

ZÁKLADY ŠTATISTICKEJ MECHANIKY I - NEINTERAGUJÚCE ČASTICE

Fenomenologická termodynamika (F)

1. Odvodte $\delta w = pdV$.

2. Odvodte

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \frac{C_v}{T}$$

3. Ako sa mení entropia ideálneho plynu pri izotermickej expanzii z objemu V_1 na V_2 ?

4. Vypočítajte minimálnu prácu potrebnú na oddelenie zmesi N_A molekúl plynu A a N_B molekúl plynu B. Z tohoto odhadnite prácu potrebnú na odsolenie 1m^3 typickej morskej vody (600 mM). Môžeme predpokladať, že rozpúšťacie teplo je malé.

5. Odvodte vzťah pre $C_p - C_v$ pre ideálny plyn.

6. Majme 2 rovnaké telesá, každé s tepelnou kapacitou C_v . Aká je pravdepodobnosť, že teplo sa spontánne rozloží tak, že teplota jedného je $T - \delta T$ a druhého $T + \delta T$?

Energetické hladiny (E)

1. Majme systém so 7 energetickými hladinami s energiami $E_i = i \epsilon$, $i \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Koľkými možnosťami vieme v tomto systéme distribuovať 4 rozlíšiteľné častice s energiou 6ϵ ? Ako sa toto číslo zmení, ak počet hladín zmeníme na 4 ($i \in \{0, 2, 4, 6\}$)?

2. Odvodte vzťah pre zmiešavaciu entropiu z kanonickej partičnej funkcie. Hint:

$$\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_{V,N} = -S$$

$$A = -k_B T \log Q(N, V, T)$$

3. Odvodte vzťah pre C_v a načrtnite závislosť tepelnej kapacity na teplote pre nasledujúce systémy:

(a) 2-hladinový systém s energiami $E_0 = 0$, $E_1 = \epsilon$.

(b) 2-hladinový systém s energiami $E_0 = 0$, $E_1 = \epsilon$ a degeneráciami stavov g_0 a g_1 .

(c) Kvantový harmonický oscilátor ($E_i = \epsilon(1/2 + i)$).

4. Pri kryštalizácii oxidu uhoľnatého (CO) obvykle nedostaneme dokonalú periodicitu. Atómy C a O jednej molekuly sa v mriežke náhodne striedajú.

(a) Aký je rozdiel kryštalizačných entalpií (tepiel) pre tieto 2 kryštály?

(b) Majme molekulu kyslíka O_2 zloženú z 2 rôznych izotopov kyslíka. V kryštáli sú tieto izotopy usporiadané náhodne. Porovnajme sublimačné takéhoto kryštálu s kryštálom obsahujúcim len 1 izotop.

Spojité hustoty stavov (S)

1. Odvodte vzťah pre hustotu stavov pre kvantovú časticu v krabici. Koľko stavov a koľko častíc ideálneho plynu nájdeme v nádobe tvare kocky objemu 1m^3 pri normálnych podmienkach?

2. Koľkými možnosťami vieme rozdeliť N nerozlíšiteľných častíc do 2 nádob s objemami V_1 a V_2 ? Ukážte, že najpravdepodobnejší stav je $N_1/V_1 = N_2/V_2$.

Neinteragujúce častice (N)

1. *Intersticiálne poruchy.* Majme kryštál s N neinteragujúcimi mriežkovými bodmi. Častice sa okrem týchto môžu nachádzať v N nezávislých bodoch, tzv. intersticiálnych poruchách, ktorých energia je ϵ . Aká je očakávaná (stredná) hodnota počtu častíc v intersticiálnych poruchách pri teplote T , z celkového počtu N častíc v kryštáli? Hint: nahraďte priemernú hodnotu najpravdepodobnejšou.

2. *Adsorpcia plynu na povrch pevnej látky.* Na povrchu pevnej látky sa nachádza M miest, na každé sa môže adsorbovať najviac 1 molekula plynu, pričom jej adsorpcia je spojená s uvoľnením energie ϵ . Nerozlišiteľné molekuly okolitého plynu sú v rovnováhe s adsorbovaným, teplota systému je T .
- Kolko z M miest je zaplnených pri tlaku p_2 , ak pri tlaku p_1 je zaplnených N_1 miest?
 - Odvoďte vzťah pre kanonickú partičnú funkciu $Q(N, M, T)$ ak je zaplnených N z M väzobných miest.
 - Odvoďte vzťah pre grandkanonickú partičnú funkciu pri chemickom potenciáli 1 častice μ , $\Xi(\mu, M, T)$. Povrchový tlak Π a povrch A sú ekvivalentné objemovému tlaku p a objemu V pre 3-rozmerný systém, strednú hodnotu pomeru zaplnených miest ku M označte f . Odvoďte 2-rozmernú stavovú rovnicu $F(\Pi, f, T)$.
3. *Kryštál bez krátkodosahových interakcií.* Majme paramagnetický kryštál zložený z N iónov, každý z nich nesie magnetický moment m a spin $1/2$, v magnetickom poli hodnoty B . Ióny sú rozlišiteľné a navzájom neinteragujú.
- Napíšte vzťah pre magnetický moment (M) a energiu (E) v závislosti od počtu iónov so spinom paralelným (N_+) a antiparalelným (N_-) k magnetickému poľu.
 - Ako závisí počet mikrostavov od energie?
 - Vypočítajte závislosť teploty na energii. Prečo je teplota záporná pre isté hodnoty E ?
 - Vypočítajte kanonickú partičnú funkciu, z nej voľnú energiu A , vnútornú energiu E a tepelnú kapacitu C_v .

Interagujúce častice (I)

1. *Prechod z izotropnej na nematickú fázu.* Majme plyn tyčínok - valčekov o dĺžke L a priemere d , kde $L \gg d$. Predpokladajme, že každá tyčinka môže mať len 3 rôzne orientácie (v smere x , y a z) a ľubovoľnú polohu stredu s tým, že žiadne 2 tyčinky sa nemôžu prekryvať.
- Nájdite vzťah pre partičnú funkciu a chemický potenciál izotropnej fázy.
 - Nájdite druhý viriálový koeficient izotropnej fázy.
 - Odvoďte závislosť hustoty izotropnej a nematickej fázy na tlaku.
 - Porovnajme chemické potenciály pre obe fázy pri vysokom tlaku. Ktorá fáza je preferovaná?