S-114.1327 Fysiikka III (EST) Tentti ja välikoeuusinta 16.5.2007

Välikoeuusinnassa vastataan vain kolmeen tehtävään. Kokeesta saatu pistemäärä kerrotaan tekijällä 5/3. Merkitse paperiin uusitko jommankumman välikokeen, vai suoritatko tentin.

1. Välikokeen alue

1. Kuutiossa, jonka sivu on $a = 10$ cm, on heliumkaasua NTP olosuhteissa. Arvioi kuinka monta molekyyliä osuu sekunnissa kuution seiniin.

Ratkaisu:

NTP olosuhteissa $p = 101325$ Pa ja $T = 273{,}15$ K. Helium molekyylin massa on $m = 4{,}003u$. Molekyylivuo aika- ja pinta-alayksikköä kohden on

$$\frac{dN_{TOT}}{Adt} = \tfrac{1}{4} n v_{ave}, \quad \text{missä}$$

$$v_{ave} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad \text{ja} \quad n = \frac{N}{V} = \frac{p}{kT}.$$

Törmäysten lukumääräksi saadaan siis (yhtä kuution tahkoa kohden)

$$N \approx \tfrac{1}{4} n v_{ave} A t = \tfrac{1}{4} \frac{p}{kT} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} a^2 t$$
$$= \frac{pa^2 t}{\sqrt{2kT\pi m}} \approx 8{,}1 \times 10^{25}.$$

2. Systeemissä hiukkasten mahdolliset tilat ovat $E_1 = 0$, $E_2 = \varepsilon$ ja $E_3 = 2\varepsilon$. Oletetaan, että $g_i = 1$, $i = 1,2,3$. Miehitysluvut ovat $n_1 = 2000$, $n_2 = 800$ ja $n_3 = 200$. a) Mikä on jakauman todennäköisyyden muutos, kun ylimmältä ja alimmalta tilalta siirretään yksi hiukkanen keskimmäiselle tilalle? b) Laske systeemin todennäköisin jakauma annetulle kokonaishiukkasmäärälle ja sisäenergialle. *Opastus*: kokonaishiukkasmäärän ja sisäenergian säilyminen antaa kaksi side-ehtoa tuntemattomille suureille n_1, n_2 ja n_3.

Ratkaisu:

Systeemissä on yhteensä $N = 3000$ hiukkasta. Alkuperäisen partition todennäköisyys on

$P_1 = \frac{1}{2000!} \times \frac{1}{800!} \times \frac{1}{200!}$. Hiukkasten siirtämisen jälkeen $P_2 = \frac{1}{1999!} \times \frac{1}{802!} \times \frac{1}{199!}$.

Jakaumien todennnäköisyyksien suhde on

$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{1999!}{2000!} \times \frac{802!}{800!} \times \frac{199!}{200!} = \frac{1}{2000} \times 801 \times 802 \times \frac{1}{200} = 1{,}6.$$

Siis alkuperäinen partitio oli 1,6 kertaa todennäköisempi. Koska pienellä miehitysluvun muutoksella saadaan suuri mikrotilojen lukumäärän muutos, systeemi on ilmeisesti hyvin kaukana termodynaamisesta tassapaainosta

b) Todennäköisimmän partition määrääminen. Maxwell Boltzman jakauma on
$n_1 = \frac{N}{Z} e^{-0/kT}$, $n_2 = \frac{N}{Z} e^{-\varepsilon/kT}$, $n_3 = \frac{N}{Z} e^{-2\varepsilon/kT}$

missä Z partitiofunktio. Systeemissä on 3000 hiukkasta joiden kokonaisenergia on 1200 ε .

Merkitään $x = e^{-\varepsilon/kT}$, jolloin $n_2 = xn_1$ ja $n_3 = x^2 n_1$. Hiukkasmäärän säilyminen voidaan tällöin kirjoittaa
$n_1 + n_1 x + n_1 x^2 = 3000$ ja energian säilyminen
$(n_1 x)\varepsilon + (n_1 x^2)(2\varepsilon) = 1200\varepsilon$.

Supistamalla ε jälkimmäisestä yhtälöstä saamme yhtälöparin

$$\begin{aligned} n_1(1 + x + x^2) &= 3000 \\ n_1(x + 2x^2) &= 1200 \end{aligned} \quad . \quad (1)$$

Jakamalla puolittain ja supistamalla n_1 saadaan $8x^2 + 3x - 2 = 0$, josta $x = 0,3465$ (vain positiivinen juuri kelpaa). Sijoittamalla yhtälöön (1)

$n_1 = 2046$, $n_2 = 708$ $n_3 = 246$. (tulos pyöristetty).

Huomaa, että jos näihin miehityslukuihin tehdään muutos $n_1 \to n_1 - 1$ $n_2 \to n_2 + 2$ ja $n_3 \to n_3 - 1$ on partition todennäköisyyden muutos varsin pieni. (Periaatteessa äärettömän pieni jos hiukkasia on tarpeeksi).

3. a) Yksiulotteinen potentiaaliaskel on määritelty seuraavasti:

$$E_p(x) = \begin{cases} 0, & kun\ x < 0 \\ E_0, & kun\ x > 0 \end{cases}$$

Hiukkanen, jonka energia on $E = 4E_0$, tulee x-akselin negatiivisesta suunnasta potentiaaliaskeleen kohdalle. Mikä on todennäköisyys, että se heijastuu takaisin?

Ratkaisu:

Lähestyvän hiukkasen energia on siis neljä kertaa kynnyksen korkeus. Heijastumistodennäköisyyden ilmaisee heijastumiskerroin

$$R = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 ,$$

missä $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ on aaltovektorin itseisarvo alueessa $x < 0$ ja $k' = \frac{\sqrt{2m(E - E_0)}}{\hbar}$ on aaltovektorin itseisarvo alueessa $x \geq 0$. Sijoitetaan nämä R:n lausekkeeseen.

$$\therefore\ R = \left[\frac{\sqrt{2mE} - \sqrt{2m(E - E_0)}}{\sqrt{2mE} + \sqrt{2m(E - E_0)}} \right]^2 = \left[\frac{\sqrt{2mE}\left(1 - \sqrt{1 - E_0/E}\right)}{\sqrt{2mE}\left(1 + \sqrt{1 - E_0/E}\right)} \right]^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - E_0/E}}{1 + \sqrt{1 - E_0/E}} \right)^2 .$$

Sijoitetaan E.

$$\therefore\ R \approx \left(\frac{1-\sqrt{1-E_0/4E_0}}{1+\sqrt{1-E_0/4E_0}}\right)^2 = \left(\frac{1-\sqrt{1-1/4}}{1+\sqrt{1-1/4}}\right)^2 \approx 0,0052 \approx \underline{\underline{0,005}}\,.$$

2 Välikokeen alue

4. Vastaa lyhyesti:

a) Mitä tarkoitetaan elektronin gyromagneettisella suhteella?

Elektronin sisäisen massan ja varauksen erilaisesta jakautumisesta aiheutuvaa korjaustekijää elektronin spin-kulmaliikemäärän ja siihen liittyvän magneettisen momentin väliseen suhteeseen.

b) Miten *pitkäaaltoisten* akustisten ja optisten fononien energiat eroavat toisistaan?

Akustisten pitkäaaltoisten fononien energia lähestyy nollaa. Optisten fononien energia saa vakioarvon (n. 30 meV) pitkäaaltorajalla.

c) Mikä on spin-ratavuorovaikutus?

Elektronin rataliikkeen magneettisen momentin ja spin-magneettisen momentin vuorovaikutus.

d) Mitä kertoo Ehrenfestin teoreema?

Suureiden kvanttimekaaniset odotusarvot toteuttavat (tietyin ehdoin)Newtonin liikeyhtälön.

e) Mitkä ovat vedyn 2*p* elektronin kokonaiskulmaliikemäärävektorin mahdolliset pituudet?

2*p* tilalle $l=1$, joten $j=l\pm s=1\pm 1/2=3/2$ tai 1/2 . Kokonaiskulmaliikemäärävektorin pituus on $\sqrt{j(j+1)}\hbar$. Sijoittamalla kokonaiskulmaliikemäärän kvanttiluvut saamme kaksi vaihtoehtoa (1) "oikotilalle" $\sqrt{j(j+1)}\hbar=\sqrt{15}\hbar/2$ ja "linkkutilalle" $\sqrt{j(j+1)}\hbar=\sqrt{3}\hbar/2$.

f) Mikä on LCAO menetelmä?

Molekyyliorbitaalien likimääräinen kuvaaminen molekyyliin kuuluvien atomien orbitaalien avulla. Linear Combination of Atomic Orbitals menetelmä.

5. Hiukkasen kulmaliikemäärän kvanttiluku $l=2$. (a) Mitkä ovat L_z:n mahdolliset arvot? (b) Mikä on *L*:n suuruus? (c) Mikä on $\boldsymbol{L}$:n ja z-akselin välisen kulman pienin mahdollinen arvo?

Ratkaisu:

(a) Kulmaliikemäärän z-komponentin mahdolliset arvot ovat $L_z = m\hbar$, missä $m=0,\pm1,\ldots,\pm l = 0,\pm1,\pm2$.
Mahdolliset arvot ovat siten:

$$L_z = -\hbar, -2\hbar, 0, +\hbar, +2\hbar\,.$$

(b) Kulmaliikemäärän itseisarvo on

$$L=\sqrt{l(l+1)}\hbar=\sqrt{6}\hbar\,.$$

(c) Kulmaliikemäärän ja z-akselin välinen kulma on

$$\cos\theta = \frac{L_z}{|\mathbf{L}|} = \frac{L_z}{L} = \frac{m\hbar}{\sqrt{l(l+1)}\hbar} = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$$

$$\Rightarrow \theta_{\min} = \cos^{-1}\left(\frac{2}{\sqrt{6}}\right) \approx 35{,}3^{\circ}$$

6. Hiukkanen voi liikkua äärettömän kovassa potentiaaliboksissa x-akselin välillä [x = 0 , x = a]. Sen aaltofunktio ajanhetkellä $t = 0$ on $\Psi\left(x, t=0\right) = \sqrt{8/5a}\left[1+\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$. a) Mikä on hiukkasen aaltofunktio myöhempinä ajanhetkinä? b) Mikä on hiukkasen keskimääräinen energia ajanhetkinä $t = 0$ ja $t = t_0$ (ts. jonain mielivaltaisena ajanhetkenä)? Apuneuvo: $\sin 2\alpha = 2\sin\alpha\cos\alpha$. Lisähelpotus: boksin aaltofunktiot ovat $\sqrt{2/a}\,\sin\left(n\pi x/a\right)$.

Ratkaisu

Hiukkanen liikkuu yksiulotteisessa potentiaalikuopassa, jonka ominaisenergiat ovat

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}; \quad n = 1, 2, 3,, \tag{1}$$

ja normitetut ominaisfunktiot

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \tag{2}$$

Tehtävässä annettu aaltofunktio hetkellä $t = 0$ ei selvästikään ole mikään ominaistiloista, vaan kyseessä on ns ei-stationäärinen tila eli sationääristen tilojen superpositio. Puretaan annettu aaltofunktio stationääristen tilojen sarjakehitelmäksi käyttäen hyväksi ominaistilojen ortonormeerausominaisuutta:

$$\begin{aligned}\Psi\left(x, t=0\right) &= \sqrt{8/5a}\left[1+\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \sqrt{8/5a}\left[\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right] = \\ &= \frac{2}{\sqrt{5}}\phi_1 + \frac{1}{\sqrt{5}}\phi_2\end{aligned} \tag{3}$$

missä käytettiin tehtävässä annettua trigonometrian apuneuvoa. Huomaa myös, että tilojen kertoimien neliöiden summa = 1 , ts voimme tulkita yhtälön (3) siten, että hiukkanen on todennäköisyydellä 4/5 perustilassa ja todennäköisyydellä 1/5 ensimmäisessä viritetyssä tilassa. Hiukkasen aaltofunktio kyseisessä ei-stationäärisessä tilassa on ajan funktiona

$$\Psi\left(x, t\right) = \frac{2}{\sqrt{5}}e^{-iE_1 t/\hbar}\phi_1 + \frac{1}{\sqrt{5}}e^{-iE_2 t/\hbar}\phi_2.$$

b) Hiukkasen keskimääräinen energia = energian odotusarvo = perustilan energia x 4/5 ja ensimmäisen virittetyn tiaaln energia x 1/5 ts.:

$$\langle E \rangle = \frac{4}{5} E_1 + \frac{1}{5} E_2 = \frac{8}{5} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

VAKIOITA

$m_e = 9{,}1091 \times 10^{-31}$ kg	$m_p = 1{,}6725 \times 10^{-27}$ kg	$m_n = 1{,}6748 \times 10^{-27}$ kg	amu $= 1{,}6605 \times 10^{-27}$ kg
$e = 1{,}6021 \times 10^{-19}$ C	$c = 2{,}9979 \times 10^{8}$ m / s	$\hbar = 1{,}0545 \times 10^{-34}$ Js	$\mu_B = 9{,}2732 \times 10^{-24}$ JT^{-1}
$\varepsilon_0 = 8{,}8544 \times 10^{-12}$ C^{2}N^{-1}m^{-2}	$K_e = 1 / 4\pi\varepsilon_0$	$\mu_0 = 1{,}2566 \times 10^{-6}$ mkgC^{-2}	$K_m = \mu_0 / 4\pi$
$\gamma = 6{,}670 \times 10^{-11}$ Nm^{2}kg^{-2}	$N_A = 6{,}0225 \times 10^{23}$ mol^{-1}	$R = 8{,}3143$ JK^{-1}mol^{-1}	$k = 1{,}3805 \times 10^{-23}$ JK^{-1}