

Øving 7

**Oppgave 1. Oppvarming**

a) Argon er en enatomig gass (dvs enkeltatomer) med atomdiameter ca 0.38 nm. Hvor stor andel av tilgjengelig volum okkuperer da argonatomene ved romtemperatur (300 K) og trykk  $10^{-3}$  Pa (et ikke unormalt trykk i et elektronmikroskop, og blant folk som driver med overflatefysikk)? (Det oppgis at kuler har volum  $4\pi r^3/3$ .)

- A)  $7 \cdot 10^{-6}$                       B)  $3 \cdot 10^{-6}$   
 C)  $7 \cdot 10^{-12}$                       D)  $3 \cdot 10^{-12}$

b) Argon har atomnummer 18, og i tillegg til de 18 protonene er det 22 nøytroner i atomkjernen. (Den mest vanlige isotopen, som utgjør ca 99.6%.) Hva blir da (omtrent) midlere partikkelhastighet  $\langle v \rangle$  i en argongass ved termodynamiske betingelser som i oppgave a?

- A) 4 m/s                      B) 400 m/s                      C) 40000 m/s                      D) 4000000 m/s

c) Hydrogenmolekylet,  $H_2$ , har mulige ("tillatte") rotasjonsenergier

$$K_{\text{rot}}^{(l)} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I_0} \quad , \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Her er  $\hbar = h/2\pi \simeq 1.05 \cdot 10^{-34}$  Js ( $h$  = Plancks konstant), og  $I_0 = md^2/2$  er molekylets treghetsmoment med hensyn på akser som står normalt på molekylets sylinder-symmetriakse, og som passerer gjennom molekylets massesenter. For hydrogenmolekylet er  $\hbar^2/I_0 \simeq 15$  meV. Det oppgis dessuten at  $k_B \simeq 0.086$  meV/K. La  $\pi_l$  være sannsynligheten for at et gitt molekyl er i "rotasjonstilstand"  $l$ , med rotasjonsenergi  $K_{\text{rot}}^{(l)}$ . Hva er da forholdet  $\pi_1/\pi_0$  ved temperatur 77 K (flytende nitrogen)?

- A) ca 1.8                      B) ca 0.1                      C) ca 0.0001                      D) ca  $10^{-9}$

**Oppgave 2. Mer oppvarming**

En kasserolle med 1.0 L vann skal varmes opp fra 20°C til 100°C ved ulike prosesser. Varmekapasiteten til vann er  $c_p = 1.0$  cal/(g K) = 4.184 kJ/kg K. Du kan se bort fra varmekapasiteten til kasserollen.

a) Kasserollen plasseres på en varmeplate (varmereservoar) som holdes konstant på 100°C, og det hele kommer til likevekt.

i) Beregn entropiendringen til omgivelsene (varmeplata). (Ett av disse er riktig: -1.23 kJ/K; -0.90 kJ/K; +0.90 kJ/K.)

ii) Beregn entropiendringen i vannet. (Ett av disse er riktig: 1.01 kJ/K; 0.90 kJ/K; 0.11 kJ/K.)

iii) Beregn total entropiendring. (Ett av disse er riktig: 1.01 kJ/K; 0.90 kJ/K; 0.11 kJ/K.)

b) Oppvarmingen gjøres nå i to trinn: Først plasseres kasserollen på en varmeplate som holder  $50^{\circ}\text{C}$ , og vannet når denne temperaturen. Deretter plasseres kasserollen på plata som holder  $100^{\circ}\text{C}$ , og likevekt oppnås der. Beregn entropiendringer, som under punktene i), ii) og iii) ovenfor, for den totale prosessen. (På iii) er ett av disse riktig:  $110 \text{ J/K}$ ;  $60 \text{ J/K}$ ;  $0 \text{ J/K}$ .)

c) Oppvarmingen gjøres nå i uendelig mange infinitesimale trinn: Kasserollen plasseres på varmeplater som er trinnvis varmere, f.eks  $20^{\circ}\text{C}$ ,  $20.1^{\circ}\text{C}$ ,  $20.2^{\circ}\text{C}$  osv til  $100^{\circ}\text{C}$ , med stadig finere oppdeling.

Forklar hvorfor dette er en reversibel prosess.

Beregn også her, som under punktene i), ii) og iii) ovenfor, entropiendringer for den totale prosessen. (På ii) er ett av disse riktig:  $1.01 \text{ kJ/K}$ ;  $0.90 \text{ kJ/K}$ ;  $0.11 \text{ kJ/K}$ .)

### Oppgave 3. Loppebefengte hunder og irreversibilitet

I kapittel 4.8 i boka (PCH) er loppebefengte hunder brukt for å illustrere det såkalte irreversibilitetsparadokset, dvs at fysikken på mikroskopisk nivå er tidsinvariant, mens på makronivå har tida en bestemt retning. I denne oppgaven skal du lage et program som reproduserer resultatene i kapittel 4.8, dvs et program som simulerer tidsutviklingen av loppeantallet på to hunder. Forutsetningene er som følger: Når hundene møtes, er det  $N$  lopper på hund A og ingen på hund B. Med jevne mellomrom, f.eks hvert sekund, hopper *en* tilfeldig valgt loppe fra den ene hunden til den andre. Skriv programmet slik at du kan plote tidsutviklingen  $N_A(t)$  av antall lopper på hund A [og/eller antall lopper på hund B,  $N_B(t) = N - N_A(t)$ ]. Illustrer den kvalitative forskjellen på tidsutviklingen av loppefordelingen mellom de to hundene når antall lopper er lite og når det er stort. I boka er det valgt hhv  $N = 6$  og  $N = 20000$ . Prøv gjerne flere verdier av  $N$ . Sammenlign med det analytiske resultatet

$$N_A(t) = \frac{N}{2} (1 + e^{-2ct})$$

som framkommer ved å anta et essensielt kontinuerlig loppeantall, og at "hopperaten" *fra* en gitt hund er proporsjonal med hvor mange lopper som befinner seg på denne hunden (se boka). Hvorfor er  $c = 1/N$  et fornuftig valg dersom tidssteget  $\Delta t$  settes lik 1?

Bruk ditt numeriske favorittverktøy. Her er et par MATLAB-tips:

- Funksjonen `randi` genererer tilfeldige heltall. Med

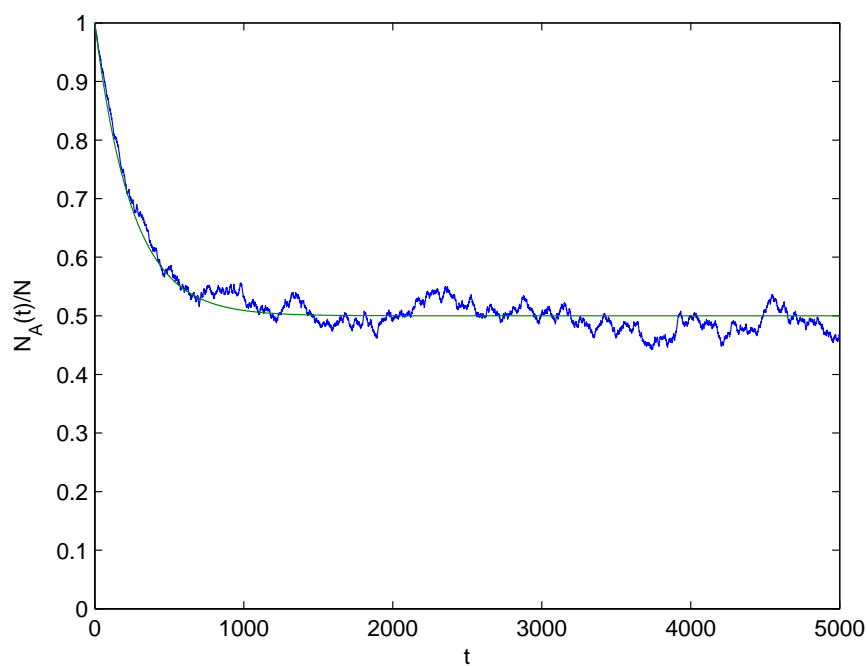
```
hopper = randi([1,N],[NT,1]);
```

genereres en tabell med NT tilfeldige heltall med verdi mellom 1 og N.

- Hvis vi lar `loppested=1` tilsvare at en gitt loppe befinner seg på hund A, og `loppested=0` at den befinner seg på hund B, vil følgende linjer teste om loppen som skal hoppe i tidssteg nummer i er på hund A, samt endre sted til hund B og oppdatere antall lopper på hver av de to hundene dersom så er tilfelle:

```
if loppested(hopper(i)) == 1
    loppested(hopper(i)) = 0;
    NB(i)=NB(i-1)+1;
    NA(i)=NA(i-1)-1;
else
    ...
```

- Med et middels stort antall lopper bør du ende opp med noe a la dette:



#### Oppgave 4. Spontane reaksjoner eller ei?

Finn ut om de kjemiske reaksjonene nedenfor vil forløpe spontant (fra venstre mot høyre) ved normale betingelser (25 °C og 1 atm). Bruk *SI Chemical Data* (Aylward og Findlay), Wikipedia eller nettstedet [webbook.nist.gov](http://webbook.nist.gov) (*National Institute of Standards and Technology*) til å bestemme Gibbs fri energi til reaktanter og produkter. ( $G = H - TS$ )

