UNIVERSITETET I OSLO

Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Eksamen i:	Fys2160
Oppgavesettet er på:	4 sider
Vedlegg:	ingen
Tilatte hjelpemidler	Elektronisk kalkulator, godkjent for videregående skole Rottman: Matematisk formelsamling Øgrim og Lian: Fysiske størrelser og enheter To A4 ark med notater (arkene kan beskrives på begge sider)

Kontroller at oppgavesettet er komplett før du begynner å besvare oppgavene.

Du må i oppgavene begrunne dine svar.

Oppgave 1

Vi skal i denne oppgaven studere overflatevekst av atomer av en bestemt type. Vi ser på et system med temperatur T, volum V og kjemisk potensial μ for atomene. Når det er N atomer i systemet kan du tenke deg at det danner en søyle med høyde $h = bN$, hvor b er en typisk størrelse (lengde) for et atom. Du kan anta at for N atomer er det kun en mulig tilstand for systemet og at denne tilstanden har energien $N\epsilon$, dvs. at det er en energi ϵ assosiert med bindingen av hvert enkelt atom til overflaten eller til andre atomer.

Du kan i denne oppgaven få bruk for summene:

$$\sum_{i=0}^{\infty} x^i = \frac{1}{1-x} \quad \text{og} \quad \sum_{i=0}^{\infty} i x^i = \frac{x}{(1-x)^2} \; . \tag{1}$$

(a) Vis at Gibbs sum, $Z_G(T, V, \mu)$ for dette systemet er

$$Z_G = \frac{1}{1 - e^{(\mu-\epsilon)/kT}} \tag{2}$$

Løsning:
For dette systemet er Gibbs sum gitt som

$$Z_G = \sum_N \sum_s e^{(N\mu - \epsilon_S)/kT} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{N(\mu-\epsilon)/kT} = \sum_{N=0}^{\infty} q^N = \frac{1}{1-q} \; , \tag{3}$$

hvor $\epsilon_s = N\epsilon$ og

$$q = e^{(\mu-\epsilon)/kT} \; . \tag{4}$$

Det gir

$$Z_G = \frac{1}{1 - e^{(\mu-\epsilon)/kT}} \tag{5}$$

(b) Finn midlere antall atomer $\langle N \rangle$ i systemet.

Løsning:

Vi finner $\langle N\rangle$ *fra*

$$\langle N\rangle = \sum_N \sum_s N \frac{e^{(N\mu-\epsilon_s)/kT}}{Z_G} = \frac{1}{Z_G}\sum_{N=0}^{\infty} N e^{N(\mu-\epsilon)/kT} \tag{6}$$

$$= \frac{1}{Z_G}\sum_{N=0}^{\infty} N q^N = \frac{q(1-q)}{(1-q)^2} = \frac{q}{1-q} \tag{7}$$

$$= \frac{e^{(\mu-\epsilon)/kT}}{1-e^{(\mu-\epsilon)/kT}} = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/kT}-1} \ . \tag{8}$$

Vi kjenner dette igjen som Bose-Einstein fordelingsfunksjonen.

(c) Finn midlere energi $\langle E\rangle$ for systemet.

Løsning:
Vi kan finne denne på flere måter. Vi kan direkte se at $E = \epsilon N$*, og dermed er* $\langle E\rangle = \epsilon\langle N\rangle$*. Dette fremkommer også om vi prøver å regne ut* $\langle E\rangle$ *direkte:*

$$\langle E\rangle = \sum_N \sum_s \epsilon_s \frac{1}{Z_G} e^{(N\mu-\epsilon_s)/kT} = \sum_N \epsilon N \frac{1}{Z_G} e^{(N\mu-\epsilon_s)/kT} = \epsilon\langle N\rangle \ . \tag{9}$$

(d) Vi antar at en overflate består av mange slike "søyler" etter hverandre. Hvordan kan vi finne bredden av en slik overflate, målt som standardavviket til høyden? (Du skal kun finne et uttrykk for hvordan vi kan finne bredden, du behøver ikke å regne den ut).

Løsning:
Vi finner bredden som standard avviket av høyden $w^2 = \langle (h-\langle h\rangle)^2\rangle = \langle h^2\rangle - \langle h\rangle^2$ *hvor* $h = Nb$*. Det gir*

$$w = \sum_N \sum_s N^2 b^2 \frac{1}{Z_g} e^{(N\mu-\epsilon_s)/kT} - b^2\langle N\rangle^2 \ . \tag{10}$$

Oppgave 2

Vi skal i denne oppgaven studere faselikevekt mellom en væske og et fast stoff. Først utvikler vi en modell for en "ideell" væske basert på en ideell gass.

For en partikkel i en tre-dimensjonal boks er energitilstandene gitt som

$$\epsilon(n_x, n_y, n_z) = \frac{h^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right) = an^2 \ , \tag{11}$$

hvor $a = h^2/(2mL^2)$, L er størrelsen på boksen, m er massen til partiklene, og $n_k = 0, 1, 2, \dots$ angir tilstanden på vanlig måte for $k = x, y, z$.

(a) Vis at partisjonsfunksjonen for en partikkel i en boks $V = L^3$ er $Z_1 = n_Q(T)V$, hvor $n_Q(T) = (2\pi mkT/h^2)^{3/2}$.

Løsning:
Vi finner partisjonsfunksjonen ved å summere over alle mulige tilstander, dvs.

over alle mulige verdier av n_x, n_y, n_z:

$$Z = \sum_{\vec{n}} e^{-an^2/kT} = \int\int\int e^{-an^2/kT} dn_x\, dn_y\, dn_z = \left(\int e^{-an_x^2/kT} dn_x \right)^3 = z^3 \ . \tag{12}$$

Vi skriver dette integralet om ved å innføre $u = n_x(a/kT)^{1/2}$, slik at

$$z = \int e^{-u^2} (a/kT)^{-1/2}\, du = (a/kT)^{-1/2} \int e^{-u^2}\, du = \sqrt{\pi}/\sqrt{a/kT} \ , \tag{13}$$

hvor vi har funnet integralet fra en formelsamling. Vi setter inn og finner $Z_1 = z^3 = (2\pi mkT/h^2)^{3/2}$.

(b) Vis at Helmholtz frie energi for gassen med N partikler er

$$F_g = -NkT \left[\ln \left(n_Q/n \right) + 1 \right] \ , \tag{14}$$

hvor $n = N/V$. (Hint: Bruk Stirlings formel $ln(x!) = xlnx - x$).

Løsning:
Vi finner Helmholtz frie energi fra $F = -kT \ln Z_N = -kT \ln(Z_1^N/N!)$, hvor vi setter inn uttrykket for Z_1 og bruker Stirlings tilnærming til fakultetetsfunksjonen:

$$F_g = -kT \left(\ln Z_1 - N \ln N + N \right) = -NkT \left(\ln(n_Q V) - \ln N + 1 \right) = -NkT \left(\ln(n_Q \right. \tag{15}$$

Vi skal lage en modell for en væske basert på modellen for en ideell gass. I væsken er den en tiltrekkende kraft mellom alle partikler, slik at alle partiklene har en potensiell energi (bindingsenergi) $-\epsilon_v$ (hvor $\epsilon_v > 0$). Dessuten har hver partikkel i væsken et volum v_v, slik at volumet til væsken er $V_v = N_v v_v$. Helmholtz frie energi for væsken er:

$$F_v(T, V_v, N_v) = -N_v kT \left[\ln \left(n_Q(T)\, v_v e^{\epsilon_v/kT} \right) + 1 \right] \ . \tag{16}$$

(c) Finn Gibbs frie energi, $G(T, p, N_v)$, for væsken.

Løsning:

$$G_v(T, p, N_v) = -N_v kT \left[\ln \left(n_Q(T)\, v_v e^{\epsilon_v/kT} \right) + 1 \right] + pN_v v_v \ . \tag{17}$$

(d) Finn det kjemiske potensialet, $\mu_v(p, T)$, til væsken.

Løsning:

$$\mu_v = \left(\frac{\partial G_v}{\partial N_v} \right)_{T,p} = -kT \left[\ln \left(n_Q(T) v_v \right) + 1 \right] - \epsilon_v + pv_v \ . \tag{18}$$

Vi ønsker å bruke en Einstein-krystall som modell for det faste stoffet. Du kan anta at hver partikkel i krystallen opptar et volum, v_s, slik at volumet til krystallen er $V_s = N_s v_s$.

(e) Vis at partisjonsfunksjonen for en enkelt harmomisk oscillator med energinivåer $\epsilon_i = i\,\Delta\epsilon$ er

$$Z_1 = \left(1 - e^{-\Delta\epsilon/kT}\right)^{-1} \ . \tag{19}$$

Løsning:
Vi finner partisjonsfunksjonen ved å summere over alle mulige energitilstander:

$$Z_1 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\Delta\epsilon n/kT} = \sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q} = \frac{1}{1 - e^{-\Delta\epsilon/kT}} \ . \tag{20}$$

(f) Vis at Helmholtz frie energi for en krystall med N_s partikler er

$$F_s(T, V_s, N_s) = 3N_s kT \ln\left(1 - e^{-\Delta\epsilon/kT}\right) - N_s\epsilon_s \ , \tag{21}$$

hvor ϵ_s er bindingsenergien for en enkelt partikkel.

Løsning:
For et system med N adskillbare partikler – slik det er i en krystall – er partisjonsfunksjonen Z_N til N partikler gitt som $Z_N = Z_1^N$. Men for hver partikkel er det tre oscillatorer, slik at partisjonsfunksjonen svarer til Z_{3N}. Dermed er Helmholtz frie energi:

$$F = -kT \ln Z = -3NkT \ln Z_1 = 3NkT \ln\left(1 - e^{-\Delta\epsilon/kT}\right) \ . \tag{22}$$

Vi må dessuten ta hensyn til bindingsenergien, som er $-\epsilon_s$ for hver partikkel, tilsammen $-N_s\epsilon_s$:

$$F_s = 3N_s kT \ln\left(1 - e^{-\Delta\epsilon/kT}\right) - N_s\epsilon_s \ . \tag{23}$$

(g) Finn Gibbs frie energi for krystallen.

Løsning:
Vi finner Gibbs frie energi fra $G = F + pV$ slik at

$$G = F + pV = F + pN_s v_s = 3N_s kT \ln\left(1 - e^{-\Delta\epsilon/kT}\right) - N_s\epsilon_s + pN_s v_s \ , \tag{24}$$

hvor $V_s = N_S v_s$.

(h) Finn det kjemiske potensialet for krystallen.

Løsning:
Vi finner det kjemiske potensialet ved

$$\mu_s = \left(\frac{\partial G_s}{\partial N_s}\right)_{T,p} = 3kT \ln\left(1 - e^{-\Delta\epsilon/kT}\right) - \epsilon_s + pv_s \ . \tag{25}$$

(i) Vis at damptrykket, p, for likevekt mellom væske og fast stoff i modellene er gitt som

$$p\,(v_v - v_s) = 3kT \ln\left(1 - e^{-\Delta\epsilon/kT}\right) + kT\left[\ln\left(n_Q v_v\right) + 1\right] - \left(\epsilon_s - \epsilon_v\right) \ . \tag{26}$$

Løsning:
Når væske og fast stoff er i likevekt må det kjemiske potensialet være det samme i de to fasene. Det gir at:

$$\mu_v = -kT\left[\ln\left(n_Q(T)v_v\right)+1\right] - \epsilon_v + pv_v = \mu_s = 3kT\ln\left(1-e^{-\Delta\epsilon/kT}\right) - \epsilon_s + pv_s\ , \tag{27}$$

$$p(v_v - v_s) = kT\ln\left(1-e^{-\Delta\epsilon/kT}\right) + kT\left[\ln\left(n_Q(T)v_v\right)+1\right] + \epsilon_v - \epsilon_s\ , \tag{28}$$

(j) Bruk Clausius-Clapeyrons likning til å vise at fordampningsvarmen per partikkel, $l = L/N$, for høye temperaturer i denne modellen er

$$l \simeq p\left(v_v - v_s\right) + \left(\epsilon_s - \epsilon_v\right) - \frac{3}{2}kT\ , \tag{29}$$

og kommenter resultatet. (Du kan her få bruk for at $xe^{-x}/(1-e^{-x}) \to 1$ når $x \to 0$.)

Løsning:
Clausius-Clapeyrons likning gir at

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta s}{\Delta v} \Rightarrow \Delta v T\frac{dp}{dT} = l\ , \tag{30}$$

Vi finner $(v_v - v_s)dp/dT$:

$$(v_v - v_s)\frac{dp}{dT} = 3k\ln\left(1-e^{-\Delta\epsilon/kT}\right) + 3kT\frac{-\Delta\epsilon/kT^2 e^{-\Delta\epsilon/kT}}{\left(1-e^{-\Delta\epsilon/kT}\right)} + k\left[\ln\left(n_Q(T)v_v\right) + \right. \tag{31}$$

$$= \frac{1}{T}\left(p(v_v - v_s) - (\epsilon_v - \epsilon_s) - 3kT\frac{xe^{-x}}{(1-e^{-x})} + \frac{3}{2}kT\right) \tag{32}$$

som gir at

$$l = p\left(v_v - v_s\right) - \left(\epsilon_v - \epsilon_s\right) - \frac{3}{2}kT\ . \tag{33}$$

Oppgave 3

Vi skal i denne oppgaven studere et system med to-dimensjonale spinn i det kanoniske systemet, det vil si i et system med gitt (T, V, N). Ett enkelt spinn kan være i fire mulige tilstander angitt ved en enhetsvektor $\vec{S}$, som kan peke i positiv x-retning ($\vec{S} = (1, 0)$), i negativ x-retning ($\vec{S} = (-1, 0)$), i positiv y-retning ($\vec{S} = (0, 1)$), eller i negativ y-retning ($\vec{S} = (0, -1)$). Spinnet vekselvirker med et ytre magnetfelt $\vec{B} = B_0(0, 1)$. Energien til spinnet er $\epsilon(\vec{S}) = -m\vec{B}\cdot\vec{S}$, hvor m er en konstant.

(a) Finn partisjonsfunksjonen til et system med ett enkelt spinn.

Løsning:
Vi finner partisjonsfunksjonen ved å summere over alle tilstandene. Tilstandene er $S_1 = (1, 0)$, $S_2 = (-1, 0)$, $S_3 = (0, 1)$, og $S_4 = (0, -1)$. De respektive

energiene er $E_1 = \vec{S}_1 \cdot \vec{B} = 0$, $E_2 = 0$, $E_3 = -mB_0$, *og* $E_4 = mB_0$. *Partisjonsfunksjonen er da*

$$Z = e^0 + e^0 + e^{-mB_0/kT} + e^{mB_0/kT} = 2 + 2\cosh\left(mB_0/kT\right) = 2\left(1 + \cosh\left(mB_0/kT\right) \tag{34}$$

(b) Finn partisjonsfunksjonen til et system med N spinn som ikke vekselvirker.

Løsning:
For et system med N spinn som ikke vekselvirker og om er adskillbare er partisjonsfunksjonen:

$$Z_N = Z_1^N = \left(2\left(1 + \cosh\left(mB_0/kT\right)\right)\right)^N \ . \tag{35}$$

(c) Vis at Helmholtz frie energi for et system med N spinn er

$$F(T, V, N) = -NkT \ln\left(2\left(1 + \cosh\frac{mB_0}{kT}\right)\right) \ . \tag{36}$$

Løsning:
Helmholtz frie energi er $F = -kT \ln Z_N$ som er

$$F = -kT \ln Z_N = -NkT \ln\left(2\left(1 + \cosh\left(mB_0/kT\right)\right)\right) \ . \tag{37}$$

(d) Finn entropien $S(T, V, N)$ til et system med N uavhengige spinn.

Løsning:
Vi finner S fra

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = Nk \ln\left(2\left(1 + \cosh\left(mB_0/kT\right)\right)\right) - NkT \frac{\sinh\left(mB_0/kT\right) mB_0/k}{1 + \cosh\left(mB_0/kT\right)} \tag{38}$$

Vi ønsker nå å lage et program som simulerer et slikt system med N spinn.

(e) Skisser en funksjon `m = spinnsystem(L)` som returnerer en tilstand `m` med N tilfeldige spinn $\vec{S}$.

(f) Skisser en funksjon `e = energy(m)` som returnerer energien til en tilstand `m` og forklar hvordan vi kan bruke denne til å estimere partisjonsfunksjonen og energien til systemet i likevekt.

(g) Forklar hvordan metoden vil endre seg hvis vi også innfører en vekselvirkning mellom spinnene slik at energien til spinn i også er avhengig av energien til spinn $i-1$ og $i+1$:

$$\epsilon_i = -m\vec{S}_i \cdot \vec{B}_i - J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i-1} - J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \ , \tag{39}$$

hvor J er en konstant som er oppgitt.

Oppgave 4

Vi skal i denne oppgaven studere en modell for en gass-turbin. Denne modellen kalles en Brayton maskin. En ideell Brayton syklus består av fire delprosesser med en ideell gass som medium:

$1 \to 2$ En isentrop kompresjon. (*Luft trekkes inn i kompressorene og trykkes sammen*).

$2 \to 3$ En isobar ekspansjon. (*Den komprimerte luften strømmer gjennom forbrenningskammeret, hvor gass brennes og varmer opp luften. Dette er en profess ved konstant trykk.*)

$3 \to 4$ En isentrop ekspansjon. (*Den oppvarmede luften ekspanderer gjennom en turbin*).

$4 \to 1$ En isobar kompresjon. (*Varmen slippes ut til atmosfæren*).

Først skal vi se på noen egenskaper til en ideell gass. Entropien til en ideell monatomisk gass er gitt av Sackur-Tetrodes likning:

$$S(E, V, N) = Nk \left[\ln \left(\frac{V}{N} \left(\frac{4\pi m E}{3Nh^2} \right)^{3/2} \right) + \frac{5}{2} \right] . \tag{40}$$

(a) Utled adiabatlikningen $pV^{5/3} = \text{const.}$.

(b) Skisser en ideell Brayton maskin i et p-V-diagram. Marker punktene 1 til 4 fra beskrivelsen ovenfor.

(c) Finn arbeidet $W_{2,3}$ uttrykt ved p_2, V_2, og V_3, hvor V_i er volumet i punkt i og p_i er trykket i punkt i.

(d) Finn varmen $Q_{2,3}$ uttrykt ved p_i og V_i.