

Tentamen Statistische Fysica

30 januari 2012

9.00h-12.00h

Dit tentamen bestaat uit 3 opgaven.

Begin bij elke opgave op een **nieuw** vel papier met daarop uw naam.

De opgaven bestaan bij elkaar uit 20 deelvragen, met elke deelvraag is 5 punten te verdienen.

Opgave 1 en 3 bestaan elk uit 7 onderdelen (a) t/m (g).

Opgave 2 bestaat uit 6 onderdelen (a) t/m (f).

X (a) t/m (g)

In dit tentamen wordt (net als in het boek en in het college) de absolute temperatuur aangeduid met T , en de constante van Boltzmann met $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$. Ook gebruiken we de afkorting $\beta = 1/(k_B T)$. Tevens mag u gebruiken dat de elementaire lading gelijk is aan $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$, het getal van Avogadro aan $N_A = 6 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, en de gas constante aan $R = 8.31 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$. Zoals u weet is 1 atm druk in zeer goede benadering gelijk aan 10^5 Pa .

BEARGUMENTEER UW ANTWOORDEN BONDIG.

ZORG ER VOOR DAT UW NAAM STAAT OP ELKE INGELEVERDE
PAGINA.

REKENMACHINES EN ANDERE ELECTRONISCHE
HULPMIDDELEN ZIJN NOCH TOEGESTAAN NOCH NODIG —IN
GEVAL VAN NUMERIEKE ANWOORDEN VOLSTAAT EEN
AFSCHATTING VAN ~ 1 SIGNIFICANT CIJFER OF DE ORDE VAN
GROOTTE.

Opgave 1

We beschouwen eerst een enkel deeltje dat zich in 2 microtoestanden kan bevinden, ofwel in de grondtoestand met energie ϵ_0 ofwel in de aangeslagen toestand met energie ϵ_1 , dus $\epsilon_1 > \epsilon_0$. Het deeltje is in thermisch evenwicht met een warmtebad op temperatuur T .

- Wat is de kans dat het deeltje in de grondtoestand zit?
- Bereken de temperatuur-afhankelijke gemiddelde energie $u(T)$ van dit deeltje.
- Geef op basis van fysische argumenten (of eventueel m.b.v. uw resultaat bij onderdeel (b)) de gemiddelde energie van dit deeltje in (i) de hoge- T en (ii) de lage- T limiet. De limieten zijn geldig voor $T \gg T^*$ en $T \ll T^*$, respectievelijk. Geef een uitdrukking voor de crossover-temperatuur T^* .

We beschouwen nu een enkele quantummechanische harmonische oscillator die in oneindig veel microtoestanden $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ kan zitten, met energie $\epsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ in microtoestand n . Hier is \hbar de constante van Planck en ω de hoekfrequentie. De oscillator is in thermisch evenwicht op temperatuur T .

- Bereken de quantummechanische kanonieke partitiesom $Z_{1,quant}(T)$ van de oscillator, en vervolgens de kans P_n om de oscillator in toestand n aan te treffen.
- Bij hoge temperaturen $T \gg \hbar\omega/k_B$ gedraagt de oscillator zich als een klassieke veer met veerconstante $m\omega^2$, zodanig dat de Hamiltoniaan (d.w.z. de energie bij uitwijking x en impuls p_x in de x -richting) gegeven wordt door $H(x, p_x) = p_x^2/2m + m\omega^2 x^2/2$, met m de massa. Bereken de klassieke partitiesom $Z_{1,klas}(T)$ van deze klassieke oscillator, en geef de relatie aan met $Z_{1,quant}(T)$.
- Bereken, met of uw antwoord bij (d) of (e) of eventueel met behulp van het equipartitie theorema, de gemiddelde potentiële energie $\langle m\omega^2 x^2/2 \rangle$ van deze oscillator in de klassieke (hoge- T) limiet.

We beschouwen nu een systeem van N identieke deeltjes in een volume V op temperatuur T , zodanig dat de kanonieke partitie-som gegeven wordt door $Z(N, V, T) = (c(T)V)^N/(N!)$ met $c(T)$ een of andere (positieve) functie van de temperatuur.

- Bereken de druk p van dit systeem.

Opgave 2 —begin op een nieuw vel s.v.p.

- Een stationair draaiende warmtemachine levert per cyclus 1 kJ aan arbeid, terwijl 2 kJ aan restwarmte wordt gedumpt in de buitenlucht op temperatuur $T_1 = 300\text{K}$. Bereken de temperatuur T_2 die het warmtebad (waaraan de warmte wordt onttrokken) *minstens* moet hebben.
- Bereken de entropie verandering ΔS van een warmtebad op vaste temperatuur T waarin op reversibele wijze een hoeveelheid warmte $Q > 0$ wordt gedumpt. Hoeveel maal groter wordt het aantal microtoestanden van het bad door deze opname van de warmte.
- Bereken het aantal mol gasdeeltjes in een liter ideaal gas onder atmosferische druk op kamertemperatuur.

Z.O.Z. VOOR HET VERVOLG

- (d) Bereken de arbeid W die een ideaal gas van N puntdeeltjes op temperatuur T levert door reversibel en isotherm uit te zetten van een begin-volume V_b naar een (groter) eind-volume V_e .
- (e) Beschouw een gas van N niet-wisselwerkende gas-deeltjes in een volume V op temperatuur T , waarvoor de energie U en de druk p gegeven worden door $U = cNk_B T$, met $c > 0$ een constante, en $pV = Nk_B T$. Laat hieruit zien dat VT^c constant is gedurende adiabatische processen.
- (e) Bereken voor het gas van onderdeel (e) de door het gas geleverde arbeid W gedurende een adiabatische expansie van begin-volume V_b en begin temperatuur T_b naar een (groter) eind-volume V_e .
- (f) Bereken de differentiaal dG van de Gibbs vrije energie $G(N, p, T)$ van een thermodynamisch systeem van N deeltjes op temperatuur T onder druk p , uitgaande van de Eerste Hoofdwet voor N deeltjes in een volume V met entropie S . De chemische potentiaal wordt aangeduid met μ .

Opgave 3 —begin op een nieuw vel s.v.p.

We beschouwen een klassiek ideaal gas van N puntdeeltjes in contact met het twee-dimensionale oppervlak van een katalysator.

- (a) Laat zien dat de chemische potentiaal μ van het ideale bulk gas (dat is het gas ver weg van het oppervlak) gegeven wordt door

$$\mu = k_B T \ln \frac{Ap}{T^{5/2}} \quad (1)$$

met T de gas temperatuur en p de gas druk. Geef een uitdrukking voor de constante A .

Het oppervlak van de katalysator heeft M posities waarop deeltjes kunnen adsorberen. Een positie is ófwel onbezet ófwel bezet door een deeltje. De adsorptie op een positie beïnvloedt de adsorptie op naburige posities níet. Een geadsorbeerd deeltje bevindt zich slechts in één microtoestand met energie ϵ ; de onbezette adsorptie-positie heeft een energie gelijk aan nul.

- (b) Bereken de groot-kanonieke partitie som $\mathcal{Z}_1(T, \mu)$ van een enkele adsorptie-positie in diffusief en thermische evenwicht met het ideale gas op temperatuur T en chemische potentiaal μ .
- (c) Bereken de kans $P(T, \mu)$ dat op een gegeven adsorptie-plaats een deeltje geadsorbeerd zit.
- (d) Bereken eerst de groot-kanonieke partitie som $\mathcal{Z}_M(T, \mu)$ van het gehele oppervlak van M adsorptie-posities, en vervolgens het gemiddeld aantal deeltjes $\langle N_M \rangle$ dat geadsorbeerd is op het gehele oppervlak en de variantie hiervan $\langle N_M^2 \rangle - \langle N_M \rangle^2$.

Het gas veronderstellen we niet langer meer ideaal, dus de wisselwerkingen kunnen niet meer verwaarloosd worden. Als we de paar potentiaal van twee deeltjes op afstand r van elkaar $u(r)$ noemen, dan wordt de tweede viriaal coefficient gegeven door $B_2 = -\frac{1}{2} \int dr [\exp(-\beta u(r)) - 1]$. Een zeer eenvoudige paar potentiaal, die de korte-drachts repulsie en tevens de attractie van atomen meeneemt, is de square-well potentiaal:

$$u_{SW}(r) = \begin{cases} \infty & r < \sigma \\ -\epsilon & \sigma < r < \lambda\sigma \\ 0 & r > \lambda\sigma \end{cases}, \quad (2)$$

waarbij σ de diameter is, $\lambda > 1$ de draagt van de attractie aangeeft, en ϵ de diepte van de attractieve put.

- (e) Bereken de tweede viriaal coefficient $B_2(T)$ van een square-well systeem. Bepaal de harde-bollen limiet van $B_2(T)$, dus voor $\epsilon \rightarrow 0$ en $\lambda \rightarrow 1$.

De Helmholtz vrije energie van dit square-well systeem van N deeltjes in een volume V en temperatuur T kan benaderd worden door

$$F(N, V, T) = Nk_B T \left[\log\left(\frac{N}{V} \Lambda^3\right) - 1 \right] + k_B T B_2(T) \frac{N^2}{V} \quad (3)$$

met Λ de thermische de Broglie golflengte.

- (f) Bereken de druk $p(\rho, T)$ en de chemische potentiaal $\mu(\rho, T)$ met $\rho = N/V$ de dichtheid van dit systeem.
- (g) Laat zien dat de vrije weglengte van het gas geschreven kan worden als $\ell = (\pi\sigma^2\rho)^{-1}$, en geef een afchatting voor ℓ voor stikstof gas (N_2) bij kamertemperatuur en atmosferische druk.

EINDE