

## TD de Physique Statistique n° 4 *Ensemble canonique*

### 1 Gaz parfaits.

On considère un gaz parfait (GP) monoatomique classique constitué de  $N$  particules indiscernables, contenues dans une enceinte de volume  $V$  en contact avec un thermostat à la température  $T$ .

1/ Calculer la fonction de partition canonique  $Z_1$  dans le cas  $N = 1$ .

2/ Montrer que la fonction de partition canonique à  $N$  particules  $Z_N$  se déduit de  $Z_1$  par :

$$Z_N = \frac{1}{N!} Z_1^N \quad (1)$$

3/ Ecrire la probabilité qu'une particule du GP ait une position  $\vec{r}$  à  $d^3\vec{r}$  près avec une impulsion  $\vec{p}$  à  $d^3\vec{p}$  près. Retrouver alors la loi de distribution des vitesses de Maxwell.

4/ Le résultat de factorisation de l'Eq.(1) est-il toujours valable si :

- les particules du GP sont de plus plongées dans un potentiel extérieur  $U_{\text{ext}}(\vec{r})$  ?
- les particules ont des interactions entre elles (le gaz n'est plus parfait !)
- les particules du GP possèdent des degrés de liberté internes (GP polyatomique) ?
- les particules sont des fermions indiscernables (sans interaction) ?
- les particules sont en fait relativistes ( $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$  où  $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$ ) ?
- les particules sont en fait ultrarelativistes ( $E \simeq pc$ ) ?

Discuter également la nature de la loi de distribution des vitesses dans chacun des cas.

5/ Dans le cas d'un GP ultrarelativiste, calculer  $Z_1$  puis  $Z_N$ . Calculer l'énergie  $\mathcal{E}$  du GP, son énergie libre  $\mathcal{F}$  puis la pression  $P$ . En déduire l'équation d'état du GP ultrarelativiste  $f(\mathcal{E}, P, V) = 0$ , à comparer à celle du GP non relativiste.

### 2 Capacité calorifique d'un solide (modèle d'Einstein).

On considère un solide composé de  $N$  atomes. Les  $3N$  degrés de liberté "de vibration" du solide sont représentés par  $3N$  oscillateurs harmoniques (quantiques) à une dimension, indépendants et **discernables**. On note  $\omega$  la pulsation commune à tous ces oscillateurs.

1/ Calculer la fonction de partition canonique d'un des oscillateurs harmoniques.

2/ En déduire l'énergie moyenne d'un oscillateur harmonique, puis l'énergie totale de la collection des  $3N$  oscillateurs.

3/ Calculer la capacité calorifique du solide  $C_V$ .

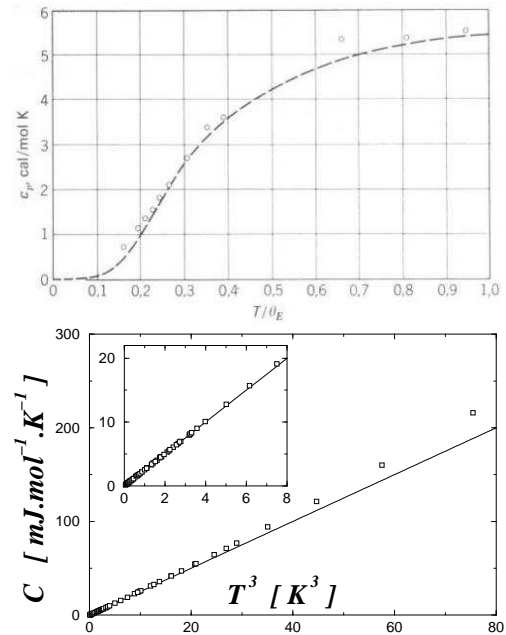
4/ Quels sont les comportements de  $C_V$  prédits par le modèle à haute et basse températures ? Comparer avec les résultats expérimentaux suivants :

À haute température ( $T \rightarrow \infty$ ) :  $C_V \rightarrow 3Nk_B$  (loi de Dulong et Petit).

Capacité calorifique du diamant (en  $\text{cal.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ). Les points expérimentaux sont comparés avec la courbe calculée par le modèle d'Einstein en utilisant la température caractéristique  $\theta_E = \hbar\omega/k_B = 1320 \text{ K}$  (d'après A. Einstein, *Ann. Physik* **22**, 180 (1907)).

À basse température ( $T \rightarrow 0$ ) :  $C_V \simeq aT + bT^3$  avec  $a \neq 0$  pour un solide conducteur et  $a = 0$  pour un solide isolant.

Capacité calorifique de l'argon solide représentée en fonction de  $T^3$  (d'après L. Finogold et N.E. Phillips, *Phys. Rev.* **177**, 1383 (1969)). La ligne droite est un fit des données expérimentales. L'insert est un agrandissement de la figure aux basses températures.



### 3 Particules quantiques indiscernables.

Dans cet exercice on vérifie sur un exemple simple que la loi (1) n'est pas valable pour des particules quantiques indiscernables, même si elles sont sans interaction mutuelle.

On considère un hamiltonien quantique à un corps ayant trois niveaux propres (non dégénérés) d'énergies 0,  $\epsilon$  et  $2\epsilon$ .

1/ On met une particule (sans spin) dans le système. Calculer la fonction de partition canonique  $Z_1$ .

2/ On met dans le système deux particules discernables, sans spin et sans interaction mutuelle. Calculer la fonction de partition canonique  $Z_2^{\text{dis}}$ . Vérifier que  $Z_2^{\text{dis}} = (Z_1)^2$ .

Ce résultat est généralisable au cas de  $N$  particules. Démontrez-le en analysant la structure des fonctions d'onde qui forment l'espace de Hilbert pour  $N$  particules discernables.

3/ On met dans le système deux bosons identiques, de spin nul (toujours sans interaction mutuelle). Calculer la fonction de partition canonique  $Z_2^B$ .

4/ On met dans le système deux fermions identiques, de spin nul<sup>1</sup>(toujours sans interaction mutuelle). Calculer la fonction de partition canonique  $Z_2^F$ .

5/ On met dans le système deux fermions de spin 1/2 (toujours indiscernables et sans interaction mutuelle). Calculer la fonction de partition canonique  $Z_2^{1/2,F}$ .

Vérifier que l'on obtient la même fonction de partition en plaçant deux fermions de spin nul dans un système ayant la même séquence de niveaux, mais dégénérés chacun deux fois. Expliquer. Ce résultat est-il généralisable ?

6/ Reprendre l'exercice en mettant 3 particules sans spin dans le système. On considèrera le cas des particules discernables, des bosons de spin nul, ou des fermions (spin nul ou demi-entier).

<sup>1</sup>On viole le théorème spin-statistique!