

TD de Physique Statistique n°2

1 Espace des phases pour un oscillateur harmonique

Un oscillateur harmonique classique unidimensionnel a pour hamiltonien :

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1)$$

où m est la masse de la particule et ω la pulsation de l'oscillateur.

1. Vérifier que les équations de Hamilton pour ce système sont les équations du mouvement que vous connaissez. Résoudre ces équations pour les données initiales :

$$x(t = 0) = x_0 \quad \text{et} \quad p(t = 0) = 0 \quad (2)$$

2. Définir l'espace des phases du système. Esquisser sa trajectoire. Quelle est l'énergie E de l'oscillateur pour cette trajectoire ?
3. Calculer la fraction de temps pendant laquelle la particule a une position comprise entre x et $x + dx$. On écrira le résultat sous la forme $P(x)dx$ et l'on interprètera $P(x)$ comme la densité de probabilité de position.
4. On va retrouver le résultat précédent par une méthode complètement différente. On considère que l'énergie de la particule est connue seulement de manière approchée et se situe entre E et $E + dE$. Dessiner dans l'espace des phases la surface où se situent les états accessibles du système.
5. On suppose que tous les micro-états accessibles (définis dans la question précédente) sont équiprobables. Calculer alors la probabilité pour que l'oscillateur se trouve en un point d'abscisse comprise entre x et $x + dx$.
6. L'approche classique doit être la limite pour les énergies macroscopiques de l'approche quantique. Il est donc nécessaire, comme en mécanique quantique de pouvoir dénombrer les microétats. Quel artifice, emprunté à la mécanique quantique, permet d'effectuer un tel dénombrement dans l'espace des phases ?
7. Calculer le nombre de microétats classiques accessibles à un oscillateur d'énergie comprise entre E et $E + dE$. Comparer ce résultat au calcul quantique, sachant que les énergies quantiques d'un oscillateur à une dimension sont données par la formule :

$$\epsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (3)$$

2 Oscillateurs harmoniques classiques et quantiques

On considère un système constitué de N oscillateurs harmoniques à une dimension, indépendants et identiques. Le hamiltonien du système est :

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q_i^2 \right) \quad (4)$$

1. On suppose que ces oscillateurs sont classiques. On désigne par $\mathcal{V}(E)$ le volume occupé par les états d'énergie $\leq E$ dans l'espace des phases (dont on précisera la dimension). Exprimer $\mathcal{V}(E)$ au moyen de la constante C_{2N} , volume de "l'hypersphère" de rayon 1 dans cet espace (on rappelle que $C_{2N} = \frac{\pi^N}{N!}$, cf. exo 2 du TD1).
2. En faisant l'hypothèse semi-classique qu'un état quantique occupe une cellule de volume h^N de l'espace des phases, calculer le nombre d'états quantiques d'énergie inférieure à E (soit $\Phi(E)$), puis la densité d'états quantique $\rho(E)$.
3. On suppose maintenant que les N oscillateurs sont quantiques. On sait que les niveaux d'énergie de chaque oscillateur sont non dégénérés et de la forme : $\varepsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ (n étant un entier ≥ 0). Calculer le nombre d'états accessibles au système lorsque son énergie vaut E .
Indications : pour calculer le nombre de façons différentes de choisir N nombres entiers positifs ou nuls ($q_1, q_2, q_3 \dots q_N$) de telle sorte que leur somme $\sum_{i=1}^N q_i$ soit égale à un entier donné M , on peut utiliser la méthode suivante : une "façon" est représentée par un schéma où on fait figurer q_1 boules, puis une barre, puis q_2 boules, puis une barre, etc...il ya en tout M boules et $N - 1$ barres. Les permutations de boules ou de barres entre elles ne comptent pas. Seules comptent différentes manières de répartir les M boules, ou de manière équivalente, de placer les $N - 1$ barres.
4. Calculer la densité d'états quantique du système. Montrer que dans la limite $E \gg N\hbar\omega$ on retrouve le résultat semi-classique obtenu à la question (2).

3 Espace des phases de 2 particules libres sur un axe

On considère un système formé de deux particules libres discernables, de même masse, sans interactions mutuelles, se déplaçant sur l'axe Ox entre deux murs réfléchissants situés entre $x = 0$ et $x = L$.

1. Quel est le hamiltonien du système? Donner ses états propres et ses énergies propres. Évaluer le nombre $\Phi(E)$ d'états propres dont l'énergie est inférieure à E .
2. On fait maintenant un calcul purement classique. Définir l'espace des phases associé au problème.
3. En supposant que chaque état quantique correspond à un micro-état qui occupe un volume h^2 de l'espace des phases, donner l'expression formelle permettant de calculer $\Phi(E)$ à partir d'une intégrale dans l'espace des phases. Calculer cette intégrale et comparer avec le résultat de la question (1).
4. Refaites le même calcul en considérant maintenant le cas de N particules de même masse, discernables, sans interaction, contenues dans une boîte cubique de côté L . Montrer que dans ce cas

$$\Phi(E) = \frac{1}{\Gamma(1 + \frac{3N}{2})} \left(\frac{\pi E}{4\varepsilon_0} \right)^{3N/2} \quad \text{où} \quad \varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} .$$

4 Etats d'équilibre de deux boîtes cubiques en contact

On considère un système fermé composé de deux boîtes cubiques identiques de côté L . Les énergies des niveaux les plus bas d'une boîte et leur dégénérescence sont rappelées dans le tableau en fin

d'exercice. On notera I et II ces deux boîtes que l'on met en contact l'une avec l'autre. Le système total est supposé être entouré d'une paroi adiabatique.

1. A l'instant initial $t = 0$, chaque boîte contient une particule mais leur énergie est différente : $E_I = 12 \varepsilon_0$ et $E_{II} = 18 \varepsilon_0$ (ε_0 est défini dans l'exercice 3 ci-dessus, question 3.4).
Calculer le nombre de micro-états accessibles au système I , au système II et au système total.
2. La paroi qui sépare les deux boîtes permet les échanges de chaleur. Le système total n'étant plus en équilibre, il va évoluer vers un état d'équilibre.
Quelle quantité est conservée dans cette transformation ?
Quelles sont les énergies possibles E_I et E_{II} pour les systèmes I et II ?
Quels sont les micro-états accessibles au système ? Combien y en a-t-il ?
Dans quel sens le nombre de micro-états a-t-il varié et de combien ?
3. On suppose maintenant que le système a atteint son état d'équilibre.
Quelle est la probabilité d'obtenir un micro-état donné ?
Quelle est la probabilité pour que le système I ait l'énergie $6 \varepsilon_0, 9 \varepsilon_0, 15 \varepsilon_0$?
Tracer la distribution en énergie des systèmes I et II à l'équilibre.
Donner leur énergie la plus probable.
4. Refaites l'exercice en considérant que chaque boîte contient deux particules discernables.
5. Refaites l'exercice en considérant que chaque boîte contient deux particules indiscernables (qui sont des fermions de spin zéro).

une particule dans une boîte		degén. du niveau	deux particules dans une boîte	degén.(*) du niveau	degén.(**) du niveau
$3 \varepsilon_0$	$3 = 1^2 + 1^2 + 1^2$	1	$6 \varepsilon_0$	1	imposs.
$6 \varepsilon_0$	$6 = 1^2 + 1^2 + 2^2$	3	$9 \varepsilon_0$	6	3
$9 \varepsilon_0$	$9 = 1^2 + 2^2 + 2^2$	3	$12 \varepsilon_0$	15	6
$11 \varepsilon_0$	$11 = 1^2 + 1^2 + 3^2$	3	$14 \varepsilon_0$	6	3
$12 \varepsilon_0$	$12 = 2^2 + 2^2 + 2^2$	1	$15 \varepsilon_0$	20	10
$14 \varepsilon_0$	$14 = 1^2 + 2^2 + 3^2$	6	$17 \varepsilon_0$	30	15
$17 \varepsilon_0$	$17 = 2^2 + 2^2 + 3^2$	3	$18 \varepsilon_0$	15	6
$18 \varepsilon_0$	$18 = 1^2 + 1^2 + 4^2$	3	$20 \varepsilon_0$	60	30
$19 \varepsilon_0$	$19 = 1^2 + 3^2 + 3^2$	3	$21 \varepsilon_0$	12	6
$21 \varepsilon_0$	$21 = 1^2 + 2^2 + 4^2$	6	$22 \varepsilon_0$	15	9
$22 \varepsilon_0$	$22 = 2^2 + 3^2 + 3^2$	3	$23 \varepsilon_0$	60	30
$24 \varepsilon_0$	$24 = 2^2 + 2^2 + 4^2$	3	$24 \varepsilon_0$	31	15
$26 \varepsilon_0$	$26 = 1^2 + 3^2 + 4^2$	6	$25 \varepsilon_0$	60	30
$27 \varepsilon_0$	$27 = 1^2 + 1^2 + 5^2$				
	$27 = 3^2 + 3^2 + 3^2$	4			
$29 \varepsilon_0$	$29 = 2^2 + 3^2 + 4^2$	6			
$30 \varepsilon_0$	$30 = 1^2 + 2^2 + 5^2$	6			

(*) deux particules discernables de même masse.

(**) deux fermions identiques de spin 0.

Règle semi-classique pour calculer la densité d'états

Se souvenir que, pour un système à d degrés de liberté, l'espace des phases est $2d$ -dimensionnel et un micro-état occupe dans l'espace des phases un "volume" h^d .

Plus précisément : on considère un système à d degrés de liberté, décrit par un hamiltonien $H(p_1, \dots, p_d, q_1, \dots, q_d)$. Soit $\Phi(E)$ le nombre d'états quantiques – que l'on identifie aux micro-états de physique statistique – dont l'énergie est plus petite que E . Les exemples présentés dans les exercices précédents justifient que, à la limite thermodynamique, l'on écrive :

$$\Phi(E) = \frac{1}{h^d} \int_{\mathcal{V}(E)} dq_1 \dots dq_d dp_1 \dots dp_d, \quad (5)$$

où $\mathcal{V}(E)$ est la région de l'espace des phases classique définie par $H(p_1, \dots, p_d, q_1, \dots, q_d) \leq E$.

La densité d'états $\rho(E)$ se calcule alors par $\rho(E) = d\Phi/dE$.

Si le système contient N particules indiscernables (par exemple on considère N particules indiscernables dans un espace à 3 dimensions et $d = 3 \times N$) alors il ne faut pas distinguer les micro-états correspondant à des permutations des particules et il faut rajouter un facteur $(1/N!)$ dans le membre de droite de la formule (5).