Chalmers, Institutionen för Fysik
Göran Wahnström

Dugga 2 i FTF140 Termodynamik och statistisk mekanik för F3

Tid och plats: Måndagen den 14 okt. 2019, 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 2019/2020.

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:

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

om dessutom temperaturoberoende värmekapacitet

$$\begin{aligned} U &= \frac{f}{2} NkT \ (f \text{ antal frihetsgrader}) \\ PV^\gamma &= \text{konst. (isentropisk process)} \\ \gamma &= C_P/C_V \end{aligned}$$

Kanonisk fördelning:

$$\begin{aligned} P_s &= \frac{1}{Z} e^{-\beta E_s} \\ Z &= \sum_s e^{-\beta E_s} \\ \bar{E} &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \end{aligned}$$

Samband:

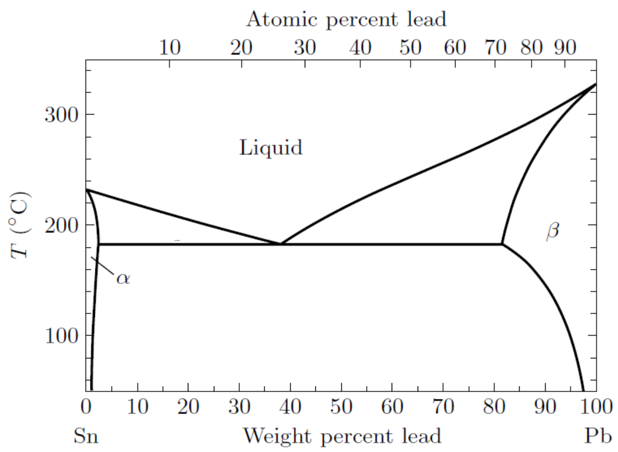
$$\begin{aligned} nR &= Nk \\ R &= N_A k \\ \beta &= 1/kT \end{aligned}$$

Geometrisk summa:

$$\sum_{k=m}^{n} a^k = \frac{a^m - a^{n+1}}{1-a} \ , \quad a \neq 1$$

1. För ett helt isolerat system gäller att alla spontana processer är sådana att *entropin ökar och vid jämvikt gäller att entropin är maximal.* Betrakta nu ett system med konstant volym och partikelantal men i termisk kontakt med en värmereservoar. Vilken motsvarande regel gäller för spontana processer och vid jämvikt för detta system? Inga härledningar behövs.

2. Nedanstående figur visar fasdiagrammet för en blandning av tenn (Sn) och bly (Pb) som funktion av temperatur och blandningsförhållande. Betrakta en blandning med 80 atomprocent bly (lead). Ange antal faser, om det är fasta eller flytande faser samt fasernas approximativa sammansättning vid temperaturen a) 120 °C, b) 200 °C och c) 320 °C. Du får anta att blandningen är i termodynamisk jämvikt vid varje temperatur.



3. För en partikel i en harmonisk potential ges energinivåerna av uttrycket
$$E_n = (\frac{1}{2} + n)\hbar\omega \ , \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$
Antag att partikel är i kontakt med ett värmebad vid temperaturen T. Bestäm medelenergin för partikeln som funktion av temperaturen.

4. De tre lägsta energinivåerna för ett visst system har värdena 0.00 eV, 0.01 eV och 0.03 eV. Då systemet befinner sig i termisk jämvikt vid temperaturen T K har följande sannolikheter P_n uppmätts

n	E_n	g_n	P_n
1	0.00	1	0.40
2	0.01	4	0.20
3	0.03	?	0.10

där g_n är degenerationsgraden för respektive energinivå. Bestäm g_3.

Lösningar till dugga 2, 2019–10–14

FTF140 Termodynamik och statistisk mekanik

Jonatan Wårdh och Magnus Rahm 2019–10–14

Uppgift 1

För ett system med konstant volym och partikelantal i termisk kontakt med ett värmebad gäller att Helmholtz fria energi , $F = U - TS$, minimeras vid alla spontanta processer

$\boxed{F = U - TS}$

Uppgift 2

(a) Vid 120°C befinner vi oss i tvåfasområdet mellan de fasta faserna α och β. Vi kommer alltså få fasseparation i $\boxed{\text{två fasta faser}}$. Deras sammansättning läses av som värdet på x-axeln vid fasgränsen. Vi ser att $\boxed{\alpha\text{-fasen innehåller ca 1 atom-\% Pb}}$ medan $\boxed{\beta\text{-fasen innehåller ca 90 atom-\% Pb}}$.

(b) Vid 200°C befinner vi oss i enfasområdet för β. Då sker ingen fasseparation och vi kommer alltså ha $\boxed{\text{en fast fas}}$ som innehåller exakt $\boxed{\text{80 atom-\% Pb}}$.

(c) Vid 320°C befinner vi oss också i ett enfasområde, nämligen det för vätska. Vi kommer alltså ha $\boxed{\text{en flytande fas}}$ som innehåller exakt $\boxed{\text{80 atom-\% Pb}}$.

Uppgift 3

För en partikel i en harmonisk potential har vi energinivåerna

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2...$$

Partikeln är i kontakt med ett värmebad och vi använder oss då av den kanoniska fördelningen med partitionsfunktion

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}, \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

där k är Boltzmanns constant. Partitionsfunktionen för den harmoniska oscillatorn ges av

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(1/2+n)} = e^{-\beta\hbar\omega/2}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} = e^{-\beta\hbar\omega/2}\frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

Här har vi använt formeln för en oändlig geometrisk serie vilken är konvergent ty $|e^{-\beta\hbar\omega}| < 1$. Medelenergin, som är den efterfrågade storheten, ges av $\overline{E} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z$.

$$\overline{E} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-\frac{\beta\hbar\omega}{2} - \ln(1-e^{-\beta\hbar\omega})\right) = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right)$$

Vilket vi kan förenkla till

$$\boxed{\overline{E} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = \frac{\hbar\omega}{2}\frac{1+e^{-\hbar\omega\beta}}{1-e^{-\hbar\omega\beta}} = \frac{\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)}$$

Uppgift 4

Vi har ett system i termisk jämvikt vid temperatur T och för de tre lägsta tillstånden har vi följande:

n	E_n	g_n	P_n
1	0.00	1	0.40
2	0.01	4	0.20
3	0.03	?	0.10

Uppgiften är att bestämma degenerationsgraden av den tredje energinivån. Vi vet att sannolikheterna för varje tillstånd ges av

$$P_n = \frac{g_n e^{-\beta E_n}}{Z}$$

För att lösa ut Z så studerar vi kvoter mellan sannolikheter. Vi kan lösa ut β från de första två tillstånden

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{4e^{-\beta\cdot 0.01\text{eV}}}{1} = \frac{0.2}{0.4} \Rightarrow e^{-\beta\cdot 0.01\text{eV}} = \frac{1}{8}$$

Om vi istället studerar kvoten mellan tredje och första

$$\frac{P_3}{P_1} = \frac{g_3 e^{-\beta\cdot 0.03\text{eV}}}{1} = \frac{0.1}{0.4} \Rightarrow g_n = \frac{1}{4e^{-\beta\cdot 0.03\text{eV}}}$$

där $e^{-\beta\cdot 0.03\text{eV}} = (e^{-\beta\cdot 0.01\text{eV}})^3 = \frac{1}{8^3}$. Den okänka degenerationsgraden ges därför av

$$\boxed{g_3 = \frac{8^3}{4} = 128}$$

vilket är ett heltal, vilket det bör vara.