FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES

CORRIGÉ DE L'ÉPREUVE SEMESTRIELLE

UNITÉ : PHYSIQUE STATISTIQUE

EXERCICE 01: (07 *points*)

1. $f(\vec{v}) = A.e^{-\frac{E_c}{k_B T}} = A.e^{-\frac{\beta m}{2}\left(v_x^2+v_y^2+v_z^2\right)}$ avec $\beta = 1/k_B T$.

Normalisation $\iiint f(\vec{v}).d^3v = 1 \quad \Rightarrow \quad \iiint\limits_{espace} A.e^{-\frac{\beta m}{2}\left(v_x^2+v_y^2+v_z^2\right)} dv_x dv_y dv_z = 1$.

Qu'on peut réécrire : $A.\left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta m}{2}v_i^2} dv_i\right]^3 = 1$

En posant $x = \sqrt{\frac{\beta m}{2}} v_i$; $dx = \sqrt{\frac{\beta m}{2}}.dv_i$ et en utilisant $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-x^2\right).dx = \sqrt{\pi}$ on a :

$$A.\left[\sqrt{\frac{2\pi}{\beta m}}\right]^3 = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{A = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} = \left(\frac{m}{2\pi.k_B T}\right)^{3/2}}.$$

2. La fonction de distribution $\tilde{f}(v)$ du module de la vitesse est donnée par la probabilité d'avoir un module de vitesse compris entre dv et $v+dv$, c'est-à-dire : $dP(v) = \tilde{f}(v).dv$.

Pour obtenir cette probabilité nous intégrons $dP(\vec{v})$ sur toutes les valeurs possibles de θ et de φ en coordonnées sphériques.

$$dP(v) = \int\limits_{\theta,\varphi} dP(\vec{v}) = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} f(\vec{v}).v^2 \sin\theta.dv d\theta d\varphi \qquad \text{avec} \qquad d^3v = v^2 \sin\theta.dv d\theta d\varphi$$

D'où

$$\boxed{\tilde{f}(v) = 4\pi.v^2 f(\vec{v}) = 4\pi.v^2 \left(\frac{m}{2\pi.k_B T}\right)^{3/2} e^{-\frac{\beta m}{2}v^2}}$$

3. Calcul de v_m .

$$\tilde{f}(v) = \left[\tilde{f}(v)\right]_{MAX} \quad \Rightarrow \quad \left.\frac{d\tilde{f}(v)}{dv}\right|_{v=v_m} = 0 .$$

Donc $4\pi\left(\frac{m}{2\pi.k_B T}\right)^{3/2}\left\{2v.e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} - v^2\frac{\beta m}{2}2v.e^{-\frac{\beta m}{2}v^2}\right\} = 0 \quad \Rightarrow \quad 1 - v^2\frac{\beta m}{2} = 0$.

Et $$\boxed{v_m = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}}$$

4. Calcul de la vitesse quadratique moyenne $v^* = \sqrt{\langle v^2 \rangle}$.

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^{+\infty} v^2 \tilde{f}(v).dv = \alpha.\int_0^{+\infty} v^4 e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} dv \qquad \text{avec} \qquad \alpha = 4\pi\left(\frac{m}{2\pi.k_B T}\right)^{3/2} .$$

En intégrant par parties ; $\left(g = v^3, h' = v.e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} \right)$ et $\left(g' = 3v^2, h = \frac{e^{-\frac{\beta m}{2}v^2}}{-\beta m} \right)$ on trouve :

$$\left\langle v^2 \right\rangle = \alpha \left\{ \left[\frac{v^3}{-\beta m} e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} \right]_0^{+\infty} + \frac{3}{\beta m} \int_0^{+\infty} v^2 e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} dv \right\}$$

Le premier terme étant nul en 0 à cause de v^3 et nul à l'infini à cause de $e^{-\frac{\beta m}{2}v^2}$, on a :

$$\left\langle v^2 \right\rangle = \frac{3}{\beta m} \alpha \int_0^{+\infty} v^2 e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} dv$$

Comme la distribution est normée $\alpha \int_0^{+\infty} v^2 e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} dv = 1$, alors :

$$\left\langle v^2 \right\rangle = \frac{3}{\beta m} \quad \text{et} \quad \boxed{v^* = \sqrt{\left\langle v^2 \right\rangle} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}}.$$

5. Calcul de la valeur moyenne du module de la vitesse $\langle v \rangle = \bar{v}$.

$$\langle v \rangle = \int_0^{+\infty} v.\tilde{f}(v).dv = \alpha.\int_0^{+\infty} v^3 e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} dv$$

En intégrant par parties ; $\left(g = v^2, h' = v.e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} \right)$ et $\left(g' = 2v, h = \frac{e^{-\frac{\beta m}{2}v^2}}{-\beta m} \right)$ on trouve :

$$\langle v \rangle = \alpha \left\{ \left[\frac{v^2}{-\beta m} e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} \right]_0^{+\infty} + \frac{2}{\beta m} \int_0^{+\infty} v.e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} dv \right\}$$

Le premier terme étant nul en 0 à cause de v^3 et nul à l'infini à cause de $e^{-\frac{\beta m}{2}v^2}$, on a :

$$\langle v \rangle = \frac{2}{\beta m} \alpha \int_0^{+\infty} v.e^{-\frac{\beta m}{2}v^2} dv = \frac{2}{\beta m} \alpha \left[\frac{e^{-\frac{\beta m}{2}v^2}}{-\beta m} \right]_0^{+\infty} \quad \Rightarrow \quad \langle v \rangle = \frac{2}{(\beta m)^2} 4\pi \left(\frac{m}{2\pi.k_B T} \right)^{3/2}.$$

Finalement :

$$\boxed{\bar{v} = \langle v \rangle = \sqrt{\frac{8}{\pi} \frac{k_B T}{m}}}$$

6. $\begin{cases} v_m = \sqrt{2}\sqrt{k_B T/m} = 1{,}41.\sqrt{k_B T/m} \\ v^* = \sqrt{3}\sqrt{k_B T/m} = 1{,}72.\sqrt{k_B T/m} \\ \bar{v} = \sqrt{8/\pi}\sqrt{k_B T/m} = 1{,}59.\sqrt{k_B T/m} \end{cases}$ donc à T donné $\boxed{v_m \le \bar{v} \le v^*}$.

EXERCICE 02: (13 *points*)

MODÉLISATION A 2 NIVEAUX

1. Calcul de la fonction de partition canonique z d'un seul défaut.

$$\boxed{z = \sum_n e^{-\beta E_n}} \quad \Rightarrow \quad z = e^{-\beta\epsilon_0}\left(1 + e^{-\beta(\epsilon_1-\epsilon_0)}\right) \quad \Rightarrow \quad \boxed{z = e^{-\beta\epsilon_0}\left(1 + e^{-\beta\epsilon}\right)}$$

2. Fonction de partition canonique Z correspondant à N défauts *discernables*.

$$\boxed{Z = z^N = e^{-N\beta\epsilon_0}\left(1 + e^{-\beta\epsilon}\right)^N}$$

3. Energie interne du système U.

$$\boxed{U = -\frac{\partial lnZ}{\partial\beta} = -N\frac{\partial lnz}{\partial\beta}}$$

Comme $lnz = -\beta\epsilon_0 + ln\left(1 + e^{-\beta\epsilon}\right) \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial lnz}{\partial\beta} = -\epsilon_0 - \frac{\epsilon . e^{-\beta\epsilon}}{1+e^{-\beta\epsilon}} = -\left(\epsilon_0 + \frac{\epsilon}{1+e^{\beta\epsilon}}\right)$

$$\boxed{U = N\epsilon_0 + \frac{N\epsilon}{1 + e^{\beta\epsilon}}}$$

4. Energie libre F. $\boxed{F = -k_B T . lnZ = -Nk_B T . lnz}$

Donc $F = -Nk_B T\left[-\beta\epsilon_0 + ln\left(1 + e^{-\beta\epsilon}\right)\right] \quad \Rightarrow \quad \boxed{F = N\epsilon_0 - Nk_B T . ln\left(1 + e^{-\beta\epsilon}\right)}$

5. L'entropie du système S.

$$F = U - TS \quad \Rightarrow \quad dF = dU - dT.S - T.dS = \delta Q - P.dV - dT.S - T.dS$$

Comme

$$\delta Q = T.dS$$

Alors

$$dF = -P.dV - S.dT$$

Et l'entropie :

$$S = -\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_V$$

D'où en utilisant l'expression de F.

$$S = +Nk_B . ln\left(1 + e^{-\beta\epsilon}\right) + Nk_B T\frac{\left(\epsilon/k_B T^2\right)e^{-\beta\epsilon}}{(1 + e^{-\beta\epsilon})}$$

Et

$$\boxed{S = +Nk_B . ln\left(1 + e^{-\beta\epsilon}\right) + \frac{N}{T}\frac{\epsilon}{(1 + e^{\beta\epsilon})}}$$

6. $F = U - TS \quad \Rightarrow \quad U = F + TS$

$$U = N\epsilon_0 - Nk_B T . ln\left(1 + e^{-\beta\epsilon}\right) + Nk_B T . ln\left(1 + e^{-\beta\epsilon}\right) + N\frac{\epsilon}{(1 + e^{\beta\epsilon})}$$

On retrouve

$$\boxed{U = N\epsilon_0 + \frac{N\epsilon}{1 + e^{\beta\epsilon}}}$$

7.
$T \to 0 \quad \Rightarrow \quad e^{\beta\epsilon} \to +\infty$ et $U = N\epsilon_0$: Presque tous les défauts sont dans l'état ϵ_0.
$T \to \infty \quad \Rightarrow \quad e^{\beta\epsilon} \to 1$ et $U = N\epsilon_0 + \frac{N\epsilon}{2} = \frac{N}{2}(\epsilon_0 + \epsilon_1)$: Les défauts sont répartis également sur les états ϵ_0 et ϵ_1 .

8. La chaleur spécifique à volume constant C_V est donnée par :

$$\boxed{C_V = \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_V}$$

En utilisant l'expression e l'énergie interne

$$C_V = N\epsilon.\frac{\partial}{\partial T}\left(1 + e^{\beta\epsilon}\right)^{-1} = -N\epsilon.\left(1 + e^{\beta\epsilon}\right)^{-2}\left(-\frac{\epsilon}{k_B T^2}e^{\beta\epsilon}\right)$$

D'où

$$C_V = \frac{N\epsilon^2}{k_B T^2}\frac{e^{\beta\epsilon}}{(1 + e^{\beta\epsilon})^2}$$

Et

$$C_V = \frac{N\epsilon^2}{k_B T^2}\frac{1}{\left(e^{-\frac{\beta\epsilon}{2}} + e^{\frac{\beta\epsilon}{2}}\right)^2}$$

Enfin

$$\boxed{C_V = Nk_B\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right)^2\frac{1}{\mathrm{ch}^2(\beta\epsilon/2)}}$$

<u>MODELISATION A n NIVEAUX</u>

1. Calcul de la fonction de partition z d'un seul défaut.

$$\boxed{z = \sum_n e^{-\beta E_n}} \qquad \Rightarrow \qquad z = \sum_p e^{-\beta(\epsilon_0 + p.\epsilon)} = e^{-\beta\epsilon_0}\sum_p\left(e^{-\beta\epsilon}\right)^p$$

En utilisant $1 + x + \ldots + x^n = \frac{1 - x^{n+1}}{1 - x}$ il vient que :

$$\boxed{z = e^{-\beta\epsilon_0}\frac{1 - e^{-\beta\epsilon(n+1)}}{1 - e^{-\beta\epsilon}}}$$

Qu'on peut réécrire sous la forme

$$z = e^{-\beta\epsilon_0}\frac{e^{-\frac{\beta\epsilon}{2}(n+1)}}{e^{-\frac{\beta\epsilon}{2}}}\frac{sh\left((n+1)\,\beta\epsilon/2\right)}{sh(\beta\epsilon/2)}$$

Puis

$$\boxed{z = e^{-\beta\epsilon_0}e^{-\frac{\beta\epsilon}{2}n}\frac{sh\left((n+1)\,\beta\epsilon/2\right)}{sh(\beta\epsilon/2)}}$$

2. L'énergie libre f associée à un seul défaut est donnée par :

$$f = -k_B T.\,lnz \qquad \Rightarrow \qquad \beta f = -lnz$$

D'où

$$\boxed{\beta.f = \beta\left(\epsilon_0 + \frac{n\epsilon}{2}\right) - ln\left[\mathrm{sh}\left((n+1)\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right] + ln\left[\mathrm{sh}\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right]}$$

3. L'énergie interne U du système.

$$U = -\frac{\partial lnZ}{\partial \beta} = -N\frac{\partial lnz}{\partial \beta}$$

Comme

$$lnz = -\beta\left(\epsilon_0 + \frac{n\epsilon}{2}\right) + ln\left[\mathrm{sh}\left((n+1)\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right] - ln\left[\mathrm{sh}\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right]$$

Alors

$$U = N\left\{\left(\epsilon_0 + \frac{n\epsilon}{2}\right) - \frac{ch\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big).(n+1)\,\epsilon/2}{sh\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)} + \frac{ch(\beta\epsilon/2).\epsilon/2}{sh(\beta\epsilon/2)}\right\}$$

Et

$$\boxed{U = N\left(\epsilon_0 + \frac{n\epsilon}{2}\right) - N\frac{\epsilon}{2}\left[\frac{(n+1)}{th\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)} - \frac{1}{th(\beta\epsilon/2)}\right]}$$

4. L'entropie S du système.

L'énergie libre du système F.

$$F = Nf = N\left(\epsilon_0 + \frac{n\epsilon}{2}\right) - Nk_BT.\,ln\left[\mathrm{sh}\left((n+1)\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right] + Nk_BT.\,ln\left[\mathrm{sh}\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right]$$

$$S = -\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_V = \frac{\partial}{\partial T}\left\{Nk_BT.\,ln\left[\mathrm{sh}\left((n+1)\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right] - Nk_BT.\,ln\left[\mathrm{sh}\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right]\right\}$$

D'où

$$S = Nk_B\left\{ln\left[\mathrm{sh}\left((n+1)\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right] - ln\left[\mathrm{sh}\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right)\right]\right\} - \frac{Nk_BT}{k_BT^2}\left\{\frac{ch\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big).(n+1)\,\epsilon/2}{sh\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)} - \frac{ch(\beta\epsilon/2).\epsilon/2}{sh(\beta\epsilon/2)}\right\}$$

Et

$$\boxed{S = Nk_B.\,ln\left[\frac{sh\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)}{sh(\beta\epsilon/2)}\right] - \frac{N\epsilon}{2T}\left\{\frac{(n+1)}{th\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)} - \frac{1}{th(\beta\epsilon/2)}\right\}}$$

Ou bien

$$F = U - TS \quad \Rightarrow \quad \boxed{S = (U-F)/T}$$

5. La chaleur spécifique à volume constant est donnée C_V par l'expression :

$$C_V = \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_V$$

Donc

$$C_V = \left.\frac{\partial U}{\partial \beta}\right|_V \left.\frac{\partial \beta}{\partial T}\right|_V = \left.\frac{\partial U}{\partial \beta}\right|_V \left(\frac{-1}{k_BT^2}\right)$$

Finalement

$$\boxed{C_V = -k_B\beta^2\left.\frac{\partial U}{\partial \beta}\right|_V}$$

6.

$$C_V = -k_B\beta^2 \frac{\partial}{\partial\beta}\left\{N\left(\epsilon_0 + \frac{n\epsilon}{2}\right) - N\frac{\epsilon}{2}\left[\frac{(n+1)}{th\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)} - \frac{1}{th(\beta\epsilon/2)}\right]\right\}$$

Calculons

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\left\{\frac{1}{th\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)}\right\} = \frac{\partial}{\partial\beta}\left\{\frac{ch\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)}{sh\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)}\right\} = \frac{-1}{sh^2\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)}\frac{(n+1)\epsilon}{2}$$

De la même manière (ou en posant $n = 0$)

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\left\{\frac{1}{th(\beta\epsilon/2)}\right\} = \frac{\partial}{\partial\beta}\left\{\frac{ch(\beta\epsilon/2)}{sh(\beta\epsilon/2)}\right\} = \frac{-1}{sh^2(\beta\epsilon/2)}\frac{\epsilon}{2}$$

En remplaçant

$$C_V = k_B\beta^2 N\left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2\left[\frac{-(n+1)^2}{sh^2\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)} - \frac{-1}{sh^2(\beta\epsilon/2)}\right]$$

Finalement

$$\boxed{C_V = Nk_B\left(\frac{\beta\epsilon}{2}\right)^2\left[-\frac{(n+1)^2}{sh^2\big((n+1)\,\beta\epsilon/2\big)} + \frac{1}{sh^2(\beta\epsilon/2)}\right]}$$