TD 1 — Modèles microscopiques

Exercice 1 : Un peu de maths

1. Les formes suivantes sont elles exactes ?
   - **a.** $\delta\omega_1 = 2xy\mathrm{d}x + x^2\mathrm{d}y$
   - **b.** $\delta\omega_2 = 2xe^{x^2-y}\mathrm{d}x - 2e^{x^2-y}\mathrm{d}y$
   - **c.** $\delta\omega_3 = xy\mathrm{d}x - z\mathrm{d}y + xz\mathrm{d}z$
   - **d.** $\delta\omega_4 = yz^2\mathrm{d}x + (xz^2+z)\mathrm{d}y + (2xyz+2z+y)\mathrm{d}z$
2. Calculer l'intégrale de la première forme $\delta\omega_1$ entre les points $(0,0)$ et $(2,3)$ de deux façons différentes.
3. Soit trois variables x, y et z reliées par l'équation d'état : $x^2+y^2+z^2=1$. Vérifier les formules sur les produits de dérivées :

$$\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = 1 \qquad\qquad \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z = -1$$

Exercice 2 : Modèle microscopique d'un solide cristalin

On se propose d'étudier les propriétés thermodynamiques d'un solide cristalin monoatomique par un modèle microscopique. Pour simplifier notre étude, on considère un cristal unidimensionnel composé d'une chaîne de N atomes de masse m. Chaque atome du cristal peut s'écarter de sa position d'équilibre en oscillant de part et d'autre de cette position. On modélise cette force de rappel par une force élastique de raideur K.

On considère un atome de la chaîne. On note x son déplacement algébrique par rapport à sa position d'équilibre. Sa vitesse est notée $\dot{x}$.

1. Donner les expressions de l'énergie cinétique e_c, l'énergie potentielle e_p et l'énergie mécanique e de cet atome en fonction de x et $\dot{x}$.

La thermodynamique statistique permet de montrer que la probabilité $\mathrm{d}^2P(\dot{x},x)$ pour un oscillateur d'être entre x et $x+\mathrm{d}x$ et d'avoir une vitesse comprise entre $\dot{x}$ et $\dot{x}+\mathrm{d}\dot{x}$ suit une distribution de Boltzman :

$$\mathrm{d}^2P(\dot{x},x) = A\exp\left[-\frac{e(\dot{x},x)}{k_BT}\right]\mathrm{d}\dot{x}\mathrm{d}x \tag{1}$$

2. Donner le nom de la constante k_B et rappeler son lien avec la constante des gaz parfait.
3. Déterminer l'expression de A.
4. On note $\langle e(\dot{x},x)\rangle$ l'énergie moyenne d'un atome. Comment peut-on l'exprimer en fonction de $e(\dot{x},x)$ et $\mathrm{d}^2P(\dot{x},x)$?
5. En déduire que $\langle e(\dot{x},x)\rangle = \langle e_c(\dot{x},x)\rangle + \langle e_p(\dot{x},x)\rangle$ et calculer sa valeur.
6. En déduire l'énergie interne totale U d'un cristal monoatomique constitué de n moles, chaque atome du cristal vibrant dans trois directions d'espace indépendantes.
7. On définit la capacité calorifique molaire à volume constant du cristal par

$$C_{V,m} = \frac{\partial(U/n)}{\partial T}, \tag{2}$$

   Montrer que l'on retouve la loi de Dulong et Petit pour un solide : $C_{V,m} = 3R$
8. Expérimentalement, $C_{V,m}$ évolue d'une valeur nulle à $T = 0$ K à la valeur trouvée lorsque la température est suffisante. Quelles insuffisances voyez-vous dans le modèle proposé ?

Données : $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-au^2}\mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ $\qquad$ $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} u^2e^{-au^2}\mathrm{d}u = \frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$

Exercice 3 : Effusion par un trou

1. Rappeler les hypothèses du modèle cinétique du gaz parfait, ainsi que les grandes étapes du raisonnement permettant d'obtenir l'équation d'état.

2. Quelle est la relation liant l'énergie cinétique moyenne du gaz à la température ? En déduire l'expression de la vitesse quadratique moyenne du gaz.

On considère une boîte de volume V contenant un gaz parfait maintenu à une température constante T. Cette boîte est percée d'un trou de section s supposé assez petit pour que le gaz reste au repos à chaque instant. A l'extérieur de la boîte, c'est le vide absolu. On considère que chaque particule a une vitesse égale à la vitesse quadratique moyenne. Ces vitesses ne sont orientées que selon $\pm\mathbf{e}_x$, $\pm\mathbf{e}_y$, $\pm\mathbf{e}_z$ et la répartition de ces six directions est isotropes.

3. Déterminer le nombre de particule $\mathrm{d}N$ passant à travers le trou en un temps $\mathrm{d}t$.

4. En déduire la loi d'évolution de la pression dans la boîte.

5. On donne $V = 1\,\mathrm{L}$, $T = 0\,°\mathrm{C}$, $s = 1\,\mu\mathrm{m}^2$ et $M = 4\,\mathrm{g/mol}$ (hélium). Calculer au bout de combien de temps la pression est diminuée de moitié.