ZADANIA do kursu PODST. FIZ. MAT. SKOND. 1 (ZMiN)/ ZESTAW 1

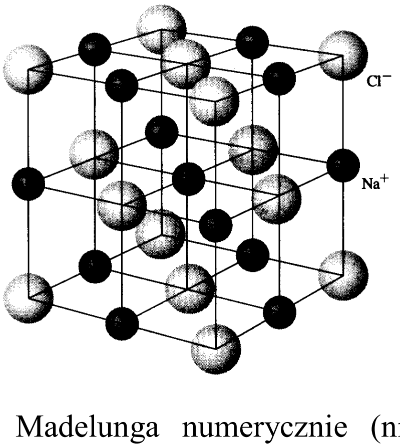
Zad.1.1. Energia oddziaływania van der Wasala wg. mechaniki kwantowej: Załóż, że hamiltonian oscylatora harmonicznego, wynoszący $H_{0poj} = p^2/(2m) + C/2\ x^2$ posiada rozwiązanie o energii drgań zerowych $E_{0poj} = h/(2\pi)\ \omega_0/2$, gdzie $\omega_0 = (C/m)^{1/2}$. Hamiltonian dwóch identycznych współosiowych oscylatorów odległych od siebie o $R >> |x_1|, |x_2|$; każdy złożony z 2 oscylujących punktów rozsuniętych o x_1 i x_2, można opisać jako: $H_0 = p_1^2/(2m) + C/2\ x_1^2 + p_2^2/(2m) + C/2\ x_2^2$ a energia takiego układu wynosi $E_0 = 2\ h/(2\pi)\ \omega_0/2$. Rozważ sytuację, gdy oscylatory te zbudowane są nie z neutralnych punktów, ale z ładunków +e i –e. A) Jaki dodatkowy człon H_1 pochodzący z oddziaływań kulombowskich należy dodać do hamiltonianu? Odp. $H_1 = -\ 2e^2x_1x_2/R^3$. B) Zdiagonalizuj całkowity hamiltonian ($H_0 + H_1$) przechodząc do współrzędnych normalnych, $x_s = (x_1 + x_2)/2^{0.5}$ oraz $x_a = (x_1 - x_2)/2^{0.5}$, i związanych z nimi pędów. Korzystając z hamiltonianu w postaci $H_0 + H_1 = p_a^2/(2m) + C_a/2\ x_1^2 + p_s^2/(2m) + C_s/2\ x_2^2$, oblicz energię układu $h/(2\pi)\ (\omega_s + \omega_a)/2$ oraz pokaż, że jest ona niższa do E_0 o człon $- A/R^6$. Od czego zależy A? WSKAZÓWKA: Patrz C. Kittel, Wstęp do fiz. c. st. str. 78-79.

Zad.1.2. Energia oddziaływania van der Wasala między makroskopowymi obiektami. Zakładając, że energia potencjalna oddziaływania vdW między 2 molekułami typu A i B wynosi $-C_{AB}/r^6$, pokaż że energia potencjalna (W) na jednostkę powierzchni (*A*) oddziaływania vdW 2 makroskopowych pół-nieskończonych ciał, złożonych z molekuł A (o gęstości ρ_A) oraz molekuł B (o gęstości ρ_B), odległych od siebie o D, wynosi $W/A = -\ (\pi^2\ \rho_A\ \rho_B\ C_{AB})/(12\pi D^2)$ albo $W/A = -\ A_H/(12\pi D^2)$, gdzie A_H - stała Hamakera. Zakładając, że oddziaływania między 2 identycznymi pół-nieskończonymi ciałami odległymi o odległość międzyatomową D_0 prowadzą do powstania 2 powierzchni o łącznej energii powierzchniowej $2\gamma_S$ oszacuj ile wynosi napięcie powierzchniowe γ_S takiego ciała.

Zad.1.3. Energia spójności kryształu gazu szlachetnego. Używając potencjału Lennarda-Jonesa $U(r)=4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$, oblicz stosunek energii wiązania kryształu gazu szlachetnego krystalizującego w strukturach bcc i fcc. Sumy sieciowe $A = \sum_j{}' \frac{1}{p_{ij}^{12}}$ oraz $B = \sum_j{}' \frac{1}{p_{ij}^{6}}$ dla wielokrotności p_{ij} odległości międzyatomowej wynoszą dla sieci fcc: A=12.13188 i B = 14.45392, a dla sieci bcc: A=9.11418 i B = 12.2533.

Zad.1.4. Rozważ liniowy układ 2N jonów o ładunku równym na przemian +q i –q. Załóż, że energia potencjalna odpychania między najbliższymi sąsiadami ma postać A/R^n.

A) Pokaż, że dla odległości między jonami odpowiadającej stanowi równowagi: $U(R_0) = -\frac{2Nq^2 \ln 2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}(1-\frac{1}{n})$. **B)** Załóżmy, że kryształ został ściśnięty tak, że $R_0 \to R_0(1-\delta)$. Pokaż, że w wyrażeniu na pracę związaną ze ściśnięciem kryształu największy wkład opisuje człon $C\delta^2/2$ gdzie: $C = \frac{(n-1)q^2 \ln 2}{4\pi\varepsilon_0 R_0} 2N$.



Zad.1.5. Oszacować wartość stałej Madelunga dla struktury NaCl **A)** stosując dodawanie przyczynków od kolejnych ładunków całkowitych, wyliczyć kilka pierwszych wyrazów szeregu wprost z definicji, **B)** wyliczyć stałą Madelunga numerycznie (nieobowiązkowe), **C)** stosując metodę Evjena (ułamkowych ładunków) dla sześcianu zawierającego 26 ładunków – przy założeniu, że tylko ½, ¼ i 1/8

ładunków na odpowiednio: powierzchni, krawędziach i rogach tego sześcianu wchodzi do sumowana, a całkowity ładunek sześcianu jest zerowy. (Zob. stare wydanie C. Kittel, Wstęp do fizyki ciała stałego, str. 109–110 oraz zadanie 3.4 ze strony 121).

Zad.1.6. Zakrzywianie arkuszy grafitu dla tworzenia fullerenów i nanorurek.

Na powierzchni ciągłej utworzonej z F wielokątów foremnych (równobocznych i równokątnych) jest V wierzchołków i E krawędzi. Taka powierzchnia może posiadać g dziur, o czym informuje jej charakterystyka Eulera $\chi_E := 2(1\text{-}g)$. **A)** Zademonstruj twierdzenie Eulera: $V - E + F = \chi_E$, dla powierzchni ciągłej bez dziur utworzonej z trójkątów (tetraedr) i z kwadratów (sześcian). **B)** Dla powierzchni ciągłej arkuszy grafitu, złożonej z F_5 pięciokątów <u>albo</u> F_6 sześciokątów, każdy wierzchołek łączy 3 wielokąty.. Pokaż, że zachodzi: $n F_n = 3V = 2E$ gdzie n = 5 (dla pięciokątów) lub 6 dla sześciokątów). **C)** Korzystając z powyższej relacji oraz z twierdzenia Eulera, pokaż że: i) powierzchnia ciągła złożona z samych sześciokątów (n = 6) może utworzyć jedynie torus z dziurą (nanorurkę), ii) zamkniętą powierzchnię ciągłą bez dziur (fullereny) można utworzyć jedynie z udziałem 12 pięciokątów.