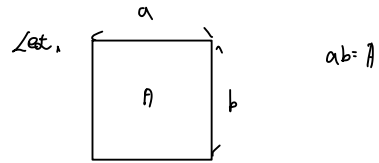


1. 넓이가 A인 2차원의 네모꼴 내부에 속박된 이상기체의 상태 방정식 및 내부 에너지를 구하시오.



partition function $Z = \sum_{\epsilon \in \text{allowed}} g_{\epsilon} e^{-\epsilon_i/kT}$

in macroscopic AG₂ 시스템이라면, $Z = \sum_i AG_i e^{-\epsilon_i/kT}$

in 2-D, $\epsilon_i = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right)$

$$Z = \sum e^{-C_1^2/(8mkT)} (n_x^2/a^2) \sum e^{-C_2^2/(8mkT)} (n_y^2/b^2)$$

$$= \int_0^{\infty} e^{-C_1^2/(8mkT)} (n_x^2/a^2) \int_0^{\infty} e^{-C_2^2/(8mkT)} (n_y^2/b^2) dn_y$$

by using $\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, $Z = \left[\frac{a}{2} \sqrt{\frac{8\pi mkT}{h^2}} \right] \left[\frac{b}{2} \sqrt{\frac{8\pi mkT}{h^2}} \right] \Rightarrow \ln Z = \ln \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right) \times A = \ln A + \ln T + \ln \frac{2\pi mk}{h^2}$

$$= \frac{ab}{4} \frac{8\pi mkT}{h^2}$$

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

전체 엔탈피 에너지는 $H = -NkT \ln Z$, in 3-D에서 엔탈피는 엔탈피와 엔탈피 $P = - \left(\frac{\partial H}{\partial V} \right)_T$

2-D에서는 $P^{(2)} = - \left(\frac{\partial H^{(2)}}{\partial L^{(2)}} \right)_T$

$$P^{(2)} = - \left(\frac{\partial H^{(2)}}{\partial L^{(2)}} \right)_T = NkT \left(\frac{\partial \ln Z^{(2)}}{\partial L^{(2)}} \right)$$

$$= NkT \left(\frac{\ln A + \ln T + \ln \frac{2\pi mk}{h^2}}{\partial L^{(2)}} \right) = NkT \left(\frac{\ln A + \ln T + \ln \frac{2\pi mk}{h^2}}{\partial A} \right) = NkT \cdot \frac{1}{A}$$

in 2-D, $P^{(2)}$ 는 2D가 엔탈피 엔탈피와 엔탈피 boundary를 따라 가지는 모든 엔탈피이다.

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

$$= NkT^2 \left(\frac{\ln A + \ln T + \ln \frac{2\pi mk}{h^2}}{\partial T} \right)_V = NkT^2 \cdot \frac{1}{T} = NkT$$

$\therefore$ in 2-D, 이상기체 상태 방정식: $PA = NkT = nAT$

내부 에너지: $U = NkT = nRT$

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.

$$\text{partition function } Z = \sum_i e^{-\epsilon_i/kT}$$

$$Z = \sum_i e^{-\epsilon_i/kT} = e^{-\Delta H_f/kT} + e^{-\Delta H_v/kT}$$

$= 1/e^{\Delta H_v/kT} \quad (\Delta H_f \text{는 격자의 값 } 0, \Delta H_v \text{는 vacancy의 } \Delta H)$

$$p = \frac{1}{Z} e^{-\epsilon_i/kT}, \quad p_v = \frac{n}{N} = \frac{e^{-\Delta H_v/kT}}{1/e^{\Delta H_v/kT}}$$

$$= \frac{1}{e^{\Delta H_v/kT}}$$

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

무슨, reversible (가역성) 이란 말 그대로 원자·분자 수준의 계에 대해서 미시적인 과정과 역과정의 두 가지 역학적 경로로 볼 때 같은 비율로 일어나는 것이다. 즉, 여러 계의 상관관계나 여러 계는 미시적으로 일대일로 대응되어 계의 역과정도 미시적으로 일어나고 있고 원자·분자 수준으로 볼 때는 같은 과정이다.

반면, Irreversible (비가역성) 은 상태 변화가 일어날 때 평형이 깨져서 가역적인 변화 일어난다. 많은 계의 계가 복잡하고 다양한 역학적 상태를 나타내며, 비가역적인 것은 많은 상태로 갈 수 있는 계로 보아야 하는 엔트로피 증가 때문에 그렇다.

따라서 미시적 상태 모두 줄인 것이 거시적 상태이고 Macroscopic microscopic 과정의 미시적인 관점에서는 무작위 수 있는 미시상태가, Microscopic 관점에서 Macroscopic 상태까지 고려하면 전체 무작위 수 있는 상태, 비가역 과정에서 엔트로피 증가 같은 상태로 나타나는 것이다.

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

a) $\begin{matrix} \text{1 mole} & \text{1 atm} \\ \text{1 mole} & \text{1 atm} \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} \text{2 moles} \\ \text{1 atm} \end{matrix} \quad (PV = C, V_2 = 2V_1)$

$\Delta U = 0 = T ds \cdot dV, \quad ds = \frac{P}{T} dV = \frac{NR}{V} dV \quad (\because PV = NR T)$

$\Delta S = \int_{V_1}^{V_2} \frac{NR}{V} dV = NR \ln \frac{V_2}{V_1} = NR \ln \frac{P_1}{P_2} \quad (P_1 V_1 = P_2 V_2)$

$\Delta S_A = 1 \cdot R \ln 2$

$\Delta S_B = 1 \cdot R \ln 2$

$\Delta S_{\text{total}} = \Delta S_A + \Delta S_B = 2R \ln 2$

b) $\begin{matrix} \text{2 moles} & \text{1 atm} \\ \text{1 mole} & \text{1 atm} \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} \text{3 moles} \\ \text{1 atm} \end{matrix} \quad (PV = C, V_2 = 2V_1)$

$\Delta S = NR \ln \frac{V_2}{V_1} = NR \ln \frac{P_1}{P_2}$

$\Delta S_A = 2R \ln 2$

$\Delta S_B = R \ln 2$

$\Delta S_{\text{total}} = \Delta S_A + \Delta S_B = 3R \ln 2$

c) i)

1	A	1	A
1 mole		1 mole	
1 atm		1 atm	

↓

1, 2	A
2 moles	
1 atm	

$P_{A,i} = \frac{RT}{V_1}$
↓
 $P_{A,f} = \frac{2RT}{2V_1} = \frac{RT}{V_1}$
 $\Delta S_A = 1 \cdot R \ln 1 = 0$

$P_{B,i} = \frac{RT}{V_1}$
↓
 $P_{B,f} = \frac{2RT}{2V_1} = \frac{RT}{V_1}$
 $\Delta S_B = 1 \cdot R \ln 1 = 0$

$\therefore \Delta S_{\text{total}} = \Delta S_A + \Delta S_B = 0$

ii)

1	A	1	A
2 moles		1 mole	

↓

1, 2	A
3 moles	

$P_{A,i} = \frac{2RT}{V_1}$
↓
 $P_{A,f} = \frac{3RT}{2V_1}$
 $\Delta S_A = 2R \ln \frac{3}{2}$

$P_{B,i} = \frac{RT}{V_1}$
↓
 $P_{B,f} = \frac{3RT}{2V_1}$
 $\Delta S_B = R \ln \frac{3}{2}$

$\therefore \Delta S_{\text{total}} = \Delta S_A + \Delta S_B = R \ln \frac{3^3}{2^3}$