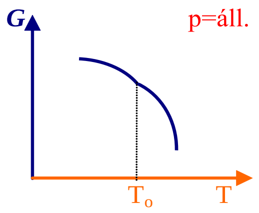
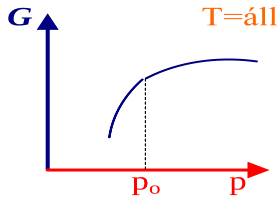
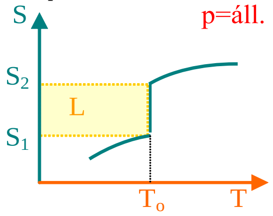
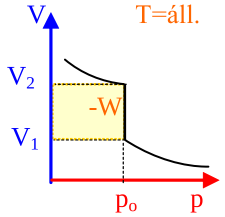
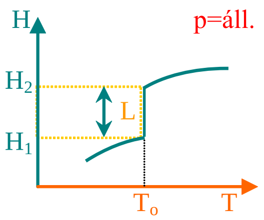
ELTE III.Fizika BSC
2014/2015 I.félév
Kondenzált anyag fizika
2. GYAKORLAT
(2014. Szeptember 16.)

Második deriváltak, kompresszibilitás (κ_T), fajhő (c_v), hőtágulás (α_p).

I. Fázisátmenetben G-folytonos; E_i , S_i , V_i , N_i, H_i , c_i ugrik!

	
$-(\partial G/\partial T)_p =$ 	$-(\partial G/\partial p)_T =$ 
	***A második deriváltak:*** $dG = -SdT + Vdp$ $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_T = -S \; ; \; \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V$ $-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p\, \partial T}\right) = \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$

Az állapotjelzők:

a) ***Az állandó nyomáson vett fajhő (c_p),***

$$c_p\, m = \left(\frac{\partial Q}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_p$$

b) ***az izobár hőtágulási együttható (α_p):***

$$\alpha_p V = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p\, \partial T}\right) = -\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

c) ***az izoterm kompresszibilitás (κ_T):***

$$\kappa_T V = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$$

Összefüggések az állapotjelzők között (pl.): $C_p - C_V = \frac{TV\alpha^2}{\kappa_T}$ és $\frac{\kappa_T}{\kappa_S} = \frac{C_V}{C_p}$

II.

A) Claussius–Clapeyron egyenlet:

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{1,2} = \frac{L}{T(V_2 - V_1)} ;$$

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{víz-jég} = -1.3*10^{2}\ {atm}/{C^o} ; \left(\frac{dp}{dT}\right)_{víz-göz} = 3.8*10^{-2}\ {atm}/{C^o}$$

B) Arrhenius formula

$$p = p_o e^{-\frac{Q}{RT}} \quad \text{(n=1)}$$

C) A ***forráshő*** hőmérsékletfüggése esetén:

$$L = L_f + a\,(T - T_f)$$

$$\frac{dp}{p} = \frac{dT}{T^2}\frac{L_o + aT}{nR} ;\ \ln p = -\frac{L_o}{nRT} + \frac{a}{nR}\ln T + konst$$

$$p = AT^{\alpha} e^{-\frac{L_o}{nRT}}$$

$$\alpha = \frac{a}{nR}$$

D) Kirchoff összefüggés (lineáris közelítésben, dT≈0):

$$L = T_f(S_2 - S_1) ;\ \frac{dL}{dT} \approx T_f\left(\frac{dS_2}{dT} - \frac{dS_1}{dT}\right) = \left(\frac{T_f dS_2}{dT} - \frac{T_f dS_1}{dT}\right) = (c_2 - c_1)m$$

$${a}/{m} = c_2 - c_1 \quad \text{(fajhő különbség).}$$

(n≠1); ***m_v =10 g=0.01kg ; V=10 cm^3; $V_{gőz}$=16 dm^3;***

$Q_f^{100C} = L_f\, m \approx 5.4$ kcal;

c_v=1 kcal/kgC^o; c_g = 0.5 kcal/kgC^o;

$L_f^{80C} = L_f^{100C} + (c_v - c_g)(80-100)m_v = 5.3$ kcal/kg

$\Delta E = Q + W$

$Q_f^{80C} = L_f^{80C}\, m \approx 5.3$ kcal; (ΔE=4.91 kcal; W= -pΔV=-16 l atm= -0.39 kcal)

III. Állapotegyenletek:

- ***Ideális gázok:***

$E^{gáz} = 3/2\, NkT$; $pV = NkT$; $E = 2/3\, pV$

$$\alpha_p = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{T}\,;\ \kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{p}$$

$$\alpha_p = \frac{1}{300\,K} \approx 3*10^{-3}\,K^{-1}\,;\ \kappa_T = \frac{1}{10^5\,Pa} = 10^{-5}\,Pa^{-1}$$

- ***Van der Waals gázok:***

$E = c_v\, m\, T - m^2\, a/V$; $(p + am^2/V^2)\,(V - bm) = (m/M)\, RT$;

Maxwell szerkesztés.

- ***Szilárdanyag állapotegyenlete*** ***(egy mólnyi mennyiségre, n=1):***

$E = BT + D/2\,(V-V_o)^2$: $p = -D\,(V-V_o) + AT$

(A, B, D, V_o) anyagi állandók! (rugalmas anyag)

$$\alpha_p = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \frac{A}{DV}\,;\ \kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{DV}$$

$$\alpha_p^{Na} \approx 7*10^{-5}\,K^{-1}\,;\ \kappa_T^{Na} = 3*10^{-11}\,Pa^{-1}\,;\ \kappa_T^{-1} = 3*10^{10}\,Pa$$

Nagy a nyomás odabenn!!!

$p(T)_{p=áll.} = (DV_o + AT)\, -1/\kappa_T$ ***(T-ben lineáris)***

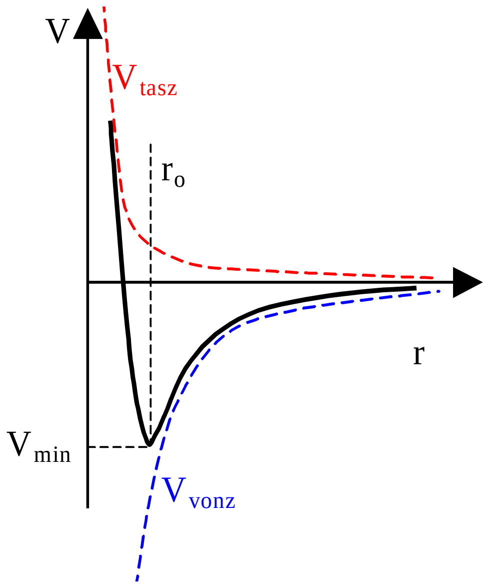
$p(V)_{T=áll.} = p_o - D\,V$ ***(Hooke törvény)*** ***(V-ben lineáris)***

Kevés számú anyagállandó! Pl. nincs C jelű (az ABCD-ből hiányzik).
Van termodinamikai összefüggés az állapotegyenletek között:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p$$

IV.

Párpotenciálok V(r)



Ionos kötés potenciálja:

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\lambda}{r^n} \quad (\alpha = Z\,e^2)$$

Van der Waals kötés potenciálja, Lennard-Jones:

$$V(r) = V_0\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right)$$

Fémek Morse-potenciálja (exponenciális):

$$V(r) = V_0\left(\exp\left(2\alpha\left(1-\frac{r}{\sigma}\right)\right) - 2\exp\left(\alpha\left(1-\frac{r}{\sigma}\right)\right)\right)$$

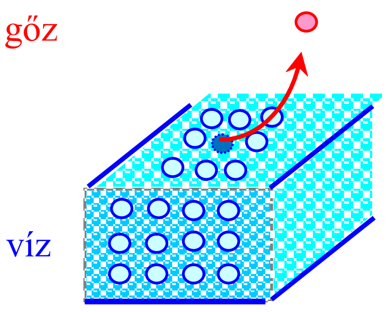
Kohézió U(r)

$$\mathrm{E} = (\mathrm{N}/2)\ \mathrm{U} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} V(r_i - r_j) = \frac{N}{2}\sum_{i} V(r_i)$$

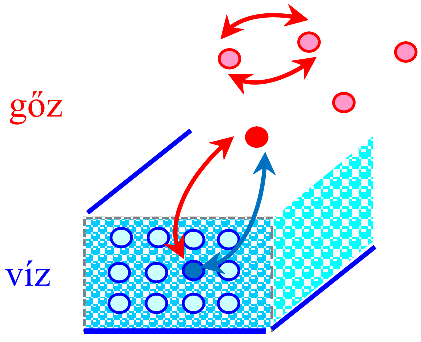
$$i \neq j \qquad\qquad (r_i \neq 0)$$

E belső energia v. ***szerkezeti energia = a pár energiák [½ N (N-1) db] együttese!***
N az *(egyforma)* ***atomok száma.***
E extenzív!

Kohézió



Párpotenciálok



Párpotenciálok - kohézió

Párpotenciál

$$V(r)^{ion} = -\left(\frac{Ze^2}{r}\right) + \left(\frac{\lambda}{r^n}\right)$$

$$V(r_o)^{ion} = -\left(\frac{Ze^2}{r}\right)\left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

$$V^{vonz}(r_o) = n\, V^{tasz}(r_o)$$

$$V_{min} = V(r_o)$$

$$V(r)^{L.J.} = V_o\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right)$$

$$V_{min}^{L.J} = -V_o = V(r_o)$$

$$r_o = \sigma$$

$$V^{vonz}(r_o) = 2\, V^{vonz}(r_o)$$

Kohézió

$$U(r)^{ion} = -A_M\left(\frac{Ze^2}{r}\right) + \left(\frac{\lambda^*}{r^n}\right)$$

$$U_{min}^{ion} = U(r_o) = -A_M\left(\frac{Ze^2}{r}\right)\left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

$$U^{vonz}(R_o) = n\, U^{tasz}(R_o)$$

$$U_{min} = U(R_o)$$

$$U(r)^{V.W.} = V_o\left(A_{12}\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - 2A_6\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right)$$

$$U_{min}^{V.W.} = U(R_o)$$

$$R_o = \sqrt[6]{\frac{A_{12}}{A_6}}\,\sigma$$

$\boldsymbol{A_M}$ Madelung állandó, A_6, A_{12}, …