

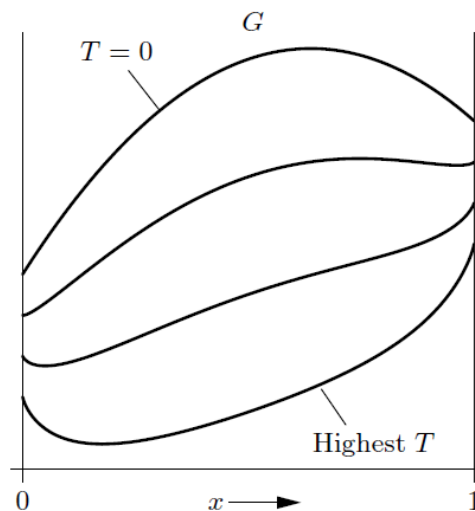
## Dugga 2 i FTF140 Termodynamik och statistisk mekanik för F3

**Tid och plats:** Måndagen den 15 okt. 2018, kl 15.15-17.00, HA1

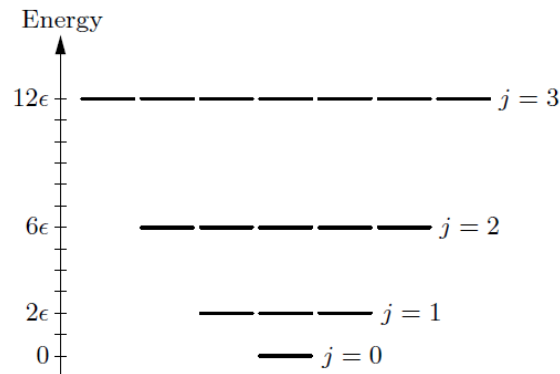
**Hjälpmedel:** Inga. Räknare är ej tillåtet hjälpmedel.

**Bedömning:** Varje uppgift kan ge en halv eller en hel poäng som adderas till tentamensresultatet läsåret 2018/2019.

1. Rita upp ett schematiskt fasdiagram (trycket  $P$  som funktion av temperaturen  $T$ ) för vatten. Läget av de tre olika faserna fast (is), flytande och gas (vattenånga) ska framgå. Du ska också markera läget av trippelpunkten och kritiska punkten. Ange dessutom trycket 1 atm på y-axeln och temperaturerna  $0^\circ\text{C}$  och  $100^\circ\text{C}$  på x-axeln. För vatten gäller att det expanderar när det fryser. Detta påverkar utseendet av fasdiagrammet på ett speciellt sätt. Vilket?
2. Betrakta en vätskeblandning av  $A$  och  $B$  molekyler. Beteckna andelen  $B$  molekyler med  $x$ , dvs  $x = N_B/(N_A+N_B)$ , där  $N_A$  och  $N_B$  är antalet  $A$  respektive  $B$  molekyler i blandningen. Nedanstående figur visar hur Gibbs fria energi för en *homogen* blandning vid 4 olika temperaturer beror av  $x$ . Beskriv i detalj jämviktstillståndet för vätskeblandningen som funktion av  $x$  vid den näst högsta temperaturen. Dvs, ange faser, sammansättning, andelar, etc.



3. Figuren visar energinivåerna för rotation av HD molekylen. För denna molekyl gäller att  $\epsilon/k = 66$  K, där  $k$  är Boltzmanns konstant. Bestäm analytiskt den temperatur då sannolikheten att en HD molekyl befinner sig i den första exciterade energinivån är 2,5 gånger större än att den befinner sig i grundtillståndet. Gör en approximativ numerisk beräkning av denna temperatur.



4. Betrakta en gas av partiklar i den klassiska gränsen. Sannolikhetsfördelningen av partiklarnas fart  $v = |\mathbf{v}|$  ges då av Maxwellfördelningen

$$D(v) \propto 4\pi v^2 \exp(-mv^2/2kT)$$

där  $m$  är partikelns massa,  $k$  Boltzmanns konstant och  $T$  temperaturen. Bestäm utgående från detta uttryck medelvärdet  $v_{rms}$ , där *rms* står för root-mean-square. Ditt uttryck får innehålla dimensionslösa bestämda integraler.

## Liten formelsamling

Allmänt:

$$\begin{aligned} S &= k \ln \Omega \\ dS &= \frac{1}{T} dU + \frac{P}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN \end{aligned}$$

För en idealgas gäller:

$$\begin{aligned} PV &= NkT \quad (Nk = nR, \quad R = N_A k) \\ U &= U(T) \\ C_P(T) - C_V(T) &= Nk \\ PV &= \text{konst. (isoterm process)} \end{aligned}$$

om dessutom temperaturoberoende värmekapacitet

$$\begin{aligned} PV^\gamma &= \text{konst. (isentropisk process)} \\ \gamma &= C_P/C_V \end{aligned}$$

Kanonisk fördelning:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(s) &= \frac{1}{Z} e^{-E(s)/kT} \\ Z &= \sum_s e^{-E(s)/kT} \\ F(T, V, N) &= -kT \ln Z(T, V, N) \\ dF &= -SdT - PdV + \mu dN \end{aligned}$$

Geometrisk summa:

$$\sum_{k=0}^{n-1} aq^k = a \frac{1 - q^n}{1 - q}, \quad q \neq 1$$

# LÖSNINGAR TILL DUGGA 2

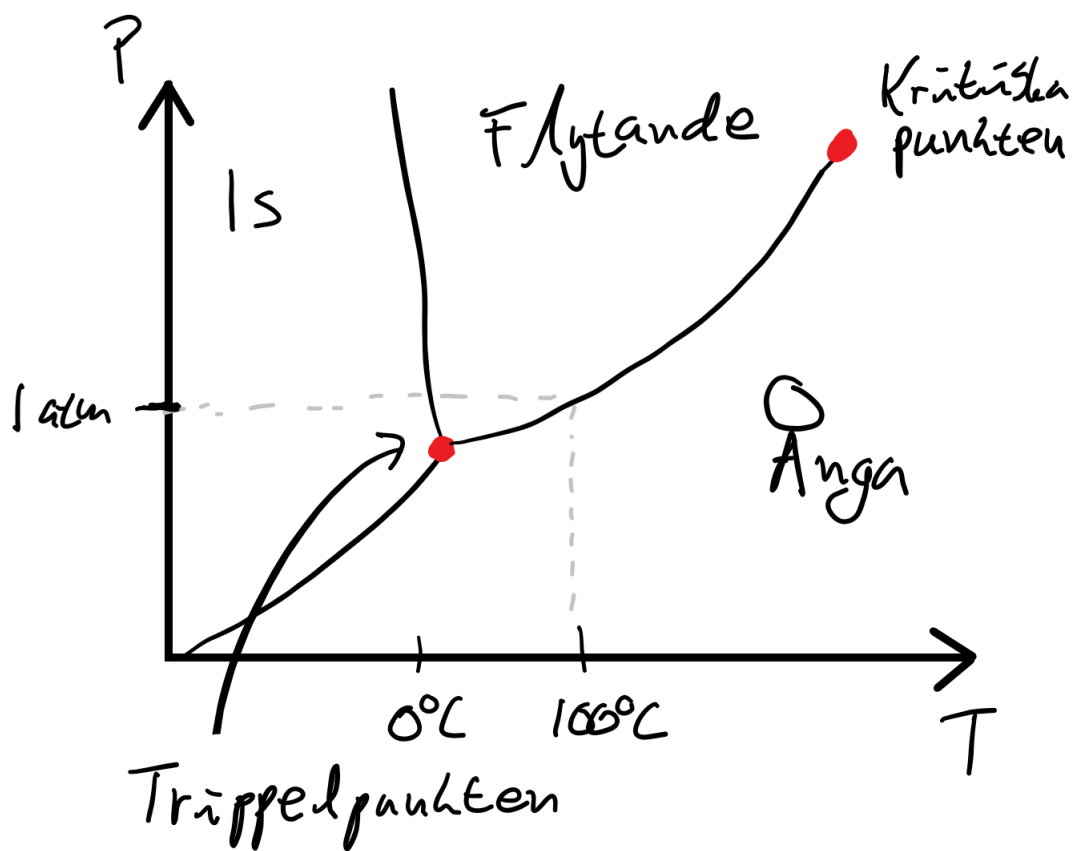
## FTF140 TERMODYNAMIK OCH STATISTISK MEKANIK 2018

Gustav Åvall

2018-10-17

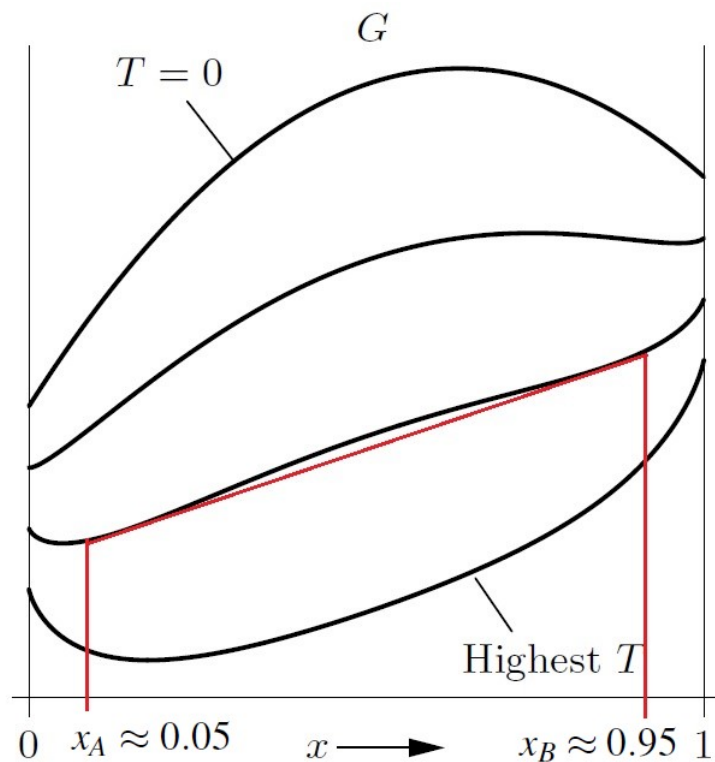
### Uppgift 1

Fasdiagrammet har följande utseende:



Notera att linjen som skiljer is från flytande har negativ lutning då vatten expanderar när det fryser.

## Uppgift 2



Mellan  $x = 0$  och  $x = x_A \approx 0.05$  har vi en homogen blandning med koncentrationen  $x$ . Likaså mellan  $x = x_B \approx 0.95$  och  $x = 1$ . Mellan  $x_A$  och  $x_B$  får vi två homogena vätskefaser som ej blandar sig med varandra då Gibbs fria energi då minimeras (röd linje i figuren). Vi får en A-rik fas med koncentration  $x_A$  och en B-rik fas med koncentration  $x_B$ . Antag att vi från början har koncentration  $x$ . Beteckna andelen A-rik fas med  $y$ , andelen B-rik fas blir då  $1 - y$ . Vi får då sambandet

$$x = yx_A + (1 - y)x_B \implies y = \frac{x - x_B}{x_A - x_B}. \quad (1)$$

## Uppgift 3

Uppgiften söker temperaturen där

$$\frac{P_1}{P_0} = 2.5 = \frac{5}{2}, \quad (2)$$

med sannolikheterna

$$P_0 = \frac{1}{Z}, \quad P_1 = \frac{3e^{-2\varepsilon/k_B T}}{Z}. \quad (3)$$

Detta ger oss

$$\begin{aligned} \frac{P_1}{P_0} &= \frac{3e^{-2\varepsilon/k_B T}/Z}{1/Z} = 3e^{-2\varepsilon/k_B T} = \frac{5}{2} \\ \implies e^{-2\varepsilon/k_B T} &= \frac{5}{6} \implies \frac{2\varepsilon}{k_B T} = \ln \frac{6}{5} \implies T = \frac{2\varepsilon}{k_B \ln \frac{6}{5}}. \end{aligned} \quad (4)$$

Med  $\varepsilon/k_B = 66$  K finner vi

$$T = \frac{132}{\ln \frac{6}{5}}. \quad (5)$$

För att få ett approximativt numeriskt uttryck kan vi utnyttja att (Taylorutveckling)

$$\ln(1+x) \approx x \quad (6)$$

då  $x$  är litet. Detta ger  $\ln(6/5) \approx 1/5$  och

$$T \approx 660 \text{ K} \quad (7)$$

Om man inte kommer ihåg detta så kan man genomföra Taylorutvecklingen

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x-a)^n = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2}(x-a)^2 + \dots \quad (8)$$

Vidare,  $6/5 \approx 1$ , så vi expanderar kring 1:

$$\ln \frac{6}{5} = 0 + 1 \cdot \left(\frac{6}{5} - 1\right) - \dots \approx \frac{1}{5}. \quad (9)$$

## Uppgift 4

Vi skall bestämma  $v_{rms}$ , där *rms* står för root-mean-square:

$$v_{rms} = \sqrt{\langle v^2 \rangle}, \quad (10)$$

där Maxwellfördelningen ges av

$$D(v) \propto 4\pi v^2 e^{-mv^2/2k_B T}. \quad (11)$$

Vi får då

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\int_0^{\infty} v^2 4\pi v^2 e^{-mv^2/2k_B T} dv}{\int_0^{\infty} 4\pi v^2 e^{-mv^2/2k_B T} dv} \quad (12)$$

Utför variabelsubstitutionen  $x = \sqrt{m/2k_B T} v$ :

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\frac{2k_B T}{m} \int_0^{\infty} x^4 e^{-x^2} dx}{\int_0^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx}, \quad (13)$$

vilket ger oss

$$v_{rms} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \sqrt{\frac{I_4}{I_2}}, \quad (14)$$

där

$$I_n = \int_0^{\infty} x^n e^{-x^2} dx \quad (15)$$