

TD 4

Exercice 1 : On cherche à comparer, pour un système A donné, d'énergie moyenne $\langle E \rangle$ fixée, les valeurs moyennes S et S_0 de l'entropie que l'on obtient respectivement pour une distribution de probabilité p_r arbitraire et pour la distribution canonique $P_r^{(0)} = \frac{e^{-\beta E_r}}{Z}$ (avec $Z = \sum_r e^{-\beta E_r}$)

1- montrer que $S - S_0 = k \sum_r P_r \ln \frac{P_r^{(0)}}{P_r}$

2- En utilisant l'inégalité $\ln x \leq x - 1$, que l'on démontrera, montre que $S_0 \geq S$

Conclusions ?

Exercice 2 : On rappelle que les niveaux d'énergie d'un oscillateur harmonique à un degré de liberté sont données par :

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

Où n est un entier positif ou nul. Cet oscillateur est supposé être en équilibre avec un thermostat à la température T.

- 1- Calculer la fonction de partition canonique du système.
- 2- Calculer l'énergie moyenne de l'oscillateur.
- 3- Etudier les deux limites extrêmes, $kT \gg \hbar\omega$ et $kT \ll \hbar\omega$. Discuter les résultats de cette comparaison. On tracera schématiquement l'évolution de l'énergie moyenne, ainsi que l'évolution prédite par le théorème d'équipartition, en fonction de la température.

Exercice 3 : On considère d'abord un oscillateur harmonique à une dimension. Son hamiltonien classique est

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

- Calculer dans l'ensemble microcanonique, le nombre de micro-états d'énergie inférieure à E. calculer ensuite sa fonction de partition canonique.

Exercice 4 : Les valeurs propres permises de l'énergie de translation d'une molécule de gaz parfait, se déplaçant dans une boîte parallélépipédique de dimension a, b, c, sont :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

- 1- Quelle est l'expression de la fonction de partition Z_c de ce mouvement à la température T ? on suppose que les nombres n_x, n_y, n_z peuvent être assimilés à des variables continues.
- 2- En déduire l'énergie interne U d'une mole de gaz parfait monoatomique, de masse atomique M, et son entropie S à la température T et la pression P.

On donne :

$$\int_0^\infty e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Exercice 5 : I/ soit un système d'un gaz parfait constitué de N particules de masse m en contact avec un thermostat à la température T et confinées dans un volume V et la fonction de partition est définie par :

$$Q_N = \frac{1}{N! h^{3N}} \int \dots \int dq_1 \dots dp_N e^{-\beta H(q_1, \dots, p_N)}$$

- Montrer que l'on $Q_N = \frac{Z_c^N}{N!}$ avec $Z_c = \frac{V}{\Lambda^3}$ est la fonction de partition particulaire. Et donnez l'expression de Λ en fonction de T.

II/ soit un système canonique d'un gaz parfait constitué de N particules indépendantes et identiques, chaque particule a deux niveaux d'énergies possibles $\varepsilon_1 = -2\varepsilon$ et $\varepsilon_2 = 2\varepsilon$ avec $\varepsilon > 0$.

- 1- Calculer la fonction de partition des niveaux d'énergies et déduire l'expression de l'énergie libre F. Calculer l'énergie moyenne du système de N particules. En déduire l'énergie à basse et haute température