DIMENSION Y0(16,7),Y1(16,7),Y2(16,7),Y3(16,7)
DIMENSION CD1V(16,7),CD2V(16,7),CD3V(16,7)
DIMENSION CY1P(16,7),CY2P(16,7),CY3P(16,7)
DIMENSION CD1P(16,7),CD2P(16,7),CD3P(16,7)
DIMENSION KA(16),KC(16),NA(16),NC(16),V(16),CI1V(16,7)
DIMENSION RO(16),B(16),A(16),ENE(16),RO1(16),B1(16),BETA(16),C(16)
DIMENSION K1(16),L1(16),K2(16),L2(16),AA(16),BB(16)
DIMENSION CVDW(16),DVDW(16),VDW1(16),VDW2(16),ELEC(16),UTOT(16,7)

WRITE(*,1)
1 FORMAT(' Ingrese el nombre del archivo de datos de entrada:')
READ (*,2) ENTRADA
2 FORMAT(A)
OPEN(1,FILE=ENTRADA,STATUS='OLD')
WRITE(*,3)
3 FORMAT(' Ingrese el nombre del archivo de salida:')
READ (*,4) SALIDA
4 FORMAT(A)
OPEN(2,FILE=SALIDA)

READ( 1, 5) ENCAB
READ( 1,10) N
READ( 1,20) NUM1,NUM2,NUM3,NUM4,NUM5,NUM6,NUM7,NUM8,
*NUM9,NUM10,NUM11
C NUM1 = 1 ECM NPC , 2 ECM CPS , 3 SM , 4 NPC-CPS , 5 NPC-SM , 6 CPS-SM
C          7 NPC-CPS-SM
C NUM2 = 1 ESTRUCTURA NaCl , 2 ESTRUCTURA CaCl
C NUM3 = 1 VALORES DE s INPUT , 2 s CALCULADOS ([W]=1/cm) ,
C          3 s CALCULADOS ([W]=10-13 1/s)
C NUM4 = 1 VALORES DE PARAM. INPUT , 2 VALORES DE PARAM. CALCULADOS
C          ESCRITOS EN LA SALIDA , 3 PARAM. CALCULADOS NO LOS ESCRIBE
C NUM5 = 1 VALORES DER.SEGUNDA COMPRES.INPUT, 2 VALORES APROXIMADOS
C NUM6 = 1 SAL.POR SAL , 2 SAL.POR POTENCIAL , 3 SAL.POR PROPIEDAD
C NUM7 = 1 DERIV.CTE.DIELEC. RESP. SOLO DE V, 2 RESP. DE V Y DE P
C NUM8 = 1 ESCRIBE LOS DATOS INPUT EN LA SALIDA, 2 NO LOS ESCRIBE
C NUM9 = 1 ESCRIBE LOS POT. Y SUS DERIVADAS, 2 NO LOS ESCRIBE
C NUM10= 1 ESCRIBE A Y SUS DERIVADAS, 2 NO LOS ESCRIBE
C NUM11= 1 ESCRIBE D Y SUS DERIVADAS, 2 NO LOS ESCRIBE
5 FORMAT (72A1)
10 FORMAT (18X,I2)
20 FORMAT (1X,I1,10(/1X,I1))
E=4.80286
Z=1.
IF(NUM2.EQ.2) GO TO 25

```

```

C..... ESTRUCTURA DE NaCl .....
      M=6
      K=2.
      NMOD=4
      CM=1.747558
      GO TO 27
C..... ESTRUCTURA DE CsCl .....
      25 M=8
      K=1.53960071784
      NMOD=5
      CM=1.762670

C..... LECTURA DE DATOS DE ENTRADA .....
      27 READ ( 1,30)((SAL(I,J),J=1,6),R(I),COM(I),CDE(I),CDI(I),CAT(I),AN(
      *I),W(I),I=1,N)
      READ ( 1,31)(COM1(I),COM2(I),KC(I),KA(I),NC(I),NA(I),S(I),I=1,N)
      30 FORMAT (//(6A1,1X,7(F8.4,1X)))
      31 FORMAT (//(7X,7(F8.4,1X)))
      IF(NUM4.EQ.1) GO TO 33

C..... PARAMETROS DE VAN DER WAALS .....
      READ(1,32)(CVDW(I),DVDW(I),I=1,N)
C      CVDW va por 10-60 erg.cm-6, DVDW va por 10-76 erg.cm-8
      32 FORMAT(//(8X,F5.0,1X,F5.0))
      GO TO 1000
      33 READ(1,35)(CVDW(I),DVDW(I),ENE(I),A(I),RO(I),B(I),RO1(I),B1(I),I=1
      *,N)
      35 FORMAT (//(8X,F5.0,1X,F5.0,1X,F6.3,1X,5(F8.3,1X)))
      READ(1,38)(BETA(I),C(I),K1(I),L1(I),K2(I),L2(I),BB(I),AA(I),I=1,N)
      38 FORMAT (//(8(F8.3,1X)))

C..... BLOQUE DE ESCRITURA 1 .....
      1000 WRITE(2,5) EN CAB
      DD 1050 I=1,N
      IF(R(I).EQ.0.0) WRITE(2,1010)(SAL(I,J),J=1,6)
      1010 FORMAT('EL VALOR DE R PARA:',6A1,'ES NULO, NO SE PUEDEN HACER CALC
      *ULOS')
      IF(COM(I).EQ.0.0) WRITE(2,1011)(SAL(I,J),J=1,6)
      1011 FORMAT('EL VALOR DE LA COMPRESIBILIDAD PARA:',6A1,'ES NULO')
      IF(CDE(I).EQ.0.0) WRITE(2,1012)(SAL(I,J),J=1,6)
      1012 FORMAT('EL VALOR DE LA CTE.DIELEC.EST. PARA:',6A1,'ES NULO')
      IF(CAT(I).EQ.0.0.OR.AN(I).EQ.0.0.OR.W(I).EQ.0.0.OR.CDI(I).EQ.0.0.A
      *ND.NUM3.EQ.2) WRITE(2,1014)(SAL(I,J),J=1,6)
      1014 FORMAT(' NO SE PUEDE CALCULAR S PARA',6A1)
      IF(KC(I).EQ.0.0.OR.KA(I).EQ.0.0.OR.NC(I).EQ.0.0.OR.NA(I).EQ.0.0)
      *WRITE(2,1015)(SAL(I,J),J=1,6)
      1015 FORMAT(' NO SE PUEDE CALCULAR D PARA',6A1)
      IF(NUM7.EQ.1) GO TO 1050
      IF(COM1(I).EQ.0.0) WRITE (2,1016)(SAL(I,J),J=1,6)
      1016 FORMAT(' NO SE PUEDEN CALCULAR LAS DERIVADAS RESPECTO DE P PARA',6
      *A1)
      1050 CONTINUE

      1100 IF(NUM8.EQ.2) GO TO 39
      WRITE(2,1101)

```

```

1101 FORMAT(/'          DATOS DE ENTRADA'/)
      WRITE(2,1102)
1102 FORMAT('  SAL    DISTANCIA COMPRESIB. C.DIEL.O C.DIEL.IN. M.REL.+
* M.REL.- FRECUENC.')
```

```

      WRITE(2,1103)
1103 FORMAT('          E-8 cm E-12dyn/cm^2
*          - 1/cm-E13/s')
      WRITE(2,1106)((SAL(I,J),J=1,6),R(I),COM(I),CDE(I),CDI(I),CAT(I),AN
*(I),W(I),I=1,N)
1106 FORMAT ((6A1,4X,7(F9.4,1X)))
      WRITE(2,1107)
1107 FORMAT('  SAL    D1COMPR.  D2COMPR.      K+      K-      N+
*  N-      S')
```

```

      WRITE(2,1108)
1108 FORMAT('          [COMP]^2 [COMP]^3  E7dyn/cm E7dyn/cm
*          -      -')
```

```

      WRITE(2,1110)((SAL(I,J),J=1,6),COM1(I),COM2(I),KC(I),KA(I),NC(I),N
*A(I),S(I),I=1,N)
1110 FORMAT ((6A1,4X,7(F9.4,1X)))
C..... PARAMETROS DE VAN DER WAALS .....
      WRITE(2,1111)
1111 FORMAT(9X,' C 10^-60 erg.cm^6      D 10^-76 erg.cm^8')
```

```

      WRITE(2,1112)((SAL(I,J),J=1,6),CVDW(I),DVDW(I),I=1,N)
C  CVDW va por 10^-60 erg.cm^6, DVDW va por 10^-76 erg.cm^8
1112 FORMAT(3X,6A1,8X,F5.0,16X,F5.0)
      IF(NUM4.EQ.1) GO TO 39
      WRITE(2,1115)
1115 FORMAT(/'          PARAMETROS INTRODUCIDOS COMO DATO      ')
      WRITE(2,1116)
1116 FORMAT(19X,'  n      B/r^n      Ro      B      Ro1      B1 ')
```

```

      WRITE(2,1117)
1117 FORMAT(19X,'          E-12erg  E-8cm  E-12erg  E-8cm  E-20erg.c
*m')
```

```

      WRITE(2,1118)((SAL(I,J),J=1,6),ENE(I),A(I),RO(I),B(I),RO1(I),B1(I)
*,I=1,N)
1118 FORMAT ((6A1,14X,F6.3,1X,2(F8.3,1X),F8.1,1X,F8.3,1X,F8.1))
      WRITE(2,1119)
1119 FORMAT(2X,'Beta.r C.r^7      K1.r^2 Lambda1 K2.r^3/2 Lambda2 b/
*r^9      a')
```

```

      WRITE(2,1120)
1120 FORMAT(2X,' - E-7erg          E-12erg          E-12erg
*-      E-12erg')
```

```

      WRITE(2,1121)(BETA(I),C(I),K1(I),L1(I),K2(I),L2(I),BB(I),AA(I),I=1
*,N)
1121 FORMAT (8(F8.3,1X))

39 DO 41 I=1,N
41 C(I)=C(I)*1.D5
      IF(NUM3.EQ.1) GO TO 45

C..... CALCULO DE LA CARGA EFECTIVA DE SZIGETI .....
      CALL CARGAEF (N,NUM3,W,CAT,AN,CDE,CDI,K,R,Z,S)

45 IF(NUM4.EQ.1) GO TO 71

      CALL PARPOT (N,CM,M,Z,E,R,K,CVDW,DVDW,COM,ENE,A,RO,B,RO1,B1,BETA,C
```

*,K1,L1,K2,L2,BB,AA)

C..... BLOQUE DE AJUSTE DE MAGNITUDES.....

```

71 E=4.80286D-10
   DO 72 I=1,N
     R(I)=R(I)*1.D-8
     V(I)=K*R(I)*R(I)*R(I)
     COM(I)=COM(I)*1.D-12
     COM1(I)=COM1(I)*1.D-24
     COM2(I)=COM2(I)*1.D-36
     KC(I)=KC(I)*1.D+7
     KA(I)=KA(I)*1.D+7
     RO(I)=RO(I)*1.D-8
     RO1(I)=RO1(I)*1.D-8
     A(I)=A(I)*1.D-12
     B(I)=B(I)*1.D-12
     B1(I)=B1(I)*1.D-20
     C(I)=C(I)*1.D-12
     L1(I)=L1(I)*1.D-12
     L2(I)=L2(I)*1.D-12
     AA(I)=AA(I)*1.D-12
     CVDW(I)=CVDW(I)*1.D-60
     DVDW(I)=DVDW(I)*1.D-76
72 CONTINUE

```

C..... CALCULO DE POTENCIALES Y SUS DERIVADAS RESPECTO DE R

```

CALL POTENS (N,R,ENE,A,RO,B,RO1,B1,BETA,C,K1,L1,K2,L2,BB,AA,FIO,FI
*1,FI2,FI3,FI4,FI5)

```

```

DO 210 I=1,N
DO 210 J=1,7
FY0(I,J)=FIO(I,J)*1.D+12
FY1(I,J)=FI1(I,J)*1.D+4
FY2(I,J)=FI2(I,J)*1.D-5
FY3(I,J)=FI3(I,J)*1.D-13
FY4(I,J)=FI4(I,J)*1.D-21
FY5(I,J)=FI5(I,J)*1.D-29

```

210 CONTINUE

```

DO 220 I=1,N
DO 220 J=1,7
FZ0(I,J)=FY0(I,J)*M

```

220 CONTINUE

```

CALL POTVDW (N,R,CVDW,DVDW,M,FIO,FI1,FI2,FI3,FI4,FI5)

```

```

CALL ETOT (N,Z,E,CM,M,R,CVDW,DVDW,FYO,ELEC,VDW1,VDW2,UTOT)

```

C..... CALCULO DE A Y SUS DERIVADAS RESPECTO DEL VOLUMEN

```

CALL CTEFZA (N,M,K,R,FI1,FI2,FI3,FI4,FI5,A0,A1,A2,A3)

```

```

DO 330 I=1,N
DO 330 J=1,7
YO(I,J)=A0(I,J)*1.D-5
Y1(I,J)=A1(I,J)*1.D-27
Y2(I,J)=A2(I,J)*1.D-50
Y3(I,J)=A3(I,J)*1.D-73

```

330 CONTINUE

C..... CALCULO DE D Y SUS DERIVADAS RESPECTO DEL VOLUMEN

NCICLO=0

350 NCICLO=NCICLO+1

IF(NCICLO.EQ.2.AND.NUM1.EQ.5) GO TO 475

IF(NCICLO.EQ.2.AND.NUM1.EQ.6) GO TO 475

IF(NCICLO.GE.3) GO TO 475

IF(NUM1.EQ.3) GO TO 475

IF(NUM1.EQ.2.OR.NUM1.EQ.6) NN=2

IF(NUM1.EQ.4.AND.NCICLO.EQ.2) NN=2

IF(NUM1.EQ.7.AND.NCICLO.EQ.2) NN=2

CALL ECP(N,E,FI0,FI1,FI2,FI3,FI4,FI5,A0,KC,KA,NC,NA,S,NMOD,R,DO,D1
*,D2,D3,K,NN)

DO 470 I=1,N

DO 470 J=1,7

P0(I,J)=D0(I,J)*1.D+10

P1(I,J)=D1(I,J)*1.D-12

P2(I,J)=D2(I,J)*1.D-35

P3(I,J)=D3(I,J)*1.D-57

470 CONTINUE

C... CALCULO DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

475 IF(NCICLO.EQ.3.AND.NUM1.NE.7) GO TO 5000

CALL CDEST(N,DO,KC,KA,NC,NA,E,K,R,AO,CDE)

C... CALCULO DE LA CONSTANTE DIELECTRICA DE ALTAS FRECUENCIAS

CALL CDINF(N,DO,KC,KA,NC,NA,E,K,R,AO,CDI)

C... CALCULO DE LA DERIVADA PRIMERA DE LA CTE.DIEL. ALTAS FRECUENCIAS

CALL DCDINF(N,DO,E,AO,D1,A1,S,CDI,CI1V)

C... CALCULO LAS DERIVADAS RESPECTO DEL VOLUMEN DE LA CTE.DIELECTRICA .

CALL DVCD(N,A0,A1,A2,A3,DO,D1,D2,D3,E,V,CDE,CD1V,CD2V,CD3V)

IF(NUM7.EQ.1) GO TO 1005

C. CALCULO LAS DERIVADAS RESPECTO DE LA PRESION DE LA CTE.DIELECTRICA .

IF(NUM5.EQ.1) GO TO 520

C APROXIMACION PARA LA DERIVADA SEGUNDA DE LA COMPRESIBILIDAD

DO 510 I=1,N

510 COM2(I)=2.*COM1(I)*COM1(I)/COM(I)

520 CALL DPCD(N,COM,COM1,COM2,CD1V,CD2V,CD3V,CDE,CD1P,CD2P,CD3P)

DO 660 I=1,N

DO 660 J=1,7

CY1P(I,J)=CD1P(I,J)*1.D12

CY2P(I,J)=CD2P(I,J)*1.D24

CY3P(I,J)=CD3P(I,J)*1.D33

660 CONTINUE

```

C..... BLOQUE DE ESCRITURA 2 .....
1005 IF(NCICLO.GT.1) GO TO 1129
      IF(NUM2.EQ.1) WRITE(2,1125)
      IF(NUM2.EQ.2) WRITE(2,1126)
1125 FORMAT(// ' * * * * * * * * ESTRUCTURA TIPO CLORURO DE SO
      *DIO * * * * * * * * ')
1126 FORMAT(// ' * * * * * * * * ESTRUCTURA TIPO CLORURO DE CE
      *SIO * * * * * * * * ')
      IF(NUM3.EQ.1) WRITE(2,1160)
      IF(NUM3.EQ.1) GO TO 1129
      WRITE(2,1127)
1127 FORMAT(/ '          CARGA EFECTIVA CALCULADA')
      WRITE(2,1128) ((SAL(I,J),J=1,6),S(I),I=1,N)
1128 FORMAT((29X,6A1,7X,F6.2))
1129 IF(NUM1.EQ.1.OR.(NUM1.EQ.4.AND.NCICLO.EQ.1)) WRITE(2,1130)
      IF((NUM1.EQ.5.AND.NCICLO.EQ.1).OR.(NUM1.EQ.7.AND.NCICLO.EQ.1))
      * WRITE(2,1130)
      IF(NUM1.EQ.2.OR.(NUM1.EQ.4.AND.NCICLO.EQ.2)) WRITE(2,1135)
      IF((NUM1.EQ.6.AND.NCICLO.EQ.1).OR.(NUM1.EQ.7.AND.NCICLO.EQ.2))
      * WRITE(2,1135)
      IF(NUM1.EQ.3.OR.(NUM1.EQ.5.AND.NCICLO.EQ.2)) WRITE(2,1140)
      IF((NUM1.EQ.6.AND.NCICLO.EQ.2).OR.(NUM1.EQ.7.AND.NCICLO.EQ.3))
      * WRITE(2,1140)
      IF(NCICLO.GT.1) GO TO 2190
1130 FORMAT(// '          MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO N.P.C.')
1135 FORMAT(// '          MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.')
1140 FORMAT(// '          MODELO DE CAPAS SIMPLE')
1160 FORMAT(/ '          VALORES DE LA CARGA EFECTIVA INTROD. COMO DATO')
2002 IF(NUM4.NE.2) GO TO 2019
      WRITE(2,2010)
2010 FORMAT(/ ' PARAMETROS DE LOS POTENCIALES CALCULADOS')
      WRITE(2,2011)
2011 FORMAT(' Sal          Born-Lande          Born-Mayer          Hellmann
      *          Wasastjerna')
      WRITE(2,2012)
2012 FORMAT('          n          A/r^n          B          B1
      *          beta.r          C.r^7 ')
      WRITE(2,2013)
2013 FORMAT('          -          dyn.cm          cm          dyn.cm          cm          dyn.
      *cm^2          -          dyn.cm')
      WRITE(2,2014) ((SAL(I,J),J=1,6),ENE(I),A(I),RO(I),B(I),RO1(I),B1(I)
      *),BETA(I),C(I),I=1,N)
2014 FORMAT((6A1,3X,F7.3,1X,E9.3,1X,E8.3,1X,E8.3,1X,E8.3,1X,E8.3,1X,F8.
      *3,1X,E8.3))
      WRITE(2,2015)
2015 FORMAT(' Sal          Varshni-Shukla          V.S.modif.          Logaritmi
      *co')
      WRITE(2,2016)
2016 FORMAT('          k1.r^2          lam1          k2.r^3/2          lam2          b/r^9
      *a')
      WRITE(2,2017)
2017 FORMAT('          dyn.cm          dyn.cm          dy
      *n.cm')
      WRITE(2,2018) ((SAL(I,J),J=1,6),K1(I),L1(I),K2(I),L2(I),BB(I),AA(I)
      *),I=1,N)
2018 FORMAT((6A1,3X,F7.3,1X,E9.3,1X,F7.3,1X,E9.3,1X,F7.3,1X,E9.3))

```

```

2019 IF(NUM6.NE.3) GO TO 3345
      IF(NUM9.EQ.2) GO TO 2110
      WRITE(2,2020)
2020 FORMAT('/' VALOR DEL POTENCIAL EN R DE EQUILIBRIO Y DE SUS '/' DERI)
      *VADAS RESPECTO DE R ( PRIMERA A QUINTA )')
      WRITE(2,2030)
2030 FORMAT('/' POTENCIAL .10-12 dyn.cm ')
      WRITE(2,2040)
2040 FORMAT(' Sal      B.L.      B.M.      H.      W.      V.S.
      *V.S.m.      Log.  ')
      WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(FY0(I,J),J=1,7),I=1,N)
2050 FORMAT((6A1,7(F9.3,1X)))
      WRITE(2,2060)
2060 FORMAT('/' DERIVADA PRIMERA .10-4 dyn ')
      WRITE(2,2040)
      WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(FY1(I,J),J=1,7),I=1,N)
      WRITE(2,2070)
2070 FORMAT('/' DERIVADA SEGUNDA .10-5 dyn/cm ')
      WRITE(2,2040)
      WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(FY2(I,J),J=1,7),I=1,N)
      WRITE(2,2080)
2080 FORMAT('/' DERIVADA TERCERA .10-13 dyn/cm2 ')
      WRITE(2,2040)
      WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(FY3(I,J),J=1,7),I=1,N)
      WRITE(2,2090)
2090 FORMAT('/' DERIVADA CUARTA .10-21 dyn/cm3 ')
      WRITE(2,2040)
      WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(FY4(I,J),J=1,7),I=1,N)
      WRITE(2,2100)
2100 FORMAT('/' DERIVADA QUINTA .10-29 dyn/cm4 ')
      WRITE(2,2040)
      WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(FY5(I,J),J=1,7),I=1,N)

      WRITE(2,2101)
2101 FORMAT('/' VALOR DEL POTENCIAL TOTAL EN R DE EQUILIBRIO '/'
      *' .10-12 ergios '/')
      WRITE(2,2102)
2102 FORMAT(' * Potenciales de Overlap *
      *Pot. * Pot.V.d.W. ')
      WRITE(2,2103)
2103 FORMAT(' Sal      B.L.      B.M.      H.      W.      V.S.      V.S.m.      L.
      *Elec. dipol. cuadr. ')
      WRITE(2,2105)((SAL(I,L),L=1,6),(FZ0(I,J),J=1,7),ELEC(I),VDW1(I),VD
      *W2(I),I=1,N)
2105 FORMAT((6A1,2X, 7(F6.3,1X),F6.1,1X,2(F6.3,1X)))
      WRITE(2,2106)
2106 FORMAT('/' Potenciales totales ')
      WRITE(2,2107)
2107 FORMAT(10X,' Sal      B.L.      B.M.      H.      W.      V.S.      V.S.
      *m.      L. ')
      WRITE(2,2108)((SAL(I,L),L=1,6),(UTOT(I,J),J=1,7),I=1,N)
2108 FORMAT((10X,6A1,2X, 7(F7.2,1X)))

2110 IF(NUM10.NE.1) GO TO 2190
      WRITE(2,2120)
2120 FORMAT('/' VALOR DE LA CONSTANTE DE FUERZA EN R DE EQUILIBRIO')

```

```

* Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V ( PRIMERA A TERCERA )')
WRITE(2,2130)
2130 FORMAT(/' VALORES DE A .10-5 dyn/cm ')
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(Y0(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2160)
2160 FORMAT(/' DERIVADA PRIMERA .10-27 dyn/cm-4 ')
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(Y1(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2170)
2170 FORMAT(/' DERIVADA SEGUNDA .10-50 dyn/cm-7 ')
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(Y2(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2180)
2180 FORMAT(/' DERIVADA TERCERA .10-73 dyn/cm-10 ')
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(Y3(I,J),J=1,7),I=1,N)
2190 IF(NCICLO.GT.1.AND.NUM6.LT.3) GO TO 3345
IF(NUM1.EQ.3.OR.(NUM1.EQ.7.AND.NCICLO.EQ.3)) GO TO 2261
IF((NUM1.EQ.5.AND.NCICLO.EQ.2).OR.(NUM1.EQ.6.AND.NCICLO.EQ.2))
* GO TO 2261
IF(NUM11.NE.1) GO TO 2261
WRITE(2,2220)
2220 FORMAT(/' VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D '/
*' Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V ( PRIMERA A TERCERA )')
WRITE(2,2230)
2230 FORMAT(/' VALORES DE D .10-10 e.s.u. ')
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(P0(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2240)
2240 FORMAT(/' DERIVADA PRIMERA .10-12 e.s.u./cm-3 ')
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(P1(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2250)
2250 FORMAT(/' DERIVADA SEGUNDA .10-35 e.s.u./cm-6 ')
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(P2(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2260)
2260 FORMAT(/' DERIVADA TERCERA .10-57 e.s.u./cm-9 ')
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(P3(I,J),J=1,7),I=1,N)

2261 WRITE(2,2262)
2262 FORMAT(/' CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA')
WRITE(2,1128)((SAL(I,L),L=1,6),CDE(I),I=1,N)
WRITE(2,2264)
2264 FORMAT(/' CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS')
WRITE(2,1128)((SAL(I,L),L=1,6),CDI(I),I=1,N)

WRITE(2,2270)
2270 FORMAT(/' DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS
*')
WRITE(2,2275)
2275 FORMAT(/' V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V ')
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(CI1V(I,J),J=1,7),I=1,N)

```



```

WRITE(2,2280)
2280 FORMAT(// ' DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA ' )
WRITE(2,2290)
2290 FORMAT(// ' V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V          ' )
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(CD1V(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2300)
2300 FORMAT(// ' V^2 POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V      ' )
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(CD2V(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2310)
2310 FORMAT(// ' V^3 POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V     ' )
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(CD3V(I,J),J=1,7),I=1,N)
IF(NUM7.EQ.1) GO TO 2350
WRITE(2,2320)
2320 FORMAT(// ' DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. .10^-12 cm^2/d
*yn ' )
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(CY1P(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2330)
2330 FORMAT(// ' DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. .10^-24 (cm^2/
*dyn)^2 ' )
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(CY2P(I,J),J=1,7),I=1,N)
WRITE(2,2340)
2340 FORMAT(// ' DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. .10^-33 (cm^2/
*dyn)^3 ' )
WRITE(2,2040)
WRITE(2,2050)((SAL(I,L),L=1,6),(CY3P(I,J),J=1,7),I=1,N)
2350 DO 2470 I=1,N
DO 2470 J=1,7
D0(I,J)=0.
D1(I,J)=0.
D2(I,J)=0.
D3(I,J)=0.
2470 CONTINUE
IF(NCICLO.EQ.2.AND.NUM1.EQ.7) GO TO 350
IF(NUM1.LT.4) GO TO 5000
IF(NCICLO.GE.2) GO TO 5000
GO TO 350

3345 IF(NUM6.EQ.1) GO TO 3900
WRITE(2,3350)
3350 FORMAT(// ' POTENCIAL DE CORTO ALCANCE TIPO BORN-LANDE ' )
IF(NUM9.EQ.2) GO TO 3354
IF(NCICLO.GT.1) GO TO 3358
WRITE(2,3351)
3351 FORMAT(// '          SAL          FI          dFI/dR   d2FI/dR2  d3FI/dR
*3  d4FI/dR4  d5FI/dR5 ' )
DO 3353 I=1,N
WRITE(2,3352)(SAL(I,L),L=1,6),FY0(I,1),FY1(I,1),FY2(I,1),FY3(I,1),
*FY4(I,1),FY5(I,1)
3352 FORMAT((6X,6A1,7X,6(F9.3,1X)))
3353 CONTINUE
WRITE(2,3600)

```

```

3600 FORMAT(/'      SAL          TOTAL      ELECTR.    OVERLAP    DIP
*. -DIP.      DIP. -CUAD. ')
DO 3610 I=1,N
WRITE(2,3605)(SAL(I,L),L=1,6),UTOT(I,1),ELEC(I),FZO(I,1),VDW1(I),V
*DW2(I)
3605 FORMAT((6X,6A1,7X,5(F9.3,3X)))
3610 CONTINUE
3354 IF(NUM10.EQ.2) GO TO 3358
WRITE(2,3355)
3355 FORMAT(/'      SAL          A          dA/dV    d2A/dV2    d3A/d
*V3      ')
DO 3357 I=1,N
WRITE(2,3356)(SAL(I,L),L=1,6),Y0(I,1),Y1(I,1),Y2(I,1),Y3(I,1)
3356 FORMAT((6X,6A1,7X,4(F9.3,1X)))
3357 CONTINUE
3358 IF(NUM1.EQ.3.OR.NUM11.EQ.2) GO TO 3362
IF((NCICLO.EQ.2.AND.(NUM1.EQ.5.OR.NUM1.EQ.6)).OR.NCICLO.EQ.3) GO T
*0 3362
WRITE(2,3359)
3359 FORMAT(/'      SAL          D          dD/dV    d2D/dV2    d3D/d
*V3      ')
DO 3361 I=1,N
WRITE(2,3360)(SAL(I,L),L=1,6),P0(I,1),P1(I,1),P2(I,1),P3(I,1)
3360 FORMAT((6X,6A1,7X,4(F9.3,1X)))
3361 CONTINUE
3362 WRITE(2,3363)
3363 FORMAT(/' SAL          E(inf)    VdE(inf)/dV    E          VdE/dV
*V^2d^2E/dV^2 V^3d^3E/dV^3')
DO 3366 I=1,N
WRITE(2,3365)(SAL(I,L),L=1,6),CDI(I),CI1V(I,1),CDE(I),CD1V(I,1),CD
*2V(I,1),CD3V(I,1)
3365 FORMAT(1X,6A1,1X,6(F11.5,1X))
3366 CONTINUE
IF(NUM7.EQ.1) GO TO 3371
3367 WRITE(2,3368)
3368 FORMAT(/' SAL          1/EdE/dP    1/Ed^2E/dP^2    1/Ed^3/dP^3')
DO 3370 I=1,N
WRITE(2,3369)(SAL(I,L),L=1,6),CY1P(I,1),CY2P(I,1),CY3P(I,1)
3369 FORMAT(1X,6A1,4X,3(F11.5,3X))
3370 CONTINUE

3371 WRITE(2,3372)
3372 FORMAT(/' POTENCIAL DE CORTO ALCANCE TIPO BORN-MAYER')
IF(NUM9.EQ.2) GO TO 3374
IF(NCICLO.GT.1) GO TO 3378
WRITE(2,3351)
DO 3373 I=1,N
WRITE(2,3352)(SAL(I,L),L=1,6),FY0(I,2),FY1(I,2),FY2(I,2),FY3(I,2),
*FY4(I,2),FYS(I,2)
3373 CONTINUE
WRITE(2,3600)
DO 3611 I=1,N
WRITE(2,3605)(SAL(I,L),L=1,6),UTOT(I,2),ELEC(I),FZO(I,2),VDW1(I),V
*DW2(I)
3611 CONTINUE
3374 IF(NUM10.EQ.2) GO TO 3378

```

```
WRITE(2,3355)
DO 3377 I=1,N
WRITE(2,3356)(SAL(I,L),L=1,6),Y0(I,2),Y1(I,2),Y2(I,2),Y3(I,2)
3377 CONTINUE
3378 IF(NUM1.EQ.3.OR.NUM11.EQ.2) GO TO 3382
IF((NCICLO.EQ.2.AND.(NUM1.EQ.5.OR.NUM1.EQ.6)).OR.NCICLO.EQ.3) GO T
*O 3382
WRITE(2,3359)
DO 3380 I=1,N
WRITE(2,3360)(SAL(I,L),L=1,6),P0(I,2),P1(I,2),P2(I,2),P3(I,2)
3380 CONTINUE
3382 WRITE(2,3363)
DO 3385 I=1,N
WRITE(2,3365)(SAL(I,L),L=1,6),CDI(I),CI1V(I,2),CDE(I),CD1V(I,2),CD
*2V(I,2),CD3V(I,2)
3385 CONTINUE
IF(NUM7.EQ.1) GO TO 3390
3386 WRITE(2,3368)
DO 3389 I=1,N
WRITE(2,3369)(SAL(I,L),L=1,6),CY1P(I,2),CY2P(I,2),CY3P(I,2)
3389 CONTINUE

3390 WRITE(2,3391)
3391 FORMAT(//' POTENCIAL DE CORTO ALCANCE TIPO HELLMANN')
IF(NUM9.EQ.2) GO TO 3394
IF(NCICLO.GT.1) GO TO 3398
WRITE(2,3351)
DO 3393 I=1,N
WRITE(2,3352)(SAL(I,L),L=1,6),FY0(I,3),FY1(I,3),FY2(I,3),FY3(I,3),
*FY4(I,3),FY5(I,3)
3393 CONTINUE
WRITE(2,3600)
DO 3612 I=1,N
WRITE(2,3605)(SAL(I,L),L=1,6),UTOT(I,3),ELEC(I),FZO(I,3),VDW1(I),V
*DW2(I)
3612 CONTINUE
3394 IF(NUM10.EQ.2) GO TO 3398
WRITE(2,3355)
DO 3397 I=1,N
WRITE(2,3356)(SAL(I,L),L=1,6),Y0(I,3),Y1(I,3),Y2(I,3),Y3(I,3)
3397 CONTINUE
3398 IF(NUM1.EQ.3.OR.NUM11.EQ.2) GO TO 3402
IF((NCICLO.EQ.2.AND.(NUM1.EQ.5.OR.NUM1.EQ.6)).OR.NCICLO.EQ.3) GO T
*O 3402
WRITE(2,3359)
DO 3400 I=1,N
WRITE(2,3360)(SAL(I,L),L=1,6),P0(I,3),P1(I,3),P2(I,3),P3(I,3)
3400 CONTINUE
3402 WRITE(2,3363)
DO 3405 I=1,N
WRITE(2,3365)(SAL(I,L),L=1,6),CDI(I),CI1V(I,3),CDE(I),CD1V(I,3),CD
*2V(I,3),CD3V(I,3)
3405 CONTINUE
IF(NUM7.EQ.1) GO TO 3410
3406 WRITE(2,3368)
DO 3409 I=1,N
```

```
WRITE(2,3369)(SAL(I,L),L=1,6),CY1P(I,3),CY2P(I,3),CY3P(I,3)
3409 CONTINUE

3410 WRITE(2,3411)
3411 FORMAT(//' POTENCIAL DE CORTO ALCANCE TIPO WASASTJERNA')
      IF(NUM9.EQ.2) GO TO 3414
      IF(NCICLO.GT.1) GO TO 3418
      WRITE(2,3351)
      DO 3413 I=1,N
      WRITE(2,3352)(SAL(I,L),L=1,6),FY0(I,4),FY1(I,4),FY2(I,4),FY3(I,4),
      *FY4(I,4),FY5(I,4)
3413 CONTINUE
      WRITE(2,3600)
      DO 3613 I=1,N
      WRITE(2,3605)(SAL(I,L),L=1,6),UTOT(I,4),ELEC(I),FZO(I,4),VDW1(I),V
      *DW2(I)
3613 CONTINUE
3414 IF(NUM10.EQ.2) GO TO 3418
      WRITE(2,3355)
      DO 3417 I=1,N
      WRITE(2,3356)(SAL(I,L),L=1,6),Y0(I,4),Y1(I,4),Y2(I,4),Y3(I,4)
3417 CONTINUE
3418 IF(NUM1.EQ.3.OR.NUM11.EQ.2) GO TO 3422
      IF((NCICLO.EQ.2.AND.(NUM1.EQ.5.OR.NUM1.EQ.6)).OR.NCICLO.EQ.3) GO T
      *O 3422
      WRITE(2,3359)
      DO 3420 I=1,N
      WRITE(2,3360)(SAL(I,L),L=1,6),P0(I,4),P1(I,4),P2(I,4),P3(I,4)
3420 CONTINUE
3422 WRITE(2,3363)
      DO 3425 I=1,N
      WRITE(2,3365)(SAL(I,L),L=1,6),CDI(I),CI1V(I,4),CDE(I),CD1V(I,4),CD
      *2V(I,4),CD3V(I,4)
3425 CONTINUE
      IF(NUM7.EQ.1) GO TO 3430
3426 WRITE(2,3368)
      DO 3429 I=1,N
      WRITE(2,3369)(SAL(I,L),L=1,6),CY1P(I,4),CY2P(I,4),CY3P(I,4)
3429 CONTINUE

3430 WRITE(2,3431)
3431 FORMAT(//' POTENCIAL DE CORTO ALCANCE TIPO VARSHNI-SHUKLA')
      IF(NUM9.EQ.2) GO TO 3434
      IF(NCICLO.GT.1) GO TO 3438
      WRITE(2,3351)
      DO 3433 I=1,N
      WRITE(2,3352)(SAL(I,L),L=1,6),FY0(I,5),FY1(I,5),FY2(I,5),FY3(I,5),
      *FY4(I,5),FY5(I,5)
3433 CONTINUE
      WRITE(2,3600)
      DO 3614 I=1,N
      WRITE(2,3605)(SAL(I,L),L=1,6),UTOT(I,5),ELEC(I),FZO(I,5),VDW1(I),V
      *DW2(I)
3614 CONTINUE
3434 IF(NUM10.EQ.2) GO TO 3438
      WRITE(2,3355)
```

```
DO 3437 I=1,N
WRITE(2,3356) (SAL(I,L),L=1,6),Y0(I,5),Y1(I,5),Y2(I,5),Y3(I,5)
3437 CONTINUE
3438 IF(NUM1.EQ.3.OR.NUM11.EQ.2) GO TO 3442
IF((NCICLO.EQ.2.AND.(NUM1.EQ.5.OR.NUM1.EQ.6)).OR.NCICLO.EQ.3) GO T
*O 3442
WRITE(2,3359)
DO 3440 I=1,N
WRITE(2,3360) (SAL(I,L),L=1,6),P0(I,5),P1(I,5),P2(I,5),P3(I,5)
3440 CONTINUE
3442 WRITE(2,3363)
DO 3445 I=1,N
WRITE(2,3365) (SAL(I,L),L=1,6),CDI(I),CI1V(I,5),CDE(I),CD1V(I,5),CD
*2V(I,5),CD3V(I,5)
3445 CONTINUE
IF(NUM7.EQ.1) GO TO 3450
3446 WRITE(2,3368)
DO 3449 I=1,N
WRITE(2,3369) (SAL(I,L),L=1,6),CY1P(I,5),CY2P(I,5),CY3P(I,5)
3449 CONTINUE

3450 WRITE(2,3451)
3451 FORMAT(// ' POTENCIAL DE CORTO ALCANCE TIPO VARSHNI-SHUKLA MODIFICA
*DO')
IF(NUM9.EQ.2) GO TO 3454
IF(NCICLO.GT.1) GO TO 3458
WRITE(2,3351)
DO 3453 I=1,N
WRITE(2,3352) (SAL(I,L),L=1,6),FY0(I,6),FY1(I,6),FY2(I,6),FY3(I,6),
*FY4(I,6),FYS(I,6)
3453 CONTINUE
WRITE(2,3600)
DO 3615 I=1,N
WRITE(2,3605) (SAL(I,L),L=1,6),UTOT(I,6),ELEC(I),FZO(I,6),VDW1(I),V
*DW2(I)
3615 CONTINUE
3454 IF(NUM10.EQ.2) GO TO 3458
WRITE(2,3355)
DO 3457 I=1,N
WRITE(2,3356) (SAL(I,L),L=1,6),Y0(I,6),Y1(I,6),Y2(I,6),Y3(I,6)
3457 CONTINUE
3458 IF(NUM1.EQ.3.OR.NUM11.EQ.2) GO TO 3462
IF((NCICLO.EQ.2.AND.(NUM1.EQ.5.OR.NUM1.EQ.6)).OR.NCICLO.EQ.3) GO T
*O 3462
WRITE(2,3359)
DO 3460 I=1,N
WRITE(2,3360) (SAL(I,L),L=1,6),P0(I,6),P1(I,6),P2(I,6),P3(I,6)
3460 CONTINUE
3462 WRITE(2,3363)
DO 3465 I=1,N
WRITE(2,3365) (SAL(I,L),L=1,6),CDI(I),CI1V(I,6),CDE(I),CD1V(I,6),CD
*2V(I,6),CD3V(I,6)
3465 CONTINUE
IF(NUM7.EQ.1) GO TO 3470
3466 WRITE(2,3368)
DO 3469 I=1,N
```

```
      WRITE(2,3369)(SAL(I,L),L=1,6),CY1P(I,6),CY2P(I,6),CY3P(I,6)
3469 CONTINUE

3470 WRITE(2,3471)
3471 FORMAT(// ' POTENCIAL DE CORTO ALCANCE TIPO LOGARITMICO')
      IF(NUM9.EQ.2) GO TO 3474
      IF(NCICLO.GT.1) GO TO 3478
      WRITE(2,3351)
      DO 3473 I=1,N
      WRITE(2,3352)(SAL(I,L),L=1,6),FY0(I,7),FY1(I,7),FY2(I,7),FY3(I,7),
      *FY4(I,7),FY5(I,7)
3473 CONTINUE
      WRITE(2,3600)
      DO 3616 I=1,N
      WRITE(2,3605)(SAL(I,L),L=1,6),UTOT(I,7),ELEC(I),FZO(I,7),VDW1(I),V
      *DW2(I)
3616 CONTINUE
3474 IF(NUM10.EQ.2) GO TO 3478
      WRITE(2,3355)
      DO 3477 I=1,N
      WRITE(2,3356)(SAL(I,L),L=1,6),Y0(I,7),Y1(I,7),Y2(I,7),Y3(I,7)
3477 CONTINUE
3478 IF(NUM1.EQ.3.OR.NUM11.EQ.2) GO TO 3482
      IF((NCICLO.EQ.2.AND.(NUM1.EQ.5.OR.NUM1.EQ.6)).OR.NCICLO.EQ.3) GO T
      *O 3482
      WRITE(2,3359)
      DO 3480 I=1,N
      WRITE(2,3360)(SAL(I,L),L=1,6),P0(I,7),P1(I,7),P2(I,7),P3(I,7)
3480 CONTINUE
3482 WRITE(2,3363)
      DO 3485 I=1,N
      WRITE(2,3365)(SAL(I,L),L=1,6),CDI(I),CI1V(I,7),CDE(I),CD1V(I,7),CD
      *2V(I,7),CD3V(I,7)
3485 CONTINUE
      IF(NUM7.EQ.1) GO TO 3490
3486 WRITE(2,3368)
      DO 3489 I=1,N
      WRITE(2,3369)(SAL(I,L),L=1,6),CY1P(I,7),CY2P(I,7),CY3P(I,7)
3489 CONTINUE
3490 DO 3500 I=1,N
      DO 3500 J=1,7
      DO(I,J)=0.
      D1(I,J)=0.
      D2(I,J)=0.
      D3(I,J)=0.
3500 CONTINUE
      IF(NCICLO.EQ.2.AND.NUM1.EQ.7) GO TO 350
      IF(NUM1.LT.4) GO TO 4500
      IF(NCICLO.GE.2) GO TO 4500
      GO TO 350

3900 DO 4100 I=1,N
      WRITE(2,3910)(SAL(I,J),J=1,6)
3910 FORMAT(/ ' * * * * * ' ,6A1,'
      * * * * * ')
      IF(NCICLO.GT.1) GO TO 3945
```

```

IF(NUM9.EQ.2) GO TO 3936
WRITE(2,3920)
3920 FORMAT(/' POTENCIAL          FI      dFI/dR   d2FI/dR2  d3FI/dR
*3 d4FI/dR4  d5FI/dR5')
WRITE(2,3929) FY0(I,1),FY1(I,1),FY2(I,1),FY3(I,1),FY4(I,1),FY5(I,1
*)
3929 FORMAT('BORN-LANDE          ',6(F9.4,1X))
WRITE(2,3930) FY0(I,2),FY1(I,2),FY2(I,2),FY3(I,2),FY4(I,2),FY5(I,2
*)
3930 FORMAT('BORN-MAYER          ',6(F9.4,1X))
WRITE(2,3931) FY0(I,3),FY1(I,3),FY2(I,3),FY3(I,3),FY4(I,3),FY5(I,3
*)
3931 FORMAT('HELLMANN           ',6(F9.4,1X))
WRITE(2,3932) FY0(I,4),FY1(I,4),FY2(I,4),FY3(I,4),FY4(I,4),FY5(I,4
*)
3932 FORMAT('WASASTJERNA        ',6(F9.4,1X))
WRITE(2,3933) FY0(I,5),FY1(I,5),FY2(I,5),FY3(I,5),FY4(I,5),FY5(I,5
*)
3933 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA     ',6(F9.4,1X))
WRITE(2,3934) FY0(I,6),FY1(I,6),FY2(I,6),FY3(I,6),FY4(I,6),FY5(I,6
*)
3934 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA mod.',6(F9.4,1X))
WRITE(2,3935) FY0(I,7),FY1(I,7),FY2(I,7),FY3(I,7),FY4(I,7),FY5(I,7
*)
3935 FORMAT('LOGARITMICO        ',6(F9.4,1X))
WRITE(2,3970)
3970 FORMAT(/' POTENCIAL          TOTAL      ELECTR.   OVERLAP   DIP
*.-DIP.  DIP.-CUAD.')
```

```

WRITE(2,3979) UTOT(I,1),ELEC(I),FZO(I,1),VDW1(I),VDW2(I)
3979 FORMAT('BORN-LANDE          ',5(F9.4,2X))
WRITE(2,3980) UTOT(I,2),ELEC(I),FZO(I,2),VDW1(I),VDW2(I)
3980 FORMAT('BORN-MAYER          ',5(F9.4,2X))
WRITE(2,3981) UTOT(I,3),ELEC(I),FZO(I,3),VDW1(I),VDW2(I)
3981 FORMAT('HELLMANN           ',5(F9.4,2X))
WRITE(2,3982) UTOT(I,4),ELEC(I),FZO(I,4),VDW1(I),VDW2(I)
3982 FORMAT('WASASTJERNA        ',5(F9.4,2X))
WRITE(2,3983) UTOT(I,5),ELEC(I),FZO(I,5),VDW1(I),VDW2(I)
3983 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA     ',5(F9.4,2X))
WRITE(2,3984) UTOT(I,6),ELEC(I),FZO(I,6),VDW1(I),VDW2(I)
3984 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA mod.',5(F9.4,2X))
WRITE(2,3985) UTOT(I,7),ELEC(I),FZO(I,7),VDW1(I),VDW2(I)
3985 FORMAT('LOGARITMICO        ',5(F9.4,2X))
IF(NUM10.EQ.2) GO TO 3945
3936 WRITE(2,3937)
3937 FORMAT(/' POTENCIAL          A          dA/dV    d2A/dV2   d3A
*/dV3  ')
WRITE(2,3938) Y0(I,1),Y1(I,1),Y2(I,1),Y3(I,1)
3938 FORMAT('BORN-LANDE          ',5(F10.4,1X))
WRITE(2,3939) Y0(I,2),Y1(I,2),Y2(I,2),Y3(I,2)
3939 FORMAT('BORN-MAYER          ',5(F10.4,1X))
WRITE(2,3940) Y0(I,3),Y1(I,3),Y2(I,3),Y3(I,3)
3940 FORMAT('HELLMANN           ',5(F10.4,1X))
WRITE(2,3941) Y0(I,4),Y1(I,4),Y2(I,4),Y3(I,4)
3941 FORMAT('WASASTJERNA        ',5(F10.4,1X))
WRITE(2,3942) Y0(I,5),Y1(I,5),Y2(I,5),Y3(I,5)
3942 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA     ',5(F10.4,1X))

```

```

WRITE(2,3943) Y0(I,6),Y1(I,6),Y2(I,6),Y3(I,6)
3943 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA mod.',5(F10.4,1X))
WRITE(2,3944) Y0(I,7),Y1(I,7),Y2(I,7),Y3(I,7)
3944 FORMAT('LOGARITMICO',5(F10.4,1X))
3945 IF(NUM1.EQ.3.OR.NUM11.EQ.2) GO TO 3955
IF(NCICLO.EQ.2.AND.(NUM1.EQ.5.OR.NUM1.EQ.6)) GO TO 3955
IF(NCICLO.EQ.3)GO TO 3955
WRITE(2,3947)
3947 FORMAT('/ POTENCIAL          D          dD/dV    d2D/dV2    d3D
*/dV3      ')
WRITE(2,3938) P0(I,1),P1(I,1),P2(I,1),P3(I,1)
WRITE(2,3939) P0(I,2),P1(I,2),P2(I,2),P3(I,2)
WRITE(2,3940) P0(I,3),P1(I,3),P2(I,3),P3(I,3)
WRITE(2,3941) P0(I,4),P1(I,4),P2(I,4),P3(I,4)
WRITE(2,3942) P0(I,5),P1(I,5),P2(I,5),P3(I,5)
WRITE(2,3943) P0(I,6),P1(I,6),P2(I,6),P3(I,6)
WRITE(2,3944) P0(I,7),P1(I,7),P2(I,7),P3(I,7)
3955 WRITE(2,3957)
3957 FORMAT('/ POTENCIAL          E          V dE      V2 d2E      V3 d3E
*      E(inf)  VdE(INF)')
WRITE(2,3958)
3958 FORMAT('          dV          dV2          dV3
*          dV      ')
WRITE(2,3959) CDE(I),CD1V(I,1),CD2V(I,1),CD3V(I,1),CDI(I),CI1V(I,1)
*)
3959 FORMAT('BORN-LANDE          ',6(F9.3,1X))
WRITE(2,3960) CDE(I),CD1V(I,2),CD2V(I,2),CD3V(I,2),CDI(I),CI1V(I,2)
*)
3960 FORMAT('BORN-MAYER          ',6(F9.3,1X))
WRITE(2,3961) CDE(I),CD1V(I,3),CD2V(I,3),CD3V(I,3),CDI(I),CI1V(I,3)
*)
3961 FORMAT('HELLMANN          ',6(F9.3,1X))
WRITE(2,3962) CDE(I),CD1V(I,4),CD2V(I,4),CD3V(I,4),CDI(I),CI1V(I,4)
*)
3962 FORMAT('WASASTJERNA          ',6(F9.3,1X))
WRITE(2,3963) CDE(I),CD1V(I,5),CD2V(I,5),CD3V(I,5),CDI(I),CI1V(I,5)
*)
3963 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA          ',6(F9.3,1X))
WRITE(2,3964) CDE(I),CD1V(I,6),CD2V(I,6),CD3V(I,6),CDI(I),CI1V(I,6)
*)
3964 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA mod.',6(F9.3,1X))
WRITE(2,3965) CDE(I),CD1V(I,7),CD2V(I,7),CD3V(I,7),CDI(I),CI1V(I,7)
*)
3965 FORMAT('LOGARITMICO          ',6(F9.3,1X))

IF(NUM7.EQ.1) GO TO 4100
WRITE(2,4010)
4010 FORMAT('/ POTENCIAL          1 dE          1 d2E          1 d3E')
WRITE(2,4020)
4020 FORMAT('          E dP          E dP2          E dP3')
WRITE(2,4059) CY1P(I,1),CY2P(I,1),CY3P(I,1)
4059 FORMAT('BORN-LANDE          ',3(F9.3,3X))
WRITE(2,4060) CY1P(I,2),CY2P(I,2),CY3P(I,2)
4060 FORMAT('BORN-MAYER          ',3(F9.3,3X))
WRITE(2,4061) CY1P(I,3),CY2P(I,3),CY3P(I,3)
4061 FORMAT('HELLMANN          ',3(F9.3,3X))

```



```

WRITE(2,4062) CY1P(I,4),CY2P(I,4),CY3P(I,4)
4062 FORMAT('WASASTJERNA          ',3(F9.3,3X))
WRITE(2,4063) CY1P(I,5),CY2P(I,5),CY3P(I,5)
4063 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA      ',3(F9.3,3X))
WRITE(2,4064) CY1P(I,6),CY2P(I,6),CY3P(I,6)
4064 FORMAT('VARSHNI-SHUKLA mod. ',3(F9.3,3X))
WRITE(2,4065) CY1P(I,7),CY2P(I,7),CY3P(I,7)
4065 FORMAT('LOGARITMICO         ',3(F9.3,3X))
4100 CONTINUE
DO 4200 I=1,N
DO 4200 J=1,7
DO(I,J)=0.
D1(I,J)=0.
D2(I,J)=0.
D3(I,J)=0.
4200 CONTINUE
IF(NCICLO.EQ.2.AND.NUM1.EQ.7) GO TO 350
IF(NUM1.LT.4) GO TO 4500
IF(NCICLO.GE.2) GO TO 4500
GO TO 350

4500 WRITE(2,4505)
4505 FORMAT('//                UNIDADES')
IF(NUM9.EQ.2) GO TO 4530
WRITE(2,4520)
4520 FORMAT('FI=10^-12 erg ,Der.resp.de R 1a=10^-4 dyn, 2a=10^-5 dyn/cm
*, '/' 3a=10^-13 dyn/cm^2, 4a=10^-21 dyn/cm^3, 5a=10^-29 dyn/cm^4')
4530 IF(NUM10.EQ.2) GO TO 4545
WRITE(2,4540)
4540 FORMAT('A=10^-5 dyn/cm ,Der.resp.de V 1a=10^-27 dyn/cm^4, '/9X, '2a=10
*^-50 dyn/cm^7, 3a=10^-73 dyn/cm^10')
4545 IF(NUM1.EQ.3.OR.NUM11.EQ.2) GO TO 4560
WRITE(2,4550)
4550 FORMAT('D=10^-10 e.s.u.,Der.resp.de V 1a=10^-12 e.s.u./cm^3, '/11X, '
*2a=10^-35 e.s.u./cm^6, 3a= 10^-57 e.s.u./cm^9')
4560 IF(NUM7.EQ.1) GO TO 5000
WRITE(2,4570)
4570 FORMAT('1/Cte.por Der.Cte.resp.de P 1a=10^-12 cm^2/dyn, '/19X, '2a=1
*0^-24 (cm^2/dyn)^2, 3a=10^-33 (cm^2/dyn)^3')
5000 WRITE(*,5001) SALIDA
5001 FORMAT(' Busque los resultados en el archivo ',A)
STOP' '
END

```

A continuación se dan una serie de listados de subrutinas, algunas utilizadas en conexión con el programa anterior y otras que se utilizaron en otras versiones.

La subrutina CARGAEF calcula el parámetro de carga efectiva de Szigeti s.

```

SUBROUTINE CARGAEF (N,NUM,W,CAT,AN,CDE,CDI,K,R,Z,S)
C Si NUM es 3 calcula teniendo a W como expresadas en cm^-1, en otro
C caso caso las toma como por 10^13 segundos^-1.
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K,MR
DIMENSION W(16),CAT(16),AN(16),CDE(16),CDI(16),R(16),MR(16),S(16)
IF(NUM.EQ.3) GO TO 43
DO 42 I=1,N

```

```

42 W(I)=.01883653*W(I)
43 DO 44 I=1,N
    MR(I)=CAT(I)*AN(I)/(CAT(I)+AN(I))
    S(I)=W(I)*((CDE(I)-CDI(I))*MR(I)*K*R(I)**3)**.5/(CDI(I)+2.)/Z*
    *0.0227044
44 CONTINUE
    RETURN
    END

```

La subrutina PARPOT calcula los dos parámetros para las siete formas de potencial de repulsión mencionadas en el capítulo 2.

```

SUBROUTINE PARPOT (N,CM,M,Z,E,R,K,CVDW,DVDW,COM,ENE,A,RO,B,RO1,B1,
*BETA,C,K1,L1,K2,L2,BB,AA)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K1,K2,L1,L2,K
DIMENSION R(16),CVDW(16),DVDW(16),COM(16)
DIMENSION ENE(16),A(16),RO(16),B(16),RO1(16),B1(16)
DIMENSION BETA(16),C(16),K1(16),L1(16),K2(16),L2(16),BB(16),AA(16)
C..... CALCULO DE PARAMETROS DE LOS POTENCIALES .....
DO 70 I=1,N
    G=-CM*Z*E*E/R(I)/R(I)-6.*CVDW(I)/(R(I)**7)-8.*DVDW(I)/(R(I)**9)
    H=Z*Z*E*E*2.*CM/(R(I)**3)+9.*K*R(I)/COM(I)+42.*CVDW(I)/(R(I)**8)+7
    *2.*DVDW(I)/(R(I)**10)
C..... POTENCIAL BORN-LANDE .....
C A CORRESPONDE A A SOBRE R A LA N POR 10 A LA -12 DYN.CM
    ENE(I)=-H*R(I)/G-1.
    A(I)=-G*R(I)/M/ENE(I)
C..... POTENCIAL BORN-MAYER .....
C RO EN ANGSTONS, B VA POR 10 A LA -12 DYN.CM
    RO(I)=-G/H
    B(I)=-G*RO(I)*DEXP(R(I)/RO(I))/M
C..... POTENCIAL HELLMANN .....
C RO1 EN ANGSTONS, B1 VA POR 10 A LA -20 DYN.CM
    O=R(I)/(H/G+2./R(I))
    RO1(I)=((-1.)*R(I)+DSQRT(R(I)*R(I)-4.*O))/2.
    B1(I)=-G*DEXP(R(I)/RO1(I))*R(I)/(1./R(I)+1/RO1(I))/M
C..... POTENCIAL WASASTJERNA .....
C BETA CORESPONDE A BETA POR R, C A C POR R A LA 7,Y VA POR 10 A LA
C -12 DYN.CM
    U=7.*(6.-R(I)*H/G)
    Q=R(I)*H/G-14.
    BETA(I)=(-Q+DSQRT(Q**2-4.*U))/2.
    C(I)=-G*DEXP(BETA(I))*R(I)/(BETA(I)-7.)/M
C..... POTENCIAL VARSHNI-SHUKLA .....
C K1 CORRESPONDE A K1 POR R A LA 2, L1 VA POR 10 A LA -12 DYN.CM
    K1(I)=.5*(-H*R(I)/G+1.)
    L1(I)=-G*DEXP(K1(I))*R(I)/K1(I)/2./M
C..... POTENCIAL VARSHNI-SHUKLA MODIFICADO .....
C K2 CORRESPONDE A K2 POR R A LA 3/2, L2 VA POR 10 A LA -12 DYN.CM
    K2(I)=(1.-2.*H*R(I)/G)/3.
    L2(I)=-2.*G*DEXP(K2(I))*R(I)/K2(I)/3./M
C..... POTENCIAL LOGARITMICO .....
C BB CORRESPONDE A B SOBRE R A LA 9, AA A A Y VA POR 10 A LA -12 DYN.CM
    BB(I)=-9./(H*R(I)/G+1.)-1.
    AA(I)=-G*(BB(I)+1.)*R(I)/(9.*M*BB(I))
70 CONTINUE

```

```
RETURN
END
```

La subrutina POTENS calcula el valor del potencial repulsivo y de sus derivadas primera a quinta respecto de la distancia, en la distancia interiónica de equilibrio.

```

SUBROUTINE POTENS (N,R,ENE,A,RO,B,RO1,B1,BETA,C,K1,L1,K2,L2,BB,AA,
*FIO,FI1,FI2,FI3,FI4,FI5)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K1,K2,L1,L2
DIMENSION R(16),ENE(16),A(16),RO(16),B(16),RO1(16),B1(16)
DIMENSION BETA(16),C(16),K1(16),L1(16),K2(16),L2(16),BB(16),AA(16)
*,FIO(16,7),FI1(16,7),FI2(16,7),FI3(16,7),FI4(16,7),FI5(16,7)
75 DO 200 I=1,N
C..... POTENCIAL BORN-LANDE .....
FIO(I,1)=A(I)
FI1(I,1)=(-1.)*ENE(I)*A(I)/R(I)
FI2(I,1)=ENE(I)*(ENE(I)+1.)*A(I)/(R(I)*R(I))
FI3(I,1)=(-1.)*ENE(I)*(ENE(I)+1.)*(ENE(I)+2.)*A(I)/(R(I)*R(I)*R(I)
*)
FI4(I,1)=ENE(I)*(ENE(I)+1.)*(ENE(I)+2.)*(ENE(I)+3.)*A(I)/(R(I)*R(I)
*)*R(I)*R(I)
FI5(I,1)=(-1.)*ENE(I)*(ENE(I)+1.)*(ENE(I)+2.)*(ENE(I)+3.)*(ENE(I)+
*4.)*A(I)/(R(I)*R(I)*R(I)*R(I)*R(I))
C..... POTENCIAL BORN-MAYER .....
IF(RO(I).EQ.0.0) GO TO 80
FIO(I,2)=B(I)*DEXP(-R(I)/RO(I))
FI1(I,2)=-FIO(I,2)/RO(I)
FI2(I,2)=-FI1(I,2)/RO(I)
FI3(I,2)=-FI2(I,2)/RO(I)
FI4(I,2)=-FI3(I,2)/RO(I)
FI5(I,2)=-FI4(I,2)/RO(I)
C..... POTENCIAL HELLMANN .....
80 IF(RO1(I).EQ.0.0) GO TO 90
FIO(I,3)=B1(I)*DEXP(-R(I)/RO1(I))/R(I)
FI1(I,3)=(-1.)*FIO(I,3)*(1./R(I)+1./RO1(I))
FI2(I,3)=-FI1(I,3)*(1./R(I)+1./RO1(I))+FIO(I,3)/R(I)**2.
FI3(I,3)=-FIO(I,3)*(6./R(I)**3.+6./RO1(I)/R(I)**2.+3./R(I)/RO1(I)*
**2.+1./RO1(I)**3.)
FI4(I,3)=FIO(I,3)*(24./R(I)**4.+24./R(I)**3./RO1(I)+12./R(I)**2./R
*O1(I)**2.+4./R(I)/RO1(I)**3.+1./RO1(I)**4.)
FI5(I,3)=-FIO(I,3)*(120./R(I)**5.+120./R(I)**4./RO1(I)+60./R(I)**3
*./RO1(I)**2.+20./R(I)**2./RO1(I)**3.+5./R(I)/RO1(I)**4.+1./RO1(I)*
**5.)
C..... POTENCIAL WASASTJERNA .....
90 FIO(I,4)=C(I)*DEXP(-BETA(I))
FI1(I,4)=FIO(I,4)*(7.-BETA(I))/R(I)
FI2(I,4)=FI1(I,4)*(7.-BETA(I))/R(I)-7.*FIO(I,4)/R(I)/R(I)
FI3(I,4)=FIO(I,4)/R(I)**3*(210.-126.*BETA(I)+21.*BETA(I)**2-BETA
*(I)**3)
FI4(I,4)=FIO(I,4)/R(I)**4*(840.-840.*BETA(I)+252.*BETA(I)**2-28.*
*BETA(I)**3+BETA(I)**4)
FI5(I,4)=FIO(I,4)/R(I)**5*(2520.-4200*BETA(I)+2100.*BETA(I)**2-4
*20.*BETA(I)**3+35.*BETA(I)**4-BETA(I)**5)
C..... POTENCIAL VARSHNI-SHUKLA .....
FIO(I,5)=L1(I)*DEXP(-K1(I))
FI1(I,5)=-2.*K1(I)*FIO(I,5)/R(I)

```

```

      FI2(I,5)=FIO(I,5)/R(I)**2*(-2.*K1(I)+4.*K1(I)**2)
      FI3(I,5)=FIO(I,5)*(12.*K1(I)**2-8.*K1(I)**3)/R(I)**3
      FI4(I,5)=FIO(I,5)/R(I)**4*(-48*K1(I)**3+16.*K1(I)**4+12.*K1(I)**2)
      FI5(I,5)=8.*K1(I)**3*FIO(I,5)/R(I)**5*(20.*K1(I)-4.*K1(I)**2-15.)
C..... POTENCIAL VARSHNI-SHUKLA MODIFICADO .....
      FIO(I,6)=L2(I)*DEXP(-K2(I))
      FI1(I,6)=-1.5*K2(I)*FIO(I,6)/R(I)
      FI2(I,6)=-.75*K2(I)*FIO(I,6)/R(I)**2-1.5*K2(I)*FI1(I,6)/R(I)
      FI3(I,6)=.75*K2(I)*FIO(I,6)/R(I)**3*(4.5*K2(I)-4.5*K2(I)**2+.5)
      FI4(I,6)=9.*K2(I)*FIO(I,6)/8./R(I)**4*(-9.*K2(I)**2+4.5*K2(I)**3
*- .5*K2(I)-.5)
      FI5(I,6)=9.*K2(I)*FIO(I,6)/16./R(I)**5*(45.*K2(I)**3-13.5*K2(I)**4
*-7.5*K2(I)**2+2.5*K2(I)+2.5)
C..... POTENCIAL LOGARITMICO .....
      IF(AA(I).EQ.0.0) GO TO 200
      FIO(I,7)=AA(I)*LOG(1.+BB(I))
      FI1(I,7)=-9.*AA(I)*BB(I)/R(I)/(1.+BB(I))
      F1=FI1(I,7)
      FI2(I,7)=-F1/R(I)*(1.+9./(1+BB(I)))
      F2=FI2(I,7)
      FI3(I,7)=F2**2/F1-F2/R(I)-F2*F1/AA(I)-F1**2/AA(I)/R(I)
      F3=FI3(I,7)
      FI4(I,7)=F2/R(I)**2-F3/R(I)+2.*F3*F2/F1-F2**3/F1**2-F3*F1/AA(I)-
      *F2*F2/AA(I)+F1*F1/AA(I)/R(I)**2-F1*F2**2./AA(I)/R(I)
      F4=FI4(I,7)
      FI5(I,7)=-F4/R(I)+2.*F4*F2/F1-F4*F1/AA(I)+2.*F3/R(I)**2+2.*F3*F3/
      *F1-5.*F3*F2*F2/(F1*F1)-3.*F3*F2/AA(I)-2.*F1*F3/AA(I)/R(I)-2.*F2/R(
      *I)**3+2.*F2**4/F1**3-2.*F2*F2/AA(I)/R(I)+4.*F1*F2/AA(I)/R(I)**2
      *-2.*F1**2/AA(I)/R(I)**3
200 CONTINUE
      RETURN
      END

```

La subrutina POTVDW calcula el valor de los términos del potencial de van der Waals en la distancia interiónica de equilibrio.

```

      SUBROUTINE POTVDW (N,R,CVDW,DVDW,M,FIO,FI1,FI2,FI3,FI4,FI5)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      DIMENSION R(16),CVDW(16),DVDW(16),FIO(16,7),FI1(16,7),FI2(16,7),FI
      *3(16,7),FI4(16,7),FI5(16,7),ENE(16),A(16),RO(16),B(16),RO1(16),B1(
      *16)
      DIMENSION BETA(16),C(16),K1(16),L1(16),K2(16),L2(16),BB(16),AA(16)
      DO 220 I=1,N
      DO 220 J=1,7
      FIO(I,J)=FIO(I,J)-(CVDW(I)/R(I)**6+DVDW(I)/R(I)**8)/M
      FI1(I,J)=FI1(I,J)+(6.*CVDW(I)/R(I)**7+8.*DVDW(I)/R(I)**9)/M
      FI2(I,J)=FI2(I,J)-(42.*CVDW(I)/R(I)**8+72.*DVDW(I)/R(I)**10)/M
      FI3(I,J)=FI3(I,J)+(336.*CVDW(I)/R(I)**9+720.*DVDW(I)/R(I)**11)/M
      FI4(I,J)=FI4(I,J)-(3024.*CVDW(I)/R(I)**10+7920.*DVDW(I)/R(I)**12)/
      *M
      FI5(I,J)=FI5(I,J)+(30240.*CVDW(I)/R(I)**11+95040.*DVDW(I)/R(I)**13
      *)/M
220 CONTINUE
      RETURN
      END

```

La subrutina ETOT calcula la energía potencial total por par iónico también a la distancia interiónica de equilibrio.

```

SUBROUTINE ETOT (N,Z,E,CM,M,R,CVDW,DVDW,FY0,ELEC,VDW1,VDW2,UTOT)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION R(16),VDW1(16),VDW2(16),CVDW(16),DVDW(16),ELEC(16),UTOT(
*16,7),FY0(16,7)
DO 255 I=1,N
ELEC(I)=-Z*Z*E*E*CM/R(I)*1.D+12
VDW1(I)=-CVDW(I)/R(I)**6*1.D+12
VDW2(I)=-DVDW(I)/R(I)**8*1.D+12
DO 255 J=1,7
UTOT(I,J)=M*FY0(I,J)+ELEC(I)+VDW1(I)+VDW2(I)
255 CONTINUE
RETURN
END

```

La subrutina CTEFZA calcula el valor de A y sus derivadas primera a tercera respecto del volumen.

```

SUBROUTINE CTEFZA (N,M,K,R,FI1,FI2,FI3,FI4,FI5,A0,A1,A2,A3)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K
DIMENSION R(16),FI1(16,7),FI2(16,7),FI3(16,7),FI4(16,7),FI5(16,7)
DIMENSION A0(16,7),A1(16,7),A2(16,7),A3(16,7)
260 DO 300 J=1,7
DO 300 I=1,N
A0(I,J)=(M/3.)*(FI2(I,J)+2.*FI1(I,J)/R(I))
A1(I,J)=M*(FI3(I,J)+2.*FI2(I,J)/R(I)-2.*FI1(I,J)/R(I)/R(I))/(9.*K*
*R(I)*R(I))
A2(I,J)=M*(FI4(I,J)-8.*FI2(I,J)/(R(I)*R(I))+8.*FI1(I,J)/(R(I)*R(I)
**R(I)))/(27.*K*K*R(I)*R(I)*R(I))
A3(I,J)=M*(FI5(I,J)-4.*FI4(I,J)/R(I)-8.*FI3(I,J)/(R(I)*R(I))+56.*F
*I2(I,J)/(R(I)*R(I)*R(I))-56.*FI1(I,J)/(R(I)*R(I)*R(I)*R(I)))/(81.*
*K*K*K*R(I)*R(I)*R(I)*R(I)*R(I))
300 CONTINUE
RETURN
END

```

La subrutina ECP calcula el valor del parámetro D y sus derivadas primera a tercera respecto del volumen.

```

SUBROUTINE ECP(N,E,FIO,FI1,FI2,FI3,FI4,FI5,A0,KC,KA,NC,NA,S,NMOD,R
*,DO,D1,D2,D3,K,NUM1)
C Si NUM1 es 2 calcula C.P.S., en otro caso N.P.C.
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K,KA,KC,NA,NC
DIMENSION FIO(16,7),FI1(16,7),FI2(16,7),FI3(16,7),FI4(16,7),FI5(16
*,7),A0(16,7),D1(16,7),D2(16,7),D3(16,7),DO(16,7),KC(16),KA(16),NC(
*16),NA(16),S(16),R(16),V(16)
DO 400 J=1,7
DO 400 I=1,N
V(I)=R(I)**3*K
FO=FIO(I,J)
F1=FI1(I,J)
F2=FI2(I,J)
F3=FI3(I,J)
F4=FI4(I,J)
DO(I,J)=A0(I,J)*E*((1./A0(I,J)+1./KC(I)+1./KA(I))*(S(I)-1.)-NC(I)/
*KC(I)+NA(I)/KA(I))

```

```

D1(I,J)=DO(I,J)*(((NMOD+1.)*F1+R(I)*F2)/(NMOD*FO+R(I)*F1))/(3.*K*R
*(I)*R(I))
D2(I,J)=(DO(I,J)*((NMOD+2.)*F2+R(I)*F3)/(3.*K*R(I)*R(I)*(NMOD*FO+R
*(I)*F1))-2.*D1(I,J)/R(I))/(3.*K*R(I)*R(I))
D3(I,J)=(DO(I,J)*((NMOD+3.)*F3+R(I)*F4)/(NMOD*FO+R(I)*F1)/(9.*K*K*
*R(I)**4)-2.*D1(I,J)/(3.*K*R(I)**4)-6.*D2(I,J)/R(I))/(3.*K*R(I)**2)
400 CONTINUE
IF(NUM1.EQ.2) GO TO 460
DO 440 J=1,7
DO 440 I=1,N
D1(I,J)=D1(I,J)+DO(I,J)/(3.*V(I))
D2(I,J)=D2(I,J)+(D1(I,J)-DO(I,J)/V(I))/(3.*V(I))
D3(I,J)=D3(I,J)+(D2(I,J)-2.*D1(I,J)/V(I)+2.*DO(I,J)/V(I)**2.)/(3.*
*V(I))
440 CONTINUE
460 RETURN
END

```

La subrutina CDEST calcula el valor de la constante dieléctrica estática.

```

SUBROUTINE CDEST(N,DO,KC,KA,NC,NA,E,K,R,AO,CDE)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION KC,KA,NC,NA,K
DIMENSION AO(16,7),DO(16,7),KC(16),KA(16),NC(16),NA(16),R(16),V(16
*),CDE(16)
DO 100 I=1,N
V(I)=R(I)**3*K
EMD=E+DO(I,1)
SUMA=1./AO(I,1)+1./KC(I)+1./KA(I)
POLAR=(NC(I)*E-DO(I,1))**2/KC(I)+(NA(I)*E+DO(I,1))**2/KA(I)+2.*EMD
**((NC(I)*E-DO(I,1))/KC(I)-(NA(I)*E+DO(I,1))/KA(I))+EMD**2*SUMA
CDE(I)=(8.*3.1415926/3./V(I)*POLAR+1.)/(1.-4.*3.1415926/3./V(I)*
*POLAR)
100 CONTINUE
RETURN
END

```

La subrutina CDINF calcula el valor de la constante dieléctrica de altas frecuencias.

```

SUBROUTINE CDINF(N,DO,KC,KA,NC,NA,E,K,R,AO,CDI)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION KC,KA,NC,NA,K
DIMENSION AO(16,7),DO(16,7),KC(16),KA(16),NC(16),NA(16),S(16),R(16
*),CDI(16),V(16)
DO 485 I=1,N
V(I)=R(I)**3*K
SUMA=1./AO(I,1)+1./KC(I)+1./KA(I)
POLAR=(NC(I)*E-DO(I,1))**2/KC(I)+(NA(I)*E+DO(I,1))**2/KA(I)-
**((NC(I)*E-DO(I,1))/KC(I)-(NA(I)*E+DO(I,1))/KA(I))**2/SUMA
CDI(I)=(8.*3.1415926/3./V(I)*POLAR+1.)/(1.-4.*3.1415926/3./V(I)*
*POLAR)
485 CONTINUE
RETURN
END

```

La subrutina DCDINF hace el cálculo de la derivada primera respecto del volumen de la constante dieléctrica de altas frecuencias.

```

SUBROUTINE DCDINF(N,DO,E,AO,D1,A1,S,CDI,CI1V)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION AO(16,7),DO(16,7),D1(16,7),A1(16,7),S(16),CDI(16),CI1V(1
*6,7)
DO 495 J=1,7
DO 495 I=1,N
CI1V(I,J)=1.3962634016*(CDI(I)+2.0)**2*(-2.0*D1(I,J)/AO(I,J))*((S(I)-
*1.0)*E-DO(I,J))-((S(I)-1.0)*E-DO(I,J))**2*A1(I,J)/AO(I,J)**2 -
*.238732414638*(CDI(I)-1.0)/(CDI(I)+2.0))
495 CONTINUE
RETURN
END

```

La subrutina DVCD realiza el cálculo de las derivadas primera a tercera respecto del volumen de la constante dieléctrica estática.

```

SUBROUTINE DVCD(N,A0,A1,A2,A3,DO,D1,D2,D3,E,V,CDE,CD1V,CD2V,CD3V)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION AO(16,7),DO(16,7),D1(16,7),A1(16,7),V(16),CDE(16),CD1V(1
*6,7),A2(16,7),D2(16,7),D3(16,7),A3(16,7),CD2V(16,7),CD3V(16,7)
DO 500 J=1,7
DO 500 I=1,N
CD1V(I,J)=1.3962634016*(CDE(I)+2.0)**2*((2.0*A0(I,J)*D1(I,J)-(E+DO(
*I,J))*A1(I,J))*(E+DO(I,J))/AO(I,J)**2-.238732414638*(CDE(I)-1.0)/(
*CDE(I)+2.0))
CD2V(I,J)=1.3962634016*V(I)*(CDE(I)+2.0)**2*((E+DO(I,J))**2/AO(I,J)
***3*(2.0*A1(I,J)**2-A0(I,J)*A2(I,J))+2.0*(E+DO(I,J))/AO(I,J)**2*
*(A0(I,J)*D2(I,J)-2.0*D1(I,J)*A1(I,J))+2.0*D1(I,J)**2/AO(I,J)-
*1.4323944878*CD1V(I,J)/V(I)*(CDE(I)+2.0-CD1V(I,J))/(CDE(I)+2.0)**3)
T1=(E+DO(I,J))**2/AO(I,J)**4*(6.0*A0(I,J)
**A1(I,J)*A2(I,J)-A0(I,J)**2*A3(I,J)-6.0*A1(I,J)**3)
T2=6.0*D1(I,J)/AO(I,J)**2*(A0(I,J)*D2(I,J)-D1(I,J)*A1(I,J))
T3=4.297183462*V(I)*(CD1V(I,J)/V(I))**3/(CDE(I)+2.0)**4
T4=(E+DO(I,J))/AO(I,J)**3*(2.0*A0(I,J)**2*D3(I,J)-6.0*A0(I,J)*D2(I,J)
)*A1(I,J)+6.0*D1(I,J)*(2.0*A1(I,J)**2-A0(I,J)*A2(I,J))
T5=-(2.0*CD1V(I,J)-(CDE(I)+2.0))*2.1485917317/(CDE(I)+2.0)**4*
*(2.0*(CD1V(I,J)/V(I))**2-CD2V(I,J)/V(I)**2*(CDE(I)+2.0))
CD3V(I,J)=1.3962634016*V(I)**2*(CDE(I)+2.0)**2*(T1+T2+T3+T4+T5)
500 CONTINUE
RETURN
END

```

Con la subrutina DPCD se obtienen las derivadas primera a tercera respecto de la presión de la constante dieléctrica estática.

```

SUBROUTINE DPCD(N,COM,COM1,COM2,CD1V,CD2V,CD3V,CDE,CD1P,CD2P,CD3P)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION CD1V(16,7),CD2V(16,7),CD3V(16,7),CD1P(16,7),CD2P(16,7),
*CD3P(16,7),CDE(16),COM(16),COM2(16),COM1(16)
DO 600 J=1,7
DO 600 I=1,N
IF(COM1(I).EQ.0.) GO TO 600
E1V=CD1V(I,J)
E2V=CD2V(I,J)
E3V=CD3V(I,J)
CD1P(I,J)=-COM(I)*E1V
E1P=CD1P(I,J)

```

```

CD1P(I,J)=E1P/CDE(I)
CD2P(I,J)=COM(I)*COM(I)*E2V+E1V*(COM(I)*COM(I)-COM1(I))
E2P=CD2P(I,J)
CD2P(I,J)=E2P/CDE(I)
CD3P(I,J)=-COM(I)**3*E3V+E2V*(3.*COM(I)*COM1(I)-
*3.*COM(I)**3)+E1V*(3.*COM(I)*COM1(I)-COM(I)**3-COM2(I))
E3P=CD3P(I,J)
CD3P(I,J)=E3P/CDE(I)
600 CONTINUE
RETURN
END

```

La subrutina GAMMAT realiza el cálculo para obtener γ_t y es similar a la incluida en el programa GT publicado en [142].

```

SUBROUTINE GAMMAT(N,E,R,K,NC,NA,KC,KA,DO,D1,A0,A1,CAT,AN,WC,GAMAT)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION K,KA,KC,NA,NC,MU,NU,LU,MOM2,MR
DIMENSION R(16),DO(16,7),D1(16,7),A0(16,7),A1(16,7),NC(16),NA(16),
*KC(16),KA(16),GAMAT(16,7),V(16),WC(16,7),MR(16),CAT(16),AN(16)
DO 50 I=1,N
DO 50 J=1,7
V(I)=K*R(I)*R(I)*R(I)
MR(I)= CAT(I)*AN(I) / (CAT(I)+AN(I))/6.023D23
C= 4.*3.1415926/3./V(I)
ED=E+DO(I,J)
LU= 1./KC(I)+1./KA(I)
MU=(NC(I)*E-DO(I,J))/KC(I) - (NA(I)*E+DO(I,J))/KA(I)
NU=(NC(I)*E-DO(I,J))**2/KC(I) + (NA(I)*E+DO(I,J))**2/KA(I)
DMU=-1.*LU*D1(I,J)
DNU=-2.*MU*D1(I,J)
TER1=LU*A1(I,J)*(1.-C*NU)-(1.+A0(I,J)*LU)*(C*DNU-NU*C/V(I))+
* C*MU**2*A1(I,J)+2.*A0(I,J)*C*MU*DMU-A0(I,J)*MU*MU*C/V(I)
TER2=2.*LU*ED*D1(I,J)+2.*MU*D1(I,J)+2.*ED*DMU+DNU
TER3=(1.+A0(I,J)*LU)*(1.-C*NU)+A0(I,J)*C*MU*MU
TER4=LU*ED*ED+NU+2.*MU*ED
TERS=A1(I,J)*C-A0(I,J)*C/V(I)
TER6= 2.*ED*C*D1(I,J)-ED*ED*C/V(I)
MOM2=((A0(I,J)-C*ED*ED)-A0(I,J)*C*TER4)/TER3
WC(I,J)=DSQRT(( A0(I,J)-C*ED*ED - A0(I,J)*C*TER4 ) /
* TER3 / MR(I) )
GAMAT(I,J)=-V(I)/2./TER3*((A1(I,J)-TER6-TER5*TER4-A0(I,J)*C*TER2)
*/MOM2-TER1)
50 CONTINUE
RETURN
END

```

La subrutina DLNSDLNV sirve para obtener valores de $\partial \ln s / \partial \ln V$ utilizando el modelo de dipolos de deformación.

```

SUBROUTINE DLNSDLNV (N,R,S,FI0,FI1,FI2,DLNS)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION S(16),R(16),FI0(16,7),FI1(16,7),FI2(16,7),DLNS(16,7)
DO 40 I=1,N
DO 40 J=1,7
DLNS(I,J)=(1.-S(I))/3./S(I)*(1.-(3.*FI1(I,J)+R(I)*FI2(I,J))/
*(2.*FI0(I,J)/R(I)+FI1(I,J)))

```



```
40 CONTINUE  
   RETURN  
   END
```

Capítulo 7

Resultados

7.1 Discusión de los resultados

Se muestran a continuación algunos resultados de los cálculos descriptos previamente con la finalidad de señalar diferentes aspectos de interés. En el Apéndice c se da un conjunto más completo de resultados.

7.1.1 Influencia de la forma del potencial

Para estudiar la influencia de la forma analítica dada al potencial repulsivo hemos desarrollado los formalismos y los programas correspondientes de manera que nos permita usar diferentes expresiones para el cálculo del término repulsivo de (5.1).

En la tabla 7.1 se muestran algunos resultados del cálculo de la energía de red W_L , es decir, una propiedad que depende directamente del potencial de repulsión, según se estableció en la ecuación (5.1). El acuerdo con los datos experimentales es bueno, como cabía esperar en compuestos esencialmente iónicos. De la comparación con los datos experimentales no podría elegirse una forma sobre otra, ya que el acuerdo es mejor para algunas formas y para otras según los casos, además hay una cierta dispersión de los valores experimentales de distintas fuentes.

Tabla 7.1: Energía de la red W_L en kcal/mol calculado con siete formas de potencial de repulsión.

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	Exp.
LiF	239.2	247.5	246.4	253.1	253.7	250.8	250.4	246.7 242.3
NaCl	179.5	184.5	184.0	187.6	188.4	186.6	183.9	187.1 182.6
KCl	164.1	168.5	168.1	171.2	172.0	170.3	167.0	170.2 165.8
RbBr	151.9	156.0	155.6	158.4	159.2	157.7	154.1	157.2 152.6
CsF	177.0	180.7	180.4	182.8	183.7	182.3	177.6	177.0
CsBr	147.2	151.4	151.0	153.9	154.9	153.2	148.4	154.1 152.3
TlBr	166.7	174.1	173.4	178.4	180.1	177.3	169.5	166.0 169.1

La derivada de B_t respecto de la presión fue obtenida según la ecuación (5.13), y es entonces una propiedad que depende ya de ϕ''' . En este caso todos los valores tienen el orden de magnitud correcto, pero se observa que en general todos los valores son más pequeños que los experimentales, lográndose el mejor acuerdo con el potencial de Born-Landé que da sistemáticamente los valores más grandes.

Tabla 7.2: $\partial B_t/\partial p$ calculado con siete formas de potencial de repulsión.

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	Exp.
LiF	4.29	3.73	3.84	2.96	3.02	3.40	2.82	5.30
NaCl	4.86	4.27	4.36	3.61	3.54	3.92	3.94	4.92 5.38
KCl	5.10	4.50	4.58	3.87	3.75	4.14	4.40	5.46 5.34
RbBr	5.26	4.65	4.73	4.03	3.89	4.29	4.71	5.59
CsF	5.54	4.98	5.05	4.47	4.30	4.66	5.41	6.68
CsBr	5.60	4.93	5.02	4.31	4.12	4.55	5.27	5.80 5.62
TlBr	5.79	4.95	5.06	4.15	3.93	4.46	5.25	5.04 6.10

La tabla 7.3 muestra algunos resultados obtenidos para el cálculo de γ_t con siete diferentes formas de potencial de repulsión entre primeros vecinos, la tabla 7.4 muestra resultados de la derivada respecto de la presión de la constante dieléctrica estática, la tabla 7.5 resultados de la derivada segunda y la tabla 7.6 resultados de la derivada tercera, todos calculados utilizando el modelo de cargas de intercambio.

Tabla 7.3: γ_t calculado con siete formas de potencial de repulsión.

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	Exp.
LiF	3.73	2.62	2.81	1.15	1.25	1.97	0.91	2.35
NaCl	3.16	2.46	2.56	1.71	1.62	2.06	2.09	2.35
KCl	3.01	2.40	2.49	1.78	1.66	2.05	2.32	2.83
RbBr	2.98	2.40	2.48	1.84	1.72	2.08	2.47	2.39
CsBr	3.72	2.97	3.06	2.29	2.09	2.55	3.36	2.74
TlBr	4.42	3.14	3.30	1.96	1.64	2.42	3.62	4.30

En la tabla 7.3 se observa que los resultados son del orden de magnitud correctos, correspondiendo en todos los casos al potencial de Born-Landé el valor más grande; el menor valor es en la mayoría de los casos el del potencial de Varshni-Shukla. El potencial tipo Born-Mayer es el que tiene un mejor acuerdo global comparando con los valores experimentales.

La tabla 7.4 muestra valores de $-1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0/\partial p$. Las tendencias son las mismas que para los valores de γ_t : los valores del potencial Born-Landé son los mayores, los de Varshni-Shukla los menores (en el caso del LiF es el logarítmico). Si bien el potencial de Born-Mayer

Tabla 7.4: $-1/\epsilon_0 \cdot \partial\epsilon_0/\partial p / (10^{-12}\text{cm}^2\text{dyn}^{-1})$ calculado con siete formas de potencial de repulsión.

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	Exp.
LiF	8.46	5.38	5.92	1.41	1.67	3.62	0.78	3.82
NaCl	15.41	10.79	11.45	5.95	5.37	8.19	8.52	9.25
KCl	18.24	13.19	13.88	8.21	7.27	10.35	12.62	11.01
RbBr	21.57	15.75	16.51	10.26	8.99	12.50	16.53	11.7
CsBr	24.94	17.96	18.81	11.86	10.05	14.13	21.65	13.9
TlBr	15.80	8.13	9.09	1.19	0.70	3.87	11.05	19.7

tiene un acuerdo razonable con los datos experimentales, el potencial que parece reproducir mejor los valores es el de Varshni-Shukla modificado.

Tabla 7.5: $1/\epsilon_0 \cdot \partial^2\epsilon_0/\partial p^2 / (10^{-24}\text{cm}^4\text{dyn}^{-2})$ calculado con siete formas de potencial de repulsión.

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	Exp.
LiF	209.5	110.3	124.7	46.15	43.62	71.15	55.75	86.6
NaCl	929.7	592.9	634.5	364.5	328.0	447.7	528.7	491.3
KCl	1430	959.8	1015	642.9	573.9	751.4	991.6	691.2
KBr	1908	1274	1348	854.6	763.0	996.9	1319	978.1

En la tabla 7.5 aparecen valores de $1/\epsilon_0 \cdot \partial^2\epsilon_0/\partial p^2$, y en la tabla 7.6 valores de $1/\epsilon_0 \cdot \partial^3\epsilon_0/\partial p^3$; otra vez los valores para Born-Landé resultan los más grandes, mientras que se puede decir que hay un buen acuerdo global para el potencial de Varshni-Shukla modificado, aunque puntualmente el acuerdo pueda ser mejor con otros potenciales. Por otra parte hay que tener en cuenta que para las derivadas de orden superior hay pocas sales medidas, los datos (igual que el caso de γ_t) son de temperatura ambiente, y además los datos experimentales están medidos con un cierto error que es importante en estas derivadas (Fontanella, Andeen y Schuele [116] estiman en un 0.2% el error para la derivada primera, un 2% para la derivada segunda y un 20% para la derivada tercera).

7.1.2 Comparación entre los modelos de capas

Ahora vamos a comparar los resultados obtenidos con la distintas versiones del modelo de capas utilizado: el modelo de cargas de intercambio, con las cargas cerca del núcleo del ion positivo (NPC), el modelo de cargas de intercambio, con las cargas en el punto de contacto entre las capas (CPS), y el modelo de capas simples (SM).

En todos los casos los valores tabulados corresponden al potencial tipo Born-Mayer.

Tabla 7.6: $-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0 / \partial p^3 / (10^{-33} \text{cm}^6 \text{dyn}^{-3})$ calculado con siete formas de potencial de repulsión.

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	Exp.
LiF	7.99	3.49	4.06	1.20	1.17	2.07	1.33	1.61
NaCl	86.3	50.0	54.1	29.3	26.1	36.4	45.1	32.2
KCl	172	107	114	69.2	61.2	81.3	113	47.4
KBr	268	166	177	108	95.4	126	177	110

Elegimos éste pues es el más ampliamente usado, muestra un comportamiento general bueno para todas las sales y nos sirve para mostrar la tendencia encontrada en los cálculos al cambiar el modelo, siendo que la tendencia debida al cambio en la forma de potencial es la descrita anteriormente.

Tabla 7.7: Comparación entre los modelos de capas (LiF).

LiF	γ_t	$-1/\epsilon_\infty \cdot \partial \epsilon_\infty / \partial p$ / $10^{-12} \text{cm}^2 \text{dyn}^{-1}$	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0 / \partial p$ / $10^{-12} \text{cm}^2 \text{dyn}^{-1}$	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0 / \partial p^2$ / $10^{-24} \text{cm}^4 \text{dyn}^{-2}$	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0 / \partial p^3$ / $10^{-33} \text{cm}^6 \text{dyn}^{-3}$
NPC	2.56	0.85	5.16	104.2	3.25
CPS	2.62	0.83	5.38	110.3	3.49
SM	3.48	0.83	7.83	202.0	7.95

Como se puede apreciar en las tablas 7.7, 7.8 y 7.9, los valores encontrados utilizando ambos modelos de cargas de intercambio (NPC y CPS) son bastante similares, dando siempre el cálculo NPC valores más chicos en γ_t y las derivadas de ϵ_0 . Los valores del modelo de capas simple (SM) son siempre mayores en estas magnitudes, notándose una gran diferencia sobre todo en las derivadas de orden superior de ϵ_0 . En el caso de la derivada de ϵ_∞ la situación es la inversa a la anterior (NPC > CPS \gg SM).

Tabla 7.8: Comparación entre los modelos de capas (KBr).

KBr	γ_t	$-1/\epsilon_\infty \cdot \partial \epsilon_\infty / \partial p$ / $10^{-12} \text{cm}^2 \text{dyn}^{-1}$	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0 / \partial p$ / $10^{-12} \text{cm}^2 \text{dyn}^{-1}$	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0 / \partial p^2$ / $10^{-24} \text{cm}^4 \text{dyn}^{-2}$	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0 / \partial p^3$ / $10^{-33} \text{cm}^6 \text{dyn}^{-3}$
NPC	2.33	5.14	14.0	1196	153.8
CPS	2.37	5.07	14.8	1274	165.7
SM	2.66	4.77	17.8	1686	239.2

Tabla 7.9: Comparación entre los modelos de capas (CsCl).

CsCl	γ_t	$-1/\epsilon_\infty \cdot \partial\epsilon_\infty/\partial p$ / $10^{-12} \text{ cm}^2\text{dyn}^{-1}$	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial\epsilon_0/\partial p$ / $10^{-12} \text{ cm}^2\text{dyn}^{-1}$	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2\epsilon_0/\partial p^2$ / $10^{-24} \text{ cm}^4\text{dyn}^{-2}$	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3\epsilon_0/\partial p^3$ / $10^{-33} \text{ cm}^6\text{dyn}^{-3}$
NPC	3.08	5.21	16.6	1400	175.2
CPS	3.13	5.19	17.2	1468	185.6
SM	3.71	4.98	23.1	2264	329.3

7.1.3 Importancia de los términos de van der Waals

Todos los valores calculados mostrados antes y todos los que siguen, si no se indica lo contrario están calculados incluyendo términos de van der Waals C/r^6 y D/r^8 en el potencial de interacción.

Para mostrar la importancia de esta inclusión, en la tabla 7.10 se muestran pares de valores de algunas magnitudes calculadas; los valores superiores incluyen términos de van der Waals en el potencial, mientras que los inferiores no lo incluyen.

Tabla 7.10: Valores superiores: incluyen términos de van der Waals, valores inferiores: no incluyen términos de van der Waals.

Sal	W_L /kcal mol ⁻¹	$\partial B_t/\partial p$	γ_t	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial\epsilon_0/\partial p$ / $10^{-12} \text{ cm}^2\text{dyn}^{-1}$	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2\epsilon_0/\partial p^2$ / $10^{-24} \text{ cm}^4\text{dyn}^{-2}$	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3\epsilon_0/\partial p^3$ / $10^{-33} \text{ cm}^6\text{dyn}^{-3}$
LiF	247.5	3.73	2.62	5.38	110.3	3.49
	246.3	3.82	2.78	5.82	121.8	3.95
NaF	220.8	4.10	2.29	5.97	157.3	6.51
	219.0	4.22	2.44	6.50	175.3	7.42
NaCl	184.5	4.27	2.46	10.79	592.9	50.0
	182.1	4.47	2.71	12.48	710.7	62.3
KI	151.8	4.53	2.38	17.47	1961	328.0
	147.8	4.92	2.79	22.94	2717	483.5
CsCl	157.2	4.94	3.13	18.00	1468	185.6
	151.0	5.57	3.98	24.66	2380	343.2
TlCl	174.5	4.45	4.04	11.41	2015	292.3
	161.1	5.55	8.33	52.10	8091	1871

Podemos observar que si bien en el caso del LiF las diferencias no son muy significativas, aumentan en el caso del NaF y el NaCl y así siguiendo al aumentar el tamaño del ion hasta llegar al TlCl donde los valores de las derivadas de ϵ_0 son varias veces más grandes si no se incluyen las interacciones de van der Waals en el potencial.

7.1.4 Influencia de la parametrización

Los valores de potencial calculados y a partir de ellos otras magnitudes resultan muy sensibles a las diferencias en los datos utilizados para determinar sus parámetros.

En la mayoría de los cálculos hemos usado la parametrización más simple y más difundida, esto es, utilizando la distancia interiónica de equilibrio (r_0) y la compresibilidad isotérmica (χ_t), como se describe con las ecuaciones (5.6) y (5.7).

Tabla 7.11: Variación de los resultados con los datos de entrada (LiCl).

r_0 / 10^{-8} cm	χ_t / 10^{-12} cm ² dyn ⁻¹	ϕ / 10^{-12} dyn.cm	ϵ_0	ϵ_∞	γ_t
2.5462	2.8265	0.450	13.0	3.40	3.03
2.5698	2.8265	0.430	11.3	3.29	2.95
2.5462	3.3670	0.496	19.7	3.37	3.27
2.5698	3.3670	0.475	16.1	3.26	3.08
r_0 / 10^{-8} cm	χ_t / 10^{-12} cm ² dyn ⁻¹	$1/\epsilon_\infty \cdot \partial\epsilon_\infty/\partial p$ / 10^{-12} cm ² dyn ⁻¹	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial\epsilon_0/\partial p$ / 10^{-12} cm ² dyn ⁻¹	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2\epsilon_0/\partial p^2$ / 10^{-24} cm ⁴ dyn ⁻²	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3\epsilon_0/\partial p^3$ / 10^{-33} cm ⁶ dyn ⁻³
2.5462	2.8265	3.14	9.43	474	37.1
2.5698	2.8265	3.02	8.89	436	33.3
2.5462	3.3670	3.77	13.71	784	67.2
2.5698	3.3670	3.62	12.39	668	54.2

En la tabla 7.11 se muestran grupos de a cuatro de valores calculados con dos pares de valores experimentales de r_0 y χ_t de LiCl. Vemos que los valores el valor más grande de r_0 tiende a dar valores más chicos de ϕ y de ϵ_0 y sus derivadas y γ_t ; lo opuesto sucede con χ_t . Luego se obtienen los valores más grandes con la combinación de el mayor χ_t y el menor r_0 ; los valores más pequeños para el mayor r_0 y el menor χ_t .

Lo mismo se puede observar en la tabla 7.12; en este caso la diferencia entre los valores experimentales de r_0 y χ_t son mayores que en el anterior y eso se traduce en una mayor dispersión en los resultados, pudiendo ser en el caso de las derivadas de orden superior de ϵ_0 mayor del 100%.

En la tabla 7.13 se dan pares de valores de ϕ , ϵ_0 , ϵ_∞ , γ_t y $\partial B_t/\partial p$ calculados según la parametrización nombrada anteriormente, que utiliza como datos r_0 y χ_t (valores superiores) y los calculados según la llamada aproximación de Hildebrand, ecuaciones (2.25) y (2.26), para la cual son necesarios además valores experimentales de la expansión térmica β y las derivadas de la compresibilidad respecto de la presión y de la temperatura, $\partial\chi_t/\partial p$ y $\partial\chi_t/\partial T$ (valores inferiores).

Comparando los pares de valores vemos que con la aproximación de Hildebrand los valores de ϕ resultan más pequeños, aumentando los valores de W_L , ϵ_0 y $\partial B_t/\partial p$, pero no en todos los casos (ϵ_0 disminuye para NaCl, TlBr y AgCl).

Tabla 7.12: Variación de los resultados con los datos de entrada (TlBr).

r_0 / 10^{-8} cm	χ_t / 10^{-12} cm ² dyn ⁻¹	ϕ / 10^{-12} dyn.cm	ϵ_0	ϵ_∞	γ_t
3.4519	3.8870	0.534	17.5	4.96	3.14
3.4088	3.8870	0.583	23.4	5.33	3.26
3.4519	4.4444	0.563	23.7	4.96	3.33
3.4088	4.4444	0.612	36.1	5.33	3.65
r_0 / 10^{-8} cm	χ_t / 10^{-12} cm ² dyn ⁻¹	$1/\epsilon_\infty \cdot \partial\epsilon_\infty/\partial p$ / 10^{-12} cm ² dyn ⁻¹	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial\epsilon_0/\partial p$ / 10^{-12} cm ² dyn ⁻¹	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2\epsilon_0/\partial p^2$ / 10^{-24} cm ⁴ dyn ⁻²	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3\epsilon_0/\partial p^3$ / 10^{-33} cm ⁶ dyn ⁻³
3.4519	3.8870	7.06	8.13	730	82.8
3.4088	3.8870	7.57	9.03	870	103
3.4519	4.4444	8.08	12.11	1171	141
3.4088	4.4444	8.67	14.91	1622	216

En la tabla 7.14 se dan pares de valores calculados de la derivada de ϵ_∞ , la derivada primera, segunda y tercera (todas respecto de la presión) de ϵ_0 y γ_t , con el mismo esquema de la tabla 7.13: valores superiores, aproximación estática; valores inferiores, aproximación de Hildebrand. Los valores de la derivada de ϵ_∞ son ligeramente más pequeños con la aproximación de Hildebrand, y las derivadas de ϵ_0 resultan mayores (con excepciones en las sales de plata y talio) y también γ_t (disminuye para TlBr).

De todas maneras la dispersión es más pequeña que la observada al variar los valores de r_0 y χ_t . Esto es así pues los términos de corrección que involucran a β , $\partial\chi_t/\partial p$ y $\partial\chi_t/\partial T$ son pequeños en el tipo de compuestos iónicos estudiados, como fue señalado por varios autores [143]. La aproximación estática resulta entonces una buena aproximación, sobre todo si los valores de β , $\partial\chi_t/\partial p$ y $\partial\chi_t/\partial T$ no son demasiado confiables.

Tabla 7.13: Valores superiores: aproximación estática, valores inferiores: aproximación de Hildebrand.

Sal	$\phi / (10^{-12}\text{erg})$	ϵ_0	ϵ_∞	$W_L / \text{kcal mol}^{-1}$	$\partial B_i / \partial p$
LiF	0.662	10.6	2.00	247.4	3.74
LiF	0.551	12.9	1.99	248.8	3.79
NaCl	0.474	6.93	2.51	184.5	4.27
NaCl	0.375	6.87	2.51	188.1	4.61
KCl	0.441	5.75	2.23	168.5	4.49
KCl	0.366	6.15	2.22	170.6	4.69
RbBr	0.422	5.32	2.33	156.1	4.64
RbBr	0.349	5.55	2.33	158.3	4.88
CsCl	0.280	7.42	2.67	157.5	5.14
CsCl	0.251	7.96	2.67	160.9	5.56
CsBr	0.304	7.15	2.77	152.3	5.05
CsBr	0.280	7.96	2.77	155.1	5.38
TlBr	0.578	26.6	5.07	171.4	4.60
TlBr	0.523	17.2	5.08	177.8	5.16
AgCl	0.805	9.64	5.25	210.8	4.89
AgCl	0.697	8.28	5.27	220.2	5.65

Tabla 7.14: Valores superiores: aproximación estática, valores inferiores: aproximación de Hildebrand.

Sal	$1/\epsilon_{\infty} \cdot \partial\epsilon_{\infty}/\partial p$ / $10^{-12} \text{ cm}^2\text{dyn}^{-1}$	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial\epsilon_0/\partial p$ / $10^{-12} \text{ cm}^2\text{dyn}^{-1}$	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2\epsilon_0/\partial p^2$ / $10^{-24} \text{ cm}^4\text{dyn}^{-2}$	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3\epsilon_0/\partial p^3$ / $10^{-33} \text{ cm}^6\text{dyn}^{-3}$	γ_t
LiF	0.825	5.278	106.9	3.347	2.58
LiF	0.824	6.307	140.4	4.805	2.90
NaCl	3.228	10.75	589.9	49.68	2.45
NaCl	3.186	12.13	694.4	60.95	2.67
KCl	4.016	13.24	965.2	107.5	2.41
KCl	4.001	15.26	1158	134.6	2.58
RbBr	5.695	15.70	1523	222.4	2.40
RbBr	5.675	17.98	1803	273.1	2.64
CsCl	4.815	15.36	1274	157.8	3.11
CsCl	4.801	18.97	1688	225.4	3.49
CsBr	5.855	16.51	1487	195.7	2.97
CsBr	5.842	20.89	2021	288.9	3.33
TlBr	8.260	12.78	1275	157.5	3.40
TlBr	5.242	9.535	912.6	103.9	3.25
AgCl	4.133	1.355	89.52	4.575	2.39
AgCl	4.095	1.051	86.89	4.575	2.66

7.1.5 Inclusión de la interacción a segundos vecinos

Ahora vamos a comparar los resultados obtenidos utilizando una forma de potencial repulsivo exponencial extendido hasta segundos vecinos. Los parámetros del potencial fueron obtenidos según lo descrito en el capítulo 5, página 49.

Los valores iniciales de ρ fueron tomados de los trabajos de Tosi y Fumi [84], Boswarva [85], Shanker, Verma, Cox y Sangster [86], Shanker y Agrawal [92] y Shanker, Singh y Jain [91]. Los trabajos de Shanker y Agrawal y Shanker, Singh y Jain incluyen conjuntos de parámetros ρ que fueron obtenidos a partir del cálculo de integrales de solapamiento [88]. Denotaremos con S.(ov.) el conjunto de valores obtenidos a partir de los parámetros del trabajo de Shanker y Agrawal, a su vez calculados a partir de integrales, para diferenciarlos de los obtenidos a partir de datos medidos sobre el cristal en el mismo trabajo, que denotaremos S.(cr.).

Tabla 7.15: Comparación entre potenciales a segundos vecinos (LiF).

LiF	T.F. [84]	B. [85]	S. [86]	S.(cr.)[92]	S. (ov.) [92]
$W_L/(\text{kcal mol}^{-1})$	246.6	246.7	246.0	247.3	247.3
$\partial B_t/\partial p$	3.819	3.809	3.852	3.749	3.750
γ_t	5.308	5.307	5.305	5.305	5.305
$-1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0/\partial p/(10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ dyn}^{-1})$	5.701	5.649	5.881	5.346	5.351
$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0/\partial p^2/(10^{-24} \text{ cm}^4 \text{ dyn}^{-2})$	117.9	116.5	123.2	108.4	108.5
$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0/\partial p^3/(10^{-33} \text{ cm}^6 \text{ dyn}^{-3})$	3.778	3.721	3.997	3.403	3.404

Tabla 7.16: Comparación entre potenciales a segundos vecinos (KCl).

KCl	T.F. [84]	B. [85]	S. [86]	S.(cr.)[92]	S. (ov.) [92]
$W_L/(\text{kcal mol}^{-1})$	168.2	168.2	168.1	168.5	168.5
$\partial B_t/\partial p$	4.553	4.557	4.580	4.503	4.503
γ_t	2.466	2.469	2.493	2.416	2.416
$-1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0/\partial p/(10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ dyn}^{-1})$	13.73	13.75	13.95	13.32	13.33
$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0/\partial p^2/(10^{-24} \text{ cm}^4 \text{ dyn}^{-2})$	1004	1006	1022	971.3	970.1
$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0/\partial p^3/(10^{-33} \text{ cm}^6 \text{ dyn}^{-3})$	112.3	112.6	114.7	108.2	108.1

En todos los casos vemos que las diferencias no son muy significativas (salvo quizá en los valores para el RbI a partir del potencial de Tosi y Fumi).

En las tablas siguientes se dan valores de distintas magnitudes calculadas con potenciales de repulsión hasta primeros vecinos y hasta segundos vecinos. Los potenciales tabulados

Tabla 7.17: Comparación entre potenciales a segundos vecinos (RbI).

RbI	T.F. [84]	B. [85]	S. [86]	S.(cr.)[92]	S. (ov.) [92]
$W_L/(\text{kcal mol}^{-1})$	143.7	146.1	145.9	146.2	146.3
$\partial B_t/\partial p$	4.448	4.803	4.845	4.766	4.754
γ_t	2.617	2.557	2.596	2.525	2.515
$-1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0/\partial p/(10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ dyn}^{-1})$	26.01	20.51	21.03	20.17	20.04
$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0/\partial p^2/(10^{-24} \text{ cm}^4 \text{ dyn}^{-2})$	3373	2583	2655	2541	2522
$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0/\partial p^3/(10^{-33} \text{ cm}^6 \text{ dyn}^{-3})$	664.4	484.4	499.8	476.1	471.7

Tabla 7.18: Comparación entre potenciales a segundos vecinos (CsI).

CsI	Shanker [91]	Shanker (cr.)[92]	Shanker (ov.) [92]
$W_L/(\text{kcal mol}^{-1})$	144.5	144.0	144.1
$\partial B_t/\partial p$	5.210	5.327	5.327
γ_t	2.975	3.087	3.085
$-1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0/\partial p/(10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ dyn}^{-1})$	18.07	19.12	19.09
$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0/\partial p^2/(10^{-24} \text{ cm}^4 \text{ dyn}^{-2})$	2012	2122	2124
$-1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0/\partial p^3/(10^{-33} \text{ cm}^6 \text{ dyn}^{-3})$	324.8	345.2	345.0

son los de Born-Mayer y Varshni-Shukla modificado, pues el primero es el más ampliamente usado y los dos en general son los de mejor acuerdo global con los datos experimentales, y el potencial a segundos vecinos de Shanker y Agrawal a partir de datos de overlap, pues dado que los resultados son bastante similares para todos los conjuntos estudiados, los datos de ρ obtenidos a partir de integrales de solapamiento tienen un origen independiente y resulta más coherente realizar un ajuste para que las derivadas del potencial satisfagan las ecuaciones (5.6) y (5.7), que realizar el ajuste sobre parámetros que a su vez fueron obtenidos a partir de datos experimentales distintos.

La tabla 7.19 muestra valores calculados de $\partial B_t/\partial p$. Los valores con el potencial de Born-Mayer son bastante similares a los obtenidos con el potencial a segundos vecinos, siendo los valores con el potencial Varshni-Shukla modificado significativamente más pequeños. A su vez todos son menores que los valores experimentales. Si bien las diferencias no son significativas, la inclusión de segundos vecinos parece actuar en la dirección correcta, esto es, aumentar el valor de $\partial B_t/\partial p$ acercándolo a los valores experimentales.

En la tabla 7.20 se muestran valores calculados de $-1/\epsilon_0 \cdot \partial \epsilon_0/\partial p$. Otra vez (especialmente para los haluros alcalinos) los valores de Born-Mayer y el potencial a segundos vecinos son muy similares. El acuerdo en general es bastante bueno con el potencial de Varshni-Shukla modificado, sobre todo en las sales de potasio, rubidio y cesio, donde los otros tienden a dar valores que parecen muy altos. Sin embargo se ve una gran diferencia

Tabla 7.19: $\partial B_t / \partial p$

Sal	1 ^o Vec.(B.M.)	1 ^o Vec.(V.S.m.)	2 ^o Vec.	Exp.
LiF	3.736	3.398	3.750	5.30
LiCl	3.978	3.616	3.997	5.63
LiBr	4.014	3.634	4.040	5.68
LiI	4.027	3.615	4.063	6.15
NaF	4.093	3.762	4.132	5.25 5.18
NaCl	4.268	3.921	4.281	5.38 4.92
NaBr	4.317	3.960	4.336	5.44 5.29
NaI	4.377	4.004	4.404	5.58 5.40
KF	4.336	3.995	4.631	5.38 5.26
KCl	4.493	4.139	4.503	5.46 5.34
KBr	4.489	4.123	4.496	5.47 5.38
KI	4.530	4.152	4.538	5.56 5.47
RbF	4.495	4.155	4.967	5.69
RbCl	4.632	4.281	4.657	5.62
RbBr	4.637	4.275	4.647	5.59
RbI	4.750	4.414	4.754	5.60
CsCl	5.140	4.790	5.536	5.85 5.89
CsBr	5.049	4.673	5.354	5.80 5.71 5.624
CsI	5.190	4.823	5.327	5.75 5.79 5.694
TlCl	4.450	3.889	4.479	6.69 6.98
TlBr	4.600	4.056	4.525	5.04 6.10
AgCl	4.893	4.419	5.460	6.57 6.55
AgBr	5.060	4.601	5.061	6.82 7.03

en las sales de talio y plata, donde el potencial a segundos vecinos tiende a dar los valores mayores y acercarse más a los valores experimentales.

La tabla 7.21 muestra valores de $1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0 / \partial p^2$. Para esta magnitud hay pocos valores experimentales; para las sales donde este valor existe el acuerdo es algo mejor para el potencial de Varshni-Shukla modificado (salvo KBr), los otros potenciales tienden a dar valores más altos.

La tabla 7.22 muestra valores de $1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0 / \partial p^3$. Como en el caso anterior hay pocos valores experimentales, y el mejor acuerdo global es para el potencial de Varshni-Shukla modificado (salvo para NaBr).

Tabla 7.20: $-1/\epsilon_0 \cdot \partial\epsilon_0/\partial p/(10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ dyn}^{-1})$

Sal	1 ^{oa} Vec.(B.M.)	1 ^{oa} Vec.(V.S.m.)	2 ^{oa} Vec.	Exp.
LiF	5.225	3.506	5.351	3.82 5.085 4.87
LiCl	11.89	7.584	12.22	8.02 8.6
LiBr	12.69	8.009	13.16	13 12.8
NaF	5.963	4.571	6.140	5.398 5.37 5.06
NaCl	10.76	8.134	10.85	9.25 10.388
NaBr	12.18	9.199	12.28	11.9 12.704
NaI	16.02	11.50	16.22	15.1
KF	8.906	6.797	10.69	7.63
KCl	13.36	10.42	13.33	10.2 11.006
KBr	14.97	11.62	14.84	11.6 12.488
KI	18.15	13.79	17.94	13.8 12.6
RbF	10.26	7.709	13.80	8.47
RbCl	14.30	11.31	14.31	10.2 11.42
RbBr	15.99	12.64	15.79	11.7 12.6
RbI	20.42	16.56	20.04	13.4 13.2
CsCl	15.55	12.77	18.43	12.5 12.91
CsBr	16.76	13.41	19.12	13.9 14.4
CsI	18.29	14.89	19.09	13.6 13.49
TlCl	16.66	4.308	17.30	19.7 21.2 18.9
TlBr	12.78	3.888	15.43	19.7 21.7 9.18
AgCl	1.303	0.162	2.537	13.5 6.4
AgBr	1.200	0.043	1.168	15.9 6.9

Tabla 7.21: $1/\epsilon_0 \cdot \partial^2 \epsilon_0 / \partial p^2 / (10^{-24} \text{ cm}^4 \text{ dyn}^{-2})$

Sal	1 ^{oa} Vec.(B.M.)	1 ^{oa} Vec.(V.S.m.)	2 ^{oa} Vec.	Exp.
LiF	105.8	68.79	108.5	86.6
LiCl	624.9	398.6	643.6	
LiBr	808.2	530.1	837.4	
NaF	157.6	118.7	161.2	120.8
NaCl	592.7	447.7	596.3	491.3
NaBr	792.1	603.5	796.5	812.6
NaI	1490	1097	1506	
KF	376.3	284.2	452.2	
KCl	977.0	763.1	970.1	691.2
KBr	1290	1009	1273	978.1
KI	2062	1596	2028	
RbF	534.1	399.3	744.1	
RbCl	1187	941.0	1180	
RbBr	1558	1239	1530	
RbI	2578	2098	2522	
CsCl	1292	1044	1538	
CsBr	1514	1200	1786	
CsI	2169	1761	2124	
TlCl	1739	840.9	1804	
TlBr	1275	707.3	1661	
AgCl	89.00	62.83	117.5	
AgBr	104.0	73.79	102.8	

Tabla 7.22: $1/\epsilon_0 \cdot \partial^3 \epsilon_0 / \partial p^3 / (10^{-33} \text{ cm}^6 \text{ dyn}^{-3})$

Sal	1 ^º Vec.(B.M.)	1 ^º Vec.(V.S.m.)	2 ^º Vec.	Exp.
LiF	3.307	1.979	3.404	1.61
LiCl	49.48	28.99	51.28	
LiBr	76.84	47.08	80.10	
NaF	6.528	4.728	6.689	2.63
NaCl	50.00	36.43	50.32	32.2
NaBr	77.58	57.11	78.01	85.6
NaI	205.5	145.6	207.8	
KF	24.53	17.81	30.05	
KCl	109.1	82.83	108.1	47.4
KBr	168.1	128.1	165.4	110
KI	348.7	263.1	342.0	
RbF	42.34	30.39	62.09	
RbCl	149.1	115.4	148.0	
RbBr	228.1	177.4	223.4	
RbI	483.8	385.3	471.7	
CsCl	160.6	125.3	192.2	
CsBr	199.9	152.4	248.5	
CsI	380.6	300.9	345.0	
TlCl	240.9	94.40	252.3	
TlBr	157.5	73.96	222.5	
AgCl	4.542	3.195	5.951	
AgBr	6.069	4.321	6.007	

Tabla 7.23: γ_t

Sal	1 ^{os} Vec.(B.M.)	1 ^{os} Vec.(V.S.m.)	2 ^{os} Vec.	Exp.
LiF	2.564	1.929	2.605	2.35 2.59
LiCl	2.981	2.251	3.031	
LiBr	2.764	2.114	2.822	
LiI	2.756	2.063	2.834	
NaF	2.291	1.892	2.340	2.08 3.0
NaCl	2.454	2.049	2.469	2.35 2.4
NaBr	2.430	2.038	2.447	2.37 3.0
NaI	2.592	2.146	2.618	
KF	2.433	2.025	2.781	
KCl	2.413	2.054	2.416	2.28 2.83
KBr	2.372	2.017	2.369	2.06 2.83
KI	2.420	2.051	2.415	2.20 3.1
RbF	2.600	2.165	3.205	
RbCl	2.447	2.106	2.460	2.16
RbBr	2.410	2.076	2.406	2.39
RbI	2.526	2.215	2.515	2.09 2.55
CsF	2.558	2.259	2.699	
CsCl	3.108	2.732	3.531	3.14 2.34
CsBr	2.973	2.583	3.287	2.74 2.15
CsI	2.957	2.607	3.085	2.42 1.90
TlCl	3.810	2.163	3.896	3.62 3.9
TlBr	3.404	2.215	3.715	4.30 3.8
AgCl	2.382	1.961	2.864	4.34
AgBr	2.490	2.087	2.485	4.41

La tabla 7.23 muestra valores de γ_t . En este caso se ve una mayor concordancia del potencial a segundos vecinos que en los casos anteriores, siendo las mejoras más significativas las de AgCl y TlBr.

Tabla 7.24: $\partial \ln s / \partial \ln V$ calculado a través del modelo de dipolos de deformación.

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	2 ^{os} Vec.
LiF	0.56	0.52	0.53	0.50	0.50	0.51	0.51	0.52
LiCl	0.73	0.70	0.70	0.68	0.67	0.68	0.69	0.70
LiBr	0.89	0.85	0.85	0.83	0.82	0.83	0.85	0.85
LiI	1.11	1.06	1.07	1.04	1.03	1.05	1.06	1.07
NaF	0.53	0.51	0.51	0.49	0.49	0.50	0.51	0.51
NaCl	0.83	0.80	0.80	0.78	0.77	0.78	0.80	0.80
NaBr	0.98	0.94	0.95	0.92	0.92	0.93	0.95	0.94
NaI	0.96	0.92	0.93	0.90	0.90	0.91	0.93	0.92
KF	0.27	0.26	0.26	0.25	0.25	0.26	0.26	0.26
KCl	0.67	0.64	0.65	0.63	0.63	0.63	0.65	0.64
KBr	0.83	0.80	0.80	0.78	0.78	0.79	0.81	0.80
KI	0.94	0.91	0.91	0.89	0.88	0.90	0.92	0.91
RbF	0.10	0.09	0.09	0.09	0.09	0.09	0.09	0.09
RbCl	0.61	0.59	0.59	0.58	0.57	0.58	0.60	0.59
RbBr	0.76	0.74	0.74	0.72	0.72	0.73	0.75	0.74
RbI	0.93	0.90	0.91	0.89	0.88	0.89	0.92	0.90
CsF	0.24	0.24	0.24	0.23	0.23	0.24	0.24	0.24
CsCl	0.58	0.57	0.57	0.56	0.56	0.57	0.59	0.58
CsBr	0.71	0.69	0.69	0.68	0.68	0.68	0.71	0.69
CsI	0.99	0.97	0.97	0.95	0.95	0.96	0.99	0.97
TlCl	0.46	0.45	0.45	0.44	0.44	0.44	0.45	0.45
TlBr	0.56	0.54	0.54	0.53	0.52	0.53	0.54	0.53
AgCl	1.45	1.41	1.41	1.38	1.37	1.39	1.43	1.42
AgBr	1.56	1.52	1.52	1.49	1.49	1.50	1.55	1.52

Las últimas dos tablas muestran valores calculados de $\partial \ln s / \partial \ln V$. La tabla 7.24 contiene valores obtenidos a partir del modelo de dipolos de deformación, ecuación (5.16). La tabla 7.25 muestra valores a partir del modelo de cargas de intercambio (cálculo CPS). Los valores con ambos modelos son muy parecidos, siendo en la mayoría de los casos ligeramente más chicos los valores con el modelo de cargas de intercambio. Llama la atención el caso de las sales de plata donde $\partial \ln s / \partial \ln V$ calculado es mayor que la unidad (también son mayores de uno algunos resultados de LiI). En todos los casos el valor calculado con el potencial a segundos vecinos es prácticamente igual al del potencial Born-Mayer.

Tabla 7.25: $\partial \ln s / \partial \ln V$ calculado a través del modelo de cargas de intercambio.

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	2 ^{os} Vec.
LiF	0.54	0.42	0.44	0.29	0.30	0.36	0.28	0.42
LiCl	0.74	0.60	0.62	0.44	0.43	0.52	0.47	0.60
LiBr	0.89	0.72	0.74	0.54	0.53	0.63	0.59	0.72
LiI	1.11	0.89	0.92	0.68	0.66	0.78	0.75	0.90
NaF	0.51	0.42	0.43	0.34	0.33	0.38	0.37	0.43
NaCl	0.82	0.69	0.71	0.56	0.55	0.62	0.64	0.69
NaBr	0.97	0.81	0.83	0.68	0.66	0.74	0.77	0.82
NaI	0.98	0.82	0.84	0.67	0.65	0.73	0.78	0.82
KF	0.27	0.22	0.23	0.19	0.18	0.20	0.21	0.24
KCl	0.66	0.56	0.58	0.48	0.47	0.52	0.56	0.56
KBr	0.81	0.70	0.71	0.60	0.58	0.64	0.70	0.70
KI	0.94	0.80	0.82	0.68	0.66	0.73	0.80	0.80
RbF	0.10	0.09	0.09	0.07	0.07	0.08	0.09	0.10
RbCl	0.60	0.52	0.53	0.45	0.44	0.48	0.53	0.52
RbBr	0.74	0.64	0.65	0.57	0.55	0.59	0.67	0.64
RbI	0.91	0.80	0.81	0.71	0.69	0.75	0.85	0.80
CsF	0.21	0.19	0.19	0.18	0.18	0.19	0.20	0.19
CsCl	0.58	0.57	0.57	0.56	0.56	0.57	0.59	0.54
CsBr	0.71	0.69	0.69	0.68	0.68	0.68	0.71	0.63
CsI	0.99	0.97	0.97	0.95	0.95	0.96	0.99	0.88
TlCl	0.46	0.45	0.45	0.44	0.44	0.44	0.45	0.34
TlBr	0.56	0.54	0.54	0.53	0.52	0.53	0.54	0.41
AgCl	1.45	1.41	1.41	1.38	1.37	1.39	1.43	1.26
AgBr	1.56	1.52	1.52	1.49	1.49	1.50	1.55	1.32

Capítulo 8

Conclusiones

En este trabajo se generalizó el modelo de Hardy para el cálculo de la variación de la carga efectiva con el volumen, de manera de poder utilizar distintas formas analíticas del potencial de corto alcance.

Con distintas formas del potencial repulsivo se calculó la energía de red y la derivada respecto de la presión de la inversa de la compresibilidad volumétrica isotérmica. Para esta última el efecto de la forma de potencial es importante; los resultados obtenidos son menores que los valores experimentales, siendo los más cercanos aquellos obtenidos con el potencial de Born-Landé, en acuerdo con lo obtenido previamente en estudios de propiedades elásticas en este grupo de investigación [113].

Se desarrolló el formalismo del modelo de cargas de intercambio para utilizarlo, como en el caso del modelo de Hardy, con distintas formas de potencial de solapamiento, para las estructuras de cloruro de sodio y cloruro de cesio.

Con este modelo, hemos estimado valores para propiedades anarmónicas de cristales. Se calcularon el parámetro de Grüneisen γ_t y las derivadas respecto del volumen y la presión de las constantes dieléctricas. Para la constante dieléctrica estática se calcularon las derivadas segunda y tercera. Se obtuvo también la variación de la carga efectiva con el volumen.

En general los cálculos muestran un comportamiento correcto en cuanto a las tendencias que se obtienen al cambiar de anión o de catión [144], como puede verse al comparar con valores experimentales de la derivada primera de la constante dieléctrica, y las derivadas segunda y tercera, en los casos en que éstas están disponibles. La comparación con el γ_t experimental [142] es en este sentido menos clara, pues los valores medidos de γ_t son de por sí más cercanos para las distintas sales, y hay una importante variación según la fuente de los datos experimentales, con lo cual no se puede establecer una tendencia clara en cuanto a aumento o disminución del γ_t experimental con el aumento o disminución del tamaño del catión y del anión.

Se mostró la importancia de la forma de potencial de corto alcance en los resultados de $\partial B_t/\partial p$, de γ_t y de las derivadas de ϵ_0 respecto de la presión. Se vió que en general, salvo para $\partial B_t/\partial p$ los potenciales más adecuados son el de Varshni-Shukla modificado y el de Born-Mayer.

En cambio, esta no es la situación en el cálculo de $\partial \ln s/\partial \ln V$ ya que esta magnitud en el modelo de Hardy depende de las derivadas del potencial hasta la segunda.

Se estudió la importancia de la parametrización en los resultados obtenidos. Como se mostró en el capítulo 7 las magnitudes que involucran al potencial de repulsión son muy sensibles a las variaciones en r_0 y χ_t . Por ejemplo, en el cálculo de las derivadas primera, segunda y tercera de ϵ_0 respecto de la presión, vemos que la variación de los datos de entrada produce una dispersión de los resultados mayor que el 0.2, 2 y 20% que es el error experimental estimado para esas magnitudes.

Por otro lado, los cálculos en los que se utilizó la aproximación de Hildebrand en la parametrización, indican que la corrección es menor que la diferencia en los resultados que puede producir una variación en r_0 o en χ_t , o en los parámetros del modelo n y k . Además, no siempre el utilizar la aproximación de Hildebrand parece variar los resultados en el sentido correcto (hay una clara mejora en $\partial B_t/\partial p$); debemos tener en cuenta que los datos experimentales de las derivadas de χ_t no son muy confiables.

En cuanto a los parámetros n y k , se utilizó el conjunto que se obtiene a través de datos de dispersión electrónica de átomos de gases nobles y polarizabilidades de iones libres. Éste fue obtenido para haluros alcalinos por Dick y Overhauser y luego con algunas correcciones utilizado por varios autores [145, 146]. Para haluros de talio y plata no se encontró ningún conjunto de parámetros consistente con el esquema anterior, por lo cual se adoptó un procedimiento basado en el utilizado por Shanker y Gupta [147] para obtener parámetros para el modelo de cargas de intercambio en el estudio del comportamiento diéctrico de óxidos de manganeso, níquel y cobalto. El método no es muy riguroso y permite entonces sólo una estimación plausible para iones formados por metales de transición y que se apartan de las hipótesis (ya aproximadas) tomadas sobre iones con la configuración de gas noble. Esto podría explicar los pobres resultados obtenidos para los haluros de plata, donde el acuerdo es mucho menor que para los haluros alcalinos.

Un aspecto de interés que surge de este estudio, es que es posible obtener resultados aceptables utilizando un conjunto de parámetros del modelo de capas propios de cada ion, algo parecido a lo que ocurre en el potencial repulsivo extendido a segundos vecinos, donde se utilizan los radios r_+ y r_- propios de cada especie.

Esto hace atractivo al método, pues reduce el número total de parámetros para estudiar un conjunto de sales que tienen iones en común.

Todo lo anterior indica que no sólo es importante el modelo elegido (incluyendo la forma de potencial) sino también cómo está parametrizado.

Por otra parte, vale la pena insistir sobre la importancia de contar con datos experimentales a temperaturas cercanas a 0 K y conocer la precisión con que han sido obtenidos para hacer una correcta comparación. Los modelos utilizados en este trabajo suponen no contribución de efectos térmicos, y son entonces, dentro de sus aproximaciones, válidos estrictamente a bajas temperaturas; pero los valores de las magnitudes calculadas están en la mayoría de los casos medidas a temperatura ambiente.

El aporte computacional de este trabajo se ha manifestado a través del desarrollo de programas tales como los descritos en el capítulo 6. Tanto los programas desarrollados como los modificados y adaptados son portables a sistemas mayores de cómputos sin requerir modificaciones ulteriores. Este aspecto es importante para un estudio posterior de cristales

más complejos.

Este trabajo muestra la factibilidad del uso del modelo de cargas de intercambio para el estudio de propiedades dieléctricas y ópticas a altas presiones de cristales iónicos. Los resultados son mejores que los obtenidos con otros modelos sencillos, pero todos ellos son muy sensibles a las parametrizaciones utilizadas, juntamente con la forma de potencial de interacción elegida, cosa que debe ser tenida en cuenta cuando desee aplicarse a cristales más complejos.

En el futuro se espera que modelos más sofisticados sean aplicados a estudios a altas presiones, pero simultáneamente será necesario contar con mayor cantidad de mediciones experimentales y más precisas, particularmente respecto de las propiedades ópticas.



Lic. Ricardo Mario Fracchia



Dra. Alicia Batana
Directora de Tesis

Apéndice a

Aspectos experimentales relacionados

En esta sección describiremos someramente algunas técnicas experimentales involucradas en la determinación de aquellas propiedades cristalinas que se utilizan en las expresiones detalladas en secciones anteriores. Por lo tanto, resultan de interés las técnicas vinculadas a la determinación de propiedades dieléctricas, ópticas y elásticas de cristales a altas presiones y bajas temperaturas, de acuerdo a los requerimientos teóricos de los modelos empleados.

Propiedades ópticas

- *Experimentos de dispersión de neutrones:* La relación frecuencia-vector de onda $\omega(\mathbf{q})$ para las vibraciones normales de un sólido cristalino es de gran importancia en las teorías que consideran fuerzas interatómicas. Muchas propiedades de los sólidos dependen directamente de las fuerzas interatómicas y se pueden calcular a partir de la función $\omega(\mathbf{q})$. Por espectroscopía de rayos X o mediciones de velocidad de propagación de sonido se puede obtener información de $\omega(\mathbf{q})$ en ciertas regiones del espectro de frecuencias. Sin embargo, con experimentos de dispersión de neutrones se puede obtener $\omega(\mathbf{q})$ para todo el espectro vibracional.

Las propiedades de dispersión de los neutrones lentos son principalmente las de una onda plana; su comportamiento corpuscular se manifiesta raramente. Las energías de los neutrones se pueden medir o bien determinando sus longitudes de onda, para lo cual se miden los ángulos de reflexión de Bragg, o bien determinando sus velocidades, para lo cual se determina el tiempo que tardan en recorrer una distancia conocida (experiencias de tiempo de vuelo).

Se han diseñado métodos basados en los dos principios. Para el estudio de fonones, el espectrómetro de triple eje (que emplea reflexión de Bragg) ha mostrado ser más adecuado que los instrumentos de tiempo de vuelo. En estos experimentos de dispersión, los neutrones incidentes de vector de onda \mathbf{k}_0 (y energía E_0) son difractados un ángulo φ de manera tal que su vector de onda final es \mathbf{k}' (y energía E'). La energía final puede, o no, ser igual a la inicial, lo que da lugar a experimentos elásticos e inelásticos, respectivamente. Todas las propiedades de dispersión se pueden calcular

en términos del vector de transferencia de momento $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'$, y de la transferencia de energía $\hbar\omega = E_0 - E'$.

Los experimentos utilizan neutrones de un reactor y dependen, por lo tanto, del espectro emitido por el mismo. Los neutrones útiles para los experimentos tienen energía entre 3 y 150 MeV, con un máximo en ~ 30 MeV. Las correspondientes longitudes de onda están entre 5 y 0.7 \AA con un máximo alrededor de 1.7 \AA . De esta forma, los neutrones térmicos tienen simultáneamente energías del orden característico a las energías en sólidos y líquidos y longitudes de onda del orden de las distancias interatómicas. Estas son las razones que hacen a la espectroscopía por neutrones una herramienta poderosa.

Las principales dificultades experimentales estriban en que aún los reactores de investigación más poderosos son fuentes pobres de neutrones, considerados como cuantos, si los comparamos con una lámpara o un tubo de rayos X; los neutrones lentos son relativamente penetrantes por lo que las muestras no deben ser demasiado finas; los neutrones rápidos son excesivamente penetrantes y los detectores de neutrones lentos son también sensibles a los neutrones rápidos, de manera tal que los experimentos suelen presentar un apantallamiento apreciable de neutrones rápidos.

- *Espectroscopía Raman de primer y segundo orden:* Esta es otra técnica utilizada comúnmente en la determinación de frecuencias de modos normales, la cual, gracias al desarrollo de dispositivos tales como la celda de yunque de diamante[148] y el manómetro de fluorescencia de rubí[149], han hecho posible obtener mediciones de dispersión de luz bajo muy alta presión[150], lo cual permite la obtención de parámetros de Grüneisen para distintos modos de vibración, tanto ópticos como acústicos.

En aquellos casos en los cuales las mediciones del espectro Raman no son posibles dentro de la celda de alta presión utilizando láseres de luz visible o en el infrarrojo cercano, debido a su alto coeficiente de absorción a presiones bajas, dichas mediciones puede ser factibles a presiones más altas, donde la muestra se vuelve transparente al láser de excitación (transiciones indirectas o prohibidas). Por lo tanto, se hace posible la investigación de la dependencia con la presión del espectro de fonones midiendo a presión cero fuera de la celda y a altas presiones dentro de la misma. Pueden obtenerse entonces los parámetros de Grüneisen de los fonones ópticos transversal (TO) y longitudinal (LO) en el punto Γ (espectro de primer orden) y los parámetros correspondientes a un cierto número de fonones ópticos y acústicos, a partir de asignaciones adecuadas en el espectro de segundo orden[151].

En equipos y celdas de alta presión modernos, pueden obtenerse presiones hidrostáticas estables de alrededor de 100 Kbar. La intensidad de radiación de fondo se ha disminuido a niveles tolerables. Si bien en las cercanías de la frecuencia de excitación del láser aparece una cola Rayleigh intensa debida a la dispersión espúrea de componentes de la celda en las vecindades de la muestra, dicha cola puede suprimirse mediante el uso de un monocromador triple[150]. En general se emplean láseres de Kr^+ o de He-Ne. La técnica requiere muestras pequeñas; las dimensiones habituales

son de alrededor de $100\ \mu\text{m}$ en diámetro y $30\text{--}60\ \mu\text{m}$ de espesor, obtenidas a partir de monocristales; no se requiere conocer la orientación de las mismas, aunque de esta forma se impide la investigación de espectros Raman polarizados a altas presiones.

Propiedades elásticas

- *Métodos de difracción de rayos X:* en estos métodos la variación de distancia Δd entre planos debida a una variación ΔT en la temperatura viene dada por $\Delta d/d = -\Delta\theta \cot\theta$, con θ el ángulo de difracción. Independientemente del uso de alguna técnica de rayos X particular (Debye-Scherrer, cámara rotante, cristal rotante, método de Laue, etc.) todos los dilatómetros interferométricos deben modificar sus dispositivos de alojamiento de muestras para poder permitir la variación de la temperatura, además de su medición. Se han medido variaciones con una precisión de 0.00003% [152].

Como ventajas principales mencionemos que estos métodos miden el coeficiente de expansión térmica en forma absoluta, a diferencia de otros que utilizan materiales de referencia a la temperatura del espécimen; sólo se requieren pequeñas cantidades de muestra y no necesariamente un monocristal; una determinación sola brinda información sobre el coeficiente de expansión térmica a lo largo de varias direcciones (diferentes si se trata de un cristal anisotrópico).

- *Métodos de palanca óptica:* Estos métodos se basan en fijar en un termostato una muestra con forma de varilla, de manera tal de transmitir su elongación a través de una segunda varilla con coeficiente de dilatación bajo a un conjunto mecánico que causa la rotación de un espejo. Finalmente, la luz reflejada por el espejo se observa con ayuda de instrumentos ópticos. Actualmente el límite de detección en estos dilatómetros es de $\sim 0.03\text{\AA}$ para especímenes de $10\ \text{cm}$ de longitud.
- *Técnicas con capacitores de dos terminales:* En estos dilatómetros capacitivos, la dilatación de la muestra altera la distancia entre las placas de un condensador produciendo variaciones en su capacidad.

Este condensador, en serie con un capacitor de referencia, forma parte de un circuito oscilante de radiofrecuencias. Así, los cambios en la frecuencia de resonancia de este oscilador pueden ser detectados y compensados alterando la capacitancia del condensador de referencia. La capacidad δC necesaria para compensar al circuito es una medida directa de la expansión o contracción de la muestra.

En este tipo de experimentos la muestra debe tener simetría cilíndrica, con una longitud de $\approx 2\ \text{cm}$. El límite de detección es de $\Delta l/l \approx 4 \cdot 10^{-7}$.

- *Técnicas con capacitores de tres terminales:* El método consiste en una comparación precisa de condensadores pequeños a temperaturas diferentes, mediante un puente de corriente alterna. Detalles sobre su construcción y utilización pueden encontrarse en un libro de Krishman y colaboradores[153].

Como ventajas de este método podemos señalar que tiene una sensibilidad de al menos 0.05 \AA a temperaturas de helio líquido, lo que resulta en mediciones de α con un error de sólo $\sim 10^{-10} \text{ K}^{-1}$. Utilizando celdas capacitivas diferentes se pueden realizar mediciones absolutas o relativas. La reproducibilidad de los resultados muestra que los errores presentes en las mediciones son sistemáticos.

Entre las desventajas mencionemos que se requieren muestras grandes ($\approx 2 \text{ cm}$ de longitud) y talladas con mucha precisión. La sensibilidad de la técnica disminuye con el aumento de la temperatura. Los diseños de las celdas de expansión hacen que su fabricación sea difícil.

- *Método del transformador diferencial:* En un dilatómetro de conductancia eléctrica, la expansión axial de una muestra se transmite al núcleo de una autoinductancia. La inductancia varía linealmente con el desplazamiento.

Entre las ventajas del método podemos mencionar que son posibles las mediciones a temperaturas por debajo de la del helio líquido. Es un método absoluto, ya que no se requieren materiales de referencia.

El método tiene como desventajas que se requieren muestras de gran tamaño; es muy difícil realizar mediciones con materiales levemente magnéticos o superconductores; pequeñas cantidades de hierro cerca del transformador variable pueden causar serias dificultades y por último el diseño de la celda de expansión hace que su montaje requiera mucha pericia por parte del operador.

- *Técnicas con interferómetros ópticos:* Éstas son las más utilizadas. El método se basa en la conversión de la variación de la longitud de la muestra en variaciones de la diferencia de camino óptico de rayos de luz monocromática, de manera tal de producir corrimientos en el patrón resultante. Existen varios métodos interferométricos diferentes.

En los dilatómetros interferométricos de Fabry-Perot la interferencia que ocurre entre los platos permite detectar desplazamientos de $\sim 10^{-7} \text{ cm}$. Con un sistema de rayos múltiples y usando un láser estabilizado se puede incrementar la precisión del método a $\Delta l/l \approx 10^{-9}$. En estos casos la precisión está limitada por la estabilidad del láser y la deformación de los platos terminales.

El método ideado por Fizeau y mejorado posteriormente por varios investigadores constituye otro de los métodos más precisos para determinar la expansión térmica tanto a altas como a bajas temperaturas. En él, tres cristales piramidales de la muestra se colocan entre dos platos de cuarzo (de calidad óptica) formando un triángulo equilátero. Cuando un haz monocromático paralelo pasa a través de la ranura entre los platos (3 mm de altura) se produce un patrón de interferencias. Una variación en la temperatura producirá un desplazamiento en las líneas de interferencia a partir del cual puede calcularse el coeficiente de expansión térmica. El error en dicho coeficiente varía entre $10^{-8} - 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ gracias al empleo de láseres de He-Ne.

El método tiene muchos aspectos interesantes, entre los que podemos mencionar que es posible trabajar con muestras pequeñas (5 mm o menos); el tamaño pequeño de las muestras permite uniformar a la temperatura rápidamente; las muestras pueden tener formas irregulares; el aparato no tiene partes móviles y su construcción es relativamente simple; se pueden estudiar materiales anisotrópicos; se pueden realizar mediciones absolutas de α .

Los métodos utilizados para determinar las constantes elásticas de sólidos se pueden clasificar en tres categorías principales:

- *Métodos estáticos:* Estos métodos se basan en la aplicación de una tensión conocida a la muestra y medir su deformación. Bridgman[154] y Slater[155] midieron las compresibilidades lineales y de volumen de gran cantidad de sustancias con una precisión mejor que el 1% y rangos amplios de presión y temperatura. Midiendo simultáneamente la extensión lineal y la contracción transversal se pueden determinar el módulo de Young (definido como el cociente entre la tensión y la deformación de elongación que ésta produce) y la relación de Poisson σ (definida como el cociente entre los cambios de dimensión transversal y longitudinal a la tensión aplicada).
- *Métodos de resonancia dinámica:* Estos experimentos, que se realizan isotérmicamente, se basan en la determinación de las constantes elásticas (isotérmicas) a partir de sus frecuencias de resonancia mecánica. Los tipos de vibración pueden ser longitudinal (o extensional), flexional (o transversal) o torsional. Los dos primeros dan información respecto del módulo de Young y el último respecto del módulo de corte.

La solución exacta de las ecuaciones diferenciales de movimiento para sólidos tridimensionales es extremadamente difícil, y desde el punto de vista práctico se prefiere usar una geometría tal que las condiciones de contorno permitan una solución razonablemente exacta. Por esta razón se utilizan fundamentalmente muestras de forma rectangular, cilíndrica o esférica.

Los métodos dinámicos tienen como ventaja sobre los estáticos que las tensiones aplicadas son lo suficientemente pequeñas como para asegurar que no existen procesos inelásticos. En estas circunstancias las suposiciones que se realizan en el tratamiento teórico son muy bien satisfechas. La aplicación de estos métodos está limitada fuertemente por el tamaño de la muestra; cuando su longitud es menor que unos 10 cm, la frecuencia de resonancia fundamental torsional suele ser del orden de 40 kHz, lo que dificulta apreciablemente su determinación experimental. Por esta razón estos métodos son más frecuentemente aplicados a muestras policristalinas.

- *Métodos basados en la determinación de la velocidad de propagación de ondas ultrasónicas:* Como la longitud de onda de la onda sonora es mucho mayor que el espaciado interatómico, éstas "ven" al sólido como si fuera un medio continuo. De acuerdo con la teoría de elasticidad de un sólido continuo, la velocidad de propagación en una

dirección Ω ($v(\Omega)$) está relacionada con la constante elástica asociada a esta dirección ($C(\Omega)$) a través de:

$$\rho v^2(\Omega) = C(\Omega) \quad (9.1)$$

donde ρ es la densidad del sólido. Por ejemplo, para un sólido con simetría cúbica, las componentes longitudinales y transversales en las direcciones de máxima simetría resultan en las siguientes relaciones:

Dirección	
[100]	$\rho v_l^2 = C_{11}$ $\rho v_t^2 = C_{44}$
[110]	$\rho v_l^2 = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})$ $\rho v_t^2 = C_{44}$ $\rho v_i^2 = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$
[111]	$\rho v_l^2 = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})$ $\rho v_i^2 = \frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44})$

La relación (9.1) representa las constantes elásticas termodinámicas a presión nula [156]. Sin embargo, en los trabajos experimentales se utiliza esta fórmula para calcular las constantes elásticas para $P \neq 0$, calculándose entonces lo que se conoce como constantes elásticas *efectivas*.

En los experimentos acústicos, el tiempo de tránsito entre la parte compresional y la parte extensional de la onda sonora es muy rápido respecto de la velocidad de flujo de calor; no hay transferencia de energía entre la región de la muestra que sufre el trabajo de expansión-compresión y sus alrededores, con lo que estas técnicas se determinan las constantes elásticas *adiabáticas*.

Desde un punto de vista experimental, la velocidad de propagación se puede determinar conociendo la longitud de la muestra y el tiempo que un pulso sonoro tarda en atravesarla. Esto último constituye la dificultad principal ya que los tiempos involucrados son muy cortos. Por ejemplo, para un cerámico típico $v \approx 9\text{km/s}$; para una longitud típica de unos 5 cm, el tiempo que una onda plana tardará en recorrer la muestra es de alrededor de $5\mu\text{s}$. Para lograr una precisión del 1% se requeriría una resolución de al menos $5 \cdot 10^{-9}\text{s}$. La capacidad de medir el tiempo de decaimiento de estas señales ha estado, por lo tanto, sujeta a la mejora de los componentes electrónicos y al diseño de los circuitos. La señal electrónica es interconvertida en pulsos ultrasónicos por medio de transductores, usualmente de cuarzo.

Además, para los experimentos a distintas presiones, de manera de poder obtener la variación con la presión de las constantes elásticas, debemos sumar las imprecisiones

introducidas en la medición de dicha magnitud. Ejemplos detallados de diversos dispositivos de alta presión pueden obtenerse de los trabajos de Ruoff y colaboradores[157] y de Morse y Lawson[158].

Propiedades dieléctricas

Las técnicas capacitivas descritas anteriormente (pág. 110) son empleadas en la determinación de constantes dieléctricas estáticas. La variación de las mismas con la presión puede investigarse adaptando al equipo correspondiente un aparato hidrostático que utiliza una mezcla al 50% de isopentano y n-pentano (detalles del aparato y de los procedimientos experimentales incluyendo la calibración de la presión pueden obtenerse en las referencias [159] y [108]).

Las dimensiones de las muestras son de aproximadamente 0.5–1.0 mm de espesor y un área de 0.70–1.50 cm². Éstas se obtienen de monocristales orientados de manera tal que la menor dimensión coincida con uno de los ejes del cubo. Dichos cristales deben tener niveles de impurezas menores a unas pocas partes por millón, ya que aún a estas concentraciones podrían observarse efectos importantes en la determinación de la constante dieléctrica a bajas temperaturas[108].

Si bien la medición de la presión tiene una indeterminación menor al 1%, a partir de las mediciones de capacitancia C de las muestras la variación con la presión de la constante dieléctrica estática puede determinarse con un error cercano al 15%, ya que es necesario introducir correcciones por cambios en las dimensiones del espécimen debidos a su compresión:

$$\left(\frac{\partial \ln \epsilon_0}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{C_0} \left(\frac{\partial C}{\partial p}\right)_T - \frac{1}{3V_0} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$$

donde ϵ_0 , C_0 y V_0 son los valores de constante dieléctrica, capacitancia y volumen a presión atmosférica y temperatura ambiente.

Esta expresión nos muestra la dificultad de obtener medidas a muy bajas temperaturas, ya que esta derivada no se mide en forma directa involucrando entonces una serie de mediciones adicionales de otras propiedades en dicho ámbito de temperaturas y altas presiones, combinación que en la práctica es muy difícil lograr.

Las constantes dieléctricas a altas frecuencias (ϵ_∞) se obtienen midiendo la dependencia del índice de refracción con la longitud de onda en el espectro visible utilizando métodos convencionales de desviación mínima para prismas con ángulos grandes. Estos prismas se cortan de monocristales de la muestra. Los ángulos de desviación se miden con espectrómetros de laboratorio estándar montados sobre una mesa giratoria. Para mediciones a bajas temperaturas, el prisma puede montarse en un criostato con circulación de helio líquido. En general se realizan mediciones a unas diez longitudes de onda utilizando líneas de emisión de lámparas de cadmio, mercurio y sodio.

Apéndice b

Datos experimentales

Tabla 10.1: Valores experimentales de la distancia interiónica.

Sal	$r_o / 10^{-8}$ cm
LiF	1.996(LT) [178] 2.0026(LT) 2.0132 [125]
LiCl	2.539(LT) [178] 2.5462(LT) 2.5698 [125]
LiBr	2.713(LT) [178] 2.7216(LT) 2.7498 [125]
LiI	2.951(LT) [178] 2.9610(LT) 3.0003 [125]
NaF	2.295(LT) [178] 2.3040(LT) 2.3173 [125]
NaCl	2.789(LT) [178] 2.7978(LT) 2.8203 [125]
NaBr	2.954(LT) [178] 2.9601(LT) 2.9871 [125]
NaI	3.194(LT) [178] 3.2044(LT) 3.2372 [125]
KF	2.648(LT) [178] 2.6522(LT) 2.6735 [125]
KCl	3.116(LT) [178] 3.1223(LT) 3.1467 [125]
KBr	3.262(LT) [178] 3.2711(LT) 3.2999 [125]
KI	3.489(LT) [178] 3.4998(LT) 3.5331 [125]
RbF	2.789(LT) [178] 2.7959(LT) 2.8203 [125]
RbCl	3.259(LT) [178] 3.2727(LT) 3.2986 [125]
RbBr	3.410(LT) [178] 3.4195(LT) 3.4482 [125]
RbI	3.628(LT) [178] 3.6361(LT) 3.6711 [125]
CsF	2.9827(LT) 3.0400 [125] 3.004 [2]
CsCl	3.5150(LT) [164] 3.559 [165] 3.571 [2]
CsBr	3.6645(LT) [164] 3.712 [165] 3.720 [2]
CsI	3.9018(LT) [164] 3.861 [165] 3.956 [2]
TlCl	3.31 [64] 3.329 [91] 3.327 [166] 3.325 [165]
TlBr	3.44 [64] 3.438 [91] 3.4088(LT) 3.4519 [158] 3.438 [166] 3.438 [165]
AgCl	2.78 [167] 2.772 [169] 2.7662(LT) 2.7747 [170]
AgBr	2.89 [167] 2.8773(LT) 2.8874 [170]

Tabla 10.2: Valores experimentales de la compresibilidad.

Sal	χ_T / $10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ dyn}^{-1}$	B_t / $10^{12} \text{ dyn.cm}^{-2}$
LiF	1.49 [2] 1.43(LT) 1.54 [160] 1.5038	0.674 [92] 0.6651 [143] 0.6980 [178]
LiCl	3.36 [2] 3.20(LT) 3.41 [160] 3.3670	0.301 [92] 0.2968 [143] 0.3538 [178]
LiBr	4.20 [2] 4.2553	0.238 [92] 0.2352 [143] 0.2634 [178]
LiI	5.7803	0.175 [92] 0.1726 [143] 0.1739 [178]
NaF	2.15 [2] 1.99(LT) 2.11 [160] 2.1505	0.471 [92] 0.4648 [143] 0.5143 [178]
NaCl	4.17 [2] 3.98(LT) 4.26 [160] 4.2194	0.240 [92] 0.2368 [143] 0.2660 [178]
NaBr	5.02 [2] 4.70(LT) 5.03 [160] 5.1282	0.197 [92] 0.1947 [143] 0.2257 [178]
NaI	6.64 [2] 6.45(LT) 7.07 [160] 6.7114	0.151 [92] 0.1487 [143] 0.1786 [178]
KF	3.28 [2] 3.10(LT) 3.30 [160] 3.31126	0.306 [92] 0.3022 [143] 0.3423 [178]
KCl	5.73 [2] 5.26(LT) 5.63 [160] 5.74713	0.176 [92] 0.1735 [143] 0.1971 [178]
KBr	6.75 [2] 6.17(LT) 6.70 [160] 6.84932	0.148 [92] 0.1464 [143] 0.1763 [178]
KI	8.55 [2] 7.75(LT) 8.54 [160] 8.69565	0.117 [92] 0.1151 [143] 0.1273 [178]
RbF	3.74532 3.81 [2]	0.270 [92] 0.2668 [143] 0.3012 [178]
RbCl	6.41026 6.40 [2]	0.158 [92] 0.1558 [143] 0.1865 [178]
RbBr	7.57576 7.69 [2]	0.134 [92] 0.1324 [143] 0.1604 [178]
RbI	9.52381 9.48 [2]	0.106 [92] 0.1049 [143] 0.1310 [178]
CsF	4.25532 4.25 [2]	0.235 [92]
CsCl	5.46448 5.55 [2] 4.5387(LT) 5.4745 [161]	0.162 [92]
CsBr	6.41026 6.28 [2] 5.4476(LT) 6.4212 [161]	0.142 [92]
CsI	8.00000 7.83 [2] 6.9396(LT) 7.9979 [161]	0.114 [92]
TlCl	3.9 [166]	0.236 [90]
TlBr	4.4 [166] 3.887(LT) 4.950 [158]	0.225 [90]
AgCl		0.440 [168] 0.4590(LT) 0.4174 [170]
AgBr		0.410 [90] 0.406 [168] 0.4195(LT) 0.3770 [170]

Tabla 10.3: Valores experimentales de ϵ_0 y ϵ_∞ .

Sal	ϵ_0	ϵ_∞	ϵ_0	ϵ_∞	Referencias
	Temperatura ambiente		Bajas temperaturas		
LiF	9.032	1.93	8.50	1.93	[125]
LiCl	11.989	2.75	10.83	2.79	[125]
LiBr	13.295	3.16	11.95	3.22	[125]
LiI	16.904	3.80	15.28	3.89	[125]
NaF	5.094	1.74	4.73	1.75	[125]
NaCl	5.9165	2.33	5.43	2.35	[125]
NaBr	6.298	2.60	5.78	2.64	[125]
NaI	7.304	3.01	6.62	3.08	[125]
KF	5.514	1.85	5.11	1.86	[125]
KCl	4.853	2.17	4.49	2.20	[125]
KBr	4.914	2.36	4.52	2.39	[125]
KI	5.115	2.65	4.66	2.68	[125]
RbF	6.497	1.93	5.99	1.94	[125]
RbCl	4.934	2.18	4.53	2.20	[125]
RbBr	4.884	2.34	4.51	2.36	[125]
RbI	4.955	2.58	4.55	2.61	[125]
CsF	8.108	2.16	7.27	2.17	[125]
CsCl	7.000	2.62	6.68	2.67	[125]
CsBr	6.680	2.78	6.38	2.83	[125]
CsI	6.600	2.96	6.29	3.09	[125]
TlCl	32.60	4.76	37.6	5.00	[108]
TlBr	29.80	5.41	32.5	5.86	[108]
AgCl	11.14	3.92	9.50	3.97	[108]
AgBr	12.44	4.62	10.60	4.68	[108]

Tabla 10.4: Valores experimentales de la derivada primera respecto de V de ϵ_0 .

Sal	$V \cdot \partial\epsilon_0/\partial V$			
LiF	29.4 [176]	23.0 [177]	30.4 [182]	30.0 [116]
LiCl		30.4 [181]	53.4 [182]	
LiBr		40.4 [181]		
NaF	12.0 [176]	12.5 [177]	12.2 [182]	12.7 [116]
NaCl	14.3 [176]	13.0 [177]	12.5 [182]	14.5 [116]
NaBr	15.5 [176]	14.9 [177]	16.0 [182]	15.9 [116]
NaI		16.6 [177]	12.4 [182]	
KF		12.8 [177]	11.3 [182]	
KCl	8.93 [176]	8.45 [177]	8.89 [182]	9.11 [116]
KBr	8.60 [176]	8.35 [177]	8.21 [182]	8.92 [116]
KI	8.93 [176]	8.16 [177]	6.58 [182]	
RbF		14.5 [177]		
RbCl	8.73 [176]	7.79 [177]	8.22 [182]	
RbBr	7.96 [176]	7.46 [177]	7.37 [182]	
RbI		6.94 [177]	6.39 [182]	
CsCl		15.8 [177]		
CsBr		14.7 [177]		
CsI		11.4 [177]		

Tabla 10.5: Valores experimentales de la derivada primera respecto de p de ϵ_0 .

Sal	$-1/\epsilon_0 \cdot \partial\epsilon_0/\partial p/10^{-12} \text{ cm}^2\text{dyn}^{-1}$
LiF	3.82 [177] 5.18 [182] 5.085 [116] 4.87 [176]
LiCl	8.02 8.62 [177] 15.1 [182]
LiBr	13.0 [177] 12.8
NaF	5.37 [177] 5.06 [176] 5.398 [116]
NaCl	9.25 [177] 8.84 [182] 10.388 [116] 9.475 [163]
NaBr	11.9 [177] 12.8 [182] 12.704 [116]
NaI	15.1 [177] 11.3 [182]
KF	7.63 [177] 6.76 [182]
KCl	10.2 [177] 11.006 [116] 10.55 [163] 10.57 [176]
KBr	11.6 [177] 11.84 [176] 12.488 [116] 11.3 [182]
KI	13.8 [177] 12.6 [176] 11.1 [182]
RbF	8.47 [177]
RbCl	10.2 [177] 10.7 [182] 9.61 [163] 11.32 [176]
RbBr	11.7 [177] 12.6 [176] 14.5 [182]
RbI	13.4 [177] 13.2 [176] 12.4 [182]
CsCl	12.5 12.91 [162]
CsBr	13.9 13.4 [162]
CsI	13.6 13.49 [162]
TlCl	19.7 21.2 \pm 1.1 (105K) 15.9 \pm 0.8 (293K) [183] 18.9
TlBr	19.7 [177] 21.7 \pm 1.1 (77K) 18.0 \pm 0.9 (290K) [183] 9.18
AgCl	13.5 \pm 0.5 [171] 6.4 \pm 0.3 (80K) 10.6 \pm 0.5 (255K) [183]
AgBr	15.9 \pm 0.5 [171] 6.9 \pm 0.3 (80K) 14.9 \pm 0.7 (255K) [183]

Tabla 10.6: Valores experimentales de las derivadas de orden superior de ϵ_0 .

Sal	$V^2 \cdot \partial^2\epsilon_0/\partial V^2$	$V^3 \cdot \partial^3\epsilon_0/\partial V^3$	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^2\epsilon_0/\partial p^2$ / $10^{-24} \text{ cm}^4\text{dyn}^{-2}$	$1/\epsilon_0 \cdot \partial^3\epsilon_0/\partial p^3$ / $10^{-36} \text{ cm}^6\text{dyn}^{-3}$	Referencias
LiF	157	-608	86.6	-1.61	[116]
NaF	50	-597	120.8	-2.63	[116]
NaCl	67	37	491.3	-32.2	[116]
NaBr	99	1081	812.6	-85.6	[116]
KCl	40	-296	691.2	-47.4	[116]
KBr	44	129	978.1	-110	[116]

Tabla 10.7: Valores experimentales de la derivada primera respecto de V de ϵ_{∞} .

Sal	$-V \cdot \partial\epsilon_{\infty}/\partial V$
LiF	0.366 [172] 0.40 [173]
LiCl	0.573 [174]
LiBr	0.653 [174]
LiI	0.828 [174]
NaF	0.488 [174] 0.33 [173]
NaCl	0.74 [172] 0.85 [173] 0.846 [174]
NaBr	0.99 [173] 0.986 [174]
NaI	1.280 [174]
KF	0.509 [174]
KCl	0.68 [172] 0.84 [173] 0.930 [174]
KBr	1.08 [172] 1.01 [173] 1.098 [174]
KI	1.40 [172] 1.28 [173] 1.443 [174]
RbF	0.565 [174]
RbCl	1.031 [174] 1.01 [175] 1.05 [173]
RbBr	1.215 [174] 1.24 [175]
RbI	1.432 [174] 1.41 [175]

Tabla 10.8: Valores experimentales de la frecuencia de vibración en el infrarrojo ω_t .

Sal	Temp. ambiente		Bajas temp.		Ref.
	/ $10^{13}s^{-1}$	/ cm^{-1}	/ $10^{13}s^{-1}$	/ cm^{-1}	
LiF	5.745	305	5.990	318	[108]
LiCl	3.823	203	4.163	221	[108]
LiBr	3.259	173	3.522	187	[108]
LiI	2.675	142	2.854	151.5	[108]
NaF	4.643	246.5	4.935	262	[108]
NaCl	3.089	164	3.353	178	[108]
NaBr	2.524	134	2.750	146	[108]
NaI	2.185	116	2.336	124	[108]
KF	3.654	194	3.796	201.5	[108]
KCl	2.675	142	2.844	151	[108]
KBr	2.147	114	2.317	123	[108]
KI	1.921	102	2.063	109.5	[108]
RbF	2.976	158	3.070	163	[108]
RbCl	2.194	116.5	2.373	126	[108]
RbBr	1.648	87.5	1.780	94.5	[108]
RbI	1.422	75.5	1.535	81.5	[108]
CsF	2.392	127	2.524	134	[108]
CsCl	1.874	99.5	2.006	106.5	[108]
CsBr	1.384	73.5	1.479	78.5	[108]
CsI	1.168	62.0	1.234	65.5	[108]
TlCl	1.187	63.0	1.138	60.4	[108]
TlBr	0.902	47.9	0.889	47.2	[108]
AgCl	1.987	105.5	2.260	120	[108]
AgBr	1.497	79.5	1.724	91.5	[108]

Tabla 10.9: Valores experimentales de W_L y $\partial B_t/\partial p$.

Sal	$W_L/ \text{kcal mol}^{-1}$	$\partial B_t/\partial p$
LiF	246.7 [63] 246.8 242.3 [105] 246.0 [75]	5.30 [143]
LiCl	203.2 [63] 201.8 198.9 [105] 201.5 [75]	5.63 [143]
LiBr	194.2 [63] 189.8 [105] 191.5 [75]	5.68 [143]
LiI	180.3 [63] 177.7 [105] 180.0 [75]	6.15 [143]
NaF	219.5 [63] 217.9 214.4 [105] 218.0 [75]	5.25 [143] 5.18 [179]
NaCl	187.1 [63] 185.3 182.6 [105] 184.7 [75]	5.38 [143] 4.92 [179]
NaBr	178.5 [63] 174.3 173.6 [105] 175.9 [75]	5.44 [92] 5.29 [143]
NaI	167.0 [63] 162.3 163.2 [105] 166.3 [75]	5.58 [92] 5.40 [143]
KF	194.3 [63] 194.5 189.8 [105] 193.0 [75]	5.38 [92] 5.26 [143]
KCl	170.2 [63] 169.5 165.8 [105] 167.8 [75]	5.46 [92] 5.34 [143]
KBr	163.2 [63] 159.3 158.5 [105] 161.2 [75]	5.47 [92] 5.38 [143]
KI	153.6 [63] 151.1 149.8 [105] 152.8 [75]	5.56 [92] 5.47 [143]
RbF	185.8 [63] 181.4 [105]	5.69 [143]
RbCl	163.6 [63] 159.3 [105] 163.6 [75]	5.62 [143]
RbBr	157.2 [63] 152.6 [105] 158.0 [75]	5.59 [143]
RbI	148.5 [63] 144.9 [105] 149.7 [75]	5.60 [143]
CsF	177.0 [63]	6.68 [92]
CsCl	159.8 [63] 157.8 [75]	5.85 [92] 5.89 [180]
CsBr	154.1 [63] 152.3 [75]	5.80 [92] 5.71 [180]
CsI	146.1 [63] 145.4 [75]	5.75 [92] 5.79 [180]
TlCl	172.8 [60]	6.69 [91] 6.98 [90]
TlBr	169.1 [60]	5.04 [91] 6.10 [90]
AgCl	213.6 [60]	6.57 [168] 6.55 [90]
AgBr	210.2 [60]	6.82 [168] 7.03 [90]

Apéndice c

Salidas de programas.

En los cálculos que se dan a continuación se utilizaron los siguientes datos de entrada.

SAL	DIST. E-8	COMPR. E-12	C E-60	D E-76	M.REL.+ -	M.REL.- -
LiF	2.014	1.5040	36.	9.	6.939	18.998
LiCl	2.570	3.3670	271.	81.	6.939	35.453
LiBr	2.751	4.2550	490.	149.	6.939	79.909
LiI	3.000	5.7800	1036.	328.	6.939	126.904
NaF	2.317	2.1510	115.	37.	22.989	18.998
NaCl	2.820	4.2190	492.	180.	22.989	35.453
NaBr	2.989	5.1280	786.	288.	22.989	79.909
NaI	3.237	6.7110	1465.	539.	22.989	126.904
KF	2.674	3.3110	370.	135.	39.102	18.998
KCl	3.146	5.7470	1150.	496.	39.102	35.453
KBr	3.298	6.8490	1663.	723.	39.102	79.909
KI	3.533	8.6960	2724.	1195.	39.102	126.904
RbF	2.815	3.7450	556.	204.	85.470	18.998
RbCl	3.291	6.4100	1589.	705.	85.470	35.453
RbBr	3.445	7.5760	2237.	1010.	85.470	79.909
RbI	3.671	9.5240	2537.	1623.	85.470	126.904
CsF	3.004	3.8800	963.	351.	132.905	18.998
CsCl	3.571	5.1800	3604.	1672.	132.905	35.453
CsBr	3.720	6.1000	5356.	2363.	132.905	79.904
CsI	3.956	7.3000	7580.	3606.	132.905	126.904
AgCl	2.772	2.2727	2114.	952.	107.868	35.435
AgBr	2.884	2.4390	2709.	1214.	107.868	79.904
TlCl	3.327	4.2373	6036.	2674.	204.370	35.453
TlBr	3.438	4.4444	7492.	3316.	204.370	79.904
SAL	D1COMPR. E-24	K+ E7	K- E7	N+ -	N- -	S -
LiF	-11.500	.8475	.1277	1.120	2.400	.806
LiCl	-63.800	.8475	.1192	1.120	4.350	.776
LiBr	-102.900	.8475	.1185	1.120	4.950	.743
LiI	.000	.8475	.1030	1.120	5.650	.700
NaF	-25.200	.7425	.1277	2.400	2.400	.831
NaCl	-99.600	.7425	.1192	2.400	4.350	.768
NaBr	-137.600	.7425	.1185	2.400	4.950	.739

NaI	-251.300	.7425	.1030	2.400	5.650	.746
KF	-59.000	.5250	.1277	4.350	2.400	.912
KCl	-183.100	.5250	.1192	4.350	4.350	.813
KBr	-255.400	.5250	.1185	4.350	4.950	.777
KI	-420.400	.5250	.1030	4.350	5.650	.756
RbF	-79.800	.3930	.1277	4.950	2.400	.968
RbCl	-230.900	.3930	.1192	4.950	4.350	.831
RbBr	-320.800	.3930	.1185	4.950	4.950	.797
RbI	-507.900	.3930	.1030	4.950	5.650	.768
CsF	-100.560	.3050	.1277	5.650	2.400	.930
CsCl	-168.410	.3050	.1192	5.650	4.350	.850
CsBr	-199.290	.3050	.1185	5.650	4.950	.820
CsI	-360.320	.3050	.1040	5.650	5.650	.770
AgCl	-33.833	.2750	.1192	5.460	4.350	.680
AgBr	-41.820	.2750	.1185	5.460	4.950	.670
TlCl	-125.320	.2020	.1192	5.850	4.350	.860
TlBr	-120.490	.2020	.1185	5.850	4.950	.840

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO M.P.C.

PARAMETROS DE LOS POTENCIALES CALCULADOS

Sal	Born-Lande		Born-Mayer		Hellmann		Wasastjerna	
	n	A/r ⁻ⁿ dyn.cm	ro cm	B dyn.cm	ro1 cm	B1 dyn.cm ²	beta.r -	C.r ⁻⁷ dyn.cm
LiF	5.924	.662E-12	.291E-08	.576E-09	.349E-08	.376E-17	14.820	.137E-05
LiCl	6.600	.547E-12	.338E-08	.949E-09	.397E-08	.799E-17	15.430	.215E-05
LiBr	6.713	.541E-12	.357E-08	.105E-08	.418E-08	.951E-17	15.533	.237E-05
LiI	6.791	.549E-12	.385E-08	.116E-08	.450E-08	.114E-16	15.605	.259E-05
NaF	6.802	.544E-12	.297E-08	.116E-08	.347E-08	.883E-17	15.614	.260E-05
NaCl	7.214	.474E-12	.343E-08	.154E-08	.398E-08	.143E-16	15.993	.336E-05
NaBr	7.321	.466E-12	.359E-08	.168E-08	.415E-08	.166E-16	16.091	.365E-05
NaI	7.439	.458E-12	.384E-08	.187E-08	.442E-08	.200E-16	16.199	.402E-05
KF	7.363	.488E-12	.320E-08	.184E-08	.369E-08	.163E-16	16.130	.398E-05
KCl	7.685	.441E-12	.362E-08	.231E-08	.416E-08	.241E-16	16.428	.490E-05
KBr	7.667	.443E-12	.381E-08	.228E-08	.437E-08	.249E-16	16.411	.484E-05
KI	7.733	.436E-12	.405E-08	.239E-08	.464E-08	.281E-16	16.472	.507E-05
RbF	7.700	.464E-12	.324E-08	.246E-08	.371E-08	.230E-16	16.441	.523E-05
RbCl	7.967	.422E-12	.367E-08	.294E-08	.419E-08	.322E-16	16.690	.614E-05
RbBr	7.959	.422E-12	.385E-08	.291E-08	.439E-08	.334E-16	16.682	.609E-05
RbI	8.238	.356E-12	.397E-08	.326E-08	.452E-08	.400E-16	16.942	.672E-05
Sal	Varshni-Shukla		V.S.modif.		Logaritmico			
	k1.r ⁻²	lam1 dyn.cm	k2.r ^{-3/2}	lam2 dyn.cm	b/r ⁹	a		
LiF	3.962	.260E-10	4.950	.745E-10	.519	.127E-11		
LiCl	4.300	.309E-10	5.400	.987E-10	.364	.150E-11		
LiBr	4.356	.325E-10	5.475	.106E-09	.341	.159E-11		
LiI	4.396	.344E-10	5.528	.113E-09	.325	.169E-11		
NaF	4.401	.343E-10	5.535	.113E-09	.323	.168E-11		
NaCl	4.607	.372E-10	5.810	.131E-09	.248	.192E-11		
NaBr	4.660	.387E-10	5.881	.138E-09	.229	.203E-11		
NaI	4.719	.405E-10	5.959	.148E-09	.210	.218E-11		
KF	4.682	.414E-10	5.909	.149E-09	.222	.220E-11		
KCl	4.843	.444E-10	6.123	.168E-09	.171	.258E-11		
KBr	4.833	.442E-10	6.111	.167E-09	.174	.255E-11		
KI	4.866	.449E-10	6.155	.172E-09	.164	.266E-11		
RbF	4.850	.471E-10	6.133	.179E-09	.169	.275E-11		

KCl	.298	.298	.298	.298	.298	.298	.298
KBr	.271	.271	.271	.271	.271	.271	.271
KI	.236	.236	.236	.236	.236	.236	.236
RbF	.392	.392	.392	.392	.392	.392	.392
RbCl	.278	.278	.278	.278	.278	.278	.278
RbBr	.253	.253	.253	.253	.253	.253	.253
RbI	.201	.201	.201	.201	.201	.201	.201

DERIVADA TERCERA

 $.10^{-13}$ dyn/cm²

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-2.633	-2.301	-2.362	-1.840	-1.872	-2.099	-1.759
LiCl	-1.391	-1.229	-1.255	-1.030	-1.025	-1.132	-1.054
LiBr	-1.173	-1.038	-1.060	-.876	-.869	-.958	-.905
LiI	-.946	-.838	-.855	-.710	-.703	-.774	-.739
NaF	-2.044	-1.812	-1.849	-1.535	-1.520	-1.673	-1.599
NaCl	-1.155	-1.029	-1.048	-.889	-.873	-.955	-.958
NaBr	-.990	-.884	-.900	-.768	-.752	-.821	-.833
NaI	-.800	-.716	-.728	-.624	-.611	-.666	-.684
KF	-1.472	-1.315	-1.338	-1.143	-1.120	-1.222	-1.245
KCl	-.916	-.821	-.835	-.723	-.705	-.766	-.806
KBr	-.794	-.712	-.723	-.626	-.611	-.663	-.697
KI	-.649	-.582	-.592	-.514	-.500	-.543	-.574
RbF	-1.352	-1.212	-1.232	-1.068	-1.041	-1.131	-1.191
RbCl	-.843	-.758	-.770	-.674	-.655	-.709	-.765
RbBr	-.732	-.659	-.669	-.585	-.569	-.616	-.664
RbI	-.561	-.506	-.513	-.453	-.439	-.474	-.523

DERIVADA CUARTA

 $.10^{-21}$ dyn/cm³

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	11.667	7.910	8.606	2.553	3.445	5.757	.110
LiCl	5.194	3.634	3.892	1.668	1.805	2.750	1.260
LiBr	4.140	2.910	3.110	1.391	1.472	2.215	1.163
LiI	3.086	2.176	2.323	1.067	1.114	1.663	.949
NaF	8.647	6.100	6.509	3.001	3.128	4.663	2.691
NaCl	4.182	2.998	3.177	1.651	1.626	2.333	1.877
NaBr	3.420	2.461	2.604	1.389	1.352	1.924	1.655
NaI	2.581	1.866	1.970	1.079	1.039	1.465	1.348
KF	5.704	4.111	4.347	2.341	2.270	3.219	2.839
KCl	3.111	2.268	2.387	1.375	1.297	1.797	1.872
KBr	2.567	1.870	1.969	1.130	1.068	1.481	1.530
KI	1.972	1.440	1.514	.880	.828	1.143	1.217
RbF	5.138	3.747	3.943	2.277	2.146	2.971	3.116
RbCl	2.808	2.066	2.167	1.311	1.215	1.653	1.940
RbBr	2.330	1.713	1.797	1.086	1.007	1.370	1.603
RbI	1.716	1.273	1.331	.839	.767	1.027	1.329

DERIVADA QUINTA

 $.10^{-29}$ dyn/cm⁴

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-57.491	-27.195	-32.595	11.915	1.075	-12.486	36.558
LiCl	-21.424	-10.746	-12.449	1.556	-.705	-5.551	8.460
LiBr	-16.122	-8.159	-9.407	.853	-.662	-4.284	5.568
LiI	-11.101	-5.652	-6.496	.439	-.519	-3.000	3.435
NaF	-40.311	-20.542	-23.598	1.522	-1.913	-10.918	12.276
NaCl	-16.630	-8.733	-9.882	-.451	-1.264	-4.885	1.649
NaBr	-12.953	-6.852	-7.726	-.552	-1.077	-3.878	.546
NaI	-9.121	-4.863	-5.464	-.540	-.829	-2.787	-.207

KF	-24.239	-12.859	-14.480	-1.180	-2.083	-7.311	.460
KCl	-11.555	-6.260	-6.982	-1.066	-1.233	-3.677	-1.888
KBr	-9.081	-4.914	-5.484	-.817	-.959	-2.881	-1.387
KI	-6.549	-3.559	-3.964	-.645	-.719	-2.100	-1.254
RbF	-21.354	-11.579	-12.909	-2.011	-2.299	-6.811	-3.673
RbCl	-10.212	-5.629	-6.231	-1.302	-1.269	-3.391	-3.392
RbBr	-8.088	-4.456	-4.933	-1.023	-1.001	-2.683	-2.645
RbI	-5.722	-3.204	-3.523	-.909	-.804	-1.974	-2.865

VALOR DEL POTENCIAL TOTAL EN R DE EQUILIBRIO

.10⁻¹² ergios

Sal	Potenciales de Overlap						# Pot. # Pot.V.d.W.			
	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	Elec.	dipol.	cuadr.
LiF	3.970	3.396	3.470	3.008	2.968	3.168	3.197	-20.0	-.539	-.033
LiCl	3.283	2.851	2.902	2.570	2.520	2.675	2.800	-15.7	-.941	-.043
LiBr	3.248	2.827	2.876	2.555	2.502	2.654	2.795	-14.7	-1.130	-.045
LiI	3.293	2.870	2.919	2.599	2.544	2.697	2.851	-13.4	-1.421	-.050
NaF	3.266	2.847	2.896	2.579	2.524	2.676	2.830	-17.4	-.743	-.045
NaCl	2.845	2.499	2.537	2.282	2.227	2.355	2.542	-14.3	-.978	-.045
NaBr	2.795	2.459	2.496	2.251	2.195	2.320	2.516	-13.5	-1.102	-.045
NaI	2.749	2.424	2.459	2.223	2.167	2.288	2.496	-12.5	-1.273	-.045
KF	2.928	2.578	2.616	2.362	2.303	2.433	2.644	-15.1	-1.012	-.052
KCl	2.647	2.342	2.374	2.158	2.101	2.215	2.444	-12.8	-1.186	-.052
KBr	2.660	2.353	2.385	2.167	2.109	2.224	2.452	-12.2	-1.292	-.052
KI	2.613	2.314	2.345	2.133	2.076	2.189	2.420	-11.4	-1.401	-.049
RbF	2.784	2.464	2.498	2.271	2.210	2.330	2.573	-14.3	-1.117	-.052
RbCl	2.531	2.249	2.277	2.081	2.023	2.130	2.380	-12.2	-1.251	-.051
RbBr	2.530	2.248	2.277	2.080	2.022	2.129	2.378	-11.7	-1.338	-.051
RbI	2.136	1.905	1.927	1.770	1.719	1.807	2.043	-11.0	-1.037	-.049

Potenciales totales

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
LiF	-16.62	-17.19	-17.12	-17.58	-17.62	-17.42	-17.39
LiCl	-13.39	-13.82	-13.77	-14.10	-14.15	-13.99	-13.87
LiBr	-12.58	-13.00	-12.95	-13.27	-13.33	-13.17	-13.03
LiI	-11.62	-12.04	-11.99	-12.31	-12.36	-12.21	-12.06
NaF	-14.92	-15.34	-15.29	-15.61	-15.66	-15.51	-15.36
NaCl	-12.47	-12.82	-12.78	-13.04	-13.09	-12.96	-12.78
NaBr	-11.84	-12.18	-12.14	-12.38	-12.44	-12.31	-12.12
NaI	-11.02	-11.35	-11.31	-11.55	-11.60	-11.48	-11.28
KF	-13.21	-13.56	-13.52	-13.78	-13.84	-13.71	-13.50
KCl	-11.40	-11.71	-11.68	-11.89	-11.95	-11.84	-11.61
KBr	-10.91	-11.21	-11.18	-11.40	-11.46	-11.34	-11.12
KI	-10.25	-10.55	-10.51	-10.73	-10.78	-10.67	-10.44
RbF	-12.71	-13.03	-12.99	-13.22	-13.28	-13.16	-12.92
RbCl	-11.02	-11.30	-11.27	-11.47	-11.53	-11.42	-11.17
RbBr	-10.56	-10.84	-10.81	-11.01	-11.07	-10.96	-10.71
RbI	-9.93	-10.16	-10.14	-10.30	-10.35	-10.26	-10.02

Energia de la red

kcal/mol

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
LiF	239.19	247.44	246.38	253.04	253.61	250.74	250.31
LiCl	192.66	198.87	198.14	202.92	203.65	201.41	199.61
LiBr	181.09	187.15	186.44	191.06	191.82	189.63	187.61
LiI	167.18	173.26	172.56	177.17	177.96	175.75	173.54

NaF	214.75	220.77	220.07	224.64	225.43	223.24	221.02
NaCl	179.53	184.51	183.96	187.63	188.42	186.58	183.89
NaBr	170.40	175.23	174.71	178.23	179.03	177.24	174.41
NaI	158.64	163.33	162.83	166.22	167.03	165.28	162.29
KF	190.15	195.18	194.64	198.30	199.15	197.28	194.23
KCl	164.14	168.53	168.07	171.18	172.01	170.36	167.07
KBr	156.99	161.41	160.95	164.09	164.91	163.26	159.98
KI	147.48	151.79	151.34	154.39	155.21	153.59	150.26
RbF	182.87	187.47	186.99	190.26	191.13	189.40	185.91
RbCl	158.61	162.68	162.26	165.09	165.92	164.39	160.79
RbBr	152.00	156.06	155.65	158.48	159.31	157.77	154.19
RbI	142.94	146.27	145.94	148.21	148.95	147.68	144.28

VALORES DE DLMS/DLMV (MOD.DIP.DEFORM.)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.556	.523	.527	.503	.501	.511	.513
LiCl	.731	.697	.701	.676	.673	.684	.693
LiBr	.889	.849	.853	.825	.821	.834	.846
LiI	1.113	1.064	1.069	1.035	1.029	1.045	1.062
NaF	.529	.506	.508	.492	.489	.497	.505
NaCl	.827	.795	.798	.776	.771	.782	.799
NaBr	.980	.942	.946	.921	.915	.928	.948
NaI	.958	.922	.926	.902	.897	.909	.930
KF	.269	.259	.260	.253	.252	.255	.261
KCl	.666	.643	.645	.630	.626	.634	.650
KBr	.829	.800	.803	.784	.779	.789	.809
KI	.940	.908	.911	.889	.884	.895	.919
RbF	.096	.093	.093	.091	.090	.091	.094
RbCl	.608	.588	.590	.578	.574	.581	.597
RbBr	.761	.736	.739	.723	.718	.726	.747
RbI	.930	.902	.905	.887	.881	.891	.919

VALORES DE DB/DP

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	4.291	3.736	3.838	2.966	3.020	3.398	2.830
LiCl	4.583	3.978	4.078	3.234	3.214	3.616	3.322
LiBr	4.650	4.014	4.116	3.245	3.212	3.634	3.383
LiI	4.717	4.027	4.137	3.203	3.159	3.615	3.388
NaF	4.648	4.093	4.182	3.433	3.396	3.762	3.585
NaCl	4.855	4.268	4.356	3.613	3.538	3.921	3.934
NaBr	4.923	4.317	4.407	3.653	3.566	3.960	4.028
NaI	5.009	4.377	4.469	3.695	3.594	4.004	4.139
KF	4.915	4.336	4.421	3.706	3.620	3.995	4.081
KCl	5.097	4.493	4.578	3.865	3.750	4.139	4.394
KBr	5.114	4.489	4.577	3.837	3.720	4.123	4.377
KI	5.174	4.530	4.620	3.864	3.738	4.152	4.451
RbF	5.074	4.495	4.576	3.892	3.781	4.155	4.407
RbCl	5.235	4.632	4.714	4.030	3.896	4.281	4.682
RbBr	5.256	4.637	4.720	4.017	3.879	4.275	4.683
RbI	5.330	4.750	4.826	4.192	4.045	4.414	4.936

VALOR DE LA CONSTANTE DE FUERZA EN R DE EQUILIBRIO
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE A	.10 ⁻⁵ dyn/cm						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.

LiF	.803	.803	.803	.803	.803	.803	.803
LiCl	.458	.458	.458	.458	.458	.458	.458
LiBr	.388	.388	.388	.388	.388	.388	.388
LiI	.311	.311	.311	.311	.311	.311	.311
NaF	.646	.646	.646	.646	.646	.646	.646
NaCl	.401	.401	.401	.401	.401	.401	.401
NaBr	.350	.350	.350	.350	.350	.350	.350
NaI	.289	.289	.289	.289	.289	.289	.289
KF	.485	.485	.485	.485	.485	.485	.485
KCl	.328	.328	.328	.328	.328	.328	.328
KBr	.289	.289	.289	.289	.289	.289	.289
KI	.244	.244	.244	.244	.244	.244	.244
RbF	.451	.451	.451	.451	.451	.451	.451
RbCl	.308	.308	.308	.308	.308	.308	.308
RbBr	.273	.273	.273	.273	.273	.273	.273
RbI	.231	.231	.231	.231	.231	.231	.231

DERIVADA PRIMERA

 $.10^{-27}$ dyn/cm⁴

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-12.904	-10.174	-10.676	-6.392	-6.655	-8.513	-5.720
LiCl	-3.934	-3.118	-3.253	-2.114	-2.088	-2.630	-2.234
LiBr	-2.779	-2.186	-2.282	-1.471	-1.440	-1.832	-1.599
LiI	-1.759	-1.361	-1.425	-.886	-.860	-1.123	-.992
NaF	-7.746	-6.304	-6.534	-4.588	-4.493	-5.445	-4.983
NaCl	-2.851	-2.326	-2.405	-1.740	-1.673	-2.015	-2.027
NaBr	-2.132	-1.736	-1.794	-1.301	-1.244	-1.502	-1.546
NaI	-1.426	-1.156	-1.195	-.865	-.822	-.997	-1.055
KF	-4.116	-3.383	-3.491	-2.584	-2.475	-2.951	-3.060
KCl	-1.809	-1.491	-1.535	-1.159	-1.099	-1.304	-1.439
KBr	-1.388	-1.137	-1.172	-.874	-.827	-.989	-1.092
KI	-.969	-.791	-.816	-.607	-.572	-.687	-.770
RbF	-3.445	-2.859	-2.941	-2.250	-2.138	-2.515	-2.770
RbCl	-1.542	-1.282	-1.317	-1.021	-.963	-1.130	-1.303
RbBr	-1.198	-.991	-1.019	-.784	-.738	-.870	-1.006
RbI	-.856	-.721	-.738	-.590	-.556	-.642	-.764

DERIVADA SEGUNDA

 $.10^{-50}$ dyn/cm⁷

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	28.596	15.910	18.260	-2.180	.835	8.641	-10.428
LiCl	4.531	2.544	2.873	.040	.215	1.418	-.479
LiBr	2.651	1.458	1.652	-.016	.063	.784	-.236
LiI	1.314	.690	.790	-.071	-.039	.338	-.152
NaF	12.375	7.467	8.254	1.493	1.736	4.695	.894
NaCl	2.650	1.610	1.767	.426	.404	1.026	.625
NaBr	1.688	1.021	1.120	.274	.249	.647	.459
NaI	.904	.542	.595	.144	.124	.339	.280
KF	4.546	2.816	3.071	.892	.815	1.846	1.433
KCl	1.274	.795	.863	.289	.245	.529	.571
KBr	.851	.523	.570	.176	.146	.341	.363
KI	.488	.299	.325	.099	.080	.193	.219
RbF	3.374	2.143	2.317	.843	.727	1.456	1.585
RbCl	.975	.623	.671	.265	.220	.427	.563
RbBr	.662	.419	.452	.171	.140	.283	.375
RbI	.398	.262	.280	.129	.107	.187	.279

DERIVADA TERCERA

 $.10^{-73}$ dyn/cm¹⁰

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-80.810	-29.333	-38.576	38.434	21.021	-3.546	79.132
LiCl	-6.545	-2.397	-3.063	2.462	1.665	-.323	4.894
LiBr	-3.161	-1.108	-1.432	1.252	.901	-.083	2.336
LiI	-1.222	-.388	-.518	.559	.429	.029	.963
NaF	-24.720	-10.466	-12.684	5.693	3.493	-3.345	12.506
NaCl	-3.045	-1.306	-1.560	.545	.399	-.437	.885
NaBr	-1.647	-.700	-.837	.290	.227	-.228	.394
NaI	-.704	-.295	-.353	.126	.106	-.091	.129
KF	-6.193	-2.752	-3.245	.828	.620	-1.035	1.084
KCl	-1.096	-.495	-.578	.102	.094	-.196	-.031
KBr	-.636	-.280	-.329	.075	.069	-.102	.003
KI	-.300	-.130	-.154	.036	.035	-.046	-.009
RbF	-4.044	-1.883	-2.179	.259	.235	-.806	-.249
RbCl	-.748	-.353	-.405	.025	.035	-.156	-.178
RbBr	-.444	-.206	-.237	.022	.028	-.087	-.098
RbI	-.223	-.111	-.125	-.008	-.001	-.055	-.100

VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE D	.10 ⁻¹⁰ e.s.u.						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-.325	-.325	-.325	-.325	-.325	-.325	-.325
LiCl	-.349	-.349	-.349	-.349	-.349	-.349	-.349
LiBr	-.527	-.527	-.527	-.527	-.527	-.527	-.527
LiI	-.689	-.689	-.689	-.689	-.689	-.689	-.689
NaF	-.377	-.377	-.377	-.377	-.377	-.377	-.377
NaCl	-.517	-.517	-.517	-.517	-.517	-.517	-.517
NaBr	-.649	-.649	-.649	-.649	-.649	-.649	-.649
NaI	-.541	-.541	-.541	-.541	-.541	-.541	-.541
KF	-.198	-.198	-.198	-.198	-.198	-.198	-.198
KCl	-.484	-.484	-.484	-.484	-.484	-.484	-.484
KBr	-.638	-.638	-.638	-.638	-.638	-.638	-.638
KI	-.660	-.660	-.660	-.660	-.660	-.660	-.660
RbF	-.027	-.027	-.027	-.027	-.027	-.027	-.027
RbCl	-.485	-.485	-.485	-.485	-.485	-.485	-.485
RbBr	-.622	-.622	-.622	-.622	-.622	-.622	-.622
RbI	-.676	-.676	-.676	-.676	-.676	-.676	-.676

DERIVADA PRIMERA	.10 ⁻¹² e.s.u./cm ⁻³						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	3.265	2.358	2.451	1.949	1.913	2.103	2.134
LiCl	1.921	1.540	1.578	1.354	1.324	1.419	1.503
LiBr	2.409	1.955	2.000	1.731	1.693	1.808	1.926
LiI	2.463	2.014	2.059	1.793	1.753	1.869	1.997
NaF	2.929	2.398	2.451	2.136	2.088	2.225	2.379
NaCl	2.388	2.023	2.059	1.841	1.799	1.899	2.064
NaBr	2.561	2.186	2.222	1.997	1.952	2.056	2.243
NaI	1.713	1.473	1.496	1.353	1.322	1.390	1.521
KF	1.098	.940	.955	.861	.841	.885	.967
KCl	1.730	1.509	1.530	1.398	1.366	1.431	1.577
KBr	1.977	1.723	1.747	1.595	1.559	1.633	1.799
KI	1.679	1.468	1.488	1.362	1.331	1.393	1.537
RbF	.133	.116	.118	.108	.105	.110	.122
RbCl	1.582	1.399	1.416	1.307	1.277	1.332	1.479

RbBr	1.764	1.560	1.578	1.457	1.424	1.485	1.648
RbI	1.650	1.476	1.491	1.388	1.357	1.411	1.575

DERIVADA SEGUNDA		$\cdot 10^{-35}$ e.s.u./cm ⁻⁶					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-6.080	-2.396	-2.898	.621	.434	-.936	1.151
LiCl	-1.844	-.982	-1.094	-.279	-.258	-.612	-.387
LiBr	-1.907	-1.049	-1.159	-.352	-.320	-.677	-.506
LiI	-1.515	-.851	-.936	-.313	-.283	-.561	-.459
NaF	-3.914	-2.205	-2.423	-.821	-.740	-1.458	-1.204
NaCl	-1.842	-1.134	-1.222	-.573	-.508	-.816	-.890
NaBr	-1.675	-1.051	-1.127	-.559	-.495	-.769	-.878
NaI	-.892	-.571	-.610	-.319	-.282	-.425	-.506
KF	-1.007	-.637	-.682	-.345	-.305	-.469	-.544
KCl	-1.003	-.666	-.706	-.405	-.357	-.510	-.655
KBr	-.994	-.658	-.698	-.398	-.351	-.503	-.642
KI	-.691	-.461	-.488	-.284	-.251	-.355	-.461
RbF	-.108	-.072	-.076	-.044	-.039	-.055	-.071
RbCl	-.822	-.565	-.594	-.369	-.326	-.445	-.608
RbBr	-.798	-.548	-.577	-.358	-.316	-.431	-.589
RbI	-.632	-.447	-.468	-.309	-.273	-.360	-.517

DERIVADA TERCERA		$\cdot 10^{-57}$ e.s.u./cm ⁻⁹					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	148.461	19.558	38.202	-99.665	-78.202	-31.345	-166.482
LiCl	22.882	6.877	9.068	-7.598	-6.416	.034	-11.763
LiBr	19.458	6.273	8.060	-5.580	-4.804	.580	-8.233
LiI	11.995	4.041	5.111	-3.078	-2.692	.584	-4.330
NaF	67.325	22.808	28.789	-17.010	-14.914	3.443	-23.754
NaCl	18.128	7.339	8.733	-2.055	-2.116	2.509	-.857
NaBr	13.955	5.858	6.893	-1.140	-1.292	2.210	.375
NaI	5.901	2.569	2.991	-.285	-.396	1.058	.631
KF	11.760	5.004	5.864	-.817	-.979	1.953	.658
KCl	7.365	3.428	3.914	.117	-.128	1.620	1.971
KBr	6.323	2.930	3.349	.071	-.132	1.373	1.618
KI	3.591	1.691	1.924	.099	-.030	.816	1.069
RbF	1.108	.517	.590	.022	-.016	.246	.307
RbCl	5.376	2.666	2.991	.437	.183	1.407	2.373
RbBr	4.552	2.253	2.529	.362	.148	1.185	1.986
RbI	3.038	1.586	1.756	.418	.239	.904	1.820

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

LiF	10.60
LiCl	14.43
LiBr	12.42
LiI	13.52
NaF	6.12
NaCl	6.93
NaBr	6.65
NaI	8.30
KF	6.72
KCl	5.75
KBr	5.52
KI	5.98
RbF	8.11
RbCl	5.60

RbBr	5.32
RbI	5.59

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

LiF	2.00
LiCl	3.23
LiBr	3.45
LiI	4.19
NaF	1.71
NaCl	2.51
NaBr	2.70
NaI	3.23
KF	1.76
KCl	2.23
KBr	2.36
KI	2.69
RbF	1.91
RbCl	2.23
RbBr	2.33
RbI	2.61

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-1.052	-1.117	-1.108	-1.179	-1.177	-1.147	-1.181
LiCl	-3.285	-3.409	-3.392	-3.529	-3.535	-3.471	-3.499
LiBr	-3.701	-3.852	-3.832	-3.984	-3.994	-3.923	-3.937
LiI	-5.405	-5.646	-5.614	-5.851	-5.869	-5.757	-5.765
NaF	-.731	-.758	-.754	-.779	-.781	-.770	-.770
NaCl	-1.889	-1.953	-1.945	-2.006	-2.014	-1.983	-1.969
NaBr	-2.186	-2.262	-2.253	-2.322	-2.332	-2.297	-2.273
NaI	-3.273	-3.373	-3.361	-3.455	-3.470	-3.421	-3.386
KF	-.912	-.918	-.917	-.923	-.924	-.921	-.919
KCl	-1.545	-1.571	-1.568	-1.591	-1.596	-1.583	-1.569
KBr	-1.731	-1.766	-1.762	-1.791	-1.797	-1.782	-1.762
KI	-2.289	-2.340	-2.334	-2.379	-2.388	-2.364	-2.334
RbF	-1.174	-1.176	-1.175	-1.177	-1.177	-1.176	-1.176
RbCl	-1.612	-1.629	-1.627	-1.641	-1.644	-1.636	-1.624
RbBr	-1.744	-1.767	-1.765	-1.783	-1.788	-1.778	-1.761
RbI	-2.188	-2.222	-2.218	-2.246	-2.253	-2.238	-2.206

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.793	.842	.835	.889	.887	.864	.890
LiCl	3.420	3.550	3.532	3.674	3.681	3.614	3.643
LiBr	4.566	4.751	4.727	4.915	4.927	4.839	4.857
LiI	7.451	7.782	7.739	8.066	8.091	7.937	7.947
NaF	.921	.954	.950	.982	.984	.969	.970
NaCl	3.175	3.283	3.269	3.371	3.384	3.333	3.309
NaBr	4.158	4.303	4.285	4.417	4.436	4.370	4.325
NaI	6.809	7.016	6.990	7.187	7.218	7.116	7.042
KF	1.718	1.729	1.728	1.738	1.740	1.734	1.731
KCl	3.989	4.058	4.050	4.110	4.121	4.090	4.052
KBr	5.030	5.132	5.120	5.207	5.223	5.178	5.122
KI	7.407	7.573	7.553	7.697	7.726	7.650	7.553

RbF	2.306	2.308	2.308	2.310	2.311	2.309	2.308
RbCl	4.628	4.676	4.671	4.711	4.720	4.699	4.662
RbBr	5.676	5.751	5.743	5.803	5.817	5.784	5.729
RbI	8.000	8.124	8.110	8.210	8.236	8.180	8.066

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	56.625	35.574	39.262	8.508	10.233	23.502	4.334
LiCl	80.756	48.879	53.943	11.736	10.563	30.581	17.076
LiBr	58.607	34.770	38.443	8.070	6.742	21.335	13.852
LiI	60.354	32.997	37.125	3.168	1.304	17.765	11.221
NaF	23.270	16.379	17.437	8.643	8.170	12.451	10.653
NaCl	24.292	16.744	17.830	8.857	7.902	12.498	13.043
NaBr	21.499	14.721	15.674	7.835	6.887	10.949	12.071
NaI	28.196	18.490	19.848	8.624	7.116	13.026	15.439
KF	25.042	17.700	18.762	9.880	8.798	13.449	14.656
KCl	17.773	12.670	13.365	7.622	6.676	9.791	12.065
KBr	15.956	11.245	11.881	6.643	5.786	8.616	10.677
KI	16.731	11.517	12.216	6.467	5.478	8.609	11.168
RbF	31.581	22.148	23.468	12.380	10.575	16.629	20.749
RbCl	16.346	11.811	12.407	7.481	6.495	9.255	12.332
RbBr	14.547	10.448	10.983	6.577	5.695	8.159	10.924
RbI	15.045	11.078	11.576	7.485	6.521	8.878	12.476

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	559.033	255.559	295.059	148.852	125.726	161.064	220.668
LiCl	940.399	428.191	487.708	249.821	221.322	272.978	351.038
LiBr	599.525	279.189	314.221	186.580	167.427	189.243	258.578
LiI	630.224	281.006	316.399	214.802	196.974	196.837	285.941
NaF	163.698	93.365	101.620	62.280	55.612	68.903	87.669
NaCl	181.699	105.352	113.649	73.470	66.153	79.585	107.136
NaBr	156.963	92.309	99.111	66.685	60.379	71.035	97.342
NaI	232.692	131.969	142.359	94.214	85.519	99.782	141.178
KF	190.208	111.739	120.469	75.457	67.341	83.471	114.417
KCl	124.257	76.810	81.736	56.134	50.616	60.133	86.403
KBr	109.080	67.415	71.658	50.340	45.638	53.261	76.282
KI	119.732	73.463	78.084	55.376	50.390	58.132	84.495
RbF	270.319	159.516	171.521	106.573	94.592	118.677	174.611
RbCl	115.062	73.557	77.758	54.929	49.549	58.602	87.406
RbBr	100.134	64.255	67.835	48.770	44.196	51.612	76.504
RbI	108.023	72.519	76.015	56.005	50.750	59.386	89.856

V³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	8159.577	2590.615	3200.186	103.709	290.846	1210.664	-510.559
LiCl	15866.891	4948.882	6024.055	438.112	390.141	2237.044	1083.597
LiBr	8671.593	2744.243	3306.050	176.096	125.342	1263.128	743.312
LiI	9035.913	2572.434	3149.516	-276.913	-339.966	1027.654	451.136
NaF	1651.623	731.516	827.716	268.763	241.061	451.417	450.232
NaCl	1855.771	826.022	927.092	324.074	268.341	511.385	686.264
NaBr	1511.284	679.314	759.064	274.572	223.388	425.197	612.615
NaI	2509.559	1050.491	1187.549	359.079	267.964	614.055	978.953
KF	2024.942	931.116	1040.446	390.214	321.172	583.313	837.569

KCl	1139.887	558.279	613.473	272.527	221.542	370.375	618.339
KBr	945.674	458.752	504.238	220.994	178.585	303.907	509.238
KI	1051.252	495.725	546.883	226.437	177.013	320.530	568.616
RbF	3204.430	1472.062	1641.135	629.579	493.335	910.583	1577.032
RbCl	1028.965	527.192	573.904	281.243	227.571	360.350	660.681
RbBr	845.801	432.681	470.664	231.633	187.187	296.815	544.807
RbI	925.245	504.149	542.594	298.166	244.014	359.695	692.710

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-8.032	-5.046	-5.569	-1.207	-1.451	-3.334	- .615
LiCl	-18.844	-11.406	-12.587	-2.739	-2.465	-7.136	-3.985
LiBr	-20.071	-11.908	-13.165	-2.764	-2.309	-7.306	-4.744
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	-8.182	-5.758	-6.131	-3.039	-2.873	-4.378	-3.745
NaCl	-14.787	-10.192	-10.853	-5.391	-4.810	-7.607	-7.939
NaBr	-16.571	-11.346	-12.081	-6.039	-5.308	-8.439	-9.304
NaI	-22.805	-14.955	-16.053	-6.975	-5.756	-10.536	-12.488
KF	-12.342	-8.723	-9.247	-4.870	-4.336	-6.628	-7.223
KCl	-17.774	-12.671	-13.365	-7.622	-6.676	-9.791	-12.065
KBr	-19.786	-13.945	-14.734	-8.238	-7.174	-10.685	-13.240
KI	-24.324	-16.744	-17.760	-9.402	-7.965	-12.516	-16.237
RbF	-14.584	-10.227	-10.837	-5.717	-4.883	-7.679	-9.582
RbCl	-18.710	-13.519	-14.201	-8.563	-7.434	-10.594	-14.115
RbBr	-20.711	-14.875	-15.636	-9.364	-8.109	-11.616	-15.553
RbI	-25.638	-18.878	-19.727	-12.756	-11.112	-15.130	-21.261

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^2/\text{dyn})^{-2}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	192.756	100.692	113.905	42.798	40.103	64.864	52.702
LiCl	1159.352	590.937	664.067	257.389	228.888	373.712	364.717
LiBr	1444.408	745.466	832.284	350.481	309.632	483.547	511.700
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	237.247	150.457	161.862	89.235	81.890	112.811	118.236
NaCl	878.076	554.154	593.860	338.695	303.725	416.062	496.055
NaBr	1150.006	727.480	777.856	456.578	408.295	550.490	682.093
NaI	2270.037	1376.685	1481.591	819.389	718.344	1006.839	1317.719
KF	571.173	366.668	391.970	226.028	201.510	276.264	339.343
KCl	1382.540	917.946	972.360	609.268	541.959	713.805	950.308
KBr	1799.770	1188.070	1258.929	791.172	704.282	923.974	1232.269
KI	2901.164	1883.873	2000.205	1236.423	1091.366	1448.866	1994.398
RbF	832.845	532.086	568.118	327.531	285.924	397.620	542.014
RbCl	1638.151	1113.351	1173.111	766.374	679.001	879.496	1240.259
RbBr	2113.954	1435.604	1512.236	993.480	881.478	1136.538	1601.559
RbI	3364.631	2363.536	2473.633	1710.709	1522.097	1914.780	2794.712

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^2/\text{dyn})^{-3}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-7.126	-3.103	-3.611	-1.090	-1.053	-1.844	-1.223
LiCl	-108.789	-46.116	-53.179	-16.821	-14.943	-26.847	-25.000
LiBr	-158.336	-69.544	-79.264	-28.423	-25.047	-42.292	-43.854
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	-10.739	-6.170	-6.718	-3.474	-3.161	-4.455	-4.819
NaCl	-80.223	-46.122	-49.942	-26.978	-23.973	-33.490	-41.766
NaBr	-121.254	-70.072	-75.647	-42.185	-37.384	-51.397	-66.789
NaI	-340.905	-187.045	-203.467	-105.958	-91.993	-132.080	-182.170

KF	-40.774	-23.769	-25.693	-13.922	-12.270	-17.241	-22.306
KCl	-164.650	-101.344	-108.175	-65.312	-57.577	-76.802	-107.966
KBr	-248.801	-152.623	-162.876	-99.079	-87.501	-115.981	-162.999
KI	-520.819	-314.085	-335.809	-201.216	-176.352	-236.240	-342.915
RbF	-72.828	-42.146	-45.510	-24.570	-21.162	-30.242	-44.038
RbCl	-218.147	-138.501	-146.892	-93.037	-81.729	-106.948	-159.699
RbBr	-326.256	-207.659	-220.053	-140.835	-124.033	-161.123	-239.730
RbI	-660.818	-437.714	-460.553	-310.628	-274.172	-347.820	-537.320

OMEGA T		.10 ^{-13/a}					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	5.305	5.305	5.305	5.305	5.305	5.305	5.305
LiCl	3.809	3.809	3.809	3.809	3.809	3.809	3.809
LiBr	3.651	3.651	3.651	3.651	3.651	3.651	3.651
LiI	3.317	3.317	3.317	3.317	3.317	3.317	3.317
NaF	4.017	4.017	4.017	4.017	4.017	4.017	4.017
NaCl	2.901	2.901	2.901	2.901	2.901	2.901	2.901
NaBr	2.488	2.488	2.488	2.488	2.488	2.488	2.488
NaI	2.099	2.099	2.099	2.099	2.099	2.099	2.099
KF	3.065	3.065	3.065	3.065	3.065	3.065	3.065
KCl	2.369	2.369	2.369	2.369	2.369	2.369	2.369
KBr	1.930	1.930	1.930	1.930	1.930	1.930	1.930
KI	1.675	1.675	1.675	1.675	1.675	1.675	1.675
RbF	2.540	2.540	2.540	2.540	2.540	2.540	2.540
RbCl	1.997	1.997	1.997	1.997	1.997	1.997	1.997
RbBr	1.511	1.511	1.511	1.511	1.511	1.511	1.511
RbI	1.269	1.269	1.269	1.269	1.269	1.269	1.269

GAMMA T							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	3.602	2.516	2.708	1.091	1.184	1.883	.862
LiCl	4.169	2.921	3.121	1.445	1.400	2.196	1.647
LiBr	3.809	2.690	2.865	1.406	1.345	2.048	1.669
LiI	3.856	2.660	2.844	1.318	1.237	1.979	1.659
NaF	2.939	2.256	2.363	1.471	1.425	1.860	1.665
NaCl	3.104	2.406	2.508	1.655	1.566	2.004	2.040
NaBr	3.049	2.373	2.470	1.660	1.565	1.986	2.081
NaI	3.302	2.533	2.643	1.732	1.612	2.092	2.271
KF	3.108	2.412	2.513	1.663	1.560	2.006	2.116
KCl	2.989	2.371	2.456	1.743	1.627	2.015	2.284
KBr	2.933	2.320	2.405	1.701	1.588	1.970	2.228
KI	2.998	2.363	2.450	1.727	1.605	2.000	2.303
RbF	3.340	2.596	2.701	1.826	1.684	2.161	2.486
RbCl	2.992	2.404	2.482	1.829	1.700	2.067	2.462
RbBr	2.937	2.359	2.436	1.796	1.670	2.029	2.414
RbI	3.010	2.471	2.540	1.965	1.831	2.164	2.651

VALORES DE DLNS/DLMV (MOD.CAPAS)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.512	.395	.414	.267	.273	.336	.254
LiCl	.712	.566	.588	.411	.405	.488	.440
LiBr	.841	.668	.693	.497	.486	.579	.545
LiI	1.043	.823	.854	.611	.595	.712	.683
NaF	.479	.391	.403	.307	.301	.346	.337
NaCl	.776	.642	.660	.519	.502	.573	.595
NaBr	.909	.754	.774	.618	.597	.677	.715

NaI	.928	.768	.789	.620	.596	.684	.733
KF	.251	.209	.215	.172	.166	.188	.199
KCl	.619	.523	.535	.441	.425	.475	.523
KBr	.757	.639	.654	.542	.522	.581	.641
KI	.878	.739	.756	.623	.598	.670	.745
RbF	.101	.085	.087	.068	.065	.075	.083
RbCl	.555	.476	.486	.413	.397	.437	.494
RbBr	.687	.589	.601	.513	.493	.542	.612
RbI	.853	.741	.754	.654	.629	.685	.788

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE D		$\cdot 10^{-10}$ e.s.u.					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-.325	-.325	-.325	-.325	-.325	-.325	-.325
LiCl	-.349	-.349	-.349	-.349	-.349	-.349	-.349
LiBr	-.527	-.527	-.527	-.527	-.527	-.527	-.527
LiI	-.689	-.689	-.689	-.689	-.689	-.689	-.689
NaF	-.377	-.377	-.377	-.377	-.377	-.377	-.377
NaCl	-.517	-.517	-.517	-.517	-.517	-.517	-.517
NaBr	-.649	-.649	-.649	-.649	-.649	-.649	-.649
NaI	-.541	-.541	-.541	-.541	-.541	-.541	-.541
KF	-.198	-.198	-.198	-.198	-.198	-.198	-.198
KCl	-.484	-.484	-.484	-.484	-.484	-.484	-.484
KBr	-.638	-.638	-.638	-.638	-.638	-.638	-.638
KI	-.660	-.660	-.660	-.660	-.660	-.660	-.660
RbF	-.027	-.027	-.027	-.027	-.027	-.027	-.027
RbCl	-.485	-.485	-.485	-.485	-.485	-.485	-.485
RbBr	-.622	-.622	-.622	-.622	-.622	-.622	-.622
RbI	-.676	-.676	-.676	-.676	-.676	-.676	-.676

DERIVADA PRIMERA		$\cdot 10^{-12}$ e.s.u./cm ³					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	3.928	3.021	3.114	2.612	2.576	2.766	2.797
LiCl	2.264	1.883	1.921	1.697	1.667	1.762	1.846
LiBr	2.831	2.376	2.422	2.153	2.115	2.230	2.348
LiI	2.889	2.440	2.484	2.218	2.178	2.294	2.423
NaF	3.434	2.903	2.956	2.641	2.593	2.730	2.884
NaCl	2.773	2.408	2.443	2.225	2.183	2.283	2.448
NaBr	2.966	2.591	2.627	2.402	2.357	2.462	2.648
NaI	1.979	1.739	1.762	1.619	1.588	1.656	1.787
KF	1.271	1.113	1.128	1.033	1.014	1.058	1.140
KCl	1.989	1.768	1.789	1.657	1.625	1.690	1.836
KBr	2.274	2.020	2.044	1.892	1.855	1.930	2.096
KI	1.928	1.718	1.737	1.611	1.580	1.643	1.787
RbF	.153	.136	.138	.128	.125	.130	.141
RbCl	1.808	1.626	1.643	1.534	1.504	1.559	1.706
RbBr	2.018	1.813	1.832	1.710	1.677	1.739	1.902
RbI	1.877	1.703	1.719	1.616	1.585	1.639	1.803

DERIVADA SEGUNDA		$\cdot 10^{-35}$ e.s.u./cm ⁶					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-7.152	-3.283	-3.804	-.182	-.362	-1.771	.310

LiCl	-2.134	-1.234	-1.350	-.513	-.489	-.852	-.636
LiBr	-2.201	-1.307	-1.421	-.592	-.557	-.923	-.761
LiI	-1.746	-1.054	-1.142	-.503	-.470	-.756	-.661
NaF	-4.510	-2.729	-2.955	-1.310	-1.222	-1.959	-1.726
NaCl	-2.105	-1.370	-1.460	-.795	-.727	-1.043	-1.129
NaBr	-1.910	-1.264	-1.342	-.759	-.692	-.973	-1.094
NaI	-1.015	-.682	-.722	-.425	-.386	-.532	-.620
KF	-1.148	-.764	-.810	-.465	-.424	-.591	-.673
KCl	-1.138	-.788	-.829	-.521	-.472	-.628	-.781
KBr	-1.127	-.779	-.820	-.513	-.465	-.620	-.767
KI	-.782	-.545	-.573	-.364	-.330	-.436	-.548
RbF	-.122	-.085	-.089	-.056	-.051	-.068	-.085
RbCl	-.927	-.662	-.692	-.462	-.418	-.539	-.709
RbBr	-.901	-.643	-.672	-.448	-.405	-.523	-.687
RbI	-.711	-.520	-.541	-.379	-.342	-.430	-.593

DERIVADA TERCERA

.10⁻⁵⁷ e.s.u./cm⁻⁹

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	173.986	35.303	55.203	-91.097	-69.341	-19.216	-158.535
LiCl	26.399	9.327	11.650	-5.946	-4.802	2.051	-9.918
LiBr	22.397	8.351	10.243	-4.145	-3.410	2.304	-6.601
LiI	13.785	5.318	6.451	-2.182	-1.825	1.649	-3.299
NaF	77.357	29.976	36.308	-11.977	-10.042	9.425	-17.947
NaCl	20.670	9.235	10.705	-.637	-.761	4.128	.870
NaBr	15.883	7.309	8.400	-.040	-.243	3.455	1.731
NaI	6.703	3.179	3.622	.183	.050	1.584	1.215
KF	13.375	6.224	7.131	.112	-.093	3.001	1.809
KCl	8.333	4.177	4.688	.707	.432	2.272	2.726
KBr	7.156	3.574	4.015	.578	.348	1.933	2.265
KI	4.060	2.055	2.300	.387	.243	1.134	1.440
RbF	1.253	.630	.706	.110	.068	.344	.420
RbCl	6.057	3.203	3.544	.871	.592	1.878	2.941
RbBr	5.129	2.708	2.998	.729	.495	1.585	2.467
RbI	3.410	1.884	2.061	.663	.470	1.168	2.148

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

LiF	10.60
LiCl	14.43
LiBr	12.42
LiI	13.52
NaF	6.12
NaCl	6.93
NaBr	6.65
NaI	8.30
KF	6.72
KCl	5.75
KBr	5.52
KI	5.98
RbF	8.11
RbCl	5.60
RbBr	5.32
RbI	5.59

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

LiF	2.00
LiCl	3.23

LiBr	3.45
LiI	4.19
NaF	1.71
NaCl	2.51
NaBr	2.70
NaI	3.23
KF	1.76
KCl	2.23
KBr	2.36
KI	2.69
RbF	1.91
RbCl	2.23
RbBr	2.33
RbI	2.61

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-1.030	-1.095	-1.085	-1.157	-1.155	-1.125	-1.159
LiCl	-3.243	-3.368	-3.350	-3.487	-3.493	-3.429	-3.457
LiBr	-3.637	-3.788	-3.768	-3.920	-3.930	-3.859	-3.873
LiI	-5.295	-5.536	-5.504	-5.741	-5.759	-5.647	-5.655
NaF	-.718	-.745	-.741	-.766	-.768	-.757	-.757
NaCl	-1.857	-1.921	-1.913	-1.973	-1.981	-1.951	-1.936
NaBr	-2.143	-2.219	-2.210	-2.279	-2.289	-2.254	-2.230
NaI	-3.226	-3.325	-3.313	-3.408	-3.422	-3.374	-3.338
KF	-.909	-.915	-.914	-.920	-.921	-.918	-.916
KCl	-1.528	-1.555	-1.552	-1.575	-1.579	-1.567	-1.553
KBr	-1.707	-1.742	-1.738	-1.768	-1.774	-1.758	-1.739
KI	-2.257	-2.308	-2.302	-2.347	-2.355	-2.332	-2.302
RbF	-1.174	-1.175	-1.175	-1.177	-1.177	-1.176	-1.175
RbCl	-1.600	-1.617	-1.615	-1.629	-1.632	-1.624	-1.612
RbBr	-1.727	-1.750	-1.748	-1.766	-1.770	-1.761	-1.744
RbI	-2.163	-2.197	-2.193	-2.220	-2.227	-2.212	-2.181

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.776	.825	.818	.872	.870	.848	.874
LiCl	3.377	3.507	3.489	3.631	3.637	3.571	3.600
LiBr	4.487	4.673	4.648	4.836	4.849	4.760	4.778
LiI	7.299	7.631	7.588	7.914	7.939	7.785	7.796
NaF	.905	.938	.934	.965	.968	.953	.953
NaCl	3.121	3.228	3.215	3.316	3.329	3.279	3.254
NaBr	4.076	4.221	4.203	4.335	4.354	4.288	4.243
NaI	6.710	6.917	6.891	7.088	7.119	7.017	6.943
KF	1.712	1.723	1.722	1.732	1.734	1.728	1.725
KCl	3.947	4.016	4.008	4.068	4.079	4.048	4.010
KBr	4.961	5.063	5.052	5.138	5.155	5.110	5.054
KI	7.303	7.469	7.449	7.593	7.622	7.546	7.449
RbF	2.305	2.308	2.307	2.310	2.310	2.309	2.308
RbCl	4.593	4.642	4.636	4.677	4.686	4.664	4.628
RbBr	5.621	5.695	5.687	5.747	5.761	5.729	5.673
RbI	7.906	8.030	8.017	8.117	8.143	8.087	7.972

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	58.263	37.213	40.901	10.147	11.872	25.141	5.973
LiCl	83.270	51.393	56.457	14.251	13.077	33.095	19.590
LiBr	61.308	37.471	41.144	10.771	9.442	24.036	16.552
LiI	64.131	36.774	40.903	6.946	5.082	21.543	14.999
NaF	23.907	17.015	18.073	9.279	8.807	13.087	11.289
NaCl	25.207	17.659	18.745	9.772	8.817	13.413	13.958
NaBr	22.505	15.727	16.680	8.841	7.893	11.955	13.077
NaI	29.356	19.650	21.008	9.784	8.276	14.186	16.599
KF	25.390	18.048	19.110	10.229	9.146	13.797	15.005
KCl	18.344	13.241	13.935	8.193	7.246	10.361	12.635
KBr	16.631	11.921	12.557	7.319	6.461	9.292	11.352
KI	17.484	12.271	12.970	7.221	6.232	9.363	11.922
RbF	31.642	22.208	23.528	12.440	10.635	16.689	20.809
RbCl	16.859	12.324	12.920	7.994	7.008	9.768	12.845
RbBr	15.129	11.029	11.564	7.159	6.277	8.740	11.506
RbI	15.699	11.732	12.230	8.139	7.175	9.532	13.130

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	590.339	274.733	316.421	151.715	129.687	173.032	220.781
LiCl	993.835	459.857	522.896	255.391	226.134	291.871	360.013
LiBr	648.676	307.782	346.047	191.385	171.121	205.956	268.144
LiI	697.917	317.722	357.881	216.682	196.781	215.894	296.656
NaF	171.976	98.961	107.642	64.701	57.855	72.906	90.829
NaCl	193.529	113.234	122.116	77.031	69.211	85.166	112.866
NaBr	169.325	100.513	107.919	70.457	63.562	76.840	103.699
NaI	248.125	141.822	153.012	98.169	88.596	106.399	149.051
KF	194.783	114.836	123.785	76.915	68.578	85.685	116.834
KCl	130.812	81.300	86.515	58.484	52.574	63.416	90.563
KBr	116.559	72.491	77.068	52.949	47.800	56.945	80.962
KI	128.111	79.045	84.051	58.119	52.590	62.097	89.779
RbF	271.167	160.087	172.132	106.848	94.813	119.083	175.133
RbCl	120.763	77.523	81.958	57.161	51.394	61.555	91.516
RbBr	106.359	68.567	72.404	51.187	46.191	54.817	80.974
RbI	115.126	77.609	81.365	59.182	53.423	63.318	95.607

MODELO DE CAPAS SIMPLE

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

LiF	19.16
LiCl	29.42
LiBr	33.73
LiI	72.44
NaF	8.75
NaCl	11.25
NaBr	11.87
NaI	14.08
KF	7.93
KCl	8.10
KBr	8.60
KI	9.50
RbF	8.29
RbCl	7.67

RbBr	7.84
RbI	8.54

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

LiF	2.06
LiCl	3.36
LiBr	3.65
LiI	4.55
NaF	1.75
NaCl	2.61
NaBr	2.83
NaI	3.38
KF	1.77
KCl	2.28
KBr	2.43
KI	2.79
RbF	1.91
RbCl	2.27
RbBr	2.38
RbI	2.68

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-1.043	-1.127	-1.112	-1.245	-1.236	-1.179	-1.265
LiCl	-3.352	-3.532	-3.503	-3.755	-3.761	-3.641	-3.729
LiBr	-3.737	-4.005	-3.962	-4.328	-4.342	-4.165	-4.270
LiI	-5.487	-5.997	-5.915	-6.605	-6.638	-6.301	-6.469
NaF	-.695	-.740	-.732	-.793	-.796	-.766	-.780
NaCl	-1.824	-1.945	-1.927	-2.079	-2.094	-2.016	-2.013
NaBr	-2.056	-2.222	-2.198	-2.404	-2.428	-2.320	-2.301
NaI	-3.233	-3.427	-3.398	-3.635	-3.666	-3.540	-3.499
KF	-.902	-.913	-.912	-.925	-.927	-.920	-.918
KCl	-1.472	-1.533	-1.525	-1.596	-1.608	-1.569	-1.543
KBr	-1.589	-1.684	-1.670	-1.782	-1.800	-1.739	-1.700
KI	-2.136	-2.268	-2.249	-2.404	-2.430	-2.345	-2.284
RbF	-1.174	-1.176	-1.176	-1.177	-1.178	-1.177	-1.176
RbCl	-1.535	-1.581	-1.574	-1.627	-1.637	-1.607	-1.577
RbBr	-1.608	-1.679	-1.669	-1.750	-1.765	-1.720	-1.674
RbI	-2.022	-2.118	-2.106	-2.211	-2.235	-2.174	-2.087

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12}$ cm²/dyn

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.759	.821	.810	.907	.901	.859	.922
LiCl	3.356	3.537	3.507	3.760	3.766	3.645	3.733
LiBr	4.356	4.668	4.618	5.045	5.061	4.855	4.977
LiI	6.974	7.623	7.520	8.397	8.438	8.010	8.223
NaF	.855	.910	.901	.975	.979	.943	.960
NaCl	2.947	3.141	3.112	3.358	3.383	3.256	3.252
NaBr	3.724	4.025	3.981	4.355	4.398	4.202	4.169
NaI	6.429	6.813	6.758	7.228	7.289	7.040	6.958
KF	1.690	1.710	1.707	1.733	1.736	1.723	1.719
KCl	3.719	3.872	3.851	4.032	4.061	3.962	3.897
KBr	4.478	4.745	4.708	5.024	5.074	4.902	4.793
KI	6.663	7.074	7.016	7.498	7.579	7.314	7.124

RbF	2.305	2.308	2.308	2.311	2.311	2.310	2.308
RbCl	4.334	4.464	4.446	4.594	4.623	4.540	4.453
RbBr	5.115	5.340	5.310	5.566	5.616	5.472	5.324
RbI	7.172	7.514	7.470	7.844	7.930	7.713	7.405

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	160.141	99.166	110.379	14.703	20.580	62.074	- .309
LiCl	298.819	175.102	195.450	22.893	18.827	101.034	40.958
LiBr	369.617	207.625	233.805	12.003	3.626	110.876	47.110
LiI	1465.282	732.095	849.162	-142.010	-189.299	294.924	53.741
NaF	41.280	28.422	30.472	13.119	12.268	20.757	16.639
NaCl	54.954	36.495	39.263	15.905	13.542	25.580	26.004
NaBr	57.750	37.669	40.635	15.628	12.761	25.818	28.082
NaI	71.638	44.830	48.725	15.917	11.667	29.043	34.739
KF	32.751	22.832	24.288	12.014	10.541	16.983	18.457
KCl	31.216	21.508	22.871	11.407	9.564	15.816	19.921
KBr	33.321	22.417	23.952	11.042	8.997	16.021	20.461
KI	36.908	24.140	25.922	10.947	8.449	16.660	22.583
RbF	32.776	22.940	24.319	12.727	10.842	17.174	21.457
RbCl	27.426	19.170	20.287	10.915	9.074	14.352	19.851
RbBr	27.736	19.082	20.254	10.418	8.495	14.030	19.731
RbI	30.770	21.716	22.899	12.990	10.702	16.454	24.619

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	2573.145	1090.949	1299.975	441.653	370.679	583.075	678.238
LiCl	6233.487	2477.929	2940.057	971.671	853.767	1272.299	1392.835
LiBr	8422.361	3142.808	3767.702	1270.624	1137.840	1544.344	1798.888
LiI	61451.099	17901.195	22774.899	6541.224	6450.902	6448.956	7763.981
NaF	371.731	200.579	221.722	117.164	103.502	137.966	168.825
NaCl	567.396	299.652	330.342	177.234	156.909	205.244	274.698
NaBr	612.142	319.235	351.967	191.489	170.094	218.446	303.244
NaI	832.920	417.649	462.470	251.226	225.225	281.394	409.821
KF	277.013	158.028	171.506	101.473	89.975	114.559	157.478
KCl	266.971	154.377	166.455	103.411	92.004	114.052	169.498
KBr	293.227	165.376	178.938	110.771	98.931	121.064	181.507
KI	341.757	189.074	204.912	127.621	114.682	137.876	212.231
RbF	284.565	167.224	179.963	111.009	98.433	123.923	182.693
RbCl	229.396	137.988	147.487	95.976	85.436	104.679	163.738
RbBr	234.262	138.993	148.801	96.965	86.585	105.078	165.470
RbI	274.490	169.898	180.548	119.738	106.221	130.666	215.141

V³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	61660.388	17502.971	22585.747	311.502	1187.286	6757.099	-3119.521
LiCl	*****	49834.052	63991.284	1587.060	1145.435	17529.162	6086.098
LiBr	*****	66952.003	87342.340	-988.753	-2017.007	21269.952	8138.601
LiI	*****	*****	*****	*****	*****	*****	6731.771
NaF	4884.947	1990.479	2302.651	585.457	512.508	1114.628	1038.484
NaCl	8389.395	3277.233	3789.702	941.839	727.411	1767.728	2348.023
NaBr	9221.235	3518.045	4075.824	962.840	704.288	1859.141	2715.215
NaI	13642.748	4862.581	5688.988	1104.356	692.947	2408.645	4009.161
KF	3326.787	1464.604	1652.461	557.223	448.682	877.044	1265.916

KCl	3151.265	1401.081	1570.000	561.071	429.456	845.593	1487.419
KBr	3543.292	1509.318	1703.159	549.692	405.033	879.752	1578.722
KI	4286.301	1754.139	1990.569	581.974	399.767	985.412	1909.724
RbF	3429.117	1565.799	1747.796	661.525	516.468	962.756	1672.977
RbCl	2582.611	1211.272	1340.925	547.393	418.117	761.514	1506.123
RbBr	2643.512	1208.631	1343.105	520.470	388.548	745.002	1505.192
RbI	3240.272	1575.387	1730.655	766.940	583.414	1012.642	2218.192

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^{-2}/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-12.573	-7.786	-8.666	-1.154	-1.616	-4.874	.024
LiCl	-34.198	-20.039	-22.368	-2.620	-2.155	-11.563	-4.687
LiBr	-46.625	-26.191	-29.493	-1.514	-.457	-13.986	-5.943
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	-10.143	-6.984	-7.487	-3.223	-3.014	-5.100	-4.088
NaCl	-20.613	-13.689	-14.727	-5.966	-5.079	-9.595	-9.754
NaBr	-24.951	-16.275	-17.557	-6.752	-5.514	-11.155	-12.133
NaI	-34.157	-21.375	-23.232	-7.589	-5.563	-13.848	-16.564
KF	-13.668	-9.528	-10.136	-5.014	-4.399	-7.087	-7.702
KCl	-22.138	-15.253	-16.220	-8.090	-6.783	-11.216	-14.127
KBr	-26.544	-17.858	-19.081	-8.796	-7.167	-12.763	-16.299
KI	-33.784	-22.097	-23.728	-10.020	-7.734	-15.250	-20.672
RbF	-14.799	-10.358	-10.980	-5.747	-4.896	-7.754	-9.688
RbCl	-22.925	-16.024	-16.958	-9.124	-7.585	-11.997	-16.593
RbBr	-26.801	-18.438	-19.571	-10.066	-8.209	-13.557	-19.066
RbI	-34.333	-24.231	-25.551	-14.494	-11.942	-18.359	-27.470

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^{-2}/\text{dyn})^2$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	418.884	200.061	232.798	62.714	58.554	113.444	79.865
LiCl	3165.093	1402.007	1632.044	432.880	377.064	748.283	641.303
LiBr	5846.620	2431.716	2861.041	725.061	623.739	1226.674	1134.548
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	337.114	202.848	221.006	106.621	96.501	143.639	145.917
NaCl	1471.502	855.125	932.587	446.483	389.655	591.797	706.139
NaBr	2153.735	1227.470	1340.951	640.068	553.080	840.516	1059.648
NaI	4173.472	2280.252	2505.673	1139.005	966.328	1511.881	2042.757
KF	671.570	419.694	451.159	246.152	217.275	308.052	380.354
KCl	1920.637	1202.821	1288.411	725.708	630.061	886.647	1222.112
KBr	2771.523	1690.543	1818.519	992.644	856.124	1223.887	1709.768
KI	4647.448	2765.458	2984.553	1587.424	1353.996	1967.352	2868.470
RbF	851.961	542.271	579.408	331.687	289.098	403.823	551.655
RbCl	2201.879	1419.295	1509.805	901.401	779.603	1069.929	1581.401
RbBr	3052.832	1937.945	2066.283	1212.347	1043.623	1445.983	2163.100
RbI	5074.859	3328.432	3524.573	2183.439	1879.349	2542.506	4012.854

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^{-2}/\text{dyn})^3$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-21.223	-7.841	-9.557	-1.664	-1.661	-3.839	-1.641
LiCl	-442.635	-147.030	-179.463	-29.537	-25.494	-66.211	-48.143
LiBr	-1105.543	-336.020	-416.146	-58.193	-48.182	-140.227	-109.856
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	-17.324	-9.150	-10.149	-4.385	-3.928	-6.110	-6.343
NaCl	-160.473	-81.060	-90.022	-38.241	-32.856	-52.650	-65.927
NaBr	-281.698	-138.372	-154.071	-64.307	-54.497	-88.491	-118.069
NaI	-769.104	-358.474	-401.911	-157.553	-130.395	-220.899	-319.493

KF	-50.733	-28.385	-30.925	-15.564	-13.554	-19.880	-25.925
KCl	-254.407	-143.652	-155.689	-81.827	-70.085	-101.552	-149.686
KBr	-439.667	-240.069	-261.506	-132.188	-112.372	-166.215	-248.715
KI	-965.295	-511.793	-559.535	-274.353	-230.370	-347.683	-545.535
RbF	-75.071	-43.200	-46.694	-24.973	-21.467	-30.853	-45.067
RbCl	-321.478	-189.061	-203.101	-114.635	-97.882	-137.489	-218.645
RbBr	-526.880	-304.337	-327.765	-181.535	-154.282	-218.959	-352.703
RbI	-1128.670	-676.820	-723.514	-423.391	-359.090	-498.380	-856.194

OMEGA T							
	.10 ^{-13/s}						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	4.130	4.130	4.130	4.130	4.130	4.130	4.130
LiCl	2.788	2.788	2.788	2.788	2.788	2.788	2.788
LiBr	2.362	2.362	2.362	2.362	2.362	2.362	2.362
LiI	1.557	1.557	1.557	1.557	1.557	1.557	1.557
NaF	3.509	3.509	3.509	3.509	3.509	3.509	3.509
NaCl	2.409	2.409	2.409	2.409	2.409	2.409	2.409
NaBr	1.994	1.994	1.994	1.994	1.994	1.994	1.994
NaI	1.703	1.703	1.703	1.703	1.703	1.703	1.703
KF	2.875	2.875	2.875	2.875	2.875	2.875	2.875
KCl	2.087	2.087	2.087	2.087	2.087	2.087	2.087
KBr	1.640	1.640	1.640	1.640	1.640	1.640	1.640
KI	1.410	1.410	1.410	1.410	1.410	1.410	1.410
RbF	2.518	2.518	2.518	2.518	2.518	2.518	2.518
RbCl	1.779	1.779	1.779	1.779	1.779	1.779	1.779
RbBr	1.312	1.312	1.312	1.312	1.312	1.312	1.312
RbI	1.086	1.086	1.086	1.086	1.086	1.086	1.086

GAMMA T							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	5.163	3.468	3.780	1.120	1.283	2.437	.703
LiCl	6.507	4.257	4.627	1.488	1.414	2.910	1.817
LiBr	7.013	4.448	4.863	1.350	1.218	2.916	1.906
LiI	11.858	6.611	7.449	.355	.017	3.482	1.756
NaF	3.441	2.583	2.720	1.562	1.505	2.072	1.797
NaCl	3.855	2.880	3.026	1.792	1.667	2.303	2.326
NaBr	3.938	2.926	3.076	1.815	1.670	2.329	2.443
NaI	4.213	3.078	3.243	1.855	1.675	2.410	2.651
KF	3.325	2.550	2.664	1.705	1.590	2.093	2.208
KCl	3.407	2.636	2.744	1.834	1.688	2.184	2.510
KBr	3.474	2.658	2.773	1.807	1.653	2.179	2.511
KI	3.593	2.727	2.848	1.833	1.663	2.220	2.622
RbF	3.370	2.616	2.721	1.832	1.688	2.173	2.502
RbCl	3.350	2.633	2.730	1.916	1.756	2.214	2.692
RbBr	3.375	2.636	2.736	1.896	1.732	2.205	2.691
RbI	3.511	2.802	2.894	2.118	1.938	2.389	3.029

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.CAPAS)							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.589	.464	.487	.292	.304	.389	.261
LiCl	.807	.639	.667	.433	.428	.539	.458
LiBr	.995	.783	.817	.526	.515	.656	.572
LiI	1.265	.978	1.024	.637	.618	.808	.713
NaF	.572	.466	.483	.339	.332	.402	.368
NaCl	.927	.756	.782	.566	.544	.655	.659
NaBr	1.112	.905	.936	.678	.649	.783	.806

NaI	1.103	.894	.924	.669	.636	.771	.816
KF	.299	.246	.254	.188	.180	.215	.222
KCl	.763	.629	.648	.489	.464	.550	.607
KBr	.961	.787	.811	.605	.572	.684	.755
KI	1.101	.899	.927	.690	.650	.780	.874
RbF	.108	.089	.092	.070	.067	.079	.087
RbCl	.702	.583	.600	.465	.439	.514	.593
RbBr	.888	.734	.755	.581	.547	.645	.746
RbI	1.076	.906	.928	.742	.699	.807	.960

V⁻³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	8850.436	2887.315	3550.394	236.943	403.715	1377.782	-311.273
LiCl	17226.504	5521.348	6691.033	698.068	619.055	2560.218	1455.566
LiBr	9755.955	3204.871	3837.769	419.339	341.903	1537.773	1089.780
LiI	10535.563	3169.325	3842.628	84.531	-10.281	1387.294	946.545
NaF	1777.868	798.700	902.125	306.842	274.741	497.181	505.234
NaCl	2040.764	925.008	1035.794	383.164	320.648	580.163	777.959
NaBr	1695.704	778.827	867.880	336.476	278.385	495.564	709.804
NaI	2767.588	1183.528	1333.954	439.928	339.939	705.590	1111.512
KF	2098.268	971.043	1084.201	413.591	341.687	610.920	875.465
KCl	1232.290	610.923	670.378	306.569	251.605	408.686	675.700
KBr	1046.506	515.878	565.968	258.781	212.138	345.769	571.978
KI	1166.976	560.333	616.768	269.456	215.335	367.743	641.287
RbF	3219.529	1480.296	1650.130	634.366	497.494	916.251	1585.686
RbCl	1107.809	573.646	623.731	312.297	254.933	394.901	715.751
RbBr	927.997	481.096	522.550	264.596	216.368	333.084	602.478
RbI	1021.207	563.585	605.735	339.608	280.535	405.319	768.096

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^{-2}/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-8.264	-5.278	-5.802	-1.439	-1.684	-3.566	-.847
LiCl	-19.430	-11.992	-13.174	-3.325	-3.051	-7.723	-4.571
LiBr	-20.996	-12.833	-14.090	-3.689	-3.234	-8.231	-5.669
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	-8.405	-5.982	-6.354	-3.262	-3.096	-4.601	-3.969
NaCl	-15.343	-10.749	-11.410	-5.948	-5.367	-8.164	-8.496
NaBr	-17.346	-12.122	-12.857	-6.814	-6.084	-9.215	-10.079
NaI	-23.743	-15.893	-16.992	-7.913	-6.694	-11.474	-13.426
KF	-12.513	-8.895	-9.418	-5.041	-4.508	-6.800	-7.395
KCl	-18.344	-13.241	-13.935	-8.193	-7.246	-10.361	-12.636
KBr	-20.624	-14.782	-15.572	-9.076	-8.012	-11.523	-14.078
KI	-25.420	-17.841	-18.856	-10.499	-9.061	-13.612	-17.333
RbF	-14.611	-10.255	-10.865	-5.745	-4.911	-7.707	-9.609
RbCl	-19.298	-14.107	-14.789	-9.150	-8.022	-11.181	-14.703
RbBr	-21.539	-15.703	-16.464	-10.192	-8.936	-12.443	-16.380
RbI	-26.752	-19.993	-20.842	-13.870	-12.226	-16.244	-22.376

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^{-2}/\text{dyn})^{-2}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	201.562	106.909	120.590	45.536	43.075	69.545	54.853
LiCl	1214.428	628.908	704.805	274.858	245.761	401.648	384.861
LiBr	1542.335	813.435	904.965	383.785	341.317	534.205	551.943
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	246.609	157.791	169.518	94.168	86.689	118.941	123.728
NaCl	923.950	589.890	631.098	363.336	327.073	445.890	526.266

NaBr	1223.650	784.692	837.450	496.270	445.660	598.217	732.006
NaI	2395.234	1471.592	1580.842	882.287	776.474	1084.184	1401.886
KF	582.265	375.347	401.008	232.033	207.154	283.502	346.912
KCl	1441.668	965.200	1021.278	644.223	574.665	754.121	995.669
KBr	1900.272	1268.163	1341.867	850.316	759.626	992.243	1309.003
KI	3069.617	2016.965	2138.175	1333.617	1181.700	1561.519	2123.723
RbF	835.008	533.770	569.870	328.702	287.002	399.016	543.612
RbCl	1704.908	1167.371	1228.852	807.674	717.461	926.090	1295.341
RbBr	2222.420	1523.442	1602.850	1060.878	944.319	1212.429	1691.097
RbI	3549.951	2516.180	2630.507	1832.313	1635.517	2048.641	2958.083

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^2/\text{dyn})^{-3}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-7.567	-3.347	-3.884	-1.186	-1.148	-2.003	-1.323
LiCl	-115.736	-49.836	-57.334	-18.342	-16.342	-29.236	-26.996
LiBr	-172.554	-77.338	-87.902	-31.913	-28.233	-47.457	-48.576
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	-11.284	-6.535	-7.108	-3.692	-3.365	-4.735	-5.087
NaCl	-85.560	-49.681	-53.732	-29.179	-25.992	-36.229	-44.785
NaBr	-131.134	-76.655	-82.647	-46.326	-41.162	-56.480	-72.626
NaI	-364.782	-202.357	-219.841	-115.128	-100.208	-143.553	-196.041
KF	-41.785	-24.446	-26.414	-14.340	-12.650	-17.761	-22.902
KCl	-173.443	-107.484	-114.643	-69.450	-61.330	-81.686	-114.049
KBr	-266.088	-164.666	-175.564	-107.224	-94.895	-125.571	-174.924
KI	-558.258	-339.852	-362.991	-218.468	-191.913	-256.597	-368.924
RbF	-73.068	-42.306	-45.680	-24.669	-21.250	-30.364	-44.195
RbCl	-229.135	-146.345	-155.114	-98.537	-86.695	-113.287	-168.083
RbBr	-346.840	-222.394	-235.488	-151.246	-133.453	-173.076	-255.475
RbI	-705.526	-470.614	-494.824	-334.894	-296.134	-375.043	-574.708

OMEGA T

 $\cdot 10^{-13}/\text{s}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	5.305	5.305	5.305	5.305	5.305	5.305	5.305
LiCl	3.809	3.809	3.809	3.809	3.809	3.809	3.809
LiBr	3.651	3.651	3.651	3.651	3.651	3.651	3.651
LiI	3.317	3.317	3.317	3.317	3.317	3.317	3.317
NaF	4.017	4.017	4.017	4.017	4.017	4.017	4.017
NaCl	2.901	2.901	2.901	2.901	2.901	2.901	2.901
NaBr	2.488	2.488	2.488	2.488	2.488	2.488	2.488
NaI	2.099	2.099	2.099	2.099	2.099	2.099	2.099
KF	3.065	3.065	3.065	3.065	3.065	3.065	3.065
KCl	2.369	2.369	2.369	2.369	2.369	2.369	2.369
KBr	1.930	1.930	1.930	1.930	1.930	1.930	1.930
KI	1.675	1.675	1.675	1.675	1.675	1.675	1.675
RbF	2.540	2.540	2.540	2.540	2.540	2.540	2.540
RbCl	1.997	1.997	1.997	1.997	1.997	1.997	1.997
RbBr	1.511	1.511	1.511	1.511	1.511	1.511	1.511
RbI	1.269	1.269	1.269	1.269	1.269	1.269	1.269

GAMMA T

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	3.664	2.578	2.771	1.153	1.246	1.945	.924
LiCl	4.241	2.993	3.193	1.518	1.473	2.269	1.720
LiBr	3.897	2.778	2.953	1.494	1.433	2.135	1.756
LiI	3.969	2.773	2.957	1.430	1.350	2.092	1.772
NaF	2.977	2.294	2.400	1.508	1.462	1.897	1.703

NaCl	3.151	2.453	2.556	1.702	1.613	2.052	2.087
NaBr	3.103	2.426	2.524	1.714	1.618	2.040	2.135
NaI	3.353	2.585	2.695	1.784	1.663	2.144	2.323
KF	3.128	2.432	2.533	1.683	1.580	2.025	2.135
KCl	3.024	2.406	2.491	1.778	1.662	2.050	2.318
KBr	2.975	2.363	2.447	1.743	1.630	2.012	2.270
KI	3.042	2.407	2.494	1.771	1.649	2.044	2.346
RbF	3.343	2.599	2.704	1.829	1.687	2.164	2.489
RbCl	3.024	2.436	2.515	1.862	1.732	2.099	2.494
RbBr	2.975	2.397	2.474	1.834	1.707	2.067	2.452
RbI	3.050	2.511	2.580	2.005	1.871	2.204	2.692

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.CAPAS)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.538	.421	.440	.293	.299	.362	.280
LiCl	.742	.596	.618	.441	.434	.518	.470
LiBr	.889	.716	.741	.544	.533	.627	.592
LiI	1.109	.889	.920	.677	.661	.778	.749
NaF	.509	.420	.433	.337	.330	.376	.367
NaCl	.821	.687	.705	.564	.547	.618	.640
NaBr	.968	.813	.833	.677	.656	.736	.774
NaI	.976	.816	.837	.669	.645	.733	.782
KF	.265	.224	.229	.186	.180	.202	.213
KCl	.659	.563	.575	.481	.465	.515	.563
KBr	.813	.695	.709	.597	.577	.637	.696
KI	.937	.798	.815	.682	.657	.729	.804
RbF	.103	.086	.089	.070	.067	.077	.085
RbCl	.595	.515	.525	.452	.436	.476	.533
RbBr	.740	.642	.653	.565	.546	.594	.665
RbI	.913	.800	.813	.713	.688	.745	.848

Cálculos realizados sin tener en consideración los términos de van der Waals.

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

PARAMETROS DE LOS POTENCIALES CALCULADOS

Sal	Born-Landé		Born-Mayer		Hellmann		Wasastjerna	
	n	A/r ⁿ dyn.cm	ro cm	B dyn.cm	ro1 cm	B1 dyn.cm ²	beta.r	C.r ⁷ dyn.cm
LiF	5.878	.568E-12	.293E-08	.471E-09	.351E-08	.307E-17	14.778	.112E-05
LiCl	6.784	.385E-12	.330E-08	.806E-09	.386E-08	.680E-17	15.598	.181E-05
LiBr	7.000	.349E-12	.344E-08	.910E-09	.400E-08	.824E-17	15.795	.201E-05
LiI	7.260	.308E-12	.363E-08	.105E-08	.420E-08	.104E-16	16.034	.228E-05
NaF	6.987	.415E-12	.290E-08	.107E-08	.338E-08	.815E-17	15.784	.236E-05
NaCl	7.695	.310E-12	.324E-08	.164E-08	.372E-08	.153E-16	16.437	.347E-05
NaBr	7.932	.284E-12	.334E-08	.191E-08	.382E-08	.189E-16	16.657	.399E-05
NaI	8.306	.250E-12	.348E-08	.246E-08	.395E-08	.265E-16	17.006	.504E-05
KF	7.889	.319E-12	.301E-08	.205E-08	.344E-08	.182E-16	16.617	.430E-05
KCl	8.617	.248E-12	.327E-08	.334E-08	.370E-08	.351E-16	17.297	.674E-05
KBr	8.730	.233E-12	.339E-08	.352E-08	.383E-08	.389E-16	17.403	.707E-05
KI	9.001	.211E-12	.353E-08	.419E-08	.397E-08	.498E-16	17.658	.832E-05
RbF	8.543	.279E-12	.296E-08	.348E-08	.334E-08	.328E-16	17.227	.706E-05
RbCl	9.247	.220E-12	.322E-08	.560E-08	.361E-08	.622E-16	17.890	.110E-04
RbBr	9.333	.209E-12	.334E-08	.579E-08	.373E-08	.673E-16	17.971	.113E-04
RbI	9.516	.192E-12	.349E-08	.642E-08	.390E-08	.795E-16	18.144	.125E-04
Sal		Varshni-Shukla		V.S.modif.		Logaritmico		

RbCl	-.617	-.617	-.617	-.617	-.617	-.617	-.617
RbBr	-.565	-.565	-.565	-.565	-.565	-.565	-.565
RbI	-.499	-.499	-.499	-.499	-.499	-.499	-.499

DERIVADA SEGUNDA

 $\cdot 10^{-5}$ dyn/cm

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.566	.566	.566	.566	.566	.566	.566
LiCl	.308	.308	.308	.308	.308	.308	.308
LiBr	.258	.258	.258	.258	.258	.258	.258
LiI	.205	.205	.205	.205	.205	.205	.205
NaF	.431	.431	.431	.431	.431	.431	.431
NaCl	.260	.260	.260	.260	.260	.260	.260
NaBr	.225	.225	.225	.225	.225	.225	.225
NaI	.184	.184	.184	.184	.184	.184	.184
KF	.313	.313	.313	.313	.313	.313	.313
KCl	.207	.207	.207	.207	.207	.207	.207
KBr	.182	.182	.182	.182	.182	.182	.182
KI	.152	.152	.152	.152	.152	.152	.152
RbF	.286	.286	.286	.286	.286	.286	.286
RbCl	.192	.192	.192	.192	.192	.192	.192
RbBr	.169	.169	.169	.169	.169	.169	.169
RbI	.143	.143	.143	.143	.143	.143	.143

DERIVADA TERCERA

 $\cdot 10^{-13}$ dyn/cm²

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-2.216	-1.935	-1.987	-1.542	-1.572	-1.763	-1.465
LiCl	-1.053	-.933	-.953	-.790	-.783	-.862	-.822
LiBr	-.846	-.752	-.767	-.644	-.634	-.696	-.681
LiI	-.634	-.566	-.576	-.490	-.481	-.525	-.529
NaF	-1.673	-1.486	-1.515	-1.271	-1.254	-1.376	-1.345
NaCl	-.895	-.803	-.816	-.707	-.689	-.749	-.789
NaBr	-.749	-.673	-.684	-.598	-.581	-.629	-.677
NaI	-.587	-.530	-.537	-.475	-.461	-.497	-.552
KF	-1.156	-1.039	-1.055	-.921	-.896	-.971	-1.041
KCl	-.700	-.634	-.642	-.573	-.554	-.596	-.677
KBr	-.592	-.536	-.543	-.487	-.470	-.505	-.578
KI	-.474	-.431	-.436	-.394	-.380	-.406	-.474
RbF	-1.068	-.967	-.980	-.873	-.844	-.908	-1.027
RbCl	-.654	-.596	-.603	-.546	-.526	-.563	-.667
RbBr	-.556	-.507	-.513	-.466	-.449	-.479	-.571
RbI	-.448	-.409	-.413	-.377	-.363	-.387	-.466

DERIVADA CUARTA

 $\cdot 10^{-21}$ dyn/cm³

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	9.771	6.609	7.200	2.058	2.847	4.795	-.067
LiCl	4.010	2.827	3.017	1.383	1.445	2.159	1.223
LiBr	3.076	2.188	2.326	1.141	1.154	1.687	1.162
LiI	2.168	1.557	1.649	.867	.849	1.214	1.006
NaF	7.209	5.124	5.449	2.663	2.697	3.949	2.693
NaCl	3.395	2.475	2.605	1.503	1.417	1.962	2.054
NaBr	2.740	2.013	2.113	1.271	1.180	1.609	1.863
NaI	2.050	1.523	1.592	1.013	.923	1.232	1.630
KF	4.709	3.455	3.627	2.167	2.017	2.757	3.138
KCl	2.583	1.937	2.018	1.336	1.203	1.580	2.296
KBr	2.103	1.582	1.646	1.104	.990	1.294	1.939
KI	1.612	1.221	1.268	.875	.779	1.006	1.612

RbF	4.373	3.272	3.411	2.238	2.020	2.664	3.789
RbCl	2.428	1.851	1.918	1.355	1.200	1.534	2.598
RbBr	1.990	1.520	1.575	1.121	.991	1.263	2.177
RbI	1.527	1.172	1.212	.876	.772	.977	1.747

DERIVADA QUINTA							
.10 ⁻²⁹ dyn/cm ⁴							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-47.942	-22.578	-27.136	10.442	1.077	-10.265	31.093
LiCl	-16.826	-8.562	-9.843	.687	-.777	-4.540	5.267
LiBr	-12.306	-6.364	-7.256	.070	-.755	-3.470	2.576
LiI	-8.138	-4.287	-4.843	-.275	-.643	-2.410	.611
NaF	-34.179	-17.660	-20.143	.259	-2.067	-9.614	7.362
NaCl	-14.079	-7.632	-8.510	-1.318	-1.512	-4.487	-2.385
NaBr	-10.945	-6.020	-6.670	-1.349	-1.337	-3.616	-3.402
NaI	-7.791	-4.379	-4.808	-1.297	-1.126	-2.712	-4.238
KF	-20.940	-11.488	-12.742	-2.471	-2.502	-6.875	-5.962
KCl	-10.359	-5.921	-6.459	-2.064	-1.682	-3.751	-7.720
KBr	-8.113	-4.664	-5.076	-1.709	-1.368	-2.978	-6.650
KI	-5.930	-3.456	-3.743	-1.403	-1.088	-2.246	-5.936
RbF	-19.447	-11.072	-12.095	-3.727	-3.075	-6.978	-13.543
RbCl	-9.751	-5.750	-6.200	-2.522	-1.915	-3.791	-11.385
RbBr	-7.696	-4.556	-4.906	-2.048	-1.545	-3.019	-9.438
RbI	-5.622	-3.356	-3.604	-1.583	-1.181	-2.247	-7.603

VALOR DEL POTENCIAL TOTAL EN R DE EQUILIBRIO
.10⁻¹² ergios

Sal	#	Potenciales de Overlap						#	Pot. Elec.	#	Pot. V.d.W. dipol.	cuadr.
		B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.					
LiF	3.407	2.911	2.976	2.575	2.542	2.714	2.732	-20.0	.000	.000	.000	
LiCl	2.312	2.015	2.050	1.825	1.786	1.894	2.001	-15.7	.000	.000	.000	
LiBr	2.094	1.833	1.862	1.667	1.629	1.725	1.842	-14.7	.000	.000	.000	
LiI	1.851	1.627	1.651	1.487	1.451	1.534	1.659	-13.4	.000	.000	.000	
NaF	2.490	2.178	2.213	1.980	1.936	2.050	2.188	-17.4	.000	.000	.000	
NaCl	1.857	1.644	1.666	1.515	1.474	1.554	1.716	-14.3	.000	.000	.000	
NaBr	1.701	1.511	1.530	1.397	1.359	1.431	1.596	-13.5	.000	.000	.000	
NaI	1.499	1.338	1.354	1.245	1.208	1.270	1.440	-12.5	.000	.000	.000	
KF	1.911	1.696	1.718	1.568	1.525	1.606	1.788	-15.1	.000	.000	.000	
KCl	1.487	1.332	1.347	1.244	1.207	1.266	1.455	-12.8	.000	.000	.000	
KBr	1.399	1.255	1.269	1.174	1.138	1.194	1.378	-12.2	.000	.000	.000	
KI	1.268	1.141	1.152	1.071	1.037	1.087	1.268	-11.4	.000	.000	.000	
RbF	1.673	1.498	1.515	1.398	1.356	1.423	1.630	-14.3	.000	.000	.000	
RbCl	1.322	1.193	1.204	1.122	1.087	1.137	1.340	-12.2	.000	.000	.000	
RbBr	1.253	1.131	1.142	1.066	1.032	1.079	1.276	-11.7	.000	.000	.000	
RbI	1.154	1.044	1.054	.985	.954	.997	1.186	-11.0	.000	.000	.000	

Potenciales totales

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
LiF	-16.62	-17.11	-17.05	-17.45	-17.48	-17.31	-17.29
LiCl	-13.37	-13.67	-13.64	-13.86	-13.90	-13.79	-13.69
LiBr	-12.57	-12.83	-12.80	-12.99	-13.03	-12.94	-12.82
LiI	-11.59	-11.81	-11.78	-11.95	-11.98	-11.90	-11.78
NaF	-14.91	-15.22	-15.18	-15.42	-15.46	-15.35	-15.21
NaCl	-12.44	-12.65	-12.63	-12.78	-12.82	-12.74	-12.58
NaBr	-11.79	-11.98	-11.97	-12.10	-12.14	-12.06	-11.90
NaI	-10.95	-11.11	-11.10	-11.21	-11.24	-11.18	-11.01

KF	-13.17	-13.38	-13.36	-13.51	-13.55	-13.47	-13.29
KCl	-11.32	-11.48	-11.46	-11.57	-11.60	-11.54	-11.36
KBr	-10.82	-10.96	-10.95	-11.04	-11.08	-11.02	-10.84
KI	-10.14	-10.27	-10.26	-10.34	-10.37	-10.32	-10.14
RbF	-12.62	-12.80	-12.78	-12.90	-12.94	-12.87	-12.66
RbCl	-10.90	-11.03	-11.02	-11.10	-11.13	-11.08	-10.88
RbBr	-10.44	-10.56	-10.55	-10.63	-10.66	-10.61	-10.42
RbI	-9.83	-9.94	-9.93	-10.00	-10.03	-9.98	-9.79

Energía de la red		kcal/mol						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	
LiF	239.17	246.30	245.37	251.15	251.62	249.14	248.87	
LiCl	192.50	196.77	196.28	199.52	200.07	198.52	196.98	
LiBr	180.85	184.62	184.20	187.01	187.55	186.17	184.49	
LiI	166.74	169.97	169.62	171.98	172.50	171.31	169.50	
NaF	214.55	219.03	218.53	221.88	222.52	220.88	218.89	
NaCl	178.99	182.07	181.74	183.93	184.51	183.35	181.03	
NaBr	169.75	172.49	172.21	174.12	174.68	173.64	171.26	
NaI	157.65	159.97	159.74	161.32	161.84	160.95	158.51	
KF	189.51	192.61	192.29	194.46	195.08	193.91	191.28	
KCl	162.99	165.21	165.00	166.48	167.02	166.16	163.45	
KBr	155.69	157.76	157.56	158.92	159.44	158.64	155.99	
KI	145.98	147.80	147.63	148.81	149.29	148.58	145.97	
RbF	181.64	184.17	183.92	185.61	186.21	185.24	182.27	
RbCl	156.87	158.73	158.56	159.74	160.26	159.53	156.61	
RbBr	150.23	151.98	151.82	152.93	153.42	152.73	149.90	
RbI	141.44	143.02	142.88	143.86	144.32	143.70	140.97	

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.DIP.DEFORM.)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.538	.506	.510	.486	.485	.494	.495
LiCl	.690	.659	.662	.641	.637	.647	.658
LiBr	.986	.945	.950	.921	.916	.929	.947
LiI	1.180	1.134	1.139	1.108	1.101	1.117	1.141
NaF	.545	.523	.525	.509	.506	.514	.523
NaCl	.866	.836	.839	.819	.814	.824	.846
NaBr	1.046	1.012	1.016	.993	.987	.999	1.027
NaI	1.147	1.114	1.117	1.095	1.088	1.100	1.135
KF	.293	.283	.284	.278	.276	.280	.287
KCl	.752	.731	.733	.720	.716	.723	.748
KBr	.915	.890	.893	.877	.872	.881	.911
KI	1.171	1.142	1.145	1.127	1.119	1.130	1.171
RbF	.167	.163	.163	.160	.159	.161	.166
RbCl	.700	.683	.684	.674	.670	.676	.702
RbBr	.861	.841	.843	.831	.825	.833	.865
RbI	1.047	1.024	1.026	1.012	1.005	1.014	1.054

VALORES DE DB/DP

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	4.293	3.822	3.910	3.166	3.216	3.536	3.038
LiCl	4.595	4.146	4.218	3.610	3.582	3.878	3.728
LiBr	4.667	4.222	4.291	3.709	3.666	3.958	3.889
LiI	4.753	4.313	4.379	3.826	3.767	4.054	4.080
NaF	4.662	4.218	4.287	3.704	3.662	3.954	3.879
NaCl	4.898	4.466	4.526	4.016	3.933	4.212	4.399
NaBr	4.977	4.548	4.606	4.116	4.022	4.297	4.570

NaI	5.102	4.678	4.733	4.272	4.162	4.431	4.839
KF	4.963	4.533	4.592	4.098	4.006	4.282	4.539
KCl	5.206	4.785	4.837	4.399	4.277	4.542	5.062
KBr	5.243	4.824	4.875	4.444	4.318	4.582	5.142
KI	5.334	4.917	4.967	4.553	4.417	4.678	5.334
RbF	5.181	4.759	4.812	4.369	4.249	4.515	5.008
RbCl	5.416	5.001	5.049	4.650	4.506	4.764	5.568
RbBr	5.444	5.031	5.078	4.684	4.538	4.794	5.568
RbI	5.505	5.094	5.140	4.755	4.604	4.858	5.697

VALOR DE LA CONSTANTE DE FUERZA EN R DE EQUILIBRIO
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE A		$\cdot 10^{-5}$ dyn/cm					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.803	.803	.803	.803	.803	.803	.803
LiCl	.458	.458	.458	.458	.458	.458	.458
LiBr	.388	.388	.388	.388	.388	.388	.388
LiI	.311	.311	.311	.311	.311	.311	.311
NaF	.647	.647	.647	.647	.647	.647	.647
NaCl	.401	.401	.401	.401	.401	.401	.401
NaBr	.349	.349	.349	.349	.349	.349	.349
NaI	.289	.289	.289	.289	.289	.289	.289
KF	.484	.484	.484	.484	.484	.484	.484
KCl	.329	.329	.329	.329	.329	.329	.329
KBr	.289	.289	.289	.289	.289	.289	.289
KI	.244	.244	.244	.244	.244	.244	.244
RbF	.452	.452	.452	.452	.452	.452	.452
RbCl	.309	.309	.309	.309	.309	.309	.309
RbBr	.273	.273	.273	.273	.273	.273	.273
RbI	.231	.231	.231	.231	.231	.231	.231

DERIVADA PRIMERA		$\cdot 10^{-27}$ dyn/cm ⁴					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-12.925	-10.611	-11.040	-7.379	-7.625	-9.202	-6.751
LiCl	-3.950	-3.345	-3.442	-2.623	-2.584	-2.984	-2.781
LiBr	-2.797	-2.383	-2.447	-1.905	-1.865	-2.137	-2.072
LiI	-1.780	-1.526	-1.564	-1.245	-1.211	-1.376	-1.392
NaF	-7.783	-6.627	-6.806	-5.293	-5.183	-5.941	-5.749
NaCl	-2.889	-2.502	-2.556	-2.100	-2.026	-2.275	-2.442
NaBr	-2.171	-1.889	-1.927	-1.606	-1.544	-1.725	-1.904
NaI	-1.465	-1.284	-1.308	-1.111	-1.064	-1.179	-1.353
KF	-4.178	-3.633	-3.708	-3.082	-2.965	-3.315	-3.641
KCl	-1.866	-1.644	-1.672	-1.440	-1.376	-1.516	-1.790
KBr	-1.439	-1.270	-1.291	-1.117	-1.066	-1.173	-1.398
KI	-1.014	-.898	-.912	-.798	-.760	-.832	-1.014
RbF	-3.539	-3.114	-3.168	-2.721	-2.601	-2.869	-3.365
RbCl	-1.612	-1.434	-1.455	-1.283	-1.221	-1.332	-1.652
RbBr	-1.258	-1.120	-1.136	-1.005	-.956	-1.042	-1.299
RbI	-.897	-.801	-.812	-.722	-.686	-.746	-.942

DERIVADA SEGUNDA		$\cdot 10^{-50}$ dyn/cm ⁷					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	28.717	18.022	20.020	2.631	5.299	11.888	-4.558
LiCl	4.571	3.065	3.307	1.225	1.305	2.213	1.021
LiBr	2.690	1.827	1.961	.809	.822	1.340	.830

LiI	1.346	.927	.990	.454	.442	.692	.549
NaF	12.495	8.478	9.105	3.737	3.804	6.216	3.795
NaCl	2.725	1.917	2.031	1.064	.988	1.467	1.547
NaBr	1.755	1.248	1.318	.730	.667	.966	1.143
NaI	.958	.692	.726	.434	.388	.544	.746
KF	4.697	3.334	3.521	1.933	1.770	2.575	2.989
KCl	1.359	.993	1.039	.652	.577	.791	1.196
KBr	.916	.672	.702	.448	.395	.537	.839
KI	.536	.397	.414	.274	.239	.320	.536
RbF	3.561	2.594	2.717	1.687	1.495	2.060	3.048
RbCl	1.067	.796	.827	.563	.490	.647	1.146
RbBr	.733	.548	.570	.391	.340	.447	.806
RbI	.439	.330	.342	.240	.208	.270	.506

DERIVADA TERCERA

 $.10^{-73} \text{ dyn/cm}^{-10}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-81.403	-38.161	-45.990	19.258	4.136	-16.495	53.643
LiCl	-6.637	-3.435	-3.935	.205	-.299	-1.835	1.770
LiBr	-3.235	-1.706	-1.937	-.027	-.210	-.943	.512
LiI	-1.268	-.683	-.768	-.066	-.111	-.392	.028
NaF	-25.083	-13.219	-15.014	-.155	-1.597	-7.294	4.127
NaCl	-3.177	-1.768	-1.961	-.371	-.387	-1.066	-.695
NaBr	-1.749	-.989	-1.090	-.259	-.244	-.610	-.621
NaI	-.767	-.444	-.485	-.149	-.127	-.283	-.442
KF	-6.510	-3.671	-4.049	-.929	-.887	-2.255	-2.148
KCl	-1.208	-.712	-.772	-.275	-.224	-.464	-.923
KBr	-.711	-.421	-.456	-.170	-.137	-.277	-.592
KI	-.345	-.207	-.223	-.092	-.072	-.139	-.345
RbF	-4.376	-2.567	-2.789	-.963	-.792	-1.666	-3.145
RbCl	-.854	-.520	-.557	-.247	-.191	-.353	-.986
RbBr	-.516	-.315	-.338	-.153	-.118	-.215	-.624
RbI	-.259	-.159	-.170	-.081	-.062	-.110	-.342

VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE D

 $.10^{-10} \text{ e.s.u.}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-.305	-.305	-.305	-.305	-.305	-.305	-.305
LiCl	-.279	-.279	-.279	-.279	-.279	-.279	-.279
LiBr	-.592	-.592	-.592	-.592	-.592	-.592	-.592
LiI	-.689	-.689	-.689	-.689	-.689	-.689	-.689
NaF	-.382	-.382	-.382	-.382	-.382	-.382	-.382
NaCl	-.507	-.507	-.507	-.507	-.507	-.507	-.507
NaBr	-.645	-.645	-.645	-.645	-.645	-.645	-.645
NaI	-.621	-.621	-.621	-.621	-.621	-.621	-.621
KF	-.208	-.208	-.208	-.208	-.208	-.208	-.208
KCl	-.498	-.498	-.498	-.498	-.498	-.498	-.498
KBr	-.623	-.623	-.623	-.623	-.623	-.623	-.623
KI	-.739	-.739	-.739	-.739	-.739	-.739	-.739
RbF	-.117	-.117	-.117	-.117	-.117	-.117	-.117
RbCl	-.490	-.490	-.490	-.490	-.490	-.490	-.490
RbBr	-.607	-.607	-.607	-.607	-.607	-.607	-.607
RbI	-.667	-.667	-.667	-.667	-.667	-.667	-.667

DERIVADA PRIMERA

 $.10^{-12} \text{ e.s.u./cm}^{-3}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	3.656	2.791	2.880	2.405	2.373	2.551	2.571
LiCl	1.860	1.570	1.599	1.427	1.402	1.476	1.559
LiBr	3.321	2.846	2.893	2.610	2.562	2.688	2.861
LiI	3.087	2.687	2.726	2.487	2.440	2.551	2.738
NaF	3.572	3.059	3.110	2.804	2.752	2.889	3.073
NaCl	2.899	2.578	2.609	2.417	2.370	2.464	2.678
NaBr	3.197	2.870	2.900	2.705	2.653	2.752	3.008
NaI	2.533	2.303	2.324	2.188	2.146	2.218	2.443
KF	1.432	1.284	1.297	1.209	1.186	1.230	1.343
KCl	2.297	2.107	2.124	2.013	1.975	2.036	2.255
KBr	2.524	2.322	2.340	2.222	2.180	2.246	2.492
KI	2.513	2.327	2.343	2.235	2.194	2.256	2.513
RbF	.742	.679	.685	.648	.636	.656	.725
RbCl	2.103	1.957	1.969	1.886	1.852	1.900	2.125
RbBr	2.302	2.146	2.159	2.070	2.033	2.085	2.334
RbI	2.137	1.999	2.010	1.932	1.898	1.945	2.181

DERIVADA SEGUNDA

 $.10^{-35}$ e.s.u./cm⁻⁶

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-6.630	-2.973	-3.467	-.047	-.236	-1.555	.471
LiCl	-1.787	-1.078	-1.168	-.512	-.478	-.771	-.671
LiBr	-2.662	-1.673	-1.796	-.891	-.821	-1.239	-1.223
LiI	-1.954	-1.281	-1.363	-.755	-.689	-.980	-1.079
NaF	-4.778	-2.997	-3.219	-1.587	-1.464	-2.215	-2.173
NaCl	-2.304	-1.598	-1.681	-1.059	-.959	-1.275	-1.588
NaBr	-2.186	-1.554	-1.627	-1.079	-.976	-1.262	-1.651
NaI	-1.407	-1.035	-1.076	-.761	-.687	-.860	-1.197
KF	-1.360	-.963	-1.009	-.664	-.600	-.780	-1.012
KCl	-1.428	-1.075	-1.113	-.821	-.741	-.907	-1.315
KBr	-1.373	-1.042	-1.077	-.805	-.727	-.884	-1.298
KI	-1.140	-.880	-.907	-.697	-.630	-.755	-1.140
RbF	-.636	-.476	-.494	-.361	-.326	-.401	-.576
RbCl	-1.196	-.935	-.962	-.756	-.684	-.810	-1.251
RbBr	-1.154	-.907	-.932	-.738	-.668	-.787	-1.225
RbI	-.901	-.714	-.733	-.588	-.533	-.624	-.985

DERIVADA TERCERA

 $.10^{-57}$ e.s.u./cm⁻⁹

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	160.841	30.514	49.271	-88.272	-67.012	-20.345	-153.120
LiCl	22.440	8.630	10.478	-3.611	-3.014	2.649	-5.491
LiBr	27.735	11.580	13.700	-2.562	-2.307	4.466	-2.705
LiI	15.990	7.237	8.358	-.298	-.440	3.316	1.132
NaF	83.121	34.557	40.936	-7.985	-7.145	13.193	-8.784
NaCl	23.442	11.776	13.208	2.042	1.255	6.426	7.807
NaBr	19.040	10.007	11.091	2.605	1.758	5.821	8.880
NaI	9.890	5.518	6.024	2.040	1.457	3.463	6.578
KF	16.478	8.594	9.544	2.112	1.409	4.947	7.293
KCl	11.162	6.490	7.015	2.867	2.098	4.272	9.157
KBr	9.382	5.529	5.958	2.568	1.893	3.694	8.205
KI	6.462	3.923	4.198	2.015	1.505	2.705	6.466
RbF	6.874	3.960	4.290	1.686	1.228	2.580	5.389
RbCl	8.466	5.264	5.603	2.905	2.193	3.718	9.396
RbBr	7.192	4.507	4.789	2.543	1.926	3.208	8.250
RbI	4.708	2.997	3.174	1.765	1.345	2.167	5.766

LiF	10.98
LiCl	16.14
LiBr	11.57
LiI	13.50
NaF	6.08
NaCl	6.98
NaBr	6.71
NaI	7.81
KF	6.68
KCl	5.69
KBr	5.55
KI	5.72
RbF	7.40
RbCl	5.49
RbBr	5.33
RbI	5.62

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

LiF	2.00
LiCl	3.26
LiBr	3.43
LiI	4.19
NaF	1.71
NaCl	2.51
NaBr	2.70
NaI	3.20
KF	1.76
KCl	2.22
KBr	2.35
KI	2.68
RbF	1.90
RbCl	2.22
RbBr	2.32
RbI	2.61

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-1.046	-1.105	-1.097	-1.160	-1.158	-1.131	-1.162
LiCl	-3.346	-3.441	-3.428	-3.529	-3.536	-3.488	-3.497
LiBr	-3.524	-3.652	-3.636	-3.752	-3.765	-3.709	-3.692
LiI	-5.232	-5.415	-5.393	-5.554	-5.577	-5.497	-5.443
NaF	-.713	-.737	-.734	-.755	-.757	-.747	-.744
NaCl	-1.846	-1.897	-1.891	-1.936	-1.945	-1.921	-1.892
NaBr	-2.126	-2.187	-2.180	-2.230	-2.241	-2.214	-2.170
NaI	-3.075	-3.153	-3.145	-3.209	-3.227	-3.190	-3.114
KF	-.906	-.911	-.910	-.915	-.915	-.913	-.910
KCl	-1.502	-1.523	-1.521	-1.537	-1.542	-1.533	-1.508
KBr	-1.681	-1.707	-1.704	-1.724	-1.730	-1.719	-1.686
KI	-2.155	-2.195	-2.191	-2.220	-2.230	-2.213	-2.155
RbF	-1.153	-1.155	-1.154	-1.156	-1.156	-1.155	-1.154
RbCl	-1.561	-1.573	-1.572	-1.581	-1.585	-1.579	-1.558
RbBr	-1.698	-1.714	-1.713	-1.725	-1.729	-1.722	-1.694
RbI	-2.131	-2.156	-2.154	-2.172	-2.180	-2.168	-2.121

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^{-2}/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.786	.830	.824	.871	.870	.850	.873
LiCl	3.456	3.554	3.541	3.645	3.652	3.602	3.613
LiBr	4.370	4.528	4.509	4.653	4.669	4.599	4.578
LiI	7.217	7.468	7.438	7.660	7.692	7.581	7.508
NaF	.899	.928	.925	.951	.954	.941	.937
NaCl	3.100	3.187	3.177	3.253	3.267	3.227	3.179
NaBr	4.035	4.150	4.137	4.233	4.254	4.203	4.120
NaI	6.440	6.603	6.586	6.721	6.757	6.680	6.522
KF	1.706	1.716	1.715	1.723	1.724	1.720	1.713
KCl	3.885	3.939	3.933	3.975	3.988	3.964	3.900
KBr	4.889	4.964	4.957	5.014	5.032	4.999	4.903
KI	7.005	7.132	7.120	7.214	7.247	7.191	7.005
RbF	2.275	2.278	2.278	2.280	2.281	2.279	2.276
RbCl	4.506	4.543	4.539	4.566	4.576	4.560	4.500
RbBr	5.534	5.588	5.583	5.621	5.637	5.613	5.521
RbI	7.787	7.881	7.872	7.939	7.967	7.924	7.751

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	61.823	42.472	45.870	17.596	19.331	31.440	13.407
LiCl	102.421	72.661	77.260	38.980	37.030	55.627	47.278
LiBr	55.570	40.349	42.555	24.534	23.047	32.002	31.000
LiI	66.910	48.536	51.089	30.325	27.914	38.559	41.130
NaF	23.964	18.395	19.222	12.382	11.849	15.255	14.663
NaCl	26.406	20.634	21.408	15.052	13.985	17.429	20.102
NaBr	24.042	18.993	19.643	14.332	13.275	16.227	19.559
NaI	28.697	22.720	23.459	17.417	15.934	19.437	25.201
KF	25.953	20.500	21.233	15.139	13.988	17.380	20.692
KCl	19.379	15.828	16.256	12.742	11.747	13.857	18.212
KBr	18.288	15.017	15.403	12.248	11.307	13.221	17.535
KI	18.267	15.087	15.449	12.504	11.523	13.357	18.271
RbF	28.805	23.010	23.733	17.712	16.083	19.690	26.456
RbCl	18.051	15.007	15.349	12.537	11.519	13.321	18.706
RbBr	17.005	14.209	14.519	11.985	11.039	12.673	17.811
RbI	17.714	14.822	15.135	12.578	11.562	13.241	19.005

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	643.645	333.242	376.740	163.430	148.331	219.239	213.693
LiCl	1339.370	753.210	827.460	396.197	357.725	521.865	549.737
LiBr	569.157	345.041	371.616	216.220	196.495	258.889	301.323
LiI	747.589	459.631	492.501	295.470	267.478	348.912	429.776
NaF	173.187	112.002	119.484	75.375	68.573	87.202	103.007
NaCl	208.150	142.536	149.886	103.543	93.873	115.361	152.404
NaBr	187.175	131.791	137.781	99.436	90.426	108.846	147.904
NaI	245.219	175.068	182.401	134.203	121.445	145.557	210.514
KF	202.891	139.941	147.033	101.346	91.087	112.871	155.068
KCl	143.621	106.415	110.228	84.642	76.727	90.275	133.391
KBr	135.038	101.386	104.774	81.944	74.550	86.833	128.511
KI	139.483	106.592	109.801	87.911	80.183	92.338	139.516
RbF	243.175	173.164	180.561	130.943	116.839	142.370	218.916

RbCl	136.017	104.313	107.379	86.191	78.170	90.271	141.983
RbBr	127.434	98.758	101.495	82.528	75.119	86.085	134.682
RbI	137.806	107.655	110.478	90.781	82.712	94.314	149.838

V³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	9921.729	3787.084	4524.620	867.154	939.156	2032.228	651.498
LiCl	25587.253	11002.716	12623.070	3775.301	3301.267	6368.083	6172.015
LiBr	8259.576	3943.438	4402.691	1753.603	1528.273	2536.941	2964.055
LiI	11674.214	5661.436	6280.766	2639.254	2247.524	3683.305	4893.049
NaF	1799.452	960.060	1052.872	501.758	448.483	667.479	778.838
NaCl	2267.962	1306.015	1405.063	784.618	679.668	954.261	1415.489
NaBr	1962.149	1173.902	1252.791	750.101	649.993	882.010	1379.275
NaI	2779.666	1689.720	1795.674	1106.704	945.847	1277.430	2216.460
KF	2232.667	1307.122	1402.916	794.764	682.426	957.085	1498.075
KCl	1420.912	922.752	970.366	654.482	566.646	727.332	1277.839
KBr	1302.772	861.268	902.804	625.908	544.199	687.780	1213.663
KI	1345.094	909.282	949.176	680.231	592.090	736.526	1345.541
RbF	2835.801	1734.744	1842.634	1131.996	954.647	1302.767	2433.528
RbCl	1333.849	911.594	949.923	688.602	596.817	740.667	1417.087
RbBr	1218.132	844.707	878.193	649.322	565.632	693.458	1316.459
RbI	1338.533	936.283	971.758	727.741	633.515	772.584	1505.932

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-8.466	-5.816	-6.281	-2.410	-2.647	-4.305	-1.836
LiCl	-21.369	-15.160	-16.120	-8.133	-7.726	-11.606	-9.864
LiBr	-20.436	-14.839	-15.650	-9.023	-8.476	-11.769	-11.401
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	-8.471	-6.502	-6.795	-4.377	-4.188	-5.392	-5.183
NaCl	-15.965	-12.476	-12.943	-9.101	-8.455	-10.538	-12.154
NaBr	-18.368	-14.510	-15.007	-10.949	-10.142	-12.397	-14.942
NaI	-24.654	-19.519	-20.154	-14.963	-13.689	-16.699	-21.651
KF	-12.870	-10.166	-10.529	-7.507	-6.937	-8.619	-10.261
KCl	-19.590	-16.000	-16.432	-12.880	-11.874	-14.008	-18.409
KBr	-22.577	-18.539	-19.016	-15.121	-13.960	-16.322	-21.648
KI	-27.768	-22.935	-23.484	-19.007	-17.516	-20.305	-27.774
RbF	-14.581	-11.648	-12.014	-8.966	-8.142	-9.967	-13.393
RbCl	-21.067	-17.514	-17.914	-14.632	-13.444	-15.547	-21.831
RbBr	-24.175	-20.200	-20.640	-17.039	-15.693	-18.017	-25.321
RbI	-30.037	-25.133	-25.665	-21.328	-19.606	-22.453	-32.228

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^2/\text{dyn})^2$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	210.016	121.845	135.062	55.705	54.769	84.545	60.805
LiCl	1417.768	867.432	941.004	459.816	423.710	625.606	606.313
LiBr	1471.815	961.924	1026.580	594.938	548.514	739.814	795.738
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	249.129	175.319	185.061	117.997	110.214	141.072	150.185
NaCl	975.230	710.748	742.515	517.366	474.747	587.504	726.975
NaBr	1320.347	980.067	1019.418	739.507	678.404	822.645	1057.020
NaI	2502.538	1871.319	1941.636	1434.512	1304.706	1576.634	2169.818
KF	605.074	444.581	463.898	325.033	296.132	367.441	471.428
KCl	1571.081	1219.913	1258.332	976.112	892.305	1051.238	1467.257
KBr	2138.378	1675.596	1725.261	1360.337	1246.537	1454.682	2042.180
KI	3427.675	2717.189	2790.960	2246.246	2059.002	2378.763	3428.419

RbF	826.331	620.108	643.303	472.874	425.479	519.618	750.557
RbCl	1911.477	1523.551	1563.453	1265.685	1155.247	1335.004	1988.546
RbBr	2579.325	2072.026	2123.482	1739.420	1592.428	1826.545	2714.593
RbI	4113.461	3318.306	3397.288	2806.611	2568.073	2934.352	4445.448

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^{-2}/\text{dyn})^{-3}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	-8.013	-3.951	-4.497	-1.563	-1.536	-2.531	-1.692
LiCl	-143.189	-75.408	-83.616	-35.052	-31.747	-50.293	-49.536
LiBr	-161.565	-94.527	-102.347	-54.044	-49.092	-69.067	-77.024
LiI	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
NaF	-11.425	-7.419	-7.911	-4.757	-4.388	-5.763	-6.370
NaCl	-91.584	-62.263	-65.564	-43.518	-39.406	-49.917	-65.083
NaBr	-144.246	-100.355	-105.124	-72.996	-66.084	-81.902	-111.347
NaI	-383.693	-269.433	-281.421	-199.243	-178.684	-220.777	-324.570
KF	-43.848	-30.038	-31.596	-21.048	-18.899	-24.044	-32.729
KCl	-192.751	-142.354	-147.573	-110.977	-100.229	-120.047	-178.186
KBr	-307.794	-230.032	-237.942	-182.347	-165.161	-195.721	-291.985
KI	-637.045	-483.494	-498.643	-391.303	-354.723	-415.586	-637.202
RbF	-71.721	-50.520	-52.765	-37.109	-32.882	-41.113	-64.027
RbCl	-263.626	-201.358	-207.447	-163.812	-147.815	-173.238	-275.844
RbBr	-416.287	-321.255	-330.430	-264.575	-239.595	-278.417	-441.279
RbI	-844.865	-655.370	-673.302	-544.122	-492.484	-569.990	-923.247

OMEGA T

 $\cdot 10^{-13}/\text{s}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	5.231	5.231	5.231	5.231	5.231	5.231	5.231
LiCl	3.634	3.634	3.634	3.634	3.634	3.634	3.634
LiBr	3.757	3.757	3.757	3.757	3.757	3.757	3.757
LiI	3.319	3.319	3.319	3.319	3.319	3.319	3.319
NaF	4.025	4.025	4.025	4.025	4.025	4.025	4.025
NaCl	2.894	2.894	2.894	2.894	2.894	2.894	2.894
NaBr	2.480	2.480	2.480	2.480	2.480	2.480	2.480
NaI	2.146	2.146	2.146	2.146	2.146	2.146	2.146
KF	3.072	3.072	3.072	3.072	3.072	3.072	3.072
KCl	2.378	2.378	2.378	2.378	2.378	2.378	2.378
KBr	1.927	1.927	1.927	1.927	1.927	1.927	1.927
KI	1.701	1.701	1.701	1.701	1.701	1.701	1.701
RbF	2.634	2.634	2.634	2.634	2.634	2.634	2.634
RbCl	2.011	2.011	2.011	2.011	2.011	2.011	2.011
RbBr	1.510	1.510	1.510	1.510	1.510	1.510	1.510
RbI	1.266	1.266	1.266	1.266	1.266	1.266	1.266

GAMMA T

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	3.736	2.779	2.950	1.522	1.611	2.224	1.301
LiCl	4.544	3.518	3.678	2.341	2.274	2.924	2.623
LiBr	3.818	3.055	3.167	2.234	2.160	2.625	2.553
LiI	4.074	3.283	3.396	2.471	2.367	2.842	2.934
NaF	2.992	2.441	2.525	1.829	1.777	2.124	2.052
NaCl	3.230	2.706	2.778	2.183	2.085	2.408	2.644
NaBr	3.206	2.715	2.780	2.244	2.139	2.438	2.757
NaI	3.422	2.919	2.983	2.458	2.331	2.636	3.121
KF	3.190	2.671	2.741	2.155	2.045	2.372	2.685
KCl	3.150	2.718	2.771	2.332	2.209	2.474	3.005
KBr	3.141	2.723	2.774	2.358	2.235	2.488	3.042

KI	3.197	2.792	2.839	2.451	2.322	2.566	3.197
RbF	3.359	2.849	2.913	2.381	2.237	2.556	3.151
RbCl	3.203	2.801	2.847	2.467	2.330	2.574	3.291
RbBr	3.190	2.801	2.845	2.482	2.347	2.582	3.305
RbI	3.261	2.873	2.916	2.563	2.424	2.657	3.438

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.CAPAS)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
LiF	.526	.423	.440	.313	.319	.372	.300
LiCl	.699	.591	.607	.480	.473	.534	.513
LiBr	.961	.821	.839	.694	.681	.752	.758
LiI	1.147	.990	1.010	.854	.833	.913	.948
NaF	.519	.443	.453	.375	.368	.406	.409
NaCl	.841	.736	.749	.647	.629	.683	.738
NaBr	1.008	.890	.904	.795	.772	.831	.913
NaI	1.117	.994	1.009	.897	.869	.932	1.051
KF	.281	.248	.252	.220	.214	.231	.253
KCl	.720	.648	.656	.593	.575	.612	.699
KBr	.872	.787	.796	.726	.704	.746	.854
KI	1.118	1.015	1.026	.942	.913	.964	1.118
RbF	.160	.144	.145	.131	.126	.135	.154
RbCl	.664	.605	.611	.565	.548	.577	.675
RbBr	.815	.745	.752	.699	.678	.712	.832
RbI	.998	.915	.923	.858	.832	.874	1.032

Cálculos para sales de estructura de CsCl.

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO N.P.C.

PARAMETROS DE LOS POTENCIALES CALCULADOS

Sal	Born-Lande		Born-Mayer		Hellmann		Wasastjerna	
	n	A/r ⁿ	ro	B	ro1	B1	beta.r	C.r ⁷
	-	dyn.cm	cm	dyn.cm	cm	dyn.cm ²	-	dyn.cm
CsCl	8.952	.312E-12	.359E-08	.589E-08	.403E-08	.706E-16	17.612	.117E-04
CsBr	8.686	.339E-12	.384E-08	.490E-08	.433E-08	.610E-16	17.362	.986E-05
CsI	8.965	.315E-12	.397E-08	.604E-08	.446E-08	.802E-16	17.624	.120E-04
TlCl	7.541	.669E-12	.390E-08	.302E-08	.448E-08	.333E-16	16.294	.647E-05
TlBr	7.739	.653E-12	.393E-08	.361E-08	.451E-08	.412E-16	16.478	.764E-05
Sal	Varshni-Shukla		V.S.modif.		Logaritmico			
	k1.r ²	lam1	k2.r ^{3/2}	lam2	b/r ⁹	a		
	-	dyn.cm	-	dyn.cm	-	dyn.cm		
CsCl	5.476	.609E-10	6.968	.284E-09	.005	.583E-10		
CsBr	5.343	.577E-10	6.791	.257E-09	.036	.939E-11		
CsI	5.483	.620E-10	6.977	.290E-09	.004	.814E-10		
TlCl	4.770	.624E-10	6.027	.231E-09	.194	.346E-11		
TlBr	4.870	.676E-10	6.159	.259E-09	.163	.401E-11		

VALOR DEL POTENCIAL EN R DE EQUILIBRIO Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE R (PRIMERA A QUINTA)

POTENCIAL	.10 ⁻¹² dyn.cm						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	.312	.280	.283	.263	.255	.267	.311
CsBr	.339	.304	.308	.284	.276	.289	.333
CsI	.315	.284	.287	.266	.258	.270	.315

TlCl	.669	.591	.599	.543	.529	.558	.611
TlBr	.653	.578	.586	.533	.519	.547	.605

DERIVADA PRIMERA		$.10^{-4}$ dyn					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-.781	-.781	-.781	-.781	-.781	-.781	-.781
CsBr	-.792	-.792	-.792	-.792	-.792	-.792	-.792
CsI	-.715	-.715	-.715	-.715	-.715	-.715	-.715
TlCl	-1.516	-1.516	-1.516	-1.516	-1.516	-1.516	-1.516
TlBr	-1.469	-1.469	-1.469	-1.469	-1.469	-1.469	-1.469

DERIVADA SEGUNDA		$.10^{-5}$ dyn/cm					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	.218	.218	.218	.218	.218	.218	.218
CsBr	.206	.206	.206	.206	.206	.206	.206
CsI	.180	.180	.180	.180	.180	.180	.180
TlCl	.389	.389	.389	.389	.389	.389	.389
TlBr	.373	.373	.373	.373	.373	.373	.373

DERIVADA TERCERA		$.10^{-13}$ dyn/cm ²					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-.668	-.607	-.614	-.553	-.534	-.572	-.665
CsBr	-.592	-.537	-.544	-.487	-.470	-.505	-.577
CsI	-.499	-.454	-.459	-.414	-.399	-.427	-.498
TlCl	-1.116	-.999	-1.016	-.875	-.855	-.930	-.965
TlBr	-1.058	-.949	-.964	-.837	-.816	-.886	-.937

DERIVADA CUARTA		$.10^{-21}$ dyn/cm ³					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	2.235	1.691	1.757	1.206	1.076	1.392	2.204
CsBr	1.861	1.398	1.456	.972	.873	1.143	1.691
CsI	1.510	1.143	1.187	.816	.727	.941	1.495
TlCl	3.536	2.565	2.705	1.514	1.445	2.022	1.964
TlBr	3.305	2.413	2.538	1.476	1.388	1.916	2.045

DERIVADA QUINTA		$.10^{-29}$ dyn/cm ⁴					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-8.107	-4.713	-5.109	-1.881	-1.465	-3.053	-7.846
CsBr	-6.347	-3.641	-3.966	-1.309	-1.055	-2.318	-5.017
CsI	-4.948	-2.878	-3.119	-1.154	-.898	-1.866	-4.832
TlCl	-12.265	-6.584	-7.373	-.898	-1.196	-3.813	-.983
TlBr	-11.284	-6.134	-6.831	-1.120	-1.243	-3.621	-2.202

VALOR DEL POTENCIAL TOTAL EN R DE EQUILIBRIO

 $.10^{-12}$ ergios

#	Potenciales de Overlap						#	Pot. #	Pot.V.d.W.	
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	Elec.	dipol.	cuadr.
CsCl	2.493	2.243	2.266	2.103	2.038	2.135	2.487	-11.4	-1.738	-.063
CsBr	2.714	2.434	2.460	2.275	2.206	2.314	2.666	-10.9	-2.021	-.064
CsI	2.524	2.270	2.294	2.130	2.063	2.162	2.519	-10.3	-1.978	-.060
TlCl	5.351	4.725	4.791	4.342	4.229	4.463	4.892	-12.2	-4.451	-.178
TlBr	5.221	4.624	4.686	4.263	4.149	4.373	4.837	-11.8	-4.537	-.170

Potenciales totales							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.

CsCl	-10.69	-10.94	-10.92	-11.08	-11.15	-11.05	-10.70
CsBr	-10.30	-10.58	-10.56	-10.74	-10.81	-10.70	-10.35
CsI	-9.79	-10.05	-10.02	-10.19	-10.25	-10.15	-9.80
TlCl	-11.50	-12.13	-12.06	-12.51	-12.62	-12.39	-11.96
TlBr	-11.31	-11.91	-11.85	-12.27	-12.38	-12.16	-11.70

Energia de la red		kcal/mol					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
CsCl	153.92	157.53	157.20	159.53	160.48	159.07	154.02
CsBr	148.28	152.31	151.93	154.59	155.59	154.03	148.96
CsI	140.94	144.58	144.25	146.61	147.56	146.15	141.01
TlCl	165.51	174.52	173.57	180.04	181.65	178.29	172.12
TlBr	162.82	171.42	170.52	176.60	178.25	175.02	168.35

VALORES DE DLBS/DLWV (MOD.DIP.DEFORM.)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	.585	.571	.572	.563	.559	.565	.585
CsBr	.709	.690	.691	.679	.675	.682	.705
CsI	.992	.967	.969	.954	.948	.957	.992
TlCl	.463	.447	.449	.437	.435	.440	.451
TlBr	.555	.536	.538	.525	.522	.529	.543

VALORES DE DB/DP

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	5.748	5.140	5.213	4.605	4.410	4.790	5.722
CsBr	5.700	5.049	5.130	4.457	4.264	4.673	5.517
CsI	5.830	5.190	5.267	4.629	4.423	4.823	5.810
TlCl	5.404	4.450	4.586	3.436	3.272	3.889	4.175
TlBr	5.529	4.600	4.730	3.641	3.459	4.056	4.492

VALOR DE LA CONSTANTE DE FUERZA EN R DE EQUILIBRIO
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE A		$\cdot 10^{-5}$ dyn/cm					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	.318	.318	.318	.318	.318	.318	.318
CsBr	.282	.282	.282	.282	.282	.282	.282
CsI	.250	.250	.250	.250	.250	.250	.250
TlCl	.363	.363	.363	.363	.363	.363	.363
TlBr	.357	.357	.357	.357	.357	.357	.357

DERIVADA PRIMERA		$\cdot 10^{-27}$ dyn/cm ⁴					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-1.854	-1.577	-1.611	-1.335	-1.246	-1.419	-1.842
CsBr	-1.433	-1.202	-1.231	-.992	-.923	-1.069	-1.368
CsI	-1.093	-.925	-.945	-.778	-.724	-.829	-1.088
TlCl	-2.390	-1.780	-1.868	-1.132	-1.027	-1.421	-1.604
TlBr	-2.206	-1.675	-1.749	-1.128	-1.023	-1.365	-1.614

DERIVADA SEGUNDA		$\cdot 10^{-50}$ dyn/cm ⁷					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	1.304	.886	.936	.514	.413	.656	1.281
CsBr	.882	.580	.617	.301	.236	.413	.771
CsI	.571	.384	.407	.217	.172	.281	.564
TlCl	1.929	.938	1.081	-.134	-.205	.384	.325
TlBr	1.647	.849	.961	.011	-.068	.404	.520

DERIVADA TERCERA							
$\cdot 10^{-73} \text{ dyn/cm}^{10}$							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-1.091	-.573	-.634	-.137	-.065	-.316	-1.052
CsBr	-.645	-.321	-.360	-.039	-.003	-.160	-.491
CsI	-.354	-.183	-.203	-.039	-.015	-.098	-.344
TlCl	-1.869	-.520	-.708	.849	.804	.154	.737
TlBr	-1.468	-.467	-.603	.521	.516	.033	.247

VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE D							
$\cdot 10^{-10} \text{ e.s.u.}$							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-.472	-.472	-.472	-.472	-.472	-.472	-.472
CsBr	-.579	-.579	-.579	-.579	-.579	-.579	-.579
CsI	-.710	-.710	-.710	-.710	-.710	-.710	-.710
TlCl	-.574	-.574	-.574	-.574	-.574	-.574	-.574
TlBr	-.585	-.585	-.585	-.585	-.585	-.585	-.585

DERIVADA PRIMERA							
$\cdot 10^{-12} \text{ e.s.u./cm}^3$							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	1.786	1.559	1.578	1.454	1.409	1.477	1.779
CsBr	1.870	1.611	1.632	1.490	1.442	1.518	1.821
CsI	1.977	1.727	1.748	1.611	1.561	1.637	1.972
TlCl	2.206	1.730	1.772	1.518	1.463	1.580	1.839
TlBr	2.102	1.685	1.721	1.496	1.444	1.550	1.816

DERIVADA SEGUNDA							
$\cdot 10^{-35} \text{ e.s.u./cm}^6$							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-1.026	-.694	-.727	-.475	-.399	-.544	-1.012
CsBr	-.929	-.608	-.641	-.393	-.326	-.464	-.843
CsI	-.836	-.567	-.594	-.389	-.327	-.444	-.828
TlCl	-1.387	-.711	-.786	-.245	-.175	-.434	-.627
TlBr	-1.219	-.663	-.724	-.280	-.213	-.431	-.667

DERIVADA TERCERA							
$\cdot 10^{-57} \text{ e.s.u./cm}^9$							
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	7.301	3.542	3.936	.870	.221	1.844	7.086
CsBr	5.749	2.620	2.955	.360	-.101	1.225	4.603
CsI	4.382	2.132	2.367	.533	.143	1.115	4.288
TlCl	11.065	3.057	3.991	-3.023	-3.242	-.220	-.878
TlBr	8.942	2.822	3.527	-1.800	-2.102	.268	.838

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

CsCl	7.42
CsBr	7.15
CsI	6.62
TlCl	35.82
TlBr	26.68

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

CsCl	2.67
CsBr	2.77
CsI	3.03
TlCl	4.76

TlBr 5.07

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	-2.473	-2.489	-2.488	-2.499	-2.502	-2.496	-2.474
CaBr	-2.653	-2.678	-2.675	-2.692	-2.698	-2.688	-2.659
CaI	-3.095	-3.138	-3.133	-3.163	-3.174	-3.156	-3.096
TlCl	-8.390	-8.409	-8.407	-8.420	-8.422	-8.416	-8.406
TlBr	-9.410	-9.449	-9.445	-9.473	-9.479	-9.465	-9.441

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^{-2}/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	4.805	4.836	4.833	4.854	4.861	4.849	4.806
CaBr	5.836	5.890	5.885	5.922	5.934	5.913	5.848
CaI	7.448	7.551	7.541	7.613	7.638	7.595	7.450
TlCl	7.466	7.483	7.482	7.493	7.495	7.490	7.481
TlBr	8.245	8.279	8.276	8.300	8.305	8.293	8.272

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTADICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	28.327	21.239	22.060	15.322	13.137	17.324	28.032
CaBr	25.486	18.495	19.323	12.543	10.568	14.660	23.601
CaI	20.879	15.376	16.003	10.893	9.222	12.390	20.715
TlCl	313.012	125.100	150.795	-60.853	-91.847	20.710	82.367
TlBr	164.522	68.287	81.119	-24.502	-42.611	14.882	61.954

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	277.464	183.439	192.361	135.130	118.355	146.184	273.700
CaBr	240.656	153.841	162.074	111.820	98.637	121.216	218.824
CaI	192.679	128.730	134.614	97.893	86.944	104.389	190.863
TlCl	6869.144	2103.500	2492.531	1812.129	2027.000	1333.976	2164.257
TlBr	2888.104	1078.481	1224.626	914.027	979.623	761.930	1260.563

V³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	3552.709	1919.953	2061.467	1158.883	914.916	1349.953	3482.755
CaBr	2905.335	1481.310	1604.187	837.330	651.183	1008.057	2524.022
CaI	2140.460	1154.842	1238.177	706.749	557.590	817.876	2110.602
TlCl	*****	33240.901	44999.805	*****	*****	3286.689	24145.266
TlBr	67085.684	13034.210	16858.061	-5888.531	-9622.627	1983.093	14285.572

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^{-2}/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	-19.781	-14.832	-15.405	-10.699	-9.174	-12.097	-19.575
CaBr	-21.745	-15.780	-16.487	-10.701	-9.017	-12.508	-20.136
CaI	-23.034	-16.962	-17.654	-12.017	-10.174	-13.669	-22.853
TlCl	-37.026	-14.798	-17.838	7.198	10.865	-2.450	-9.743
TlBr	-27.403	-11.374	-13.511	4.081	7.097	-2.479	-10.319

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^{-2}/\text{dyn})^2$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
-----	------	------	----	----	------	--------	------

CsCl	1749.231	1222.569	1276.452	892.070	773.900	984.754	1727.858
CsBr	2095.571	1412.471	1482.729	996.882	862.951	1115.824	1919.584
CsI	2856.773	1997.780	2084.368	1469.258	1276.633	1615.130	2831.898
TlCl	4695.006	1554.711	1852.477	664.904	648.637	751.466	1414.243
TlBr	3002.687	1157.276	1332.908	547.848	501.230	642.253	1258.782

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^2/\text{dyn})^{-3}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-232.398	-150.250	-158.068	-105.296	-89.828	-117.097	-229.003
CsBr	-298.150	-183.864	-194.707	-123.916	-105.359	-140.027	-268.372
CsI	-527.952	-346.000	-363.110	-247.740	-212.910	-273.084	-522.624
TlCl	-879.776	-209.268	-260.536	-34.184	-16.195	-80.056	-182.204
TlBr	-473.836	-139.516	-166.295	-37.124	-23.852	-64.507	-154.440

OMEGA T $\cdot 10^{-13}/\text{s}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	1.809	1.809	1.809	1.809	1.809	1.809	1.809
CsBr	1.310	1.310	1.310	1.310	1.310	1.310	1.310
CsI	1.146	1.146	1.146	1.146	1.146	1.146	1.146
TlCl	1.110	1.110	1.110	1.110	1.110	1.110	1.110
TlBr	.939	.939	.939	.939	.939	.939	.939

GAMMA T

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	3.736	3.069	3.147	2.498	2.288	2.693	3.708
CsBr	3.623	2.928	3.012	2.318	2.117	2.538	3.432
CsI	3.535	2.911	2.984	2.381	2.185	2.561	3.516
TlCl	6.541	3.603	4.008	.662	.174	1.956	2.907
TlBr	5.376	3.258	3.543	1.185	.782	2.069	3.096

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.CAPAS)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	.535	.462	.469	.413	.394	.428	.532
CsBr	.648	.552	.561	.486	.464	.507	.625
CsI	.924	.796	.809	.709	.675	.735	.921
TlCl	.374	.290	.299	.239	.228	.258	.298
TlBr	.478	.376	.387	.307	.291	.333	.391

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)VALORES DE D $\cdot 10^{-10} \text{ e.s.u.}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-.472	-.472	-.472	-.472	-.472	-.472	-.472
CsBr	-.579	-.579	-.579	-.579	-.579	-.579	-.579
CsI	-.710	-.710	-.710	-.710	-.710	-.710	-.710
TlCl	-.574	-.574	-.574	-.574	-.574	-.574	-.574
TlBr	-.585	-.585	-.585	-.585	-.585	-.585	-.585

DERIVADA PRIMERA $\cdot 10^{-12} \text{ e.s.u./cm}^3$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	2.011	1.784	1.803	1.679	1.633	1.702	2.004
CsBr	2.114	1.854	1.876	1.733	1.686	1.762	2.064
CsI	2.226	1.976	1.996	1.860	1.810	1.885	2.220

TlCl	2.543	2.067	2.109	1.855	1.801	1.917	2.176
TlBr	2.414	1.997	2.033	1.808	1.756	1.862	2.128

DERIVADA SEGUNDA $.10^{-35}$ e.s.u./cm⁶

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-1.143	-0.800	-0.834	-0.576	-0.498	-0.646	-1.128
CsBr	-1.039	-0.706	-0.740	-0.486	-0.417	-0.559	-0.950
CsI	-0.931	-0.653	-0.681	-0.471	-0.407	-0.528	-0.923
TlCl	-1.576	-0.872	-0.950	-0.393	-0.321	-0.587	-0.794
TlBr	-1.381	-0.803	-0.866	-0.410	-0.339	-0.563	-0.814

DERIVADA TERCERA $.10^{-57}$ e.s.u./cm⁹

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	8.123	4.175	4.587	1.384	.693	2.395	7.900
CsBr	6.416	3.124	3.475	.760	.267	1.659	5.228
CsI	4.874	2.511	2.758	.842	.426	1.445	4.777
TlCl	12.548	4.044	5.031	-2.355	-2.626	.573	.082
TlBr	10.109	3.622	4.365	-1.236	-1.583	.921	1.662

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

CsCl	7.42
CsBr	7.15
CsI	6.62
TlCl	35.82
TlBr	26.68

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

CsCl	2.67
CsBr	2.77
CsI	3.03
TlCl	4.76
TlBr	5.07

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-2.463	-2.479	-2.477	-2.488	-2.492	-2.485	-2.463
CsBr	-2.638	-2.662	-2.660	-2.677	-2.682	-2.672	-2.643
CsI	-3.067	-3.110	-3.106	-3.136	-3.146	-3.128	-3.068
TlCl	-8.378	-8.397	-8.396	-8.408	-8.410	-8.404	-8.394
TlBr	-9.387	-9.427	-9.423	-9.451	-9.456	-9.442	-9.419

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $.10^{-12}$ cm²/dyn

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	4.784	4.815	4.812	4.833	4.841	4.828	4.785
CsBr	5.802	5.855	5.850	5.888	5.899	5.878	5.814
CsI	7.381	7.484	7.474	7.546	7.571	7.529	7.384
TlCl	7.456	7.473	7.471	7.482	7.484	7.479	7.470
TlBr	8.225	8.260	8.256	8.280	8.285	8.273	8.253

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	29.083	21.996	22.817	16.078	13.894	18.080	28.789

CsBr	26.339	19.348	20.176	13.396	11.421	15.513	24.454
CsI	21.721	16.217	16.845	11.735	10.064	13.232	21.557
TlCl	328.725	140.813	166.507	-45.140	-76.134	36.422	98.079
TlBr	172.980	76.745	89.577	-16.044	-34.153	23.340	70.412

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	289.053	192.030	201.310	141.103	123.370	153.060	285.161
CsBr	253.094	162.781	171.443	117.634	103.424	128.164	230.288
CsI	204.075	137.083	143.326	103.635	91.722	111.023	202.165
TlCl	7448.391	2345.898	2781.446	1716.075	1874.907	1386.977	2325.768
TlBr	3113.779	1177.653	1340.887	888.759	930.253	789.785	1349.577

V³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	3777.613	2060.441	2210.215	1253.436	994.738	1455.973	3704.040
CsBr	3134.731	1618.767	1750.664	927.245	727.576	1109.757	2728.589
CsI	2336.649	1277.445	1367.783	791.586	630.118	911.529	2304.544
TlCl	*****	40471.913	53923.876	*****	*****	6894.069	30674.990
TlBr	75123.269	15600.373	19889.204	-4135.087	-7677.082	3470.005	17122.220

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-20.309	-15.360	-15.933	-11.228	-9.702	-12.626	-20.103
CsBr	-22.473	-16.508	-17.215	-11.429	-9.745	-13.236	-20.864
CsI	-23.962	-17.891	-18.583	-12.946	-11.103	-14.597	-23.781
TlCl	-38.885	-16.657	-19.696	5.340	9.006	-4.308	-11.602
TlBr	-28.812	-12.783	-14.920	2.672	5.689	-3.888	-11.728

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^2/\text{dyn})^2$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	1811.067	1273.559	1328.736	933.590	811.956	1029.540	1789.229
CsBr	2188.525	1487.223	1559.707	1055.358	916.088	1180.202	2007.470
CsI	3001.162	2117.667	2207.143	1568.114	1367.734	1721.173	2975.533
TlCl	5048.188	1739.054	2060.136	679.604	635.248	840.877	1558.042
TlBr	3214.200	1275.144	1463.426	573.597	509.136	707.326	1369.130

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^2/\text{dyn})^3$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-242.751	-157.795	-165.914	-110.909	-94.773	-123.294	-239.235
CsBr	-314.978	-195.656	-207.045	-132.305	-112.698	-149.478	-283.823
CsI	-560.663	-370.220	-388.233	-266.166	-229.293	-293.250	-555.075
TlCl	-970.588	-240.933	-298.163	-43.716	-24.685	-94.396	-208.268
TlBr	-518.702	-157.517	-187.023	-43.730	-29.401	-73.959	-172.619

OMEGA T $\cdot 10^{-13}/\text{s}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	1.809	1.809	1.809	1.809	1.809	1.809	1.809
CsBr	1.310	1.310	1.310	1.310	1.310	1.310	1.310
CsI	1.146	1.146	1.146	1.146	1.146	1.146	1.146
TlCl	1.110	1.110	1.110	1.110	1.110	1.110	1.110
TlBr	.939	.939	.939	.939	.939	.939	.939

GAMMA T

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	3.775	3.108	3.186	2.537	2.327	2.732	3.747

CsBr	3.668	2.973	3.057	2.363	2.162	2.583	3.477
CsI	3.582	2.957	3.030	2.427	2.231	2.607	3.562
TlCl	6.748	3.810	4.215	.869	.381	2.163	3.113
TlBr	5.522	3.404	3.689	1.331	.928	2.215	3.241

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.CAPAS)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	.572	.499	.506	.450	.431	.465	.569
CsBr	.695	.599	.609	.534	.511	.555	.673
CsI	.986	.858	.871	.771	.737	.797	.983
TlCl	.418	.334	.343	.283	.272	.302	.342
TlBr	.525	.423	.434	.353	.337	.379	.437

radicando negativo TlCl

MODELO DE CAPAS SIMPLE

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

CsCl	10.63
CsBr	11.05
CsI	10.64
TlCl	*****
TlBr	529.30

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

CsCl	2.70
CsBr	2.82
CsI	3.12
TlCl	4.80
TlBr	5.15

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-2.370	-2.414	-2.408	-2.452	-2.466	-2.439	-2.372
CsBr	-2.491	-2.561	-2.553	-2.626	-2.647	-2.602	-2.511
CsI	-2.839	-2.959	-2.945	-3.064	-3.103	-3.028	-2.843
TlCl	-8.088	-8.224	-8.204	-8.367	-8.391	-8.303	-8.263
TlBr	-9.145	-9.320	-9.295	-9.500	-9.535	-9.422	-9.340

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	4.548	4.631	4.621	4.705	4.732	4.679	4.551
CsBr	5.383	5.536	5.517	5.675	5.721	5.625	5.426
CsI	6.643	6.923	6.889	7.169	7.259	7.084	6.652
TlCl	7.138	7.257	7.240	7.384	7.405	7.327	7.292
TlBr	7.899	8.051	8.030	8.207	8.236	8.139	8.068

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	53.363	39.380	41.056	27.080	22.587	31.334	52.762
CsBr	55.378	39.388	41.366	24.848	20.097	30.155	50.877
CsI	49.206	35.404	37.056	23.283	18.832	27.465	48.774

TlCl 3179.317 1226.650 1506.350 -847.861 -1183.279 78.843 663.467
 TlBr 63542.911 25754.955 31023.602 ***** ***** 3618.022 21352.813

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	647.443	407.217	430.870	276.918	235.252	308.808	637.120
CsBr	675.548	403.669	430.697	262.705	223.617	297.125	600.935
CsI	585.086	362.520	384.044	247.551	211.426	274.165	578.107
TlCl	*****	*****	*****	4373.322	-7858.179	12984.704	10826.376
TlBr	*****	*****	*****	*****	*****	*****	*****

V³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	10864.984	5489.196	5966.490	2961.539	2226.351	3606.804	10614.675
CsBr	11383.457	5314.793	5853.602	2568.738	1872.868	3301.326	9594.155
CsI	9386.036	4601.391	5019.102	2406.419	1767.879	2964.091	9222.746
TlCl	*****	56869.789	*****	*****	*****	*****	*****
TlBr	*****	*****	*****	*****	*****	*****	*****

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-26.011	-19.195	-20.012	-13.199	-11.009	-15.273	-25.718
CsBr	-30.572	-21.745	-22.836	-13.718	-11.095	-16.647	-28.087
CsI	-33.747	-24.282	-25.414	-15.968	-12.916	-18.836	-33.452
TlCl	115.820	44.686	54.875	-30.887	-43.106	2.872	24.170
TlBr	-533.557	-216.259	-260.499	111.327	173.653	-30.380	-179.295

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^2/\text{dyn})^2$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	2615.123	1751.672	1842.184	1196.698	1008.949	1355.389	2578.004
CsBr	3460.266	2202.444	2335.786	1416.531	1183.188	1646.026	3112.651
CsI	4841.407	3190.778	3362.718	2144.146	1790.340	2439.888	4789.698
TlCl	20940.382	663.673	2377.161	369.298	2670.527	-2101.453	-2488.413
TlBr	*****	*****	*****	33818.984	67026.906	13135.489	83698.451

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^2/\text{dyn})^3$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	-395.776	-238.846	-254.003	-152.721	-125.415	-175.753	-388.779
CsBr	-583.126	-327.519	-352.198	-193.662	-156.791	-230.308	-510.261
CsI	-1043.676	-622.539	-662.926	-394.539	-322.124	-454.797	-1029.991
TlCl	5652.213	-87.616	78.607	283.618	-67.157	165.536	-130.258
TlBr	*****	*****	*****	13406.001	37652.918	-3223.876	*****

OMEGA T $\cdot 10^{-13}/\text{s}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	1.568	1.568	1.568	1.568	1.568	1.568	1.568
CsBr	1.103	1.103	1.103	1.103	1.103	1.103	1.103
CsI	.954	.954	.954	.954	.954	.954	.954
TlCl	.641	.641	.641	.641	.641	.641	.641
TlBr	.219	.219	.219	.219	.219	.219	.219

GAMMA T

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	4.360	3.513	3.615	2.769	2.497	3.027	4.323
CsBr	4.372	3.445	3.560	2.603	2.327	2.910	4.111
CsI	4.305	3.451	3.553	2.701	2.426	2.960	4.278

DERIVADA SEGUNDA		$\cdot 10^{-5}$ dyn/cm						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.	
CsCl	.135	.135	.135	.135	.135	.135	.135	
CsBr	.120	.120	.120	.120	.120	.120	.120	
CsI	.102	.102	.102	.102	.102	.102	.102	
TlCl	.164	.164	.164	.164	.164	.164	.164	
TlBr	.179	.179	.179	.179	.179	.179	.179	
TlBr	.159	.159	.159	.159	.159	.159	.159	

DERIVADA TERCERA		$\cdot 10^{-13}$ dyn/cm ²						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.	
CsCl	-.492	-.454	-.458	-.427	-.409	-.432	-.559	
CsBr	-.426	-.394	-.397	-.372	-.356	-.376	-.491	
CsI	-.347	-.321	-.323	-.303	-.291	-.306	-.404	
TlCl	-.632	-.583	-.588	-.548	-.525	-.555	-.716	
TlBr	-.799	-.747	-.751	-.718	-.688	-.719	-1.013	
TlBr	-.634	-.588	-.592	-.558	-.534	-.562	-.750	

DERIVADA CUARTA		$\cdot 10^{-21}$ dyn/cm ³						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.	
CsCl	1.928	1.523	1.563	1.234	1.073	1.303	2.899	
CsBr	1.625	1.290	1.322	1.057	.919	1.108	2.546	
CsI	1.265	1.008	1.032	.834	.725	.870	2.055	
TlCl	2.632	2.077	2.132	1.678	1.460	1.776	3.919	
TlBr	3.807	3.128	3.181	2.742	2.386	2.764	7.792	
TlBr	2.714	2.174	2.223	1.817	1.578	1.883	4.582	

DERIVADA QUINTA		$\cdot 10^{-29}$ dyn/cm ⁴						
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.	
CsCl	-8.098	-5.111	-5.395	-3.088	-2.227	-3.645	-18.889	
CsBr	-6.631	-4.224	-4.447	-2.634	-1.898	-3.042	-16.707	
CsI	-4.934	-3.169	-3.329	-2.031	-1.463	-2.303	-13.299	
TlCl	-11.753	-7.401	-7.817	-4.436	-3.201	-5.266	-26.905	
TlBr	-19.243	-13.091	-13.562	-9.743	-7.109	-10.063	-78.265	
TlBr	-12.403	-8.038	-8.424	-5.294	-3.814	-5.894	-35.836	

VALOR DEL POTENCIAL TOTAL EN R DE EQUILIBRIO
 $\cdot 10^{-12}$ ergios

#	Potenciales de Overlap						#	Pot. #	Pot. V.d.W.	#	Pot. dipol. cuadr.
	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.					
Sal	1.049	.961	.968	.918	.887	.922	1.153	-11.5	.000	.000	
CsCl	.977	.897	.903	.858	.829	.862	1.087	-10.9	.000	.000	
CsBr	.899	.827	.832	.792	.765	.795	1.011	-10.3	.000	.000	
TlCl	1.126	1.031	1.038	.984	.951	.989	1.235	-12.2	.000	.000	
TlBr	.876	.815	.819	.790	.763	.788	1.064	-11.8	.000	.000	
TlBr	1.010	.930	.936	.893	.862	.895	1.149	-11.8	.000	.000	

Potenciales totales

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
CsCl	-10.40	-10.49	-10.48	-10.53	-10.56	-10.53	-10.30
CsBr	-9.95	-10.03	-10.03	-10.07	-10.10	-10.07	-9.84
CsI	-9.38	-9.45	-9.45	-9.49	-9.51	-9.48	-9.27
TlCl	-11.10	-11.19	-11.18	-11.24	-11.27	-11.23	-10.99
TlBr	-10.90	-10.96	-10.96	-10.99	-11.02	-10.99	-10.72
TlBr	-10.82	-10.90	-10.89	-10.93	-10.96	-10.93	-10.68

Energía de la red	kcal/mol							
	Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
CsCl	149.71	150.97	150.88	151.60	152.05	151.53	148.20	
CsBr	143.24	144.40	144.31	144.95	145.38	144.91	141.66	
CsI	134.99	136.03	135.95	136.53	136.92	136.49	133.38	
TlCl	159.70	161.06	160.96	161.74	162.22	161.66	158.13	
TlBr	156.93	157.80	157.75	158.17	158.56	158.19	154.23	
TlBr	155.69	156.83	156.75	157.37	157.81	157.34	153.69	

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.DIP.DEFORM.)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	.701	.689	.690	.683	.679	.684	.716
CsBr	.891	.877	.878	.870	.865	.871	.912
CsI	1.169	1.151	1.152	1.143	1.136	1.143	1.198
TlCl	.590	.580	.581	.575	.572	.576	.603
TlBr	.917	.907	.908	.903	.898	.903	.951
TlBr	.807	.795	.796	.790	.785	.790	.829

VALORES DE DB/DP

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	5.972	5.571	5.610	5.288	5.104	5.346	6.675
CsBr	6.061	5.662	5.700	5.387	5.198	5.438	6.860
CsI	6.145	5.748	5.784	5.480	5.286	5.525	7.034
TlCl	5.951	5.550	5.590	5.265	5.082	5.325	6.632
TlBr	6.816	6.429	6.459	6.211	5.989	6.216	8.418
TlBr	6.237	5.842	5.878	5.583	5.384	5.621	7.226

VALOR DE LA CONSTANTE DE FUERZA EN R DE EQUILIBRIO
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE A	$\cdot 10^{-5}$ dyn/cm							
	Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsCl	.300	.300	.300	.300	.300	.300	.300	.300
CsBr	.268	.268	.268	.268	.268	.268	.268	.268
CsI	.228	.228	.228	.228	.228	.228	.228	.228
TlCl	.363	.363	.363	.363	.363	.363	.363	.363
TlBr	.410	.410	.410	.410	.410	.410	.410	.410
TlBr	.357	.357	.357	.357	.357	.357	.357	.357

DERIVADA PRIMERA	$\cdot 10^{-27}$ dyn/cm ⁴						
	Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.
CsCl	-1.874	-1.700	-1.717	-1.577	-1.496	-1.602	-2.181
CsBr	-1.486	-1.351	-1.364	-1.258	-1.194	-1.275	-1.756
CsI	-1.073	-.978	-.987	-.914	-.867	-.924	-1.286
TlCl	-2.741	-2.484	-2.510	-2.302	-2.185	-2.340	-3.176
TlBr	-3.335	-3.085	-3.104	-2.943	-2.799	-2.946	-4.373
TlBr	-2.610	-2.384	-2.405	-2.236	-2.123	-2.258	-3.175

DERIVADA SEGUNDA	$\cdot 10^{-50}$ dyn/cm ⁷						
	Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.
CsCl	1.443	1.124	1.155	.897	.771	.952	2.206
CsBr	1.011	.793	.813	.641	.550	.674	1.612
CsI	.617	.486	.498	.397	.341	.415	1.020
TlCl	2.555	1.988	2.044	1.581	1.359	1.681	3.868
TlBr	3.239	2.641	2.688	2.301	1.988	2.321	6.747

TlBr	2.324	1.841	1.885	1.522	1.308	1.581	3.995
------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

DERIVADA TERCERA

 $.10^{-73} \text{ dyn/cm}^{-10}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	-1.319	-.858	-.902	-.543	-.404	-.628	-2.918
CaBr	-.816	-.535	-.561	-.349	-.259	-.396	-1.942
CaI	-.419	-.277	-.290	-.185	-.137	-.207	-1.064
TlCl	-2.832	-1.837	-1.933	-1.155	-.860	-1.343	-6.152
TlBr	-3.657	-2.552	-2.637	-1.948	-1.464	-2.003	-13.814
TlBr	-2.441	-1.628	-1.700	-1.113	-.828	-1.224	-6.625

VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE D

 $.10^{-10} \text{ e.s.u.}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	-.487	-.487	-.487	-.487	-.487	-.487	-.487
CaBr	-.592	-.592	-.592	-.592	-.592	-.592	-.592
CaI	-.695	-.695	-.695	-.695	-.695	-.695	-.695
TlCl	-.523	-.523	-.523	-.523	-.523	-.523	-.523
TlBr	-.558	-.558	-.558	-.558	-.558	-.558	-.558
TlBr	-.585	-.585	-.585	-.585	-.585	-.585	-.585

DERIVADA PRIMERA

 $.10^{-12} \text{ e.s.u./cm}^3$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	2.568	2.398	2.411	2.323	2.271	2.331	2.805
CaBr	2.786	2.612	2.625	2.536	2.481	2.542	3.064
CaI	2.779	2.615	2.627	2.544	2.491	2.549	3.076
TlCl	3.340	3.115	3.132	3.016	2.948	3.026	3.640
TlBr	3.952	3.796	3.806	3.734	3.671	3.730	4.526
TlBr	3.653	3.451	3.465	3.364	3.295	3.368	4.070

DERIVADA SEGUNDA

 $.10^{-35} \text{ e.s.u./cm}^6$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	-1.728	-1.380	-1.410	-1.177	-1.049	-1.213	-2.367
CaBr	-1.661	-1.341	-1.369	-1.157	-1.035	-1.187	-2.336
CaI	-1.403	-1.143	-1.165	-.996	-.893	-1.018	-2.018
TlCl	-2.720	-2.167	-2.215	-1.841	-1.640	-1.902	-3.701
TlBr	-3.421	-2.945	-2.979	-2.707	-2.471	-2.708	-5.605
TlBr	-2.863	-2.357	-2.398	-2.075	-1.865	-2.110	-4.216

DERIVADA TERCERA

 $.10^{-57} \text{ e.s.u./cm}^9$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	14.136	9.162	9.607	6.080	4.443	6.780	26.928
CaBr	12.004	7.930	8.287	5.453	4.041	5.969	24.098
CaI	8.550	5.742	5.983	4.064	3.047	4.385	17.955
TlCl	26.956	17.390	18.249	11.437	8.328	12.815	50.694
TlBr	35.024	25.849	26.531	21.070	16.782	21.308	95.367
TlBr	27.021	18.451	19.172	13.428	10.182	14.290	59.390

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

CaCl	8.43
CaBr	7.58
CaI	7.44
TlCl	40.48
TlBr	17.46

TlBr 61650.304 45871.137 46933.879 38958.686 32620.576 38904.413 *****
 TlBr ***** 94355.298 *****

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	-28.693	-24.661	-25.042	-21.933	-20.154	-22.470	-35.593
CaBr	-31.438	-27.244	-27.629	-24.498	-22.601	-24.982	-39.610
CaI	-38.025	-33.118	-33.556	-30.002	-27.735	-30.490	-48.680
TlCl	-62.918	-52.102	-53.128	-44.770	-40.053	-46.241	-80.780
TlBr	-27.905	-24.367	-24.639	-22.431	-20.464	-22.462	-42.384
TlBr	-45.190	-38.255	-38.864	-33.912	-30.581	-34.515	-62.124

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^2/\text{dyn})^2$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	2921.706	2379.907	2427.401	2064.200	1863.226	2116.697	3890.058
CaBr	3482.630	2871.575	2923.593	2526.078	2292.103	2576.185	4724.341
CaI	5492.888	4579.248	4655.304	4072.223	3710.051	4137.029	7567.487
TlCl	10926.681	8090.504	8337.375	6465.401	5511.277	6758.778	16426.129
TlBr	3034.484	2532.687	2568.881	2286.525	2046.517	2286.478	5443.863
TlBr	6278.756	4902.103	5013.932	4157.127	3623.489	4246.477	10237.625

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^2/\text{dyn})^3$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	-445.175	-343.204	-351.740	-288.508	-254.688	-296.998	-638.961
CaBr	-569.655	-445.868	-455.942	-381.216	-338.549	-389.887	-836.982
CaI	-1176.030	-936.814	-955.908	-813.470	-727.297	-827.922	-1751.777
TlCl	-2836.559	-1871.006	-1949.674	-1380.755	-1113.948	-1464.574	-5010.082
TlBr	-487.141	-386.351	-393.345	-339.963	-296.193	-339.734	-1044.226
TlBr	-1289.774	-922.337	-950.617	-741.393	-618.713	-761.861	-2517.223

OMEGA T $\cdot 10^{-13}/s$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	1.679	1.679	1.679	1.679	1.679	1.679	1.679
CaBr	1.250	1.250	1.250	1.250	1.250	1.250	1.250
CaI	1.048	1.048	1.048	1.048	1.048	1.048	1.048
TlCl	1.048	1.048	1.048	1.048	1.048	1.048	1.048
TlBr	1.207	1.207	1.207	1.207	1.207	1.207	1.207
TlBr	.939	.939	.939	.939	.939	.939	.939

GAMMA T

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	4.470	3.979	4.026	3.641	3.421	3.709	5.318
CaBr	4.342	3.891	3.933	3.589	3.381	3.644	5.230
CaI	4.347	3.915	3.955	3.633	3.429	3.679	5.299
TlCl	9.736	8.330	8.464	7.369	6.752	7.563	12.069
TlBr	6.297	5.707	5.752	5.380	5.049	5.386	8.724
TlBr	7.567	6.654	6.735	6.076	5.634	6.158	9.809

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.CAPAS)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CaCl	.657	.607	.612	.579	.561	.584	.735
CaBr	.838	.777	.782	.744	.721	.749	.946
CaI	1.107	1.029	1.035	.986	.955	.992	1.264
TlCl	.531	.493	.496	.473	.460	.476	.586
TlBr	.842	.800	.803	.780	.760	.780	1.007
TlBr	.739	.692	.695	.667	.649	.670	.843

Cálculos para las sales de plata.

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO N.P.C.

PARAMETROS DE LOS POTENCIALES CALCULADOS

Sal	Born-Lande		Born-Mayer		Hellmann		Wasastjerna	
	n	A/r ⁻ⁿ	ro	B	ro1	B1	beta.r	C.r ⁻⁷
	-	dyn.cm	cm	dyn.cm	cm	dyn.cm ⁻²	-	dyn.cm
CsF	8.742	.414E-12	.308E-08	.632E-08	.348E-08	.636E-16	17.414	.127E-04
AgCl	8.246	.903E-12	.300E-08	.835E-08	.341E-08	.772E-16	16.949	.172E-04
AgBr	8.513	.866E-12	.303E-08	.105E-07	.343E-08	.101E-15	17.199	.213E-04
Sal	Varshni-Shukla		V.S.modif.		Logaritmico			
	k1.r ⁻²	lam1	k2.r ^{-3/2}	lam2	b/r ⁻⁹	a		
	-	dyn.cm	-	dyn.cm	-	dyn.cm		
CsF	5.371	.724E-10	6.828	.326E-09	.030	.140E-10		
AgCl	5.123	.122E-09	6.497	.507E-09	.091	.988E-11		
AgBr	5.256	.135E-09	6.675	.584E-09	.057	.151E-10		

VALOR DEL POTENCIAL EN R DE EQUILIBRIO Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE R (PRIMERA A QUINTA)

POTENCIAL .10⁻¹² dyn.cm

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.414	.371	.375	.347	.337	.353	.408
AgCl	.903	.805	.815	.749	.727	.764	.864
AgBr	.866	.775	.784	.723	.702	.737	.843

DERIVADA PRIMERA .10⁻⁴ dyn

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-1.204	-1.204	-1.204	-1.204	-1.204	-1.204	-1.204
AgCl	-2.687	-2.687	-2.687	-2.687	-2.687	-2.687	-2.687
AgBr	-2.558	-2.558	-2.558	-2.558	-2.558	-2.558	-2.558

DERIVADA SEGUNDA .10⁻⁵ dyn/cm

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.391	.391	.391	.391	.391	.391	.391
AgCl	.896	.896	.896	.896	.896	.896	.896
AgBr	.844	.844	.844	.844	.844	.844	.844

DERIVADA TERCERA .10⁻¹³ dyn/cm²

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-1.396	-1.266	-1.282	-1.149	-1.110	-1.191	-1.366
AgCl	-3.312	-2.989	-3.031	-2.678	-2.596	-2.801	-3.095
AgBr	-3.075	-2.782	-2.819	-2.511	-2.428	-2.613	-2.947

DERIVADA CUARTA .10⁻²¹ dyn/cm³

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	5.458	4.107	4.274	2.870	2.574	3.361	5.050
AgCl	13.438	9.970	10.424	6.579	6.010	8.046	10.439
AgBr	12.275	9.178	9.571	6.257	5.654	7.465	10.525

DERIVADA QUINTA .10⁻²⁹ dyn/cm⁴

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-23.152	-13.318	-14.492	-4.902	-3.919	-8.510	-19.151
AgCl	-59.363	-33.253	-36.562	-9.481	-8.368	-20.498	-30.009

AgBr -53.258 -30.273 -33.092 -10.039 -8.331 -19.039 -36.046

VALOR DEL POTENCIAL TOTAL EN R DE EQUILIBRIO
.10⁻¹² ergios

#	Potenciales de Overlap							#	Pot. #	Pot.V.d.W.	
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.	Elec.	dipol.	cuadr.	
CsF	2.483	2.228	2.252	2.084	2.021	2.119	2.447	-13.4	-1.310	-.053	
AgCl	5.419	4.833	4.891	4.491	4.361	4.585	5.185	-14.5	-4.660	-.273	
AgBr	5.199	4.652	4.705	4.339	4.210	4.420	5.055	-14.0	-4.708	-.254	

Potenciales totales

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
CsF	-12.30	-12.55	-12.53	-12.70	-12.76	-12.66	-12.34
AgCl	-14.06	-14.64	-14.58	-14.98	-15.11	-14.89	-14.29
AgBr	-13.74	-14.29	-14.23	-14.60	-14.73	-14.52	-13.88

Energia de la red

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
CsF	177.03	180.70	180.35	182.77	183.68	182.26	177.55
AgCl	202.31	210.75	209.91	215.66	217.53	214.31	205.67
AgBr	197.77	205.64	204.88	210.14	212.00	208.98	199.83

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.DIP.DEFORM.)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.244	.238	.239	.234	.233	.235	.243
AgCl	1.450	1.407	1.411	1.383	1.374	1.390	1.433
AgBr	1.562	1.518	1.522	1.494	1.485	1.500	1.550

VALORES DE DB/DP

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	5.539	4.978	5.047	4.472	4.303	4.655	5.409
AgCl	5.710	4.893	5.000	4.107	3.900	4.419	5.161
AgBr	5.853	5.060	5.160	4.323	4.101	4.601	5.507

VALOR DE LA CONSTANTE DE FUERZA EN R DE EQUILIBRIO
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE A

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.465	.465	.465	.465	.465	.465	.465
AgCl	.732	.732	.732	.732	.732	.732	.732
AgBr	.709	.709	.709	.709	.709	.709	.709

DERIVADA PRIMERA

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-3.318	-2.837	-2.896	-2.404	-2.259	-2.560	-3.206
AgCl	-6.945	-5.543	-5.726	-4.193	-3.837	-4.728	-6.002
AgBr	-6.191	-5.018	-5.166	-3.929	-3.600	-4.340	-5.679

DERIVADA SEGUNDA

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	2.926	2.005	2.118	1.161	.959	1.496	2.648
AgCl	7.876	4.613	5.041	1.422	.887	2.803	5.054
AgBr	6.376	3.888	4.204	1.543	1.058	2.513	4.970

DERIVADA TERCERA		.10 ⁻⁷³ dyn/cm ¹⁰					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-3.096	-1.645	-1.819	-.390	-.221	-.922	-2.527
AgCl	-10.596	-4.314	-5.115	1.470	1.847	-1.185	-3.768
AgBr	-7.747	-3.403	-3.938	.463	.860	-1.239	-4.607

VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE D		.10 ⁻¹⁰ e.s.u.					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-.348	-.348	-.348	-.348	-.348	-.348	-.348
AgCl	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087
AgBr	-.974	-.974	-.974	-.974	-.974	-.974	-.974

DERIVADA PRIMERA		.10 ⁻¹² e.s.u./cm ³					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	1.654	1.505	1.518	1.431	1.401	1.449	1.632
AgCl	6.165	5.516	5.575	5.190	5.075	5.276	5.891
AgBr	5.084	4.593	4.636	4.347	4.252	4.408	4.946

DERIVADA SEGUNDA		.10 ⁻³⁵ e.s.u./cm ⁶					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-1.207	-.892	-.926	-.665	-.590	-.740	-1.138
AgCl	-5.491	-3.886	-4.066	-2.690	-2.380	-3.128	-4.499
AgBr	-4.113	-2.983	-3.107	-2.156	-1.911	-2.444	-3.654

DERIVADA TERCERA		.10 ⁻⁵⁷ e.s.u./cm ⁹					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	10.959	6.177	6.710	2.487	1.656	3.896	9.539
AgCl	61.317	32.053	35.471	8.519	4.892	18.304	37.000
AgBr	41.543	22.671	24.820	7.827	4.971	13.728	31.171

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

CsF	5.81
AgCl	9.68
AgBr	10.06

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

CsF	2.09
AgCl	5.27
AgBr	5.75

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-1.492	-1.492	-1.492	-1.492	-1.492	-1.492	-1.492
AgCl	-9.593	-9.691	-9.680	-9.758	-9.778	-9.735	-9.644
AgBr	-11.151	-11.295	-11.279	-11.398	-11.432	-11.364	-11.202

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. .10⁻¹² cm²/dyn

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	2.767	2.767	2.767	2.766	2.766	2.766	2.767
AgCl	4.137	4.180	4.175	4.209	4.217	4.199	4.159
AgBr	4.730	4.791	4.784	4.835	4.849	4.820	4.752

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	16.173	12.167	12.650	8.649	7.461	9.904	15.264
AgCl	12.237	4.091	5.104	-3.174	-5.143	-.377	7.072
AgBr	11.340	3.330	4.301	-3.655	-5.808	-1.088	8.015

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	122.400	84.507	88.157	65.873	59.144	69.661	115.071
AgCl	171.889	117.501	121.605	111.702	110.463	106.584	144.988
AgBr	181.444	129.057	132.943	122.371	121.098	118.084	163.193

V³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	1122.952	642.238	685.389	404.840	328.985	468.508	1023.126
AgCl	997.305	224.408	291.722	-216.733	-333.521	-40.924	533.234
AgBr	996.866	212.700	281.215	-234.137	-369.107	-67.631	677.453

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-10.800	-8.125	-8.448	-5.775	-4.982	-6.613	-10.192
AgCl	-2.872	-.960	-1.198	.745	1.207	.089	-1.660
AgBr	-2.749	-.807	-1.043	.886	1.408	.264	-1.943

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^2/\text{dyn})^2$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	638.927	461.047	480.122	342.763	301.695	377.548	601.851
AgCl	140.961	79.147	85.416	46.799	38.206	55.331	105.815
AgBr	161.136	92.123	99.032	55.007	44.029	64.659	134.555

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^2/\text{dyn})^3$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-57.567	-39.517	-41.332	-28.915	-25.277	-31.823	-53.858
AgCl	-7.508	-4.026	-4.351	-2.395	-1.965	-2.828	-5.540
AgBr	-9.719	-5.371	-5.774	-3.276	-2.662	-3.815	-8.045

OMEGA T $\cdot 10^{-13}/\text{s}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	2.896	2.896	2.896	2.896	2.896	2.896	2.896
AgCl	3.074	3.074	3.074	3.074	3.074	3.074	3.074
AgBr	2.347	2.347	2.347	2.347	2.347	2.347	2.347

GAMMA T

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	3.059	2.536	2.599	2.070	1.913	2.237	2.939
AgCl	3.041	2.324	2.416	1.657	1.479	1.918	2.572
AgBr	3.117	2.430	2.515	1.807	1.618	2.040	2.824

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.CAPAS)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.182	.166	.167	.158	.155	.160	.179
AgCl	1.251	1.070	1.090	.931	.891	.981	1.148
AgBr	1.430	1.224	1.248	1.062	1.010	1.119	1.351

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE D		$\cdot 10^{-10}$ e.s.u.					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-0.348	-0.348	-0.348	-0.348	-0.348	-0.348	-0.348
AgCl	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087
AgBr	-0.974	-0.974	-0.974	-0.974	-0.974	-0.974	-0.974

DERIVADA PRIMERA		$\cdot 10^{-12}$ e.s.u./cm ³					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	1.868	1.719	1.732	1.645	1.614	1.662	1.845
AgCl	7.016	6.367	6.426	6.041	5.926	6.127	6.742
AgBr	5.760	5.269	5.313	5.024	4.929	5.085	5.623

DERIVADA SEGUNDA		$\cdot 10^{-35}$ e.s.u./cm ⁶					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-1.348	-1.024	-1.058	-0.792	-0.716	-0.869	-1.278
AgCl	-6.174	-4.518	-4.702	-3.296	-2.977	-3.741	-5.160
AgBr	-4.608	-3.443	-3.570	-2.599	-2.347	-2.892	-4.139

DERIVADA TERCERA		$\cdot 10^{-57}$ e.s.u./cm ⁹					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	12.221	7.212	7.769	3.366	2.482	4.825	10.755
AgCl	68.817	38.058	41.639	13.468	9.556	23.628	43.623
AgBr	46.461	26.662	28.909	11.172	8.118	17.291	35.730

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

CsF	5.81
AgCl	9.68
AgBr	10.06

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

CsF	2.09
AgCl	5.27
AgBr	5.75

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-1.492	-1.492	-1.492	-1.492	-1.492	-1.492	-1.492
AgCl	-9.516	-9.613	-9.603	-9.681	-9.701	-9.658	-9.567
AgBr	-11.053	-11.197	-11.181	-11.300	-11.334	-11.266	-11.105

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12}$ cm²/dyn

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	2.767	2.767	2.767	2.767	2.767	2.767	2.767
AgCl	4.104	4.146	4.142	4.175	4.184	4.166	4.126
AgBr	4.689	4.750	4.743	4.793	4.808	4.779	4.710

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	16.522	12.516	13.000	8.998	7.810	10.253	15.613
AgCl	13.883	5.737	6.750	-1.527	-3.497	1.270	8.719
AgBr	12.823	4.813	5.784	-2.171	-4.325	.395	9.498

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	126.228	87.296	91.074	67.713	60.668	71.845	118.656
AgCl	186.138	124.643	129.653	112.247	109.247	109.709	154.591
AgBr	193.658	135.154	139.799	122.934	119.976	120.713	172.794

V³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	1177.723	677.333	722.421	429.896	350.832	495.815	1073.721
AgCl	1213.020	344.415	419.171	-108.661	-225.696	59.619	696.173
AgBr	1189.556	325.501	400.082	-132.428	-267.528	28.506	839.135

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-11.033	-8.358	-8.681	-6.009	-5.215	-6.846	-10.426
AgCl	-3.258	-1.347	-1.584	.358	.821	-.298	-2.046
AgBr	-3.109	-1.167	-1.402	.526	1.048	-.096	-2.303

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^2/\text{dyn})^2$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	655.791	475.218	494.627	354.477	312.589	390.154	618.085
AgCl	155.193	89.588	96.340	53.721	44.189	63.630	117.569
AgBr	175.400	102.772	110.129	62.383	50.408	73.256	147.276

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^2/\text{dyn})^3$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-59.391	-40.903	-42.767	-29.980	-26.236	-32.991	-55.584
AgCl	-8.373	-4.580	-4.939	-2.753	-2.275	-3.248	-6.214
AgBr	-10.680	-6.005	-6.443	-3.701	-3.028	-4.304	-8.870

OMEGA T $\cdot 10^{-13}/\text{s}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	2.896	2.896	2.896	2.896	2.896	2.896	2.896
AgCl	3.074	3.074	3.074	3.074	3.074	3.074	3.074
AgBr	2.347	2.347	2.347	2.347	2.347	2.347	2.347

GAMMA T

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	3.081	2.558	2.622	2.092	1.936	2.259	2.961
AgCl	3.107	2.390	2.481	1.722	1.544	1.983	2.637
AgBr	3.173	2.485	2.570	1.863	1.673	2.095	2.879

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.CAPAS)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.206	.190	.192	.183	.180	.185	.204
AgCl	1.353	1.172	1.192	1.033	.993	1.083	1.250
AgBr	1.523	1.317	1.341	1.155	1.103	1.212	1.444

Sin tener en cuenta los términos de van der Waals.

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

PARAMETROS DE LOS POTENCIALES CALCULADOS

Sal	Born-Lande		Born-Mayer		Hellmann		Wasastjerna	
	n	A/r ⁿ	ro	B	rol	B1	beta.r	C.r ⁷
	-	dyn.cm	cm	dyn.cm	cm	dyn.cm ²	-	dyn.cm
CsF	10.371	.216E-12	.264E-08	.171E-07	.292E-08	.174E-15	18.957	.320E-04
AgCl	12.600	.192E-12	.204E-08	.144E-06	.221E-08	.137E-14	21.097	.250E-03
AgBr	13.665	.170E-12	.197E-08	.372E-06	.212E-08	.370E-14	22.128	.627E-03
Sal	Varshni-Shukla		V.S.modif.		Logaritmico			
	k1.r ²	lam1	k2.r ^{3/2}	lam2	b/r ⁹	a		
	-	dyn.cm	-	dyn.cm	-	dyn.cm		
CsF	6.186	.878E-10	7.914	.515E-09	-.132	-.163E-11		
AgCl	7.300	.246E-09	9.400	.208E-08	-.286	-.673E-12		
AgBr	7.833	.375E-09	10.110	.378E-08	-.341	-.499E-12		

VALOR DEL POTENCIAL EN R DE EQUILIBRIO Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE R (PRIMERA A QUINTA)

Sal	.10 ⁻¹² dyn.cm						
	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.216	.197	.198	.187	.181	.188	.231
AgCl	.192	.178	.179	.172	.166	.172	.227
AgBr	.170	.159	.160	.154	.149	.154	.209

Sal	.10 ⁻⁴ dyn						
	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-.745	-.745	-.745	-.745	-.745	-.745	-.745
AgCl	-.874	-.874	-.874	-.874	-.874	-.874	-.874
AgBr	-.808	-.808	-.808	-.808	-.808	-.808	-.808

Sal	.10 ⁻⁵ dyn/cm						
	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.282	.282	.282	.282	.282	.282	.282
AgCl	.429	.429	.429	.429	.429	.429	.429
AgBr	.411	.411	.411	.411	.411	.411	.411

Sal	.10 ⁻¹³ dyn/cm ²						
	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-1.161	-1.067	-1.077	-.997	-.957	-1.014	-1.278
AgCl	-2.260	-2.105	-2.118	-2.011	-1.927	-2.019	-2.776
AgBr	-2.231	-2.089	-2.100	-2.010	-1.927	-2.010	-2.850

Sal	.10 ⁻²¹ dyn/cm ³						
	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	5.167	4.039	4.155	3.186	2.780	3.425	7.075
AgCl	12.716	10.327	10.528	8.870	7.706	9.044	23.890
AgBr	12.892	10.621	10.797	9.354	8.145	9.407	26.916

Sal	.10 ⁻²⁹ dyn/cm ⁴						
	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-24.717	-15.288	-16.232	-8.550	-6.205	-10.665	-48.194
AgCl	-76.153	-50.667	-52.756	-35.822	-25.939	-38.134	-266.511
AgBr	-78.969	-54.008	-55.890	-40.651	-29.727	-41.720	-332.454

VALOR DEL POTENCIAL TOTAL EN R DE EQUILIBRIO

.10⁻¹² ergios

#	Potenciales de Overlap							# Pot.	#	Pot.V.d.W.
	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.			
Sal										
CsF	1.294	1.180	1.189	1.122	1.085	1.130	1.388	-13.4	.000	.000
AgCl	1.154	1.069	1.075	1.032	.996	1.031	1.359	-14.5	.000	.000
AgBr	1.023	.953	.958	.924	.892	.922	1.251	-14.0	.000	.000

Potenciales totales

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
CsF	-12.13	-12.24	-12.23	-12.30	-12.33	-12.29	-12.03
AgCl	-13.39	-13.47	-13.47	-13.51	-13.55	-13.51	-13.18
AgBr	-12.95	-13.02	-13.02	-13.05	-13.09	-13.06	-12.73

Energia de la red

kcal/mol

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	L.
CsF	174.52	176.16	176.03	176.99	177.53	176.88	173.17
AgCl	192.70	193.92	193.84	194.46	194.97	194.47	189.75
AgBr	186.46	187.46	187.40	187.88	188.34	187.92	183.17

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.DIP.DEFORM.)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.285	.280	.280	.277	.276	.278	.290
AgCl	2.133	2.106	2.108	2.095	2.084	2.095	2.202
AgBr	2.408	2.382	2.383	2.371	2.360	2.370	2.497

VALORES DE DB/DP

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	5.790	5.386	5.428	5.083	4.910	5.157	6.296
AgCl	6.533	6.143	6.175	5.906	5.694	5.926	7.837
AgBr	6.888	6.502	6.532	6.288	6.064	6.290	8.566

VALOR DE LA CONSTANTE DE FUERZA EN R DE EQUILIBRIO
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE A

.10⁻⁵ dyn/cm

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.465	.465	.465	.465	.465	.465	.465
AgCl	.732	.732	.732	.732	.732	.732	.732
AgBr	.709	.709	.709	.709	.709	.709	.709

DERIVADA PRIMERA

.10⁻²⁷ dyn/cm⁴

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-3.533	-3.187	-3.222	-2.927	-2.779	-2.991	-3.967
AgCl	-8.361	-7.689	-7.746	-7.282	-6.919	-7.317	-10.600
AgBr	-7.722	-7.151	-7.195	-6.834	-6.503	-6.837	-10.203

DERIVADA SEGUNDA

.10⁻⁵⁰ dyn/cm⁷

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	3.339	2.570	2.649	1.988	1.711	2.151	4.642
AgCl	11.514	9.266	9.455	7.895	6.799	8.058	22.028
AgBr	10.014	8.190	8.331	7.173	6.202	7.216	21.276

DERIVADA TERCERA

.10⁻⁷³ dyn/cm¹⁰

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.

CsF	-3.772	-2.405	-2.542	-1.421	-1.062	-1.725	-7.037
AgCl	-18.560	-12.687	-13.170	-9.249	-6.906	-9.770	-60.590
AgBr	-15.075	-10.573	-10.914	-8.153	-6.138	-8.337	-58.899

VALOR DEL PARAMETRO DE CARGA DE INTERCAMBIO D
Y DE SUS DERIVADAS RESPECTO DE V (PRIMERA A TERCERA)

VALORES DE D		.10 ⁻¹⁰ e.s.u.					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-0.348	-0.348	-0.348	-0.348	-0.348	-0.348	-0.348
AgCl	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087	-1.087
AgBr	-0.974	-0.974	-0.974	-0.974	-0.974	-0.974	-0.974

DERIVADA PRIMERA		.10 ⁻¹² e.s.u./cm ³					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	2.216	2.100	2.109	2.046	2.012	2.053	2.322
AgCl	10.721	10.366	10.390	10.216	10.079	10.215	11.686
AgBr	9.247	8.993	9.009	8.891	8.783	8.883	10.188

DERIVADA SEGUNDA		.10 ⁻³⁵ e.s.u./cm ⁶					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-1.822	-1.496	-1.526	-1.289	-1.174	-1.335	-2.228
AgCl	-13.087	-11.371	-11.505	-10.441	-9.625	-10.504	-19.089
AgBr	-10.707	-9.465	-9.555	-8.837	-8.191	-8.833	-16.466

DERIVADA TERCERA		.10 ⁻⁵⁷ e.s.u./cm ⁹					
Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	18.338	12.404	12.972	8.418	6.573	9.482	28.592
AgCl	190.466	142.213	146.079	114.944	93.574	117.960	430.310
AgBr	146.291	112.636	115.133	95.007	78.483	95.629	369.867

CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

CsF	5.81
AgCl	9.68
AgBr	10.06

CONSTANTE DIELECTRICA A ALTAS FRECUENCIAS

CsF	2.09
AgCl	5.27
AgBr	5.75

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ALTAS FRECUENCIAS

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-1.493	-1.493	-1.493	-1.493	-1.493	-1.493	-1.493
AgCl	-9.140	-9.191	-9.187	-9.216	-9.239	-9.215	-8.990
AgBr	-10.454	-10.526	-10.521	-10.561	-10.597	-10.562	-10.164

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. .10⁻¹² cm²/dyn

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	2.768	2.768	2.768	2.768	2.768	2.768	2.768
AgCl	3.942	3.964	3.963	3.975	3.985	3.975	3.878
AgBr	4.434	4.465	4.463	4.480	4.495	4.480	4.311

DERIVADAS DE LA CONSTANTE DIELECTRICA ESTATICA

V POR LA DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	18.781	15.876	16.170	13.754	12.539	14.263	22.350
AgCl	28.007	24.022	24.345	21.733	19.682	21.899	40.878
AgBr	29.525	25.592	25.887	23.494	21.294	23.490	46.266

V² POR LA DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	153.940	122.514	125.278	105.454	95.494	108.201	190.311
AgCl	356.660	304.693	308.470	280.228	258.794	280.797	537.983
AgBr	400.916	347.449	351.077	323.594	299.219	322.492	655.016

V³ POR LA DERIVADA TERCERA RESPECTO DE V

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	1589.602	1145.681	1182.690	920.874	795.991	958.334	2138.242
AgCl	4191.790	3251.227	3317.176	2829.683	2467.669	2839.475	7752.534
AgBr	4970.642	3951.235	4018.188	3516.232	3079.904	3496.180	10316.703

DERIVADA PRIMERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-12.541	-10.602	-10.798	-9.185	-8.373	-9.524	-14.925
AgCl	-6.573	-5.638	-5.714	-5.101	-4.619	-5.139	-9.594
AgBr	-7.158	-6.204	-6.276	-5.696	-5.163	-5.695	-11.217

DERIVADA SEGUNDA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-24} (\text{cm}^2/\text{dyn})^2$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	772.542	633.321	646.332	546.905	496.916	564.136	937.798
AgCl	303.023	259.258	262.573	236.993	217.298	237.962	451.574
AgBr	377.255	326.966	330.514	302.901	278.040	302.230	606.997

DERIVADA TERCERA RESPECTO DE P SOBRE CTE. $\cdot 10^{-33} (\text{cm}^2/\text{dyn})^3$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	-72.454	-57.493	-58.831	-48.930	-44.020	-50.506	-90.350
AgCl	-18.489	-15.407	-15.633	-13.929	-12.637	-13.978	-29.445
AgBr	-26.247	-22.233	-22.507	-20.411	-18.551	-20.343	-45.705

OMEGA T $\cdot 10^{-13}/\text{s}$

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	2.896	2.896	2.896	2.896	2.896	2.896	2.896
AgCl	3.074	3.074	3.074	3.074	3.074	3.074	3.074
AgBr	2.347	2.347	2.347	2.347	2.347	2.347	2.347

GAMMA T

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	3.345	2.967	3.006	2.687	2.527	2.755	3.814
AgCl	4.064	3.717	3.746	3.512	3.329	3.528	5.203
AgBr	4.303	3.967	3.993	3.784	3.592	3.784	5.751

VALORES DE DLNS/DLNV (MOD.CAPAS)

Sal	B.L.	B.M.	H.	W.	V.S.	V.S.m.	Log.
CsF	.246	.233	.234	.228	.224	.229	.257
AgCl	1.901	1.809	1.816	1.761	1.718	1.764	2.182
AgBr	2.183	2.081	2.088	2.029	1.975	2.028	2.606

```
\end {verbatim}
}
```

Cálculos realizados utilizando potenciales de repulsión hasta segundos vecinos.

Cálculos realizados utilizando parámetros de potencial tomados de Tosi y Fumi \cite{tosipot}, modificados.

{\footnotesize
 \begin{verbatim}

	RO	B	B++	B+-	B--	R+	R-
LiF	.3122	.3866	2.0000	1.3750	.7500	.8160	1.1790
LiCl	.3758	.4405	2.0000	1.3750	.7500	.8160	1.5850
LiBr	.4017	.4629	2.0000	1.3750	.7500	.8160	1.7160
LiI	.4422	.4798	2.0000	1.3750	.7500	.8160	1.9070
NaF	.3110	.3973	1.2500	1.0000	.7500	1.1700	1.1790
NaCl	.3624	.4554	1.2500	1.0000	.7500	1.1700	1.5850
NaBr	.3831	.4802	1.2500	1.0000	.7500	1.1700	1.7160
NaI	.4165	.5108	1.2500	1.0000	.7500	1.1700	1.9070
KF	.3393	.4271	1.2500	1.0000	.7500	1.4630	1.1790
KCl	.3739	.4831	1.2500	1.0000	.7500	1.4630	1.5850
KBr	.3938	.5028	1.2500	1.0000	.7500	1.4630	1.7160
KI	.4217	.5313	1.2500	1.0000	.7500	1.4630	1.9070
RbF	.4190	.4190	1.2500	1.0000	.7500	1.5870	1.1790
RbCl	.4910	.4910	1.2500	1.0000	.7500	1.5870	1.5850
RbBr	.5136	.5136	1.2500	1.0000	.7500	1.5870	1.7160
RbI	.4681	.4681	1.2500	1.0000	.7500	1.5870	1.9070

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

Valor del Potencial en R de Equilibrio y de sus Derivadas respecto de R (Primera a Quinta)

Sal	Pot. 10 ⁻¹² dyn.cm	Der. 1a. 10 ⁻⁴ dyn	Der. 2a. 10 ⁵ dyn/cm	Der. 3a. 10 ¹³ dyn/cm ²	Der. 4a. 10 ²¹ dyn/cm ³	Der. 5a. 10 ²⁹ dyn/cm ⁴
LiF	3.457	-11.680	4.016	-14.107	50.820	-188.301
LiCl	2.919	-8.432	2.493	-7.575	23.693	-76.355
LiBr	2.899	-7.924	2.222	-6.407	19.034	-58.245
LiI	2.950	-7.455	1.936	-5.179	14.271	-40.458
NaF	2.882	-9.585	3.227	-11.037	38.490	-137.413
NaCl	2.534	-7.279	2.120	-6.287	19.049	-59.205
NaBr	2.499	-6.846	1.906	-5.413	15.749	-47.085
NaI	2.472	-6.318	1.647	-4.397	12.056	-34.040
KF	2.618	-8.065	2.523	-8.042	26.231	-87.853
KCl	2.363	-6.467	1.785	-4.986	14.130	-40.804
KBr	2.375	-6.183	1.625	-4.323	11.682	-32.200
KI	2.340	-5.720	1.414	-3.546	9.054	-23.637
RbF	2.734	-7.016	1.840	-4.951	13.705	-39.084
RbCl	2.600	-5.539	1.198	-2.642	5.962	-13.816
RbBr	2.619	-5.325	1.099	-2.312	4.975	-10.991
RbI	2.082	-4.589	1.023	-2.312	5.326	-12.544

Valor del Potencial en R de equilibrio .10⁻¹² ergios

Sal	Pot.Electr.	Pot.Ov.	Pot.D.D.	Pot.D.C.	Pot.Total	E.Red(kcal/mol)
LiF	-20.016	3.457	-.539	-.033	-17.13	246.57
LiCl	-15.685	2.919	-.941	-.043	-13.75	197.89
LiBr	-14.653	2.899	-1.130	-.045	-12.93	186.10
LiI	-13.437	2.950	-1.421	-.050	-11.96	172.11

NaF	-17.398	2.882	-.743	-.045	-15.30	220.27
NaCl	-14.295	2.534	-.978	-.045	-12.78	184.00
NaBr	-13.487	2.499	-1.102	-.045	-12.13	174.65
NaI	-12.453	2.472	-1.273	-.045	-11.30	162.64
KF	-15.075	2.618	-1.012	-.052	-13.52	194.61
KCl	-12.814	2.363	-1.186	-.052	-11.69	168.23
KBr	-12.223	2.375	-1.292	-.052	-11.19	161.09
KI	-11.410	2.340	-1.401	-.049	-10.52	151.42
RbF	-14.320	2.734	-1.117	-.052	-12.76	183.59
RbCl	-12.249	2.600	-1.251	-.051	-10.95	157.62
RbBr	-11.702	2.619	-1.338	-.051	-10.47	150.72
RbI	-10.981	2.082	-1.037	-.049	-9.98	143.71

Sal	s	dlns/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlns/dlnv (capas)	dB/dp
LiF	.806	.526	5.308	2.734	.436	3.819
LiCl	.776	.702	3.809	3.246	.624	4.104
LiBr	.743	.856	3.651	3.018	.750	4.154
LiI	.700	1.073	3.318	3.044	.936	4.188
NaF	.831	.507	4.015	2.376	.430	4.162
NaCl	.768	.798	2.902	2.553	.704	4.354
NaBr	.739	.947	2.488	2.537	.836	4.420
NaI	.746	.928	2.099	2.737	.846	4.504
KF	.912	.260	3.067	2.541	.229	4.429
KCl	.813	.644	2.369	2.466	.571	4.553
KBr	.777	.802	1.931	2.426	.705	4.556
KI	.756	.910	1.675	2.485	.813	4.611
RbF	.968	.078	.903	7.590	.066	4.216
RbCl	.831	.458	.822	3.934	.344	4.062
RbBr	.797	.573	.686	3.253	.426	4.000
RbI	.768	.794	.983	2.617	.669	4.448

Valor de la Constante de Fuerza en R de equilibrio
y de sus derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	A 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der.1a. 10 ⁻²⁷ dyn/cm ⁻⁴	Der.2a. 10 ⁻⁵⁰ dyn/cm ⁻⁷	Der.3a. 10 ⁻⁷³ dyn/cm ⁻¹⁰
LiF	.804	-10.588	17.800	-36.548
LiCl	.458	-3.288	2.945	-3.177
LiBr	.388	-2.317	1.713	-1.514
LiI	.311	-1.454	.828	-.558
NaF	.646	-6.478	8.074	-12.180
NaCl	.401	-2.404	1.765	-1.557
NaBr	.350	-1.803	1.134	-.856
NaI	.289	-1.211	.615	-.373
KF	.485	-3.502	3.099	-3.295
KCl	.328	-1.523	.845	-.557
KBr	.289	-1.164	.559	-.319
KI	.244	-.814	.323	-.152
RbF	.294	-1.497	.929	-.668
RbCl	.163	-.456	.144	-.042
RbBr	.143	-.341	.089	-.019
RbI	.174	-.465	.150	-.057

Valor del Parametro de Carga de Intercambio D
y de sus Derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

	D	Der.1a.	Der.2a.	Der.3a.
Sal	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹²	10 ⁻³⁵	10 ⁻⁵⁷
	e.s.u.	e.s.u./cm ³	e.s.u./cm ⁶	e.s.u./cm ⁹
LiF	-.325	3.094	-3.704	51.137
LiCl	-.349	1.934	-1.383	12.193
LiBr	-.527	2.444	-1.467	10.875
LiI	-.689	2.514	-1.187	6.923
NaF	-.377	2.941	-2.900	34.849
NaCl	-.517	2.440	-1.457	10.677
NaBr	-.649	2.630	-1.352	8.556
NaI	-.541	1.771	-.738	3.791
KF	-.198	1.128	-.814	7.215
KCl	-.484	1.781	-.817	4.546
KBr	-.638	2.036	-.809	3.912
KI	-.660	1.734	-.569	2.279
RbF	-.071	.283	-.145	.913
RbCl	-.639	1.475	-.429	1.475
RbBr	-.790	1.586	-.401	1.193
RbI	-.785	1.665	-.444	1.447

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte
				10 ⁻¹² cm ² /dyn
LiF	10.596	1.996	-1.087	.819
LiCl	14.428	3.233	-3.345	3.483
LiBr	12.424	3.449	-3.760	4.638
LiI	13.516	4.193	-5.487	7.565
NaF	6.122	1.708	-.742	.935
NaCl	6.930	2.511	-1.913	3.215
NaBr	6.652	2.696	-2.209	4.201
NaI	8.297	3.226	-3.308	6.881
KF	6.714	1.758	-.914	1.722
KCl	5.747	2.225	-1.553	4.010
KBr	5.523	2.357	-1.739	5.055
KI	5.981	2.687	-2.303	7.452
RbF	50.937	1.907	-1.175	2.308
RbCl	22.036	2.227	-1.638	4.714
RbBr	16.792	2.321	-1.781	5.814
RbI	7.560	2.599	-2.216	8.120

Sal	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte	De.2a./Cte	De.3a./Cte
				10 ⁻¹²	10 ⁻²⁴	10 ⁻³³
				cm ² /dyn	cm ⁴ /dyn ²	cm ⁶ /dyn ³
LiF	40.165	308.095	3415.096	-5.701	117.942	-3.778
LiCl	57.787	542.543	7065.143	-13.486	727.243	-59.649
LiBr	42.524	363.409	4129.829	-14.563	943.738	-92.582
LiI	42.869	381.703	4245.811	.000	.000	.000
NaF	17.850	105.668	877.830	-6.272	166.826	-6.974
NaCl	18.712	121.766	1030.901	-11.392	629.740	-53.583
NaBr	16.808	108.944	879.782	-12.957	844.760	-83.474
NaI	21.528	157.764	1397.442	-17.414	1625.361	-227.107
KF	19.183	124.377	1091.325	-9.460	402.990	-26.560
KCl	13.730	84.797	650.534	-13.731	1003.753	-112.345
KBr	12.396	75.752	551.322	-15.373	1322.004	-172.532
KI	12.894	83.365	608.745	-18.749	2123.521	-360.011
RbF	670.971	18436.962	*****	-49.332	6312.404	-1216.721

RbCl	132.691	1751.354	33474.922	-38.598	4903.349	-944.274
RbBr	78.293	827.558	12361.900	-35.323	4591.908	-906.411
RbI	20.641	144.879	1284.199	-26.005	3372.869	-664.438

Cálculos realizados utilizando parámetros de potencial tomados de Boswarva [85], modificados.

	RO	B	B++	B+-	B--	R+	R-
LiF	.3082	.2394	2.0000	1.3750	.7500	1.0040	1.1470
LiCl	.3652	.2684	2.0000	1.3750	.7500	1.0040	1.6080
LiBr	.3909	.2835	2.0000	1.3750	.7500	1.0040	1.7540
LiI	.4318	.2956	2.0000	1.3750	.7500	1.0040	1.9660
NaF	.3160	.2499	1.2500	1.0000	.7500	1.3390	1.1470
NaCl	.3583	.2727	1.2500	1.0000	.7500	1.3390	1.6080
NaBr	.3777	.2865	1.2500	1.0000	.7500	1.3390	1.7540
NaI	.4095	.3050	1.2500	1.0000	.7500	1.3390	1.9660
KF	.3510	.2616	1.2500	1.0000	.7500	1.6380	1.1470
KCl	.3745	.2837	1.2500	1.0000	.7500	1.6380	1.6080
KBr	.3928	.2938	1.2500	1.0000	.7500	1.6380	1.7540
KI	.4191	.3080	1.2500	1.0000	.7500	1.6380	1.9660
RbF	.3607	.2600	1.2500	1.0000	.7500	1.7550	1.1470
RbCl	.3797	.2939	1.2500	1.0000	.7500	1.7550	1.6080
RbBr	.3959	.3047	1.2500	1.0000	.7500	1.7550	1.7540
RbI	.4075	.2699	1.2500	1.0000	.7500	1.7550	1.9660

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

Valor del Potencial en R de Equilibrio y de sus Derivadas respecto de R (Primera a Quinta)

Sal	Pot. 10 ⁻¹² dyn.cm	Der.1a. 10 ⁻⁴ dyn	Der.2a. 10 ⁵ dyn/cm	Der.3a. 10 ¹³ dyn/cm ²	Der.4a. 10 ²¹ dyn/cm ³	Der.5a. 10 ²⁹ dyn/cm ⁴
LiF	3.446	-11.676	4.015	-14.067	50.407	-185.420
LiCl	2.906	-8.433	2.494	-7.546	23.435	-74.910
LiBr	2.888	-7.926	2.222	-6.389	18.891	-57.541
LiI	2.943	-7.456	1.936	-5.172	14.227	-40.317
NaF	2.892	-9.586	3.228	-11.088	38.991	-140.849
NaCl	2.527	-7.278	2.120	-6.269	18.882	-58.171
NaBr	2.491	-6.846	1.906	-5.397	15.599	-46.209
NaI	2.466	-6.333	1.653	-4.407	12.037	-33.797
KF	2.635	-8.076	2.530	-8.131	26.886	-91.584
KCl	2.364	-6.467	1.785	-4.989	14.158	-40.964
KBr	2.373	-6.183	1.625	-4.320	11.658	-32.054
KI	2.336	-5.720	1.414	-3.540	9.008	-23.383
RbF	2.525	-7.619	2.355	-7.481	24.475	-82.493
RbCl	2.270	-6.127	1.670	-4.607	12.910	-36.899
RbBr	2.266	-5.846	1.521	-3.997	10.655	-28.907
RbI	1.919	-4.798	1.208	-3.073	7.914	-20.716

Sal	Pot.Electr.	Pot.Ov.	Pot.D.D.	Pot.D.C.	Pot.Total	E.Red(kcal/mol)
LiF	-20.016	3.446	-.539	-.033	-17.14	246.73
LiCl	-15.685	2.906	-.941	-.043	-13.76	198.09
LiBr	-14.653	2.888	-1.130	-.045	-12.94	186.26
LiI	-13.437	2.943	-1.421	-.050	-11.97	172.22

NaF	-17.398	2.892	-.743	-.045	-15.29	220.13
NaCl	-14.295	2.527	-.978	-.045	-12.79	184.11
NaBr	-13.487	2.491	-1.102	-.045	-12.14	174.77
NaI	-12.453	2.466	-1.273	-.045	-11.31	162.72
KF	-15.075	2.635	-1.012	-.052	-13.50	194.36
KCl	-12.814	2.364	-1.186	-.052	-11.69	168.23
KBr	-12.223	2.373	-1.292	-.052	-11.19	161.12
KI	-11.410	2.336	-1.401	-.049	-10.52	151.47
RbF	-14.320	2.525	-1.117	-.052	-12.96	186.60
RbCl	-12.249	2.270	-1.251	-.051	-11.28	162.37
RbBr	-11.702	2.266	-1.338	-.051	-10.82	155.80
RbI	-10.981	1.919	-1.037	-.049	-10.15	146.07

Sal	s	dlms/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlms/dlnv (capas)	dB/dp
LiF	.806	.526	5.307	2.715	.434	3.809
LiCl	.776	.701	3.811	3.203	.619	4.084
LiBr	.743	.855	3.653	2.989	.746	4.138
LiI	.700	1.072	3.319	3.027	.933	4.179
NaF	.831	.508	4.017	2.398	.432	4.180
NaCl	.768	.797	2.902	2.537	.702	4.341
NaBr	.739	.946	2.489	2.519	.832	4.403
NaI	.746	.928	2.111	2.710	.844	4.488
KF	.912	.261	3.082	2.575	.232	4.464
KCl	.813	.645	2.370	2.469	.572	4.557
KBr	.777	.802	1.931	2.423	.705	4.552
KI	.756	.910	1.675	2.476	.812	4.601
RbF	.968	.093	2.543	2.776	.090	4.634
RbCl	.831	.590	1.998	2.500	.523	4.699
RbBr	.797	.738	1.512	2.451	.650	4.696
RbI	.768	.905	1.271	2.557	.810	4.803

Valor de la Constante de Fuerza en R de equilibrio
y de sus derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	A 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der. 1a. 10 ⁻²⁷ dyn/cm ⁴	Der. 2a. 10 ⁻⁵⁰ dyn/cm ⁷	Der. 3a. 10 ⁻⁷³ dyn/cm ¹⁰
LiF	.804	-10.534	17.569	-35.712
LiCl	.458	-3.263	2.890	-3.080
LiBr	.388	-2.304	1.689	-1.482
LiI	.312	-1.449	.823	-.553
NaF	.646	-6.530	8.234	-12.601
NaCl	.401	-2.391	1.740	-1.519
NaBr	.350	-1.793	1.117	-.833
NaI	.291	-1.214	.613	-.369
KF	.487	-3.567	3.216	-3.489
KCl	.329	-1.525	.848	-.560
KBr	.289	-1.162	.557	-.317
KI	.244	-.812	.321	-.150
RbF	.451	-3.003	2.437	-2.368
RbCl	.308	-1.311	.664	-.398
RbBr	.273	-1.011	.443	-.229
RbI	.232	-.736	.276	-.122

Valor del Parametro de Carga de Intercambio D

y de sus Derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	D 10 ⁻¹⁰ e.s.u.	Der.1a. 10 ⁻¹² e.s.u./cm ³	Der.2a. 10 ⁻³⁵ e.s.u./cm ⁶	Der.3a. 10 ⁻⁵⁷ e.s.u./cm ⁹
LiF	-.325	3.084	-3.648	49.164
LiCl	-.349	1.922	-1.356	11.753
LiBr	-.526	2.431	-1.446	10.606
LiI	-.689	2.505	-1.178	6.846
NaF	-.377	2.953	-2.948	36.112
NaCl	-.517	2.434	-1.442	10.443
NaBr	-.649	2.623	-1.337	8.354
NaI	-.537	1.756	-.728	3.711
KF	-.197	1.132	-.832	7.559
KCl	-.483	1.782	-.818	4.564
KBr	-.638	2.035	-.808	3.893
KI	-.660	1.732	-.566	2.253
RbF	-.027	.139	-.092	.757
RbCl	-.485	1.638	-.686	3.487
RbBr	-.622	1.825	-.663	2.918
RbI	-.675	1.712	-.534	2.010

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn
LiF	10.600	1.996	-1.088	.820
LiCl	14.414	3.234	-3.349	3.488
LiBr	12.414	3.449	-3.763	4.642
LiI	13.509	4.193	-5.491	7.570
NaF	6.117	1.708	-.741	.934
NaCl	6.930	2.511	-1.915	3.217
NaBr	6.651	2.696	-2.210	4.205
NaI	8.240	3.227	-3.311	6.887
KF	6.664	1.758	-.914	1.721
KCl	5.746	2.225	-1.553	4.010
KBr	5.522	2.357	-1.739	5.055
KI	5.979	2.687	-2.304	7.454
RbF	8.097	1.907	-1.175	2.307
RbCl	5.598	2.232	-1.615	4.638
RbBr	5.320	2.328	-1.749	5.690
RbI	5.576	2.605	-2.194	8.021

Sal	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn	De.2a./Cte 10 ⁻²⁴ cm ⁴ /dyn ²	De.3a./Cte 10 ⁻³³ cm ⁶ /dyn ³
LiF	39.810	303.726	3344.331	-5.649	116.505	-3.721
LiCl	56.641	526.032	6751.103	-13.231	708.961	-57.757
LiBr	41.852	354.825	3984.983	-14.345	925.451	-90.347
LiI	42.453	376.205	4152.236	.000	.000	.000
NaF	18.043	107.416	898.993	-6.344	169.220	-7.093
NaCl	18.538	120.249	1012.049	-11.286	622.898	-52.903
NaBr	16.619	107.340	860.575	-12.814	833.961	-82.221
NaI	20.954	152.449	1329.502	-17.066	1586.865	-220.648
KF	19.337	126.222	1117.523	-9.607	410.639	-27.156
KCl	13.751	84.966	652.505	-13.754	1005.685	-112.594
KBr	12.366	75.538	549.033	-15.338	1318.685	-172.043
KI	12.811	82.747	601.907	-18.632	2109.307	-357.279

RbF	24.396	181.224	1780.427	-11.284	596.626	-48.251
RbCl	12.798	80.890	611.489	-14.655	1215.563	-153.136
RbBr	11.398	71.066	507.936	-16.233	1577.108	-231.116
RbI	12.005	79.526	585.294	-20.505	2582.539	-484.360

Cálculos realizados utilizando parámetros de potencial tomados de Shanker, Verma, Cox y Sangster [86], modificados.

	RO	B	B++	B+-	B--	R+	R-
LiF	.3378	.3426	2.0000	1.3750	.7500	.6000	1.3600
LiCl	.4117	.2947	2.0000	1.3750	.7500	.6000	1.8100
LiBr	.4389	.2958	2.0000	1.3750	.7500	.6000	1.9500
LiI	.4807	.2864	2.0000	1.3750	.7500	.6000	2.1600
NaF	.3186	.4291	1.2500	1.0000	.7500	.9500	1.3600
NaCl	.3902	.3701	1.2500	1.0000	.7500	.9500	1.8100
NaBr	.4154	.3656	1.2500	1.0000	.7500	.9500	1.9500
NaI	.4543	.3512	1.2500	1.0000	.7500	.9500	2.1600
KF	.3315	.3867	1.2500	1.0000	.7500	1.3300	1.3600
KCl	.3804	.3660	1.2500	1.0000	.7500	1.3300	1.8100
KBr	.4047	.3692	1.2500	1.0000	.7500	1.3300	1.9500
KI	.4392	.3664	1.2500	1.0000	.7500	1.3300	2.1600
RbF	.3359	.3594	1.2500	1.0000	.7500	1.4800	1.3600
RbCl	.3795	.3565	1.2500	1.0000	.7500	1.4800	1.8100
RbBr	.4007	.3642	1.2500	1.0000	.7500	1.4800	1.9500
RbI	.4191	.3130	1.2500	1.0000	.7500	1.4800	2.1600

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

Valor del Potencial en R de Equilibrio y de sus Derivadas respecto de R (Primera a Quinta)

	Pot. 10 ⁻¹² dyn.cm	Der.1a. 10 ⁻⁴ dyn	Der.2a. 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der.3a. 10 ⁻¹³ dyn/cm ²	Der.4a. 10 ⁻²¹ dyn/cm ³	Der.5a. 10 ⁻²⁹ dyn/cm ⁴
Sal						
LiF	3.494	-11.678	4.015	-14.221	51.880	-194.526
LiCl	2.938	-8.432	2.493	-7.586	23.682	-75.571
LiBr	2.911	-7.925	2.222	-6.403	18.909	-57.005
LiI	2.954	-7.455	1.936	-5.161	14.070	-39.080
NaF	2.898	-9.589	3.229	-11.107	39.178	-142.130
NaCl	2.566	-7.279	2.120	-6.357	19.639	-62.463
NaBr	2.529	-6.846	1.906	-5.465	16.143	-49.031
NaI	2.496	-6.318	1.647	-4.423	12.221	-34.633
KF	2.604	-8.066	2.523	-7.996	25.758	-84.696
KCl	2.373	-6.467	1.785	-5.011	14.352	-42.115
KBr	2.390	-6.183	1.625	-4.354	11.944	-33.653
KI	2.360	-5.720	1.414	-3.579	9.304	-24.906
RbF	2.490	-7.617	2.354	-7.374	23.488	-76.389
RbCl	2.270	-6.128	1.670	-4.606	12.903	-36.858
RbBr	2.273	-5.847	1.521	-4.012	10.778	-29.597
RbI	1.931	-4.794	1.207	-3.090	8.086	-21.700

Sal	Pot.Electr.	Pot.Ov.	Pot.D.D.	Pot.D.C.	Pot.Total	E.Red(kcal/mol)
LiF	-20.016	3.494	-.539	-.033	-17.09	246.03
LiCl	-15.685	2.938	-.941	-.043	-13.73	197.63
LiBr	-14.653	2.911	-1.130	-.045	-12.92	185.93
LiI	-13.437	2.954	-1.421	-.050	-11.95	172.06

NaF	-17.398	2.898	-.743	-.045	-15.29	220.05
NaCl	-14.295	2.566	-.978	-.045	-12.75	183.55
NaBr	-13.487	2.529	-1.102	-.045	-12.10	174.22
NaI	-12.453	2.496	-1.273	-.045	-11.28	162.29
KF	-15.075	2.604	-1.012	-.052	-13.54	194.81
KCl	-12.814	2.373	-1.186	-.052	-11.68	168.09
KBr	-12.223	2.390	-1.292	-.052	-11.18	160.87
KI	-11.410	2.360	-1.401	-.049	-10.50	151.12
RbF	-14.320	2.490	-1.117	-.052	-13.00	187.11
RbCl	-12.249	2.270	-1.251	-.051	-11.28	162.37
RbBr	-11.702	2.273	-1.338	-.051	-10.82	155.70
RbI	-10.981	1.931	-1.037	-.049	-10.14	145.88

Sal	s	dlms/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlms/dlnv (capas)	dB/dp
LiF	.806	.528	5.305	2.799	.443	3.852
LiCl	.776	.703	3.809	3.263	.626	4.111
LiBr	.743	.857	3.651	3.015	.751	4.151
LiI	.700	1.073	3.317	3.016	.932	4.169
NaF	.831	.508	4.018	2.406	.433	4.187
NaCl	.768	.801	2.902	2.618	.717	4.409
NaBr	.739	.950	2.488	2.593	.849	4.469
NaI	.746	.930	2.099	2.779	.855	4.538
KF	.912	.260	3.068	2.505	.228	4.399
KCl	.813	.645	2.369	2.493	.575	4.580
KBr	.777	.804	1.931	2.465	.712	4.596
KI	.756	.912	1.675	2.536	.824	4.664
RbF	.968	.093	2.541	2.685	.088	4.562
RbCl	.831	.590	1.998	2.499	.523	4.698
RbBr	.797	.738	1.512	2.470	.653	4.716
RbI	.768	.906	1.269	2.596	.816	4.845

Valor de la Constante de Fuerza en R de equilibrio
y de sus derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	A 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der.1a. 10 ⁻²⁷ dyn/cm ⁴	Der.2a. 10 ⁻⁵⁰ dyn/cm ⁷	Der.3a. 10 ⁻⁷³ dyn/cm ¹⁰
LiF	.803	-10.746	18.398	-38.423
LiCl	.458	-3.298	2.942	-3.133
LiBr	.388	-2.314	1.692	-1.463
LiI	.311	-1.443	.806	-.523
NaF	.646	-6.549	8.294	-12.757
NaCl	.401	-2.453	1.851	-1.681
NaBr	.350	-1.835	1.180	-.909
NaI	.289	-1.225	.629	-.384
KF	.485	-3.466	3.013	-3.134
KCl	.328	-1.537	.866	-.582
KBr	.289	-1.180	.580	-.340
KI	.244	-.829	.338	-.164
RbF	.451	-2.928	2.291	-2.139
RbCl	.308	-1.311	.663	-.397
RbBr	.273	-1.018	.451	-.237
RbI	.231	-.743	.285	-.130

Valor del Parametro de Carga de Intercambio D

y de sus Derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	D 10 ⁻¹⁰ e.s.u.	Der.1a. 10 ⁻¹² e.s.u./cm ³	Der.2a. 10 ⁻³⁵ e.s.u./cm ⁶	Der.3a. 10 ⁻⁵⁷ e.s.u./cm ⁹
LiF	-.325	3.145	-3.901	56.798
LiCl	-.349	1.948	-1.400	12.259
LiBr	-.527	2.455	-1.471	10.737
LiI	-.689	2.517	-1.177	6.692
NaF	-.377	2.957	-2.966	36.600
NaCl	-.517	2.470	-1.519	11.549
NaBr	-.649	2.661	-1.402	9.116
NaI	-.541	1.788	-.756	3.933
KF	-.198	1.122	-.797	6.899
KCl	-.483	1.788	-.829	4.705
KBr	-.638	2.047	-.828	4.110
KI	-.660	1.747	-.586	2.420
RbF	-.027	.137	-.088	.693
RbCl	-.485	1.638	-.686	3.482
RbBr	-.622	1.829	-.670	2.988
RbI	-.676	1.721	-.546	2.108

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn
LiF	10.603	1.996	-1.083	.817
LiCl	14.427	3.233	-3.343	3.481
LiBr	12.423	3.449	-3.758	4.636
LiI	13.518	4.193	-5.490	7.568
NaF	6.116	1.708	-.741	.934
NaCl	6.931	2.511	-1.908	3.206
NaBr	6.653	2.696	-2.202	4.189
NaI	8.298	3.226	-3.302	6.869
KF	6.710	1.758	-.914	1.722
KCl	5.746	2.225	-1.552	4.008
KBr	5.522	2.357	-1.737	5.050
KI	5.981	2.687	-2.299	7.440
RbF	8.104	1.907	-1.175	2.307
RbCl	5.597	2.232	-1.615	4.638
RbBr	5.318	2.328	-1.748	5.688
RbI	5.586	2.605	-2.192	8.014

Sal	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn	De.2a./Cte 10 ⁻²⁴ cm ⁴ /dyn ²	De.3a./Cte 10 ⁻³³ cm ⁶ /dyn ³
LiF	41.456	325.394	3700.154	-5.881	123.228	-3.997
LiCl	58.232	551.916	7252.964	-13.590	736.946	-60.737
LiBr	42.483	365.094	4161.777	-14.550	945.850	-92.974
LiI	42.279	377.108	4167.780	.000	.000	.000
NaF	18.119	108.112	907.351	-6.373	170.151	-7.139
NaCl	19.414	128.647	1118.361	-11.818	659.266	-56.615
NaBr	17.367	114.417	947.186	-13.386	880.061	-87.714
NaI	22.070	163.955	1483.062	-17.850	1678.108	-236.229
KF	18.785	120.800	1046.307	-9.270	393.255	-25.802
KCl	13.946	86.499	669.829	-13.948	1021.702	-114.655
KBr	12.685	77.989	575.692	-15.732	1356.832	-177.755
KI	13.308	86.713	646.445	-19.351	2200.212	-375.023

RbF	23.263	169.369	1610.987	-10.751	562.466	-44.960
RbCl	12.787	80.804	610.507	-14.643	1214.497	-152.979
RbBr	11.519	71.955	517.458	-16.409	1595.665	-234.177
RbI	12.335	82.088	613.541	-21.030	2654.659	-499.770

Cálculos realizados utilizando parámetros de potencial tomados de Shanker, Singh y Jain [91], modificados.

	RO	B	B++	B+-	B--	R+	R-
CsCl	.3709	.2390	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	1.6480
CsBr	.3948	.2617	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	1.8090
CsI	.4067	.2479	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	2.0480
TlCl	.4014	.4860	1.2500	1.0000	.7500	1.6810	1.6480
TlBr	.4083	.4195	1.2500	1.0000	.7500	1.6810	1.8090

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

Valor del Potencial en R de Equilibrio y de sus Derivadas respecto de R (Primera a Quinta)

Sal	Pot.	Der.1a.	Der.2a.	Der.3a.	Der.4a.	Der.5a.
	10^{-12}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-13}	10^{-21}	10^{-29}
	dyn.cm	dyn	dyn/cm	dyn/cm ²	dyn/cm ³	dyn/cm ⁴
CsCl	2.251	-6.250	1.742	-4.873	13.690	-38.624
CsBr	2.441	-6.337	1.650	-4.310	11.301	-29.747
CsI	2.277	-5.719	1.441	-3.640	9.228	-23.476
TlCl	4.740	-12.128	3.114	-8.022	20.746	-53.877
TlBr	4.898	-12.307	3.102	-7.844	19.913	-50.753

Valor del Potencial en R de equilibrio .10⁻¹² ergios

Sal	Pot.Electr.	Pot.Ov.	Pot.D.D.	Pot.D.C.	Pot.Total	E.Red(kcal/mol)
CsCl	-11.386	2.251	-1.738	-.063	-10.94	157.41
CsBr	-10.930	2.441	-2.021	-.064	-10.57	152.20
CsI	-10.278	2.277	-1.978	-.060	-10.04	144.49
TlCl	-12.221	4.740	-4.451	-.178	-12.11	174.30
TlBr	-11.924	4.898	-4.765	-.181	-11.97	172.31

Sal	s	dlns/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlns/dlnv (capas)	dB/dp
CsCl	.850	.571	1.809	3.133	.501	5.163
CsBr	.820	.690	1.310	2.995	.602	5.070
CsI	.770	.968	1.146	2.975	.861	5.210
TlCl	.860	.447	1.111	3.896	.336	4.479
TlBr	.840	.527	.831	3.715	.411	4.525

Valor de la Constante de Fuerza en R de equilibrio y de sus derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	A	Der.1a.	Der.2a.	Der.3a.
	10^{-5}	10^{-27}	10^{-50}	10^{-73}
	dyn/cm	dyn/cm ⁴	dyn/cm ⁷	dyn/cm ¹⁰
CsCl	.318	-1.588	.902	-.591
CsBr	.282	-1.210	.589	-.330
CsI	.250	-.930	.390	-.188
TlCl	.363	-1.799	.967	-.556
TlBr	.354	-1.659	.838	-.453

Valor del Parametro de Carga de Intercambio D

y de sus Derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

	D	Der.1a.	Der.2a.	Der.3a.
Sal	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹²	10 ⁻³⁵	10 ⁻⁵⁷
	e.s.u.	e.s.u./cm ³	e.s.u./cm ⁶	e.s.u./cm ⁹
CsCl	-.472	1.790	-.811	4.301
CsBr	-.579	1.860	-.715	3.212
CsI	-.710	1.981	-.660	2.571
TlCl	-.574	2.077	-.889	4.243
TlBr	-.587	1.997	-.805	3.633

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte
				10 ⁻¹² cm ² /dyn
CsCl	7.417	2.666	-2.478	4.814
CsBr	7.150	2.773	-2.661	5.854
CsI	6.617	3.033	-3.109	7.481
TlCl	35.804	4.761	-8.397	7.472
TlBr	35.588	5.319	-10.352	8.649

Sal	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte	De.2a./Cte	De.3a./Cte
				10 ⁻¹²	10 ⁻²⁴	10 ⁻³³
				cm ² /dyn	cm ⁴ /dyn ²	cm ⁶ /dyn ³
CsCl	22.255	195.009	2108.371	-15.542	1260.122	-151.758
CsBr	19.567	165.100	1653.859	-16.694	1542.574	-209.786
CsI	16.375	138.671	1300.321	-18.065	2012.248	-324.750
TlCl	146.189	2431.971	43102.313	-17.300	1804.315	-252.331
TlBr	123.538	2116.804	33553.086	-15.427	1661.432	-222.492

MODELO DE CAPAS SIMPLE

Sal	s	dlns/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlns/dlnv (capas)	dB/dp
CsCl	.850	.571	1.568	3.545	.595	5.163
CsBr	.820	.690	1.103	3.475	.723	5.070
CsI	.770	.968	.955	3.477	1.025	5.210
TlCl	.860	.447	.640	-3.662	.437	4.479
TlBr	.840	.527	.445	-3.505	.520	4.525

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte
				10 ⁻¹² cm ² /dyn
CsCl	10.626	2.700	-2.412	4.628
CsBr	11.050	2.822	-2.559	5.531
CsI	10.643	3.120	-2.956	6.915
TlCl	-116.526	4.802	-8.219	7.253
TlBr	-134.407	5.399	-10.253	8.440

Sal	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte	De.2a./Cte	De.3a./Cte
				10 ⁻¹²	10 ⁻²⁴	10 ⁻³³
				cm ² /dyn	cm ⁴ /dyn ²	cm ⁶ /dyn ³
CsCl	39.903	414.688	5639.199	-19.452	1741.401	-231.840
CsBr	39.910	410.830	5456.182	-22.032	2285.215	-350.274
CsI	35.815	367.901	4705.073	-24.565	3059.680	-557.710
TlCl	1291.023	*****	*****	46.943	1001.212	-64.334
TlBr	1482.729	*****	-7678.846	49.024	882.472	-144.227

Cálculos realizados utilizando parámetros de potencial tomados de Singh y Khare [90], modificados.

	RO+-	B	B++	B+-	B--	R+	R-	RO++	RO--
CsF	.3445	.2373	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	1.1790	.3445	.3445
AgCl	.3148	.5330	1.2500	1.0000	.7500	1.2600	1.6480	.1721	.1647
AgBr	.3038	.3663	1.2500	1.0000	.7500	1.2600	1.8090	.3918	.4266

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

Valor del Potencial en R de Equilibrio y de sus Derivadas respecto de R (Primera a Quinta)

Sal	Pot. 10 ⁻¹² dyn.cm	Der.1a. 10 ⁻⁴ dyn	Der.2a. 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der.3a. 10 ⁻¹³ dyn/cm ²	Der.4a. 10 ⁻²¹ dyn/cm ³	Der.5a. 10 ⁻²⁹ dyn/cm ⁴
CsF	2.283	-7.225	2.343	-7.810	26.812	-94.826
AgCl	4.981	-16.120	5.377	-19.280	80.126	-416.524
AgBr	4.653	-15.345	5.062	-16.698	55.090	-181.782

Valor del Potencial en R de equilibrio .10⁻¹² ergios

Sal	Pot.Electr.	Pot.Ov.	Pot.D.D.	Pot.D.C.	Pot.Total	E.Red(kcal/mol)
CsF	-13.419	2.283	-1.310	-.053	-12.50	179.91
AgCl	-14.542	4.981	-4.660	-.273	-14.49	208.61
AgBr	-13.978	4.653	-4.708	-.254	-14.29	205.63

Sal	s	dlns/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlns/dlnv (capas)	dB/dp
CsF	.930	.239	2.896	2.699	.194	5.130
AgCl	.680	1.418	3.074	2.864	1.261	5.460
AgBr	.670	1.518	2.347	2.485	1.317	5.061

Valor de la Constante de Fuerza en R de equilibrio y de sus derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	A 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der.1a. 10 ⁻²⁷ dyn/cm ⁴	Der.2a. 10 ⁻⁵⁰ dyn/cm ⁷	Der.3a. 10 ⁻⁷³ dyn/cm ¹⁰
CsF	.465	-2.968	2.251	-2.015
AgCl	.732	-6.516	7.797	-12.645
AgBr	.710	-5.020	3.891	-3.407

Valor del Parametro de Carga de Intercambio D y de sus Derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	D 10 ⁻¹⁰ e.s.u.	Der.1a. 10 ⁻¹² e.s.u./cm ³	Der.2a. 10 ⁻³⁵ e.s.u./cm ⁶	Der.3a. 10 ⁻⁵⁷ e.s.u./cm ⁹
CsF	-.348	1.749	-1.102	8.437
AgCl	-1.087	6.519	-5.396	63.588
AgBr	-.974	5.269	-3.444	26.681

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn
CsF	5.811	2.093	-1.492	2.767
AgCl	9.683	5.269	-9.573	4.129
AgBr	10.060	5.750	-11.197	4.749

Sal	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn	De.2a./Cte 10 ⁻²⁴ cm ⁴ /dyn ²	De.3a./Cte 10 ⁻³³ cm ⁶ /dyn ³
CsF	13.588	96.207	783.866	-9.073	567.320	-55.158
AgCl	10.809	138.690	617.204	-2.537	117.510	-5.951
AgBr	4.819	135.179	325.980	-1.168	102.821	-6.007

Cálculo utilizando los parámetros del potencial de datos cristalinos de Shanker y Agrawal [92] modificados.

Paámetros del potencial

	B	B++	B+-	B--	R+	R-	Ro+	Ro-
LiF	1.0274	2.0000	1.3750	.7500	.9240	1.1330	.0580	.2279
LiCl	.7236	2.0000	1.3750	.7500	.9240	1.6480	.0618	.2640
LiBr	.6761	2.0000	1.3750	.7500	.9240	1.8090	.0638	.2774
LiI	.5909	2.0000	1.3750	.7500	.9240	2.0480	.0669	.2978
NaF	1.4344	1.2500	1.0000	.7500	1.1810	1.1330	.0587	.2349
NaCl	.9167	1.2500	1.0000	.7500	1.1810	1.6480	.0623	.2710
NaBr	.8364	1.2500	1.0000	.7500	1.1810	1.8090	.0639	.2827
NaI	.7243	1.2500	1.0000	.7500	1.1810	2.0480	.0662	.3002
KF	1.4160	1.2500	1.0000	.7500	1.5030	1.1330	.0693	.2537
KCl	.9332	1.2500	1.0000	.7500	1.5030	1.6480	.0717	.2855
KBr	.8423	1.2500	1.0000	.7500	1.5030	1.8090	.0740	.2997
KI	.7309	1.2500	1.0000	.7500	1.5030	2.0480	.0766	.3182
RbF	1.3465	1.2500	1.0000	.7500	1.6450	1.1330	.0627	.2657
RbCl	.9168	1.2500	1.0000	.7500	1.6450	1.6480	.0646	.2975
RbBr	.8357	1.2500	1.0000	.7500	1.6450	1.8090	.0665	.3115
RbI	.6384	1.2500	1.0000	.7500	1.6450	2.0480	.0669	.3215

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

Valor del Potencial en R de Equilibrio y de sus Derivadas respecto de R (Primera a Quinta)

Sal	Pot. 10 ⁻¹² dyn.cm	Der.1a. 10 ⁻⁴ dyn	Der.2a. 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der.3a. 10 ⁻¹³ dyn/cm ²	Der.4a. 10 ⁻²¹ dyn/cm ³	Der.5a. 10 ⁻²⁹ dyn/cm ⁴
LiF	3.405	-11.678	4.015	-13.852	48.158	-171.232
LiCl	2.862	-8.432	2.493	-7.400	22.035	-65.824
LiBr	2.839	-7.924	2.222	-6.254	17.674	-50.129
LiI	2.885	-7.455	1.936	-5.052	13.244	-34.869
NaF	2.855	-9.587	3.228	-10.932	37.638	-136.534
NaCl	2.507	-7.278	2.120	-6.195	18.155	-53.366
NaBr	2.469	-6.846	1.906	-5.325	14.929	-41.993
NaI	2.435	-6.318	1.647	-4.313	11.344	-29.950
KF	2.608	-8.063	2.522	-8.173	29.319	-132.567
KCl	2.346	-6.467	1.785	-4.938	13.697	-38.245
KBr	2.358	-6.183	1.625	-4.278	11.290	-29.893
KI	2.320	-5.720	1.414	-3.503	8.702	-21.668
RbF	2.503	-7.616	2.354	-7.670	29.316	-157.264
RbCl	2.253	-6.127	1.669	-4.558	12.484	-34.442
RbBr	2.254	-5.846	1.520	-3.963	10.353	-27.141
RbI	1.911	-4.793	1.206	-3.044	7.703	-19.540

Sal	Pot.Electr.	Pot.Ov.	Pot.D.D.	Pot.D.C.	Pot.Total	E.Red(kcal/mol)
LiF	-20.016	3.405	-.539	-.033	-17.18	247.33

.10⁻¹² ergios

LiCl	-15.685	2.862	-.941	-.043	-13.81	198.72
LiBr	-14.653	2.839	-1.130	-.045	-12.99	186.97
LiI	-13.437	2.885	-1.421	-.050	-12.02	173.06
NaF	-17.398	2.855	-.743	-.045	-15.33	220.66
NaCl	-14.295	2.507	-.978	-.045	-12.81	184.39
NaBr	-13.487	2.469	-1.102	-.045	-12.17	175.09
NaI	-12.453	2.435	-1.273	-.045	-11.34	163.16
KF	-15.075	2.608	-1.012	-.052	-13.53	194.75
KCl	-12.814	2.346	-1.186	-.052	-11.71	168.47
KBr	-12.223	2.358	-1.292	-.052	-11.21	161.34
KI	-11.410	2.320	-1.401	-.049	-10.54	151.70
RbF	-14.320	2.503	-1.117	-.052	-12.99	186.91
RbCl	-12.249	2.253	-1.251	-.051	-11.30	162.61
RbBr	-11.702	2.254	-1.338	-.051	-10.84	155.98
RbI	-10.981	1.911	-1.037	-.049	-10.16	146.18

Sal	s	dlms/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlms/dlnv (capas)	dB/dp
LiF	.806	.523	5.305	2.603	.424	3.749
LiCl	.776	.698	3.809	3.027	.600	3.995
LiBr	.743	.850	3.651	2.812	.721	4.034
LiI	.700	1.065	3.317	2.817	.897	4.052
NaF	.831	.506	4.017	2.323	.423	4.118
NaCl	.768	.795	2.901	2.471	.690	4.283
NaBr	.739	.943	2.488	2.447	.818	4.336
NaI	.746	.924	2.099	2.614	.822	4.401
KF	.912	.260	3.065	2.638	.233	4.511
KCl	.813	.643	2.369	2.416	.564	4.503
KBr	.777	.801	1.931	2.373	.697	4.500
KI	.756	.908	1.675	2.421	.801	4.544
RbF	.968	.093	2.540	2.950	.094	4.769
RbCl	.831	.589	1.997	2.447	.517	4.644
RbBr	.797	.737	1.511	2.409	.644	4.650
RbI	.768	.903	1.269	2.525	.803	4.766

Valor de la Constante de Fuerza en R de equilibrio
y de sus derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	A 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der.1a. 10 ⁻²⁷ dyn/cm ⁴	Der.2a. 10 ⁻⁵⁰ dyn/cm ⁷	Der.3a. 10 ⁻⁷³ dyn/cm ¹⁰
LiF	.803	-10.240	16.303	-31.496
LiCl	.458	-3.141	2.593	-2.486
LiBr	.388	-2.205	1.493	-1.160
LiI	.311	-1.376	.711	-.413
NaF	.646	-6.368	7.799	-11.960
NaCl	.401	-2.340	1.634	-1.342
NaBr	.350	-1.748	1.039	-.724
NaI	.289	-1.167	.555	-.308
KF	.485	-3.605	3.658	-5.372
KCl	.328	-1.496	.804	-.508
KBr	.289	-1.141	.529	-.286
KI	.244	-.795	.302	-.134
RbF	.451	-3.136	3.151	-4.894
RbCl	.308	-1.286	.630	-.362
RbBr	.273	-.995	.424	-.210

RbI	.231	-.724	.265	-.114
-----	------	-------	------	-------

Valor del Parametro de Carga de Intercambio D
y de sus Derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

	D	Der.1a.	Der.2a.	Der.3a.
Sal	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹²	10 ⁻³⁵	10 ⁻⁵⁷
	e.s.u.	e.s.u./cm ³	e.s.u./cm ⁶	e.s.u./cm ⁹
LiF	-.325	3.031	-3.347	38.516
LiCl	-.349	1.891	-1.254	9.678
LiBr	-.527	2.387	-1.330	8.691
LiI	-.689	2.453	-1.076	5.562
NaF	-.377	2.911	-2.786	32.504
NaCl	-.517	2.416	-1.387	9.470
NaBr	-.649	2.600	-1.281	7.520
NaI	-.541	1.747	-.693	3.287
KF	-.198	1.125	-.846	9.029
KCl	-.484	1.771	-.793	4.242
KBr	-.638	2.023	-.784	3.626
KI	-.660	1.722	-.549	2.091
RbF	-.027	.138	-.098	1.047
RbCl	-.485	1.628	-.666	3.254
RbBr	-.622	1.817	-.648	2.751
RbI	-.676	1.708	-.525	1.918

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn
LiF	10.603	1.996	-1.094	.824
LiCl	14.430	3.233	-3.365	3.504
LiBr	12.424	3.449	-3.784	4.667
LiI	13.518	4.193	-5.528	7.620
NaF	6.118	1.708	-.744	.937
NaCl	6.931	2.511	-1.919	3.226
NaBr	6.653	2.696	-2.217	4.217
NaI	8.297	3.226	-3.322	6.909
KF	6.718	1.758	-.914	1.721
KCl	5.747	2.225	-1.554	4.015
KBr	5.523	2.357	-1.742	5.062
KI	5.981	2.687	-2.307	7.465
RbF	8.110	1.907	-1.175	2.307
RbCl	5.600	2.232	-1.616	4.641
RbBr	5.321	2.328	-1.750	5.694
RbI	5.589	2.605	-2.196	8.027

Sal	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn	De.2a./Cte 10 ⁻²⁴ cm ⁴ /dyn ²	De.3a./Cte 10 ⁻³³ cm ⁶ /dyn ³
LiF	37.692	278.848	2957.276	-5.346	108.406	-3.403
LiCl	52.248	470.620	5717.500	-12.191	641.800	-51.104
LiBr	38.204	315.585	3331.969	-13.084	831.975	-79.475
LiI	37.766	327.539	3331.105	.000	.000	.000
NaF	17.304	100.026	818.863	-6.084	160.003	-6.637
NaCl	17.851	114.892	945.637	-10.865	597.395	-50.427
NaBr	15.931	102.205	799.079	-12.279	796.413	-78.003
NaI	20.014	144.993	1225.763	-16.188	1501.820	-207.239
KF	20.196	122.240	1110.577	-9.954	409.801	-26.838

KCl	13.323	81.831	617.801	-13.323	971.339	-108.271
KBr	12.000	73.072	522.482	-14.881	1277.479	-166.062
KI	12.385	79.914	570.152	-18.005	2037.319	-343.797
RbF	26.650	174.884	1821.907	-12.307	610.759	-48.825
RbCl	12.409	78.088	581.024	-14.204	1175.630	-147.541
RbBr	11.113	69.198	488.174	-15.822	1536.233	-224.545
RbI	11.837	78.473	573.371	-20.172	2541.483	-476.083

Cálculo utilizando los parámetros del potencial de datos de solapamiento de Shanker y Agrawal [92] modificados.

Paámetros del potencial

	B	B++	B+-	B--	R+	R-	Ro+	Ro-
LiF	1.0301	2.0000	1.3750	.7500	.9240	1.1330	.0616	.2251
LiCl	.7227	2.0000	1.3750	.7500	.9240	1.6480	.0592	.2658
LiBr	.6748	2.0000	1.3750	.7500	.9240	1.8090	.0581	.2811
LiI	.5902	2.0000	1.3750	.7500	.9240	2.0480	.0583	.3029
NaF	1.4432	1.2500	1.0000	.7500	1.1810	1.1330	.0680	.2277
NaCl	.9189	1.2500	1.0000	.7500	1.1810	1.6480	.0653	.2688
NaBr	.8364	1.2500	1.0000	.7500	1.1810	1.8090	.0638	.2828
NaI	.7232	1.2500	1.0000	.7500	1.1810	2.0480	.0634	.3020
KF	1.3879	1.2500	1.0000	.7500	1.5030	1.1330	.0962	.2386
KCl	.9446	1.2500	1.0000	.7500	1.5030	1.6480	.0889	.2712
KBr	.8508	1.2500	1.0000	.7500	1.5030	1.8090	.0879	.2885
KI	.7366	1.2500	1.0000	.7500	1.5030	2.0480	.0877	.3097
RbF	1.2502	1.2500	1.0000	.7500	1.6450	1.1330	.1127	.2437
RbCl	.9362	1.2500	1.0000	.7500	1.6450	1.6480	.1005	.2669
RbBr	.8540	1.2500	1.0000	.7500	1.6450	1.8090	.0992	.2839
RbI	.6518	1.2500	1.0000	.7500	1.6450	2.0480	.0967	.2973

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

Sal	s	dlns/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlns/dlnv (capas)	dB/dp
LiF	.806	.523	5.305	2.605	.424	3.750
LiCl	.776	.698	3.809	3.031	.600	3.997
LiBr	.743	.850	3.651	2.822	.722	4.040
LiI	.700	1.066	3.317	2.834	.900	4.063
NaF	.831	.506	4.017	2.340	.425	4.132
NaCl	.768	.795	2.902	2.469	.690	4.281
NaBr	.739	.943	2.488	2.447	.818	4.336
NaI	.746	.924	2.099	2.618	.823	4.404
KF	.912	.261	3.065	2.781	.240	4.631
KCl	.813	.643	2.369	2.416	.564	4.503
KBr	.777	.801	1.931	2.369	.696	4.496
KI	.756	.908	1.675	2.415	.800	4.538
RbF	.968	.094	2.540	3.205	.099	4.967
RbCl	.831	.589	1.997	2.460	.518	4.657
RbBr	.797	.736	1.511	2.406	.643	4.647
RbI	.768	.903	1.269	2.515	.801	4.754

Valor del Parametro de Carga de Intercambio D
y de sus Derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	D 10 ⁻¹⁰	Der.1a. 10 ⁻¹²	Der.2a. 10 ⁻³⁵	Der.3a. 10 ⁻⁵⁷
Sal	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹²	10 ⁻³⁵	10 ⁻⁵⁷

	e.s.u.	e.s.u./cm ³	e.s.u./cm ⁶	e.s.u./cm ⁹
LiF	-.325	3.030	-3.351	38.966
LiCl	-.349	1.892	-1.257	9.726
LiBr	-.527	2.391	-1.337	8.788
LiI	-.689	2.458	-1.084	5.659
NaF	-.377	2.913	-2.815	33.908
NaCl	-.517	2.414	-1.385	9.439
NaBr	-.649	2.600	-1.281	7.521
NaI	-.541	1.748	-.695	3.301
KF	-.198	1.141	-.910	10.237
KCl	-.484	1.770	-.793	4.260
KBr	-.638	2.021	-.782	3.612
KI	-.660	1.720	-.548	2.077
RbF	-.027	.142	-.109	1.165
RbCl	-.485	1.628	-.670	3.341
RbBr	-.622	1.814	-.646	2.754
RbI	-.676	1.704	-.521	1.894

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn		
LiF	10.603	1.996	-1.094	.824		
LiCl	14.430	3.233	-3.364	3.503		
LiBr	12.425	3.449	-3.782	4.666		
LiI	13.518	4.193	-5.524	7.615		
NaF	6.118	1.708	-.743	.937		
NaCl	6.931	2.511	-1.920	3.226		
NaBr	6.653	2.696	-2.217	4.217		
NaI	8.297	3.226	-3.321	6.909		
KF	6.718	1.758	-.913	1.719		
KCl	5.747	2.225	-1.554	4.015		
KBr	5.523	2.357	-1.742	5.062		
KI	5.981	2.687	-2.308	7.467		
RbF	8.110	1.907	-1.174	2.306		
RbCl	5.600	2.232	-1.616	4.641		
RbBr	5.321	2.328	-1.750	5.694		
RbI	5.589	2.605	-2.196	8.029		

Sal	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn	De.2a./Cte 10 ⁻²⁴ cm ⁴ /dyn ²	De.3a./Cte 10 ⁻³³ cm ⁶ /dyn ³
LiF	37.726	278.840	2957.980	-5.351	108.450	-3.404
LiCl	52.365	472.122	5744.967	-12.219	643.585	-51.280
LiBr	38.418	317.901	3369.764	-13.157	837.390	-80.103
LiI	38.155	331.501	3396.820	.000	.000	.000
NaF	17.464	100.630	826.998	-6.140	161.242	-6.689
NaCl	17.823	114.644	942.605	-10.849	596.313	-50.319
NaBr	15.933	102.216	799.216	-12.280	796.489	-78.012
NaI	20.058	145.387	1231.012	-16.223	1505.522	-207.840
KF	21.691	138.675	1277.823	-10.690	452.176	-30.047
KCl	13.325	81.608	616.006	-13.325	970.114	-108.069
KBr	11.969	72.752	519.256	-14.842	1273.038	-165.374
KI	12.336	79.520	565.797	-17.935	2028.350	-342.047
RbF	29.878	230.369	2488.936	-13.797	744.064	-62.089
RbCl	12.501	78.116	583.112	-14.309	1180.297	-148.017
RbBr	11.091	68.758	484.242	-15.790	1529.874	-223.363

RbI 11.758 77.766 565.581 -20.037 2521.544 -471.730

Cálculo utilizando los parámetros del potencial de datos cristalinos de Shanker y Agrawal [92] modificados.

Paámetros del potencial

	B	B++	B+-	B--	R+	R-	Ro+	Ro-
CsCl	.7079	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	1.6480	.0746	.3188
CsBr	.7148	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	1.8090	.0722	.3140
CsI	.6259	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	2.0480	.0703	.3130

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

Valor del Potencial en R de Equilibrio y de sus Derivadas respecto de R (Primera a Quinta)

Sal	Pot. 10 ⁻¹² dyn.cm	Der.1a. 10 ⁻⁴ dyn	Der.2a. 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der.3a. 10 ⁻¹³ dyn/cm ²	Der.4a. 10 ⁻²¹ dyn/cm ³	Der.5a. 10 ⁻²⁹ dyn/cm ⁴
CsCl	2.442	-6.250	1.742	-5.830	26.066	-153.990
CsBr	2.519	-6.337	1.650	-4.636	15.453	-68.548
CsI	2.310	-5.719	1.441	-3.707	9.927	-29.261

Valor del Potencial en R de equilibrio .10⁻¹² ergios

Sal	Pot.Electr.	Pot.Ov.	Pot.D.D.	Pot.D.C.	Pot.Total	E.Red(kcal/mol)
CsCl	-11.386	2.442	-1.738	-.063	-10.75	154.66
CsBr	-10.930	2.519	-2.021	-.064	-10.50	151.07
CsI	-10.278	2.310	-1.978	-.060	-10.01	144.01

Sal	s	dlns/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlns/dlnv (capas)	dB/dp
CsCl	.850	.582	1.809	4.395	.599	6.356
CsBr	.820	.695	1.310	3.483	.648	5.549
CsI	.770	.971	1.146	3.087	.881	5.327

Valor de la Constante de Fuerza en R de equilibrio y de sus derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	A 10 ⁻⁵ dyn/cm	Der.1a. 10 ⁻²⁷ dyn/cm ⁴	Der.2a. 10 ⁻⁵⁰ dyn/cm ⁷	Der.3a. 10 ⁻⁷³ dyn/cm ¹⁰
CsCl	.318	-2.130	2.091	-2.689
CsBr	.282	-1.380	.928	-.880
CsI	.250	-.961	.434	-.245

Valor del Parametro de Carga de Intercambio D y de sus Derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

Sal	D 10 ⁻¹⁰ e.s.u.	Der.1a. 10 ⁻¹² e.s.u./cm ³	Der.2a. 10 ⁻³⁵ e.s.u./cm ⁶	Der.3a. 10 ⁻⁵⁷ e.s.u./cm ⁹
CsCl	-.472	1.960	-1.348	14.378
CsBr	-.579	1.926	-.897	6.313
CsI	-.710	2.011	-.702	3.057

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn
CsCl	7.418	2.666	-2.460	4.779

CsBr	7.150	2.773	-2.651	5.832		
CsI	6.617	3.033	-3.103	7.467		
	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte	De.2a./Cte	De.3a./Cte
Sal				10 ⁻¹²	10 ⁻²⁴	10 ⁻³³
				cm ² /dyn	cm ⁴ /dyn ²	cm ⁶ /dyn ³
CsCl	35.237	347.082	4619.608	-24.606	2133.647	-279.115
CsBr	24.272	198.516	2198.689	-20.709	1880.803	-260.888
CsI	17.329	145.762	1421.725	-19.118	2121.520	-345.169

Cálculo utilizando los parámetros del potencial de datos de solapamiento de Shanker y Agrawal [92] modificados.

Paámetros del potencial

	B	B++	B+-	B--	R+	R-	Ro+	Ro-
CsCl	.6666	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	1.6480	.1250	.2686
CsBr	.6898	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	1.8090	.1208	.2795
CsI	.6236	1.2500	1.0000	.7500	1.9030	2.0480	.1131	.2812

MOD.DE CARGAS DE INTERCAMBIO. CALCULO C.P.S.

Valor del Potencial en R de Equilibrio y de sus Derivadas respecto de R (Primera a Quinta)

	Pot.	Der.1a.	Der.2a.	Der.3a.	Der.4a.	Der.5a.
Sal	10 ⁻¹²	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵	10 ⁻¹³	10 ⁻²¹	10 ⁻²⁹
	dyn.cm	dyn	dyn/cm	dyn/cm ²	dyn/cm ³	dyn/cm ⁴
CsCl	2.343	-6.250	1.742	-5.172	16.665	-58.776
CsBr	2.506	-6.337	1.650	-4.504	13.206	-42.596
CsI	2.301	-5.719	1.441	-3.706	9.881	-27.948

Valor del Potencial en R de equilibrio .10⁻¹² ergios

	Pot.Electr.	Pot.Ov.	Pot.D.D.	Pot.D.C.	Pot.Total	E.Red(kcal/mol)
Sal	-11.386	2.343	-1.738	-.063	-10.84	156.08
CsCl	-11.386	2.343	-1.738	-.063	-10.84	156.08
CsBr	-10.930	2.506	-2.021	-.064	-10.51	151.27
CsI	-10.278	2.301	-1.978	-.060	-10.01	144.14

	s	dlns/dlnV (dip.def.)	Wt 10 ⁻¹³ /s	gamma_t	dlns/dlnv (capas)	dB/dp
Sal	.850	.576	1.809	3.531	.536	5.536
CsCl	.850	.576	1.809	3.531	.536	5.536
CsBr	.820	.694	1.310	3.287	.632	5.354
CsI	.770	.970	1.146	3.085	.879	5.327

Valor de la Constante de Fuerza en R de equilibrio y de sus derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

	A	Der.1a.	Der.2a.	Der.3a.
Sal	10 ⁻⁵	10 ⁻²⁷	10 ⁻⁵⁰	10 ⁻⁷³
	dyn/cm	dyn/cm ⁴	dyn/cm ⁷	dyn/cm ¹⁰
CsCl	.318	-1.757	1.187	-.971
CsBr	.282	-1.310	.744	-.519
CsI	.250	-.961	.431	-.233

Valor del Parametro de Carga de Intercambio D y de sus Derivadas respecto de V (Primera a Tercera)

	D	Der.1a.	Der.2a.	Der.3a.
Sal	10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹²	10 ⁻³⁵	10 ⁻⁵⁷
	e.s.u.	e.s.u./cm ³	e.s.u./cm ⁶	e.s.u./cm ⁹

CsCl	-.472	1.868	-.984	6.675
CsBr	-.579	1.914	-.828	4.650
CsI	-.710	2.003	-.700	3.014

Constantes dielectricas y Derivadas

Sal	Cte.Estat.	Cte.Alt.Fr.	VdCAF/dV	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn		
CsCl	7.418	2.666	-2.471	4.801		
CsBr	7.149	2.773	-2.654	5.839		
CsI	6.617	3.033	-3.104	7.469		

Sal	V.De1a.	V ² .De2a.	V ³ .De3a.	De.1a/Cte 10 ⁻¹² cm ² /dyn	De.2a./Cte 10 ⁻²⁴ cm ⁴ /dyn ²	De.3a./Cte 10 ⁻³³ cm ⁶ /dyn ³
CsCl	26.397	243.318	2904.167	-18.433	1538.010	-192.202
CsBr	22.409	192.827	2077.765	-19.119	1786.172	-248.490
CsI	17.301	146.205	1411.550	-19.087	2123.528	-344.955

Bibliografía

- [1] Friedrich W., Knipping P. y von Laue M.; *Sitzungsber. Math.-Phys. Kl. Bayer. Akad. Wiss.*, 303 (1912);
von Laue M.; *Sitzungsber. Math.-Phys. Kl. Bayer. Akad. Wiss.*, 363 (1912);
Friedrich W., Knipping P. y von Laue M.; *Ann. Physik (Leipzig)*, 41, 971 (1913).
- [2] Tosi M.P.; *Solid State Physics*, 16, 1, Academic Press, Nueva York (1964).
- [3] Huggins M.L. y Mayer J.E.; *J. Chem. Phys.*, 1, 643 (1933);
Huggins M.L.; *J. Chem. Phys.*, 15, 212 (1947);
Born M. y Goeppert-Mayer M.; *Handbuch der Physik*, , Vol. 24, Parte 2, Springer-Verlag, Berlín (1933).
- [4] Löwdin P.-O.; *A Theoretical Investigation into Some Properties of Ionic Crystals*, Tesis Doctoral, Uppsala University, Uppsala, Suecia (1948).
- [5] Kellermann E.W.; *Phil. Trans. Roy. Soc. (London)*, A238, 513 (1940).
- [6] Ewald P.P.; *Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, Jahresber. Math.-Phys. Kl. Fachgrup. I*, 55 (1938).
- [7] Lundqvist S.O., Lundstrom V., Tenerz E. y Waller I.; *Ark. Fys.*, 15, 193 (1959).
- [8] Brockhouse B.N. y Iyengar P.K.; *Phys. Rev.*, 108, 894 (1957).
- [9] Dick Jr. B.G. y Overhauser A.W.; *Phys. Rev.*, 112, 90 (1958).
- [10] Szigeti B.; *Trans. Far. Soc.*, 45, 155 (1949).
- [11] Szigeti B.; *Proc. Roy. Soc.*, A204, 51 (1950).
- [12] Lyddane R.H., Sachs R. y Teller E.; *Phys. Rev.*, 59, 673 (1941).
- [13] Cochran W.; *Proc. Roy. Soc.*, A253, 260 (1959).
- [14] Hardy J.R.; *Phil. Mag.*, 7, 315 (1962).
- [15] Zeyher R.; *Phys. Rev. Lett.*, 35, 174 (1975).

- [16] Basu A.N. y Sengupta S.; *Phys.Rev.B*, **14**, 2633 (1976).
- [17] Löwdin P.-O.; *Ark.Mat.Astra.Fys.*, **35A**, 30 (1947).
- [18] Lundqvist S.O.; *Ark.Fys.*, **9** 435 (1955);
Lundqvist S.O.; *Ark.Fys.*, **12** 263 (1957).
- [19] Tolpygo K.B.; *J.Exp.Theo.Phys.*, **20**, 497 (1950);
Tolpygo K.B.; *Ukr.Fiz.*, **4**, 72 (1959); *Sov. Phys. (Solid State)*, **3**, 685 (1961).
- [20] Meissner G.; *Z.Phys.*, **235**, 85 (1970).
- [21] Singh R.K.; *Physics Reports*, **85**, 259 (1982).
- [22] Vetelino J.F. y Mitra S.S.; *Phys.Rev.*, **178**, 1349 (1969).
- [23] Namjoshi K.V., Mitra S.S. y Vetelino J.F.; *Sol.State Commun.*, **9**, 185 (1979).
- [24] Vetelino J.F., Mitra S.S. y Namjoshi K.V.; *Phys.Rev.B*, **2**, 2167 (1970).
- [25] Buyers W.J.L.; *Phys.Rev.*, **153**, 923 (1967).
- [26] Karo A.M. y Hardy J.R.; *Phys.Rev.*, **181**, 612 (1969).
- [27] Lundqvist S.O.; *Ark.Fys.*, **9**, 435 (1955).
- [28] Jaswal S.S. y Hardy J.R.; *Localised Excitations in Solids*, R.F.Wallis ed., Plenum Press, Nueva York (1968).
- [29] Cunningham S.L. et al.; *Phys.Rev.B*, **10**, 3500 (1974).
- [30] Mashkevitch V.S.; *Sov.Phys. (Solid State)*, **2**, 2345 (1961).
- [31] Cowley R.A.; *Proc.Roy.Soc.*, **A268**, 121 (1962).
- [32] Demidenko Z.A., Kucher T.I. y Tolpygo K.B.; *Sov.Phys. (Solid State)*, **4**, 73 (1962).
- [33] Martin R.M.; *Phys.Rev.*, **186**, 871 (1969).
- [34] Phillips J.C.; *Covalent Bonding in Crystals, Molecules and Polymers*, Chicago University Press (1960).
- [35] Sinha S.K.; *Phys.Rev.*, **177**, 1256 (1969).
- [36] Born M. y Oppenheimer; *Ann.Phys.*, **84**, 457 (1927).
- [37] Wakabayasi N. y Sinha S.K.; *Phys.Rev.B*, **10**, 745 (1975).

- [38] Born M. y von Kármán T.; *Physik.Z.*, **13**, 297 (1912);
Born M. y von Kármán T.; *Physik.Z.*, **14**, 15 (1913);
Born M.; *Dynamik der Kristallgitter*, Teubner, Leipzig (1915);
Born M.; *Atomtheorie des festen Zustandes*, Teubner, Leipzig (1923).
- [39] Batana A. y Faour J.; *J.Phys.Chem.Solids*, **45**, 5, 571 (1984).
- [40] Batana A. y Hense C.; *J.Phys.Chem.Solids*, **41**, 863 (1980).
- [41] Batana A. y Soriano M.R.; *J.Phys.Chem.Solids*, **44**, 8, 741 (1983).
- [42] Tribe L. y Batana A.; *An.Asoc.Quim.Arg.*, **82**, 5, 391 (1994).
- [43] Batana A. y Bruno J.A.O.; *J.Phys.Chem.Solids*, **51**, 10, 1237 (1990).
- [44] Batana A. y Soriano M.R.; *Phys.Stat.Sol.(a)*, **98**, 1, K15 (1986).
- [45] Batana A. y Faour J.; *Phys.Stat.Sol.(b)*, **130**, 115 (1985).
- [46] Batana A., Monard M.C. y Soriano M.R.; *Comp.Phys.Comm.*, **43**, 3 (1987).
- [47] Batana A. y Bruno J.A.O.; *Computers Chem.*, **15**, 225 (1991).
- [48] Batana A. y Faour J.; *Phys. Stat.Sol.(b)*, **140**, K87 (1987).
- [49] Batana A. y Castillo A.D.; *J.Phys.Chem.Solids*, **50**, 9, 981 (1989).
- [50] Ewald P.P.; *Ann.Physik*, **64**, 253 (1921).
- [51] Madelung E.; *Physik.Z.*, **19**, 524 (1918).
- [52] Ejven H.M.; *Phys.Rev.*, **39**, 675 (1932).
- [53] London F.; *Z.Physik.Chem.*, **B11**, 222 (1930);
London F.; *Trans. Faraday Soc.*, **33**, 8 (1937).
- [54] Margenau H.; *Phys.Rev.*, **38**, 747 (1931);
Margenau H.; *Rev.Mod.Phys.*, **11**, 1 (1939).
- [55] Mayer J.E.; *J.Chem.Phys.*, **1**, 270 (1933).
- [56] Hajj F.; *J.Chem.Phys.*, **44**, 12, 4618 (1966).
- [57] Lynch D.W.; *J.Phys.Chem.Solids*, **28**, 1941 (1967).
- [58] Boswarva I.M.; *Phys.Rev.B*, **1**, 4, 1698 (1970).
- [59] Jain J.K., Shanker J. y Khandelwal D.P.; *Phys.Rev.B*, **13**, 6, 2692 (1976).

- [60] Bakhshi P.S., Goyal S.C. y Shanker J.; *J.Inorg.Nucl.Chem.*, **39**, 546 (1977).
- [61] Slater J.C. y Kirkwood J.G.; *Phys.Rev.*, **37**, 682 (1931).
- [62] Narayan R.; *J.Phys.Chem.Solids*, **38**, 1097 (1977).
- [63] Shanker J., Agrawal G.G. y Singh R.P.; *J.Chem.Phys.*, **69**, 2, 670 (1978).
- [64] Shanker J., Bakhshi P.S. y Sharma L.P.; *J.Inorg.Nucl.Chem.*, **41**, 1285 (1979).
- [65] Heitler W. y London F.; *Z.Physik*, **44**, 455 (1927).
- [66] Pauling L.; *Z.Krist.*, **67**, 377 (1928).
- [67] Slater J.C.; *Phys.Rev.*, **32**, 349 (1928);
Bleick W.E. y Mayer J.E.; *J.Chem.Phys.*, **2**, 252 (1934).
- [68] Pauling L.; *Proc.Roy.Soc.*, **A114**, 181 (1927).
- [69] Born M. y Landé A.; *Verh.DPG*, **20**, 210 (1918).
- [70] Born M. y Mayer J.E.; *Z.Physik*, **75**, 1 (1932).
- [71] Hellmann H.; *J.Chem.Phys.*, **3**, 61 (1935).
- [72] Wasastjerna J.A.; *Phil.Trans.Roy.Soc.(London)*, **237**, 105 (1938).
- [73] Varshni Y.P. y Shukla R.C.; *J.Chem.Phys.*, **35**, 2, 582 (1961);
Varshni Y.P. y Shukla R.C.; *Rev.Mod.Phys.*, **35**, 1, 130 (1963).
- [74] Patil M.N., Gohel V.B. y Trivedi M.D.; *Indian J.Phys.*, **41**, 235 (1967);
Sharma M.N. y Tripathi S.R.; *J.Phys.Chem.Solids*, **36**, 45 (1975).
- [75] Sharma M.N., Gautam A.K. y Tripathi S.R.; *J.Phys.Soc.Japan*, **40**, 651 (1976).
- [76] Prakash S. y Behari J.; *Indian J.Pure Appl.Phys.*, **7**, 709 (1969);
Sharma M.N. y Jain R.; *J.Phys.Soc.Japan*, **35**, 194 (1973).
- [77] Verwey E.J.W.; *Recueil Trav.Chim.Pays.Bas.*, **65**, 521 (1946).
- [78] Thakur K.P.; *Indian J.Pure Appl.Phys.*, **11**, 549 (1973);
Thakur K.P.; *Acta Cryst.*, **A31**, 540 (1975).
- [79] Alam M.I., Ali M.S. y Hasan M.M.; *Indian J.Pure Appl.Phys.*, **30**, 310 (1992).
- [80] Samara G.A., Walters L.C. y Northrop D.A.; *J.Phys.Chem.Solids*, **28**, 1875 (1967).
- [81] Giri A.K.; *J.Phys.Chem.Solids*, **54**, 8, 973 (1993).

- [82] Huggins M.L.; *J.Chem.Phys.*, **5**, 143 (1937).
- [83] Cubicciotti D.; *J.Chem.Phys.*, **31**, 6, 1646 (1959).
- [84] Fumi F.G. y Tosi M.P.; *J.Phys.Chem.Solids*, **25**, 31 (1964);
Tosi M.P. y Fumi F.G.; *J.Phys.Chem.Solids*, **25**, 45 (1964).
- [85] Boswarva I.M.; *J.Phys.Chem.Solids*, **42**, 487 (1981).
- [86] Shanker J., Verma T.S., Cox, A. y Sangster M.J.L.; *Can.J.Phys.*, **59**, 1359 (1981);
Sangster M.J.L., Schröder U. y Atwood R.M.; *J.Phys.C*, **11**, 1523 (1978);
Sangster M.J.L. y Atwood R.M.; *J.Phys.C*, **11**, 1541 (1978).
- [87] Sangster M.J.L.; *J.Phys.Chem.Solids*, **35**, 195 (1974);
Sangster M.J.L.; *J.Phys.Chem.Solids*, **34**, 355 (1973);
Sangster M.J.L. y Dixon M.; *Adv.Phys.*, **25**, 247 (1976).
- [88] Hafemeister D.W. y Flygare W.H.; *J.Chem.Phys.*, **43**, 3, 795 (1965).
- [89] Hafemeister D.W. y Zahrt J.D.; *J.Chem.Phys.*, **47**, 4, 1428 (1967).
- [90] Singh R.K. y Khare P.; *Phys.Stat.Sol.(b)*, **124**, 29 (1984);
Singh R.K. y Khare P.; *J.Phys.Soc.Japan*, **51**, 1, 141 (1982);
Singh R.K. y Khare P.; *Phys.Stat.Sol.(b)*, **103**, 337 (1981).
- [91] Shanker J., Singh J.P. y Jain G.D.; *Phys.Stat.Sol.(b)*, **105**, 385 (1981).
- [92] Shanker J. y Agrawal D.P.; *J.Phys.Chem.Solids*, **41**, 1003 (1980).
- [93] Narayan R. y Ramaseshan S.; *J.Phys.Chem.Solids*, **39**, 1287 (1978);
Narayan R. y Ramaseshan S.; *J.Phys.Chem.Solids*, **37**, 395 (1976).
- [94] Agrawal G.G., Sharma H.P. y Shanker J.; *J.Phys.Chem.Solids*, **38**, 815 (1977).
- [95] Agrawal G.G. y Shanker J.; *J.Chem.Phys.*, **68**, 11, 5244 (1978).
- [96] Sipani S.K. y Gupta V.P.; *Indian J.Phys.*, **57A**, 261 (1983).
- [97] Woodcock L.V.; *J.Chem.Soc.Faraday Trans.II*, **70**, 1405 (1974).
- [98] Romano S., Margheritis C. y Sinistri C.; *Z.Naturforsch.*, **29a**, 1202 (1974).
- [99] Hardy R.J. y Karo A.M.; *Phys.Rev.B*, **13**, 900 (1976);
Hardy R.J. y Karo A.M.; *J.Phys.Chem.Solids*, **38**, 905 (1977).

- [100] Catlow C.R.A., Diller K.M. y Norgett M.J.; *J.Phys.C*, , 10, 1395 (1977).
- [101] Eggenhoffner R., Murthy C.S.N. y Fumi F.G.; *J.Phys.Chem.Solids*, **39**, 1295 (1978);
Eggenhoffner R., Fumi F.G. y Murthy C.S.N.; *J.Phys.Chem.Solids*, **43**, 583 (1982).
- [102] Wedepohl P.T.; *Proc.Phys.Soc.*, **92**, 79 (1967).
- [103] Gordon R.G. y Kim Y.S.; *J.Chem.Phys.*, **56**, 6, 3122 (1972).
- [104] Kim Y.S. y Gordon R.G.; *Phys.Rev.B*, **9**, 8, 3548 (1974).
- [105] Cohen A.J. y Gordon R.G.; *Phys.Rev.B*, **12**, 8, 3228 (1975).
- [106] Murti Y.V.G.S. y Selvarajan T.V.; *Phys.Stat.Sol.(b)*, **108**, 315 (1981).
- [107] Singh R.K. y Gupta H.N.; *Proc.Roy.Soc.(London)*, **A349**, 289 (1976);
Singh R.K., Gupta H.N. y Agarwal M.K.; *Phys.Rev.B*, **17**, 894 (1978).
- [108] Lowndes R.P. y Martin D.H.; *Proc.Roy.Soc.*, **A308**, 473 (1969).
- [109] Fröhlich H.; *Theory of Dielectrics, 2nd.Ed.*, , Oxford Clarendon Press, (1958).
- [110] Shanker J. y Dixit S.; *Phys.Stat.Sol.(a)*, **123**, 17 (1991).
- [111] Born M. y Huang K.; *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, , Oxford Clarendon Press (1954).
- [112] Barron T.H.K. y Batana A.; *Phil.Mag.*, **20**, 619 (1969).
- [113] Soriano M.R.; *Tesis Doctoral*, , Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, U.B.A. (1992).
- [114] Bruno J.A.O.; *Tesis Doctoral*, , Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, U.B.A. (1994).
- [115] Lowndes R.P. y Rastogi A.; *Phys.Rev.B*, **14**, 3598 (1976).
- [116] Fontanella J., Andeen C. y Schuele D.; *Phys.Rev.B*, **6**, 2, 582 (1972); Andeen C., Schuele D. y Fontanella J.; *Phys.Rev.B*, **6**, 2, 591 (1972).
- [117] Mitra S.S.; *Phys.Stat.Sol.*, **9**, 519 (1965).
- [118] Mitra S.S., Postmus C. y Ferraro J.R.; *Phys.Rev.Letters*, **18**, 455 (1967).
- [119] Postmus C., Ferraro J.R. y Mitra S.S.; *Phys.Rev.*, **174**, 983 (1968).
- [120] Ferraro J.R., Mitra S.S. y Quattrochi A.; *J.Appl.Phys.*, **42**, 3677 (1971).
- [121] Postmus C., Ferraro J.R. y Mitra S.S.; *Inorg.Nuclear Chem.Letters*, **4**, 55 (1968).

- [122] Lowndes R.P.; *Proc.Int.Conf.Phonons*, , Rennes, France; ed. M.A.Nusimovici, Flammarion, Paris (1971).
- [123] Born M. y von Kármán T.; *Physik.Z.*, **13**, 297 (1912);
Born M. y von Kármán T.; *Physik.Z.*, **14**, 15 (1913);
Born M.; *Dynamik der Kristallgitter*, Teubner, Leipzig (1915);
Born M.; *Atomtheorie des festen Zustandes*, Teubner, Leipzig (1923).
- [124] Tessman, Kahn y Shockley; *Phys.Rev.*, **92**, 890 (1953).
- [125] Hardy J.R. y Karo A.M.; *The Lattice Dynamics and Statics of Alkali Halide Crystals*, Plenum Press, Nueva York (1979).
- [126] Havinga E.E.; *Phys.Rev.*, **119**, 4, 1193 (1960).
- [127] Hanlon J.E. y Lawson A.W.; *Phys.Rev.*, **113**, 2, 472 (1959).
- [128] Cochran W.; *Crit.Rev.Solid State Sci.*, **2**, 1 (1971).
- [129] Woods A.D.B., Cochran W. y Brockhouse N.B.; *Phys.Rev.*, **119**, 3, 980 (1960).
- [130] Woods A.D.B., Brockhouse B.N., Cowley R.A. y Cochran W.; *Phys.Rev.*, **131**, 3, 1025 (1963);
Cowley R.A., Cochran W., Brockhouse B.N. y Woods A.D.B.; *Phys.Rev.*, **131**, 3, 1030 (1963).
- [131] Tolpygo K.B.; *Zh.eksp.teor.fiz.*, **20**, 497 (1950);
Tolpygo K.B.; *Fiz.tverd.tela*, **2**, 2655 (1960);
Tolpygo K.B.; *Sov.Phys.Solid State*, **2**, 2367 (1961).
- [132] Yamashita J. y Kurosawa T.; *J.Phys.Soc.Japan*, **10**, 8, 610 (1955).
- [133] Mashkevitch V.S. y Tolpygo K.B.; *Zh.eksp.teor.fiz.*, **32**, 520 (1957);
Mashkevitch V.S. y Tolpygo K.B.; *Sov.Phys.J.E.T.P.*, **5**, 435 (1957);
Mashkevitch V.S.; *Fiz.tverd.tela*, **2**, 2629 (1960);
Mashkevitch V.S.; *Sov.Phys.Solid State*, **2**, 2345 (1961).
- [134] Cowley R.A.; *Proc.Roy.Soc.*, **A268**, 109 (1962);
Cowley R.A.; *Proc.Roy.Soc.*, **A268**, 121 (1962).
- [135] Rosen N.; *Phys.Rev.*, **38**, 2099 (1931);
Rosen N.; *Phys.Rev.*, **38**, 255 (1931).

- [136] Kotani, Amemiya, Ishiguro y Kimura; *Table of Molecular Integrals*, Maruzen Company, Tokio (1955).
- [137] Sternheimer R.M.; *Phys.Rev.*, **96**, 951 (1954);
Sternheimer R.M.; *Phys.Rev.*, **107**, 1565 (1957).
- [138] Basu A.N. y Sengupta S.; *Phys.Stat.Sol.*, **29**, 367 (1968).
- [139] Cochran W.; *Phil.Mag.*, **4**, 1082 (1959).
- [140] Dutt N., Agrawal G.G. y Shanker J.; *Phys.Stat.Sol.(b)*, **85**, 99 (1985).
- [141] Batana A., Castillo A.D. y Fracchia R.M.; *Computers Chem.*, **17**, 3, 309 (1993).
- [142] Tribe L., Fracchia R.M., Bruno J.A.O. y Batana A.; *Computers Chem.*, en prensa (1995).
- [143] McLean K.O. y Smith C.S.; *J.Phys.Chem.Solids*, **33**, 275 (1972);
McLean K.O. y Smith C.S.; *J.Phys.Chem.Solids*, **33**, 279 (1972);
Roberts R.W. y Smith C.S.; *J.Phys.Chem.Solids*, **31**, 619 (1970);
Roberts R.W. y Smith C.S.; *J.Phys.Chem.Solids*, **31**, 2397 (1970);
Smith C.S. y Cain L.S.; *J.Phys.Chem.Solids*, **36**, 205 (1975).
- [144] Batana A., Castillo A.D. y Fracchia R.M.; *J.Phys.Chem.Solids*, **53**, 10, 1309 (1992).
- [145] Jain V.C. y Shanker J.; *Physica (Utrecht)*, **94B**, 346 (1978).
- [146] Shanker J., Gupta V.P. y Sharma, O.P.; *Phys.Rev.B*, **18**, 10, 5869 (1978).
- [147] Shanker J. y Gupta, V.P.; *J.Phys.Chem.Solids*, **41**, 141 (1980).
- [148] Syassen K. y Holzapfel W.; *Phys.Rev.B*, **18**, 5826 (1978).
- [149] Barnett J.D., Block S. y Piermarini G.J.; *Rev.Sci.Instrum.*, **44**, 1 (1973).
- [150] Weinstein B.A. y Piermarini G.J.; *Phys.Rev.B*, **12**, 1172 (1975).
- [151] Trommer R., Müller H., Cardona M. y Vogl P.; *Phys.Rev.B*, **21**, 4869 (1980).
- [152] Straumanis M.E. y Aka E.Z.; *J.Appl.Phys.*, **23**, 330 (1952).
- [153] Krishnan R.S., Srinivasan R. y Devanadayanan S.; *Thermal Expansion of Crystals*, Pergamon, Oxford (1979).
- [154] Bridgman P.W.; *The Physics of High Pressure*, G.Bell & Sons, Londres (1952).
- [155] Slater J.C.; *Introduction to Chemical Physics*, McGraw Hill, Nueva York (1939).

- [156] Thurston R.N.; *Proceedings of the IEEE*, **53**, 1320 (1965).
- [157] Koliwad K.M., Ghate P.B. y Ruoff A.L.; *Phys.Stat.Sol.*, **21**, 507 (1967).
- [158] Morse G.E. y Lawson A.W.; *J.Phys.Chem.Solids*, **28**, 939 (1967).
- [159] Samara G.A.; *J.Phys.Chem.Solids*, **26**, 121 (1965).
- [160] Karo A.M. y Hardy J.R.; *Phys.Rev.*, **129**, 5, 2024 (1961).
- [161] Karo A.M. y Hardy J.R.; *J.Chem.Phys.*, **48**, 7, 3173 (1968).
- [162] Bijanki S. y Hardy R.J.; *J.Phys.Chem.Solids*, **38**, 147 (1977).
- [163] Hardy R.J. y Karo A.M.; *J.Phys.Chem.Solids*, **38**, 335 (1977).
- [164] Shrivastava U.C.; *Phys.Rev.B*, **21**, 6, 2602 (1980).
- [165] Murthy C.S.N. y Murti Y.V.G.S.; *J.Phys.C*, **4**, 1108 (1971).
- [166] Samara G.A., Walters L.C. y Northrop D.A.; *J.Phys.Chem.Solids*, **28**, 1875 (1967).
- [167] Bottger G.L. y Geddes A.L.; *J.Chem.Phys.*, **46**, 8, 3000 (1967).
- [168] Giri A.K.; *J.Phys.Chem.Solids*, **54**, 8, 973 (1993).
- [169] Joshi S.K. y Gupta R.; *Phys.Rev.*, **126**, 3, 933 (1962).
- [170] Loje K. y Schuele D.; *J.Phys.Chem.Solids*, **31**, 2051 (1970).
- [171] Goyal S.C. y Kumar V.; *Phys.Stat.Sol.(b)*, **92**, K77 (1979).
- [172] Van Vechten J.A.; *Phys.Rev.*, **182**, 891 (1969).
- [173] Singh A.V., Sharma J.C. y Shanker J.; *Physica (Utrecht)*, **94B**, 331 (1978).
- [174] Shanker J., Agrawal G.G. y Singh R.P.; *Phil.Mag.B*, **39**, 5, 405 (1979).
- [175] Srinivasan R. y Srinivasan K.; *Phys.Stat.Sol.(b)*, **57**, 757 (1973).
- [176] Jones B.W.; *Phil.Mag.*, **16**, 1085 (1967).
- [177] Lowndes R.P. y Martin D.H.; *Proc.Roy.Soc.*, **A316**, 351 (1970).
- [178] Shanker J. y Singh K.; *Phys.Stat.Sol.(b)*, **103**, 151 (1981).
- [179] Vaidya S.N. y Kennedy G.C.; *J.Phys.Chem.Solids*, **32**, 951 (1971).
- [180] Chang Z.P., Barsch G.R. y Miller D.L.; *Phys.Stat.Sol.*, **23**, 577 (1967).
- [181] Lowndes R.P. y Martin D.H.; *J.Phys.C*, **2**, 1595 (1969).
- [182] Mahmud K.R., Kamath K.V. y Scaife B.K.P.; *Phil.Mag.*, **23**, 655 (1971).
- [183] Lowndes R.P.; *Phys.Rev.B*, **6**, 12, 4667 (1972).