
Tfy-3.363 Johdatus pehmeän aineen fysiikkaan

Tentti 07.01.2004 (3 sivua, 5 tehtävää)

Tehtävä 1.

Polymeerimolekyylit liikkuvat liuottimessa, kun systeemin lämpötila on 278 K. Polymeerimolekyylien keskimääräinen koko gyraatiosäteellä R_g mitattuna on noin 20.0 nm ja niiden massa on 2000 amu ($1 \text{ amu} = 1.66057 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$).

- Polymeeriketjut liikkuvat vesimäisessä liuottimessa. Laske termisen energian kautta, kuinka nopeasti sen pitäisi liikkua oman kokonsa pituisen matkan. Entä jos ketjut liikkuvat öljymäisessä liuottimessa?
- Polymeeriketjujen diffuusiokertoimen (tarkemmin sanottuna *tracer*-diffuusiokertoimen) tiedetään olevan $D = 1 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2 / \text{s}$. Laske tämän perusteella, kuinka nopeasti se nyt liikkuisi oman kokonsa pituisen matkan.
- Määrittele diffuusiokertoimen D . Selvitä, mitä se käytännössä kuvaa.

Tehtävä 2.

Selitä seuraavat termit ja ilmiöt.

- Pehmeä aine (1p)
- Kriittinen misellikonsentraatio (critical micelle concentration) (1p)
- Brownin liike (1p)
- Järjestysparametri (1p)
- Kuvaa vety-, van der Waals, ja elektrostaattisten -sidosten vahvuutta suhteessa toisiinsa, ja toisaalta niiden vahvuutta suhteessa termiseen energiaan. Kuinka suureksi arvioisit termisen energian (fysiologisissa olosuhteissa) suhteessa energiaan $E = 1 \text{ eV}$, joka on tyypillinen mitta kiinteille aineille. (2p)

Tehtävä 3.

- Tarkastellaan nestekidettä, jonka molekyyilleillä on dipolimomentti \vec{p} . Nestekidemolekyylit ovat ulkoisessa sähkökentässä \vec{E} , joka pyrkii kääntämään nestekidemolekyyliä, vuorovaikutuksen ollessa muotoa

$$V = -\vec{p} \cdot \vec{E}.$$

Johda todennäköisyysjakauma $P(\theta)$ sille, että molekyyli havaitaan jossain tietyssä kulmassa θ suhteessa kenttään (θ on kulma molekyylin dipolimomentin ja kentän välillä).

- Sekoittumisen vapaaenergiaa kuvataan usein muodossa

$$\frac{F_{\text{mix}}}{k_B T} = \phi_A \ln \phi_A + \phi_B \ln \phi_B + \chi \phi_A \phi_B.$$

Tarkastellaan rajaa, jossa liuos tyyppiä A yrittää liueta tyyppiin B. Johda liukenevuudelle likimääräinen kuvaus, joka on voimassa suurella ja positiivisella χ :n arvolla.

Tehtävä 4.

Debye-Huckel -teorian sovelluksista.

Joulukuun tentissä nelisen viikkoa sitten pohdittiin Debye-Huckel -teoriaa elektrolyyttiliuksille. Siinä oletettiin varausjakauman olevan pallosymmetrinen ja keskityttiin yhteen ioniin j , jonka säde on R_{ion} . Tarkoituksena oli laskea muiden ionien jakauma tämän ionin ympärillä, kun Poisson-Boltzmann -yhtälö on linearisoituna saatu muotoon

$$\frac{1}{r^2} \left(\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) \right) = \kappa^2 \Psi.$$

Tässä $\Psi(r)$ on potentiaali radiaalisen etäisyyden r funktiona, kun r lasketaan etäisyytenä tarkasteltavaan ioniin j . Suure κ on muotoa

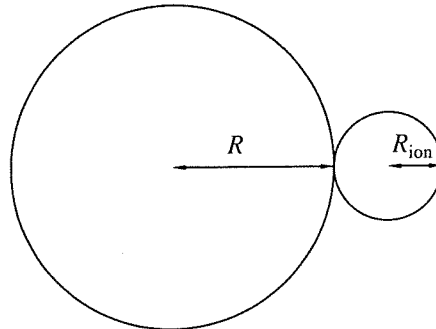
$$\kappa^2 = \frac{\sum_i (z_i e)^2 c_{i0}^*}{\epsilon_0 \epsilon_r k_B T},$$

missä z_i on ionityypin i valenssi ja c_{i0}^* on saman ionityypin konsentraatio bulkissa (äärettömän kaukana ionista j). Tässä tenttitehtävässä potentiaalille $\Psi(r)$ saatiin (tai ainakin piti saada) Debye-Huckel -kuvaus

$$\Psi(r) = \frac{z_j e}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{e^{\kappa R_{\text{ion}}}}{(1 + R_{\text{ion}}\kappa)} \frac{e^{-\kappa r}}{r}.$$

Sovella tätä tulosta seuraavaan tehtävään.

Oletetaan proteiini-molekyylä palloksi, jonka säde on R (katso oheinen kuva). Molekyylä on liuotainneessa, jossa on ioneja, joiden säde on $R_{\text{ion}} < R$. Ionien kokonaisvaraus ze on yhtä suuri kuin proteiinin kokonaisvaraus. Oleta, että varaus on jakautunut proteiinin läheisyyteen siten, että kuoren $R < r < R + R_{\text{ion}}$ sisällä ei ole varausta, jolloin siis $\kappa = 0$. Ratkaise Debye-Huckel -yhtälö tässä tapauksessa (proteiinin pinnan läheisyydessä).



Vinkkinä kannattaa palauttaa mieleen reunaehdot; potentiaalä ja sen derivaatan jatkuvuus.



Tehtävä 5.

Landaun teoriasta.

Olkoon $G(T, S)$ Gibbsin vapaaenergia per yksikkötilavuus, T lämpötila ja S systeemin järjestysparametri. Tarkastellaan tällöin kahta erilaista tapausta.

(i) Ensimmäiseksi,

$$G(T, S) = G_0 + \frac{1}{2}A(T)S^2 + \frac{1}{3}BS^3 + \frac{1}{4}CS^4,$$

jossa $A(T) = A_0(T - T^*)$, $A_0 > 0$, $B \neq 0$, ja $C \neq 0$ (B ja C ovat vakioita).

(ii) Toiseksi,

$$G(T, S) = G_0 + \frac{1}{2}a(T)S^2 + cS^4,$$

jossa $a(T) = a_0(T - T^\dagger)$ ja vakio $c \neq 0$.

- Tarkastele näitä molempia systeemejä ja hahmottele, kuinka niiden vapaaenergia käyttäytyy järjestysparametrin S funktiona eri lämpötiloissa T .
- Molemmissa systeemeissä tapahtuu faasitransitio epäjärjestyneestä faasista järjestyneeseen faasiin jossain lämpötilassa T_c . Tutki malleja ja määritä, onko tämä faasitransitio ensimmäistä vai toista astetta.
- Faasitransitioita kuvataan usein nk. kriittisillä eksponenteilla. Jos kriittinen lämpötila on T_c , niin yksi kriittisistä eksponenteista kuvaa järjestysparametrin käyttäytymistä lähellä kriittistä lämpötilaa siten, että $S \sim (T_c - T)^\beta$. Määritä eksponentin β arvo, mikäli se yllä oleville systeemeille on mahdollista.

On hyvä muistaa, että Boltzmannin vakio on $1.380662 \cdot 10^{-23}$ J / K. Lisäksi

$$\sin 2x = 2 \sin x \cos x$$

$$\sin 3x = 3 \sin x - 4 \sin^3 x$$

$$\cos 2x = 1 - 2 \sin^2 x$$

$$\cos 3x = 4 \cos^3 x - 3 \cos x$$

$$\sinh x = \frac{1}{2}(e^x - e^{-x})$$

$$\cosh x = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})$$

Hyvää uutta vuotta ja nauttikaa pehmeistä hangista!