

CORRECTION DE L'EXAMEN PARTIEL DE PHYSIQUE STATISTIQUE DU 15 MARS 2023

Questions de cours (~ 10mn)

→ cf. cours

Postulat fondamental : « *tous les microétats accessibles d'un système isolé et à l'équilibre (macroscopique) sont équiprobables.* »

Problème 1 : Oscillateurs harmoniques (~ 45mn)

1/ **Préliminaire (questions de cours)** : a) , b) , c) → cf. cours

d) Règle de composition pour des systèmes indépendants (pb séparable) : $Z_{1\otimes 2} = Z_1 Z_2$.

2/ On doit calculer une série géométrique :

$$z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2 \operatorname{sh}(\beta\hbar\omega/2)} \quad (1)$$

3/ Pour N oscillateurs 1D indépendants, identiques (et discernables) : $Z_N = z^N$.

4/ L'énergie moyenne $\bar{E}^c = -\partial_\beta \ln Z_N = -N\partial_\beta \ln z = N\bar{\varepsilon}^c$ avec $\bar{\varepsilon}^c = \frac{\hbar\omega}{2} \coth(\beta\hbar\omega/2)$. On analyse les comportements limites :

- Régime classique ($T \gg \hbar\omega/k_B$) : $\bar{\varepsilon}^c \simeq k_B T$ (résultat du th. d'équipartition) ; l'oscillateur quantique est fortement excité.
- Régime quantique ($T \ll \hbar\omega/k_B$) : on utilise $\coth x \simeq 1 + 2e^{-2x}$ pour $x \gg 1$, d'où $\bar{\varepsilon}^c \simeq \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega}$, ce qu'on interprète en terme du spectre de l'oscillateur comme

$$\bar{\varepsilon}^c \simeq \varepsilon_0 + \Delta e^{-\Delta/(k_B T)} \quad \text{où } \Delta = \varepsilon_1 - \varepsilon_0 \quad (2)$$

est le gap d'excitation. Pour $T \rightarrow 0$, l'énergie sature à l'énergie fondamentale ε_0 : l'oscillateur est bloqué dans son état fondamental car l'énergie disponible dans le thermostat $\sim k_B T$ n'est pas suffisante pour l'exciter. Le terme correctif est Δ (le gain en énergie si l'oscillateur saute dans le premier état excité) pondéré par la probabilité d'excitation $\sim e^{-\beta\Delta} \ll 1$.

5/ Discutons la relation avec les résultats microcanoniques. En utilisant $(1-x)^{-N} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(N+m-1)!}{m!(N-1)!} x^m$ on peut développer la fonction de partition

$$Z_N = \frac{e^{-N\beta\hbar\omega/2}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^N} = e^{-N\beta\hbar\omega/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(N+m-1)!}{m!(N-1)!} e^{-m\beta\hbar\omega} \quad (3)$$

qu'on identifie avec le développement sur les niveaux d'énergie $Z = \sum_m g_m e^{-\beta E_m}$, où g_m est la dégénérescence du niveau. On a donc

$$\begin{cases} E_m = \hbar\omega \left(\frac{N}{2} + m\right) \\ g_m = \frac{(N+m-1)!}{m!(N-1)!} \end{cases} \quad \text{pour } m \in \mathbb{N} \quad (4)$$

En passant par le calcul de Z_N , un simple développement de Taylor nous a permis de retrouver les dégénérescences obtenues en TD par un argument combinatoire (plus subtil).

6/ BONUS : Pour faire le lien entre *canonique* et *microcanonique*, on doit passer de $E = \overline{E^c}(T)$ à $T^*(E) = T$ (les deux fonctions réciproques selon l'équivalence entre ensembles). Posons $E = \hbar\omega(m + N/2)$, alors $E = \frac{N\hbar\omega}{2} \coth(\beta\hbar\omega/2)$ devient

$$m = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{N}{2} = \frac{N}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (5)$$

qu'il est facile d'inverser :

$$T = \frac{\hbar\omega/k_B}{\ln(1 + N/m)} \quad (6)$$

ce qui correspond à l'expression de la température microcanonique

$$T^*(E, N) = \frac{\hbar\omega/k_B}{\ln\left(1 + \frac{N\hbar\omega}{E - N\hbar\omega/2}\right)}. \quad (7)$$

Problème 2 : Équations d'état pour des gaz sur réseau ($\sim 60\text{mn}$)

Gaz sur réseau : on étudie N particules dans les M cases divisant l'espace ($M = V/v$ joue le rôle de volume).

Gaz de fermions.— soit une case est vide, soit elle contient une unique particule (principe de Pauli). On a donc un problème à deux états. Le fait de caractériser les microétats par les occupations des cases intègre l'indiscernabilité des particules (le postulat de symétrisation).

1/ Le nombre de microétats (accessibles) est $\Omega_f(N, M) = \frac{M!}{N!(M-N)!}$, qui est le nombre de manières de choisir N cases occupées et $M - N$ cases vides.

2/ L'entropie des fermions est $S_f^* = k_B \ln \Omega_f$, d'où

$$S_f^*(N, M) \stackrel{\text{Stirling}}{\simeq} k_B [M \ln M - N \ln N - (M - N) \ln(M - N)] \quad (8)$$

3/ La pression microcanonique est définie comme $p^* \stackrel{\text{def}}{=} T^* \frac{\partial S_f^*}{\partial V}$. On dérive S_f^* par rapport à M : $p_f^* = \frac{k_B T^*}{v} \frac{\partial}{\partial M} [M \ln M - N \ln N - (M - N) \ln(M - N)] = \frac{k_B T^*}{v} \ln(M/(M - N))$ i.e.

$$p_f^* = -\frac{k_B T^*}{v} \ln(1 - \rho v), \quad (9)$$

où l'on a introduit la densité moyenne $\rho = N/V = N/(Mv)$.

4/ Le potentiel chimique microcanonique est $\mu^* \stackrel{\text{def}}{=} -T^* \frac{\partial S_f^*}{\partial N}$. On trouve

$$\mu_f^* = -k_B T^* \ln\left(\frac{1}{\rho v} - 1\right). \quad (10)$$

Gaz de bosons.— Les bosons peuvent occuper les cases en nombres arbitraires.

5/ $\Omega_b(N, M)$ correspond au nombre de manières pour répartir les N bosons dans les M cases, i.e. au nombre de façons de partitionner l'entier $N = \sum_{i=1}^M n_i$ en M entiers. On a fait cela en TD (nombre de permutations inéquivalentes des N particules et de $M - 1$ séparateurs) :

$$\Omega_b(N, M) = \frac{(M - 1 + N)!}{N!(M - 1)!} \quad (11)$$

6/ L'entropie des bosons est donc

$$S_b^*(N, M) \simeq k_B [(M + N) \ln(M + N) - N \ln N - M \ln M] \quad (12)$$

7/ Une dérivée par rapport à M nous donne la pression $p_b^* = \frac{T^*}{v} \frac{\partial S_b^*}{\partial M} = \frac{k_B T^*}{v} \ln((M + N)/M)$ i.e.

$$p_b^* = \frac{k_B T^*}{v} \ln(1 + \rho v). \quad (13)$$

8/ Une dérivée de S_b^* par rapport à N nous donne le potentiel chimique des bosons

$$\mu_b^* = -k_B T^* \ln\left(\frac{1}{\rho v} + 1\right). \quad (14)$$

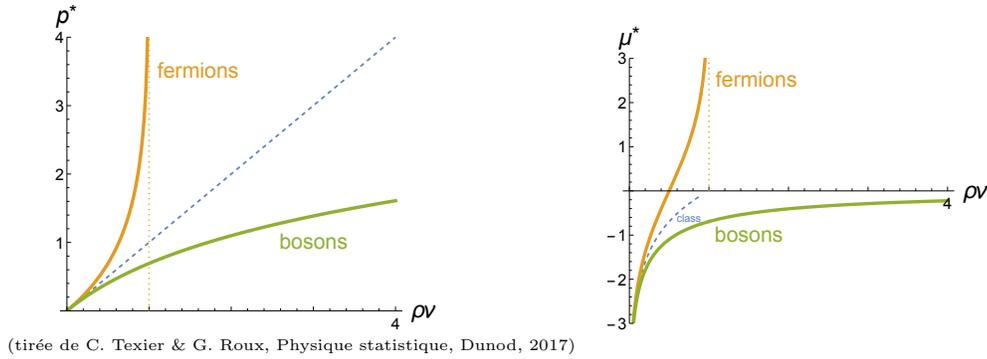
Conclusion

9/ **Limite diluée.**— Si $\rho \ll 1/v$, on obtient $p_b^* \simeq p_f^* \simeq k_B T^* \rho$ (équation d'état universelle des gaz parfaits classiques).

De même, les deux potentiels chimiques coïncident $\mu_f^* \simeq \mu_b^* \simeq k_B T^* \ln(\rho v)$.

Dans ce régime, chaque case a une probabilité très faible d'être occupée. La question de l'occupation multiple d'un état individuel (une case) se pose peu et les particules "sentent" peu les effets du postulat de symétrisation (la nature fermionique/bosonique).

10/ En revanche, si l'on considère un régime de haute densité $\rho v \sim 1$ pour les fermions ou $\rho v \gtrsim 1$ pour les bosons, les effets du postulat de symétrisation deviennent importants et les deux équations d'état dévient fortement de l'équation d'état classique.



Dans le cas des fermions, si la densité tend vers sa valeur maximale, $\rho \rightarrow 1/v$, le principe de Pauli empêche les particules de se mettre à plusieurs dans une case, i.e. génère une "répulsion" effective (augmentation de la pression par rapport au cas classique).

Dans le cas des bosons, à forte densité, la pression est abaissée, ce que l'on interprète comme l'effet d'une "attraction" effective entre bosons (qui ont tendance à se regrouper dans les cases).

Insistons : on étudie ici des particules *sans interaction* (gaz parfaits quantiques). La "répulsion" effective (fermions) ou l'"attraction" effective (bosons) vient uniquement du postulat de symétrisation (les "corrélations quantiques").

11/ **BONUS :** La même remarque s'applique aux potentiels chimiques.

Le potentiel chimique des fermions $\mu_f^* \simeq -k_B T^* \ln(1 - \rho v) \rightarrow +\infty$ pour $\rho \rightarrow 1/v$; la divergence vient de l'occupation complète des cases (il devient impossible d'ajouter des fermions). Ici le coût est de nature entropique puisqu'il n'y a pas d'énergie. Pour les bosons, $\mu_b^* \simeq -k_B T^*/(\rho v) \rightarrow 0^-$ pour $\rho \gg 1/v$: il tend vers l'énergie minimale d'un boson, qui est ici $\varepsilon_0 = 0$ dans notre modèle sans énergie.

En M1, vous étudierez les comportements de ces grandeurs pour un modèle plus réaliste de particules pouvant se mouvoir librement dans l'espace.