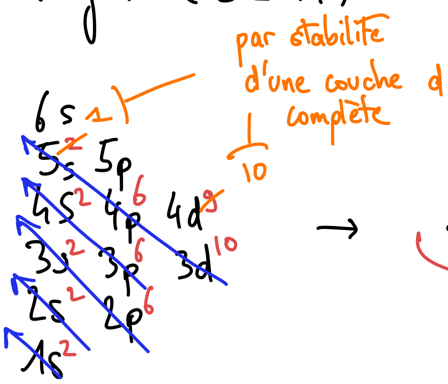
Modern physics TD 2 - corrigé annexe

Pascal WANG

Pour voir le corrigé originel de M. Tisserand, voir le dossier 2022.

Exercice 1 - L'expérience de Stern et Gerlach

1 a. On utilise la règle de Klechkowski pour obtenir la configuration électronique de l'argent ($Z = 47$)



$$\rightarrow \underbrace{1s^2 2s^2 2p^6\ 3s^2 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6}_{Kr\ (Z=36)}\ 5s^1\ 4d^{10}$$

$$= [Kr]\ 4d^{10}\ 5s^1$$

b. Il y a un seul électron de valence, il se trouve dans l'orbitale 5s qui correspond à $n = 5$ et $\ell = 0$

n : nombre quantique principal

ℓ : nombre quantique azimutal $\begin{pmatrix} s \rightarrow \ell = 0 \\ p \rightarrow \ell = 1 \\ d \rightarrow \ell = 2 \end{pmatrix}$

Comme $\ell = 0$, le moment cinétique orbital est nul $\vec{L} = \vec{0}$.

Le moment cinétique total $\vec{J} = \underbrace{\cancel{\vec{L}}}_{\text{orbital}} + \underbrace{\vec{S}}_{\text{spin}}$ est uniquement dû au spin.

2. L'air agit comme un thermostat à température T. Le nombre d'atomes d'argent N est fixé par l'expérimentateur.

↳ donc on se place dans l'ensemble canonique

3. La force magnétique $\vec{F} = \pm \underbrace{\frac{e\hbar}{2m_e}}_{\mu_B \text{ magnéton de Bohr}} \frac{\partial B_z}{\partial z} \vec{e}_z$ dérive d'un potentiel

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} E_\pm = -\overrightarrow{\text{grad}}\, E_\pm$$

$$= -\left(\frac{\partial E_\pm}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial E_\pm}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial E_\pm}{\partial z} \vec{e}_z \right)$$

avec $\boxed{E_\pm = \pm \mu_B B_z}$ qui est l'énergie potentielle des atomes d'argent.

dépend de l'espace

4. On calcule la fonction de partition

$Z_N = \prod_{i=1}^{N} Z_i$

(o) le système est constitué de N particules indépendantes, identiques et discernables $\rightarrow$ $Z_N = (Z_1)^N$ où Z_1 est la fonction de partition à 1 particule

$Z_i = Z_1$

(i) On identifie les micro-états pour une particule

Ici, il y a 2 micro-états : spin $\uparrow$ (+) et spin $\downarrow$ (−) d'énergie E_+ et E_-.

(ii) on écrit la fonction de partition

$$Z_N = (Z_1)^N = \left(e^{-\beta E_+} + e^{-\beta E_-}\right)^N \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$Z_N = \left(e^{-\beta \mu_B B_z} + e^{+\beta \mu_B B_z}\right)^N = \left(2\, \text{ch}(\beta \mu_B B_z)\right)^N$$

cosinus hyperbolique $\quad \text{ch}(x) = \cosh(x) = \frac{e^{x} + e^{-x}}{2}$

5. En connaissant Z_N, on calcule $\langle E \rangle = -\dfrac{\partial \ln(Z_N)}{\partial \beta}$

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta}\left[\ln\left(\left(2\,\mathrm{ch}(\beta \mu_B B_z)\right)^N\right)\right]$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta}\left[N \ln\left(2\,\mathrm{ch}(\beta \mu_B B_z)\right)\right]$$

$\ln(x^N) = N.\ln(x)$

$$= -N \frac{\frac{\partial}{\partial \beta}\left(2\,\mathrm{ch}(\beta \mu_B B_z)\right)}{2\,\mathrm{ch}(\beta \mu_B B_z)} = -N \mu_B B_z \frac{\mathrm{sh}(\beta \mu_B B_z)}{\mathrm{ch}(\beta \mu_B B_z)}$$

$(\ln f)' = \dfrac{f'}{f}$

$\mathrm{ch}'(x) = \mathrm{sh}(x)$

$= \dfrac{e^x - e^{-x}}{2}$

$\to$ $\boxed{\langle E \rangle = -N \mu_B B_z\, \mathrm{th}(\beta \mu_B B_z)}$

$\left(\mathrm{th}(x) = \dfrac{\mathrm{sh}(x)}{\mathrm{ch}(x)} = \dfrac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}\right)$

6. Connaissant Z_N, on deduit aussi l'energie libre F

$$F = -\frac{\ln Z_N}{\beta} = -\frac{1}{\beta} \ln\left[2^N \mathrm{ch}(\beta \mu_B B_z)^N\right]$$

$$\boxed{F = -\frac{N}{\beta} \ln\left[2\,\mathrm{ch}(\beta \mu_B B_z)\right]}$$

7. a) L'entropie se deduit de F et $\langle E \rangle$ par

$F = \langle E \rangle - TS$ donc $S = \dfrac{\langle E \rangle - F}{T}$

$$S = \frac{1}{T}(N)\left[-\mu_B B_z\, \mathrm{th}(\beta \mu_B B_z) + \frac{1}{\beta} \ln\left(2\,\mathrm{ch}(\beta \mu_B B_z)\right)\right]$$

$$\boxed{S = N k_B\left[-\frac{\mu_B B_z}{k_B T}\, \mathrm{th}(\beta \mu_B B_z) + \ln\left(2\,\mathrm{ch}(\beta \mu_B B_z)\right)\right]}$$

b) On pose $x \equiv \dfrac{\mu_B B_z}{k_B T} = \beta \mu_B B_z$

$$S = N k_B \left[-x \, \text{th}\, x + \ln\left(2 \, \text{ch}(x)\right) \right]$$

Si $B_z \to 0$ (limite de champ faible), alors $x \to 0$

Si $T \to \infty$ (limite haute température), alors $x \to 0$ aussi

Or $\text{th}(0) = 0$, $\text{ch}(0) = 1$ donc

$S \xrightarrow[x \to 0]{} N k_B \ln 2$ donc $\boxed{\left\{ \begin{array}{l} S \xrightarrow[B_z \to 0]{} N k_B \ln 2 \\ S \xrightarrow[T \to \infty]{} N k_B \ln 2 \end{array} \right.}$

L'entropie est maximale : le désordre est maximal, il n'y a pas d'information sur le système. Lorsque $x \ll 1$, ie $\dfrac{\mu_B B_z}{k_B T} \ll 1$, l'agitation thermique l'emporte sur l'interaction magnétique et les spins peuvent être up $\uparrow$ ou down $\downarrow$ avec probabilité $\frac{1}{2}$.

c) On examine la limite $x \gg 1$ lorsque $\mu_B B_z \gg k_B T$ donc l'interaction magnétique domine sur l'agitation thermique.

dans cette limite $S = N k_B \Big[\underbrace{-x \, \text{th}\, x}_{\xrightarrow[x \to +\infty]{} -\infty} + \underbrace{\ln(2 \, \text{ch}\, x)}_{\xrightarrow[x \to +\infty]{} +\infty} \Big]$

c'est une forme indéterminée "$\infty - \infty$" qu'il faut lever en développant à l'ordre suivant

$$2 \operatorname{ch} x = e^{x} + e^{-x} = e^{x}\left(1 + e^{-2x}\right)$$

donc $\ln(2 \operatorname{ch} x) = \ln(e^{x}) + \ln(1 + e^{-2x}) = x + \ln(1 + e^{-2x})$

$\ln(ab) = \ln a + \ln b$

$$= x + e^{-2x} + o\left(e^{-2x}\right)$$

$\ln(1+\varepsilon) \underset{\varepsilon \to 0}{=} \varepsilon + o(\varepsilon)$, $\varepsilon = e^{-2x} \xrightarrow[x \to +\infty]{} 0$

d'autre part, $\operatorname{th} x = \dfrac{e^{x} + e^{-x}}{e^{x} - e^{-x}} = \dfrac{\cancel{e^{x}}\left(1 + e^{-2x}\right)}{\cancel{e^{x}}\left(1 - e^{-2x}\right)} = 1 + e^{-2x} + e^{-2x} + o\left(e^{-2x}\right)$

$\dfrac{1}{1-\varepsilon} \underset{\varepsilon \to 0}{=} 1 + \varepsilon + o(\varepsilon)$

$$\operatorname{th} x = 1 + 2e^{-2x} + o\left(e^{-2x}\right)$$

donc $S \underset{x \to +\infty}{=} N k_B \left[\cancel{-x} - \underbrace{x 2 . e^{-2x}}_{\xrightarrow[x \to +\infty]{} 0} + \underbrace{o\left(x e^{-2x}\right)}_{\xrightarrow[x \to +\infty]{} 0} + \cancel{x} + \underbrace{e^{-2x}}_{\xrightarrow[x \to +\infty]{} 0} + \underbrace{o\left(e^{-2x}\right)}_{\xrightarrow[x \to +\infty]{} 0} \right]$

donc $\boxed{\lim_{x \to 0} S = 0}$ L'entropie est minimale i.e. l'information est complète.

Le système est totalement ordonné : il occupe un seul micro-état avec probabilité 1. Cet état est celui qui minimise l'énergie i.e. les spins sont tous orientés dans le sens du champ magnétique $\vec{B}$: $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $\uparrow \vec{B}$

Exercice 2 - le gaz parfait monoatomique

1. Le système {gaz + enceinte} est maintenu à température constante T et contient un nombre fixe N de particules

donc on se place dans l'ensemble canonique

2. On utilise le résultat du TD 1 : $\rho(E) = \frac{m^{3/2} V}{\sqrt{2}\,\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$

densité d'états

$$Z_1 = \int_0^\infty dE\, \rho(E)\, e^{-\beta E}$$

$$= \int_0^\infty dE\, \frac{m^{3/2} V}{\sqrt{2}\,\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}\, e^{-\beta E} .$$

Pour faire apparaître une gaussienne, on change de variable $x^2 = \beta E$

$2x\,dx = \beta\, dE$, $\sqrt{E} = \frac{x}{\sqrt{\beta}}$

alors $$Z_1 = \frac{m^{3/2} V}{\sqrt{2}\,\pi \hbar^3} \int_0^\infty \frac{2x\,dx}{\beta} \cdot \frac{x}{\sqrt{\beta}} \cdot e^{-x^2}$$

$$= \frac{2}{\beta^{3/2}} \frac{m^{3/2} V}{\sqrt{2}\,\pi \hbar^3} \underbrace{\int_0^\infty dx\, x^2 e^{-x^2}}_{\frac{\sqrt{\pi}}{4} \text{ (donné dans l'énoncé)}}$$

donc $$Z_1 = \frac{2\, m^{3/2} V}{\beta^{3/2} \sqrt{2} \cdot \pi^{3/2} \hbar^3\, 4} = V \left(\frac{m}{2\pi \beta \hbar^2} \right)^{3/2}$$

3. Les particules sont indépendantes, identiques et indiscernables

donc $$Z_N = \frac{(Z_1)^N}{N!} = \frac{1}{N!} \left(V \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3/2} \right)^N = \frac{V^N}{N!} \left(\frac{1}{\Lambda^3} \right)^N$$

avec $\Lambda = \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$ la longueur d'onde thermique / quantique

longueur d'onde de de Broglie

scientifique français

4 a) Connaissant Z_N, on calcule $\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}(\ln Z_N)$

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\Big(\underbrace{\ln\left(\frac{V^N}{N!}\right)}_{\text{indépendant de } \beta} - 3N\ln\Lambda\Big)$$

$$= 3N\frac{\partial}{\partial\beta}\Big(\ln\Big(\underbrace{\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}}_{u}\Big)^{\frac{1}{2}}\Big) = \frac{3}{2}N\,\frac{\frac{2\pi\hbar^2}{m}}{\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}}$$

$(\ln u)' = \frac{u'}{u}$

$$= \frac{3}{2}\frac{N}{\beta}$$

$$\boxed{\langle E \rangle = \frac{3}{2}Nk_BT}$$

on retrouve le résultat obtenu avec le théorème d'équipartition de l'énergie.

b) La capacité thermique à volume constant C_V est définie par

$$C_V = \left.\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}\right)_V = \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{3}{2}Nk_BT\right)\Big|_V = \frac{3}{2}\underbrace{N}_{n.\mathcal{N}_A}\underbrace{k_B}_{\frac{R}{\mathcal{N}_A}}$$

$\mathcal{N}_A$ nombre d'Avogadro

$$\boxed{C_V = \frac{3}{2}nR}$$

(monoatomique)

5. Connaissant Z_N, on déduit aussi l'énergie libre F

$$F = -\frac{\ln Z_N}{\beta} = -k_BT\ln\left(\frac{1}{N!}\frac{V^N}{\Lambda^{3N}}\right)$$

$$\simeq k_BT\left(N\ln N - N + N\ln\left(\frac{\Lambda^3}{V}\right)\right)$$

$\ln N! \simeq N\ln N - N$

approximation de Stirling

6. La pression P se déduit de F par

$$P = -\left.\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = -\frac{\partial}{\partial V}\left[k_B T\left(\underbrace{N\ln N - N}_{\text{indépendant de } V} + N\underbrace{\ln\left(\frac{\Lambda^3}{V}\right)}_{-\ln(V) + \ln(\Lambda^3)}\right)\right]$$

indépendant de V

$$P = +\frac{k_B T . N}{V}$$

$$\hookrightarrow \boxed{PV = N k_B T = n R T}$$ loi des gaz parfaits

$N = n . \mathcal{N}_A \; ; \; k_B = \frac{R}{\mathcal{N}_A}$

7. L'entropie se calcule avec $S = \frac{\langle E \rangle - F}{T}$

$$S = \frac{1}{T}\left(\frac{3}{2} N k_B T - k_B T\left[N\ln N - N + 3N\ln\Lambda - N\ln V\right]\right)$$

$$S = k_B\left[\frac{3}{2}N - N\ln N + N - 3N\ln\left(\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T}\right)^{1/2}\right) + N\ln V\right]$$

$$\boxed{S(T,V) = cte + \frac{3}{2} n R \ln T + n R \ln V}$$ entropie du gaz parfait

$N k_B = nR$

constante indépendante de T et V