ΛΥΣΕΙΣ ΘΕΜΑΤΩΝ ΠΡΟΟΔΟΥ, 22/11/06

1) $CH_3 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$

$$\xleftarrow{\quad\quad\quad L \quad\quad\quad}\!\!\rightarrow$$

Έχω $N = 8 \cdot 2 = 16$ ηλεκτρόνια

σε μήκος $L = 7 \cdot 1.5Å = 10.5Å = \frac{10.5Å}{0.529Å} a_B = 19.8\, a_B$

Στάθμες $E_n = \frac{\hbar^2}{m a_B^2} \frac{\pi^2}{2 \cdot (19.8)^2} n^2$

ή $E_n = 27.2\, eV \cdot 0.0126\, n^2 \Rightarrow E_n = 0.343 n^2\, eV$

Βάζω δυο e^- σε κάθε στάθμη αρχίζοντας από τη $n=1$ άρα κατειλημμένες είναι οι 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 και κενές αυτές με $n>8$.

$E_1 = 0.343\, eV$ $E_2 = 1.37\, eV$ $E_3 = 3.08\, eV$ $E_4 = 5.49\, eV$

$E_5 = 8.58\, eV$ $E_6 = 12.3\, eV$ $E_7 = 16.8\, eV$ $E_8 = 22.0\, eV$

$E_9 = 27.8\, eV$ $E_{10} = 34.3\, eV$

E_F είναι η ενέργεια της ανώτατης κατειλημμένης, $E_F = E_8 = 22.0\, eV$.

---

2) Για τον Au, $\Theta_D = 165K$ άρα $0°C$ και $40°C > \Theta_D$

Για $T \gtrsim \Theta_D$, ξέρω ότι $\rho \sim T$ άρα και $R \sim T$. Επομένως

$$100 \frac{R(40°C) - R(0°C)}{R(0°C)} = 100 \frac{(40+273)-(0+273)}{0+273} = \frac{40}{273} \cdot 100 = \underline{\underline{14\%}}$$

3) $V_H = -\frac{RBI}{d} \Rightarrow B = -\frac{dV_H}{RI}$ όπου $R = -\frac{1}{ne}$

$$\Rightarrow B = \frac{d n e V_H}{I}$$

Χρειάζομαι το n. Από τα δεδομένα έχω δομή fcc και $f=1$

άρα $n = \frac{4S}{a^3} = \frac{4}{4.08Å^3} = 5.89 \cdot 10^{28}\, m^{-3}$

$$\Rightarrow \text{στο SI} \quad B = \frac{10^{-4} m \;\; 5.89 \cdot 10^{28} m^{-3} \;\; 1.6 \cdot 10^{-19} C \;\; 10^{-6} V}{1 A}$$

$$\Rightarrow \boxed{B = 0.942\ T}$$

---

4) $$U_i = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon\, \phi(\varepsilon)}{e^{\beta\varepsilon}-1} d\varepsilon + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon\, \phi(\varepsilon)\, d\varepsilon \qquad (1)$$

$$\frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}-1} = \frac{1}{\beta}\frac{\beta\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}-1} \approx \frac{1}{\beta}\left(1 - \frac{\beta\varepsilon}{2} - \frac{\beta^2\varepsilon^2}{6}\right)$$

$$= \frac{1}{\beta} - \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\beta\varepsilon^2}{6}$$

Αντικαθιστώ στην (1)

$$U_i = \frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\varepsilon)d\varepsilon - \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varepsilon\phi(\varepsilon)d\varepsilon - \frac{\beta}{6}\int_{-\infty}^{+\infty}\varepsilon^2\phi(\varepsilon)\,d\varepsilon$$
$$+ \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varepsilon\phi(\varepsilon)d\varepsilon$$

$\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\varepsilon)d\varepsilon =$ συνολικός αριθμός καταστάσεων $= 3N_i$

και $\beta = \frac{1}{k_B T}$

$$\Rightarrow U_i = k_B T\, 3N_i - \frac{1}{6k_B T}\int_{-\infty}^{+\infty}\varepsilon^2\phi(\varepsilon)\,d\varepsilon$$

$$\Rightarrow U_i = 3N_i k_B T - \frac{A}{T}, \quad \text{όπου } A = \frac{1}{6k_B}\int_{-\infty}^{+\infty}\varepsilon^2\phi(\varepsilon)d\varepsilon$$

4) – συνέχεια –

$$C_V = \frac{dU_i}{dT} \Rightarrow C_V = 3N_i k_B + \frac{A}{T^2}$$

(β) $$\phi(\varepsilon) = \begin{cases} a\varepsilon^2 , & 0<\varepsilon<\varepsilon_D \\ 0 , & \text{αλλού} \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\varepsilon) d\varepsilon = 3N_i \Rightarrow a \int_0^{\varepsilon_D} \varepsilon^2 d\varepsilon = 3N_i \Rightarrow a \frac{\varepsilon_D^3}{3} = 3N_i$$

$$\Rightarrow a = \frac{9N_i}{\varepsilon_D^3}$$

$$\Rightarrow \phi(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{9N_i}{\varepsilon_D^3}\varepsilon^2 , & 0<\varepsilon<\varepsilon_D \\ 0 , & \text{αλλού} \end{cases}$$

$$A = \frac{1}{6k_B} \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon^2 \phi(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{6k_B} \int_0^{\varepsilon_D} \varepsilon^2 \frac{9N_i}{\varepsilon_D^3} \varepsilon^2 d\varepsilon$$

$$\Rightarrow A = \frac{3N_i}{2k_B \varepsilon_D^3} \int_0^{\varepsilon_D} \varepsilon^4 d\varepsilon = \frac{3N_i}{2k_B\varepsilon_D^3} \frac{\varepsilon_D^5}{5} = \frac{3N_i \varepsilon_D^2}{10 k_B}$$

Είναι $\varepsilon_D = k_B \Theta_D \Rightarrow A = \frac{3N_i k_B \Theta_D^2}{10}$

(γ) $$C_V = 3N_i k_B + \frac{3N_i k_B \Theta_D^2}{10 T^2} = 3N_i k_B \left(1 + \frac{1}{10}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^2\right)$$

ή $$C_V = C_V^{\kappa\lambda\alpha\sigma} \left(1 + \frac{1}{10}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^2\right)$$

$$\Rightarrow C_V - C_V^{\kappa\lambda\alpha\sigma} = \frac{1}{10}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^2 C_V^{\kappa\lambda\alpha\sigma}$$

$$\Rightarrow \frac{C_V - C_V^{\kappa\lambda\alpha\sigma}}{C_V^{\kappa\lambda\alpha\sigma}} = \frac{1}{10}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^2 \Rightarrow$$

$$\frac{C_V - C_V^{\kappa\lambda\alpha\sigma}}{C_V^{\kappa\lambda\alpha\sigma}} \cdot 100 = 10\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^2$$

Από τα δεδομένα $\Theta_D = 165 K$

$$\Rightarrow \frac{C_V - C_V^{\kappa\lambda\alpha\sigma}}{C_V^{\kappa\lambda\alpha\sigma}} 100 = \underline{\underline{3.03 \%}}$$

5) $\Theta_D = 165\,K$, άρα η θερμοκρασία δωματίου είναι $> \Theta_D$.

Άρα $C_V = 3N_i k_B$ δηλαδή (α) C_V είναι ανεξάρτητο του T

(β) C_V ανάλογο της μάζας

(αφού $M = N_i m_i$ και $C_V \sim N_i$)

Από (α) και τον ορισμό $C_V = \frac{dU}{dT} \Rightarrow \Delta U = C_V \Delta T$

αφού $C_V \sim M$ (έστω $C_V = kM$)

$\Rightarrow \Delta U = kM\Delta T$

έχω: για 1 mol , $M = A$ gr όπου A = ατομικό βάρος

και ~~...~~ $C_V = 3N_A k_B = 3R = 24.9$ J/k

άρα για $\Delta T = 1\,K$

έχω: $\Delta U = 24.9$ J για $M = A$ gr

δίνεται $\Delta U = 0.03$ cal για $M = 1$ gr

$$\Rightarrow A = \frac{0.03\text{ cal}}{24.9\text{ J}} = \frac{0.03 \cdot 4.18\text{ J}}{24.9\text{ J}}$$

$\Rightarrow A = 200$ gr/mol.