UNIVERSITETET I OSLO

Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Eksamen i:	Fys2160
Eksamensdag:	Mandag 5. desember 2016
Tid for eksamen:	1430–1830
Oppgavesettet er på:	5 sider
Vedlegg:	ingen
Tilatte hjelpemidler	Elektronisk kalkulator, godkjent for videregående skole Rottman: Matematisk formelsamling Øgrim og Lian: Fysiske størrelser og enheter To A4 ark med notater (arkene kan beskrives på begge sider)

Kontroller at oppgavesettet er komplett før du begynner å besvare oppgavene.

Du må i oppgavene begrunne dine svar.

Oppgave 1

(a) For et elektron i en to-dimensjonal relativistisk elektron-gass er energitilstandene gitt ved $\epsilon(n_x, n_y) = a\left(n_x^2 + n_y^2\right)^{1/2}$ for $n_x, n_Y = 0, 1, 2, \ldots$. Vis at tilstandstettheten er $D(\epsilon) = \pi\epsilon/a^2$.

Løsning:
Vi finner tilstandstettheten ved å ta utgangspunkt i at i (n_x, n_y)-rommet er tilstandstettheten 2: For hver (n_x, n_y)-verdi har vi to tilstander svarende til de to spinntilstandene til et Fermion, slik at $D(n_x, n_y) = 2$. Vi finner tilstandstettheten i n-rommet ved å se at i intervallet mellom n og $n + dn$ er det $D(n_x, n_y)dA$ tilstander hvor $dA = (1/4)\,2\,\pi\,n\,dn$, slik at $D(n)dn = \pi n\,dn$. Vi finner da tilstandstettheten i energirommet ved

$$D(\epsilon)d\epsilon = D(n)dn\ , \tag{1}$$

$$D(\epsilon) = D(n)\frac{1}{d\epsilon/dn}\ , \tag{2}$$

hvor $d\epsilon/dn = d/dn\,(an) = a$, slik at

$$D(\epsilon) = D(n)\frac{1}{d\epsilon/dn} = \pi n/a = \pi\epsilon/a^2\ , \tag{3}$$

som var det vi skulle vise

(b) Må to systemer som begge er i termisk likevekt og i termisk kontakt ha samme entropi? Begrunn svaret eller gi et moteksempel.

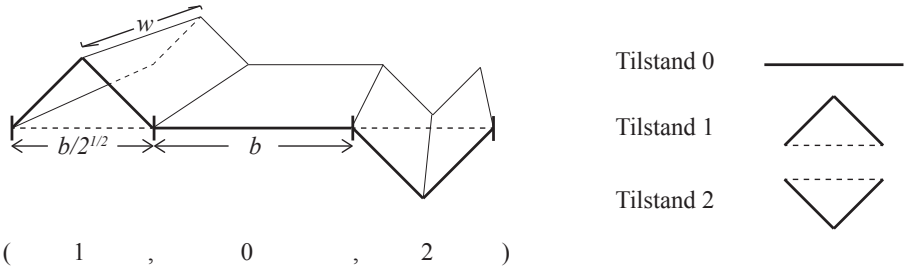
Løsning:
Nei. For eksempel vil to ideelle gasser med samme tetthet i termisk likevekt og i termisk kontakt ha en entropi som er avhengig av partikkeltallet.

Oppgave 2

Vi skal i denne oppgaven studere en membran som kan foldes langs x-aksen, mens den forblir uforandret langs y-aksen. Vi skal studere dette systemet ved

gitt energi, E, areal, A, og antall elementer, N, i membranen. Hvert element i membranen kan være i tre mulige tilstander:

- Elementet kan være flatt, med energi ϵ_0 og lengde $b_0 = b$ (tilstand 0)
- Elementet kan være foldet oppover med energi ϵ_0 og lengde $b_1 = b/\sqrt{2} = b\,c$ (tilstand 1)
- Elementet kan være foldet nedover med energi ϵ_0 og lengde $b_1 = b/\sqrt{2} = b\,c$ (tilstand 2).



Figur 1: Illustrasjon av modellen for en membran.

Modellen er illustrert i figur 1. Hvert element, i, har en energi, $\epsilon_i = \epsilon_0$, som er uavhengig av tilstanden til elementet, og et areal, A_i. Den totale energien til systemet er $E = \sum_i \epsilon_0 = N\epsilon_0$, mens det totale arealet til systemet er:

$$A = \sum_{i=1}^{N} A_i \,. \tag{4}$$

Arealet er gitt som lengden, L, ganger bredden, w, $A = wL$. Bredden w er den samme for alle elementer, mens lengden L er gitt som:

$$L = N_0 b_0 + N_1 b_1 + N_2 b_1 = N_0 b_0 + (N - N_0) b_1 = N_0 b + (N - N_0) bc \,, \tag{5}$$

hvor $c = 1/\sqrt{2}$. En mikrotilstand til systemet angis som en liste $(i_1, i_2, \ldots, i_N)$ av tilstandene til hvert enkelt element. For eksempel er membranen i figur 1 i mikrotilstanden $(1, 0, 2)$.

Del 1

Anta at systemet består av 2 elementer, hvorav ett element er i tilstand 0, mens det andre elementet ikke i tilstand 0. Det vil si at $N = 2$ og $N_0 = 1$.

(a) List opp alle mikrotilstander for dette systemet. Hva er multiplisiteten til systemet?

Løsning:
Mulige tilstander er: (0,1), (0,2), (1,0), (2,0)

Multiplisiteten er derfor $\Omega(N = 2, N_0 = 1) = 4$

(b) Hva er sannsynligheten for hver av disse mikrotilstandene i likevekt ($N = 2$, $N_0 = 1$)?

Løsning:
Siden systemet er beskrevet ved konstant E, A, N er systemet et mikrokanonisk system og alle mikrotilstander er like sannsynlige:

$$P = \frac{1}{\Omega} = \frac{1}{4} \,. \tag{6}$$

Del 2

Vi skal nå studere et system med N elementer hvorav N_0 elementer er i tilstanden 0.

(c) Vis at multiplisiteten til dette systemet er

$$\Omega(N, N_0) = \frac{N!}{N_0!(N-N_0)!} 2^{N-N_0} \,. \tag{7}$$

Løsning:
Vi finner multiplisiteten til dette systemet. Vi har N plasser som skal besettes med ulike elementer. Først plasserer vi N_0 elementer av typen 0 blant N plasser. Dette kan vi gjøre $\Omega_0(N, N_0)$ forskjellige måter:

$$\Omega_0 = \left(\begin{array}{c} N \\ N_0 \end{array} \right) \,. \tag{8}$$

Vi har da igjen $N-N_0$ plasser. Hver av disse plassene kan enten være av element 1 eller av element 2. Det betyr at antall måter vi kan velge de resterende plassene på er 2^{N-N_0}. Multiplisiteten er derfor

$$\Omega(N, N_0) = \Omega_0 \, 2^{N-N_0} = \frac{N!}{N_0!(N-N_0)!} 2^{N-N_0} \,. \tag{9}$$

(d) Finn entropien, $S = S(E, N_0, N)$, til systemet. Bruk Stirling's tilnærmelse $\ln(x!) = x \ln x - x$ til å skrive om uttrykket slik at det ikke inneholder fakultetsfunksjonen.

Løsning:

$$S = k \ln \Omega(E, N_0, N) = k \ln \frac{N!}{N_0!(N-N_0)!} 2^{N-N_0} \tag{10}$$

$$= k \left(\ln(N!) - \ln(N_0!) - \ln(N-N_0)! + (N-N_0) \ln 2 \right) \tag{11}$$

$$\simeq k \left(N \ln N - N - N_0 \ln N_0 + N_0 - (N-N_0) \ln(N-N_0) + (N-N_0) + (N-N_0) \ln 2 \right) \tag{12}$$

$$\simeq k \left(N \ln N - N_0 \ln N_0 - (N-N_0) \ln(N-N_0) + (N-N_0) \ln 2 \right) \tag{13}$$

(e) Ta utgangspunkt i termodynamikkens første lov og at $đQ = T\,dS$ for en reversibel prosess og vis at den termodynamiske identitet for systemet kan skrives som

$$T dS = dE - \sigma \, dA \,, \tag{14}$$

hvor σ er den ytre overflatespenningen som virker på enden av membranen.

Løsning:
Termodynamikkens første lov gir at $dE = đQ + đW$ *. Hvis vi ser på en reversibel prosess hvor* $đQ = T\,dS$ *blir da*

$$dE = T\,dS + đW\ , \tag{15}$$

hvor arbeidet som utføres av overflatespenningen på membranen er $đW = \sigma\,dA = \sigma w\,dL$*, slik at*

$$dE = T\,dS - \sigma\,dA \ \Rightarrow\ T\,dS = dE - \sigma\,dA\ . \tag{16}$$

(f) Vis at vi kan finne σ ved:

$$\sigma = -T\frac{1}{wb(1-c)}\left(\frac{\partial S}{\partial N_0}\right)_{E,N}\ . \tag{17}$$

Løsning:
Fra den termodynamiske identiteten vet vi at $dE = T\,dS - \sigma\,dA$*, slik at*

$$\sigma = -\left(\frac{\partial S}{\partial A}\right)_{E,N}\ . \tag{18}$$

Vi deler dette opp ved først å derivere med hensyn på N_0 *og deretter med hensyn på* A *siden* $A = A(N_0)$*:*

$$\sigma = -\left(\frac{\partial S}{\partial A}\right)_{E,N} = -\left(\frac{\partial S}{\partial N_0}\right)_{E,N}\left(\frac{\partial N_0}{\partial A}\right)\ . \tag{19}$$

Her bruker vi at $A = wL = w\left(bN_0 + bc(N - N_0)\right)$ *slik at*

$$\left(\frac{\partial A}{\partial N_0}\right) = wb(1-c)\ , \tag{20}$$

og dermed

$$\sigma = -\frac{1}{wb(1-c)}\left(\frac{\partial S}{\partial N_0}\right)_{E,N}\ . \tag{21}$$

(g) Vis at tilstandslikningen for membranen er:

$$\sigma \simeq -\frac{kT}{wb(1-c)}\ln\frac{(N-N_0)}{(2N_0)}\ . \tag{22}$$

Løsning:
Vi finner σ *fra*

$$\sigma = -\frac{1}{wb(1-c)}\left(\frac{\partial S}{\partial N_0}\right)_{E,N}\ , \tag{23}$$

hvor

$$S \simeq k\left(N\ln N - N_0\ln N_0 - (N-N_0)\ln(N-N_0) + (N-N_0)\ln 2\right) \tag{24}$$

Vi deriverer med hensyn på N_0*. Da forsvinner alle ledd som kun avhenger av* N*:*

$$\left(\frac{\partial S}{\partial N_0}\right)_{E,N} \simeq kT\ln 2 - kT\left(-1\ln N_0 - 1 + 1 + \ln(N-N_0)\right) \tag{25}$$

$$\simeq kT\ln 2 - kT\ln(N-N_0)/N_0\ . \tag{26}$$

Og da får vi for σ:

$$\sigma \simeq -\frac{kT}{wb(1-c)} \ln \frac{(N-N_0)}{(2N_0)} \, . \tag{27}$$

(h) Finn likevektsarealet, A_0, slik at $\sigma(T, A_0, N) = 0$.

Løsning:
Vi finner likevektsarealet A_0 ved å finne den verdien for N_0 som gjør $\sigma = 0$, og deretter finner vi den tilsvarende verdien for A_0. Vi ser at $\sigma = 0$ når logaritmen er null, og det er den når $N - N_0 = 2N_0$, det vil si for $N_0 = N/3$. Den tilsvarende verdien for A er

$$A_0 = wL = wb\left(N_0 + (N-N_0)c\right) = wb\left(\frac{N}{3} + c\left(N - \frac{N}{3}\right)\right) = Nwb\left(\frac{1}{3} + c\frac{2}{3}\right) \, . \tag{28}$$

Oppgave 3

Vi skal i denne oppgaven studere en blanding av to typer atomer i en krystall i kontakt med et termisk reservoar slik at (T, V, N) er tilnærmet konstant for systemet. Systemet består av N_A atomer av type A og N_B av type B. Atomene vekselvirker med sine nærmeste naboer. Det er to nærmeste naboer i en dimensjon, fire i to dimensjoner og seks i tre dimensjoner. Vekselvirkningen mellom hvert par av naboatomer gir et energibidrag til den totale energien til systemet. To atomer av typen A som er ved siden av hverandre bidrar med en energi ϵ_{AA} til den totale energien til systemet, to atomer av typen A og B bidrar med en energi ϵ_{AB}, og to atomer av typen B bidrar med en energi ϵ_{BB}. Vi antar at $\epsilon_{AA} = \epsilon_{BB} = u$, og at $\epsilon_{AB} = \epsilon_{BA} = v$ Vi har i figur 2 illustrert et en-dimensjonalt system med fire atomer i tilstanden (A, A, B, A). I denne tilstanden har systemet energien $E((A, A, B, A)) = \epsilon_{AA} + 2\epsilon_{AB} = u + 2v$.

A	A	B	A

Figur 2: Illustrasjon av en tilstand (A, A, B, A) for et system med fire atomer: tre atomer av type A og ett atom av type B.

La oss først anta at vi ser på et system med tre atomer, to av type A og et av type B, i en dimensjon.

(a) List opp alle mulige tilstander for systemet med $N_A = 2, N_B = 1$ og finn energien til hver av tilstandene.

Løsning:

- AAB, $E = \epsilon_{AA} + \epsilon_{BA} = u + v$
- ABA, $E = \epsilon_{AB} + \epsilon BA = 2v$
- BAA, $E = \epsilon_{AB} + \epsilon AA = u + v$

(b) Finn partisjonsfunksjonen, $Z(T, V, N_A = 2, N_B = 1)$ for dette systemet.

Løsning:
Vi finner Z ved å summere over alle mulige tilstander for systemet:

$$Z = \sum_i e^{-\epsilon_i/kT} = e^{-(u+v)/kT} + e^{-(2v)/kT} + e^{-(u+v)/kT} = 2e^{-(u+v)/kT} + e^{-(2v)/kT} \tag{29}$$

(c) Finn Helmholtz frie energi, $F(T, V, N_A = 2, N_B = 1)$ for dette systemet.

Løsning:
Vi finner F fra $F = -kt \ln Z$:

$$F = -kT \ln Z = -kT \ln \left(2e^{-(u+v)/kT} + e^{-(2v)/kT} \right) . \tag{30}$$

La oss nå se på et endimensjonalt system med $N_A = N_B = N/2$, hvor $\epsilon_{AA} = \epsilon_{BB} < \epsilon_{AB}$, og N er stor.

(d) Hva blir F i likevekt når $T = 0$? (Hint: Du behøver ikke finne det eksakte uttrykket for F for å kunne svare på denne oppgaven).

Løsning:
I likevekt er F minimal. Siden $F = E - TS$ vil E være minmal når $T = 0$. Hvordan kan E bli liten i dette tilfellet? Vi må ha minst mulig av ϵ_{AB}. Det får vi når alle A er sammen og alle B er sammen - altså når overflaten mellom A og B blir minst mulig. Da er det kun ett sted hvor vi får ϵ_{AB}, mens alle de andre blir $\epsilon_{AA} = \epsilon_{BB}$. Helmholtz fri energi blir da $F = E(T = 0) = (N_A - 1)\epsilon_{AA} + \epsilon_{AB} + (N_B - 1)\epsilon_{BB}$.

Vi skal nå utvikle en numerisk modell og så en teoretisk modell for dette systemet i to dimensjoner. En tilstand for systemet beskrives av en matrise m_{ij}, hvor hvert element i matrisen kan ha verdien 1 (som svarer til at elementet er av typen A) eller verdien -1 (som svarer til at elementet er av typen B). Husk at antall A-atomer, N_A, og antall B-atomer, N_B, ikke endrer seg.

(e) Skisser en algoritme for en funksjon `randomstate(NA,NB,M)` som lager en tilfeldig $M \times M$ matrise med $N = M^2$ elementer, hvor `NA` (N_A) elementer har verdi $+1$ (er av type A) og `NB` ($N_B = N - N_A$) elementer har verdi -1 (er av type B).

Løsning:

```
def randomstate(NA,NB,M):
    m = zeros((M,M))
    index = permutation(M*M)
    ix,iy = unravel_index(index,(M,M))
    j = range(NA)
    m[ix[j],iy[j]] = 1
    j = range(NA,NA+NA)
    m[ix[j],iy[j]] = -1
    return m
```

Anta at du har oppgitt en funksjon `energy(m,EAA,EAB,EBB)` som returnerer energien som svarer til tilstanden gitt av matrisen `m`, hvor `EAA`, `EAB` og `EBB` er henholdsvis ϵ_{AA}, ϵ_{AB} og ϵ_{BB}.

(f) Skisser et program som lager 10000 tilfeldige tilstander og bruker dette til å finne en tilnærmet verdi for partisjonsfunksjonen og energien til systemet.

Løsning:

```
# Python
Z = 0.0
E = 0.0
EAA =
EBB =
EAB =
kT = ...
for i in range(10000):
  m = rndstate()
  en = energy(m,EAA,EAB,EBB)
  ee = exp(-en/kT)
  Z = Z + ee
  E = E + en*ee
print "Z = ",Z
print "<E> = ",E/Z
```

Vi skal nå studere en forenklet modell for det to-dimensjonale systemet. Vi antar at $\epsilon_{AA} = \epsilon_{BB} = 0$ og at $\epsilon_{AB} = \epsilon$. Energien til systemet er da tilnærmet lik

$$E = zN\epsilon\, x(1-x)\ ,\ x = (N_A/N)\ . \tag{31}$$

Vi antar at det eneste bidraget til entropien til systemet kommer fra blandingsentropien for systemet.

(g) Vis at entropien til en krystall med N_A atomer av typen A og N_B atomer av typen B tilnærmet er lik

$$S = -Nk\left[x\ln x + (1-x)\ln(1-x)\right]\ . \tag{32}$$

Løsning:
Vi finner entropien til systemet ved å se på antall måter systemet kan organiseres på. Hvis vi har N_A av type A og N_B vav type B som skal plasseres på $N = N_A + N_B$ plasser er antallet måter dette kan gjøres $\Omega = N!/(N_A!N_B!)$ slik at entropien til systemet er

$$S = k\ln\Omega = k\left(\ln N! - \ln N_A! - \ln(N-N_A)!\right)\ . \tag{33}$$

Vi bruker Stirlings tilnærming og finner:

$$S/k = N\ln N - N - N_A\ln N_A + N_A - (N-N_A)\ln(N-N_A) + (N-N_A)\ , \tag{34}$$

hvor vi nå setter inn at $N_A = xN$ og $N - N_A = (1-x)N$:

$$\begin{aligned} S/k &= N\ln N - Nx\ln Nx - (1-x)\ln N(1-x) && (35)\\ &= N\ln N - (Nx + (1-x)N)\ln N - Nx\ln x - N(1-x)\ln(1-x)\ , && (36)\end{aligned}$$

som gir

$$S/k = -N\left(x\ln x + (1-x)\ln(1-x)\right)\ . \tag{37}$$

(h) Skriv et program som plotter Helmholtz frie energi, $F(x)$, som funksjon av x for en gitt temperatur T.

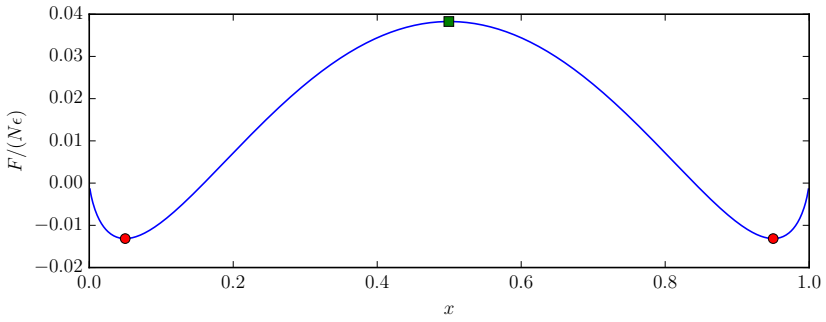
Løsning:
Vi vet at $F = E - TS$*, som her blir*

$$F = zN\epsilon x(1-x) + NkT\left(x\ln x + (1-x)\ln(1-x)\right) \ , \tag{38}$$

hvor z *er et tall. (Dette er vanligvis antall naboer, altså* $z = 4$ *i to dimensjoner). Vi plotter dette direkte*

```
# Python
z = ...
epsilon = ...
kT = ...
x = linspace(0.0,1.0,1000)
F_div_N = z*epsilon*x*(1-x) + kT*(x*log(x)+ (1-x)*log(x))
plot(x,F_div_N)
xlabel('x'),ylabel('F/N')
show()
```

Figur 3 viser Helmholtz frie energi, $F(x)$, for en gitt temperatur T. Minimum for $F(x)$ ligger her ved $x = 0.05$ og $x = 0.95$.



Figur 3: Plot av $F(x)/(N\epsilon_{AB})$. Minimum av F inntreffer for $x = 0.05$ og $x = 0.95$, mens maksimum inntreffer for $x = 0.5$.

(i) Vi ser på et system hvor $N_A = N_B = N/2$. Anne sier at i likevekt er A og B plassert på annenhver posisjon i hele systemet, som på et sjakkbrett, fordi dette svarer til $x = 0.5$. Anton sier at Anne tar feil. Han sier at Helmholtz energi er minimal hvis halve systemet har $x = 0.05$ og den andre halvdelen har $x = 0.95$. For et slikt system er også $N_A = N_B = N/2$ sier Anton, men F er mindre enn hvis $x = 0.5$ uniformt i hele i systemet. Hvem har rett? Begrunn svaret ditt.

Løsning:
Anton har rett. Hvis vi lager et system hvor halvparten er ved $x = 0.05$ *og den andre halvdelen er ved* $x = 0.95$*, blir midlere* x*-verdi:* $\bar{x} = (0.05 + 0.95)/2 = 0.5$*. Men Helmholtz fri energi for den ene halvdelen med* $x = 0.05$ *blir* $F_1 = f(x = 0.05)\, N/2$ *og Helmholtz fri energi for den andre halvdelen blir* $F_2 = f(x = 0.95)\, N/2$*. Den totale Helmholtz frie energi blir derfor* $F_{TOT} = F_1 + F_2 + F_3$ *hvor* F_3 *er Helmholtz frie energi for den delen hvor del 1 og del 2 møtes. Men i et stort system blir denne overflaten liten sammenliknet med resten av systemet*

og vi kan derfor anta at $F_3 \ll F_1, F_2$. Derm er $F_{TOT} \simeq F_1 + F_2 = N/2(f(x = 0.05) + f(x = 0.95)) = Nf(x = 0.05)$. Den siste overgangen kommer av at $f(x = 0.05) = f(x = 0.95)$. Vi ser at dette blir lavere enn $Nf(x = 0.5)$ som svarer til Anne sitt forslag.

Oppgave 4

Helmholtz frie energi for en ideell, monoatomisk gass med N atomer er

$$F = -kT \ln \frac{Z_1^N}{N!} , \tag{39}$$

hvor partisjonsfunksjonen for ett atom er

$$Z_1 = n_Q(T)\, V . \tag{40}$$

Her er V volumet til gassen, N er antallet atomer i gassen, T er temperaturen og $n_Q(T) = \left(2\pi mkT/h^2\right)^{3/2}$.

(a) Vis at det kjemiske potensialet til gassen er

$$\mu = kT \ln \frac{n}{n_Q} , \tag{41}$$

hvor $n = N/V$.

Anta at atomene i gassen blir påvirket av en kraft langs x-aksen slik at energien til et atom er $\epsilon(x) = \kappa x^2/2$. Du kan fremdeles anta at gassen er tynn slik at atomene ikke vekselvirker med hverandre og du kan anta at temperaturen er konstant i hele gassen.

(b) Finn Helmholtz frie energi, $F(x; T, V, N)$, for en del av gassen med volum V, temperatur T, og antall atomer N ved posisjonen x.

Løsning:
Vi finner Helmholtz fri energi som Helmholtz fri energi for gassen uten potensialet pluss energien gassen med N atomer ved posisjonen x har i det ytre potensialet:

$$F_{TOT} = F_g + N\, e(x) = -kT \ln \frac{Z_1^N}{N!} + N\, \kappa x^2/2 . \tag{42}$$

(c) Finn det kjemiske potensialet til gassen som funksjon av x.

Løsning:
Vi kan finne det kjemiske potensialet ved å summere det indre og det ytre potensialet, eller ved å derivere Helmholtz frie energi med hensyn på N. I begge tilfeller får vi:

$$\mu_{TOT} = \mu_g + \kappa x^2/2 . \tag{43}$$

(d) Finn tettheten til gassen som funksjon av x når gassen er i diffusiv likevekt ved konstant temperatur T.

Løsning:
Vi finner tettheten $n(x)$ ved å ta utgangspunkt at i likevekt må det kjemiske potensialet være det samme overalt. Det betyr at det kjemiske potensialet må være det samme i $x = 0$ som i x. Det gir

$$\mu(x=0) = \mu_0 = kT \ln n(0)/n_Q(T) = \mu(x) = kT \ln n(x)/n_Q(T) + \kappa x^2/2 \ . \quad (44)$$

Vi deler på kT og får:

$$\ln n(0)/n_Q(T) = \ln n(x)/n_Q(T) + \kappa x^2/(2kT) \ . \quad (45)$$

Vi trekker $n_Q(T)$ ut på begge sider:

$$\ln n(0) - \ln n_Q(T) = \ln n(x) - \ln n_Q(T) + \kappa x^2/(2kT) \ , \quad (46)$$

$$\ln n(0) = \ln n(x) + \kappa x^2/(2kT) \ , \quad (47)$$

som gir

$$\ln n(x) = \ln n(0) - \kappa x^2/(2kT) \ . \quad (48)$$

Vi tar eksponesialfunksjonen på begge sider og får

$$n(x) = n(0) e^{-\kappa x^2/(2kT)} \ . \quad (49)$$