

Ασκήσεις κεφ. 10. Παράδοση 22/11/2019

1. Θεωρήστε το μόριο AgBr στοιχεία του οποίου δίνονται στον Πιν. 10.1 και στον Πιν. 10.2 (αντί του λανθασμένου συμβόλου $E_{n^1,p}$ γράψτε $E_{n^1,d}$). Για το μόριο αυτό:
 - i) Υπολογίστε την ενέργεια συνοχής D με δύο τρόπους: α) όπως στη σελίδα 216 για το NaCl (η χημική συγγένεια του Br είναι 3,364 eV). (β) όπως στον τύπο (10.26), σελ. 237.
 - ii) Υπολογίστε το δείκτη ιοντικότητας του δεσμού a_p και το δεσμικό μοριακό τροχιακό.
 - iii) Υπολογίστε τη διακύμανση δx στο μήκος του δεσμού ως ποσοστό του μήκους του δεσμού.
2. Εξετάστε το αν υπάρχει το μόριο Ne_2 σε θερμοκρασία 0 K. ($\sigma=2,74$ Å, $\epsilon=3,1$ meV). Βλ. Λυμένη άσκηση 1, σελ. 237.
3. Ποια είναι η τιμή της γωνίας HSiH στο μόριο SiH_4 ;
4. Μελετήστε τη λυμένη άσκηση 6 (σελ. 242) και τη σχέση της με το φαινόμενο του θερμοκηπίου. (Δεν χρειάζεται να παραδώσετε κάτι, απλώς να κατανοήσετε αυτό το σημαντικό θέμα).