Wstęp do fizyki fazy skondensowanej.

1. Znaleźć równowagową odległość w parze anion-kation. Obliczyć energię potencjalną dla równowagowej odległości.

$$U_{prz}(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q^+Q^-}{r}, \quad U_{odp}(r) = \frac{A}{r^m}$$

2. Wyznacz stałą Madelunga $\alpha = \sum_j (\pm 1)/p_{ij}$ $(r_{ij} = p_{ij}R)$ liniowego kryształu NaCl, jeżeli R jest odległością między najbliższymi sąsiadami.

3. Wykaż, że w sytuacji z zadania 2 równowagowa odległość między najbliższymi sąsiadami R_0 określa równanie

$$R_0 \exp\left(-\frac{R_0}{\rho}\right) = \alpha \frac{\rho q^2}{4\pi\varepsilon_0 z B}$$

   a całkowita energia układu w stanie równowagi wynosi

$$U_{cak} = -\frac{N\alpha q^2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}\left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right),$$

   jeżeli energia układu dana jest wzorem

$$U = N\left(zB\exp\left(\frac{R_0}{\rho}\right) - \alpha\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 R}\right), \ \alpha - \text{stała Madelunga.}$$

4. Zakładając, że energia potencjalna odpychania między najbliższymi sąsiadami kryształu dana jest wzorem

$$U_{odp}(r) = \frac{A}{r^m}.$$

   Udowodnić, że dla odległości równowagowej R_0 energia całkowita układu wynosi

$$U_{cak} = -\frac{2Nq^2\ln 2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}\left(1 - \frac{1}{m}\right).$$

5. Obliczyć równowagową odległość i równowagową energię pary atomów oddziałujących siłami van der Waalsa, które opisane są wzorem Lennarda-Jonesa
$$U(r) = -4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right].$$

6. Jeżeli R jest odległością między najbliższymi atomami, to całkowita energia N-atomowego kryształu van der Waalsa dana jest wzorem
$$U_{cak} = -2N\varepsilon \left[\beta \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 - \gamma \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right],$$
gdzie β i γ zależą od geometrii kryształu. Znaleźć równowagową odległość między atomami R_0 i energię kryształu w stanie równowagi.

Ciecze.

1. Światło o długości fali $256nm$ przechodzi przez kuwetę o grubości $2mm$ zawierającą roztwór benzenu o stężeniu $0.001mol/dm^3$. Intensywność światjest zredukowana o 48% wartości początkowej. Obliczyć ekstynkcję oraz molowy współczynnik ekstynkcji dla tej długości fali.

2. Gdy człowiek znajduje się na dużej głębokosci widzi "ciemny świat". Zakładając, że średni współczynnik ekstynkcji wody morskiej w zakresie widzialnym wynosi $6.2 \cdot 10^{-5} dm^3/(mol \cdot cm)$ obliczyć głębokość do której dociera

   (a) połowa intensywności światła, która występuje na powierzchni morza,

   (b) jedna dziesiąta tej intensywności.

3. Dla wielu cząstek pasmo absorpcji w roztworze ma szerokość (jest to odległość między punktami dla których $\varepsilon = \varepsilon_{max}/2$) $5000cm^{-1}$. Zakładając że zależność $\varepsilon(\bar{\nu})$ można przedstawić w postaci trójkąta równoramiennego znaleźć integralny współczynnik absorpcji dla pasma z:

   a) $\varepsilon_{max} \approx 10^4 dm^3/(mol \cdot cm)$,

   b) $\varepsilon_{max} \approx 4 \cdot 10^4 dm^3/(mol \cdot cm)$,

   założyć, że $\varepsilon_{max} = \varepsilon(6000cm^{-1})$.

Kryształy doskonałe.

1. Sześcian zawiera: 1) 3 płaszczyzny symetrii równoległe do ścian sześcianu, 2) 6 płaszczyzn symetrii przekątnych w sześcianie, 3) 3 czterokrotne osie, 4) 4 trzykrotne osie, 5) 6 dwukrotnych osi, 6) środek inwersji w środku sześcianu. Narysować wszystkie elementy symetrii sześcianu.

2. Bryły platońskie są to wielościany utowrzone z wielokątów foremnych. Tetraedr jest czworościanem zbudowanym z trójkątów równobocznych. Natomiast oktaedr jest ośmiościanem zbudowanym z trójkątów równobocznych. Znaleźć wszystkie elementy symetrii tetraedru i oktaderu.

3. Wykazać, że przekształcenie symetryczne względem osi inwersyjnej dwukrotnej może być zastąpione działaniem płaszczyzny symetrii prostopadłej do tej osi.

4. Udowodnić, że macierz reprezentująca środek symetrii ma postać

$$[\alpha_{i'j}] = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

5. Wykazać, że macierz reprezentująca płaszczyznę symetrii prostopadłą do osi Oz ma postać

$$[\alpha_{i'j}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

6. Wykazać, że macierz reprezentująca płaszczyznę symetrii równoległą do osi Oz ma postać

$$[\alpha_{i'j}] = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

7. Udowodnić, że dla przekształceń pierwszego rodzaju wyznacznik macierzy $\alpha_{i'j}$ ma wartość 1, a dla przekształceń drugiego rodzaju $det(\alpha_{i'j}) = -1$.

8. Wykazać, że z faktu istnienia dwóch osi dwukrotnych przecinających się pod kątem $\pi/2$ wynika istnienie prostopadłej do nich trzeciej osi dwukrotnej.

9. Wykazać, że z faktu istnienia dwukrotnej osi i prostopadłej do niej osi n-krotnej wynika istnienie $n-1$ innych osi dwukrotnych.

10. Udowodnić, że iloczyn dwóch odbić względem płaszczyzn symetrii m_1 i m_2 jest obrotem o kąt $2\phi_{12}$ wokół osi wyznaczonej przez przecięcie płaszczyzn m_1 i m_2; ϕ_{12} jest kątem między tymi płaszczyznami.

11. Wykazać, że iloczyn obrotu o kąt $\pi/2$ wokół osi symetrii 4 i odbicia względem płaszczyzny symetrii m_1, zawierającej oś 4, jest odbiciem względem płaszczyzny symetrii m_2, przechodzącej przez tę oś, przy czym płaszczyzny m_1 i m_2 tworzą kąt $\pi/4$.

12. Udowodnić, że przecięcie dwóch płaszczyzn symetrii prostopadłych do siebie jest dwukrotną osią symetrii.

13. Pokazać, że jeżeli płaszczyzna symetrii zawiera oś n-krotną to istnieje $n-1$ innych płaszczyzn symetrii.

14. Znaleźć grupę symetrii sześcianu, oktaedru i tetraedru.

15. Do jakich układów krystalograficznych odnoszą się sześcian, oktaedr i tetraedr?

16. Wykazać, że grupę punktową $\bar{6}$ można opisać jako $3/m$.

17. Do jakich układów krystalograficznych odnoszą się grupy 32 i 23 oraz grupy $3m$ i $m3$?

18. Narysować wzajemne rozmieszczenie elementów symetrii grup punktowych 222, $4/m$, $3m$.

Komórka elementarna.

1. Ile atomów przypada na jedną komórkę elementarną w kryształach o strukturze regularnej: a) prostej, b) centrowanej przestrzennej, c) płasko centrowanej.

2. Sieć krystaliczną chlorku sodu $NaCl$ możemy otrzymać umieszczając na przemian jony Na^+ i Cl^- w węzłach sieci regularnej prostej. Ile kazdy atom ma w najbliższym sąsiedztwie atomów innego rodzaju? Ile cząsteczek $NaCl$ znajduje się w komórce elementarnej?

3. Sieć krystaliczną chlorku cezu $CsCl$ możemy otrzymać umieszczając jony Cs^+ w węzłach sieci regularnej prostej a jony Cl^- w środku sześcianu tej sieci. Ile kazdy atom ma w najbliższym sąsiedztwie atomów innego rodzaju? Ile cząsteczek $NaCl$ znajduje się w komórce elementarnej?

4. Udowodnić, że iloczyn dwóch odbić względem równoległych do siebie płaszczyzn symetrii, znajdującymi się w odległości $t/2$ jest translacją o t wzdłuż prostej prostopadłej do tych płaszczyzn symetrii.

5. Wyznaczyć wskaźniki Millera płaszczyzn, które odcinają na osiach krystalograficznych odcinki:

   1) $a/2$, $b/3$, c,

   2) ∞, b, $c/5$,

   3) $2a/3$, ∞, $c/6$,

   4) ∞, ∞, $5c$.

6. Narysować płaszczyzny Millera o wskaźnikach: (001), (111), $(11\bar{1})$, $(\bar{2}10)$.

7. Narysować kierunki o wskaźnikach Millera: [100], [111], $[11\bar{1}]$, $[\bar{2}10]$.