

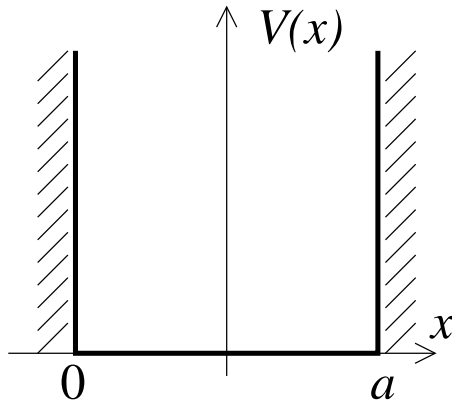
THERMODYNAMIQUE STATISTIQUE

TD n°2: Densité d'états.

De Brooglie a associé à toute particule matérielle de masse m et de quantité de mouvement \vec{p} une onde de vecteur d'onde $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, où $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Ce comportement ondulatoire s'exprime via une fonction d'onde $\psi(x, t)$ que l'on peut calculer en résolvant l'équation de Schrödinger. La présentation et la résolution détaillées de cette équation font l'objet du cours de mécanique quantique. Pour ce TD, nous admettrons directement que

$$\psi(x, t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) e^{i\omega t} \quad (1)$$

où $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$, et A et B sont à préciser.



On s'intéresse au cas où la particule est dans un puit de potentiel de longueur a , c'est-à-dire au cas où la particule ne peut pas sortir de l'intervalle $[0, a]$ car la valeur du potentiel passe brusquement de 0 à $+\infty$ aux bornes de $[0, a]$ (cf figure ci-contre).

L'énergie vaut $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$. Dans le puit où V est nul on a donc $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Le but de ce TD est de montrer que même si, comme on va le voir, le spectre en énergie est quantifié, i.e. discret, on peut introduire (dans une certaine limite) un formalisme continu par le biais de la 'densité d'état' pour calculer toutes les grandeurs thermodynamiques.

1. Quantification de l'énergie

On se place tout d'abord, comme le suggère la figure ci-dessus, dans le cas unidimensionnel. On veut imposer des conditions aux limites de type 'bords durs', c'est-à-dire $\psi(0, t) = \psi(a, t) = 0$.

- Donner l'expression de ψ à une constante multiplicative près, et montrer que k (et donc E) est quantifié. ψ_k et ψ_{-k} représentent-ils le même état physique?
- Exprimer $N(E)$, le nombre d'états d'énergie inférieure ou égale à E . En déduire la densité d'états $g(E) = \frac{dN(E)}{dE}$.

On peut généraliser ces résultats aux situations bi- et tridimensionnelles.

- Donner sans calcul les valeurs permises de k_x , k_y (k_z).
- Exprimer les $N(E)$ et $g(E)$ correspondants.

2. Utilité de $g(E)$. Limite classique

Les vecteurs \vec{k} que nous venons de déterminer qualifient complètement les ‘microétats’ du système. Les calculs des grandeurs thermodynamiques vont faire intervenir des sommes sur tous les états, et donc sur tous les \vec{k} possibles. Par exemple, pour la particule étudiée dans la partie 1., la fonction de partition canonique Z s’écrit:

$$Z = \sum_{\vec{k} \text{ possibles}} e^{-\frac{E_k}{k_B T}} \quad (2)$$

- Réécrire Z en fonction de $N(E_k + \Delta E) - N(E_k)$.
- Donner la valeur minimale ΔE_{\min} de ΔE .
- Montrer que si $\Delta E_{\min} \ll k_B T$ alors $Z \sim \int_0^{+\infty} dE g(E) e^{-\frac{E}{k_B T}}$.
- En utilisant $p = \frac{h}{\lambda}$, trouver la longueur d’onde λ_{th} associée à une particule d’énergie $k_B T$. Ramener le critère $\Delta E_{\min} \ll k_B T$ à une comparaison entre λ_{th} et a .

Remarque: La limite $\Delta E_{\min} \ll k_B T$ est appelée ‘limite classique’. Elle permet de simplifier beaucoup les calculs puisqu’on peut transformer les sommes discrètes en intégrales de fonctions continues. $k_B T$ est dans ce cas suffisamment grand pour pouvoir ‘résumer toutes les sensibilités quantiques’ dans la même fonction $g(E)$.

Exemple: Pour un électron ($m \sim 10^{-30}$ kg) on a

$\lambda_{th} = 6$ nm à $T = 300$ K.

$\lambda_{th} = 0.6$ μ m à $T = 30$ mK.

La limite classique est donc toujours valable sauf aux températures très basses dans les très petits circuits.

3. Équipartition de E à la limite classique

On considère m particules sans interaction (gaz parfait) dans le puits de potentiel étudié dans la première partie.

- Calculer $Z_{m=1}$ dans la limite classique (en utilisant $g_{m=1}(E)$). En déduire qu’en dimension d , on a $U_{m=1} = \frac{1}{2} d k_B T$ (équipartition de l’énergie).

Remarque: nous verrons au TD 3 que pour m particules sans interaction (gaz parfait), on obtient $U_m = m \times U_1$.