

## Chaleur spécifique

Tutoring 5 de Thermodynamique statistique/avril 2002

On donne les valeurs numériques suivantes :

$$h = 6,626\,068\,76(52) \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$k = 1,380\,6503(24) \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$$

$$N_A = 6,022\,141\,99(47) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

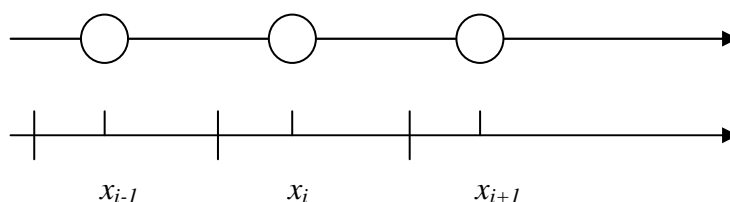
### 1. Théorème d'équipartition

Considérons un système de  $N$  particules placées dans un volume  $V$  en contact avec un réservoir d'énergie qui fixe la température  $T$ . Un microétat du système est défini par un point dans l'espace des phases.

1. Rappeler la définition d'espace des phases.
2. Montrer que la valeur moyenne de chaque terme énergétique quadratique dans une des coordonnées de l'espace des phases est égal à  $\frac{1}{2} kT$ . Ceci s'appelle le théorème d'équipartition.

### 2. Application 1 : $N$ oscillateurs harmoniques indépendants.

Considérons un ensemble de  $N$  oscillateurs harmoniques indépendants de raideur  $k_0$ , en contact avec un thermostat qui fixe la température  $T$ . On suppose que ces particules sont alignées sur un axe ( $Ox$ ). On repère par  $x_i$  l'écart de chaque particule par rapport à sa position d'équilibre.



1. Quelle est l'énergie cinétique moyenne, l'énergie potentielle moyenne et la chaleur spécifique moyenne de ce système. La valeur de la chaleur spécifique obtenue est connue sous le nom de loi de Dulong et Petit. Commenter vos résultats et comparer au tableau de valeurs de chaleur spécifique tiré de [1].

Table 7 · 7 · 1 Values\* of  $c_p$  (joules mole<sup>-1</sup> deg<sup>-1</sup>) for some solids at  $T = 298^\circ \text{K}$

Solid	$c_p$	Solid	$c_p$
Copper	24.5	Aluminum	24.4
Silver	25.5	Tin (white)	26.4
Lead	26.4	Sulfur (rhombic)	22.4
Zinc	25.4	Carbon (diamond)	6.1

\* "American Institute of Physics Handbook," 2d ed., McGraw-Hill Book Company, New York, 1963, p. 4-48.

2. La mécanique quantique nous dit que les niveaux d'énergie d'un oscillateur harmonique sont quantifiés et vérifient la relation :

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega \text{ où } n \in \{0;1;2;\dots;\infty\}$$

- Calculer la fonction de partition  $Z(N,T)$ .
- En déduire les différentes fonctions thermodynamiques de ce système.
- Calculer la valeur de l'énergie moyenne de ce système dans la limite des hautes et des basses températures. La température caractéristique apparaissant dans les équations  $\theta_E$  est appelée température d'Einstein.
- Vous justifierez en partie les résultats expérimentaux reproduits sur la figure suivante tirée de [1].

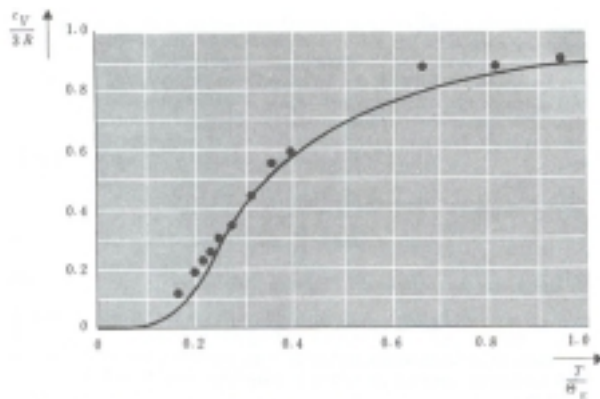


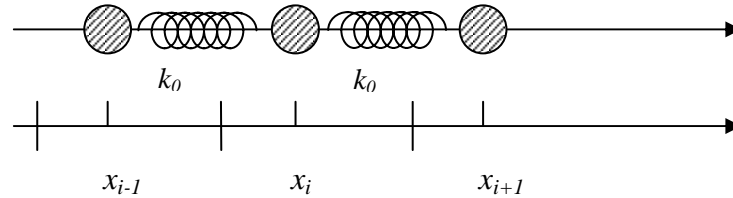
Fig. 7-7-1 Temperature dependence of  $c_v$  according to the Einstein model. The points are experimental values of  $c_v$  for diamond, the fit to the curve being achieved by choosing  $\theta_E = 1320^\circ\text{K}$  (after A. Einstein, Ann. Physik, vol. 22, p. 186 (1907)).

Le module d'Young<sup>1</sup> du diamant étant de l'ordre de  $E = 940 \text{ GPa}$ , la masse volumique du diamant  $\rho = 3500 \text{ kg.m}^{-3}$ , y-a-t-il un accord qualitatif sur la valeur de la température d'Einstein mesurée et prévue théoriquement. Justifier pourquoi la loi de Dulong et Petit est violée pour diamant alors qu'elle est valable pour le cuivre à température ambiante.

<sup>1</sup> Le module d'Young est une grandeur décrivant la réponse mécanique des matériaux. Lorsqu'on tire sur une éprouvette élastique on observe que la contrainte à appliquer est proportionnelle au taux de déformation. Le module d'Young est le facteur de proportionnalité.

### 3. $N$ oscillateurs harmoniques couplés à une dimension

Le principal défaut du modèle d'Einstein est de considérer les atomes comme des oscillateurs indépendants. Il est possible de raffiner le modèle précédent en prenant en compte les corrélations entre les mouvements des différents atomes. Un tel modèle est connu en physique statistique sous le nom de modèle de Debye. Dans ce modèle, on considère que chaque atome est relié à ses deux plus



proches voisins par un ressort de raideur  $k_0$ . On repère chaque atome  $i$  initialement placé en  $ia$  où  $a$  est le pas du réseau interatomique par son déplacement  $x_i$ . Trouver la relation de dispersion des ondes sonores dans ce système. Montrer que pour les courtes longueur d'onde, il est possible de définir une vitesse du son  $c$  que vous calculerez en fonction de  $m$ ,  $k_0$  et  $a$ . Montrer que si on impose des conditions périodiques alors  $x_1 = x_N$  alors les vecteurs d'onde susceptibles de se propager sont quantifiés. Ces modes de vibration quantifiés sont appelés *phonons*. On pourra traiter ces modes de vibrations  $N$  oscillateurs indépendants à condition que leur fréquence vérifie la relation de dispersion précédente.

1. Calculer l'énergie de la chaîne considérée.
2. Donner l'expression de la chaleur spécifique à haute et basse température pour ce solide.  
Comment la chaleur spécifique tend-elle vers 0 ?

### 3. $N$ oscillateurs harmoniques couplés à une dimension

Reprendre le calcul précédent dans le cas d'un solide à trois dimensions. Montrer en particulier dans ce cas que la chaleur spécifique tend vers 0 comme  $T^3$  quand  $T$  tend vers 0.

[1] F. Reif. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, Mc Graw Hill, London (1965).

