ELEC-C3210 Materiaalien ominaisuudet **6. harjoitus, malliratkaisut**

1. *Eräässä termodynaamisessa tasapainossa olevassa systeemissä, joka noudattaa Maxwell-Boltzmann statistiikkaa, saatiin kokeellisesti tilojen energioille ja niiden suhteellisille miehitys-todennäköisyyksille arvot: 2,3 meV (63%), 10,9 meV (23%), 19,5 meV (8,5%) ja 28,1 meV (3,1%) vastaavasti. Arvioi systeemin lämpötila näiden kokeellisten tulosten perusteella. Oletetaan kaikkien tilojen degeneraatioksi* $g_i = 1$**.**

Olkoon tilat 1, 2, 3, 4. Suhteelllinen todennäköisyys ensimmäisen ja toisen tilan välillä on

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-(E_2-E_1)/kT} = \frac{0.23}{0.63} = 0.365.$$

Tästä seuraa

$$-\left(\frac{E_2-E_1}{kT}\right) = \ln(0.365) \Rightarrow T_{21} = \frac{E_1-E_2}{k\ln(0.365)} = 99.0 \text{ K}.$$

Vastaavasti muille tiloille saadaan

$$T_{31} = \frac{E_1-E_3}{k\ln(0.1349)} = 99.6 \text{ K},$$

$$T_{41} = \frac{E_1-E_4}{k\ln(0.0492)} = 99.4, \text{ K, vastaavasti}$$

$T_{32} = 100.26K$, $T_{42} = 99.59K$ ja $T_{43} = 98.94K$.

Lämpötilat eivät ole tarkalleen samat, sillä miehitystodennäköisyydet on määritelty kokeellisesti, jolloin niihin sisältyvän epätarkkuuden takia suhteelliset todennäköisyydet eivät anna tarkalleen samaa lämpötilaa. Eräs tapa parantaa tarkkuutta on laskea esimerkiksi näin saatujen lämpötilojen keskiarvo, jolloin osa satunnaisista mittausvirheistä eliminoituu. Lämpötilojen keskiarvoksi saadaan $T = 99.5$ K.

2. *a) Laske makrotilojen lukumäärä systeemille, jossa on neljä hiukkasta ja kaksi energiatilaa, joista toisen degeneraatio on yksi ja toisen kaksi. b) Laske kunkin makrotilan termodynaaminen todennäköisyys (mikrotilojen lukumäärä), kun kullakin tilalla voi olla rajattomasti hiukkasia ja hiukkaset voidaan erottaa toisistaan. c) Kuten b-kohta, mutta hiukkasia ei voi erottaa toisistaan.*

a) Olkoot energiatilat *i*=1 ($g_1 = 1$) ja *i*=2 ($g_2 = 2$). Mahdolliset makrotilat 4 hiukkasen ja 2 energiatilan systeemille ovat:

	a	b	c	d	e
Energiatila 1	0	1	2	3	4
Energiatila 2	4	3	2	1	0

Systeemissä on siis viisi eri makrotilaa.
b) Systeemi noudattaa siis Maxwell-Boltzmann -statistiikka. Kunkin makrotilan mikrotilojen lukumääräksi saadaan:

$$P = N!\prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!} \qquad \Rightarrow$$

a	b	c	d	e
16	32	24	8	1

c) Koska hiukkaset ovat identiteetittömiä ja kullakin tilalla voi olla rajaton määrä hiukkasia, noudattaa systeemi Bose-Einstein -statistiikkaa. Kutakin makrotilaa vastaavien mikrotilojen lukumäärä on:

$$P = \prod_i \frac{(g_i + n_i - 1)!}{(g_i - 1)!\, n_i!} \qquad \Rightarrow$$

a	b	c	d	e
5	4	3	2	1

3. *a) Olkoon Bose-Einstein -statistiikkaa noudattavassa systeemissä 6 hiukkasta ja 8 energiatilaa (energiat $0, \varepsilon, 2\varepsilon, 3\varepsilon, 4\varepsilon, 5\varepsilon, 6\varepsilon, 7\varepsilon$ ja $g_i = 3 \quad \forall i$). Muodosta diagrammi makrotiloista (vrt. luentomonisteen kuva), kun sisäenergia $U = 7\varepsilon$. b) Laske kunkin makrotilan termodynaaminen todennäköisyys ja c) osoita, että mikrotilojen summa on 2340. d) Laske kunkin tilan keskimääräinen miehitysluku.*

a) Systeemillä on 14 erilaista makrotilaa:

	1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**	**11**	**12**	**13**	**14**
E=7ε	•													
E=6ε		•												
E=5ε			•		•									
E=4ε				•		•			•					
E=3ε				•			•	••		•		•		
E=2ε			•			•	••			•	•••		••	•
E=ε		•			••	•		•	•••	••	•	••••	•••	•••••
E=0	•••••	••••	••••	••••	•••	•••	•••	•••	••	••	••	•	•	

b) Todennäköisyydet (mikrotilojen lukumäärät) saadaan kaavalla $P = \prod_i \frac{(g_i + n_i - 1)!}{(g_i - 1)!\, n_i!}$:

	1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**	**11**	**12**	**13**	**14**
P_k	63	135	135	135	180	270	180	180	180	324	180	135	180	63

c) Mikrotilojen kokonaislukumäärä saadaan yllä olevasta taulukosta laskemalla mikrotilat yhteen

$$\Omega = \sum_{k=1}^{14} P_k = 2340.$$

d) Kunkin tilan keskimääräiset miehitysluvut saadaan

$$\bar{n}_i = \sum_k \frac{P_k}{\Omega} n_{k,i},$$

missä *k* käy kaikkien partitioiden yli.

i	$\bar{n}_i$
1	2,585
2	1,585
3	0,877
4	0,485
5	0,25
6	0,135
7	0,058
8	0,027
$\sum_i \bar{n}_i$	6

4. *Osoita, että Maxwell-Boltzmann -statistiikkaa noudattavassa systeemissä tilan j keskimääräinen miehitysluku on* $n_j = -Nk_B T \left(\frac{\partial \ln(Z)}{\partial E_j} \right)_T$*, missä N on kokonaishiukkasmäärä.*

MB-systeemin partitiofunktio on

$$Z = \sum_i g_i e^{-E_i/(k_B T)}$$

ja sen logaritmin derivaatta energian E_j suhteen on

$$\left(\frac{\partial}{\partial E_j} \ln(Z) \right)_T = \frac{1}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial E_j} \right)_T = \frac{1}{Z} \left(-\frac{g_j}{k_B T} e^{-E_j/(k_B T)} \right).$$

Kerrotaan yo. tulos $-Nk_B T$:lla, jolloin saadaan

$$-Nk_B T \left(\frac{\partial}{\partial E_j} \ln(Z) \right)_T = -Nk_B T \frac{1}{Z} \left(-\frac{g_j}{k_B T} e^{-E_j/(k_B T)} \right) = \frac{N}{Z} g_j e^{-E_j/(k_B T)},$$

missä viimeinen muoto vastaa tasapainotilan miehityslukua. Toisin sanoen

$$n_j = \frac{N}{Z} g_j e^{-E_j/(k_B T)} = -Nk_B T \left(\frac{\partial}{\partial E_j} \ln(Z) \right)_T .$$