

1. 넓이가 A인 2차원의 네모꼴 내부에 속박된 이상기체의 상태 방정식 및 내부 에너지를 구하시오.

$$* Z = A \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \Rightarrow \ln Z = \ln A + \frac{3}{2} \ln T + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi mk}{h^2} \right) \Rightarrow \frac{\partial \ln Z}{\partial A} = \frac{1}{A}$$

$$P = NkT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial A} \right)_T = NkT \times \frac{1}{A} = \frac{nRT}{A} \quad , \quad \underline{PA = nRT}$$

$$* U = NkT^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right)_V = NkT^2 \times \frac{3}{2T} = \underline{\underline{\frac{3NkT}{2}}}$$

2. 모든 결정은 원자가 일정한 격자 자리에 위치하고 있다. 원자가 있어야 할 격자 자리가 비어 있는 경우 원자공공 (vacancy)이 발생했다고 한다. Vacancy formation energy는 vacancy가 하나 생겼을 때 증가하는 system의 에너지를 말하며 ΔH_v 로 표시한다. N 개의 격자 자리로 이루어진 순수 결정에서 평형 vacancy 수 (n) 또는 vacancy와 총 격자 자리 개수 비율 (n/N)의 표현 식을, 통계열역학적 접근 방식으로 유도하시오.

$$Z = \sum_i e^{\left(-\frac{\epsilon_i}{kT}\right)} \Rightarrow Z = e^{\left(-\frac{0}{kT}\right)} + e^{\left(-\frac{\Delta H_v}{kT}\right)} = 1 + e^{-\frac{\Delta H_v}{kT}}$$

$$\text{Vacancy에 있을 확률} \Rightarrow P_i = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\Delta H_v}{kT}} \text{이므로}$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{P_v = \frac{n}{N} = \frac{e^{-\frac{\Delta H_v}{kT}}}{1 + e^{-\frac{\Delta H_v}{kT}}}}}$$

3. "Microscopically reversible, macroscopically irreversible"이라는 표현이 전달하고자 하는 의미가 무엇일지 각자 이해한 대로 의미를 설명하시오.

미시적인 것들이 모여 거시적인 어떠한 것을 이룬다.
여를 들어 미시적인 입자들의 운동 방식이 가역적인 행동을 한다면,
이러한 입자들이 셀 수 없이 모인 형태인 거시적인 상태에서는
입자 수의 증가 등에 따라 엔트로피 등의 변동이 빠르게 감소하거나
쉽게 원래의 상태로 돌아가기 힘든 형태가 된다.
이러한 이유로 입자가 작고 적은 미시적인 형태일 때는 가역성을 가지지만,
거시적인 형태에서는 비가역성을 가진다는 것으로 이해하였다.

#4

4. A rigid container is divided into two compartments of equal volume by a partition.

One compartment contains 1 mole of ideal gas A at 1 atm, and the other compartment contains 1 mole of ideal gas B at 1 atm.

(a) Calculate the entropy increase in the container if the partition between the two compartments is removed.

If the partition is removed

A의 1mole이 차지하는 부피가 2배가 됨 $\Rightarrow \Delta S_A = R \ln 2$

B " $\Rightarrow \Delta S_B = R \ln 2$

$$\Rightarrow \Delta S_A + \Delta S_B = R \ln 4$$

(b) If the first compartment had contained 2 moles of ideal gas A, what would have been the entropy increase due to gas mixing when the partition was removed?

A의 2mole이 차지하는 부피가 2배가 됨. $\Rightarrow \Delta S_A = 2R \ln 2$

B의 1mole이 차지하는 부피가 2배가 됨. $\Rightarrow \Delta S_B = R \ln 2$

$$\Delta S_A + \Delta S_B = 3R \ln 2 = R \ln 8$$

$$\Rightarrow \text{No change} \Rightarrow \Delta S = 0$$

(c) Calculate the corresponding entropy changes in each of the above two situations if both compartments had contained ideal gas A.

A의 2mole이 차지하는 부피가 2배가 됨 $\Rightarrow \Delta S = 2R \ln 2$

Remove the partition $\Rightarrow \Delta S = 0$

A의 3mole이 차지하는 부피 $\frac{2}{3} \Rightarrow \Delta S = 3R \ln(\frac{2}{3})$

$$\Delta S_{\text{Total}} = 2R \ln 2 + 0 + 3R \ln(\frac{2}{3}) = R \ln(\frac{32}{27})$$