

FYSA2042, Statistical Physics B

Vihjeet # 1

7. maaliskuuta 2024

Tehtävä # 1

- (a) Ratkaisun saa melkein suoraan soveltamalla erästä tuttua summakaavaa.
- (b) Tätä kohtaa voi lähestyä kahdella tapaa. Voi tarkastella todennäköisyyttä sille, että systeemi on tilassa, missä on n adsorptoitunutta hiukkasta, ja todennäköisyyttä sille, että systeemin ollessa tilassa, missä on n adsorptoitunutta hiukkasta yksittäinen adsorptiokohta on miehitetty. Haluttu todennäköisyys sille, että yksittäinen kohta on miehitetty saadaan näiden kahden todennäköisyyden tulona. Vaihtoehtoisesti voi tarkastella systeemiä, missä on vain yksi adsorptiokohta, ja käyttää sen suurkanonista partitiofunktioita todennäköisyyden laskemiseen. Jos käytät jälkimmäistä lähestymistapaa, mieti ja perustele miksi näin voidaan tehdä.
- (c) Tämä on selitetty luentomonisteen luvussa 2.

Tehtävä # 2

- (a) Kurssin A-osalla johdettiin ideaalikaasun kanoninen partitiofunktio. Käyttämällä aiemman tehtävän (c)-kohdan ideaa saadaan laskettua ideaalikaasulle myös suurkanoninen partitiofunktio.
- (b) Tarkastele systeemiä, missä kaasu ja adsorptioiva aine vuorovaikuttavat toistensa kanssa. Kaasun molekyylien adsorptiota ja desorptiota tapahtuu jokaisella ajanhetkellä. Mikä ehto pätee kemiallisille potentiaaleille termodynaamisessa tasapainossa?
- (c) Se, kuinka käyrät muuttuisivat selviää johtamalla neljän vakanssin adsorptiokohtaa vastaava isotermi $\theta_4(P)$ ja piirtämällä siitä kuvaaja Langmuir'in isotermin $\theta(P)$ kanssa samaan kuvaan. Voidaan tehdä yksinkertaistava oletus, että kun adsorptiokohdassa on n molekyyliä, sidosenergia on $-n\epsilon$ (eli jokainen yksittäinen molekyyli kontribuoi sidosenergiaan aina saman $-\epsilon$ määrän), ja että molekyylit eivät vuorovaikuta keskenään. Suurkanonisen partitiofunktion voi ratkaista joko tarkastelemalla koko systeemiä, ja käyttämällä tehtävän 1 (a)-kohdassa käytetyn summakaavan yleistystä,

tai tarkastelemalla yksittäisen adsorptiokohdan partitiofunktioita, ja rakentamalla näistä koko systeemin partitiofunktion. Partitiofunktioista saadaan suuri potentiaali Ω , tästä osittaisderivaatalla keskimääräinen hiukkasluku $\langle n \rangle$, ja jakamalla tämä vakanssien määrällä saadaan lopulta $\theta_4(P)$. Pohdi myös, mistä kuvassa näkyvät erot johtuvat.

Tehtävä # 3

Tämä tehtävä on aika suoraviivainen. Tarkoitus on johtaa yhtälö (6), ja tehtävänannossa on jo annettu aika selvät ohjeet kuinka tämä onnistuu.

Tehtävä # 4

Lukekaa artikkeli huolella läpi ja valmistautukaa vastaamaan siihen liittyviin kysymyksiin demoissa. Kirjallisessa palautuksessa kelpaa tiivistelmä artikkelista, jossa on selitetty sen sisältö omin sanoin ja painotettu erityisesti tehtävänannossa mainittuja aiheita.