

Dugga 1 i FTF140 Termodynamik och statistisk fysik för F3

Tid och plats: Onsdagen den 15 september 2010, kl 13.15-15.00, HB4

Hjälpmedel: Inga

Bedömning: Varje uppgift kan ge en halv eller en poäng som adderas till tentamensresultatet läsåret 2010/2011.

Liten formelsamling

För en idealgas gäller:

$$\begin{aligned}PV &= nRT \\E &= E(T) \\C_P(T) - C_V(T) &= nR \\PV &= \text{konst. (isoterm process)} \\PV^\gamma &= \text{konst. (reversibel, adiabatisk process)} \\ \gamma &= C_P/C_V\end{aligned}$$

Kanonisk fördelning:

$$\begin{aligned}P_r &= \frac{1}{Z} e^{-\beta E_r} \\Z &= \sum_r e^{-\beta E_r} \\ \beta &= 1/k_B T \\ \bar{E} &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z\end{aligned}$$

Geometrisk summa:

$$\sum_{k=m}^n a^k = \frac{a^m - a^{n+1}}{1 - a}, \quad a \neq 1$$

1. Betrakta n mol av en idealgas med konstanta värmekapaciteter C_P och C_V . Låt gasen expandera reversibelt och adiabatiskt (värmeisolerat) från begynnelsevolymen V_0 till slutvolymen $2V_0$. I denna process uträttar gasen ett tryck-volym arbete på omgivningen. Gasens begynnelse-temperatur är T_0 . Vad blir sluttemperaturen för gasen vid denna process? Hur stort arbete uträttas?
2. För en partikel i en harmonisk potential ges energinivåerna av uttrycket

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Antag att partikel är i kontakt med ett värmebad vid temperaturen T .

- a) Bestäm tillståndssumman Z för partikeln som funktion av temperaturen.
- b) Bestäm medelenergin för partikeln som funktion av temperaturen.

- Betrakta en gas som är innesluten i en behållare med konstant volym. Gasens värmekapaciteter C_P och C_V är oberoende av temperaturen. Bestäm det maximala arbetet som kan erhållas då gasens temperatur sänks från T_1 till omgivningens temperatur T_0 .
- Tillstånden för en tre-dimensionell harmonisk oscillator ges av uttrycket

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \left(\frac{3}{2} + n_1 + n_2 + n_3\right)\hbar\omega$$

där n_1, n_2 och n_3 är heltal och kan anta värdena: $n_1 = 0, 1, 2, \dots, n_2 = 0, 1, 2, \dots$ och $n_3 = 0, 1, 2, \dots$ och frekvensen ω är densamma i alla tre riktningarna. Energinivåerna är därför degenererade. Antag att systemet är i jämvikt med en reservoar med temperaturen T . Bestäm den temperatur då sannolikheten är lika stor för att nivån med energin $(5/2)\hbar\omega$ är besatt jämfört med nivån med energin $(7/2)\hbar\omega$.

Lösningar

- För en idealgas som genomgår en reversibel och adiabatisk process gäller

$$\begin{aligned} PV &= nRT, \\ PV^\gamma &= \text{konst.} \end{aligned}$$

Beteckna sluttemperaturen med T_1 (och motsvarande för tryck och volym). Relationerna ovan ger oss då

$$T_1 = \frac{P_1 V_1}{nR} = \frac{P_0 V_0^\gamma V_1^{1-\gamma}}{nR} = \frac{P_0 V_0^\gamma (2V_0)^{1-\gamma}}{nR} = \frac{P_0 V_0 2^{1-\gamma}}{nR} = 2^{1-\gamma} T_0$$

För en reversibel process gäller att ett infinitesimalt arbete utträttat av gasen ges av

$$dW = PdV.$$

Det totala arbete gasen uträttar vid expansionen blir därför

$$\begin{aligned} W &= \int dW = \int_{V_0}^{V_1} PdV = \int_{V_0}^{2V_0} P_0 V_0^\gamma V^{-\gamma} dV = \\ &= P_0 V_0^\gamma \frac{1}{-\gamma+1} \left((2V_0)^{-\gamma+1} - V_0^{-\gamma+1} \right) = \frac{P_0 V_0}{-\gamma+1} \left(2^{-\gamma+1} - 1 \right) = \\ &= \frac{nRT_0}{\gamma-1} \left(1 - 2^{1-\gamma} \right). \end{aligned}$$

-

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = e^{-\beta\hbar\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} = \\ &= e^{-\beta\hbar\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\beta\hbar\omega} \right)^n = e^{-\beta\hbar\omega/2} \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{E} &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z = -\frac{\partial}{\partial\beta}(-\beta\hbar\omega/2) + \frac{\partial}{\partial\beta} \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) = \\ &= \hbar\omega/2 + \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} e^{-\beta\hbar\omega} \hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}.\end{aligned}$$

Är svaret rimligt? Vi har i.a.f. $\bar{E} \rightarrow \hbar\omega/2$ när $\beta \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$) och $\bar{E} \rightarrow \infty$ när $\beta \rightarrow 0$ ($T \rightarrow \infty$), vilket stämmer med vad vi förväntar oss.

3. Eftersom gasens volym är konstant kan den inte utföra något eget arbete. Däremot kan gasen ge värme Q_{in} till en motor som utför arbete W och lämnar spillvärme Q_{ut} till omgivningen. Eftersom energin är bevarad måste vi ha

$$W = Q_{\text{in}} - Q_{\text{ut}}.$$

Under processens gång måste totala entropin öka eller vara oförändrad:

$$\Delta S + \Delta S_0 \geq 0,$$

där S betecknar gasens entropi och S_0 omgivningens (värmebadets) dito. Vi vet att värmebadets entropi ökar med $\Delta S_0 = Q_{\text{ut}}/T_0$. För att räkna ut systemets entropiändring beräknar vi den successiva förändringen i entropin längs en reversibel väg mellan start- och sluttillståndet (vid konstant volym).

$$\Delta S = \int dS = \int \frac{\delta Q}{T} = \int_{T_1}^{T_0} \frac{C_v dT}{T} = C_v \int_{T_1}^{T_0} \frac{dT}{T} = C_v \ln \frac{T_0}{T_1} = -C_v \ln \frac{T_1}{T_0}.$$

Sammantaget får vi alltså

$$\Delta S + \Delta S_0 \geq 0 \Leftrightarrow Q_{\text{ut}} \geq C_v T_0 \ln \frac{T_1}{T_0}.$$

Det återstår att beräkna Q_{in} . Q_{in} blir som störst om hela minskningen i gasens interna energi sker genom reversibel värmeöverföring till motorn:

$$Q_{\text{in}} = -\int \delta Q \leq -\int_{T_1}^{T_0} C_v dT = C_v(T_1 - T_0).$$

Minustecknet kommer sig av att δQ är definierat som ett infinitesimalt *tillskott* av värme till gasen.

Slutresultatet blir alltså

$$W = Q_{\text{in}} - Q_{\text{ut}} \leq C_v(T_1 - T_0) - C_v T_0 \ln \frac{T_1}{T_0}.$$

Det maximala arbetet blir alltid ≥ 0 , med likhet precis då $T_1 = T_0$, vilket verkar rimligt.

Om man minns formeln för exergin $A = E + P_0V - T_0S$ finns ett kortare sätt att komma fram till samma resultat. Vi vet att

$$W_{\max} = -\Delta A = -\Delta(E + P_0V - T_0S) = -\Delta E + T_0\Delta S.$$

På samma sätt som ovan finner vi $\Delta E = -C_v(T_1 - T_0)$, $\Delta S = -C_v \ln \frac{T_1}{T_0}$, och vi ser att båda metoderna ger samma resultat.

4. Sannolikheten för att systemet har en viss energi E ges av

$$P(E) = \sum_{E_i=E} p_i = \sum_{E_i=E} \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} = g(E) \frac{e^{-\beta E}}{Z},$$

där $p_i = 1/Z \exp(-\beta E_i)$ är sannolikheten för att systemet befinner sig i tillstånd i , degenerationsgraden $g(E)$ är antalet tillstånd med energi E , och summan går över alla tillstånd i med energi $E_i = E$. Genom att räkna alla sätt på vilket systemet kan ha energin $(5/2)\hbar\omega$ respektive $(7/2)\hbar\omega$ finner vi

$$\begin{aligned} g((5/2)\hbar\omega) &= 3 \\ g((7/2)\hbar\omega) &= 6. \end{aligned}$$

Sannolikheten för respektive energi ges därför av

$$\begin{aligned} P((5/2)\hbar\omega) &= \frac{3e^{-\frac{5}{2}\beta\hbar\omega}}{Z} \\ P((7/2)\hbar\omega) &= \frac{6e^{-\frac{7}{2}\beta\hbar\omega}}{Z}. \end{aligned}$$

Vi ska nu bestämma temperaturen då $P((5/2)\hbar\omega) = P((7/2)\hbar\omega)$:

$$\begin{aligned} P((5/2)\hbar\omega) - P((7/2)\hbar\omega) = 0 &\Leftrightarrow \frac{3e^{-\frac{5}{2}\beta\hbar\omega}}{Z} (e^{\beta\hbar\omega} - 2) = 0 \\ &\Leftrightarrow e^{\beta\hbar\omega} = 2 \Leftrightarrow \beta = \frac{\ln 2}{\hbar\omega} \Leftrightarrow T = \frac{\hbar\omega}{k_B \ln 2}. \end{aligned}$$

Är detta rimligt? Ja, eftersom det finns hälften så många tillstånd vid den lägre energin måste sannolikheten för varje sådant tillstånd vara dubbelt så stor, d.v.s. $\exp(\beta\Delta E) = 2 \Leftrightarrow \exp(\beta\hbar\omega) = 2$.