

Tentamen i FTF140 Termodynamik och statistisk mekanik för F3

Tid och plats: Torsdag 26 okt 2017, kl 08.30-13.30 i "Maskin"-salar.

Hjälpmedel: Physics Handbook, BETA, ett A4-blad (2 sidor) med egna anteckningar, Chalmersgodkänd räknare.

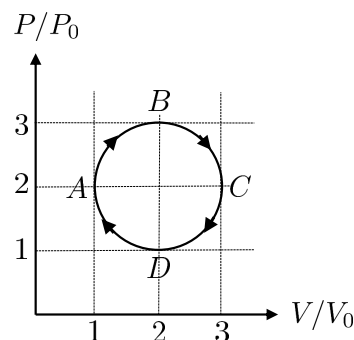
Jourhavande lärare: Göran Wahnström, tel. 772-3634, 076-1010523.

Bedömning: Varje uppgift ger maximalt 10 poäng. Till detta adderas eventuella duggapoäng. För godkänt krävs 20 poäng (4:a minst 30 poäng, 5:a minst 40 poäng).

Lösningar: Anslås på kurshemsidan.

Rättningsgranskning: Torsdag 9 nov 2017, kl 12.30-13.30 i rum O7112B, översta våningen i Origohuset, norra flygeln.

1. Betrakta en behållare med 1 mol av en enatomig idealgas. Gasen genomgår en kvastatistisk cyklisk process som beskriver en cirkel som genomlöps medurs i ett diagram med trycket P som funktion av volymen V (se figuren, där $P_0 = 0.1$ MPa och $V_0 = 1$ dm³). (a) Bestäm nettoarbetet som gasen utför då den genomlöper ett varv! Hur mycket värme tillförs? (b) Hur mycket arbete utträttas i delprocessen $A \rightarrow C$ (via B)? Vad blir motsvarande tillfört värme?



2. Vid mitten av 1800-talet studerade och mätte den brittiske fysikern James Prescott Joule värmeutveckling i olika processer. Tillsammans med andra studier ledde detta fram till läran om energins oförstörbarhet, det vi nu kallar termodynamikens första huvudsats. Bland annat studerade han fri expansion av en gas.

Betrakta en gas innesluten i en behållare med volymen $2V_0$. Behållaren är helt värmeisolerad från omgivningen. Gasen upptar från början enbart halva volymen av behållaren, $V = V_0$. I den andra halvan är det vakuum. Gasen har trycket P_0 och temperaturen T_0 . Man låter därefter gasen fritt expandera ut till fulla volymen, $V = 2V_0$. Expansionen är fri och inget arbete tas ut under denna process. Antag att gasen följer van der Waals tillståndsekvation

$$\left(P + \frac{aN^2}{V^2}\right)(V - Nb) = NkT$$

där N är antalet gaspartiklar och a och b två konstanter. Gasens värmekapacitet C_V får antas ha ett konstant värde. (a) Härled ett uttryck för gasens temperaturändring! Ökar, minskar eller är temperaturen oförändrad? Ge en *kvalitativ* fysikalisk förklaring till ditt

resultat! Till din hjälp finns ett antal termodynamiska relationer bifogade i slutet av tesen.

(b) Bestäm nu temperaturändringen numeriskt om behållaren innehåller kvävgas med begynnelsestrycket $P_0 = 1.6$ MPa och begynnelse-temperaturen $T_0 = 300$ K! Detta motsvarar begynnelse-tätheten $n_0 = N/V_0 = 3.9 \cdot 10^{26}$ molekyler/m³. Du kan anta att värmekapaciteten ges av uttrycket $C_V = fNk/2$, där f är antalet frihetsgrader. För kvävgas gäller att $a = 2.4$ eVÅ³ och $b = 65$ Å³.

3. Tillståndssumman för en viss icke-ideal gas är

$$Z(N, V, T) = \frac{1}{N!} (V - Nb)^N \left(\frac{2\pi kT}{h^2} \right)^{3N/2} \exp \left(\frac{aN^2}{VkT^2} \right),$$

där a och b är konstanter. Bestäm gasens värmekapacitet vid konstant volym!

4. Ett system består av två harmoniska oscillatorer, en med vinkelfrekvensen ω och en med vinkelfrekvensen 2ω . Systemets grundtillståndsen-
ergi är därför $(3/2)\hbar\omega$. Antag att systemet är i kontakt med en värmereservoar med temperaturen T . (a) Vad är då sannolikheten att systemets energi är större än $3\hbar\omega$? (b) Bestäm denna sannolikhet numeriskt om temperaturen är lika med $T = \hbar\omega/k$, där k är Boltzmanns konstant!
5. Ledningselektronerna i en metall kan approximativt behandlas som ett system av icke-växelverkande fermioner, en Fermigas. I frielektronmodellen gäller att tillståndstätheten för ledningselektronerna $g(\epsilon)$ är proportionell mot $\sqrt{\epsilon}$, där ϵ är elektronens kinetiska energi. För en viss metall, där den explicita växelverkan mellan ledningselektronerna och metalljonerna inte kan försummas, gäller istället att tillståndstätheten ges av uttrycket

$$g(\epsilon) = \begin{cases} 0 & \epsilon < 0 \\ A \sin(\pi\epsilon/\epsilon_0) & 0 < \epsilon < \epsilon_0 \\ 0 & \epsilon_0 < \epsilon \end{cases}$$

där A och ϵ_0 är två konstanter. (a) Beräkna Fermienergin ϵ_F om antalet ledningselektroner är $N = (3/2\pi)A\epsilon_0$! (b) Studera nu systemet vid en ändlig temperatur T . Vad gäller då *kvalitativt* för kemiska potentialens temperaturberoende (ökar, minskar eller förblir oförändrad vid ökande temperatur)? Du får anta att $kT \ll \epsilon_F$. Motivera ditt svar väl!

Termodynamiska relationer

Inom termodynamiken kan en mängd olika exakta relationer mellan olika termodynamiska storheter härledas. För system som kan beskrivas med två tillståndsvariabler och där tryck-volym arbete är det enda relevanta arbetet gäller att

$$\begin{aligned}dU &= C_V dT + \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV \\ &= C_V dT + \left[\frac{T\beta}{\kappa_T} - P \right] dV \\ dS &= \frac{C_V}{T} dT + \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V dV \\ &= \frac{C_V}{T} dT + \frac{\beta}{\kappa_T} dV\end{aligned}$$

och

$$\begin{aligned}dH &= C_P dT + \left[V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \right] dP \\ &= C_P dT + [V - TV\beta] dP \\ dS &= \frac{C_P}{T} dT - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP \\ &= \frac{C_P}{T} dT - V\beta dP\end{aligned}$$

Notera att vi här har uttryckt ändringen i energin U , entalpin H samt entropin S i mätbara storheter. Denna typ av relationer utnyttjas då man experimentellt önskar bestämma värden för dessa tillståndsfunktioner. Vidare gäller att

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial C_V}{\partial V} \right)_T &= T \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_V \\ \left(\frac{\partial C_P}{\partial P} \right)_T &= -T \left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2} \right)_P\end{aligned}$$

och

$$\begin{aligned}C_P - C_V &= T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \\ &= \frac{TV\beta^2}{\kappa_T}\end{aligned}$$

Denna relation är användbar då man önskar bestämma C_V eftersom C_P , β och κ_T är enklare att experimentellt bestämma.

LÖSNINGAR TILL TENTAN I

FTF140 TERMODYNAMIK OCH STATISTISK MEKANIK 2017

Martin Eriksson, Gustav Åvall

2017-10-26

Uppgift 1

För en cyklisk process gäller att arbetet ges av den inneslutna arean i ett P-V diagram. Om processen genomlöps medurs gäller att det *uträttade* arbetet W_{ut} är lika med den inneslutna arean. I detta fall gäller att arean av de små kvadraterna är lika med $P_0V_0 = 0.1 \text{ MPa} \cdot 1 \text{ dm}^3 = 100 \text{ J}$.

(a) Nettoarbetet ges av den inneslutna arean som här är en cirkel:

$$W_{\text{ut}} = \pi P_0 V_0 = 314 \text{ J} = 0.31 \text{ kJ} \quad (1)$$

Första huvudsatsen (energikonservering) ger att

$$\Delta U = Q_{\text{in}} - W_{\text{ut}} . \quad (2)$$

där Q_{in} är *tillfört* värme. Eftersom cykeln är sluten så kommer energin vara oförändrad, $\Delta U = 0$, och

$$Q_{\text{in}} = W_{\text{ut}} = 0.31 \text{ kJ} . \quad (3)$$

(b) För processen A→B→C ges arbetet av arean under kurvan, dvs

$$W_{\text{ut}} = (\pi/2 + 4) P_0 V_0 = 557 \text{ J} = 0.56 \text{ kJ} \quad (4)$$

För denna process gäller inte att energin är oförändrad. Vi har för en enatomig idealgas att $U = (3/2)NkT$. Med ideala gaslagen $PV = NkT$ fås då att

$$U = \frac{3}{2}PV \quad (5)$$

Förändringen i energi blir därmed:

$$\Delta U = U_C - U_A = \frac{3}{2}2P_03V_0 - \frac{3}{2}2P_0V_0 = 6P_0V_0, \quad (6)$$

och med hjälp av första huvudsatsen

$$Q_{\text{in}} = \Delta U + W_{\text{ut}} = (6 + \pi/2 + 4) P_0 V_0 = 1157 \text{ J} = 1.2 \text{ kJ}. \quad (7)$$

Uppgift 2

Behållaren är värmeisolerad och inget arbete utförs. Enligt termodynamikens första huvudsats gäller då att energin U är konserverad. Därför använder vi oss av den givna relationen

$$dU = C_V dT + \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV. \quad (8)$$

(a) Från van der Waals tillståndsekvation får vi ett uttryck för trycket:

$$P = \frac{NkT}{V - Nb} - \frac{aN^2}{V^2}, \quad (9)$$

detta ger oss

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{Nk}{V - Nb}, \quad (10)$$

vilket leder till

$$dU = C_V dT + \frac{aN^2}{V^2} dV. \quad (11)$$

Ändringen i inre energi skall vara noll, därför har vi att $C_V dT = -aN^2 dV/V^2$, där det är givet att C_V är konstant. Beteckna temperaturändringen med ΔT och integrera mellan samma begynnelse- och sluttillstånd som för den verkliga processen:

$$\int_{T_0}^{T_0 + \Delta T} C_V dT = - \int_{V_0}^{2V_0} \frac{aN^2}{V^2} dV \implies C_V \Delta T = - \frac{aN^2}{2V_0}. \quad (12)$$

Relationen som söks är alltså

$$\Delta T = - \frac{aN^2}{2C_V V_0}. \quad (13)$$

Vi ser här att temperaturändringen är negativ (antag $a > 0$), gasens temperatur minskar då den expanderar. Detta kan förklaras på följande vis: Systemets inre energi är oförändrad, alltså är summan av gasens potentiella och kinetiska energi konstant. Då systemet expanderar så ökar medelavståndet mellan partiklarna, om kraften mellan partiklarna antas vara attraktiv (positivt värde på a) så ökar då systemets potentiella energi. Således måste gasens kinetiska energi minska, vilket leder till att gasens temperatur minskar.

(b) Kvävgas har 3 translationsfrihetsgrader och 2 rotationsfrihetsgrader vid dessa temperaturer, alltså är $f = 5$. Vi har då $C_V = 5Nk/2$ och

$$\Delta T = - \frac{aN}{5kV_0} = - \frac{an_0}{5k} = -2.2 \text{ K}. \quad (14)$$

Uppgift 3

Tillståndssumman är given

$$Z = \frac{1}{N!} (V - Nb)^N \left(\frac{2\pi kT}{h^2} \right)^{3N/2} \exp\left(-\frac{aN^2}{VkT^2} \right). \quad (15)$$

Energien ges av

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z \quad (16)$$

där $\beta = (kT)^{-1}$. Vi har att

$$\ln Z = \ln \left[\frac{1}{N!} (V - Nb)^N \right] + \frac{3N}{2} \ln \frac{2\pi k}{h^2} + \frac{3N}{2} \ln T + \frac{aN^2}{VkT^2} \quad (17)$$

vilket leder till energin

$$U = kT^2 \left[\frac{3N}{2} \frac{1}{T} - \frac{2aN^2}{VkT^3} \right] = \frac{3NkT}{2} - \frac{2aN^2}{VT} \quad (18)$$

Värmekapaciteten ges av

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{3Nk}{2} + \frac{2aN^2}{VT^2}. \quad (19)$$

Första termen känner vi igen som värmekapaciteten för en gas med 3 frihetsgrader, alltså en enatomig gas, medan andra termen är en korrektion till idealfallet.

Uppgift 4

Systemet består av två harmoniska oscillatorer, en med vinkelfrekvens $\omega_1 = \omega$ och en med vinkelfrekvens $\omega_2 = 2\omega$. Systemets totala energi är summan av de två oscillatorernas energier

$$E(n_1, n_2) = \hbar\omega_1(n_1 + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_2(n_2 + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(n_1 + 2n_2 + \frac{3}{2}), \quad (20)$$

där $n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots$. I systemets grundtillstånd $n_1 = n_2 = 0$ har vi således energin $E = 3\hbar\omega/2$. För att beräkna sannolikheter behöver vi tillståndssumman Z . Med $\beta = (kT)^{-1}$ fås

$$Z = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} e^{-\beta E(n_1, n_2)} = e^{-3\beta\hbar\omega/2} \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n_1} \sum_{n_2=0}^{\infty} e^{-2\beta\hbar\omega n_2}. \quad (21)$$

Detta är två geometriska summor. Genom att utföra summeringarna kan nu tillståndssumman beräknas till

$$Z = q^{3/2} \sum_{n_1=0}^{\infty} q^{n_1} \sum_{n_2=0}^{\infty} q^{2n_2} = \frac{q^{3/2}}{(1-q)(1-q^2)}, \quad (22)$$

där vi har infört beteckningen

$$q \equiv e^{-\beta\hbar\omega}. \quad (23)$$

(a) Vi vill beräkna sannolikheten

$$P(E(n_1, n_2) > 3\hbar\omega) = 1 - P(E(n_1, n_2) \leq 3\hbar\omega). \quad (24)$$

Vi bestämmer nu de värden på n_1 och n_2 som uppfyller $E(n_1, n_2) \leq 3\hbar\omega$

$$\hbar\omega(\frac{3}{2} + n_1 + 2n_2) \leq 3\hbar\omega \implies n_1 + 2n_2 \leq \frac{3}{2}. \quad (25)$$

Vi ser här att $n_2 \geq 1$ går aldrig, alltså måste $n_2 = 0$ för att uppfylla villkoret. Då har vi $n_1 \leq 3/2$. Så de tillstånd som uppfyller villkoret är $n_1 = n_2 = 0$ och då $n_1 = 1, n_2 = 0$ vilket ger oss

$$P(E \leq 3\hbar\omega) = P(n_1 = 0, n_2 = 0) + P(n_1 = 1, n_2 = 0), \quad (26)$$

där

$$P(n_1 = 0, n_2 = 0) = \frac{q^{3/2}}{Z} \quad \text{och} \quad P(n_1 = 1, n_2 = 0) = \frac{q^{5/2}}{Z}. \quad (27)$$

Vi får då att

$$P(E > 3\hbar\omega) = 1 - \frac{q^{3/2} + q^{5/2}}{Z} = 1 - (1+q)(1-q)(1-q^2) = 2q^2 - q^4 \quad (28)$$

dvs

$$P(E > 3\hbar\omega) = 2e^{-2\hbar\omega/kT} - e^{-4\hbar\omega/kT} \quad (29)$$

(b) Med $T = \hbar\omega/k$ fås att $q = e^{-1} = 0.3679 \implies P(E > 3\hbar\omega) = 0.2524$, dvs ca 25%.

Uppgift 5

Antalet elektroner ges av uttrycket

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) d\varepsilon \bar{n}_{\text{FD}}(\varepsilon) \quad (30)$$

där $\bar{n}_{\text{FD}}(\varepsilon)$ är Fermi-Dirac fördelningen och där tillståndstätheten $g(\varepsilon)$ i detta fall ges av

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} 0 & \varepsilon < 0 \\ A \sin(\pi\varepsilon/\varepsilon_0) & 0 < \varepsilon < \varepsilon_0 \\ 0 & \varepsilon_0 < \varepsilon \end{cases} \quad (31)$$

(a) Vi ska studera ett system med $N = (3/2\pi)A\varepsilon_0$ elektroner och bestämma Fermienergin ε_{F} . Totala antalet tillstånd är

$$N_{\text{tot}} = \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) d\varepsilon = A \int_0^{\varepsilon_0} \sin(\pi\varepsilon/\varepsilon_0) d\varepsilon = (2/\pi)A\varepsilon_0 \quad (32)$$

dvs fler än antalet elektroner. Det betyder att $0 < \varepsilon_{\text{F}} < \varepsilon_0$. Vi har relationen

$$N = \int_0^{\varepsilon_{\text{F}}} g(\varepsilon) d\varepsilon = A \frac{\varepsilon_0}{\pi} \left[1 - \cos\left(\frac{\pi}{\varepsilon_0} \varepsilon_{\text{F}}\right) \right] \quad (33)$$

Med $N = (3/2\pi)A\varepsilon_0$ fås

$$\frac{3}{2} = \left[1 - \cos\left(\frac{\pi}{\varepsilon_0} \varepsilon_{\text{F}}\right) \right] \implies \cos\left(\frac{\pi}{\varepsilon_0} \varepsilon_{\text{F}}\right) = -\frac{1}{2} \implies \left(\frac{\pi}{\varepsilon_0} \varepsilon_{\text{F}}\right) = \frac{2}{3}\pi \quad (34)$$

då $0 < \varepsilon_{\text{F}} < \varepsilon_0$. Det betyder att

$$\varepsilon_{\text{F}} = \frac{2}{3}\varepsilon_0 \quad (35)$$

(b) Vid temperatur $T = 0$ så är kemiska potentialen $\mu(T = 0) = \varepsilon_{\text{F}}$. Vid en ändlig temperatur bestäms värdet av $\mu(T)$ av att antalet elektroner ska vara konserverat. Fermi-Dirac fördelningen är symmetrisk kring $\varepsilon = \mu$, dvs andelen obesatta tillstånd för $\varepsilon = \mu - \Delta\varepsilon$ är lika med andelen besatta för $\varepsilon = \mu + \Delta\varepsilon$. I detta fall avtar $g(\varepsilon)$ vid $\varepsilon = \mu$ ($kT \ll \varepsilon_{\text{F}}$) vilket gör att μ måste öka då T ökar för att antalet elektroner ska bevaras.