

LP16 FACTEUR DE BOLTZMANN

27 mars 2020

MONNET Benjamin & CAETANO Frédérick

Niveau : M2 enseignement

Commentaires du jury

Bibliographie

✦ *Le nom du livre, l'auteur*¹

→ Expliciter si besoin l'intérêt du livre dans la leçon et pour quelles parties il est utile.

Prérequis

- Ensemble microcanonique
- Mécanique Newtonienne
- Diffusion
- Grandeurs thermodynamiques
- Electromagnétisme (moment magnétique)

Expériences



Table des matières

1 Exemple introductif : expérience de Jean Perrin	2
1.1 Description	2
1.2 Autres exemples	2
2 Ensemble canonique	2
2.1 Contextualisation	2
2.2 Loi de distribution	3
2.3 Paramagnétisme	3
3 Application : théorème de l'équipartition de l'énergie	3
3.1 Hypothèses	3
3.2 Calcul	4
3.3 Loi de Dulong-Petit	4

Introduction

1 Exemple introductif : expérience de Jean Perrin

1.1 Description

On suppose que l'on a des particules de masse volumique ρ dans un liquide de masse volumique ρ_l . Il y a trois forces qui s'appliquent sur une particule donnée :

- Le poids : $\vec{P} = m\vec{g}$
- La poussée d'Archimède : $\vec{\Pi} = -\rho_l V\vec{g}$
- Une force de frottement fluide (Stokes) : $\vec{F} = -\alpha\vec{v}$

A l'équilibre, on trouve que les particules ont pour vitesse $\vec{v}_0 = -\frac{\Delta mg}{\alpha}\vec{e}_z$.

Les particules chutent donc vers le fond de la cuve. Un flux diffusif se crée alors vers du bas vers le haut suite à l'apparition d'un gradient de concentration. Nous avons donc l'égalité entre deux flux à l'équilibre : le flux convectif et le flux diffusif. Cela donne :

$$D\frac{\partial n}{\partial z} = nv_0$$

Ce qui permet d'obtenir en intégrant

$$n(z) = n_0 e^{-\frac{\Delta mg}{k_B T} z}$$

On voit apparaître ici un facteur exponentiel que l'on appelle facteur de Boltzmann. On a prouvé ici qu'il apparaissait dans un cas particulier mais on peut le trouver dans d'autres domaines.

1.2 Autres exemples

Problème physique	Expression mathématique
Pression de l'atmosphère isotherme	$P(z) = P_0 e^{-\frac{mgz}{k_B T}}$
Population d'un niveau d'énergie E_i	$p_i = A e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$
Concentration des charges dans un plasma	$n(r) = n_0 e^{-\frac{q\Phi(r)}{k_B T}}$

On remarque que dans tous les cas, on a la comparaison dans l'exponentielle d'une énergie typique de notre système et d'une énergie d'agitation thermique $k_B T$.

Le facteur de Boltzmann apparaît donc dans divers domaines de la physique. On peut remarquer que dans les cas étudiés, la température est fixée. En utilisant cela et la thermodynamique statistique, nous allons montrer d'où vient ce facteur.

2 Ensemble canonique

2.1 Contextualisation

On considère ici un système que l'on nommera S qui est en contact avec un thermostat (que l'on nommera Th) à $T = T_0$ qui est un système beaucoup plus gros que S donc d'énergie beaucoup plus grande. L'ensemble [S+Th] est isolé ce qui en fait un ensemble microcanonique.

Avec l'extensivité de l'énergie $E_{tot} = E_S + E_{th}$ avec $E_S \ll E_{th}, E_{tot}$

2.2 Loi de distribution

L'ensemble [S+Th] étant un ensemble microcanonique, nous pouvons déterminer la probabilité que le système S soit dans une micro-état d'énergie E_l :

$$P_l(E_S = E_l) = \frac{\Omega_{th}(E_{tot} - E_l)}{\Omega_{tot}(E_{tot})} = C\Omega_{th}(E_{tot} - E_l)$$

En combinant cela à l'expression de l'entropie proposé par Maxwell Boltzmann $S = k_B \ln(\Omega)$, on trouve à l'aide d'un développement limité de S par rapport à E :

$$P_l(E_S = E_l) = \frac{e^{-\frac{E_l}{k_B T}}}{Z}$$

Z est fixé par $\sum P_l = 1$ et est appelée fonction de partition. Elle permet de retrouver les grandeurs thermodynamiques définies classiquement. En effet, on peut prouver que l'on a :

- $\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$
- $F = -k_B T \ln(Z)$ avec $F = U - TS$

2.3 Paramagnétisme

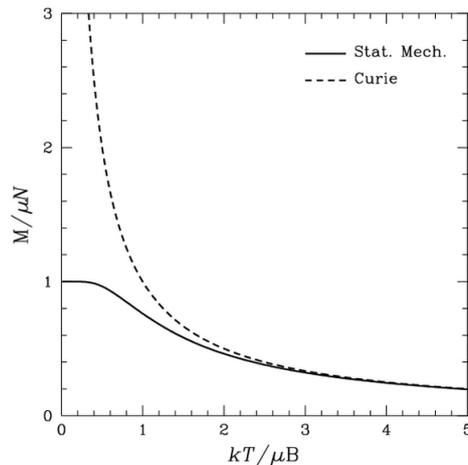
On considère une particule avec un moment magnétique plongé dans un champ magnétique \vec{B} . Le moment magnétique peut s'aligner soit dans le sens de \vec{B} , soit dans le sens opposé. On a donc :

$$E_{up} = -MB \text{ et } E_{down} = MB$$

En utilisant l'expression des probabilités en fonction des énergies que l'on a trouvé plus tôt, on peut calculer l'aimantation moyenne :

$$\langle M \rangle = MP_{up} - MP_{down} = M \text{th} \left(\frac{MB}{k_B T} \right)$$

On remarque qu'à haute température, l'aimantation est proportionnelle à l'inverse de la température. C'est ce que l'on appelle la loi de Curie. A basse température, l'aimantation tend vers une valeur finie. Cela peut se résumer sur le graphe suivant :



3 Application : théorème de l'équipartition de l'énergie

3.1 Hypothèses

- $h \ll \delta x \delta p$. Cette hypothèse assure que les volumes que l'on considère dans nos intégrales contient beaucoup d'états quantiques et que donc une vision continue de ces derniers est justifiée
- $\Delta E \ll k_B T$. Les niveaux d'énergie sont ainsi balayés de manière quasi-continue
- En notant v_i les paramètres de notre problème, on supposera que l'hamiltonien s'écrit : $H(v_1, \dots, v_N) = b v_1^2 + f(v_2, \dots, v_N)$ avec la variable v_1 indépendante des autres

3.2 Calcul

$$\begin{aligned}
 H(v_1, \dots, v_N) &= bv_1^2 + f(v_2, \dots, v_N) \\
 \langle bv_1^2 \rangle &= \frac{\int bv_1^2 e^{-\beta H(v_1, \dots, v_N)} dv_1 \dots dv_N}{\int e^{-\beta H(v_1, \dots, v_N)} dv_1 \dots dv_N} \\
 &= \frac{\int bv_1^2 e^{-\beta bv_1^2} dp_1}{\int e^{-\beta bv_1^2} dv_1} \quad v_1 \text{ indépendant des autres variables} \\
 &= b \frac{\sqrt{\pi}}{2(\beta b)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{\sqrt{\frac{\pi}{\beta b}}} \\
 &= \frac{k_B T}{2}
 \end{aligned}$$

Formulaire :

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \int_{\mathbb{R}} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a^{3/2}}$$

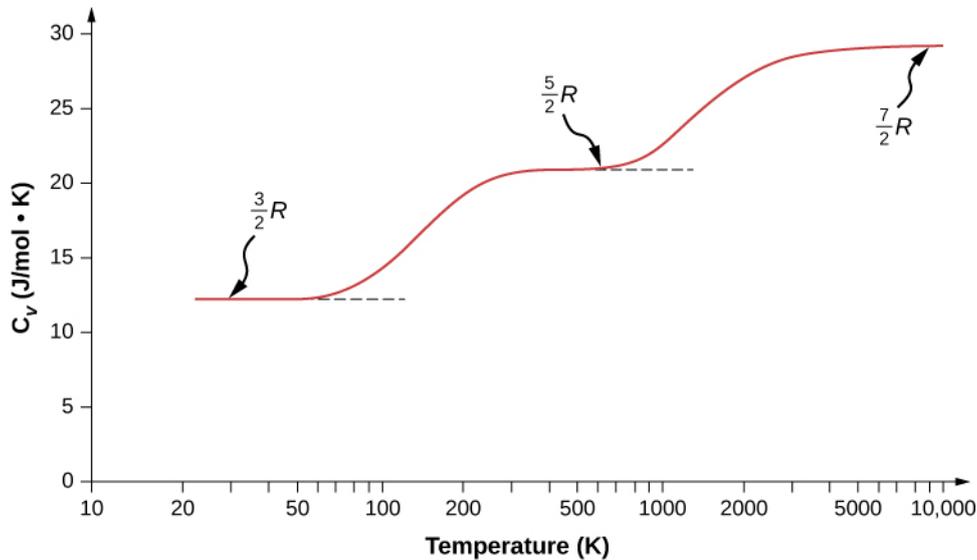
Pour une particule avec N_d degrés de liberté quadratiques, nous avons donc $\langle U \rangle = N_d \frac{k_B T}{2}$

3.3 Loi de Dulong-Petit

Remarque

Le titre de cette partie est mal choisie car on parle de gaz diatomique et pas d'un solide cristallin.

Pour un système de N particules avec N_d degrés de liberté, on a donc $U_{tot} = NN_d \frac{k_B T}{2}$. La capacité molaire dont la formule est $c_V = \frac{1}{n} \frac{\partial U_{tot}}{\partial T}$ vaut donc ainsi $c_V = N_d \frac{RT}{2}$



Graphique capacité calorifique en fonction de la température. On observe trois domaines :

- Faibles températures : les seuls degrés disponibles sont les trois translations
- Les températures intermédiaires : on rajoute deux rotations, celle autour de l'axe de la liaison étant négligée
- Haute température : les deux particules vibrent l'une par rapport à l'autre. Nous avons donc un oscillateur harmonique en plus et donc deux degrés de liberté supplémentaires

Questions

- Tu entends quoi par grandeurs thermodynamiques ? E , F et l'entropie
- C'est quoi l'ensemble microcanonique et où est-ce qu'on l'utilise dans cette leçon ? *Système isolé, tout est fixé.* On l'utilise quand on considère $S+Th$ isolé
- Quelle est la différence entre un micro état et un état ?

- Différence entre gravité et pesanteur? *Pesanteur c'est toutes les forces (gravité et centrifuge) et gravité c'est juste la force de gravité*
- Pour les frottements fluides tu as parlé de la force de Stokes. Elle date de quand? *Vers 1850*
- C'est quoi la loi de Fick? Tu peux en donner une justification et son cadre (quand est-elle valable)? *Approximation linéaire : que des dérivées premières. Pour le signe : on tend juste à homogénéiser.*
- Loi de Stokes-Einstein, dans quel cours on peut la voir? *Diffusion, mouvement brownien*
- Tu connais la loi de fluctuation dissipation?
- Thermostat. Est-ce que tu peux mieux le définir d'un point de vue de la physique statistique? Comment tu définis sa température microcanonique et canonique? *On a $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$ Température canonique du système égale la température microcanonique de tous le système.*
- Quel est le postulat fondamental du microcanonique que tu as utilisé? *Tous les micro états ont la même probabilité*
- Quel est l'intérêt de la fonction de partition? *Elle sert de fonction génératrice pour les grandeurs thermodynamiques*
- L'équivalence des ensembles ça te parle?
- On peut montrer avec des développements limités, que dans la limite thermodynamique, l'entropie canonique est égale à l'entropie microcanonique. (Cela vient des fluctuations qui sont en $\frac{1}{\sqrt{N}}$). Equivalence $S = -k_B \sum p_i \ln p_i$ et $S = \frac{U-F}{T}$
- Date spin? *1922 avec Stern et Gerlach*
- Date du modèle du paramagnétisme que t'as proposé?
- Différence entre paramagnétisme et diamagnétisme? *La susceptibilité magnétique est supérieure à 0 pour le para et inférieure à 0 pour dia.*
- C'est quoi la loi de Dulong et Petit? *La capacité calorifique molaire d'un réseau cristallin vaut $3R$*
- Tu as parlé de deux hypothèses dans la partie 1.3.1. Est-ce que tu connais un cas où l'un est vrai et pas l'autre? C'est possible d'avoir $\delta x \delta p \approx \hbar$ et un continuum d'énergie. Dans quel cas? *Gaz d'électrons libres dans une métal*

Remarques

- Bon plan
- Manque de rigueur et de clarté parfois
- Gestion du temps : très bien
- Il faut plus écrire au tableau
- Manque un peu de contextualisation (les deux jurys sont partagés là dessus)
- Attention à la partie que tu as nommé loi de Dulong et Petit parce que tu as pas présenté cette loi en fait mais les gaz diatomiques
- Sur la graphe du la capacité calorifique du gaz diatomique il faut plus écrire, plus présenter les degrés de liberté et l'expression des énergies
- Il faudrait faire le lien à un moment avec l'exemple du début pour rappeler qu'on a déjà vu cette exponentielle
- T'as oublié de faire apparaître le nombre d'Avogadro dans l'expérience de Jean Perrin