

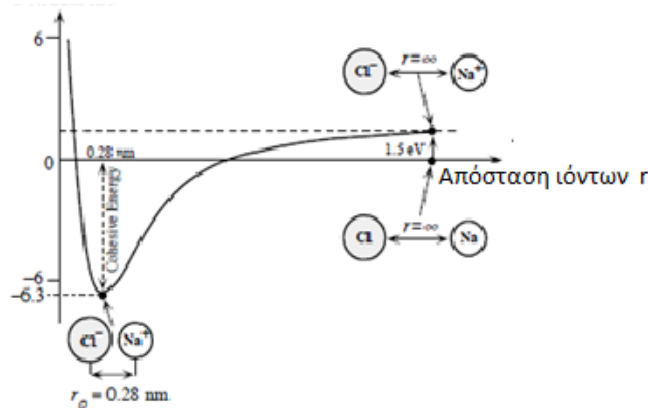


Άσκηση 1. Ιοντικός δεσμός: Η ενέργεια λόγω αλληλεπίδρασης μεταξύ των ιόντων Na^+ και Cl^- στον κρύσταλλο NaCl (βλέπε το παρακάτω σχήμα) ισούται με

$$U(r) = -\frac{4,03 \times 10^{-28}}{r} + \frac{6,97 \times 10^{-96}}{r^8}$$

όπου U το δυναμικό σε Joules ανά ζεύγος ιόντων και r σε m η απόσταση διαχωρισμού των ιόντων. Να υπολογιστούν η ενέργεια δεσμού και η θέση ισορροπίας των ιόντων στον κρύσταλλο. Στους υπολογισμούς σας να συμπεριλάβετε και την ενέργεια που απαιτείται για τη μετακίνηση e^- από το Cl^- στο Na^+

Δυναμική ενέργεια σε eV (ανά ζεύγος)



Λύση: Για να βρούμε την ελάχιστη δυναμική ενέργεια καθώς και την ελάχιστη απόσταση r_0 παίρνουμε τη σχέση: $\frac{dE(r_0)}{dr_0} = 0$

$$4,03 \frac{1}{10^{28} r_0^2} - 55,76 \frac{1}{10^{96} r_0^9} = 0, \quad \text{προκύπτει ότι } r_0 = 2,81 \times 10^{-10} \text{ m} = 0,28 \text{ nm}$$

Η δυναμική ενέργεια σε eV (ενέργεια δεσμού των ιόντων) είναι:

$$E_0 = -\frac{E(r_0)}{q} = -\left(\frac{-4,03 \times 10^{-28}}{r_0} + \frac{6,97 \times 10^{-96}}{r_0^8} \right) \left(\frac{1}{q} \right)$$

$$E_0 = -\left(\frac{-4,03 \times 10^{-28}}{(2,81 \times 10^{-10})} + \frac{6,97 \times 10^{-96}}{(2,81 \times 10^{-10})^8} \right) \left(\frac{1}{1,602 \times 10^{-19}} \right) = 7,83 \text{ eV}$$

Η παραπάνω τιμή αντιστοιχεί στην ενέργεια που απαιτείται για να διαχωρίσουμε τα ιόντα. Η ενέργεια δεσμού συνεπάγεται τη λήψη του κρυστάλλου NaCl από τα ουδέτερα άτομα Na και Cl . Δηλαδή πρέπει να μεταφέρουμε το ηλεκτρόνιο από το Cl^- στο Na^+ . Η ενέργεια που ελευθερώνεται κατά τη μετακίνηση είναι $-1,5 \text{ eV}$. Συνεπώς η ενέργεια δεσμού είναι: $7,83 - 1,5 = 6,33 \text{ eV}$.

Άσκηση 2. Αρχή απροσδιοριστίας του Heisenberg: Ένα ηλεκτρόνιο σε ένα άτομο Na διεγείρεται εκπέμποντας ακτινοβολία μήκους κύματος 589 nm και επιστρέφει στην θεμελιώδη κατάσταση. Αν ο χρόνος μετάβασης είναι 20 ns , να υπολογίσετε τη διασπορά στο μήκος κύματος $\Delta \lambda$.

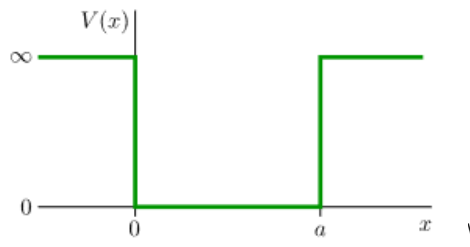
Λύση: Από τη σχέση απροσδιοριστίας του Heisenberg $\Delta t \cdot \Delta E \approx h/2\pi$, γνωρίζουμε ότι $\Delta t = 20$ ns, έχουμε: $\Delta E \approx \frac{h}{2\pi \cdot \Delta t} = \frac{1}{2\pi} \frac{(6,626 \times 10^{-34} \text{Js})}{20 \times 10^{-9} \text{s}} = 5,273 \times 10^{-27} \text{J}$ ή $3,29 \times 10^{-8} \text{eV}$

Από τη σχέση $E = h \cdot \nu$ (όπου ν η συχνότητα) έχουμε $\Delta \nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{(5,273 \times 10^{-27} \text{J})}{(6,626 \times 10^{-34} \text{Js})} = 7,958 \times 10^6 \text{s}^{-1}$

Για να υπολογίσουμε τη διασπορά στο μήκος κύματος $\Delta \lambda$, θα παραγωγίσουμε τη σχέση $\lambda = c/\nu$:

$$\frac{d\lambda}{d\nu} = -\frac{c}{\nu^2} = -\frac{\lambda^2}{c}, \text{ οπότε } \Delta \lambda = \frac{\lambda^2}{c} \Delta \nu = \frac{(589 \times 10^{-9} \text{m})^2}{3,0 \times 10^8 \text{m.s}^{-1}} (7,958 \times 10^6 \text{s}^{-1}) = 9,20 \times 10^{-15} \text{m}$$

Άσκηση 3. Εντοπισμένο ηλεκτρόνιο (άπειρο πηγάδι δυναμικού). Να υπολογίσετε τις 3 πρώτες ενεργειακές καταστάσεις ενός ηλεκτρονίου σε άπειρο πηγάδι δυναμικού με διάσταση $0,5 \text{nm}$. Ποιά είναι η θεμελιώδης ενέργεια; Πόση ενέργεια χρειάζεται για να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στην 3^η ενεργειακή κατάσταση; Ποιό πρέπει να είναι το μήκος κύματος του φωτονίου προκειμένου να παρέχει αυτήν την ενέργεια;



Λύση: Η ενέργεια του ηλεκτρονίου σε άπειρο πηγάδι δυναμικού είναι: $E_n = \frac{h^2 n^2}{8ma^2} = \frac{(6,625 \times 10^{-34})^2 n^2}{8(9,1 \times 10^{-31})(5 \times 10^{-10})^2} = (2,41 \times 10^{-19}) n^2 \text{J} = \frac{(2,41 \times 10^{-19}) n^2 \text{J}}{1,6 \times 10^{-19}} = (1,51) n^2 \text{eV}$, οπότε

$$E_1 = 1,51 \text{eV}, E_2 = 6,04 \text{eV}, E_3 = 13,59 \text{eV}$$

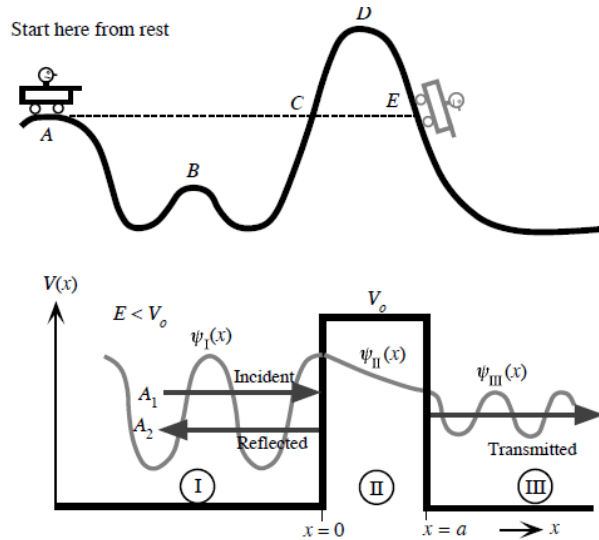
Η ενέργεια στη θεμελιώδη κατάσταση με $n=1$, είναι $E_1 = 1,51 \text{eV}$. Η ενέργεια που χρειάζεται για να βρεθεί το ηλεκτρόνιο από την 1^η στην 3^η ενεργειακή κατάσταση είναι $13,59 - 1,51 = 12,08 \text{eV}$. Το φωτόνιο πρέπει να έχει ίδια ενέργεια $E = h\nu = hc/\lambda = 12,08 \text{eV}$. Τα $12,08 \text{eV}$ είναι $12,08 \times 1,6 \times 10^{-19} \text{J}$. Συνεπώς έχουμε

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{(6,625 \times 10^{-34} \text{Js})(3 \times 10^8 \text{m.s}^{-1})}{12,08 \times 1,6 \times 10^{-19} \text{J}} = 1,03 \times 10^{-7} \text{m}$$

Άσκηση 4. Φαινόμενο σήραγγας διαμέσου φράγματος δυναμικού. Να βρείτε την πιθανότητα διέλευσης (tunneling) ενός ηλεκτρονίου ενέργειας 2eV δια μέσου ενός τετραγωνικού φράγματος δυναμικού ύψους 20eV και εύρους $0,3 \text{nm}$.

Λύση: Η πιθανότητα διέλευσης είναι $T = T_0 \exp(-2K_2 a)$, όπου

$$T_0 = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) \text{ και } K_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)(2\pi)^2}{h^2}}$$



$$K_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)(2\pi)^2}{h^2}} =$$

$$\sqrt{\frac{2(9,11 \times 10^{-31})(20 - 2) \times (1,6 \times 10^{-19})(2\pi)^2}{(6,625 \times 10^{-34})^2}} = 2,17 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

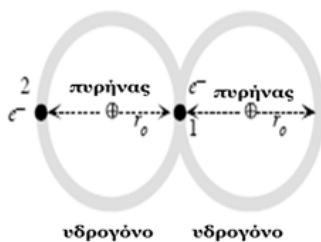
$$T_0 = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) = 16(0,1)(1 - 0,1)$$

$$T = T_0 \exp(-2K_2 a) = 16(0,1)(1 - 0,1) \exp[-2(2,17 \times 10^{10})(3 \times 10^{-10})] = 3,17 \times 10^{-6}$$

Η πιθανότητα μπορεί να φαίνεται ότι είναι μικρή, ωστόσο δεν είναι μηδενική. Αν ένας μεγάλος αριθμός ηλεκτρονίων προσπίπτει στο φράγμα δυναμικού, ένας σημαντικός αριθμός από αυτά θα το διαπεράσει .

Άλυτες ασκήσεις

1.Ομοιοπολικός δεσμός. Θεωρήστε το μόριο του H_2 με μία απλή δομή δύο ατόμων H που βρίσκονται σε επαφή. Δίνονται $r_0=0,0529\text{nm}$, $\epsilon_0=8,85 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$. Να υπολογιστούν: α) Η ολική ηλεκτροστατική ενέργεια όλων των φορτίων του παρακάτω σχήματος. Είναι η διάταξη αυτή των φορτίων ενεργειακά συμφέρουσα; β) Με δεδομένο ότι το δυναμικό ενός απομονωμένου ατόμου H είναι $-13,6\text{eV}$, να υπολογιστεί η διαφορά δυναμικού του μορίου σε σχέση με την περίπτωση δυο απομονωμένων ατόμων H.



2. Ιοντικός δεσμός .Η ολική δυναμική ενέργεια σε συνάρτηση της απόστασης ανάμεσα στα ιόντα στον ιοντικό κρύσταλλο KCl δίνεται από τη σχέση

$$U(r) = -\frac{ke^2}{r} + \frac{b}{r^9}$$

όπου b είναι μία σταθερά. Να υπολογιστεί η ελάχιστη τιμή της δυναμικής ενέργειας U_0 που αντιστοιχεί στην απόσταση ισορροπίας.

3. Δεσμός van der Waals. Το Ne (Νέο) κάτω από τους 24,5K είναι κρυσταλλικό στερεό. Η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατόμων ανά άτομο είναι της μορφής

$$E(r) = -2\varepsilon \left[14,45 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - 12,13 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right] \text{ eV/άτομο}$$

όπου ε και σ είναι σταθερές που εξαρτώνται από την μέση διπολική ροπή, την πολικότητα, και το βαθμό επικάλυψης των ηλεκτρονικών τροχιακών. Για το κρυσταλλικό Νέο είναι $\varepsilon = 3,121 \times 10^{-3} \text{ eV}$ και $\sigma = 0,274 \text{ nm}$. Να δείξετε ότι η απόσταση ισορροπίας μεταξύ των ατόμων r_0 ισούται με $r_0 = (1,090)\sigma$ και να τη βρείτε. Να βρείτε επίσης την ενέργεια δεσμού ανά άτομο.

4. Να υπολογίσετε την απροσδιοριστία της ορμής και της κινητικής ενέργειας ενός ηλεκτρονίου αν η απροσδιοριστία θέσης είναι 1,2nm.

5. Η μικρότερη ενέργεια ενός σωματιδίου μέσα σε άπειρο πηγάδι δυναμικού με διάσταση 10nm είναι 0,025eV. Να βρείτε τη μάζα του σωματιδίου.

6. Σε μία ημιαγωγική διάταξη απαιτείται μία πιθανότητα διέλευσης (tunneling) $T = 10^{-5}$ όταν ένα ηλεκτρόνιο ενέργειας 0,04eV διαπερνάει δια μέσου ενός τετραγωνικού φράγματος δυναμικού ύψους 0,4eV. Να υπολογίσετε το μέγιστο εύρος του φράγματος.