# 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<br>Rottman: Matematisk formelsamling<br>Øgrim og Lian: Fysiske størrelser og enheter<br>To A4 ark med notater<br>(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

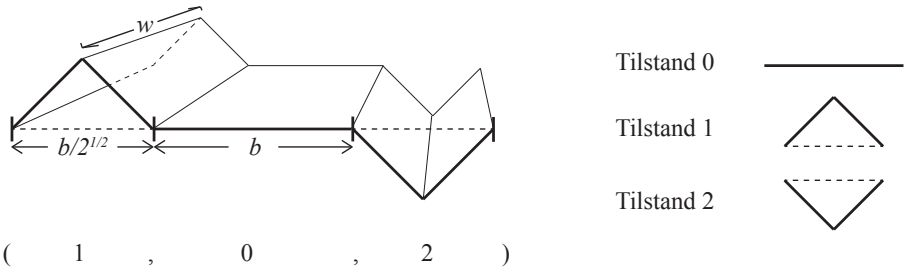
**(a)** For et elektron i en to-dimensjonal relativistisk elektron-gass er energitilstandene gitt ved $\epsilon(n_x, n_y) = a\left(n_x^2 + n_y^2\right)^{1/2}$ for $n_x, n_Y = 0, 1, 2, \ldots$. Vis at tilstandstettheten er $D(\epsilon) = \pi\epsilon/a^2$.

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

## 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 $\epsilon_0$ og lengde $b_0 = b$ (tilstand 0)
- Elementet kan være foldet oppover med energi $\epsilon_0$ og lengde $b_1 = b/\sqrt{2} = b\,c$ (tilstand 1)
- Elementet kan være foldet nedover med energi $\epsilon_0$ 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:

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

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:

$$L = N_0 b_0 + N_1 b_1 + N_2 b_1 = N_0 b_0 + (N - N_0) b_1 = N_0 b + (N - N_0) bc \ , \tag{2}$$

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?

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

## 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

$$\Omega(N, N_0) = \frac{N!}{N_0!(N - N_0)!} 2^{N - N_0} \ . \tag{3}$$

**(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.

**(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

$$TdS = dE - \sigma\, dA \ , \tag{4}$$

hvor $\sigma$ er den ytre overflatespenningen som virker på enden av membranen.

**(f)** Vis at vi kan finne $\sigma$ ved:

$$\sigma = -T \frac{1}{wb(1 - c)} \left( \frac{\partial S}{\partial N_0} \right)_{E,N} \ . \tag{5}$$

**(g)** Vis at tilstandslikningen for membranen er:

$$\sigma \simeq -\frac{kT}{wb(1 - c)} \ln \frac{(N - N_0)}{(2N_0)} \ . \tag{6}$$

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

# 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 $\epsilon_{AA}$ til den totale energien til systemet, to atomer av typen A og B bidrar med en energi $\epsilon_{AB}$, og to atomer av typen B bidrar med en energi $\epsilon_{BB}$. 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 $E((A, A, B, A)) = \epsilon_{AA} + 2\epsilon_{AB} = u + 2v$.




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.

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

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

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).

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).

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 $\epsilon_{AA}$, $\epsilon_{AB}$ og $\epsilon_{BB}$.

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

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

$$E = zN\epsilon\, x(1-x)\ ,\ x = (N_A/N)\ . \tag{7}$$

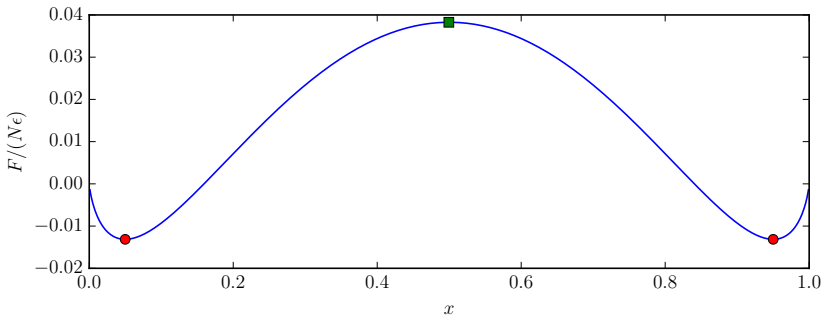
Vi antar at det eneste bidraget til entropien til systemet kommer fra blandingsentropien for systemet.

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

$$S = -Nk\left[x\ln x + (1-x)\ln(1-x)\right]\ . \tag{8}$$

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

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.

# Oppgave 4

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

$$F = -kT\,\ln\frac{Z_1^N}{N!}\ , \tag{9}$$

hvor partisjonsfunksjonen for ett atom er

$$Z_1 = n_Q(T)\,V\ . \tag{10}$$

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

$$\mu = kT \ln \frac{n}{n_Q} , \tag{11}$$

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 $x$.

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

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