UNIVERSITETET I OSLO

Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Eksamen i: Fys2160

Eksamensdag: Mandag 5. desember 2016

Tid for eksamen: 1430–1830 Oppgavesettet er på: 5 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

(a) For et elektron i en to-dimensjonal relativistisk elektron-gass er energitilstandene gitt ved $\epsilon(n_x,n_y)=a\left(n_x^2+n_y^2\right)^{1/2}$ for $n_x,n_Y=0,1,2,\ldots$ Vis at tilstandstettheten er $D(\epsilon)=\pi\epsilon/a^2$.

Løsning:

Vi finner tilstandstettheten ved å ta utgangspunkt i at i (n_x, n_y) -rommet er tilstandstettheten 2: For hver (n_x, n_y) -verdi har vi to tilstander svarende til de to spinntilstandene til et Fermion, slik at $D(n_x, n_y) = 2$. Vi finner tilstandstettheten i n-rommet ved å se at i intervallet mellom n og n + dn er det $D(n_x, n_y) dA$ tilstander hvor $dA = (1/4) 2 \pi n dn$, slik at $D(n) dn = \pi n dn$. Vi finner da tilstandstettheten i energirommet ved

$$D(\epsilon)d\epsilon = D(n)dn , \qquad (1)$$

$$D(\epsilon) = D(n) \frac{1}{d\epsilon/dn} , \qquad (2)$$

 $hvor d\epsilon/dn = d/dn (an) = a$, slik at

$$D(\epsilon) = D(n)\frac{1}{d\epsilon/dn} = \pi n/a = \pi \epsilon/a^2 , \qquad (3)$$

som var det vi skulle vise

(b) Må to systemer som begge er i termisk likevekt og i termisk kontakt ha samme entropi? Begrunn svaret eller gi et moteksempel.

Løsning:

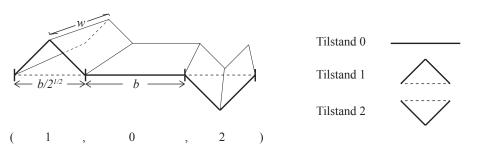
Nei. For eksempel vil to ideelle gasser med samme tetthet i termisk likevekt og i termisk kontakt ha en entropi som er avhengig av partikkeltallet.

Oppgave 2

Vi skal i denne oppgaven studere en membran som kan foldes langs x-aksen, mens den forblir uforandret langs y-aksen. Vi skal studere dette systemet ved

gitt energi, E, areal, A, og antall elementer, N, i membranen. Hvert element i membranen kan være i tre mulige tilstander:

- Elementet kan være flatt, med energi ϵ_0 og lengde $b_0 = b$ (tilstand 0)
- Elementet kan være foldet oppover med energi ϵ_0 og lengde $b_1 = b/\sqrt{2} = b\,c$ (tilstand 1)
- Elementet kan være foldet nedover med energi ϵ_0 og lengde $b_1 = b/\sqrt{2} = b c$ (tilstand 2).



Figur 1: Illustrasjon av modellen for en membran.

Modellen er illustrert i figur 1. Hvert element, i, har en energi, $\epsilon_i = \epsilon_0$, som er uavhengig av tilstanden til elementet, og et areal, A_i . Den totale energien til systemet er $E = \sum_i \epsilon_0 = N\epsilon_0$, mens det totale arealet til systemet er:

$$A = \sum_{i=1}^{N} A_i . (4)$$

Arealet er gitt som lengden, L, ganger bredden, w, A = wL. Bredden w er den samme for alle elementer, mens lengden L er gitt som:

$$L = N_0 b_0 + N_1 b_1 + N_2 b_1 = N_0 b_0 + (N - N_0) b_1 = N_0 b + (N - N_0) bc,$$
 (5)

hvor $c = 1/\sqrt{2}$. En mikrotilstand til systemet angis som en liste (i_1, i_2, \dots, i_N) av tilstandene til hvert enkelt element. For eksempel er membranen i figur 1 i mikrotilstanden (1, 0, 2).

Del 1

Anta at systemet består av 2 elementer, hvorav ett element er i tilstand 0, mens det andre elementet ikke i tilstand 0. Det vil si at N=2 og $N_0=1$.

(a) List opp alle mikrotilstander for dette systemet. Hva er multiplisiteten til systemet?

Løsning:

Mulige tilstander er: (0,1), (0,2), (1,0), (2,0)

Multiplisiteten er derfor $\Omega(N=2, N_0=1)=4$

(b) Hva er sannsynligheten for hver av disse mikrotilstandene i likevekt $(N=2, N_0=1)$?

Løsning:

Siden systemet er beskrevet ved konstant E, A, N er systemet et mikrokanonisk system og alle mikrotilstander er like sannsynlige:

$$P = \frac{1}{\Omega} = \frac{1}{4} \,. \tag{6}$$

Del 2

Vi skal nå studere et system med N elementer hvorav N_0 elementer er i tilstanden 0.

(c) Vis at multiplisiteten til dette systemet er

$$\Omega(N, N_0) = \frac{N!}{N_0!(N - N_0)!} 2^{N - N_0} . \tag{7}$$

Løsning:

Vi finner multiplisiteten til dette systemet. Vi har N plasser som skal besettes med ulike elementer. Først plasserer vi N_0 elementer av typen 0 blant N plasser. Dette kan vi gjøre $\Omega_0(N,N_0)$ forskjellige måter:

$$\Omega_0 = \begin{pmatrix} N \\ N_0 \end{pmatrix} . \tag{8}$$

Vi har da igjen $N-N_0$ plasser. Hver av disse plassene kan enten være av element 1 eller av element 2. Det betyr at antall måter vi kan velge de resterende plassene på er 2^{N-N_0} . Multiplisiteten er derfor

$$\Omega(N, N_0) = \Omega_0 \, 2^{N - N_0} = \frac{N!}{N_0! (N - N_0)!} 2^{N - N_0} \,. \tag{9}$$

(d) Finn entropien, $S = S(E, N_0, N)$, til systemet. Bruk Stirling's tilnærmelse $\ln(x!) = x \ln x - x$ til å skrive om uttrykket slik at det ikke inneholder fakultetsfunksjonen.

Løsning:

$$S = k \ln \Omega(E, N_0, N) = k \ln \frac{N!}{N_0!(N - N_0)!} 2^{N - N_0}$$
(10)

$$= k \left(\ln(N!) - \ln(N_0!) - \ln(N - N_0)! + (N - N_0) \ln 2 \right) \tag{11}$$

$$\simeq k \left(N \ln N - N - N_0 \ln N_0 + N_0 - (N - N_0) \ln(N - N_0) + (N -$$

$$\simeq k \left(N \ln N - N_0 \ln N_0 - (N - N_0) \ln(N - N_0) + (N - N_0) \ln 2 \right) \tag{13}$$

(e) Ta utgangspunkt i termodynamikkens første lov og at dQ = T dS for en reversibel prosess og vis at den termodynamiske identitet for systemet kan skrives som

$$TdS = dE - \sigma \, dA \,, \tag{14}$$

hvor σ er den ytre overflatespenningen som virker på enden av membranen.

Løsning:

Termodynamikkens første lov gir at dE = dQ + dW. Hvis vi ser på en reversibel $prosess\ hvor dQ = T\ dS\ blir\ da$

dE = T dS + dW.

$$dE = T dS + dW , \qquad (15)$$

$$ever flates renningen nå membranen er dW - \sigma dA -$$

hvor arbeidet som utføres av overflatespenningen på membranen er $dW = \sigma dA = 0$ $\sigma w dL$, slik at

$$dE = T dS - \sigma dA \Rightarrow T dS = dE - \sigma dA.$$
 (16)

(f) Vis at vi kan finne σ ved:

$$\sigma = -T \frac{1}{wb(1-c)} \left(\frac{\partial S}{\partial N_0} \right)_{E,N} .$$

(17)

(20)

(21)

(22)

Løsning:

Fra den termodynamiske identiteten vet vi at $dE = T dS - \sigma dA$, slik at

$$\sigma = -\left(\frac{\partial S}{\partial A}\right)_{E,N} . \tag{18}$$

Vi deler dette opp ved først å derivere med hensyn på N_0 og deretter med hensyn $p \mathring{a} A \ siden A = A(N_0)$:

$$\sigma = -\left(\frac{\partial S}{\partial A}\right)_{E,N} = -\left(\frac{\partial S}{\partial N_0}\right)_{E,N} \left(\frac{\partial N_0}{\partial A}\right) . \tag{19}$$

Her bruker vi at $A = wL = w(bN_0 + bc(N - N_0))$ slik at

$$\left(\frac{\partial A}{\partial N_0}\right) = wb(1-c) ,$$

 $\sigma = -\frac{1}{wb(1-c)} \left(\frac{\partial S}{\partial N_0}\right)_{E,N}.$

og dermed

$$\sigma \simeq -\frac{kT}{wb(1-c)} \ln \frac{(N-N_0)}{(2N_0)}.$$

Løsning:

 $Vi\ finner\ \sigma\ fra$

$$\sigma = -\frac{1}{wb(1-c)} \left(\frac{\partial S}{\partial N_0}\right)_{F,N},\tag{23}$$

hvor

$$S \simeq k \left(N \ln N - N_0 \ln N_0 - (N - N_0) \ln(N - N_0) + (N - N_0) \ln 2 \right)$$
 (24)

Vi deriverer med hensyn på N_0 . Da forsvinner alle ledd som kun avhenger av N:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial N_0}\right)_{E,N} \simeq kT \ln 2 - kT \left(-1 \ln N_0 - 1 + 1 + \ln(N - N_0)\right) \tag{25}$$

$$\simeq kT \ln 2 - kT \ln(N - N_0)/N_0$$
 (26)

Og da får vi for σ :

$$\sigma \simeq -\frac{kT}{wb(1-c)} \ln \frac{(N-N_0)}{(2N_0)}$$
 (27)

(h) Finn likevektsarealet, A_0 , slik at $\sigma(T, A_0, N) = 0$.

Løsning:

Vi finner likevektsarealet A_0 ved å finne den verdien for N_0 som gjør $\sigma = 0$, og deretter finner vi den tilsvarende verdien for A_0 . Vi ser at $\sigma = 0$ når logaritmen er null, og det er den når $N-N_0 = 2N_0$, det vil si for $N_0 = N/3$. Den tilsvarende verdien for A er

verdien for
$$A$$
 er
$$A_0 = wL = wb \left(N_0 + (N - N_0)c \right) = wb \left(\frac{N}{3} + c \left(N - \frac{N}{3} \right) \right) = Nwb \left(\frac{1}{3} + c \frac{2}{3} \right).$$
(28)

Oppgave 3

Vi skal i denne oppgaven studere en blanding av to typer atomer i en krystall i kontakt med et termisk reservoar slik at (T, V, N) er tilnærmet konstant for systemet. Systemet består av N_A atomer av type A og N_B av type B. Atomene vekselvirker med sine nærmeste naboer. Det er to nærmeste naboer i en dimensjon, fire i to dimensjoner og seks i tre dimensjoner. Vekselvirkningen mellom hvert par av naboatomer gir et energibidrag til den totale energien til systemet. To atomer av typen A som er ved siden av hverandre bidrar med en energi ϵ_{AA} til den totale energien til systemet, to atomer av typen A og B bidrar med en energi ϵ_{AB} , og to atomer av typen B bidrar med en energi ϵ_{BB} . Vi antar at $\epsilon_{AA} = \epsilon_{BB} = u$, og at $\epsilon_{AB} = \epsilon_{BA} = v$ Vi har i figur 2 illustrert et en-dimensjonalt system med fire atomer i tilstanden (A, A, B, A). I denne



tilstanden har systemet energien $E((A, A, B, A)) = \epsilon_{AA} + 2\epsilon_{AB} = u + 2v$.

Figur 2: Illustrasjon av en tilstand (A, A, B, A) for et system med fire atomer: tre atomer av type A og ett atom av type B.

La oss først anta at vi ser på et system med tre atomer, to av type A og et av type B, i en dimensjon.

(a) List opp alle mulige tilstander for systemet med $N_A = 2, N_B = 1$ og finn energien til hver av tilstandene.

Løsning:

- AAB, $E = \epsilon_{AA} + \epsilon_{BA} = u + v$
- ABA, $E = \epsilon_{AB} + \epsilon BA = 2v$
- BAA, $E = \epsilon_{AB} + \epsilon AA = u + v$

(b) Finn partisjonsfunksjonen, $Z(T, V, N_A = 2, N_B = 1)$ for dette systemet.

Løsning:

 $\it Vi\ finner\ Z\ ved\ å\ summere\ over\ alle\ mulige\ til stander\ for\ systemet:$

$$Z = \sum_{i} e^{-\epsilon_i/kT} = e^{-(u+v)/kT} + e^{-(2v)/kT} + e^{-(u+v)/kT} = 2e^{-(u+v)/kT} + e^{-(2v)/kT}$$
(29)

(c) Finn Helmholtz frie energi, $F(T, V, N_A = 2, N_B = 1)$ for dette systemet.

Løsning:

Vi finner F fra $F = -kt \ln Z$:

$$F = -kT \ln Z = -kT \ln \left(2e^{-(u+v)/kT} + e^{-(2v)/kT} \right) . \tag{30}$$

La oss nå se på et endimensjonalt system med $N_A=N_B=N/2$, hvor $\epsilon_{AA}=\epsilon_{BB}<\epsilon_{AB},$ og N er stor.

(d) Hva blir F i likevekt når T=0? (Hint: Du behøver ikke finne det eksakte uttrykket for F for å kunne svare på denne oppgaven).

Løsning:

 $\epsilon_{AB} + (N_B - 1)\epsilon_{BB}$.

I likevekt er F minimal. Siden F = E - TS vil E være minmal når T = 0. Hvordan kan E bli liten i dette tilfellet? Vi må ha minst mulig av ϵ_{AB} . Det får vi når alle A er sammen og alle B er sammen - altså når overflaten mellom A og B blir minst mulig. Da er det kun ett sted hvor vi får ϵ_{AB} , mens alle de andre blir $\epsilon_{AA} = \epsilon_{BB}$. Helmholtz fri energi blir da $F = E(T = 0) = (N_A - 1)\epsilon_{AA} +$

- Vi skal nå utvikle en numerisk modell og så en teoretisk modell for dette systemet i to dimensjoner. En tilstand for systemet beskrives av en matrise m_{ij} , hvor hvert element i matrisen kan ha verdien 1 (som svarer til at elementet er av typen A) eller verdien -1 (som svarer til at elementet er av typen B). Husk at antall A-atomer, N_A , og antall B-atomer, N_B , ikke endrer seg.
- (e) Skisser en algoritme for en funksjon randomstate(NA,NB,M) som lager en tilfeldig $M \times M$ matrise med $N = M^2$ elementer, hvor NA (N_A) elementer har verdi +1 (er av type A) og NB $(N_B = N N_A)$ elementer har verdi -1 (er av type B).

Løsning:

def randomstate(NA,NB,M):
 m = zeros((M,M))
 index = permutation(M*M)
 ix,iy = unravel_index(index,(M,M))

j = range(NA)
m[ix[j],iy[j]] = 1
j = range(NA,NA+NA)
m[ix[j],iy[j]] = -1
return m

Anta at du har oppgitt en funksjon energy(m,EAA,EAB,EBB) som returnerer energien som svarer til tilstanden gitt av matrisen m, hvor EAA, EAB og EBB er henholdsvis ϵ_{AA} , ϵ_{AB} og ϵ_{BB} .

henholdsvis ϵ_{AA} , ϵ_{AB} og ϵ_{BB} .

(f) Skisser et program som lager 10000 tilfeldige tilstander og bruker dette til å

finne en tilnærmet verdi for partisjonsfunksjonen og energien til systemet.

Løsning:

Python

```
Z = 0.0
E = 0.0
EAA =
EBB =
EAB =
kT = ...
for i in range(10000):
    m = rndstate()
    en = energy(m,EAA,EAB,EBB)
    ee = exp(-en/kT)
    Z = Z + ee
    E = E + en*ee
print "Z = ",Z
```

print "<E> = ",E/Z

Vi skal nå studere en forenklet modell for det to-dimensjonale systemet. Vi antar at $\epsilon_{AA} = \epsilon_{BB} = 0$ og at $\epsilon_{AB} = \epsilon$. Energien til systemet er da tilnærmet lik

$$E = zN\epsilon x(1-x) , x = (N_A/N) .$$
 (31)

Vi antar at det eneste bidraget til entropien til systemet kommer fra blandingsentropien for systemet.

(g) Vis at entropien til en krystall med N_A atomer av typen A og N_B atomer av typen B tilnærmet er lik

$$S = -Nk \left[x \ln x + (1 - x) \ln (1 - x) \right] . \tag{32}$$

Løsning:

Vi finner entropien til systemet ved å se på antall måter systemet kan organiseres på. Hvis vi har N_A av type A og N_B vav type B som skal plasseres på $N=N_A+N_B$ plasser er antallet måter dette kan gjøres $\Omega=N!/(N_A!N_B!)$ slik at entropien til systemet er

$$S = k \ln \Omega = k (\ln N! - \ln N_A! - \ln(N - N_A)!) . \tag{33}$$

Vi bruker Stirlings tilnærming og finner:

$$S/k = N \ln N - N - N_A \ln N_A + N_A - (N - N_A) \ln(N - N_A) + (N - N_A), (34)$$

hvor vi nå setter inn at $N_A = xN$ og $N - N_A = (1 - x)N$:

$$S/k = N \ln N - Nx \ln Nx - (1-x) \ln N(1-x)$$
(35)

$$= N \ln N - (Nx + (1-x)N) \ln N - Nx \ln x - N(1-x) \ln(1-x) , \quad (36)$$

som gir

$$S/k = -N(x \ln x + (1-x)\ln(1-x)). \tag{37}$$

(h) Skriv et program som plotter Helmholtz frie energi, F(x), som funksjon av x for en gitt temperatur T.

Løsning:

Python

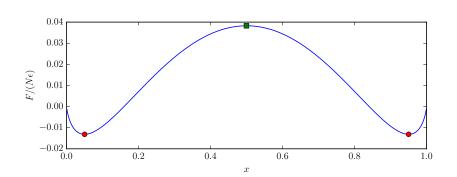
Vi vet at F = E - TS, som her blir

$$F = zN\epsilon x(1-x) + NkT(x \ln x + (1-x)\ln(1-x)), \qquad (38)$$

hvor z er et tall. (Dette er vanligvis antall naboer, altså z=4 i to dimensjoner). Vi plotter dette direkte

```
z = ...
epsilon = ...
kT = ...
x = linspace(0.0,1.0,1000)
F_div_N = z*epsilon*x*(1-x) + kT*(x*log(x)+ (1-x)*log(x))
plot(x,F_div_N)
xlabel('x'),ylabel('F/N')
show()
```

Figur 3 viser Helmholtz frie energi, F(x), for en gitt temperatur T. Minimum for F(x) ligger her ved x = 0.05 og x = 0.95.



Figur 3: Plot av $F(x)/(N\epsilon_{AB})$. Minimum av F inntreffer for x=0.05 og x=0.95, mens maksimum inntreffer for x=0.5.

(i) Vi ser på et system hvor $N_A=N_B=N/2$. Anne sier at i likevekt er A og B plassert på annenhver posisjon i hele systemet, som på et sjakkbrett, fordi dette svarer til x=0.5. Anton sier at Anne tar feil. Han sier at Helmholtz energi er minimal hvis halve systemet har x=0.05 og den andre halvdelen har x=0.95. For et slikt system er også $N_A=N_B=N/2$ sier Anton, men F er mindre enn hvis x=0.5 uniformt i hele i systemet. Hvem har rett? Begrunn svaret ditt.

Løsning:

Anton har rett. Hvis vi lager et system hvor halvparten er ved x=0.05 og den andre halvdelen er ved x=0.95, blir midlere x-verdi: $\bar{x}=(0.05+0.95)/2=0.5$. Men Helmholtz fri energi for den ene halvdelen med x=0.05 blir $F_1=f(x=0.05)\,N/2$ og Helmholtz fri energi for den andre halvdelen blir $F_2=f(x=0.95)\,N/2$. Den totale Helmholtz frie energi blir derfor $F_{TOT}=F_1+F_2+F_3$ hvor F_3 er Helmholtz frie energi for den delen hvor del 1 og del 2 møtes. Men i et stort system blir denne overflaten liten sammenliknet med resten av systemet

og vi kan derfor anta at $F_3 \ll F_1, F_2$. Derm er $F_{TOT} \simeq F_1 + F_2 = N/2 (f(x=0.05) + f(x=0.95)) = Nf(x=0.05)$. Den siste overgangen kommer av at f(x=0.05) = f(x=0.95). Vi ser at dette blir lavere enn Nf(x=0.5) som svarer til Anne sitt forslag.

Oppgave 4

Helmholtz frie energi for en ideell, monoatomisk gass med N atomer er

$$F = -kT \ln \frac{Z_1^N}{N!} \,, \tag{39}$$

hvor partisjonsfunksjonen for ett atom er

$$Z_1 = n_Q(T) V . (40)$$

Her er V volumet til gassen, N er antallet atomer i gassen, T er temperaturen og $n_Q(T) = \left(2\pi mkT/h^2\right)^{3/2}$.

(a) Vis at det kjemiske potensialet til gassen er

$$\mu = kT \ln \frac{n}{n_Q} \,, \tag{41}$$

hvor n = N/V.

Anta at atomene i gassen blir påvirket av en kraft langs x-aksen slik at energien til et atom er $\epsilon(x) = \kappa x^2/2$. Du kan fremdeles anta at gassen er tynn slik at atomene ikke vekselvirker med hverandre og du kan anta at temperaturen er konstant i hele gassen.

(b) Finn Helmholtz frie energi, F(x;T,V,N), for en del av gassen med volum V, temperatur T, og antall atomer N ved posisjonen x.

Løsning:

Vi finner Helmholtz fri energi som Helmholtz fri energi for gassen uten potensialet pluss energien gassen med N atomer ved posisjonen x har i det ytre potensialet:

$$F_{TOT} = F_g + N e(x) = -kT \ln \frac{Z_1^N}{N!} + N \kappa x^2 / 2$$
. (42)

(c) Finn det kjemiske potensialet til gassen som funksjon av x.

Løsning:

Vi kan finne det kjemiske potensialet ved å summere det indre og det ytre potensialet, eller ved å derivere Helmholtz frie energi med hensyn på N. I begge tilfeller får vi:

$$\mu_{TOT} = \mu_g + \kappa x^2 / 2. \tag{43}$$

(d) Finn tettheten til gassen som funksjon av x når gassen er i diffusiv likevekt ved konstant temperatur T.

Løsning:

Vi finner tettheten n(x) ved å ta utgangspunkt at i likevekt må det kjemiske potensialet være det samme overalt. Det betyr at det kjemiske potensialet må være det samme i x=0 som i x. Det gir

$$\mu(x=0) = \mu_0 = kT \ln n(0)/n_Q(T) = \mu(x) = kT \ln n(x)/n_Q(T) + \kappa x^2/2$$
. (44)

Vi deler på kT og får:

$$\ln n(0)/n_Q(T) = \ln n(x)/n_Q(T) + \kappa x^2/(2kT) . \tag{45}$$

Vi trekker $n_Q(T)$ ut på begge sider:

$$\ln n(0) - \ln n_Q(T) = \ln n(x) - \ln n_Q(T) + \kappa x^2 / (2kT) , \qquad (46)$$

$$\ln n(0) = \ln n(x) + \kappa x^2 / (2kT) , \qquad (47)$$

som gir

$$\ln n(x) = \ln n(0) - \kappa x^2 / (2kT) . \tag{48}$$

Vi tar eksponesialfunksjonen på begge sider og får

$$n(x) = n(0)e^{-\kappa x^2/(2kT)}$$
 (49)