

PHYSIQUE STATISTIQUE - TD 1

Ensemble microcanonique

11 octobre 2005

I - Système à deux niveaux

On considère un système macroscopique Σ formé de N particules susceptibles de n'occuper que deux états d'énergie $-\epsilon_0$ et ϵ_0 . Il s'agit par exemple d'un ensemble de N spins $1/2$ placés dans un champ magnétique extérieur \mathbf{B}_0 , auquel cas on a $\epsilon_0 = \mu_B B_0$ avec $\mu_B = e\hbar/2m_e$ le magnéton de Bohr et $B_0 = \|\mathbf{B}_0\|$ la norme du champ. On désigne par n_1 et n_2 le nombre de particules ayant des énergies égales respectivement à $-\epsilon_0$ et ϵ_0 , et par M la différence $n_2 - n_1$.

1. Exprimer l'énergie E d'un état macroscopique du système.
2. Déterminer le nombre $\Omega(E, N)$ de configurations microscopiques correspondant à l'énergie macroscopique E , le nombre N de particules étant fixe.
3. Définir l'entropie S du système. Que peut-on dire du système lorsque $|M| = N$? Que vaut alors l'entropie? Dans l'hypothèse où $n_1 \gg 1$ et $n_2 \gg 1$, déterminer l'entropie S en fonction de N et E . On rappelle la formule de Stirling, valable dans la limite de N grand,

$$N! \sim \left(\frac{N}{e}\right)^N \sqrt{2\pi N} \quad \text{ou encore} \quad \ln N! \sim N \ln N - N.$$

4. Calculer la température microcanonique T . Montrer qu'on peut l'exprimer sous la forme

$$\frac{1}{T} = \frac{k_B}{2\epsilon_0} \ln \left(\frac{1-x}{1+x} \right) \quad \text{avec} \quad x = \frac{E}{N\epsilon_0} \quad \text{et où } k_B \text{ est la constante de Boltzmann.}$$

En supposant que l'on puisse préparer le système dans un état d'énergie positive, quel résultat obtiendra-t-on si l'on essaie de déterminer sa température avec un thermomètre à gaz?

5. Déterminer la capacité calorifique C du système, en fonction de la température T .
6. Dans le cas d'un ensemble de spins $1/2$, calculer l'aimantation. Dans quel domaine de champ magnétique peut-on considérer que l'aimantation est une fonction linéaire de B_0 ? Définir la susceptibilité magnétique χ . Comment varie-t-elle avec la température?

II - Gaz parfait classique

On considère un gaz parfait classique constitué de N atomes de masse m discernables, sans structure interne et sans interaction à distance, contenus dans un volume V . Le Hamiltonien

de ce gaz dépend alors simplement des quantités de mouvement \mathbf{p}_i ,

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}.$$

1. Calculer, dans le cas $N = 1$, la densité d'états microscopiques $\rho(\epsilon)$. On pourra passer par le nombre $W(\epsilon)$ d'états dont l'énergie interne est inférieure ou égale à ϵ .
2. Traiter le cas N quelconque en utilisant le fait que le volume d'une hypersphère de rayon r en dimension n est donné par

$$\mathcal{V}_n = \frac{\pi^{n/2} r^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} \quad \text{où} \quad \Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t} t^{x-1} dt \quad \text{est la fonction "gamma" d'Euler.}$$

On rappelle que cette fonction possède la propriété $\Gamma(n + 1) = n!$

3. En déduire l'entropie $S(E, N, V)$. On justifiera à ce propos que pour $N \gg 1$, il revient au même de définir l'entropie comme $S = k_B \ln \Omega$, $S = k_B \ln \rho$ ou $S = k_B \ln W$. Toujours pour $N \gg 1$, déterminer l'énergie interne du gaz parfait en fonction de la température, puis retrouver l'équation d'état.

III - Mélange idéal de deux gaz parfaits

On considère dans un volume V un gaz parfait constitué d'un mélange de N_1 particules de masse m_1 d'un corps pur (1) et de N_2 particules de masse m_2 d'un corps pur (2) sans interactions. Le système est isolé et l'énergie totale $E = E_1 + E_2$ est donc fixée.

1. Déterminer la densité d'états $\rho(E, N, V)$ du système. On donne la fonction

$$B(m, n) = \int_0^1 t^{m-1} (1-t)^{n-1} dt = \frac{\Gamma(m)\Gamma(n)}{\Gamma(m+n)}.$$

2. En déduire l'entropie $S(E, N_1, N_2, V)$, puis la température et la pression du mélange.
3. On suppose que le mélange a été obtenu en enlevant une cloison mobile et diatherme qui séparait le volume V en deux compartiments de volumes respectifs V_1 et V_2 , les N_1 particules du gaz (1) étant dans le compartiment (1) et les N_2 particules du gaz (2) étant dans le compartiment (2). Quelle était l'entropie initiale S_i du système? Quelle variation d'entropie ΔS , appelée "entropie de mélange", subit-il au cours de la transformation?
4. Que devient ΔS si les deux gaz sont identiques?
5. Pour lever ce paradoxe dit "paradoxe de Gibbs", il faut tenir compte de l'indiscernabilité des particules. Comment?
6. En déduire les modifications apportées à la densité d'états microscopiques ρ , puis à l'entropie S du gaz parfait (formule de Sackur-Tetrode). Conclusion?