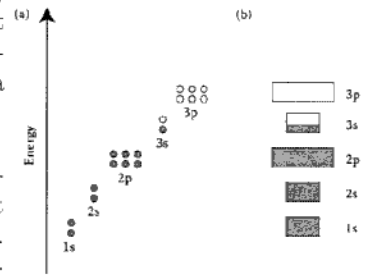


1. Selitystehtävä (lyhyesti): (a) Mitä kuvaa plasmataajuus, ja miten se vaikuttaa metallihiukkasen heijastuvuuteen ja läpinäkyvyyteen? (b) Resonansitaajuus ja laatukerroin. Anna esimerkki sovelluksesta nanomekaniikassa. (c) Piillä on 14 elektronia. Piirrä energiatasokaavio, jossa piin elektronit täyttävät kuoret  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ , jne. (ks. malliksi kuva natriumin elektronien energiatasoi- ta). Kaavion perusteella selitä, miten atomiset valenssitilat kiinteässä aineessa jakautuvat valenssi- ja johtavuusvyöksi, joiden väliin syntyy vyörajo.

Courtesy of CRC Press/Taylor & Francis Group

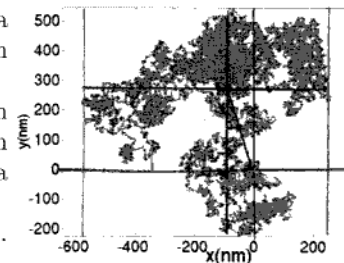


Tehtävän 1c. mallikuva.

2. Mallinna ketjumaista molekyyliä äärettömän syvässä 1-ulotteisessa kvanttila-  
 laatikossa, jonka pituus on  $L$ . Molekyylin uloimmilla kuorilla olevat elektronit  
 ovat vapaita liikkumaan tässä laatikossa, ja niiden energiatilat kvantittuvat.  
 Fermi-Dirac -jakauman mukaan, jos energiatasojen ero on alle  $k_B T$ , elektro-  
 nien terminen viritys alemmalla tilalle ylempälle on hyvin todennäköinen.

(a) Määritä kahden alimman energiatilan erotus käyttäen hiukkasen laatikossa -mallia. (3p)  
 (b) Vertaa tätä energiaerotusta termiseen kohinaan  $k_B T$ . Onko odotettavissa, että elektroni olisi selkeästi jommalla kummalla energiatilalla? (2p)  
 Jos komponenttisolvelluksissa kvanttimekaanisten energiatilojen erotuksen olisi oltava suu-  
 rempi kuin  $10k_B T$ , missä lämpötiloissa molekyyliä voisi toimia? (1p)

3. Oheinen kuva esittää nanoihiukkasen muodostamaa Brownin liikkeen mukaista polkua sen diffundoituessa ve-  
 dessä. Hiukkasen lähtöpaikka on origossa ja mitta-asteikot ovat nanometreina.



Tehtävän 3. kuva.

(a) Arvioi kuvasta esim. viivottimella hiukkasen neliöllinen keskipoikkeama  $\sigma = \sqrt{\langle (x - x_0)^2 \rangle}$  sen lähtöpaikasta. Jos kuvan reitin muodostumiseen on kulunut aikaa  $\Delta t = 1.0ms$ , arvioi tästä hiukkasen diffusiovakioita. (3p)

(b) Einsteinin teoria Brownin liikkeestä liittyy diffusiovakion  $D$  termisen energian  $k_B T$  hiukkasen säteeseen  $r$  ja ympäröivän nesteen viskositeettiin  $\mu$ . Oheisen kuvan, (a)-kohdan tuloksen avulla sekä Einsteinin teorian avulla arvioi kyseisen nanoihiukkasen kokoa. (3p)

Oleta veden lämpötilaksi  $20^\circ C$  ja dynaamiseksi viskositeetiksi  $\eta = 1.00mPa \cdot s$ .  
 Lisävihje löytyy muualta tehtäväpaperista.

4. Atomien välistä vuorovaikutusta molekyyliissä mallinnetaan erälle materiaaleille ns. Morse-potentiaalilla:

$$U(r) = D (1 - \exp(-a(r - r_0)))^2,$$

Missä  $D$ ,  $a$  ja  $r_0$  ovat sovitettavia parametreja. (a) Osoita, että potentiaalin minimi on kohdassa  $r = r_0$ . Määritä  $U(r = r_0)$  ja  $U(r \rightarrow \infty)$ . Mikä on energia, jonka tarvitset sidoksen katkaisemiseen? (b) Määritä lauseke ato-  
 mien väliselle voimalle. Missä kohdassa voima on maksimissaan? Piirrä kuvaaja potentiaalienergiasta ja voimasta.

5. Skaalaustehtäviä. Tarkastele (a)- ja (b)-kohdissa, miten seuraavat suureet skaalautuvat suhteessa hiukkasen tai rakenteen karakteristiseen kokoon  $D$ : (a) Pallon muotoisen nanopartikkelin pinta-atomien lukumäärä suhteessa partikkelin kokonaisatomimäärään; (b) Jos nanoihiukkasen varaustiheys  $\rho$  ja ulkoinen sähkökenttä ovat vakioita, miten skaalautuu kappaleeseen vaikuttava sähköstaattinen voima?

(c) Nesteessä väliaineen kitkavoima (*drag force*) on muotoa  $F_d = 6\pi\eta Rv$ , missä  $\eta$  on väliaineen viskositeetti,  $R$  on hiukkasen säde ja  $v$  on hiukkasen hetkellinen nopeus. Dimensiotarkastelulla osoita, että Einsteinin lauseke Brownin liikkeelle

$$D = \frac{k_B T}{6\pi R \mu}.$$

antaa oikean dimension termisen energian  $k_B T$  ja kitkavoiman tekemän työn  $W = F_d \Delta x$  suhteelle.

**Kenties** tarvitsemiasi vakioita:

Boltzmannin vakio  $k_B = 1.381 \times 10^{-23} J/K = 8.617 \times 10^{-5} eV/K$ , alkeisvaraus  $e = 1.602 \times 10^{-19} C$ , tyhjän permittii-  
 visuus  $\epsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12} F/m$ , Planckin vakio  $h = 6.626 \times 10^{-34} Js = 4.136 \times 10^{-15} eVs$ , redusoitu Planckin vakio  
 $\hbar = 1,054 \times 10^{-34} Js$ , Avogadron luku  $N_A = 6.022 \times 10^{23}$ , Yleinen kaasuvakio  $R = 8.315 J/mol \cdot K$ , valon nopeus  
 $c = 2.998 \times 10^8 m/s$ , gravitaatiovakio  $G = 6.673 \times 10^{-11} N \cdot m^2/kg^2$ , elektronin massa  $m_e = 9.109 \times 10^{-31} kg$ , protonin  
 massa  $m_p = 1.673 \times 10^{-27} kg$ .  $1u = 1.66 \times 10^{-27} kg$ . Elektronivoltti:  $1eV = 1.602 \times 10^{-19} J$ .