MALLIVASTAUKSET
S-114.1327 Fysiikka III (EST) (6 op) **1. välikoe 07.03.2007**

1. Astiassa on 0,100 μmol vetyä (H_2) ja 1,00 μg typpeä (N_2). Seoksen lämpötila on 300 K ja paine 0,100 Pa. Laske **a)** astian tilavuus, **b)** vedyn ja typen osapaineet ja **c)** molekyylien lukumäärä cm^3:ssä kaasua. (6p)

Ratkaisu:

Merkitään ν_{H2} = 0,100 μmol, m_{N2} = 1,00 μg, T = 300 K, p = 0,100 Pa. Oletetaan kaasu ideaalikaasuksi.

Kumpikin seoksen kaasu toteuttaa erikseen ideaalikaasun tilanyhtälön:

$$p_{\mathrm{H}_2}V = \nu_{\mathrm{H}_2}RT \qquad p_{\mathrm{N}_2}V = \nu_{\mathrm{N}_2}RT = \frac{m_{\mathrm{N}_2}}{M_{\mathrm{N}_2}}RT \text{ , (1)}$$

missä $M_{\mathrm{N}_2} \approx 28{,}0\ \mathrm{g/mol}$ on typen moolimassa ja p_{H_2} ja p_{N_2} ovat vedyn ja typen osapaineet.

a) Daltonin lain mukaan $p = p_{\mathrm{H}_2} + p_{\mathrm{N}_2}$ (2)

Yhtälöistä (1) ja (2) saadaan astian tilavuuden ratkaisemiseksi

$$p_{\mathrm{H}_2} + p_{\mathrm{N}_2} = \left(\nu_{\mathrm{H}_2} + \frac{m_{\mathrm{N}_2}}{M_{\mathrm{N}_2}}\right)\frac{RT}{V} = p \quad \Rightarrow \quad V = \left(\nu_{\mathrm{H}_2} + \frac{m_{\mathrm{N}_2}}{M_{\mathrm{N}_2}}\right)\frac{RT}{p}$$

Sijoittamalla lukuarvot saadaan V = 3,39 dm^3 (2p)

b) (1) ja (2) $\Rightarrow$

$$p_{H_2} = \frac{\nu_{H_2}RT}{V} \approx 73{,}7\,\mathrm{mPa}$$

$$p_{N_2} = p - p_{H_2} \approx 26{,}3\,\mathrm{mPa}\ \text{(2p)}$$

c) Molekyylien kokonaislukumäärä on $N = N_{\mathrm{H}_2} + N_{\mathrm{N}_2}$. Moolissa on Avogadron luvun ilmoittama määrä molekyylejä, joten molekyylin kokonaislukumäärä astiassa on

$$N = \left(\nu_{\mathrm{H}_2} + \frac{m_{\mathrm{N}_2}}{M_{\mathrm{N}_2}}\right)N_A \approx \left(0{,}100\cdot 10^{-6} + \frac{1{,}00\cdot 10^{-6}}{28{,}0}\right)\mathrm{mol}\cdot 6{,}022\cdot 10^{23}\,\mathrm{mol}^{-1} \approx 8{,}173\cdot 10^{16}$$

Molekyylien lukumäärätiheys on siten

$$n = \frac{N}{V} \approx \frac{8.173\cdot 10^{16}}{3.39\cdot 10^{3}cm^{3}} \approx 2{,}41\cdot 10^{13}\ \mathrm{cm}^{-3}\ \text{(2p)}$$

2. a) Maxwell-Boltzmann-jakauman mukaan partitiofunktio eli tilasumma on muotoa $Z = \sum_i g_i e^{-\beta E_i}$. Jatkuvien suureiden avulla kirjoitettuna partitiofunktion tilasummasta tulee integraali $Z = \int_0^\infty g(E) e^{-\beta E} dE$. Systeemin kokonaisenergia termisessä tasapainossa on $U = \sum_i n_i E_i = NE_{ave} = \frac{N}{Z}\left(\sum_i g_i E_i e^{-\beta E_i}\right) = -\frac{N}{Z}\frac{dZ}{d\beta} = -N\frac{d}{d\beta}(\ln Z) = kNT^2 \frac{d}{dT}(\ln Z)$, sillä tasapainossa miehitysluvut ovat $n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta E_i}$. Sovellettaessa partitiofunktiota klassiseen ideaalikaasuun, havaitaan, että kineettinen energia on jatkuva suure ja tilatiheys on suoraan verrannollinen energian neliöjuureen (ideaalikaasulla on vain kineettistä energiaa). Johda hyvin tunnettu ideaalikaasun kokonaisenergian lauseke kokonaishiukkaslukumäärän ja lämpötilan avulla. Saatat tarvita seuraavan integraalin tulosta
$\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$. (2p)

b) Systeemissä on 5 tunnistettavaa klassista kaasumolekyyliä. Mahdolliset energiatilat E_i ovat 0ε, 1ε, 2ε, 3ε, 4ε, 5ε, 6ε... Kaikkien hiukkasten yhteenlaskettu kokonaisenergia on 5ε. Jokainen energiatila E_i on lisäksi degeneroitunut siten, että $g_i=2\ \forall$ i. Laske tämän Maxwell-Boltzmann-statistiikkaa noudattavan systeemin todennäköisimmän partition todennäköisyys ja alimman tilan (energia 0ε) keskimääräinen miehitysluku. (4p)

Ratkaisu:

a)

Tilatiheys on suoraan verrannollinen energian neliöjuureen:

$g(E) = c\sqrt{E}$, missä verrannollisuuskerroin c on vakio. (1/2p)

Partitiofunktioksi saadaan

$$Z = c\int_0^\infty \sqrt{E} e^{-\beta E} dE .$$

Tehdään muuttujanvaihdos $E = x^2$, jolloin $dE = 2xdx$ ja saadaan

$$Z = 2c\int_0^\infty x^2 e^{-\beta x^2} = \frac{c}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\beta^3}} = \frac{c}{2}\sqrt{\pi (kT)^3} \quad (1/2p)$$

missä käytettiin hyväksi tehtävässä annettua integraalia ja tietoa $\beta = \frac{1}{kT}$.

Sijoitetaan tulos kokonaisenergian lausekkeeseen ja derivoidaan:

$$U = kNT^2 \frac{d}{dT}(\ln Z) = kNT^2 \frac{d}{dT}(\ln \frac{c}{2}\sqrt{\pi(kT)^3}) = kNT^2 \frac{d}{dT}(\ln \frac{c\sqrt{\pi k^3}}{2} + \frac{3}{2}\ln(T))$$
$$= \frac{3}{2}kNT^2 \frac{1}{T} = \frac{3}{2}kNT,$$

mikä on hyvin tunnettu ideaalikaasun kokonaisenergia (1p).

b)

Molekyylien kokonaislukumäärä on N=5
Systeemin sisäinen energia on U=5e
g_1=2 kaikilla i.

Tehdään mahdollisista partitioista taulukko (1p)

Energia/e	1	2	3	4	5	6	7
5	1						
4		1					
3			1	1			
2			1		2	1	
1		1		2	1	3	5
0	4	3	3	2	2	1	0

Mikrotilojen lkm:

$$P = N!\prod_{i=1} \frac{g_i^{n_i}}{n_i!}$$

eli saadaan esim. partitiolle 1: $5! * 2^4/4! \cdot 2^1/1! = 160$

Vastaavasti muut:
Partitio 2: 640
Partitio 3: 640
Partitio 4: 960
Partitio 5: 960
Partitio 6: 640
Partitio 7: 32
Mikrotilojen summa ∑= 4032 (1p)

Nähdään, että kaikkein todennäköisimmät ovat partitiot, joiden mikrotilojen lukumäärä on suurin eli partitiot 4 ja 5. (1p)

Partition todennäköisyys $W_k = \dfrac{P_k}{4032}$

ja keskimääräiset miehitysluvut $\bar{n}_j = \sum_k W_k n_{k,j}$, eli alimmalle tilalle saadaan:

n_1 = (4*160 + (3 +3 +1)*640 + (2 + 2)*960)/4032 = 2,22. (1p)

3. Laske johtovyön elektronin keskimääräinen energia metallissa 0 K lämpötilassa, jos elektronitiheys on 10^{21} cm^{-3}. *(Ohje Käytä hyväksi elektronien tilatiheyttä. Tärkeä vakiotekijä tilatiheydessä on* $2\dfrac{m^{3/2}V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}$) (6 p)

Ratkaisu:

Vapaalle elektronikaasulle pätee

$$\frac{dn}{dE} = 2\frac{m^{3/2}V}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\frac{E^{1/2}}{e^{(E-\mu)/kT}+1}.$$

Kun T = 0 Fermi-Dirac -jakauma on askelfunktio:

$$\frac{1}{e^{(E-\mu)/kT}+1} = \begin{cases} 1, & E < \mu = \varepsilon_F \\ 0, & E > \mu = \varepsilon_F \end{cases}$$

Keskimääräinen energia saadaan integroimalla

$$E_{ave} = \frac{U}{N} = \frac{1}{N}\int_0^\infty E\left(\frac{dn}{dE}\right)dE = \frac{1}{N}2\frac{m^{3/2}V}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}\int_0^{\varepsilon_F} E^{3/2} = \frac{2^{1/2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3 n}\frac{2}{5}\varepsilon_F^{5/2}$$

$$= \frac{2^{1/2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3 n}\frac{2}{5}(\varepsilon_F)^{3/2}\varepsilon_F = \frac{2^{1/2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3 n}\frac{2}{5}\left(\frac{\left(3\pi^2\right)^{2/3}\hbar^2}{2m}n^{2/3}\right)^{3/2}\varepsilon_F \quad ,$$

$$= \frac{2^{1/2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3 n}\frac{2}{5}\left(\frac{3\pi^2\hbar^3 n}{2^{3/2}m^{3/2}}\right)\varepsilon_F = \frac{3}{5}\varepsilon_F$$

missä Fermienergia on $\varepsilon_F = \dfrac{\left(3\pi^2\right)^{2/3}\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{N}{V}\right)^{2/3}$. Sijoittamalla $n = \dfrac{N}{V} = 10^{21}\mathrm{cm}^{-3}$ saadaan

$$E_{ave} = 0.22\,\mathrm{eV} = 3.5\mathrm{x}10^{-20}\ \mathrm{J}.$$

4. Vastaa sanallisesti ***lyhyesti*** seuraaviin kysymyksiin. (1p/kysymys)

a) Mikä on termodynamiikan toinen pääsääntö?
b) Mitkä osapuolet osallistuvat Compton-sirontatapahtumaan? Mitä fysiikan peruslakeja soveltaisit sen analysointiin?
c) Mitä termodynamiikassa tarkoitetaan adiabaattisella prosessilla?
d) Miten kemiallinen potentiaali ja Fermi-energia liittyvät toisiinsa Fermi-Dirac-statistiikassa?
e) Miten määräytyy kidehilassa etenevän ääniaallon korkein mahdollinen taajuus?
f) Mitä valosähköisessä ilmiössä tapahtuu, jos metallia valaisevan laserin intensiteettiä lisätään? Entä mitä tapahtuu, jos laserin aallonpituutta kasvatetaan?

Ratkaisu:

a) Eristetty systeemi pyrkii termodynaamiseen tasapainotilaan. dS $\geq$ 0, maksimoi myös entropian. Makrotilaa termodynaamisessa tasapainossa vastaa maksimimäärä mikrotiloja.
b) Valo (fotonit, SM-aalto...) siroaa elektroneista siten että aallonpituus kasvaa. Analysoinnissa sovelletaan liikemäärän ja energian säilymislakeja. Fotoniin liittyy liikemäärä $p= h/\lambda$.
c) Adiabaattisessa prosessissa työtä voi tehdä vain siten että sisäenergia muuttuu $dQ=0 \rightarrow dU=-dW$. Lämpötila T laskee laajenemisessa ja nousee kompressiossa.
d) Kun $T \rightarrow 0$, $\mu \rightarrow E_F$, eli Fermi-energia saadaan kemiallisen potentiaalin raja-arvona matalissa lämpötiloissa.
e) Korkein taajuus saadaan tilanteesta, jossa kiteen vierekkäiset atomit värähtelevät vastakkaisessa vaiheessa, mistä saadaan lyhin akustisen aallon pituus (2a, missä a on kiteen atomien lähinaapurietäisyys). Taajuus voidaan myös laskea ottamalla huomioon että maksimi vapausasteiden lukumäärä on hilassa 3N.
f) Intensiteetin eli tulevien fotonien määrän kasvattaminen lisää irtoavien fotoelektronien määrää, jos taajuus on kynnysarvoa suurempi eli fotonin energia riittää elektronin irrottamiseen. Irtoavan elektronin energiaan intensiteetin lisäyksellä ei ole vaikutusta jos aallonpituus pysyy samana. Jos fotonien energia on kynnyksen alapuolella intensiteetin kasvattamisella ei ole vaikutusta eli elektroneja ei irtoa. Kun aallonpituutta kasvatetaan, taajuus pienenee, fotonien energia vähenee ja vastaavasti irronneiden fotoelektronien saama energia vähenee. Kun aallonpituutta kasvatetaan kynnykseen asti valosähköinen ilmiö sammuu.

5. a) Kvanttimekaanisen harmonisen oskillaattorin potentiaalienergia on muotoa $E_p = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Tämän potentiaalienergian määräämää yhtä ominaistilaa vastaa aaltofunktio $\psi(x) = \left(\frac{a}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} 2axe^{-a^2x^2/2}$, missä parametri $a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. Mikä on vastaava ominaisenergia? OHJE: Laske energia lähtemällä ajasta riippumattomasta Schrödingerin yhtälöstä. (Huom. Pelkällä oikealla vastauksella et saa pisteitä.) (3p)

b) Yksiulotteisen äärettömän korkea potentiaalilaatikon pituus on 2a. Laske tämän potentiaalin ominaisenergioiden riippuvuus parametrista a. (3p)

Ratkaisu:

a)
Annettu:

Potentiaalienergia: $E_p = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

Aaltofunktio: $\psi(x) = \left(\frac{a}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} 2axe^{-a^2x^2/2}, \ a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

Muistettavaa:

Schrödingerin yhtälö: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E_p\psi = E\psi$

Sijoitetaan:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi = E\psi$$

Derivoidaan:

$$\psi(x) = \alpha xe^{-a^2x^2/2}, \ \alpha = \left(\frac{a}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} 2a$$

$$\psi'(x) = \alpha e^{-a^2x^2/2} + x\alpha\left(-\frac{a^2}{2}2x\right)e^{-a^2x^2/2}$$

$$\psi'(x) = \alpha e^{-a^2x^2/2} - x^2\alpha a^2 e^{-a^2x^2/2}$$

$$\psi''(x) = \alpha e^{-a^2x^2/2}\left(-a^2x\right) - 2a^2\alpha xe^{-a^2x^2/2} - a^2\alpha x^2 e^{-a^2x^2/2}\left(-a^2x\right)$$

$$\psi''(x) = -\alpha a^2 xe^{-a^2x^2/2} - 2a^2\alpha xe^{-a^2x^2/2} + a^4\alpha x^3 e^{-a^2x^2/2}$$

Sijoitus loppuun:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\alpha a^2 xe^{-a^2x^2/2} - 2a^2\alpha xe^{-a^2x^2/2} + a^4\alpha x^3 e^{-a^2x^2/2}\right] + \frac{1}{2}kx^2\alpha xe^{-a^2x^2/2} = E\alpha xe^{-a^2x^2/2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[-a^2x - 2a^2x + a^4x^3\right] + \frac{1}{2}kx^2x = Ex \qquad : a^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[-3\frac{m\omega}{\hbar}+\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right]+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E$$

$$\frac{3\hbar\omega}{2}-\frac{1}{2}m\omega^2x^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E$$

$$E=\frac{3}{2}h\omega$$

b)
Schrödingerin yhtälö potentiaalilaatikossa sijaitsevalle hiukkaselle:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0$$

Yleinen ratkaisu:

$$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

Koordinaatiston siirto –a..a → 0..2a ja reunaehdot:

$$\psi(0)=A+B=0$$
$$\psi(2a)=Ae^{ik2a}+Be^{-ik2a}=0$$
$$\cos k2a-i\sin k2a-\cos 2ka-i\sin k2a=0$$
$$-2i\sin k2a=0$$

$$k2a=n\pi$$

$$k=\frac{n\pi}{2a}$$

$$E=\frac{p^2}{2m},\ \ p=\hbar k \rightarrow E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$