

Termofysik HT 2006 Räknevöning 3 (behandlas To 28.9 kl. 16:15)

1. I ett monoatomiskt kristallint fast ämne kan varje atom ockupera antingen en reguljär gitterplats eller en interstitiell plats. Energin för en atom på en interstitiell plats överstiger energin för en atom vid en gitterplats med ϵ . Anta att antalet interstitiella platser är lika med antalet gitterplatser, samt att det också är lika med antalet atomer N .

(a) Beräkna entropin för kristallen i det tillstånd, där exakt n av N atomer är vid interstitiella platser.

(b) Vad är temperaturen för kristallen i detta tillstånd, om kristallen är i termisk jämvikt?

(c) Om $\epsilon = 1 \text{ eV}$ och kristalltemperaturen är 300 K , vad är andelen atomer vid interstitiella platser?

2. Anta att $\Omega(E, V, N) = CE^{3N/2}$, där C är en konstant och N är antalet partiklar.

(a) Härled sambandet mellan temperatur och inre energi.

(b) Härled att $(\frac{\partial^2 S}{\partial E^2})_{N,V}$ är negativt.

(c) Denna form av Ω (som är obroende av V) gäller för en idealgas. Diskutera varför resultatet i (a) motiverar den allmänna definitionen av temperaturen.

3. Betrakta ett system med två energinivåer E_0 och E_1 i en omgivning med temperaturen T .

(a) Konstruera systemets partitionsfunktion Z och beräkna systemets energi som funktion av dess temperatur.

(b) Hur beter sig entropin då $T \rightarrow 0$?

Degenerations-nivåerna antas här vara 1.

VÄND !

4. Hela uttrycket för en vakanskoncentration i en kristall är

$$\frac{n}{N} = e^{S_v^f/k} e^{-E_v^f/k_B T}$$

Man kan göra motsvarande härledning för extra atomer i en kristall, s.k. interstitiella, och erhålla

$$\frac{n}{N} = e^{S_i^f/k} e^{-E_i^f/k_B T}$$

För vakanser i koppar är $E_v^f = 1.27$ eV och $S_v^f = 2.3k_B$ (experimentella värden), samt $E_i^f = 3.2$ eV och $S_i^f = 15k_B$ (datorsimuleringar [Nordlund and Averbäck, Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 4201]). Vad är förhållandet mellan antalet vakanser och interstitiella atomer i koppar

- (a) vid rumstemperatur, 300 K
- (b) vid 900 K?
- (c) Vid vilken temperatur börjar antalet interstitiella atomer dominera i koppar?
- (d) Är det realistiskt att nå sådana förhållanden?

5. En kvantmekanisk harmonisk oskillator har energinivåerna

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

- (a) Bestäm dess partitionsfunktion och dess energi om omgivningen har temperaturen T .
- (b) Om $\hbar\omega = 0.3$ eV, vad är skillnaden i de relativa populationerna för det första exciterade tillståndet $n = 1$ och grundtillståndet $n = 0$ då gasen är i termisk jämvikt vid $T = 1000$ K?