

Série 4

La plupart des systèmes physiques et chimiques sont en contact avec un environnement qui impose leur température : ils sont alors naturellement décrits dans l'ensemble canonique. On applique ce formalisme à deux exemples de référence : un ensemble de systèmes à deux niveaux et l'oscillateur harmonique. Parmi de nombreuses applications, les systèmes à deux niveaux représentent des degrés de liberté de spin (sondés notamment par les spectroscopies RMN et RPE).

1 Système de particules à deux niveaux

On s'attache à décrire le comportement d'un système de N particules, ayant chacune deux niveaux d'énergie ϵ_1 et ϵ_2 ($\epsilon_1 < \epsilon_2$). On cherche à établir l'expression de l'énergie interne et de la température pour ce système, en partant soit d'une situation microcanonique, soit d'une situation canonique.

Dans les deux cas, on suit le protocole d'étude d'un système en mécanique statistique : l'identification des micro-états et de leurs énergies, puis le calcul de la fonction de partition, avant l'obtention du potentiel thermodynamique et finalement des coordonnées thermodynamiques d'intérêt.

1. Expliquer pourquoi on peut imposer $\epsilon_1 = 0$ et $\epsilon_2 = \epsilon$, afin de simplifier les calculs à venir.
2. Approche *microcanonique* : le système est isolé et son énergie totale U est fixée.
 - (a) Quels sont les micro-états accessibles au système ? Donner le nombre de ces micro-états.
 - (b) Exprimer l'entropie du système.
 - (c) En déduire la température du système T en fonction de U puis inverser cette relation pour exprimer U en fonction de T .
 - (d) Exprimer le nombre de particules dans chacun des niveaux d'énergie en fonction de T .
3. Approche *canonique* : le système est fermé. Il peut donc échanger de l'énergie avec son environnement, qui fixe sa température T .
 - (a) Quels sont les micro-états accessibles au système ? En déduire la fonction de partition canonique.
Astuce : les fonctions hyperboliques $\sinh(x) = (e^x - e^{-x})/2$ et $\cosh(x) = (e^x + e^{-x})/2$ permettent d'exprimer les fonctions de partition d'une manière compacte. Elles satisfont en particulier $\cosh^2(x) - \sinh^2(x) = 1$.
 - (b) Exprimer le nombre moyen de particules dans chacun des niveaux d'énergie en fonction de T .
 - (c) Trouver l'énergie interne du système et comparer avec le résultat obtenu avec l'approche microcanonique.