## Department of Materials Science and Engineering Pohang University of Science and Technology

1/2

## AMSE205 Thermodynamics I

due date: Oct. 19, 2023

Prof. Byeong-Joo Lee

Problem Set #2

Room 1- 311

- 1. 2 차원 직사각형 결정 면 길이가 각각  $L_1$ ,  $L_2$ 이고, 각 면의 표면에너지는 각각  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ 라고 하자. 결정의 면적이  $L_1L_2$ 로 일정할 때, 이 결정의 평형 모양  $(L_1$ 과  $L_2$ 의 비율)은 어떠한 모양일까? 평형 상태는 결정의 총 표면자유에너지가 최소가 되는 상태임을 고려하여, 결정의 총 표면자유에너지를 표현하고, 평형 모양  $(L_1/L_2)$  비율)을 유도하시오.
- 2. 통계 열역학 기법을 이용하여, 넓이가 A인 2차원의 네모꼴 내부에 속박된 이상기체의 상태방정식 및 내부 에너지를 구하시오.
- 3. 길이가 a인 N개의 막대꼴 분자가 쇠사슬과 비슷한 모양으로 연이어 이어져 있다. 이때 이웃한 두 분자의 상태는 완전히 겹쳐서 두 분자의 길이가 a 가 되거나 완전히 펴져서 길이가 2a가 되는 두 가지 상태만 가능하다고 하자. 이웃하는 두 분자의 겹친 상태에서의 상호작용 에너지는  $\varepsilon$  ( $\varepsilon$ >0)이고, 펴졌을 때는 0이라 하고, 이웃하지 않는 분자 사이에는 상호작용이 없다고 가정하자. 온도가 T일 때 이 분자들의 평균 길이는 얼마인가? (hint: 가장 짧을 때의 길이는 a 이고 에너지는 (N-1)  $\varepsilon$ 이다.)
- 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. (20 points)
  - (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.

2/2

## AMSE205 Thermodynamics I

due date: Oct. 19, 2023

Prof. Byeong-Joo Lee

Problem Set #2

Room 1- 311

- 5. 1 기압 하 Pb 의 melting point 는 600K 이다. 1 기압 하 590K 로 과냉된 액상 Pb 가 응고하는 것은 자발적인 반응이라는 것을 (1) maximum-entropy criterion 과 (2) minimum-Gibbs-Energy criterion 을 이용하여 보이시오.
  - $\Delta H_{melting} = 4810 \ J / mole$
  - $C_{p(I)} = 32.4 3.1 \times 10^{-3} T \ J / mol \cdot K$
  - $C_{p(s)} = 9.75 \times 10^{-3} T \ J / mol \cdot K$

이 문제에서의 Pb 가 단열된 용기에 보관되어 있었다면 용기 내부는 결국 어떠한 (평형)상태가 될 것인지 예측하시오. (20 points)

6. Carbon 의 두 동소체 (Graphite and Diamond)를 생각하자. 25℃, 1 기압 하에서 안정한 형태는 Graphite 이다. 다음의 data 로부터, 같은 온도에서 Graphite 를 Diamond 로 바꾸려면 (상변태가 일어나게 하려면) 적어도 얼마만한 압력을 가해야 하는지 계산하시오.

Data:  $H_{298}(graphite) - H_{298}(diamond) = -454 \text{ calories/mole}$ 

 $S_{298}(graphite) = 1.37 calories/mole/K$ 

 $S_{298}(diamond) = 0.58 \text{ calories/mole/K}$ 

Density of graphite at 25°C is 2.22 gram/cm<sup>3</sup>

Density of diamond at 25°C is 3.515 gram/cm<sup>3</sup>