

# ZÁKLADY ŠTATISTICKEJ MECHANIKY I - NEINTERAGUJÚCE ČASTICE

## Fenomenologická termodynamika (F)

1. Odvodte  $\delta w = pdV$ .
2. Odvodte

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \frac{C_v}{T}$$

3. Ako sa mení entropia ideálneho plynu pri izotermickej expanzii z objemu  $V_1$  na  $V_2$ ?
4. Vypočítajte minimálnu prácu potrebnú na oddelenie zmesi  $N_A$  molekúl plynu A a  $N_B$  molekúl plynu B. Z tohoto odhadnite prácu potrebnú na odsolenie  $1\text{m}^3$  typickej morskej vody (600 mM). Môžeme predpokladať, že rozpúšťacie teplo je malé.
5. Odvodte vzťah pre  $C_p - C_v$  pre ideálny plyn.
6. Majme 2 rovnaké telesá, každé s tepelnou kapacitou  $C_v$ . Aká je pravdepodobnosť, že teplo sa spontánne rozloží tak, že teplota jedného je  $T - \delta T$  a druhého  $T + \delta T$ ?

## Energetické hladiny (E)

1. Majme systém so 7 energetickými hladinami s energiami  $E_i = i \epsilon$ ,  $i \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ . Koľkými možnosťami vieme v tomto systéme distribuovať 4 rozlíšiteľné častice s energiou  $6\epsilon$ ? Ako sa toto číslo zmení, ak počet hladín zmeníme na 4 ( $i \in \{0, 2, 4, 6\}$ )?
2. Odvodte vzťah pre zmiešavaciu entropiu z kanonickej partičnej funkcie. Hint:

$$\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_{V,N} = -S$$

$$A = -k_B T \log Q(N, V, T)$$

3. Odvodte vzťah pre  $C_v$  a načrtnite závislosť tepelnej kapacity na teplote pre nasledujúce systémy:
  - (a) 2-hladinový systém s energiami  $E_0 = 0$ ,  $E_1 = \epsilon$ .
  - (b) 2-hladinový systém s energiami  $E_0 = 0$ ,  $E_1 = \epsilon$  a degeneráciami stavov  $g_0$  a  $g_1$ .
  - (c) Kvantový harmonický oscilátor ( $E_i = \epsilon(1/2 + i)$ ).
4. Pri kryštalizácii oxidu uhoľnatého (CO) obvykle nedostaneme dokonalú periodicitu. Atómy C a O jednej molekuly sa v mriežke náhodne striedajú.
  - (a) Aký je rozdiel kryštalizačných entalpií (tepiel) pre tieto 2 kryštály?
  - (b) Majme molekulu kyslíka  $O_2$  zloženú z 2 rôznych izotopov kyslíka. V kryštáli sú tieto izotopy usporiadané náhodne. Porovnajme sublimačné takéhoto kryštálu s kryštálom obsahujúcim len 1 izotop.

## Spojité hustoty stavov (S)

1. Odvodte vzťah pre hustotu stavov pre kvantovú časticu v krabici. Koľko stavov a koľko častíc ideálneho plynu nájdeme v nádobe tvare kocky objemu  $1\text{m}^3$  pri normálnych podmienkach?
2. Koľkými možnosťami vieme rozdeliť  $N$  nerozlíšiteľných častíc do 2 nádob s objemami  $V_1$  a  $V_2$ ? Ukážte, že najpravdepodobnejší stav je  $N_1/V_1 = N_2/V_2$ .

## Neinteragujúce častice (N)

1. *Intersticiálne poruchy.* Majme kryštál s  $N$  neinteragujúcimi mriežkovými bodmi. Častice sa okrem týchto môžu nachádzať v  $N$  nezávislých bodoch, tzv. intersticiálnych poruchách, ktorých energia je  $\epsilon$ . Aká je očakávaná (stredná) hodnota počtu častíc v intersticiálnych poruchách pri teplote  $T$ , z celkového počtu  $N$  častíc v kryštáli? Hint: nahraďte priemernú hodnotu najviac pravdepodobnou.

2. *Adsorpcia plynu na povrch pevnej látky.* Na povrchu pevnej látky sa nachádza  $M$  miest, na každé sa môže adsorbovať najviac 1 molekula plynu, pričom jej adsorpcia je spojená s uvoľnením energie  $\epsilon$ . Nerozlíšiteľné molekuly okolitého plynu sú v rovnováhe s adsorbovaným, teplota systému je  $T$ .
- Kolko z  $M$  miest je zaplnených pri tlaku  $p_2$ , ak pri tlaku  $p_1$  je zaplnených  $N_1$  miest?
  - Odvoďte vzťah pre kanonickú partičnú funkciu  $Q(N, M, T)$  ak je zaplnených  $N$  z  $M$  väzobných miest.
  - Odvoďte vzťah pre grandkanonickú partičnú funkciu pri chemickom potenciáli 1 častice  $\mu$ ,  $\Xi(\mu, M, T)$ . Povrchový tlak  $\Pi$  a povrch  $A$  sú ekvivalentné objemovému tlaku  $p$  a objemu  $V$  pre 3-rozmerný systém, strednú hodnotu pomeru zaplnených miest ku  $M$  označte  $f$ . Odvoďte 2-rozmernú stavovú rovnicu  $F(\Pi, f, T)$ .
3. *Kryštál bez krátkodosahových interakcií.* Majme paramagnetický kryštál zložený z  $N$  iónov, každý z nich nesú magnetický moment  $m$  a spin  $1/2$ , v magnetickom poli hodnoty  $B$ . Ióny sú rozlíšiteľné a navzájom neinteragujú.
- Napíšte vzťah pre magnetický moment ( $M$ ) a energiu ( $E$ ) v závislosti od počtu iónov so spinom paralelným ( $N_+$ ) a antiparalelným ( $N_-$ ) k magnetickému poľu.
  - Ako závisí počet mikrostavov od energie?
  - Vypočítajte závislosť teploty na energii. Prečo je teplota záporná pre isté hodnoty  $E$ ?
  - Vypočítajte kanonickú partičnú funkciu, z nej voľnú energiu  $A$ , vnútornú energiu  $E$  a tepelnú kapacitu  $C_v$ .