

Energia wiązania, potencjały oddziaływań międzyatomowych

Zadanie 1

Niech energia oddziaływania między dwoma cząstkami zależy od ich odległości w następujący sposób: $U(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^8}$, gdzie α i β są stałymi dodatnimi. Wykazać, że: a) równowagowa odległość cząstek wynosi $r_0 = (8\beta/\alpha)^{1/7}$; b) w odległości równowagowej energia związana z oddziaływaniem przyciągającym jest 8 razy większa od energii związanej z oddziaływaniem odpychającym.

Zadanie 2

Potencjał oddziaływania pomiędzy dwoma molekułami dany jest wzorem postaci:

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}.$$

Wykaż, że aby mógł powstać stan związany, musi być spełniony warunek $m > n$.

Zadanie 3

Potencjał oddziaływania pomiędzy dwoma molekułami dany jest wzorem $U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$, gdzie $n = 2$ i $m = 10$. Wiadomo, że odległość równowagowa dwóch cząstek wynosi 3Å , a energia dysocjacji -4eV . a) Wylicz wartości stałych α i β . b) Oblicz siłę działającą pomiędzy cząstkami, gdy ich odległość jest o 10% większa od odległości równowagowej.

Odp.

- a) $\alpha = -\frac{5}{4}U_d r_0^2 \approx 4.5 \cdot 10^{-19} \text{eV} \cdot \text{m}^2$, $\beta = -\frac{1}{4}U_d r_0^{10} \approx 6 \cdot 10^{-96} \text{eV} \cdot \text{m}^{10}$;
b) $F(2.7\text{Å}) \approx 19 \cdot 10^{-9} \text{N}$ (odpychanie), $F(3.3\text{Å}) \approx -2.3 \cdot 10^{-9} \text{N}$ (przyciąganie)

Zadanie 4

Przebieg efektywnej energii potencjalnej cząsteczki dwuatomowej można z dobrą dokładnością opisać za pomocą funkcji Morse'a:

$$U(r) = D[1 - e^{-b(r-r_0)}]^2.$$

a) Przedyskutuj znaczenie parametrów D , b , r_0 . b) Podaj przybliżone wyrażenie dla $U(r)$ w pobliżu minimum tej funkcji. c) Przyjmując, że znana jest masa zredukowana μ znajdź częstość oscylacji w pobliżu minimum.

Odp.

- b) $U(r) = Db^2(r - r_0)^2$;
c) $\omega = b\sqrt{\frac{2D}{\mu}}$

Zadanie 5

Oblicz stałą Madelunga dla kryształu:

a) jonowego jednowymiarowego o stałej sieci równej a ; b) NaCl; c) CsCl

Odp. a) $A \approx 1.38$; b) $A \approx 1.74$; c) $A \approx 1.76$

Zadanie 6

Wyobraź sobie, że objętość zajmowaną przez kryształ NaCl ($r_0 = 2.81\text{Å}$) wypełniono ośrodkiem o względnej stałej dielektrycznej ϵ . Jak zmienią się energia i stała sieci dla $\epsilon = 81$ i $n = 10$?

Odp. $r_1 = r_0 \epsilon^{\frac{1}{n-1}}$, $U_1 = U_0 \epsilon^{-\frac{n}{n-1}}$

Zadanie 7

Założmy, że istnieje jednowymiarowy kryształ zawierający $2N$ jonów o zmiennym ładunku $\pm q$, z energią opisującą odpychanie pomiędzy dwoma najbliższymi sąsiadami postaci Ar^{-n} :

a) wykaż, że dla odległości odpowiadającej stanom równowagi energia całkowita kryształu wynosi:

$$U(r_0) = -\frac{2Nq^2 \ln 2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(-\frac{1}{n}\right);$$

b) podczas ściskania kryształu niech $r_0 \rightarrow r_0(1 - \delta)$. Wykaż, że ściskanie jednostkowej długości kryształu wprowadza do wyrażenia na energię wielkość $C\delta^2$, gdzie

$$C = \frac{(n-1)q^2 \ln 2}{4\pi\epsilon_0 r_0}.$$