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

2020097(강지성

3차원에서의 이상기체 방정식 $PV = nRT$를 2차원에 적용한다면, 3차원에 대한 압력 P와 부피 V가 달라져야 할 것이다.

2차원의 이상기체의 면적을 A, 면적 A에 대해 작용하는 압력을 P_{2D}라고 하면 $\rightarrow$ $P_{2D} \cdot A = nRT$ 라고 할 수 있을 것이다.

$$U = NkT^2\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_V \qquad Z = \sum_{\substack{energy \\ level\ i}} g_i e^{-\varepsilon_i/kT} \qquad \varepsilon_i = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right)$$

이때 ε_i를 2차원에서 표현하면, $\varepsilon_i = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2}\right)$.

$$\rightarrow Z = \sum g_i e^{-\varepsilon_i/kT}$$

$$= \sum g_i e^{-\frac{h^2}{8mkT}\cdot\frac{n_x^2}{a^2}} \cdot \sum g_i \cdot e^{-\frac{h^2}{8mkT}\cdot\frac{n_y^2}{b^2}}$$

$$= \int_0^\infty g_i e^{-\frac{h^2}{8mkT}\cdot\frac{n_x^2}{a^2}} \cdot \int_0^\infty g_i \cdot e^{-\frac{h^2}{8mkT}\cdot\frac{n_y^2}{b^2}} \qquad \int_0^\infty e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$= \frac{1}{\cancel{2}}\sqrt{\frac{8mkT\pi a^2}{h^2}} \cdot \frac{1}{\cancel{2}}\sqrt{\frac{8mkT\pi b^2}{h^2}}$$

$$= \frac{2mkT\pi A}{h^2} = Z$$

$$U = NkT^2\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_A \rightarrow \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = \left(\ln T + \ln\frac{2mk\pi A}{h^2}\right) dT$$

$$= \frac{1}{T}$$

$$= NkT^2 \cdot \frac{1}{T}$$

$$= NkT$$

$$\therefore U = NkT$$

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_v로 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.

Vacancy 존재 유무에 따라 $\begin{cases} \text{있을 때} & E_i = \Delta H_v \\ \text{없을 때} & E_i = 0 \end{cases}$

$$Z = \sum_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}$$

$$= e^{-\frac{\Delta H_v}{kT}} + 1 \rightarrow \frac{n_v}{N} = \frac{e^{-\frac{\Delta H_v}{kT}}}{Z} = \frac{e^{-\frac{\Delta H_v}{kT}}}{e^{-\frac{\Delta H_v}{kT}} + 1} = \frac{1}{1 + e^{\frac{\Delta H_v}{kT}}}$$

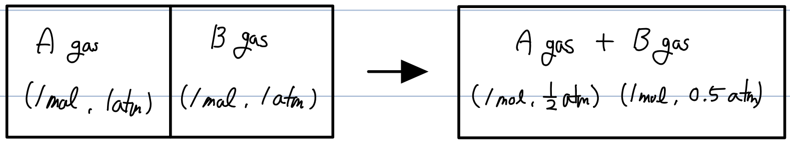
3. "Microscopically reversible, macroscopically irreversible"이라는 표현이 전달하고자 하는 의미가 무엇일지 각자 이해한 대로 의미를 설명하시오.

microstate가 모여서 macrostate가 된다.

⇒ 해당 표현은 하나하나의 입자(microstate)의 운동은 reversible 할 수도 있으나 그 reversible microstate들을 모아 macroscopically 관찰하면 결과적으로 irrevesible한 macrostate가 관찰될 것이다 라는 의미를 가진다고 생각한다. 이는 즉, 각 입자의 입장에서는 스스로가 reversible한 운동·반응을 하고 있더라도 그것이 결과적으로 해당 계의 무질서도(Entropy)의 상승 등 irreversible한 결과를 만들어낼 가능성이 절대적으로 크다는 것을 의미한다

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.



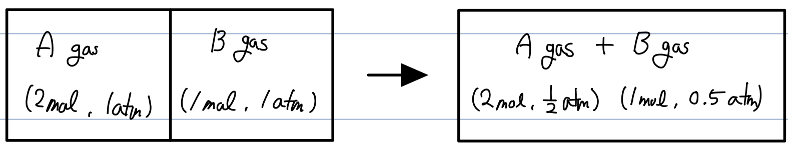
adiabatic : $\Delta U = TdS - PdV = 0 \rightarrow dS = \frac{P}{T} dV = \frac{nR}{V} dV$

$$\Rightarrow \Delta S = \int_{V_1}^{V_2} \frac{nR}{V} dV = nR \cdot \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right)$$

$\Delta S_A = \Delta S_B = R \cdot \ln 2 \quad (\because V_2 = 2V_1)$ $\qquad \therefore \Delta S_{Total} = \Delta S_A + \Delta S_B = R \ln 4$

$(\because V_{1A} = V_{1B},\ V_{2A} = V_{2B})$

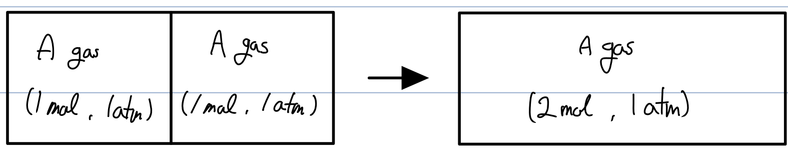
(b) If the first compartment had contained 2 moles of ideal gas A, what would have been the entropy increase due to gas mixing when the partition was removed?



$\Delta S_A = 2R \ln 2 \quad , \quad \Delta S_B = R \ln 2$

$\Delta S_{total} = \Delta S_A + \Delta S_B = R \ln 8$

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



gas의 압력, 부피의 변화가 존재하지 않으므로 $\Delta S_A = nR \ln 1 = 0$. 즉 $\Delta S_{total} = 0$