

Fizikai kémia 3: Statisztikus termodinamika 1. gyakorlat

- Hányféleképpen lehet szétosztani három egyforma üveggolyót négy különböző – A, B, C és D-vel jelölt – dobozban? Írjuk fel az összes lehetőséget!
- Számítsuk ki, hogy 30 energiakvantumot hányféleképpen lehet szétosztani 30, illetve 39 oszcillátor között egy Einstein kristályban!
- Számítsuk ki, hogy 10^{20} energiakvantumot hányféleképpen lehet szétosztani egy 1,0 mol atomból álló Einstein kristályban!
- Számítsuk ki a multiplicitását annak az Einstein kristálynak, mely 2000 atomból áll, összes belső energiája $114,2 E_h$ (hartree) és az oszcillátorok sajátfrekvenciája $1,179 \cdot 10^{15}$ Hz! Adjuk meg a rendszer moláris entrópiáját is!
- Egy Einstein kristály moláris belső energiája 136 kJ/mol. A rendszer alapállapotához tartozó moláris belső energiája 104 kJ/mol.
 - Számítsuk ki a rendszer moláris entrópiáját!
 - Számítsuk ki az oszcillátorok sajátfrekvenciáját!
 - Mekkora a rendszer állandó térfogaton vett hőkapacitása 25,0 °C-on?
- Állandó térfogatú, izolált rendszerünket mikrokanonikus sokaságban írjuk le. A rendszert alkotó 30 molekula tekinthető két állapotúnak, az alap- és gerjesztett állapotok energiakülönbsége $24 E_h$.
 - A molekulák hány százaléka van gerjesztett állapotban, ha a rendszer teljes belső energiája $408 E_h$?
 - Mennyi a lehetséges mikroállapotok száma?
 - Mennyi a rendszer moláris entrópiája?
- Milyen arányban állnak egymással a kétállapotú rendszer egyes állapotainak betöltési számai, ha a hőmérséklet végtelen?
- Mennyi a kétállapotú rendszer hőmérséklete, ha a gerjesztett állapot betöltöttsége fele az alsóénak? A két állapot energiakülönbsége 300 cm^{-1} -nek felel meg.

Képletek:

$$S(E, V, N) = k \ln \Omega(E, V, N) \quad P_{a+b}^{(a,b)} = \frac{(a+b)!}{a!b!} \quad \Omega \cong \frac{(3N + \frac{U}{\hbar\omega_0})!}{(3N)!(\frac{U}{\hbar\omega_0})!} \quad N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$s = 3R \ln \left(1 + \frac{u}{u_0}\right) + 3R \frac{u}{u_0} \ln \left(1 + \frac{u_0}{u}\right) \quad C_{a,b} = \frac{a!}{b!(a-b)!} \quad \Omega = \frac{N!}{\frac{U}{\varepsilon}!(N - \frac{U}{\varepsilon})!} \quad u_0 = 3N_A \hbar\omega_0$$

$$S = \left(\frac{U}{\varepsilon} - N\right) k \ln \left(1 - \frac{U}{N\varepsilon}\right) - \frac{U}{\varepsilon} k \ln \frac{U}{N\varepsilon} \quad c_V = 3k \left(\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_0/kT}}{(e^{\hbar\omega_0/kT} - 1)^2} \quad 1 E_h = 4,36 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$c_V = \frac{N_A \varepsilon^2}{kT^2} \frac{1}{(e^{\varepsilon/2kT} + e^{-\varepsilon/2kT})^2} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad \ln(N!) \cong N \ln N - N$$

$$k = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \quad \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V,N} = \frac{1}{T} \quad \tilde{\nu} = 1/\lambda \quad \frac{E}{\hbar c} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$