Série 6.

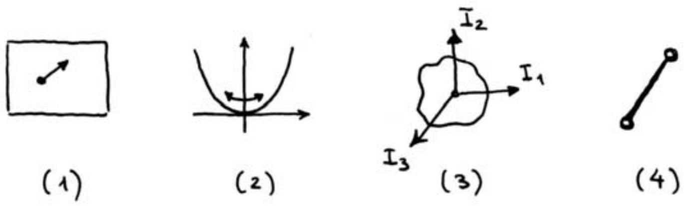
Ensemble canonique et distribution de Gibbs.

Exercice 6.1

Considérer les systèmes suivants dans l'ensemble canonique (à température T fixée). Pour chacun d'entre eux, calculer en fonction de la température:

(a) la fonction de partition $Z(T)$;
(b) l'énergie libre $F(T)$;
(c) l'entropie $S(T)$;
(d) l'énergie moyenne $E(T)$;
(e) la chaleur spécifique $C(T) = dE/dT$.

Les systèmes à considérer:
(1) particule ponctuelle libre dans un volume V.
(2) oscillateur harmonique $H = \frac{\omega}{2}(p^2 + q^2)$.
(3) toupie asymétrique avec une énergie cinétique $H = \frac{1}{2}(I_1\Omega_1^2 + I_2\Omega_2^2 + I_3\Omega_3^2)$ où les Ω_i sont les composantes de la vitesse angulaire et les I_i sont les trois moments principaux d'inertie.
(4) rotations d'une molécule linéaire (rotateur): $H = \frac{I}{2}(\Omega_1^2 + \Omega_2^2)$.



Exercice 6.2 Chaleur spécifique d'un gaz possédant des degrés de liberté internes.

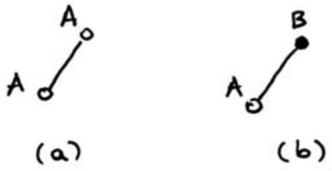
A partir des résultats de l'exercice précédent, déduire la chaleur spécifique c_V par molécule d'un gaz composé de

(1) molécules à deux atomes possédant des degrés de liberté translationnels et rotationnels [résultat: $c_V = 5/2$].

(2) molécules à deux atomes possédant des degrés de liberté translationnels, rotationnels et vibrationnels [résultat: $c_V = 7/2$].

(3) molécules à plusieurs atomes (non-collinéaires) possédant des degrés de liberté translationnels et rotationnels [résultat: $c_V = 3$].

Dans le cas d'un gaz diatomique, les résultats seront-ils différents si les molécules sont composées de deux atomes identiques où discernables (voir Fig.)?



Remarque: La contribution des degrés de liberté vibrationnels dans c_V est importante à partir de températures de l'ordre de $\hbar\omega$ où ω est la fréquence des vibrations. C'est une conséquence d'effets quantiques qui seront étudiés plus tard dans le cours. Leur contribution est négligeable à température $T \ll \hbar\omega$ et peut être inclue de manière classique pour $T \gg \hbar\omega$.

Exercice 6.3 Formule barométrique.

Considérer une colonne d'air au dessus de la surface de la terre. Supposons que l'air se comporte comme un gaz parfait et que le champ de graviation est uniforme. On prend tout d'abord un modèle d'atmosphère à température constante T indépendante de l'altitude (atmosphère isothermique). Montrer que la pression en fonction de l'altitude h est donnée par

$$p(h) = p(0)\exp[-\frac{mgh}{T}] \tag{1}$$

où m est la masse d'une molécule et g est l'accélération de chute libre.

Montrer que les deux dérivations suivantes conduisent au même résultat:

(1) Partir de particules indépendantes dans un ensemble canonique.

(2) Partir de la condition d'équilibre hydrostatique d'un gaz obéissant à la loi du gaz parfait $PV = NT$.

Pour une atmosphère réelle, la température baisse en fonction de l'altitude (environ de 0.5K par 100m).

(3) En prenant une dépendance linéaire $T(h) = T(h_0) - a(h - h_0)$ pour la température, corriger la dérivation (2) pour calculer la pression $p(h)$.

(4)* Les *altimètres* barométriques calculent l'altitude à partir de mesures de la pression p et de la température T. Proposer une formule raisonnable pour ce calcul.