ENS Cachan - UPMC

Introduction à la Physique Statistique LP357
2012-2013

TD 2 : Microétats quantiques et classiques

1 Système d'oscillateurs harmoniques

1.1 Description quantique

Un système constitué de N oscillateurs harmoniques *quantiques* de pulsation ω à une dimension, discernables et indépendants, est isolé, son énergie étant égale à E.

▷ **1-1** Donner l'expression de l'énergie du système en fonction des nombres quantiques d'excitation n_i, où $i = 1 \ldots N$.

▷ **1-2** D'après ce qui précède fixer l'énergie E revient à fixer la valeur de la somme des nombres quantiques n_i à une valeur M :

$$\sum_{i=1}^{N} n_i = M \ . \tag{1}$$

Calculer le nombre $\Omega(E, N)$ de microétats dont l'énergie vaut E (Indication : ce problème est équivalent à trouver le nombre de façons de répartir M objets dans N boîtes distinctes). Vérifier l'expression en calculant directement la dégénérescence des niveaux d'énergie d'un oscillateur harmonique tridimensionnel.

▷ **1-3** Dans la limite des hautes énergies (N étant fixé et $M \gg 1$), montrer que l'on a :

$$\Omega(E, N) \simeq \frac{1}{(N-1)!}\left(\frac{E}{\hbar\omega}\right)^{N-1} \ . \tag{2}$$

1.2 Description classique

On considère à présent un système constitué de N oscillateurs harmoniques *classiques* de pulsation ω à une dimension, discernables et indépendants. Ce système est isolé, son énergie étant comprise entre E et $E+\delta E$.

▷ **1-4** Donner l'expression du Hamiltonien du système.

▷ **1-5** Exprimer $\Phi(E, N)$, le nombre de microétats d'énergie inférieure à E, comme une intégrale dans l'espace des phases. Pour calculer cette intégrale on pourra effectuer le changement de variables suivant

$$\begin{aligned} p_i &= \sqrt{2m}X_i \quad \text{pour} \quad i = 1, 2, .., N \\ q_i &= \sqrt{\frac{2}{m\omega^2}}X_i \quad \text{pour} \quad i = N+1, .., 2N, \end{aligned}$$

où $\mathbf{X}$ est un vecteur à $2N$ dimensions. Que vaut le jacobien de la transformation ? En déduire les expressions de $\Phi(E, N)$ et de $\Omega(E, N)$. Comparer ce résultat à celui obtenu à la question **1-3**).

2 Le gaz parfait

2.1 Une particule quantique dans une boîte

Une particule de masse m est confinée dans une enceinte cubique de dimension linéaire L et de volume $V = L^3$.

▷ **2-1** Donner les états propres du Hamiltonien ainsi que les énergies correspondantes.

▷ **2-2** Calculer l'énergie des 15 premiers niveaux d'énergie et donner leur dégénérescence $\Omega(E, V)$. À quelle propriété du système cette dégénérescence est-elle attribuable ? Comment $\Omega(E, V)$ varie-t-elle avec E ?

On cherche à évaluer sommairement la façon dont le nombre de microétats $\Omega(E, V)$ varie avec E et V. Pour cela, on se place dans l'approximation des grands nombres quantiques, de telle façon que l'énergie varie quasi continûment avec les nombres quantiques associés. La fonction $\Omega(E, V)$ est alors elle-même une fonction continue de E.

▷ **2-3** On considère tout d'abord le cas d'une particule dans une boîte à *une* dimension de taille L. À partir de l'expression des niveaux d'énergie de la particule évaluer le nombre d'états $\Phi(E, L)$ d'énergie inférieure ou égale à E. En déduire l'expression de la densité $\omega(E, L)$ d'états compris entre les énergies E et $E + \delta E$ avec $\delta E \ll E$, ainsi que $\Omega(E, L)$. Retrouver ce résultat par un calcul classique.

▷ **2-4** Obtenir la densité d'états $\omega(E, L)$ en *deux* puis en *trois* dimensions quantiquement et classiquement.

▷ **2-5** Calculer le nombre de microétats accessibles pour un atome d'argon de masse molaire $M = 40$ g.mol^{-1} d'énergie comprise entre E et $E + \delta E$, où $E = 6\,10^{-21}$ J et $\delta E = 10^{-31}$ J, dans un volume d'un litre.

2.2 Le gaz parfait quantique

L'enceinte contient N particules sans interaction et supposées *discernables*. Malgré cette hypothèse nous allons étudier ce système dans le cadre de la mécanique quantique.

▷ **2-6** Montrer que ce gaz parfait est équivalent à une particule évoluant dans un espace à $3N$ dimensions. Calculer $\Phi(E, V, N)$ et $\omega(E, V, N)$ en vous inspirant de la question **2-4**.

2.3 Le gaz parfait classique

Le gaz parfait de N particules de masse m est traité dans l'approximation classique.

▷ **2-7** Écrire le Hamiltonien du système.

▷ **2-8** Exprimer $\Phi(E, V, N)$ comme une intégrale dans l'espace des phases et interpréter géométriquement l'intégrale sur les impulsions. En déduire $\Phi(E, V, N)$ et $\omega(E, V, N)$.

Un peu de … *thermodynamique* ! On se place à la limite thermodynamique et on considère un système fermé (N fixé) qui subit une transformation au cours de laquelle $\Omega(E, V, N)$ reste constante alors que E et V peuvent varier indépendamment.

▷ **2-9** En utilisant des relations caractéristiques des gaz parfaits déduire de ce qui précède une relation entre P et V associée à cette transformation. Commenter ce résultat.

3 Particules discernables/indiscernables (en supplément)

Considérons un système quantique de N particules. À chaque niveau d'énergie E_i est associé un nombre d'états quantiques g_i (dégénérescence). Un état macroscopique d'énergie E est défini par l'ensemble des nombres N_i de particules dans chaque niveau d'énergie E_i pour $i = 1, 2, ..., r$. On a donc :

$$E = \sum_{i=1}^{r} N_i \, E_i$$

et

$$N = \sum_{i=1}^{r} N_i.$$

$\triangleright$ **3-1** Montrer que le nombre $\Omega(E, N)$ de microétats associés à cette répartition $\{N_i\}$ peut se décomposer sous la forme suivante :

$$\Omega(E, N) = \Omega_0 \prod_{i=1}^{r} \Omega_i,$$

où Ω_0 est le nombre de façons de répartir les N particules sur r niveaux d'énergies et Ω_i le nombre de façons de distribuer les N_i particules du niveau d'énergie E_i parmi les g_i états quantiques.

3.1 Particules discernables

Supposons les N particules *discernables* (elles sont, par exemple, numérotées de 1 à N).

$\triangleright$ **3-2** Calculer Ω_0 et Ω_i dans le cas où un nombre quelconque de particules peut être dans un même état quantique. En déduire $\Omega(E, N)$ en fonction des N_i et des g_i pour $i = 1, 2, ..., r$.

3.2 Particules indiscernables

Supposons à présent les N particules *indiscernables*. Quelle est la valeur de Ω_0 ?

$\triangleright$ **3-3** Les *bosons*. Calculer Ω_i dans le cas où un nombre quelconque de particules peut être dans un même état quantique. En déduire $\Omega(E, N)$ et son expression dans la limite $N_i \ll g_i$ (faible densité de particules par niveau).

$\triangleright$ **3-4** Les *fermions*. Calculer Ω_i dans le cas où une particule *au plus* peut être dans un état quantique donné. On a alors la condition $0 \leq N_i \leq g_i$. En déduire $\Omega(E, N)$ et son expression dans la limite des faibles densités de particules par niveau.