Problem 2.

2022년 10월 12일 수요일 오후 2:22

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

상태방정식: $PA=nRT$

내부에너지: $U=NkT^2\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_v$, $Z=\sum_i g_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}$, $\varepsilon_i=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}+\frac{n_z^2}{c^2}\right)$, $\int_0^\infty e^{-ax^2}dx=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ 을 이용.

2d에서 $\varepsilon_i=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}\right)$,

$$Z=\sum_i g_i e^{-\frac{h^2}{8m}\frac{n_x^2}{a^2}\frac{1}{kT}}\times\sum_i g_i e^{-\frac{h^2}{8m}\frac{n_y^2}{b^2}\frac{1}{kT}}$$

$$=\left[\frac{a}{2}\sqrt{\frac{8\pi mkT}{h^2}}\right]\left[\frac{b}{2}\sqrt{\frac{8\pi mkT}{h^2}}\right]=2A\,\frac{\pi mkT}{h^2}$$

$$\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_v=\frac{\partial(\ln T+\ln 2A\pi mk-2\ln h)}{\partial T}=\frac{1}{T}$$

$$\Rightarrow U=NkT^2\times\frac{1}{T}=NkT$$

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.

$$E=\begin{cases}\Delta H_v & (\text{vacancy 존재})\\ 0 & (\text{vacancy 없음})\end{cases}$$

$$Z=\sum_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}=1+e^{-\frac{\Delta H_v}{k_BT}}$$

$$\therefore \frac{n_i}{Z}=\frac{n}{N}=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{\Delta H_v}{k_BT}\right)}$$

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

microscopically는 미시적, macroscopically는 거시적이라는 뜻을 가지고 있다.
또한 reversible은 가역성. irreversible은 비가역성이라는 뜻이다
우리는 보통 갇혀있는 기체를 거시적인 한 덩어리로 보고 부피·온도·압력 등을 계산하지만
실제 기체 속에서는 수많은 분자들이 각각의 에너지·속도를 가진 미시적 상태이다.
미시적인 분자 하나하나는 자유롭게 운동할 수 있고 이는 가역적이지만,
거시적인 관점에서는 무질서가 질서로 돌아오는 깨진 파편이 다시 유리컵이 되는 과정은
일어날 수 없으므로 비가역적이다. 이것이 microscopically reversible, macroscopically irreversible이다.

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)

A	B
1mole	1 mole
1atm	1atm

$\Delta S_A=R\ln\frac{V_2}{V_1}=R\ln 2$

$\Delta S_B=R\ln 2$

$\therefore \Delta S=\Delta S_A+\Delta S_B=2R\ln 2$

(b)

A	B
2mole	1 mole
2atm	1atm

$\Delta S_A=2R\ln 2$

$\Delta S_B=R\ln 2$

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

(c) (a)

A	A
1mole	1 mole
1atm	1atm

$\Delta S=0$

(b)

A	A
2mole	1 mole
2atm	1atm

→

A	A
2mole	1mole
1atm	1atm

→

A
$\frac{5}{3}$atm, 3mol

$\Delta S=2R\ln 2+0=2R\ln 2$ $\Delta S=R\ln\frac{2}{3}+2R\ln\frac{2}{3}=3R\ln\frac{2}{3}$

$\Delta S_{tot}=R\ln\frac{32}{27}$