S-114.1327 Fysiikka III (Est) 2 VK 7.5.2009

1. Bohrin vetyatomimallissa elektronilla voi olla vain tiettyjä nopeuksia. Johda kaava sallituille nopeuksille, ja laske sen avulla numeerinen arvo suurimmalle mahdolliselle nopeudelle.

Voima on on massa kertaa kiihtyvyys. Ympyräradalla tämä saa muodon:

$$\frac{m_e v_n^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \qquad (1)$$

Bohrin ehto kulmaliikemäärän kvantittumiselle on

$$L = n\hbar = m_e r v_n \quad n = 1, 2, 3\,. \qquad (2)$$

Näistä ratkaisemalla

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 n} \quad n = 1, 2, 3 \qquad (3)$$

Nopeuden suurin arvo saadaan kun $n = 1$:

$$v = \frac{(1,602 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{C})^2}{4\pi(8,85 \cdot 10{-}12\ \mathrm{C}^2/\mathrm{Nm}^2)(1,055 \cdot 10{-}34\ \mathrm{Js})} = 2,2 \cdot 10^6\ \mathrm{m/s}$$

2. a) Miten vedyn 2p tilan energia muuttuu, kun spin-rata vuorovaikutus otetaan huomioon? b) Laske tämän tilan energia ilman spin-rata vuorovaikutusta ja sen kanssa. c) Miten $2p \to 1s$ dipoliemissiossa vapautuvan fotonin energia muuttuu spin-rata-vuorovaikutuksen johdosta? d) Laske fotonien energiat ilman tätä vuorovaikutusta ja sen kanssa, piirrä myös kuva sallituista sähködipolitransitioista. *Opastus:* vedyn 2p tilassa hienorakennevakion *a* arvona voidaan pitää $a = 30 \times 10^{-6}\,\mathrm{eV}/\hbar^2$.

a) Spin-ratavuorovaikutuksen (rataliikkeen ja spinin magneettisten momenttien välinen kytkentä) seurauksena vedyn 2*p* tila jakautuu kahteen energiatasoon joiden energiat poikkeavat hieman toisistaan: $2p_{j=3/2}$ (neljä alitilaa $m_j = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ joilla sama energia nollamagneettikentässä) ja $2p_{j=1/2}$ (kaksi alitilaa $m_j = -1/2, 1/2$ joilla sama energia nollamagneettikentässä)

Ilman spin-ratavuorovaikutusta vedyn energiat ovat

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^2}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{E_0}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, .. \text{Rydbergin energia } E_0 = 13{,}605692\,\mathrm{eV}\,.$$

2*p* tilalle *n* =2 saadaan siis $E_{2p} = -\dfrac{E_0}{4}$

Spinrata vuorovaikutuksen kanssa energiat ovat

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^2}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} + a\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} \text{ eli 2p tilalle } E_{2p} = -\frac{E_0}{4} + a\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$$

missä vakio *a* on odotusarvo yleisesti

$$a = \left\langle \frac{1}{2m_e^2 c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{dE_p}{dr}\right)\right\rangle \qquad E_p = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2 Z}{r}\,.$$

Odotusarvo lasketaan aina sen tilan aaltofunktioilla, johon energiaa ollaan laskemassa. Tehtävässä on annettu valmiiksi vakion *a* arvo 2*p* tilalle $a = 30 \times 10^{-6}\,\mathrm{eV}/\hbar^2$.

b) Spin-ratavuorovaikutuksen arvon laskemiseksi tarvitaan myös pistetulon $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ arvo. Sille pätee $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - 3/4\right]\hbar^2$. Tässä $l = 1$ joten mahdollisia kvanttiluvun *j* arvoja ovat $j = l + 1/2$ = 3/2 ja $j = l - 1/2$ = 1/2. Näin ollen pistetulo voi saada arvot $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} = \frac{1}{2}\hbar^2$ ($j = 3/2$) ja $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} = -1\hbar^2$ ($j = 1/2$).

Spin-ratavuorovaikutuksesta aiheutuva korjaus on siis

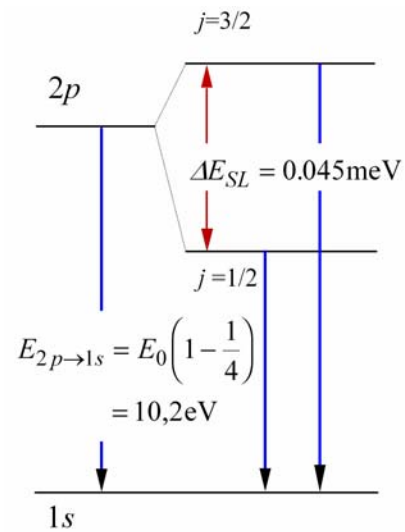
$a\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} = a\frac{l}{2}\hbar^2 = +15\mu\mathrm{eV}$ ($2p_{3/2}$ tila) ja $a\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} = -1a\hbar^2 = -30\mu\mathrm{eV}$ ($2p_{1/2}$ tila).

Vastaavat kokonaisenergiat ovat

$E_{2p} = -\dfrac{E_0}{4} + 15\mu\mathrm{eV}$ ($2p_{3/2}$ tila)

$E_{2p} = -\frac{E_0}{4} - 30\mu\text{eV}$ ($2p_{1/2}$ tila).

Katso oheista kuvaa.



c) Spin-ratavuorovaikutus ei vaikuta 1*s* tilan energiaan, koska sille $\boldsymbol{L} = 0 \Rightarrow \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} = 0$. Sähködipoliaproksimaatiossa saadaan siis kuvan esittämät kaksi fotoemissio siirtymää.

Huomaa, että spinratavuorovaikutuksesta aiheutuva korjaus on niin pieni että sitä ei voi piirtää samaan mittakaavaan 2p ja 1s tilojen energioiden kanssa.

d) Siirtymissä emittoituvien fotonien energiat ovat

$$E_{2p_{3/2}\to 1s} = E_{alkutila} - E_{lopputila} =$$
$$E_0\left(1-\frac{1}{4}\right) + a\frac{1}{2}\hbar^2 = \frac{3}{4}E_0 + 15\mu\text{eV}$$

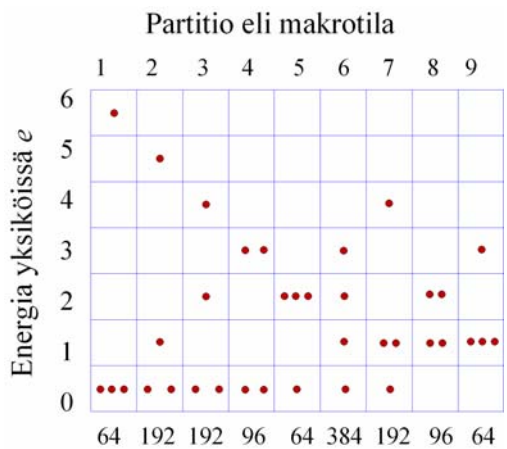
ja

$$E_{2p_{1/2}\to 1s} = E_0\left(1-\frac{1}{4}\right) - a1\hbar^2 = \frac{3}{4}E_0 \text{-}30\mu\text{eV}$$

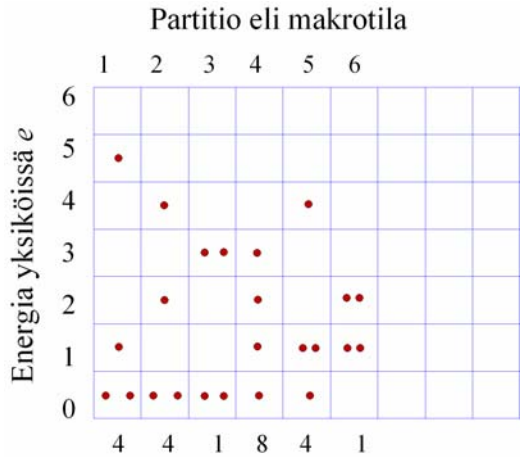
3. Maxwell-Boltzmann systeemissä on 4 klassista hiukkasta energiatasoilla $E_i = 0, 1e, 2e, 3e, \ldots$. Hiukkasten kokonaisenergia on 6*e*. Kunkin tason degeneraatio on $g_i = 2$. Mitkä ovat mahdolliset makrotilat ja kuinka monta mikrotilaa niihin sisältyy? (4p) b) Mitkä ovat mahdolliset makrotilat ja niihin sisältyvien mikrotilojen lukumäärät, jos hiukkaset ovat fermioneja? (2p) *Ohje kohtaan b)* päättele kuhunkin energiatasoon liittyvien mikrotilojen lukumäärä Paulin kieltosäännön avulla ja kerro eri energiatasojen mikrotilamäärät lopuksi keskenään saadaksesi makrotilaan liittyvän mikrotilalukumäärän.

a) Mahdolliset makrotilat ja niihin kuuluvien mikrotilojen lukumäärät on esitetty oheisessa kuvassa. Mikrotilojen määrät (kuvan alareunassa). laskettu yhtälöstä

$$W = N! \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!}$$



b) Jos hiukkaset ovat fermioneja kullekin energiatasolle voi laittaa enintään yhden hiukkasen ominaistilaa kohden eli tässä 2 hiukkasta, koska kukin taso oli kahdesti degeneroitunut. Jos tasolle laitetaan 2 fermionia se voidaan tehdä vain yhdellä tavalla, mutta 1 fermioni voidaan sijoittaa jommalle kummalle ominaistilalle eli tällöin ko. tasoon liittyy 2 mikrotilaa. Ylemmästä kuvasta makrotilat 1 5 ja 9 eivät Paulin kieltosäännön perusteella ole mahdollisia fermioneille. Alla oleva kuva esittää sallitut makrotilat ja niihin kuuluvien mikrotilojen määrän.



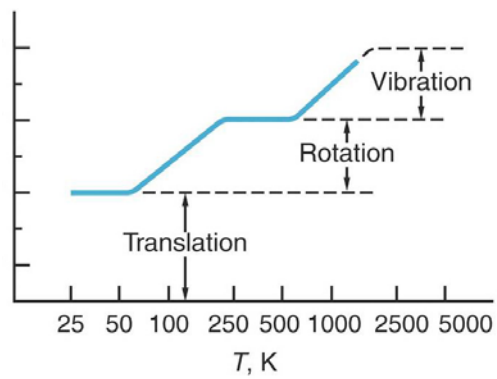
4. a) Selitä lyhyesti 1) mitä on mustan kappaleen säteily 2) Mikä on ekvipartitioperiaate ja 3) miten 2-atomisen molekyylin keskimääräinen lämpöenergia muuttuu lämpötilan mukaan - piirrä kuva b) Käyttämällä fotonikaasun "tilanyhtälöä" $pV = (1/3)U$, missä U on mustan kappaleen säteilyn kokonaisenergia, laske missä lämpötilassa fotonikaasun paine on 1 baari.

a)

1. Mustan kappaleen säteily on tietyssä lämpötilassa olevan väliaineen kansa tasapainossa olevaa sähkömagneettista säteilyä.

2. Ekvipartitioperiaatteen mukaan molekyylin keskimääräinen energia on lämmön aktivoimaa vapausastetta kohden $k_B T$ jos kyseiseen vapausasteeseen liittyy sekä liike että potentiaalienergiaa ja $k_B T/2$ jos ko. vapausasteeseen liittyy vain liike-energiaa.

3. Kaksi atomisen molekyylin keskimääräinen energia on hyvin alhaisissa lämpötiloissa $(3/2)k_B T$ sillä etenemisliikkeeseen liittyy kolme liike-energiaa sisältävää vapausastetta. Etenemisliikkeeseen ei liity kynnysenergiaa joten se on aina aktiivinen. Kun lämpötila ylittää pyörimisliikkeen aktivoitumislämpötilan /muutamasta Kelvinistä muutamaan kymmeneen Kelviniin) keskimääräinen energia kasvaa määrällä $k_B T$ kaksi vapausastetta ei potentiaalienergiaa. Kun lämpötila ylittää värähtelyn kynnyslämpötilan (1000-2000 Kelviniä) energia kasvaa vielä $k_B T$ verran (yksi vapausaste jolla liike ja potentiaalienergiaa). Katso oheista kuvaa.



b)

Stefan-Boltzmannin lain mukaan

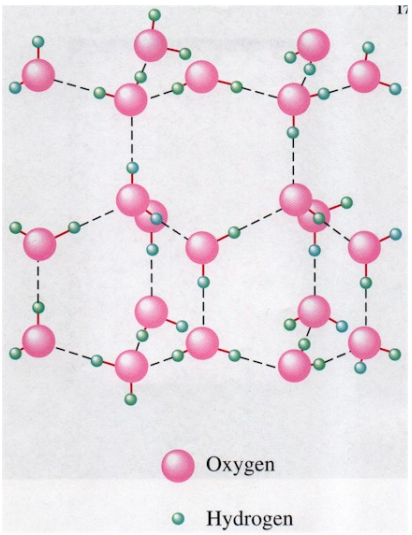
$$U = VaT^4 = V8\pi^5 k_B{}^4 / \left(15c^3h^3\right)T^4$$

Ratkaistaan tilanyhtälöstä lämpötila

$$pV = (1/3)8\pi^5 k_B{}^4 / \left(15c^3h^3\right)T^4 V \Rightarrow T = \left(\frac{45c^3h^3}{8\pi^5 k_B{}^4}\right)^{1/4} (p)^{1/4}$$

Asettamalla paineeksi 1 baari saadaan lämpötilaksi 141000 K.

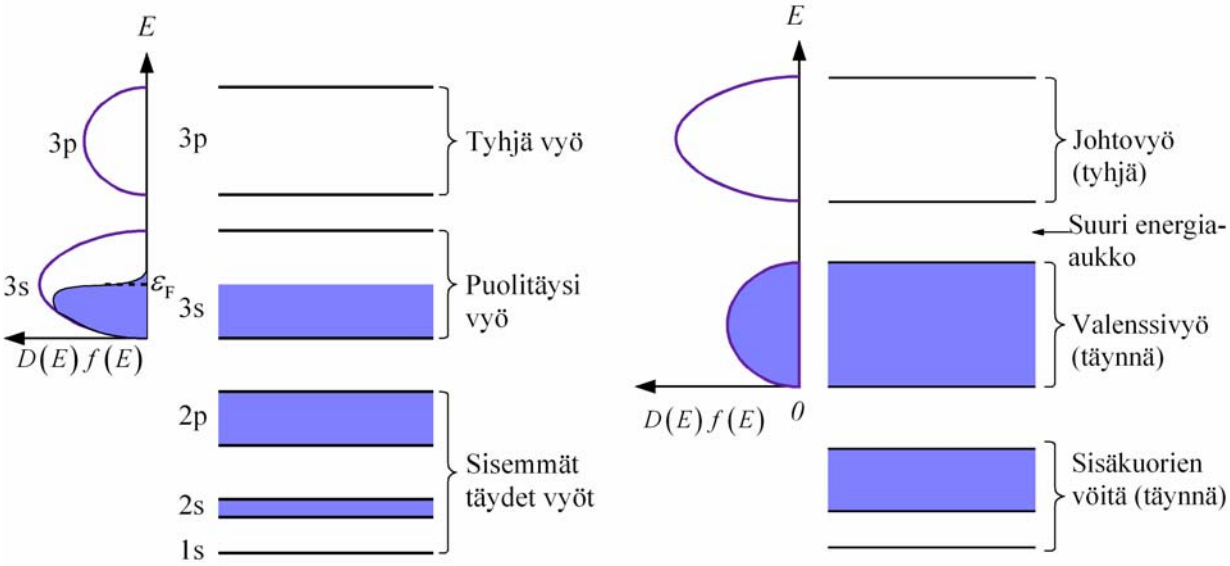
5. Selvitä 2-3 virkkeellä seuraavia asioita: a) jään kiderakenne, b) kovalenttinen sidos, c) piirrä skemaattisesti ylimmät elektronivyöt 1) metallissa ja 2) itseispuolijohteessa d) Piirrä donori- ja akseptoritilat puolijohteen elektronivyörakenteeseen - mitä näille tiloille tapahtuu korkeissa ja mitä hyvin matalissa lämpötiloissa? e) hybridisaatio metaanimolekyylissä f) efektiivinen massa.



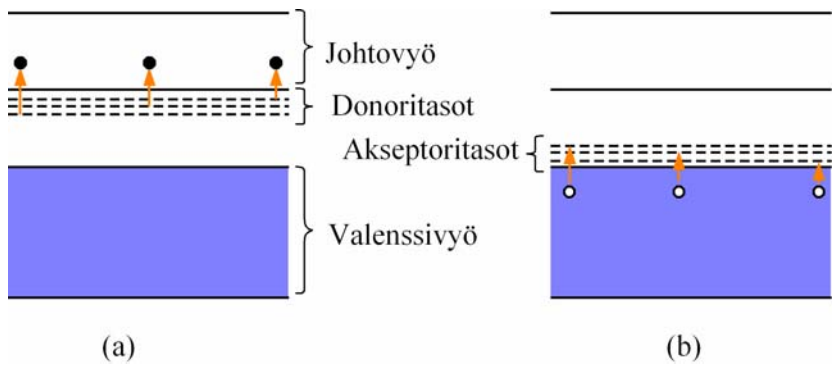
a) Jäässä vesimolekyylit ovat kiinni toisissaan vetysidoksilla jotka muodostuvat kun permanentteja dipoleja sisältävään sidokseen kuuluu vetyatomi. Happiatomit muodostavat tetraedrigeometrian josta seuraa 120 asteen kiertosymmetria ks kuva

b) Kovalenttinen sidos muodostuu tyypillisesti saman alkuaineen atomeista, jotka jakavat uloimmat elektroninsa atomien väliseen tilaan. Ydinten välissä oleva negatiivinen varaus ”liimaa” ytimet kiinni toisiinsa. Esimerkkejä ovat typpimolekyyli ja timanttikide.

c) Vasemmalla alhaalla metalli oikealla itseispuolijohde.



d) Oheinen kuva esittää donori ja akseptori tiloja. Matalissa lämpötiloissa elektronit lukkiutuvat donoritiloihin ja akseptritilalla oleva elektroni putoaa valenssivyöhön – ilmiötä kutsutaan freeze outiksi ja silloin puolijohde menettää sähkön johtavuutensa. Korkeissa lämpötiloissa elektroni irtoaa johtovyöhön ja akseptrotilan aukon täyttää valenssivyön elektroni jolloin valenssivyöhön muodostuu aukkoja. Näin puolijohteessa on vapaita varauksenkuljettajia ja siitä tulee hyvä johde



e) Metaanimolekyylissä hiilen 2s $2p_x$, $2p_y$ ja $2p_z$ orbitaalit muodostavat atomiorbitaaalien lineaarikombinaatioina neljä molekyyliorbitaalia, jotka suuntautuvat kohden tetraedrin kärjissä olevia vetyatomeja.

f) Energiavöiden reunalla energia voidaan esittää elektronin aaltovektorin avulla muodossa

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow \text{tästä seuraa } m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

missä m^* on elektronin efektiivinen massa. Puolijohteen valenssivyössä elektronin efektiivinen massa voi olla myös negatiivinen (tällöin aukon efektiivinen massa on positiivinen)

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}