

TD 4 : Systèmes en contact avec un thermostat Ensemble canonique

1 Systèmes à deux niveaux

On considère N particules discernables interagissant faiblement, pouvant chacune se trouver dans deux états d'énergie $e_1 = \varepsilon$ ou $e_2 = 4\varepsilon$. Le système est maintenu à température T constante.

A. Une seule particule

1. Calculer la fonction de partition z_β pour une particule puis déduire l'énergie libre $f(T)$.
2. Quelle est la probabilité p_1 de se trouver dans l'état d'énergie e_1 ? p_2 ? Analyser les limites de basse température et haute température.
3. *Énergie moyenne.* Calculer l'énergie moyenne $\bar{e}(T)$. Tracer la en fonction de T .
4. *Entropie canonique.* Rappeler la relation entre l'entropie $s(T)$ et l'énergie libre. Calculer l'entropie canonique.

B. N particules

1. Donner la fonction de partition Z_β du système. Déduire l'énergie libre $F(T)$, l'énergie moyenne $\bar{E}(T)$ et l'entropie canonique $S(T)$.
2. Calculer le nombre moyen \bar{N}_1 de particules dans l'état e_1 , ainsi que \bar{N}_2 .
3. Comparer les expressions calculées aux questions 1 et 2 avec les résultats obtenus dans l'ensemble microcanonique (TD3).
4. Le système est isolé dans un premier temps. Son énergie est E_0 . Il est ensuite mis en contact avec le thermostat à température T . Pour quelle valeur de E_0 reçoit-il en moyenne de l'énergie du thermostat ?

2 Fluctuations de l'énergie et Capacité calorifique

A. Pour fixer la température d'un système, on le met en contact avec un thermostat, ce qui autorise les échanges d'énergie entre le thermostat et le système. On veut étudier les fluctuations de l'énergie de ce dernier.

On considère un système dont les états (l) ont des énergies notées E_l .

1. Démontrer que $\bar{E}(T) = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z_\beta$.
2. Montrer que les fluctuations ΔE de l'énergie sont données par $\frac{\partial^2}{\partial\beta^2} \ln Z_\beta$. Relier ΔE^2 et \bar{E} .
3. Quelle est la relation entre ΔE^2 et la chaleur spécifique C ?
4. Comparer les dépendances en N de \bar{E} et ΔE . Discuter la notion de limite thermodynamique.

B. Application : systèmes à 2 niveaux.— N systèmes à 2 niveaux, e_1 et e_2 , discernables, interagissant faiblement sont en contact avec un thermostat. On pose $\epsilon = e_2 - e_1$.

1. a) Donner les probabilités p_1 et p_2 pour se trouver dans les deux états (exprimées en fonction de ϵ).

b) Donner les nombres moyens \overline{N}_1 et \overline{N}_2 de particules dans chacun des états. Analyser les limites de basse et haute températures.

c) Calculer la fonction de partition du système

2. Calculer l'énergie moyenne $\overline{E}(T)$ dans laquelle on fera apparaître ϵ . Tracer l'énergie moyenne en fonction de T .

3. Calculer les fluctuations de l'énergie ΔE . Analyser les limites de basse et haute température. Interpréter les résultats à l'aide de la question 1a. Calculer la capacité calorifique $C(T)$ du système. Tracer $C(T)$.

3 Oscillateur harmonique - Chaleur spécifique des solides dans le modèle d'Einstein

En mécanique quantique, les niveaux d'énergie d'un oscillateur harmonique de pulsation ω sont $\epsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ où $n \in \mathbb{N}$. \hbar est la constante de Planck.

A. Un seul oscillateur

1. Calculer la fonction de partition z_β d'un oscillateur en contact avec un thermostat.

2. Calculer l'énergie moyenne $\overline{e}(T)$ de l'oscillateur puis les fluctuations $\Delta e(T)$. Analyser les limites de basse et haute températures.

B. Modèle d'Einstein : chaleur spécifique des solides

Dans un cristal, les atomes vibrent autour de leurs positions d'équilibre. Dans le modèle d'Einstein, on assimile les N atomes à $3N$ oscillateurs harmoniques identiques et indépendants.

1. Donner la fonction de partition associée aux degrés de vibration du cristal. Dédurre l'énergie moyenne de vibration.

2. Calculer la chaleur spécifique $C(T)$. Analyser soigneusement les limites de basse et haute températures. Tracer $C(T)$. Quel théorème permet de retrouver le résultat classique (haute température) ?

En guise de conclusion : Expérimentalement, le comportement de basse température de la chaleur spécifique n'est pas exponentiel $C(T) \sim e^{-T_0/T}$, mais une loi de puissance : $C(T) \sim T^3$. Ceci se comprend dans le cadre du modèle de Debye qui prend en compte la vraie distribution des fréquences des $3N$ oscillateurs décrivant les vibrations des atomes du cristal.