

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 CH_2CD_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 CH_2CD_2 orientée de deux façons suivantes CH_2CD_2 et CD_2CH_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 CH_3D 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

Last update: 2013/11/19 16:18

