FYSA2041 kevät 2024

Harjoitus 4

Palauta ratkaisu ke 7.2.2024 klo 8:15 mennessä, jos et osallistu demotilaisuuteen. Palautus joko Moodleen, Matin työhuoneelle, sähköpostilla Matille, tai suoraan Matille viikon ensimmäisen demotilaisuuden alussa.

Demo 4

Return solutions by Wednesday 7.2.2024, if you are not attending the demo session. Returns to Moodle, Matti's office, email to Matti, or directly to Matti before the first demo session of the week.

Questions in English are in the end of this sheet.

1. (a) Osoita, että van der Waalsin tilayhtälöstä (a ja b ovat vakioita)

$$\left(P + a\frac{N^2}{V^2}\right)(V - Nb) = Nk_BT \ , \tag{1}$$

seuraa, että

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T = 0 \ , \tag{2}$$

joten C_V on pelkästään lämpötilan funktio. Voi käyttää apuna yhtälöä

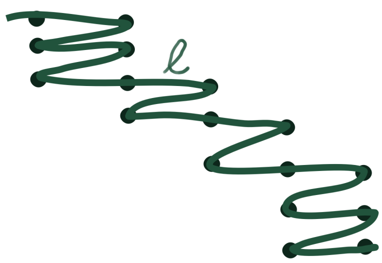
$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_V \ . \tag{3}$$

(b) Osoita, että partiofunktiosta

$$Z = \left(\frac{V - Nb}{N}\right)^N \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \exp\left(\frac{aN^2}{Vk_BT}\right),$$

seuraa van der Waalsin tilayhtälö. Laske aineen sisäenergia.

2. Käytetään seuraavanlaista kuminauhan mallia mikrokanonisessa joukossa. Kuminauhan pituus on L ja siinä on N samanlaista ℓ-mittaista palasta, jotka voivat osoittaa toisistaan riippumatta oikealle tai vasemmalle (ks. kuva). Oikealle osoittavia on n_R ja vasemmalle n_L kappaletta, $N = n_R + n_L$ ja $L = (n_R - n_L)\ell$. Oletetaan, että $n_R \gg 1$ ja $n_L \gg 1$.



Kuminauhan sisäenergia on termodynamiikan 1. pääsäännön mukaan (N on vakio)

$$dU = TdS + \mathcal{F}dL \ , \tag{4}$$

missä $\mathcal{F}$ on kuminauhan venyttämiseen tarvittava voima. Tästä seuraa voimalle lauseke

$$\mathcal{F} = -T\left(\frac{\partial S}{\partial L}\right)_U \ . \tag{5}$$

(a) Jos kuminauhan paloja voi järjestellä Ω tavalla, niin sen entropia on $S = k_B \ln \Omega$. Osoita, että

$$S = k_B \left[N \ln N - n_R \ln n_R - (N - n_R) \ln(N - n_R) \right] \ . \tag{6}$$

(b) Osoita, että jos $L \ll N\ell$, niin kuminauhan venyttämiseen tarvittava voima on Hooken lain muotoa,

$$\mathcal{F} = \frac{k_B T}{N\ell^2} \, L \ , \tag{7}$$

eli kuminauhan kimmokerroin riippuu lämpötilasta. Mitä tapahtuu, jos ripustat kuminauhaan painon ja lämmität kuminauhaa?

3. Tarkastellaan joukkoa yksiulotteisia klassisia harmonisia oskillaattoreita, joiden Hamiltonin funktio on (liikemäärät $\mathbf{p} = (p_1, p_2, ..., p_N)$ ja paikat $\mathbf{q} = (q_1, q_2, ..., q_N)$)

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 \right) \ , \tag{8}$$

missä oskillaattoreiden taajuus on ω ja massa m.

(a) Osoita, että $Z = Z_1^N$, missä

$$Z_1 = \frac{k_B T}{\hbar\omega} \ . \tag{9}$$

(b) Osoita, että

$$F = -N k_B T \ln \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right) \quad , \ U = N k_B T \tag{10}$$

$$S = N k_B \left[1 + \ln \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right) \right] \quad , \ \mu = -k_B T \ln \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right) \ . \tag{11}$$

(c) Laske systeemin ominaislämpö ja paine.

4. Atomien liike kaksiatomisessa molekyylissä on melko tarkasti harmoninen oskillaattori. Yksiulotteisen harmonisen oskillaattorin energiatilat (mikrotilat) ovat

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad , \ n = 0, 1, 2, ... \ . \tag{12}$$

Johda tämän perusteella oskillaattorin

(a) Z (vihje: geometrinen sarja, älä yritä muuntaa summaa integraaliksi!)

(b) U ja F (jos $k_B T \gg \hbar\omega$, niin onko F sama kuin edellisessä tehtävässä?)

(c) systeemin ominaislämpö.

FYSA2041 spring 2024

1. (a) Show that the van der Waals equation of state (a and b are constants)

$$\left(P + a\frac{N^2}{V^2}\right)(V - Nb) = Nk_B T \ , \tag{13}$$

leads to

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T = 0 \ , \tag{14}$$

meaning C_V is only a function of temperature. You can use the relation

$$\left(\frac{\partial C_V}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_V \ . \tag{15}$$

(b) Show that the partition function

$$Z = \left(\frac{V - Nb}{N}\right)^N \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3N}{2}} \exp\left(\frac{aN^2}{Vk_B T}\right) , \tag{16}$$

gives the van der Waals equation of state. Calculate the internal energy.

2. Let's use the following microcanonical model for a rubber band. The band length is L, and it's made of N similar length ℓ segments, which may point independently either to left or right (see figure below). There are n_R segments pointing right and n_L pointing left, $N = n_R + n_L$ and $L = (n_R - n_L)\ell$. We'll assume that $n_R \gg 1$ and $n_L \gg 1$.

According to the 1. law of thermodynamics (N is kept constant),

$$dU = TdS + \mathcal{F}dL \ , \tag{17}$$

where $\mathcal{F}$ is the force needed to stretch the rubber band. This gives

$$\mathcal{F} = -T\left(\frac{\partial S}{\partial L}\right)_U \ . \tag{18}$$

(a) If the band segments can be arranged Ω ways, the entropy of the band is $S = k_B \ln \Omega$. Show, that

$$S = k_B \left[N \ln N - n_R \ln n_R - (N - n_R)\ln(N - n_R)\right] \ . \tag{19}$$

(b) Show, that if $L \ll N\ell$, then the force needed to stretch the band has the form of Hooke's law,

$$\mathcal{F} = \frac{k_B T}{N\ell^2} L \ , \tag{20}$$

so that the elastic coefficient of the rubber band depends on temperature. What happens if you hang a weight on the band and heat the band?

3. Let's examine a collection of 1D classical harmonic oscillators with Hamiltonian function (momenta $\mathbf{p} = (p_1, p_2, ..., p_N)$ and positions $\mathbf{q} = (q_1, q_2, ..., q_N)$)

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 \right) \ , \tag{21}$$

where the oscillator frequencies are ω and mass m.

(a) Show that $Z = Z_1^N$, where

$$Z_1 = \frac{k_B T}{\hbar\omega} \ . \tag{22}$$

(b) Show that

$$F = -Nk_B T \ln\left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right) \ , \ U = Nk_B T \tag{23}$$

$$S = Nk_B \left[1 + \ln\left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right)\right] \ , \ \mu = -k_B T \ln\left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right) \ . \tag{24}$$

(c) Calculate the specific heat and pressure of the system.

4. Atomic motion in a two-atom molecule is well approximated by a harmonic oscillator. The energy states (microstates) of a 1D harmonic oscillator are

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad , \ n = 0, 1, 2, ... \ . \tag{25}$$

Find

- Z (hint: geometric series, don't try to convert the sum to an integral!)
- U and F (does F give the classical result in the previous question in the case $k_B T \gg \hbar\omega$?)
- specific heat (compare with the classical result)