

2. ZH – megoldással

1. feladat:

Adott egy N db, független, lokalizált atomokból álló paramágnes, melyben az atomok állapota: $S = \frac{1}{2}$, $L = 0$, $J = \frac{1}{2}$.

a) Igazold, hogy ekkor egy atom mágneses momentuma: $\underline{\mu} = -2\mu_B \underline{S}$! [1 pont]

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \quad \text{és} \quad J = L + S$$

Megoldás:

$$g = 1 + \frac{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)}{2\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)} = 1 + \frac{\frac{3}{4} + \frac{3}{4}}{2\frac{3}{4}} = 1 + 1 = 2$$

$$\underline{\mu} = \gamma \hbar \underline{J} = -\frac{1}{\hbar} \mu_B g \hbar \underline{S} = -2\mu_B \underline{S}$$

b) A rendszer B nagyságú, külső, homogén, csak z irányú komponenssel rendelkező ($\underline{B} = (0,0,B)$) mágneses térben van. Mennyi szintre hasad fel az alapállapot energiaszint? Add meg az entrópia hőmérsékletfüggését ($S(T)$)! (Alkalmazd a gyakorlaton is használt közelítést: csak az alapállapot felhasadásával számol!) [5 pont]

$$\begin{array}{l} 2\text{sh}(x) = (e^x - e^{-x}); \quad 2\text{ch}(x) = (e^x + e^{-x}) \\ \text{sh}'(x) = \text{ch}(x); \quad \text{ch}'(x) = \text{sh}(x) \end{array} \quad \left| \quad \begin{array}{l} \frac{\text{sh}(x)}{\text{sh}\left(\frac{x}{2}\right)} = 2\text{ch}\left(\frac{x}{2}\right); \\ \frac{\text{sh}(x)}{\text{ch}(x)} = \text{th}(x) \end{array} \right.$$

Megoldás:

Két ($\pm\frac{1}{2}$) szintre hasad fel. $E = g\mu_B S_z B = 2\mu_B S_z B$

$$\zeta = \sum_{S_z = -\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} e^{-\frac{E}{k_B T}} = e^{\frac{\mu_B B}{k_B T}} + e^{-\frac{\mu_B B}{k_B T}} = 2\text{ch}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$$

Vagy az órán levezetett összefüggésből:

$$\zeta = \sum_{J_z = -J}^{+J} e^{-\frac{1}{k_B T} g \mu_B B J_z} = \dots = \frac{\text{sh}\left(J + \frac{1}{2}\right) x^{J + \frac{1}{2}}}{\text{sh}\frac{1}{2} x} \stackrel{\cong}{=} \frac{\text{sh}(x)}{\text{sh}\frac{x}{2}} = 2\text{ch}\left(\frac{x}{2}\right) = 2\text{ch}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$$

Ebből felírható a szabadenergia (mivel függetlenek és lokalizáltak, ezért $Z = \zeta^N$):

$$F = -k_B T \ln(Z) = -k_B T N \ln(\zeta) = -k_B T N \ln\left(2 \operatorname{ch}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)\right)$$

Innen az entrópia deriválással:

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left[k_B T N \ln\left(2 \operatorname{ch}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)\right) \right] = \\ &= k_B N \ln\left(2 \operatorname{ch}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)\right) + k_B N T \frac{1}{2 \operatorname{ch}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)} 2 \operatorname{sh}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right) \left(-\frac{1}{T^2}\right) = \\ &= k_B N \left[\ln\left(2 \operatorname{ch}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)\right) - \frac{1}{T} \frac{2 \operatorname{sh}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)}{2 \operatorname{ch}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)} \right] = k_B N \left[\ln\left(2 \operatorname{ch}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)\right) - \frac{1}{T} \operatorname{th}\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right) \right] \end{aligned}$$

2. A feladat:

A C_2H_2 molekula lineáris. A tiszta acetilén gázra vonatkoznak az $H-C\equiv C-H$ alábbi feladatok:

- Becsüld meg a moláris hőkapacitást szobahőmérsékleten és magas hőmérsékleten – ahol már számítanak a rezgési módusok is! [2 pont]
- Mennyi egy C_2H_2 molekula sebességének átlagos nagysága, a sebesség lehetséges maximális értéke és mennyi a sebesség abszolút értékének szórása szobahőmérsékleten (22 °C)? [2 pont]

I. A									
1									
H 1									
VIII. A									
2									
He 4									
III. A	IV. A	V. A	VI. A	VII. A					
5	6	7	8	9	10				
B 11	C 12	N 14	O 16	F 19	Ne 20				
13	14	15	16	17	18				
Al 27	Si 28	P 31	S 32	Cl 35,5	Ar 40				
31	32	33	34	35	36				
Ga	Ge	As	Se	Br	Kr				

$$(u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg})$$

Megoldás:

- A molekula lineáris, tehát 3 translációs és 2 forgási módusa van. Így a belső energia: $U = N \left(\frac{3}{2} + \frac{2}{2}\right) k_B T = \frac{5}{2} N k_B T$, ahonnan a hőkapacitás: $C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{5}{2} N k_B$. Így a moláris hőkapacitás alacsony hőmérsékleten:

$$C_m = \frac{5}{2} N_A k_B = \frac{5}{2} \cdot 6 \cdot 10^{23} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} = 20,7 \left[\frac{J}{\text{mol} \cdot K} \right]$$

Magas hőmérsékleten a rezgési módusok száma: $(4 \cdot 3) - 3 - 2 = 7$. Így a rezgésekkel a hőkapacitás:

$$C_m^* = \left(\frac{3}{2} + \frac{2}{2} + 7\right) N_A k_B = \frac{19}{2} \cdot 6 \cdot 10^{23} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} = 78,7 \left[\frac{J}{\text{mol} \cdot K} \right]$$

- A C_2H_2 molekula tömege: $m_{C_2H_2} = 26 u$. ($T = 22 \text{ °C} = 295 \text{ K}$)

$$\begin{aligned} \cdot \quad \bar{v} &= \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} = \sqrt{\frac{8 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 295}{3,14 \cdot 26 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}}} = 490,1 \left[\frac{m}{s} \right] \\ \cdot \quad \tilde{v} &= \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 295}{26 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}}} = 434,3 \left[\frac{m}{s} \right] \\ \cdot \quad \sigma &= \sqrt{\frac{2k_B T}{m} \left(\frac{3}{2} - \frac{4}{\pi} \right)} = \sqrt{\frac{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 295}{26 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}} (0,2267)} = 206,8 \left[\frac{m}{s} \right] \end{aligned}$$

3. feladat:

Magas hőmérsékleten ($T = 1640 \text{ K}$), hogyan oszlanak meg az oxigén molekulák (O_2) az alapállapot és az első gerjesztett állapot között, ha tudjuk, hogy az első gerjesztett állapothoz $E_1 = 0.196 \text{ eV}$ energiaérték tartozik? Az összes molekulának átlagosan mennyi százaléka van a gerjesztett állapotban? (Az alapállapot energiát tekintjük $E_0 = 0 \text{ eV}$ -nak. $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$) [2 pont]

Megoldás:

Felírható az alap- és gerjesztett állapotban levő molekulák száma:

$$N_0 = \frac{N}{Z} e^{-\frac{E_0}{k_B T}} \quad \text{és} \quad N_1 = \frac{N}{Z} e^{-\frac{E_1}{k_B T}} \quad (\text{és természetesen } N = N_0 + N_1)$$

Ha csak ezek arányát számoljuk, nincs szükségünk se a részecske számra, se az állapotösszegre:

$$\frac{N_1}{N_0} = \frac{e^{-\frac{E_1}{k_B T}}}{e^{-\frac{E_0}{k_B T}}} = e^{-\frac{E_1 - E_0}{k_B T}} = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} = e^{-\frac{E_1}{k_B T}}$$

Ezt kiszámolva megkapjuk, hogyan oszlanak meg az oxigén molekulák az alapállapot és az első gerjesztett állapot között:

$$\frac{N_1}{N_0} = e^{-\frac{E_1}{k_B T}} = e^{-\frac{0.196 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1640}} \cong 0,25 = \frac{1}{4}$$

Ez a szám még csak az egymáshoz viszonyított arányuk. Az összes molekulából a gerjesztettek hányada:

$$\frac{N_1}{N} = \frac{N_1}{N_0 + N_1} = \frac{1}{4 + 1} = \frac{1}{5} = 0,2,$$

Tehát összesen molekulának 20%-a van gerjesztett állapotba.