

# Exercices simples sur l'entropie configurationnelle

- A partir de mesures expérimentales et de calculs théoriques, des chercheurs ont proposé pour borne inférieure de l'entropie d'un cristal d'éthylène la valeur  $0.72 \ln 2 \text{ mol}^{-1}$  et ont montré qu'on pouvait obtenir une valeur arbitrairement proche de zéro pour un cristal d'éthylène.
  - Commenter ce résultat.
  - On tiendra compte de la remarque suivante : si dans deux états microscopiques d'un cristal moléculaire, les molécules n'ont pas la même orientation relative, alors les fonctions d'onde représentant ces états sont différentes.
- Les chercheurs ont proposé pour borne inférieure de l'entropie d'un cristal de  $\text{CH}_2\text{CD}_2$   $5.763 \ln 2 \text{ mol}^{-1}$ .
  - Expliquer ce résultat en remarquant qu'il n'y a pas beaucoup (voir pas du tout) de différence de valeur entre une molécule de  $\text{CH}_2\text{CD}_2$  orientée de deux façons suivantes  $\text{CH}_2\text{CD}_2$  et  $\text{CD}_2\text{CH}_2$ .
  - Justifier la proposition ?
- La borne inférieure de l'entropie d'un cristal de 1,1 dichloroéthène est  $0.72 \ln 2 \text{ mol}^{-1}$ .
  - Interpréter ce résultat.
- La borne inférieure de  $\text{CH}_3\text{D}$  est  $11.526 \ln 2 \text{ mol}^{-1}$ .
  - Interpréter ce résultat.
- Combien de mots différents peut-on former avec trois lettres  $A, B, C$  ?
  - Même question pour 3 lettres  $A, B, B$
  - Même question pour trois lettres identiques ?
  - Ecrire ces mots ? Réponses (6,3,1).
- Combien de mots différents peut-on former avec 3 lettres  $A$  et 2 lettres  $B$  ?
- Combien de mots différents peut-on former avec  $n_A$  lettres  $A$  et  $n_B$  lettres  $B$  ?  
Réponse :  $\frac{(n_A + n_B)!}{n_A! n_B!}$
- On suppose que  $\text{CH}_2 = \text{CH}_2$  et  $\text{CD}_2 = \text{CD}_2$  forment des cristaux mixtes. Préciser ce que l'on entend par cristal mixte ?
  - Calculer la borne inférieure de l'entropie de tels cristaux mixtes pour des cristaux contenant un nombre égal de molécules de chaque espèce.
- Même question pour un cristal contenant 2 fois plus de molécules de  $\text{CH}_2 = \text{CH}_2$  que de molécules de  $\text{CD}_2 = \text{CD}_2$ .

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

Permanent link:  
[https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:entropie\\_configurationelle\\_simple?rev=1384874297](https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:entropie_configurationelle_simple?rev=1384874297)

Last update: 2013/11/19 16:18

