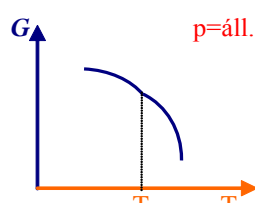
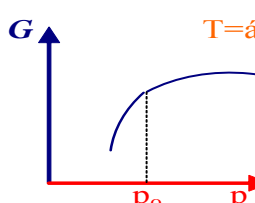
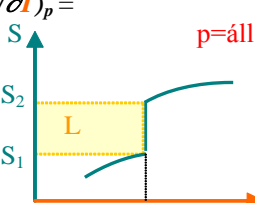
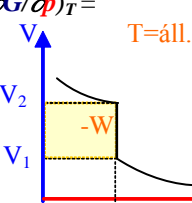
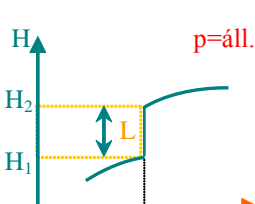


ELTE III.Fizika BSC
2014/2015 I.félév
Kondenzált anyag fizika
 2. GYAKORLAT
 (2014. Szeptember 16.)

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!

 <p style="text-align: center;">$p=\text{áll.}$</p>	 <p style="text-align: center;">$T=\text{áll.}$</p>
$-(\partial G/\partial T)_p =$  <p style="text-align: center;">$p=\text{áll.}$</p>	$-(\partial G/\partial p)_T =$  <p style="text-align: center;">$T=\text{áll.}$</p>
 <p style="text-align: center;">$p=\text{áll.}$</p>	<p>A második deriváltak: $dG = -SdT + Vdp$</p> $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_T = -S ; \quad \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V$ $-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p \partial T}\right) = \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$

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:**

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{1,2} = \frac{L}{T(V_2 - V_1)};$$
$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{\text{víz-jég}} = -1.3 \cdot 10^2 \text{ atm/C}^\circ; \left(\frac{dp}{dT}\right)_{\text{víz-gőz}} = 3.8 \cdot 10^{-2} \text{ atm/C}^\circ$$

B) **Arrhenius formula**

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

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, $dT \approx 0$):

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

$$(n \neq 1); m_v = 10 \text{ g} = 0.01 \text{ kg}; V = 10 \text{ cm}^3; V_{g\ddot{o}z} = 16 \text{ dm}^3;$$

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

$$c_v = 1 \text{ kcal/kgC}^\circ; c_g = 0.5 \text{ kcal/kgC}^\circ;$$

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

$$\Delta E = Q + W$$

$$Q_f^{80C} = L_f^{80C} m \approx 5.3 \text{ kcal}; (\Delta E = 4.91 \text{ kcal}; W = -p\Delta V = -16 \text{ l atm} = -0.39 \text{ kcal})$$

III. Állapotegyenletek:

- Ideális gázok:

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

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

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

- Van der Waals gázok:

$$E = c_v m T - m^2 a / V; \quad (p + am^2/V^2) (V - bm) = (m/M) RT; \\ \text{Maxwell szerkesztés.}$$

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

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

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

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

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

Nagy a nyomás odabenn!!!

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

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

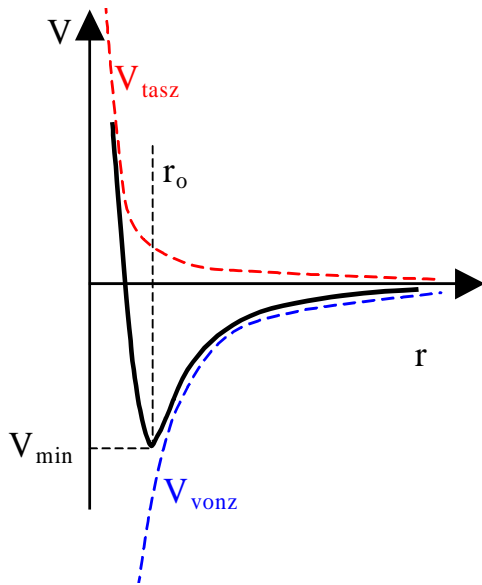
Kevés számú anyagállandó! Pl. nincs C jelű (az ABCD-ből hiányzik).

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):

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

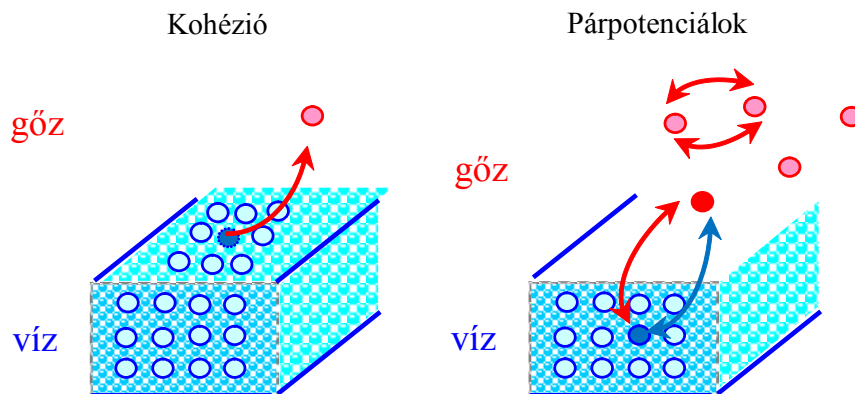
Kohézió $U(r)$

$$E = (N/2) U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N V(r_i - r_j) = \frac{N}{2} \sum_i V(r_i) \quad (r_i \neq 0)$$

E belső energia v. szerkezeti energia = a pár energiák [$\frac{1}{2} N(N-1)$ db] együttese!

N az (egyforma) atomok száma.

E extenzív!



Párpotenciálok - kohézió

Párpotenciál

Kohézió

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$U(r)^{v.w.} = V_o \left[A_{12} \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - 2A_6 \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$

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

$$U_{min}^{v.w.} = U(R_o)$$

$$r_o = \sigma$$

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

$$V^{vonz}(r_o) = 2 V^{tasz}(r_o)$$

A_M Madelung állandó, A_6 , A_{12} , ...