Série 7

Dans cette série (à un exercice) on étudie une extension du modèle du gaz parfait vu en cours au cas plus concret d'un gaz diatomique (tel que O_2 ou N_2). Cet exemple illustre la méthode générale pour traiter des degrés de liberté internes qui sera vue en cours, et permet de vérifier explicitement le théorème d'équipartition dans un cas non trivial.

1 Gaz parfait diatomique

On étudie dans l'ensemble canonique un gaz parfait de N molécules diatomiques homonucléaires, contenu dans une enceinte de volume V à température T. On adopte une description classique pour les mouvements de translation de ces molécules, et une description quantique pour leur mouvement de rotation. On supposera que les molécules n'ont pas d'autres degrés de liberté (elles sont dans leur état vibrationnel et électronique fondamental dans les conditions étudiées). On donne le hamiltonien du rotateur rigide :

$$\hat{H}_{\mathrm{rot}} = \frac{\hat{L}^2}{2I}, \tag{1}$$

avec $\hat{L}$ l'opérateur du moment cinétique et I le moment d'inertie de la molécule.

1. Rappeler les états propres de l'opérateur $\hat{L}^2$.
2. Quels sont les micro-états du système ? Donner leurs énergies.
3. Exprimer la fonction de partition canonique en fonction de N, V, la longueur d'onde de de Broglie thermique Λ_T et

$$z_{\mathrm{rot}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{-\beta \frac{\hbar^2}{2I} \ell(\ell+1)}. \tag{2}$$

4. Exprimer l'énergie moyenne du gaz diatomique en fonction de z_{rot}.
5. A quelle condition peut-on remplacer la somme dans l'expression de z_{rot} par une intégrale ? On donne dans ce cas $z_{\mathrm{rot}} = 2I/(\beta\hbar^2)$.
6. Calculer alors l'énergie moyenne du gaz. A-t-on bien équipartition ?
7. Retrouver l'expression donnée à la question 5. On pourra commencer par faire apparaître un carré dans l'exponentielle.