

# Comparaison microcanonique-canonique, vibrateurs et cristal d'Einstein

Les mesures de chaleur spécifique massique de quelques solides à température et pression ambiante (25 °C et 1 atm) donnent ces résultats :

Substance	C (J g-1 K-1)
Aluminium	0.897
Antimoine	0.210
Cuivre	0.384
Or	0.129
Argent	0.231
Plomb	0.129
Fer	0.444
KCl	0.695
Diamant	0.509

- Comment ramener ces valeurs à une base de comparaison commune ?
- Ces chaleurs spécifiques ont été mesurées à pression constante. Est-ce une difficulté ?
- Analyser ces valeurs par rapport à la loi de Dulong et Petit (1819)
- Les mesures suivent-elles systématiquement la loi, y-a-t-il une exception ?

## Les mesures en fonction de la température pour le diamant

Capacité calorifique massique

T	C (J g-1 K-1)
215	0,217
264	0,348
273	0,433
280	0,452
306	0,549
335	0,65
363	0,751
412	0,983
471	1,215
516	1,301
874	1,857
1079	1,869
1238	1,887

- Examiner ces valeurs

## Modèle d'Einstein

- Quelles sont les hypothèses ?

### Résolution utilisant les relations de l'ensemble microcanonique

- Quelles sont les variables ?
- Quelle est la “somme d'état” et sa relation avec une grandeur thermodynamique ?
- Quelles sont les hypothèses utilisées ?
- Disposez-vous d'une autre relation thermodynamique ?
- Comment calculer en pratique la somme d'état pour des vibrateurs (modèle microscopique) ?
- Comment en déduire des grandeurs thermodynamiques (aspect macroscopique) ?
- Comment obtenir la chaleur spécifique et comparer avec les mesures ?
- Quel paramètre peut-on obtenir pour un matériau particulier (diamant par exemple) ?
- Des spectroscopistes indiquent que la fréquence de vibration fondamentale dans le diamant est  $2.78 \cdot 10^{13}$  Hz. Que peut-on en déduire ?
- Même question pour le plomb avec la fréquence  $1.9 \cdot 10^{12}$  Hz

### Résolution utilisant les relations de l'ensemble canonique

- Adopter la même démarche !

## Comparaison

### Les mesures à basse température pour le diamant, le fer

#### Diamant

T	C (J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
12,9	0,00053
16,1	0,00081
19,8	0,00138
24,1	0,00257
30,1	0,00494
33,4	0,0074
41,3	0,0133
47,7	0,02
57,2	0,0365
67	0,0595
76,1	0,092
87	0,147
100,4	0,24
113,1	0,378

T	C (J mol-1 K-1)
126,3	0,56
143,4	0,88
159	1,19
176	1,66
197	2,21

## Données diverses

- Fer
  - $\alpha = 3,54 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  (coefficient de dilatation)
  - $V = 7,12 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3$  (volume molaire)
  - $\kappa = 0,59 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$  (coefficient de compressibilité)

From:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**



Permanent link:

[https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:cv\\_vibration\\_einstein?rev=1394540851](https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:cv_vibration_einstein?rev=1394540851)

Last update: **2014/03/11 13:27**