소재열역학 Problem Set #2 2021[illegible]4 김보동.

#1

3D에서 Ideal gas law $\Rightarrow PV = nRT$ → 2D에서 [illegible]변수

2D에서 Ideal gas law $\Rightarrow \pi A = nR'T$ (π : 면적에 대한 압력, A : 면적) → $A = a \times b$.

$$Z = \sum_{\substack{\text{energy} \\ \text{level } i}} g_i e^{-\varepsilon_i/kT} \Rightarrow Z = \sum_{\text{state}} e^{-\varepsilon_i/kT}, \quad \varepsilon_i = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2}\right) : 2 \text{ Dimension.}$$

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

$$= \int_0^\infty e^{-\frac{h^2}{8mkT} \cdot \frac{n_x^2}{a^2}} dn_x \int_0^\infty e^{-\frac{h^2}{8mkT} \cdot \frac{n_y^2}{b^2}} dn_y \quad \left(\int_0^\infty e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}\right)$$

$$Z = \left[\frac{a}{2}\sqrt{\frac{8\pi mkT}{h^2}}\right]\left[\frac{b}{2}\sqrt{\frac{8\pi mkT}{h^2}}\right] = A \cdot \frac{2\pi mkT}{h^2} \Rightarrow \underline{\ln Z = \ln A + \ln T + \ln \frac{2\pi mk}{h^2}}$$

$$U = NkT^2\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_A : 2 \text{ dimension} \ / \ U = NkT^2\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right)_V : 3 \text{ dimension.}$$

$$= NkT^2 \cdot \left(\frac{1}{T}\right) = \underline{NkT}$$

2D에서 ideal gas law → $\pi A = nR'T$

2D에서 Internal Energy → $U = NkT$

소재열역학 Problem Set #2 20210194 [illegible]

#2

$Z = \sum_{state} e^{-E_i/kT}$: partition func

N
- 공공(vacancy) 있을 경우 → $E = \Delta H_v$: Vacancy formation Energy
- 공공(vacancy) 없을 경우 → $E = 0$

$$Z = \sum_{state} e^{-E_i/kT} = e^{-\frac{\Delta H_v}{kT}} + 1$$

$$\frac{n_v}{N} = \frac{e^{-\Delta H_v/kT}}{Z} = \frac{e^{-\Delta H_v/kT}}{1+e^{-\Delta H_v/kT}} = \underline{\frac{1}{1+e^{\Delta H_v/kT}}} \Rightarrow \star\ \underline{\frac{n}{N} = \frac{1}{1+e^{\Delta H_v/kT}}}$$

#3

"Microscopically reversible, macroscopically irreversible."

→ average, 확률분포.

⇒ 수많은 microstate가 모여서 하나의 macrostate를 형성한다.
미시적인 관점(microscopically)에서 보았을 때, 입자 하나하나의 움직임은 reversible 할 수 있으나 그 입자들이 모여서 형성된 거시적인 관점(macroscopically)에서 보면 irreversible 한 결과가 나타날 수 있다는 것을 설명하고자 하는 것 같다.

또한, 미시적 관점에서 입자 각각의 행동은 reversible 하며 전체 엔트로피의 변화가 없거나 거시적 관점에서는 irreversible 하며 전체 엔트로피 증가로 나타날 수 있다는 의미로 많이 가지는 것 같다. (결국, 위와 같은 말이라고 생각)

+) 미시적관점에서는 $\Delta S = \int \frac{\delta q_{rev}}{T}$ 에서 $dS = \frac{\delta q}{T}$ 로 구하지고 $\delta q \to 0$ 이므로 $dS \to 0$ 으로 수렴.
dS가 0으로 수렴하여 reversible

소재열역학 Problem Set #2 2021①94 [illegible]

#4

(a)

A	B
1atm	1atm
1mol	1mol

· A와 B 기체의 mixing → Configuration Entropy (ΔS_{conf}) → $k\ln\Omega$

· 기체의 부피변화 → thermal Entropy (ΔS_{ther}) → $\underset{zero}{0}$ (부피변화 X) ∵분자가 차지하는 공간

$$\Delta S_{conf} = k\ln\Omega,\quad \Omega = \frac{2N!}{N!N!} \Rightarrow \ln\Omega = \ln\left(\frac{2N!}{N!N!}\right) \underset{근사}{\simeq} 2N\ln 2N - 2N + (N\ln N - N + N\ln N - N) = 2N\ln 2 = N\ln 4$$

$$\Delta S_{conf} = k\ln\Omega = k\cdot N\ln 4 = R\ln 4 \ (1mol)$$

$$\Delta S_{total} = \Delta S_{ther} + \Delta S_{conf} = 0 + R\ln 4 = \underline{R\ln 4}$$

(b)

A	B
2atm	1atm
2mol	1mol

· A와 B 기체의 mixing → ΔS_{conf} → $k\ln\Omega$

· 기체들의 부피변화 → ΔS_{ther} → $\Delta S_A + \Delta S_B$.

$$\Delta S_{conf} = k\ln\Omega = k\ln\frac{3N!}{2N!N!} \underset{근사}{=} k(3N\ln 3N - 3N - (2N\ln 2N - 2N + N\ln N - N)) = Nk\ln\frac{27}{4} = R\ln\frac{27}{4}$$

기체 A의 thermal Entropy (ΔS_A)

$$\Delta S_A = nR\ln\frac{V_2}{V_1} = 2R\ln\frac{\frac{2}{3}}{\frac{1}{2}} = 2R\ln\frac{4}{3} = R\ln\frac{16}{9}$$

기체 B의 thermal Entropy (ΔS_B)

$$\Delta S_B = nR\ln\frac{V_2}{V_1} = 1\cdot R\ln\frac{\frac{1}{3}}{\frac{1}{2}} = R\ln\frac{2}{3}$$

$\Rightarrow \Delta S_{ther} = \Delta S_A + \Delta S_B$.

$$\Delta S_{tot} = \Delta S_{conf} + \underbrace{\Delta S_A + \Delta S_B}_{\Delta S_{ther}} = R\ln\frac{27}{4} + R\ln\frac{16}{9} + R\ln\frac{2}{3} = \underline{R\ln 8}.$$

소재열역학 Problem Set #2 20210994 [illegible]

#4

(c)

A	A
1atm	1atm
1mol	1mol

기체의 독립X

· 기체의 mixing X → ΔS_{conf} → X → $\Delta S_{conf} = 0$

· 기체의 부피변화 X → ΔS_{ther} → X → $\Delta S_{ther} = 0$

⇒ $\underline{\Delta S_{tot} = 0}$

A_1	A_2
2atm	1atm
2mol	1mol

· 기체의 mixing X → $\Delta S_{conf} = 0$

· 기체의 부피변화 O → ΔS_{ther} 有

기체의 thermal energy

$$\Delta S_{A_1} = nR\ln\frac{V_2}{V_1} = 2R\ln\frac{4}{3} = R\ln\frac{16}{9}$$

$$\Delta S_{A_2} = nR\ln\frac{V_2}{V_1} = R\ln\frac{2}{3}$$

$$\Rightarrow \Delta S_{tot} = \Delta S_{conf} + \underbrace{\Delta S_{ther}}_{\Delta S_{A_1} + \Delta S_{A_2}} = 0 + R\ln\frac{16}{9} + R\ln\frac{2}{3} = \underline{\underline{R\ln\frac{32}{27}}}$$