S-114.1327 Fysiikka III (Est) 2 VK 12.5.2010

1. Tarkastellaan vedyn 2p energiatasoa. a) Mikä on tämän tason energia Bohrin mallissa? b) Oletetaan, että spin-ratavuorovaikutus voidaan jättää huomiotta. Kirjoita kaikki tähän energiatasoon liittyvät spinorbitaalit käyttäen tarvittavia kvanttilukuja (kirjoita kaikki kvanttiluvut näkyviin) c) Mihin suureisiin ao. kvanttiluvut liittyvät ts. kirjoita kaikkien kvanttilukujen yhteys vastaavaan fysikaaliseen suureeseen näkyviin.

a) Energia Bohrin mallissa

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^2}{8\,\epsilon_0{}^2 h^2 n^2} = \frac{R_\infty hcZ^2}{n^2}$$

Nyt meillä on n=2, Z=1, ja $\boldsymbol{R_\infty = 1,097 \cdot 10^7\ m^{-1}}$ (Rydbergin vakio) jolloin energiaksi saadaan

$$E_2 = -\frac{1{,}097 \cdot 10^7\ m^{-1} \cdot hc}{4} = -5{,}35 \cdot 10^{-19} J \approx 3{,}35\ eV$$

Tai vastaavasti voi laskea likimääräisen energian arvon

$$E_n = -\frac{13{,}607\ eV}{n^2} Z^2 = 3{,}4\ eV$$

b) Energiatasoon n=2 liittyvät kvanttitilat: l=0 (s-tila) ja l=1 (p-tila).
l=0 : $\boldsymbol{m_l = 0}$ (tätä ei vaadittu täysiin pisteisiin)
l=1 : $\boldsymbol{m_l = -1, 0, 1}$
ja lisäksi spinkvanttiluku $\boldsymbol{m_s}$, joka elektronin tapauksessa voi saada kaksi eri arvoa $\boldsymbol{m_s = \pm\frac{1}{2}}$.

Spin-orbitaalit ovat muotoa

$$\psi_{nlm_lm_s} = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\phi)\chi_{m_s}$$

Eli

$$\psi_{2,1,-1,\pm1/2} = R_{21}(r)Y_{1-1}(\theta,\phi)\chi_{\pm\frac{1}{2}}\ ,$$
$$\psi_{2,1,0,\pm1/2} = R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\phi)\chi_{\pm\frac{1}{2}}\ ,$$
$$\psi_{2,1,1,\pm1/2} = R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\phi)\chi_{\pm\frac{1}{2}}\ .$$

c) Pääkvanttiluku n kertoo Bohrin mallin mukaisen energiatason järjestysluvun, eli kertoo millä energiatasolla elektroni sijaitsee. Pääkvanttiluku ilmoittaa myös elektronin keskimääräisen etäisyyden ytimestä eli sitä voidaan ajatella kuvaavan elektronikuorten järjestyslukua.
Sivukvanttiluku l kuvaa sen atomiorbitaalin avaruudellista muotoa ja symmetriaa, jolta hiukkanen todennäköisimmin löytyy
Magneettinen kvanttiluku $\boldsymbol{m_l}$ ilmoittaa magneettikentässä sijaitsevan elektronin energian ja elektronipilven suuntautumisen, eli erottelee eri p-, d- ja f-orbitaalit toisistaan.
Spinkvanttiluku kuvaa hiukkasen spinin kvanttitilaa.

2. Hopea-atomeista koostuva suihku läpäisee 0,1 m pitkän alueen jossa olevan magneettikentän gradientti on kohtisuorassa atomien nopeusvektoria vastaan. Atomien keskimääräinen nopeus on $7{,}0\times10^2$ m/s. ja kentän gradientin suuruus on $3{,}0 \cdot 10^2$ T/m. Laske kuinka paljon spin ylös ja spin alas komponentit eroavat atomien tullessa ulos magneettikentästä. Huomaa, että hopea-atomin ylin elektroni on 5*s*, joten hopea-atomin magneettinen momentti aiheutuu yksinomaan spinistä. Opastus: spinmagneettisesta momentista aiheutuva voima lasketaan samoin kuin klassisessa sähkömagneettisessa teoriassa.

Koejärjestely tunnetaan nimellä Stern-Gerlachin koe, ja se on perinteinen osoitus elektronin sisäisen kulmaliikemäärän(=spin) olemassaolosta. Koska elektronin spinillä on kaksi mahdollista arvoa, jakautuu suihku magneettikentän vaikutusalueella kahdeksi suihkuksi. Magneettisen dipolin potentiaalienergia ulkoisen magneettikentän vaikutusalueella on $\mathrm{U} = -\bar{\mu} \cdot \bar{\mathrm{B}}$, josta saadaan ratkaistua atomeihin vaikuttava voima:

$$\bar{\mathrm{F}} = -\nabla \mathrm{U} = -\nabla(\bar{\mu} \cdot \bar{\mathrm{B}}).$$

Oletetaan, että magneettikentän gradientti on kohtisuorassa suihkun etenemissuuntaa vastaan. Valitaan magneettikentän gradientin suunnaksi z-suunta, jolloin saadaan

$$\bar{\mathrm{F}} = \mu_z \frac{\mathrm{dB}}{\mathrm{dz}}.$$

jossa μ_z on magneettisen momentin komponentti z-akselin suuntaan. Voiman suunta päätellään siitä, että se pyrkii aina siirtämään systeemiä alempaan potentiaaliin, eli tässä tapauksessa spin alas -hiukkasia ylöspäin ja spin ylös -hiukkasia alaspäin. Hopea-atomin sisempien elektronikuorien magneettinen momentti on nolla. Uloimman s-elektronin rataliikkeestä aiheutuva magneettinen momentti on myös nolla, koska tälle elektronille $l = 0$. Täten koko magneettinen momentti aiheutuu uloimman elektronin spinistä:

$$\overline{\mu_s} = \mathrm{g}\, \frac{\mathrm{q}}{2m_e} \bar{S}.$$

jossa $g \approx 2$ on gyromagneettinen suhde ja $q = -e$. Magneettiseksi momentiksi saadaan siis $\overline{\mu_s} = \frac{\mathrm{q}}{m_e} \bar{S}$.
Yleisesti hiukkasen spin on kvantittunut yhtälön $S = \sqrt{s(s+1)}$ mukaan, jossa s on hiukkasen spinkvanttiluku. Elektronille tämä kvanttiluku on$s = \frac{1}{2}$, minkä takia elektronia kutsutaan spin-1/2-hiukkaseksi. Spinin z-komponentti taas saadaan yhtälöstä $S_z = m_s\hbar$, jossa m_s =-s, -s+1, ..., s-1, s.
Elektronin spinin z-komponentilla on siis kaksi mahdollista arvoa, joihin liittyvät kvanttiluvut ovat $m_s = \frac{1}{2}$ ja $m_s = -\frac{1}{2}$.

Nähdään siis, että spin ylös- ja spin alas -komponenttien magneettiset momentit ovat

$$\mu_{sz} = \pm \frac{1}{2} \frac{\mathrm{q}}{m_e} \hbar.$$

Nyt voidaan laskea atomeihin vaikuttava voima F:

$$F = \mu_{Sz} \frac{dB}{dz} = \frac{1}{2} \frac{e}{m\_e} \hbar \frac{dB}{dz} = 2{,}782 \cdot\ 10^{-21}\ N.$$

Tämä voima poikkeuttaa atomeja suunnastaan, ja molempien spinkomponenttien siirtymäksi saadaan

$$\Delta z = \frac{1}{2} a t^2 = \frac{1}{2} \frac{F}{M_{Ag}} \left(\frac{x}{v}\right)^2 =$$
$$\frac{1}{2}\ \frac{2{,}782 \cdot 10^{-21} N}{47 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27} kg} \left(\frac{0{,}1\, m}{7{,}0 \cdot 10^2 \frac{m}{s}} \right)^2$$
$$\approx\ 3{,}64 \cdot\ 10^{-4}\ m.$$

Spinit ovat poikenneet vastakkaisiin suuntiin, joten spin ylös- ja spin alas -komponenttien välimatka on kaksinkertainen eli $7,28 \cdot 10^{-4}$.

3. Oletetaan, että saunan kiukaan tulipesää voidaan pitää likimain mustana kappaleena, jonka lämpötila on 1200 ^{0}C .

a) Selitä lyhyesti miten tulipesän lämpösäteilyn fotonien lukumäärätiheys riippuu fotonien taajuudesta. (Huom: taajuusriippuvuus muodostuu kahdesta eri tekijästä, mitkä ne ovat)

b) Miten lämpösäteilyn kokonaisenergiatiheys riippuu lämpötilasta?

c) Kiukaan tulipesän luukku avataan (oletetaan, että avaaminen ei häiritse lämpösäteilyä tulipesässä) Arvioi suuruusluokalleen mikä on aukosta ulos virtaavan lämpösäteilyn energiavuo (yksikköpinnan läpäisevä energia sekunnissa).

d) Laitat kätesi avatun luukun eteen. Oletetaan, että emittoituvan lämpösäteilyn vuo absorboituu ihollesi yhden kymmenysosamillimetrin paksuiseen pintakerrokseen, jonka tiheys on $1{,}0\,\mathrm{kg/dm^3}$ ja ominaislämpö sama kuin veden eli $4{,}186\,\mathrm{kJ/(kgK)}$. Missä ajassa ihon pintakerroksen lämpötila on 100 ^{0}C? Apuneuvo: Stefan Boltzmannin vakion arvo on $7{,}56\times10^{-16}\,\mathrm{J/(m^{-3}K^{-4})}$.

a**) Fotonien tiheys tilavuusyksikköä kohden energiavälillä $[E, E+dE]$ on**

$$dn = g(E)\frac{1}{e^{E/kT}-1}dE\,,$$

missä $g(E)=\frac{8\pi V}{h^3c^3}E^2$ **on fotonien tilatiheysfunktio ja** $\frac{1}{e^{E/kT}-1}$ **fotonin tilojen miehitystodennäköisyys. Lausumalla fotonin energia taajuuden avulla** $E = h\nu$ **ja sijoittamalla se fotonitiheyden yhtälöön saadaan (** $dE = hd\nu$ **)**

$$dn = \frac{8\pi V}{h^3c^3}(h\nu)^2\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}hd\nu = \frac{8\pi V}{c^3}\frac{\nu^2}{e^{h\nu/kT}-1}d\nu\,.$$

Fotonotiheys on siis muotoa

$$dn \propto \frac{\nu^2}{e^{h\nu/kT}-1}\,.$$

b) Lämpösäteilyn kokonaisenergiatiheyden riippuvuutta lämpötilasta kutsutaan Stefan-Boltzmanin laiksi

$$E_{tot} = aT^4\,,$$

missä vakio $a = \frac{8\pi^5k^4}{15c^3h^3}$ **. Eli kokonaisenergiatiheys on muotoa**

$$E_{tot} \propto T^4$$

c)

Molekyylivuon yhtälö on

$$\Phi = \frac{dN}{Adt} = \tfrac{1}{4}nv_{ave}\,.$$

Sijoitetaan tässä hiukkasmäärän *N* tilalle energia *E*, hiukkastiheyden *n* tilalle energiatiheys aT^4 **ja keskimääräisen nopeuden** v_{ave} **tilalle valonnopeus *c*. Tulokseksi saadaan energiavuo**

$\Phi_E = \frac{dE}{Adt} = \frac{1}{4}aT^4c$.

d)

Ihokerroksen paksuus $l = 1{,}0 \cdot 10^{-4}\,m$**, tiheys** $\rho = 1{,}0 \cdot 10^3\,kg/m^3$ **ja ominaislämpökapasiteetti** $C = 4{,}186\,kJ/(kgK)$**. Lisäksi kiukaan lämpötila** $T = 1200°C$ **ja Stefan-Boltzmanin vakio** $a = 7{,}56 \cdot 10^{-16}\,J/(m^{-3}K^{-4})$**. Oletetaan, että kaikki emittoituva lämpösäteily absorboituu iholle. Kiukaan emittoima lämpöenergia on (** $c = 2{,}9979 \cdot 10^8\,\frac{m}{s}$ **)**

$Q = \Phi_E At = \frac{1}{4}aT^4cAt$.

Ihon absorboima lämpöenregia on

$Q = mC\Delta T = \rho AlC\Delta T$ **,**

missä massa $m = \rho V = \rho Al$ **ja lämpötilan muutos** $\Delta T = (100 - 37)°C = 63°C$**. Asettamalla nämä lämpöenergiat yhtä suuriksi ja ratkaisemalla** t **saadaan**

$t = \frac{\rho AlC\Delta T}{\frac{1}{4}aT^4cA} = \frac{\rho lC\Delta T}{\frac{1}{4}aT^4c} \approx 0{,}1s$.

4. Selitä lyhyesti (kaksi-kolme virkettä riittää): a) ekvipartitioperiaate, b) tilatiheys c) makrotila ja mikrotila d) kovalenttinen sidos e) ionisidos f) suunnatut orbitaalit. Kohdissa d-f anna myös esimerkki molekyylistä.

a) Makroskooppisen järjestelmän jokainen mikrotason vapausaste varastoi $\frac{1}{2}k_BT$ **verran (sisä)energiaa.**

b) Tilatiheys g(E) kertoo kuinka monta energiatilaa on differentiaalisella energiavälillä [E,E+dE].

c) Mikrotila on jokainen fysikaalisesti muista mikrotiloista erotettavissa oleva tapa jakaa hiukkaset eri yhden hiukkasen ominaistiloille, mikrokanooninen joukko = hiukkasmäärä N **ja sisäenergia**U **ovat vakioita.**
Makrotilalla statistisessa fysiikassa tarkoitetaan aineen "kaukaa nähtävää" termodynaamista tilaa. Makrotilan kertovat systeemin tilanmuuttujat, kuten lämpötila, tilavuus ja energia.

d) Kovalenttinensidos muodostuu, kun elektronegatiivisuusero on pieni ja atomit ovat jaksollisessa järjestelmässä lähekkäin (kahden epämetallin välille). Atomit jakavat uloimman kuoren elektronit keskenään (elektronit kuuluvat molempiin atomeihin). Jakamalla elektroneja, atomit saavuttavat jalokaasujen elektronikonfiguraation. Kumpikin ydin vetää jaettuja elektroneja puoleensa. Esimerkkinä O_2**-molekyyli.**

e) Syntyy positiivisesti ja negatiivisesti varattujen ionien välisestä vetävästä vuorovaikutuksesta (metallien ja epämetallien välillä). Ionit muodostuvat elektronien siirtyessä atomilta toiselle. Tämä on edullista johtuen suuresta erosta elektronegatiivisuudessa (atomin kyvystä sitoa ylimääräinen elektroni). NaCl tyypillinen molekyyli.

f) Suunnatut orbitaalit voidaan esittää palloharmonisten funktioiden lineaarikombinaationa. Yksittäisten atomien orbitaalit uudelleenjärjestäytyvät vastaamaan molekyylin symmetriaa eli ne suuntautuvat molekyylin geometrian mukaan. Esimerkkinä H_20**-molekyyli.**

5. Kuparin tiheys on $8{,}9\times10^{3}\text{kg/m}^{3}$, elektronikonfiguraatio $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s$ ja atomimassa 63,546 amu. a) kuinka monta elektronia jokainen kupariatomi luovuttaa johtovyöhön? b) mikä on kuparin Fermienergia? c) 77K lämpötilassa kuparin ominaisvastus on $4\cdot10^{-9}\,\Omega\text{m}$. Laske kuparin johtavuuselektronin kahden törmäyksen välillä kulkema matka Druden mallista [opastus kohtaan c): ominaisvastus on johtavuuden käänteisluku, elektronin nopeuden voit laskea Fermienergiasta].

a) Kuparilla uloimmalla elektronikuorella 1 ainut elektroni. Alemmat elektronikuoret ovat täynnä ja näin siis eivät reagoi kauheammin ulkomaailman kanssa. Täten kupari luovuttaa yhden johtavuuselektronin uloimmalta elektronikuorelta.

b) Tilavuus on $\boldsymbol{V = m_{cu}/\rho_{cu}}$ ja koska kupari luovuttaa yhden elektronin johtovyöhön N=1. Tästä saadaan

$$\frac{N}{V} = \frac{\rho_{cu}}{m_{cu}} = \eta = 8{,}43\cdot10^{28}m^{-3}$$

Tästä voidaan ratkaista fermienergia

$$E_F = \frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} = = \frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}\cdot\left(1.054\cdot10^{-34}\text{ Js}\right)^2}{2\cdot9{,}11\cdot10^{-31}kg}(8{,}43\cdot10^{28}m^{-3})^{\frac{2}{3}} = 1{,}22\cdot10^{-18}J \approx 7\ eV$$

c) Törmäysaika Druden mallilla

$$\sigma = \frac{e^2\eta t}{m_e} \to t = \frac{\sigma m_e}{e^2\eta} = 1{,}05\cdot10^{-13}s$$

Fermienergia antaa hyvän estimaatin kineettiselle energialle ja täten nopeudelle (KE=$\boldsymbol{E_F}$)

$$KE = \frac{1}{2}mv^2 \to v = \sqrt{2\cdot\frac{E_F}{m_e}} = 1{,}57\cdot10^7\,\frac{m}{s}$$

Törmäyksien välisellä ajalla elektroni kerkeää liikkua matkan

$$s = vt = 1{,}57\cdot10^7\,\frac{m}{s}\cdot1{,}05\cdot10^{-13}s = 0{,}17\ \mu m$$