Université de Strasbourg

TD4 - Ensemble canonique

Jérôme Tribollet

Transcrit par
Pierre Guichard

L3 Semestre 5 2020

1 Entropie dans un ensemble à deux niveaux

On considère N systèmes indépendants. Chaque système peut se trouver dans un état d'énergie E et E' en équilibre avec un thermostat de température T (on suppose qu'aucun des systèmes n'est dégénéré). On désigne par n et n' les populations des systèmes ayant respectivement l'énergie E et E'. On a : $n \gg 1$ et $n' \gg 1$ et bien évidemment que $N = n + n'$. Si une transition se produit sur l'un des systèmes avec un transfert d'énergie vers le réservoir, les modifications sur les populations se produisent selon les règles :

$$n \to (n+1) \qquad n' \to (n'-1)$$

1. **Calculer la variation d'entropie des N systèmes.**

   On sait que la variation d'entropie $\Delta S^\star$ est :

$$\begin{aligned}\Delta S^\star &= S_f^\star - S_i^\star \\ &= k_B \ln\big(C_N^{n+1}\big) - k_B \ln(C_N^n) \\ &= k_B \ln\left(\frac{n!(N-n)!}{(n+1)!(N-(n+1))!}\right) \\ &= k_B \ln\left(\frac{N-n}{n+1}\right) \\ &= k_B \ln\left(\frac{n'}{n+1}\right)\end{aligned}$$

   On suppose que $n \gg 1$:

$$= k_B \ln\left(\frac{n'}{n}\right)$$

2. **Que vaux la variation d'entropie du réservoir ?**
   On sait que :

$$\delta S = \Delta S_{\text{système}} + \Delta S_{\text{reservoir}} = 0$$

   Car on est dans une situation d'un système isolé à l'équilibre.

   Alors,

$$\Delta S_{\text{système}} = -\Delta S_{\text{reservoir}}$$

   C'est un échange d'entropie.

3. Déterminer la forme que prend le rapport n'/n et commenter.

$$\Delta S = \frac{\delta Q}{T} + 0$$

$$\begin{aligned}\Delta U &= E_f - E_i \\ &= -\Delta E \\ &= \delta Q\end{aligned}$$

$$\Delta S = -\frac{\Delta E}{T} = k_B \ln\left(\frac{n!}{n}\right)$$

Alors, le rapport des deux populations,

$$\frac{n'}{n} = \exp^{-\beta \Delta E}$$

On aurais pu retrouver ça en canonique de façon immédiate :

$$\begin{aligned}\langle n' \rangle (T) &= NP(E', T) = \frac{N}{Z} \exp^{-\beta E'} \\ \langle n \rangle (T) &= NP(E, T) = \frac{N}{Z} \exp^{-\beta E}\end{aligned}$$

Et on obtient immédiatement :

$$\frac{\langle n' \rangle}{\langle n \rangle} = \exp^{-\beta(E'-E)} = \exp^{-\beta \Delta E}$$

2 Paramagnétisme

On considère un cristal parfait de volume V en équilibre avec un thermostat de température T. Le cristal est formé de N atomes identiques ($N \gg 1$), indépendants, fixés aux nœuds du réseau cristallin. Chaque atome possède un spin $s = 1/2$. Le moment magnétique de spin associé s'écrit $\vec{\mu}_{s,j} = -g_s\mu_B\vec{s}$. En l'absence de champ magnétique, le cristal n'est pas aimanté, l'aimantation totale du cristal étant définie par :

$$\vec{M}_{\text{tot}} = \sum_{j=1}^{N} \vec{\mu}_j = -g_s\mu_B \sum_{j=1}^{N} \vec{s}_j$$

Lorsqu'on le soumet à un champ magnétique $\vec{B}_{0_z} = B_{0_z}\vec{e}_z$, il acquiert une aimantation totale. La projection du spin $\vec{s}$ sur l'axe du champ magnétique $\vec{B}_{0_z}$ est, soit $m_{s_z} = +1/2$, soit $m_{s_z} = -1/2$. Pour chaque atome, le Hamiltonien du spin en présence de $\vec{B}_{0_z}$ s'écrit

$$\hat{H}_{\text{mag}} = -\hat{\vec{\mu}}_s\vec{B}_{0_z} = +g_s\mu_B B_{0_z}\vec{s}_z$$

avec

$$\begin{cases} \hat{s}_z \left|s = +1/2, m_{s_z} = +1/2\right\rangle = +1/2 \left|s = +1/2, m_{s_z} = +1/2\right\rangle \\ \hat{s}_z \left|s = +1/2, m_{s_z} = -1/2\right\rangle = -1/2 \left|s = +1/2, m_{s_z} = -1/2\right\rangle \end{cases}$$

1. **Calculer la fonction de partition z d'un atome.**

   Il y a deux niveaux d'énergies : $E_\oplus$ et $E_\ominus$.

$$\left|m_{s_z} = +1/2\right\rangle \rightarrow \begin{cases} E_\oplus = \frac{+g_s\mu_B B_{0_z}}{2} \\ E_\ominus = \frac{-g_s\mu_B B_{0_z}}{2} \end{cases}$$

$$z = \sum_{\{|l\rangle\}} \exp^{-\beta E(|l\rangle)}$$

   Devient ici :

$$\begin{aligned} z &= \sum_{\{m_{s_z}=\pm 1/2\}} \exp^{-\beta E(|m_{s_z}\rangle)} \\ &= \exp^{-\beta\frac{g_s\mu_B B_{0_z}}{2}} + \exp^{\beta\frac{g_s\mu_B B_{0_z}}{2}} \end{aligned}$$

   On pose :

$$x = \frac{\beta g_s\mu_B B_{0_z}}{2}$$

   où $\beta = 1/k_BT$.

D'où, z devient

$$\boxed{z = \exp^{-x} + \exp^{x} = 2\cosh x}$$

2. Quelle est la probabilité pour qu'un spin pointe vers le haut $P_\oplus$? vers le bas $P_\ominus$?

$$P_\oplus(T, B_{0_z}) = \frac{\exp^{-\beta E_\oplus}}{z} = \frac{\exp^{-x}}{2\cosh x}$$

De façon similaire pour $P_\ominus$:

$$P_\ominus(T, B_{0_z}) = \frac{\exp^{-\beta E_\ominus}}{z} = \frac{\exp^{x}}{2\cosh x}$$

Remarques :

- Si $x \to 0^+$, c'est à dire pour $B_{0_z} \to 0^+$ ou $T \to +\infty$

  $$P_\oplus \to 1/2 \text{ et } P_\ominus \to 1/2 \text{ alors } P_\oplus = P_\ominus = 1/2$$

  C'est un état de désordre maximal.

- Si $x \to +\infty$, c'est à dire pour $B_{0_z} \to +\infty$ ou $T \to 0^+$

  $$P_\oplus \to 0 \text{ et } P_\ominus \to 1$$

  C'est l'état ordonné, l'état fondamental.

3. Montrer que la fonction de partition Z du système s'écrit $Z = z^N$.

$$Z = \sum_{\{|l\rangle^{\text{à N}}\}} \exp^{-\beta E\left(|l\rangle^{\text{à N}}\right)}$$

N spins identiques, indépendant et discernables :

$$\begin{cases} E_{\text{tot}}\left(|l\rangle^{\text{à N}}\right) & = E_1(m_{s_{z_1}}) + E_2(m_{s_{z_2}}) + \ldots + E_N(m_{s_{z_N}}) \\ |l\rangle^{\text{à N}} & = \left|m_{s_{z_1}}, m_{s_{z_2}}, \ldots, m_{s_{z_N}}\right\rangle \end{cases}$$

Donc on peut réécrire Z :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{m_{s_{z_1}}=\pm 1/2\}} \sum_{\{m_{s_{z_2}}=\pm 1/2\}} ... \sum_{\{m_{s_{z_N}}=\pm 1/2\}} \exp^{-\beta E_1(m_{s_{z_1}})} ... \exp^{-\beta E_N(m_{s_{z_N}})} \\ &= \sum_{\{m_{s_{z_1}}=\pm 1/2\}} \exp^{-\beta E_1(m_{s_{z_1}})} ... \sum_{\{m_{s_{z_N}}=\pm 1/2\}} \exp^{-\beta E_N(m_{s_{z_N}})} \\ &= \Pi_{j=1}^{N} \left(\sum_{\{m_{s_{z_j}}=\pm 1/2\}} \exp^{-\beta E_j(m_{s_{z_j}})} \right) \\ &= \Pi_{j=1}^{N} z_j \\ &= z^N \end{aligned}$$

D'où,

$$\boxed{Z = z^N}$$

4. Déduire l'énergie libre F du système.

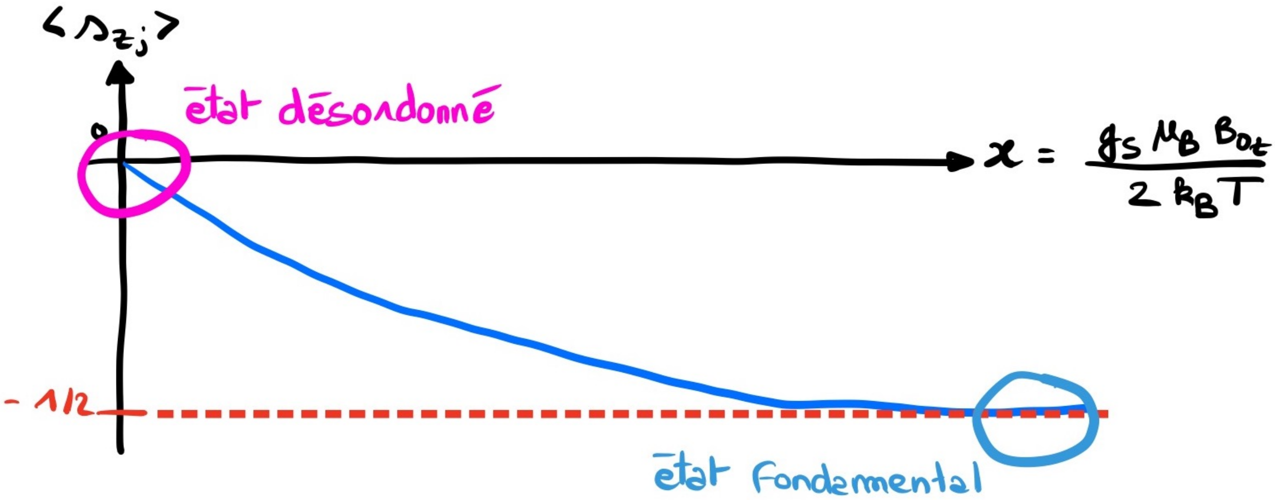
$$\begin{aligned} F(T,V,N) &= -k_B T \ln(Z) \\ &= -N k_B T \ln(z) \\ &= -N k_B T \ln(2\cosh x) \end{aligned}$$

$$\boxed{F = -N k_B T \ln(2\cosh x)}$$

5. Montrer que la valeur moyenne d'un spin est : $\langle s_{z_j} \rangle = -1/2 \tanh(x)$, tracer s comme une fonction de x et commenter.

$$\begin{aligned} \langle s_{z_j} \rangle &= \left(-\frac{1}{2}\right) P_{\ominus}(T) + \left(+\frac{1}{2}\right) P_{\oplus}(T) \\ &= \left(-\frac{1}{2}\right) \frac{\exp^{+x}}{2\cosh x} + \left(+\frac{1}{2}\right) \frac{\exp^{-x}}{2\cosh x} \\ &= -\frac{1}{2} \tanh(x) \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle s_{z_j} \rangle = -\frac{1}{2} \tanh(x)}$$



6. Calculer la susceptibilité magnétique et Δs^2 par spin.

$$\chi_m = \frac{\partial \langle \mu_{s_z} \rangle}{\partial B_{0_z}}$$

où $\langle \mu_{s_z} \rangle = -g_s \mu_B \langle s_{z_j} \rangle$.

$$\begin{aligned}
\chi_m &= \frac{\partial \langle \mu_{s_z} \rangle}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial B_{0_z}} \\
&= \frac{g_s \mu_B}{2} \cdot \left(1 - (\tanh(x))^2\right) \frac{\beta g_s \mu_B}{2} \\
&= \frac{(g_s \mu_B)^2}{4 k_B T} \cdot \left(1 - (\tanh(x))^2\right)
\end{aligned}$$

$$\boxed{\chi_m = \frac{(g_s \mu_B)^2}{4 k_B T} \cdot \left(1 - (\tanh(x))^2\right)}$$

Remarque :

- Si $x \to 0^+$, alors $\tan x \to 0^+$, donc

$$\chi_m \underset{0^+}{\to} \frac{C}{T}$$

où $C = (g_s \mu_B)^2 / 4 k_B$ une constante.

Quand $B_{0_z} \to 0^+$ ou température T élevé, $\chi_m \simeq \frac{C}{T}$: c'est la loi de Curie du paramagnétisme

$$\boxed{\langle \mu_{s_z} \rangle^2 = \left(\frac{g_s \mu_B}{2}\right)^2 (\tanh x)^2}$$

$$\begin{aligned}\frac{\langle \mu_{s_z}^2 \rangle}{(g_s \mu_B)^2} &= \left(\frac{1}{2}\right)^2 P_\oplus + \left(-\frac{1}{2}\right)^2 P_\ominus \\ &= \frac{1}{4}\end{aligned}$$

Donc

$$\boxed{\langle \mu_{s_z}^2 \rangle = \frac{(g_s \mu_B)^2}{4}}$$

Alors,

$$\begin{aligned}\Delta s^2 &= \frac{(g_s \mu_B)^2}{4} - \left(\frac{g_s \mu_B}{2}\right)^2 (\tanh x)^2 \\ &= \frac{(g_s \mu_B)^2}{4} \left(1 - (\tanh x)^2\right) \\ &= k_B T \chi_m(T)\end{aligned}$$

Donc

$$\boxed{\Delta s^2 = k_B T \chi_m(T)}$$

7. Calculer U l'énergie interne du système.

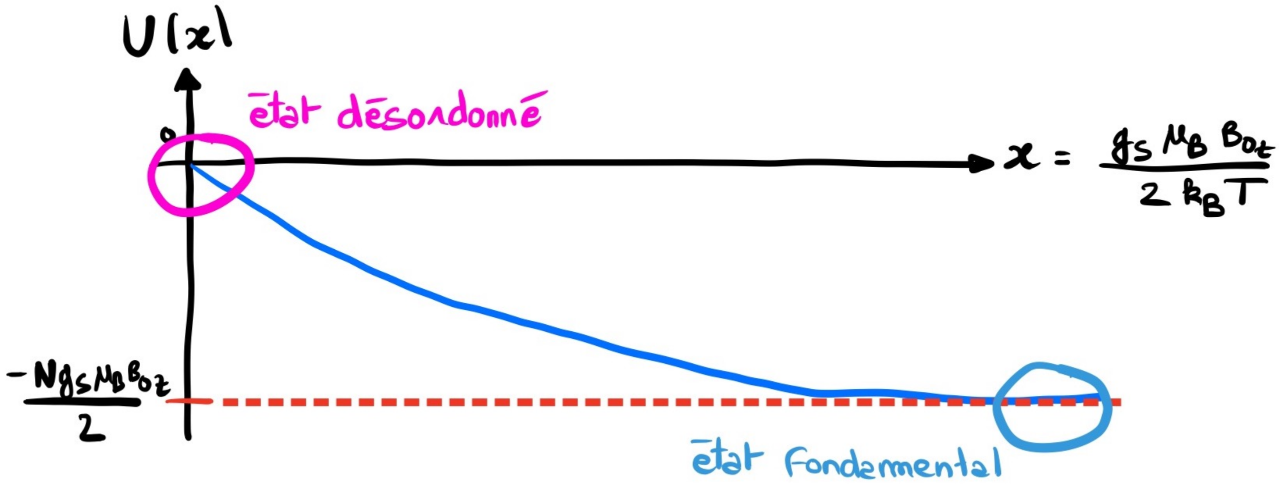
$$U = \langle E \rangle = -\frac{\partial \ln z}{\partial \beta}$$

En utilisant les résultats précédents :

$$\begin{aligned}U &= \langle \sum_{j=1}^{N} + g_s \mu_B B_{0_z} s_{z_j} \rangle \\ &= N g_s \mu_B B_{0_z} \langle s_{z_j} \rangle \\ &= -\frac{N g_s \mu_B B_{0_z}}{2} \tanh(x)\end{aligned}$$

Alors

$$\boxed{U = -\frac{N g_s \mu_B B_{0_z}}{2} \tanh(x)}$$

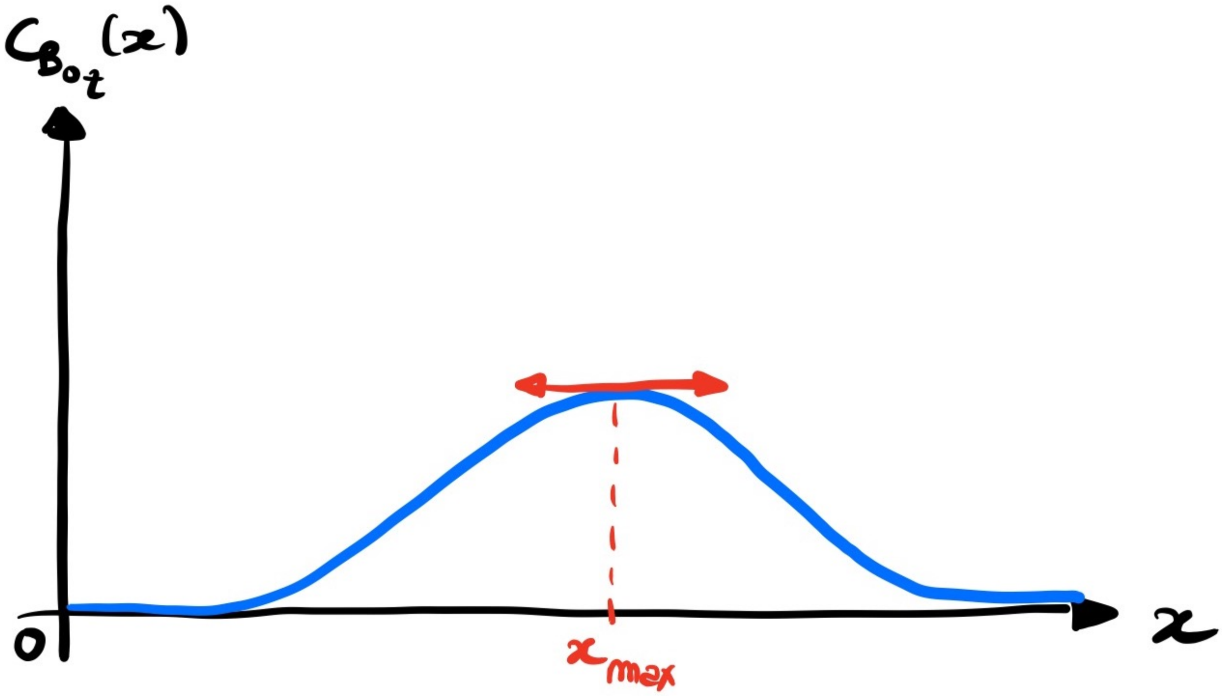


8. Déduire la capacité calorifique $C_{B_{0_z}}$ à champ magnétique constant. Tracer $C_{B_{0_z}}$ en fonction de x. Commenter.

$$
\begin{aligned}
C_{B_{0_z}} &= \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_{B_{0_z}} \\
&= \left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{B_{0_z}} \left.\frac{\partial x}{\partial T}\right|_{B_{0_z}} \\
&= \left(-\frac{N g_s \mu_B B_{0_z}}{2}\right)\left(1-(\tanh x)^2\right)\left(-\frac{g_s \mu_B B_{0_z}}{2 k_B T^2}\right) \\
&= N k_B (x^2)\left(1-(\tanh x)^2\right)
\end{aligned}
$$

Alors

$$
\boxed{C_{B_{0_z}} = N k_B (x^2)\left(1-(\tanh x)^2\right)}
$$



Il y a existence d'un maximum de $C_{B_{0_z}}(x)$.

9. Calculer l'entropie du système. Discuter les deux cas limites.

$$S = \frac{U-F}{T}$$
$$= -Nk_B(x\tanh(x)) + Nk_B\ln(2\cosh(x))$$

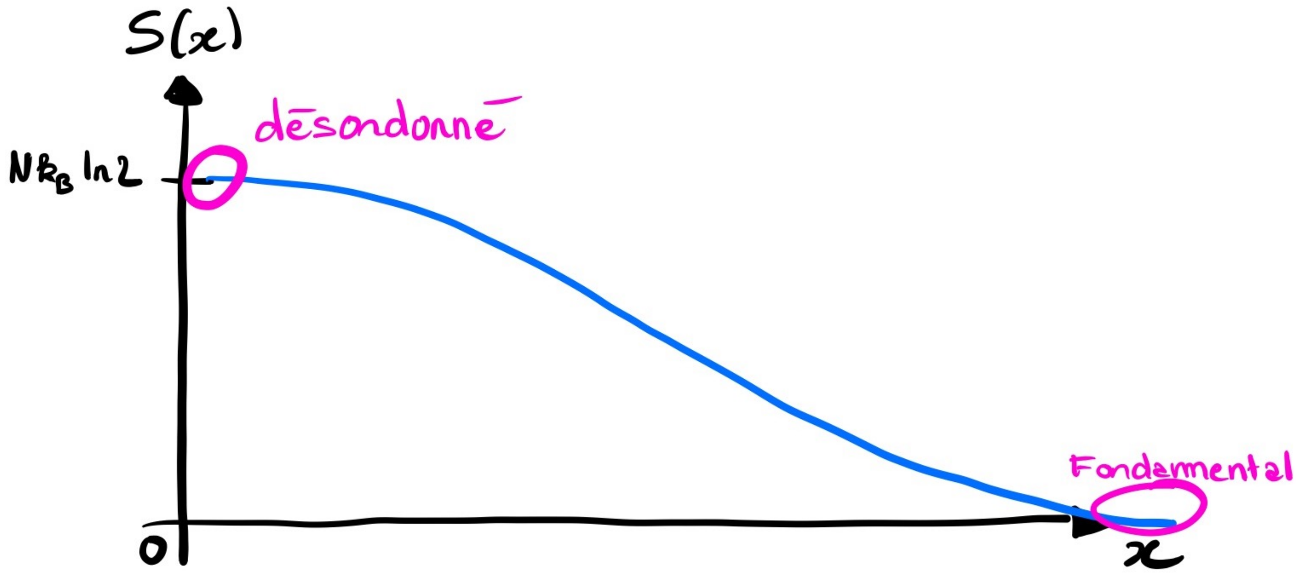
$$\boxed{S = Nk_B\left(\ln(2\cosh(x)) - x\tanh(x)\right)}$$

- $x \to 0^+$

$$S(x) \underset{0^+}{\to} Nk_B \ln 2$$

- $x \to +\infty$

$$S(x) \underset{+\infty}{\to} Nk_B(x-x) \sim 0$$



Dans l'état fondamental, c'est à dire à $T = 0K$, en approche microcanonique on aurais obtenu

$$S^\star = +k_B \ln(1) = 0$$

Dans l'état le plus désordonné

$$P_\oplus = P_\ominus = \frac{1}{2}$$

en approche microcanonique on aurais obtenu

$$S^\star = +k_B \ln\left(C_N^{N/2}\right)$$

On se place à la limite thermodynamique, c'est à dire pour $N \to +\infty$, $V \to +\infty$, $N/V = \text{cst}$.

On peut alors utilisé Stirling

$$\begin{aligned} S^\star &\simeq k_B \left(N\ln N - N - \frac{N}{2}\ln\frac{N}{2} + \frac{N}{2} - \frac{N}{2}\ln\frac{N}{2} + \frac{N}{2} \right) \\ &= Nk_B \ln(2) \end{aligned}$$

On trouve alors

$$S^\star = S^c(x \to 0^+)$$

On obtient alors qu'il y a équivalence des approches canonique et microcanonique à la limite thermodynamique.

Le paramagnétisme est un exemple de compétition entre l'ordre B_{0_z} et le désordre T.

3 Système à trois niveaux dans l'ensemble canonique

On considère un système de N atomes de spin $s = 1$ immergé dans un champ magnétique extérieur H. Les atomes sont disposés sur un réseau cristallin. Chaque atome peut se trouver dans l'un des trois états d'énergie suivants :

$$\epsilon_0 = 0 \qquad \epsilon_\pm = \pm x \text{ où } x = \mu H > 0$$

Calculer le nombre Ω d'états microscopiques et l'entropie S pour une distribution donnée $\{n_+, n_-, n_0\}$ des N atomes.

$$\begin{aligned} S^\star(n_+, n_0, n_-) &= k_B \ln\left(C_N^{n_+} C_{N-n_+}^{n_-} C_{N-n_+-n_-}^{n_0}\right) \\ &= k_B \ln\left(\frac{N!}{n_+! n_-! n_0!}\right) \end{aligned}$$

A présent, on cherche à calculer les fonctions d'états en s'appuyant sur la description canonique.

1. **Écrire la fonction de partition z d'un atome.**

$$\begin{aligned} z &= \sum_{|l\rangle}^{3} \exp^{-\beta E_{|l\rangle}} \\ &= \exp^{-\beta x} + \exp^{\beta 0} + \exp^{+\beta x} \\ &= 1 + 2\cosh(\beta x) \end{aligned}$$

Alors,

$$\boxed{z = 1 + 2\cosh(\beta x)}$$

2. **Que vaut la fonction de partition totale ?**

C'est un système de N particules identiques, indépendantes et discernables, alors :

$$\begin{aligned} Z &= z^N \\ &= (1 + 2\cosh(\beta x))^N \end{aligned}$$

Alors,

$$\boxed{Z = (1 + 2\cosh(\beta x))^N}$$

3. Calculer l'énergie libre F du système.

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta}\ln(Z) \\ &= -\frac{1}{\beta}\ln\left(z^N\right) \\ &= -\frac{N}{\beta}\ln(z) \\ &= -\frac{N}{\beta}\ln(1+2\cosh(\beta x)) \end{aligned}$$

Alors,

$$\boxed{F = -\frac{N}{\beta}\ln(1+2\cosh(\beta x))}$$

4. Déduire l'énergie interne correspondante.

$$\begin{aligned} U = \bar{E}^c &= -\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} \\ &= -\frac{\partial \ln\left((1+2\cosh(\beta x))^N\right)}{\partial \beta} \\ &= -N\frac{\partial \ln(1+2\cosh(\beta x))}{\partial \beta} \\ &= -N\left(\frac{2x\sinh(\beta x)}{1+2\cosh(\beta x)}\right) \end{aligned}$$

Alors,

$$\boxed{U = -N\left(\frac{2x\sinh(\beta x)}{1+2\cosh(\beta x)}\right)}$$

5. Calculer l'aimantation du système.

$$
\begin{aligned}
M = \frac{k_B T}{V}\frac{\partial \ln Z}{\partial H} &= -\frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial H} \\
&= -\frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial H}\left(-\frac{N}{\beta}\ln(1+2\cosh(\beta\mu H))\right) \\
&= \frac{N}{V\beta}\frac{\partial}{\partial H}\left(\ln(1+2\cosh(\beta\mu H))\right) \\
&= \frac{N}{V\beta}\left(\frac{2\beta\mu\sinh(\beta\mu H)}{1+2\cosh(\beta\mu H)}\right) \\
&= \frac{N\mu}{V}\left(\frac{2\sinh(\beta\mu H)}{1+2\cosh(\beta\mu H)}\right)
\end{aligned}
$$

Alors,

$$
\boxed{M = \frac{N\mu}{V}\left(\frac{2\sinh(\beta\mu H)}{1+2\cosh(\beta\mu H)}\right)}
$$

6. Que vaut la capacité calorifique du système, conclure.

$$
\begin{aligned}
C_V = \frac{\partial U}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial T}\frac{N\mu}{V}\left(\frac{2\sinh\left(\frac{1}{k_B T}\mu H\right)}{1+2\cosh\left(\frac{1}{k_B T}\mu H\right)}\right) \\
&= \frac{N\mu}{V}\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{2\sinh\left(\frac{1}{k_B T}\mu H\right)}{1+2\cosh\left(\frac{1}{k_B T}\mu H\right)}\right)
\end{aligned}
$$

4 États de dégénérescence et nombre moyen de particule

On considère 4 particules indiscernables. Chacune d'entre elles peut être dans un niveau d'énergie $\epsilon_q = qU_0$, $q = 1, 2, 3$ où U_0 est donnée.

1. **Quelle est le nombre moyen de particule pour chaque niveau si l'énergie totale du système est $7U_0$.**

   Nous avons deux type de particules :

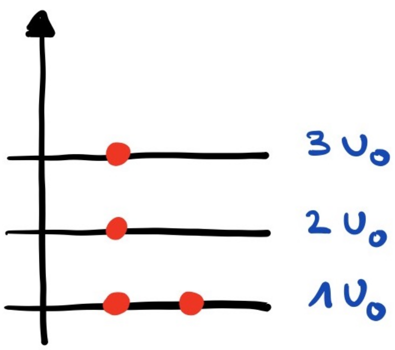
   - Bosons :

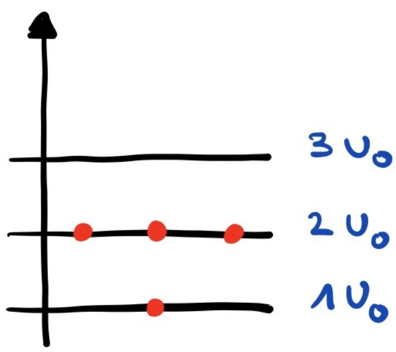
     Les bosons sont de spin entier, on prend $S = 0 \rightarrow |m_{s_z} = 0\rangle$,
     On peut mettre autant de Bosons qu'on souhaite dans un état défini par les deux nombres quantiques $|\epsilon_q, m_{s_z}\rangle$.
   - Fermions :

     Les bosons sont de spin demi-entier, on prend $S = \frac{1}{2} \rightarrow \left|m_{s_z} = \pm\frac{1}{2}\right\rangle$,
     On ne peut mettre qu'un seul fermion dans dans le même état quantique défini par les deux nombres quantiques $|\epsilon_q, m_{s_z}\rangle$ (principe d'exclusion de Pauli).

   On vas ainsi séparé les deux cas

   - Pour 4 Bosons,
     Nous avons deux configurations possibles :





On appelle la première configuration $|2, 1, 1\rangle$ et la seconde $|1, 3, 0\rangle$. Alors par le postulat d'équiprobabilité :

$$P_{|2,1,1\rangle} = \frac{1}{2} \qquad P_{|1,3,0\rangle} = \frac{1}{2}$$

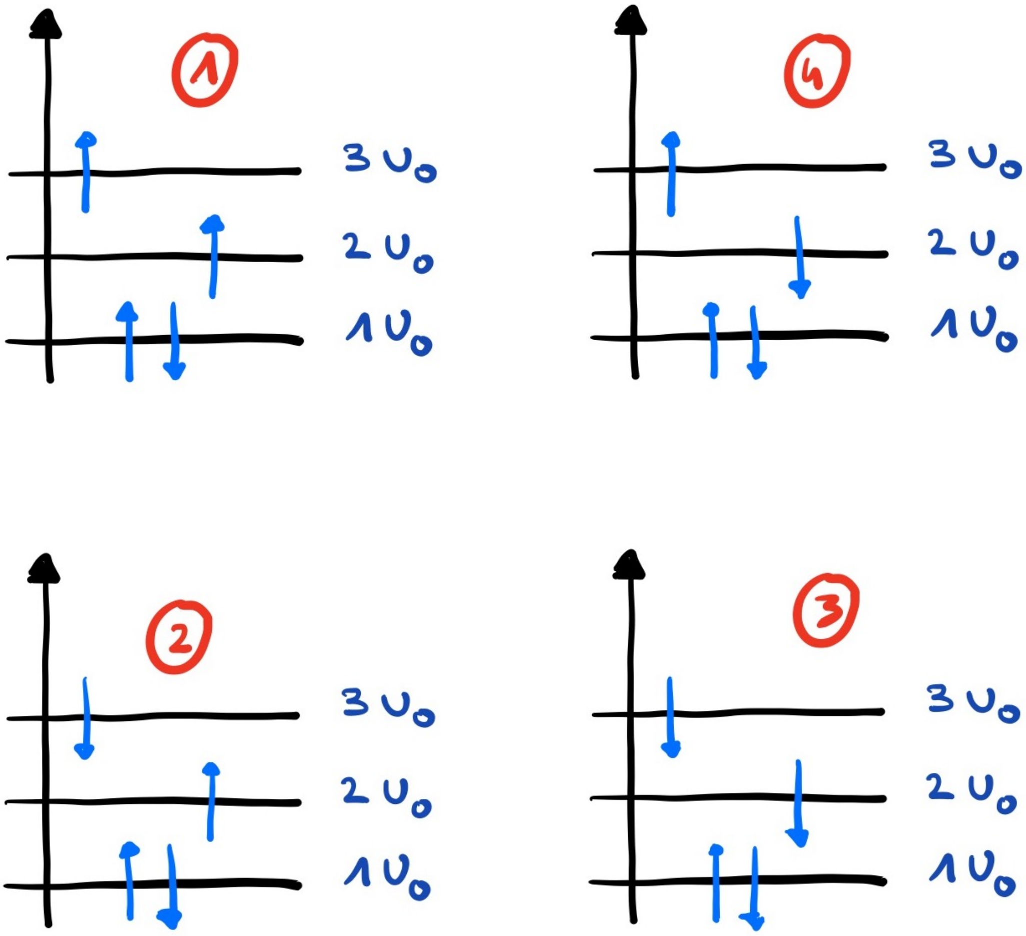
Alors,

$$\langle n_{1U_0} \rangle = 2 \times P_{|2,1,1\rangle} + 1 \times P_{|1,3,0\rangle} = \frac{3}{2} = 1.5$$
$$\langle n_{2U_0} \rangle = 1 \times P_{|2,1,1\rangle} + 3 \times P_{|1,3,0\rangle} = \frac{4}{2} = 2$$
$$\langle n_{3U_0} \rangle = 0 \times P_{|2,1,1\rangle} + 1 \times P_{|1,3,0\rangle} = \frac{1}{2} = 0.5$$

Et on retrouve en effet

$$N_{\text{tot}} = 0.5 + 1.5 + 2 = 4$$

- Pour 4 Fermions, Nous avons quatre configurations possibles :



On appelle la première configuration $|\uparrow\downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle$, la deuxième configuration $|\uparrow\downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle$, la troisième configuration $|\uparrow\downarrow, \downarrow, \downarrow\rangle$ et la quatrième configuration $|\uparrow\downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle$. Alors par le postulat d'équiprobabilité :

$$P_{|\uparrow\downarrow,\uparrow,\uparrow\rangle} = \frac{1}{4} \qquad P_{|\uparrow\downarrow,\uparrow,\downarrow\rangle} = \frac{1}{4}$$
$$P_{|\uparrow\downarrow,\downarrow,\downarrow\rangle} = \frac{1}{4} \qquad P_{ket\uparrow\downarrow,\downarrow,\uparrow} = \frac{1}{4}$$

Alors,

$$\begin{aligned}
\langle n_{1U_0}\rangle &= 2\times P_{|\uparrow\downarrow,\uparrow,\uparrow\rangle} + 2\times P_{|\uparrow\downarrow,\uparrow,\downarrow\rangle} + 2\times P_{|\uparrow\downarrow,\downarrow,\downarrow\rangle} + 2\times P_{|\uparrow\downarrow,\downarrow,\uparrow\rangle} = 2\\
\langle n_{2U_0}\rangle &= 1\times P_{|\uparrow\downarrow,\uparrow,\uparrow\rangle} + 1\times P_{|\uparrow\downarrow,\uparrow,\downarrow\rangle} + 1\times P_{|\uparrow\downarrow,\downarrow,\downarrow\rangle} + 1\times P_{|\uparrow\downarrow,\downarrow,\uparrow\rangle} = 1\\
\langle n_{3U_0}\rangle &= 1\times P_{|\uparrow\downarrow,\uparrow,\uparrow\rangle} + 1\times P_{|\uparrow\downarrow,\uparrow,\downarrow\rangle} + 1\times P_{|\uparrow\downarrow,\downarrow,\downarrow\rangle} + 1\times P_{|\uparrow\downarrow,\downarrow,\uparrow\rangle} = 1
\end{aligned}$$

Et on retrouve en effet

$$N_{\text{tot}} = 2+1+1 = 4$$

2. Quelle est l'entropie du système pour chacune des situations trouvées en 1.

- Bosons :

$$S^{\star}_{\text{Bosons}} = k_B \ln(2)$$

- Fermions :

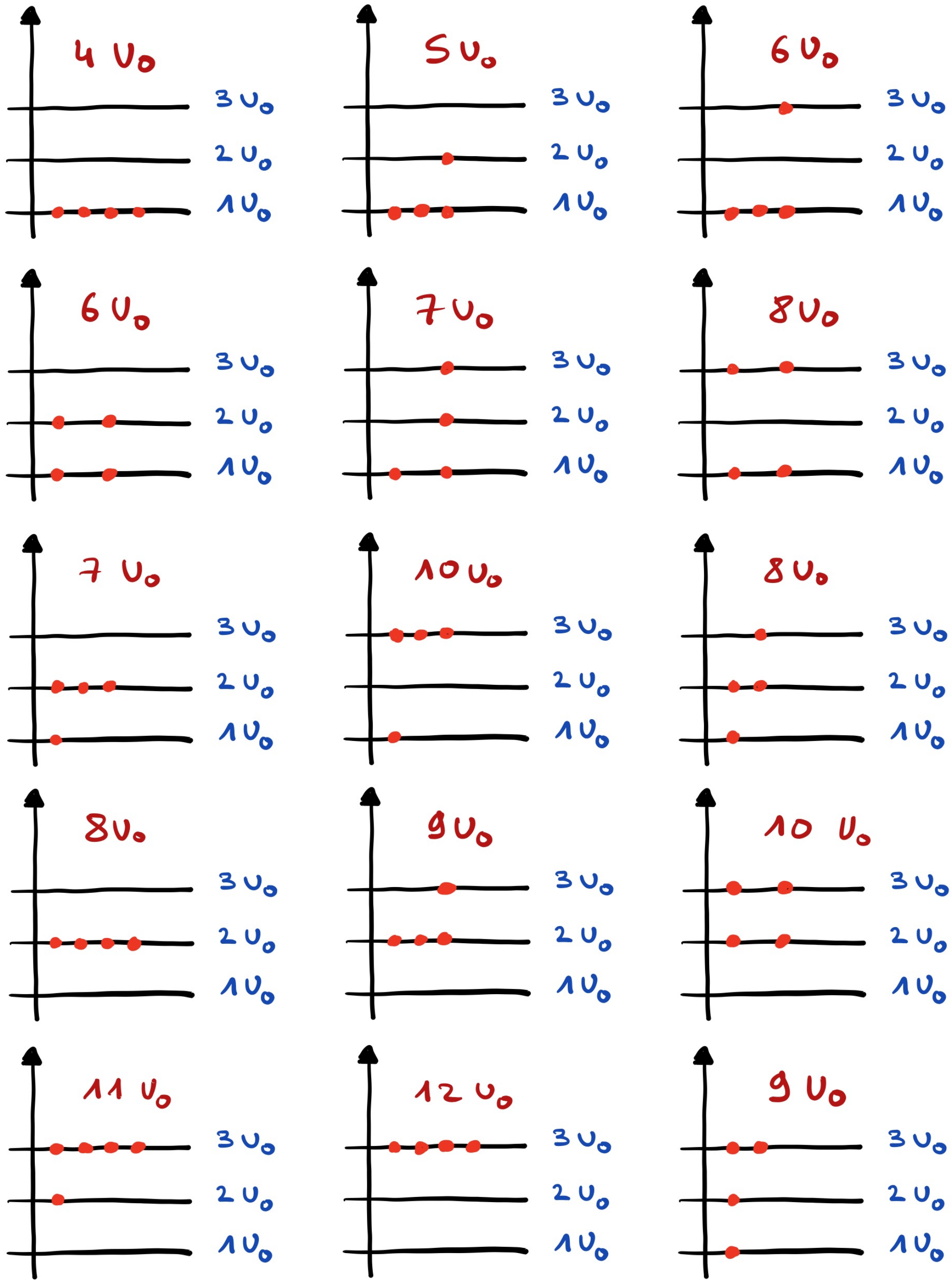
$$S^{\star}_{\text{Fermions}} = k_B \ln(4)$$

On remarque bien que $S^{\star}_{\text{Bosons}} \neq S^{\star}_{\text{Fermions}}$.

3. Lorsque le système est en contact avec un réservoir de température T, que devient alors le nombre moyen de particules dans chacun des niveaux.

- Bosons :

$$Z_{\text{Bosons}} = \sum_{\{E_{\text{tot}_{\text{Bosons}}}\}} g\left(E_{\text{tot}_{\text{Bosons}}}\right) \exp^{-\beta E_{\text{tot}_{\text{Bosons}}}}$$

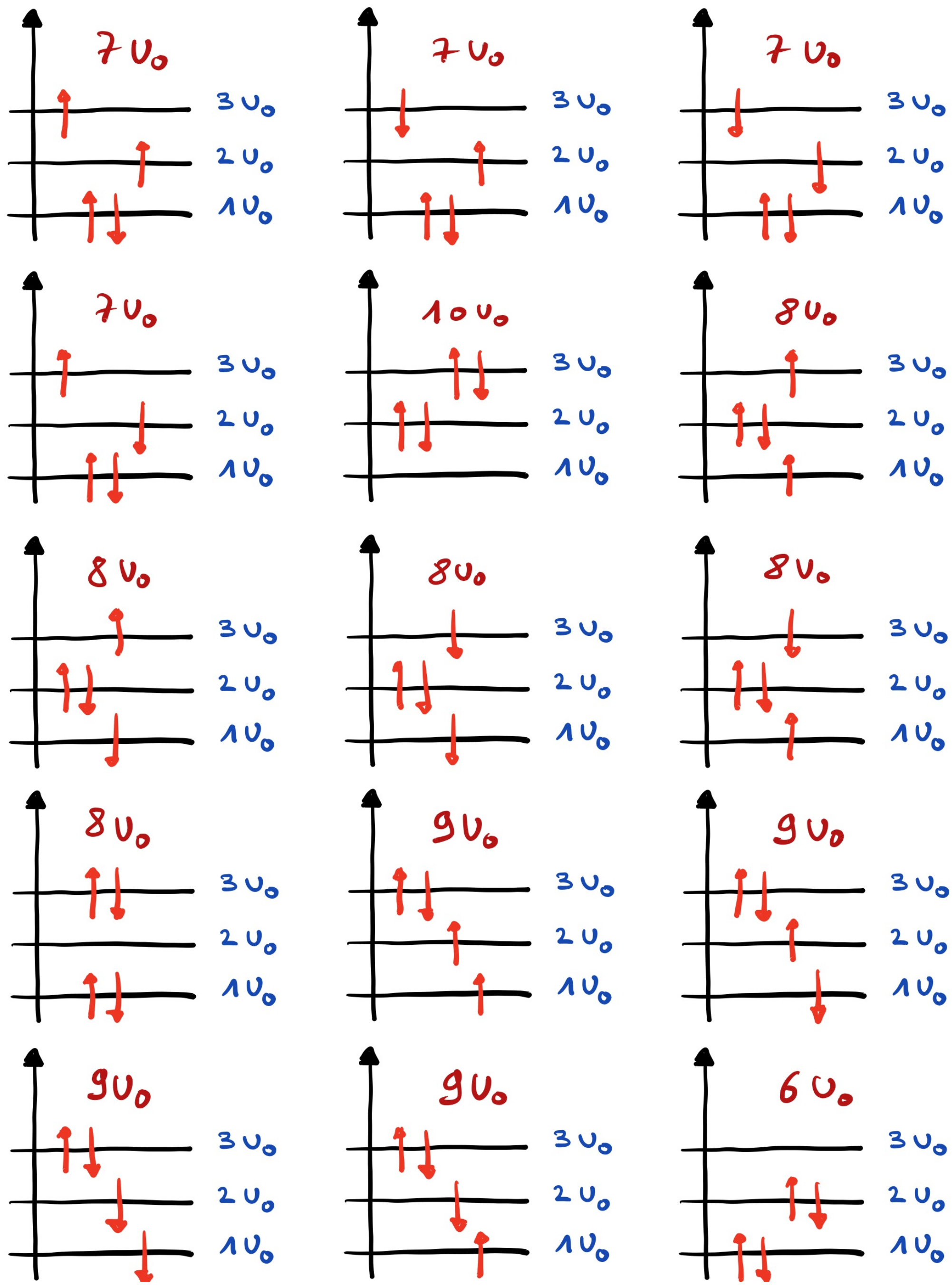


$4U_0$
$5U_0$
$6U_0$
$6U_0$
$7U_0$
$8U_0$
$7U_0$
$10U_0$
$8U_0$
$8U_0$
$9U_0$
$10U_0$
$11U_0$
$12U_0$
$9U_0$
$3U_0$
$2U_0$
$1U_0$

E	$g(E)$
$4U_0$	1
$5U_0$	1
$6U_0$	2
$7U_0$	2
$8U_0$	3
$9U_0$	2
$10U_0$	2
$11U_0$	1
$12U_0$	1

- Fermions :

$$Z_{\text{Fermions}} = \sum_{\{E_{\text{tot}_{\text{Fermions}}}\}} g\left(E_{\text{tot}_{\text{Fermions}}}\right) \exp^{-\beta E_{\text{tot}_{\text{Fermions}}}}$$



E	$g(E)$
$6U_0$	1
$7U_0$	4
$8U_0$	5
$9U_0$	4
$10U_0$	1

5 Fonction de partition d'une particule soumise à un potentiel harmonique

L'énergie d'une particule uni-dimensionnelle est donnée d'après a relation suivante :

$$E = \frac{p^2}{2m} + ax^2$$

où a est une constante donnée du problème. On considère que cette particule est au contact d'un thermostat porté à la température T.

1. **Calculer la fonction de partition z de la particule.**

On considère que l'énergie d'une particule à une dimension est donnée par (semi-classique) :

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

(Dans cette situation alors, $a = \frac{1}{2}m\omega^2$)

Fonction de partition semi-classique :
à l'état semi-classique $\{x, p_x\}$ on y associe une énergie $E(x, p_x)$.

Il faut cependant discrétisé l'espace des phases semi-classiques, en souvenir de la mécanique quantique sous-jacente d'où le facteur $1/h$ dans la fonction de partition :

$$z = \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \int_{\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p_x \exp^{-\beta E(x,p_x)}$$

Remarque : on peut aussi penser au facteur $1/h$ par analyse dimensionnelle.

Remarque : un outil clé du formalisme canonique est l'intégrale gaussienne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{-\alpha u^2} \mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\begin{aligned}
z(T) &= \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p_x \exp^{-\frac{\beta p_x^2}{2m}} \exp^{-\beta\frac{1}{2}m\omega^2 x^2} \\
&= \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \exp^{-\beta\frac{1}{2}m\omega^2 x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p_x \exp^{-\frac{\beta p_x^2}{2m}} \\
&= \frac{1}{h}\sqrt{\frac{\pi}{\beta/2m}}\sqrt{\frac{\pi}{\beta\frac{1}{2}m\omega^2}} \\
&= \frac{1}{\beta\hbar\omega}
\end{aligned}$$

$$\boxed{z = \frac{1}{\beta\hbar\omega}}$$

2. Calculer l'énergie F de cette particule.

Énergie libre semi-classique :

$$F = -k_B T \ln(z) = k_B T \ln(\beta\hbar\omega)$$

3. Calculer l'énergie interne moyenne de la particule.

$$U = -\frac{\partial \ln(z)}{\partial\beta} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\ln\left(\frac{1}{\beta\hbar\omega}\right)\right) = \frac{1}{\beta}$$

$$\boxed{U = k_B T}$$

4. Que vaut la distance moyenne $\langle x\rangle$ à laquelle se trouve la particule.

$$\langle x\rangle = \sum_{\{x\}} x \cdot \tilde{p}(x,T)$$

Ici, c'est une variable continue, alors,

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \tilde{p}(x,T), \cdot x$$

où $\tilde{p}(x,T)$ est la loi de probabilité réduire de trouver la particule en x, à $\mathrm{d}x$ près, à T, peu importe son impulsion p_x. Il faut donc dériver l'expression de $\tilde{p}(x,T)$ à partir de l'expression de la loi de probabilité jointe $p(x,p_x,T)\mathrm{d}x\mathrm{d}p_x$ où $p(x,p_x,T)\mathrm{d}x\mathrm{d}p_x$ est la loi de probabilité de trouver la particule entre x et $x+\mathrm{d}x$ et qu'elle ai une impulsion comprise entre p_x et $p_x+\mathrm{d}p_x$, à T.

Pour trouver la loi de probabilité réduire, on intègre la loi de probabilité jointe sur les variables à éliminer ici,

$$\tilde{p}(x,T)\cdot \mathrm{d}x = \int_{p_x=-\infty}^{p_x=+\infty} p(x,p_x,T)\mathrm{d}x\mathrm{d}p_x = \frac{1}{\hbar}\frac{\exp^{-\beta\frac{1}{2}m\omega^2x^2}}{z}\cdot \mathrm{d}x \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\beta/2m}}$$

Car la loi de probabilité jointe est donnée par :

$$p(x,p_x,T)\mathrm{d}x\mathrm{d}p_x = \frac{\exp^{-\beta p_x^2/2m}\exp^{-\beta\frac{1}{2}m\omega^2x^2}}{z}\cdot\frac{\mathrm{d}x\mathrm{d}p_x}{h}$$

Remarque : On remarque bien que

$$\iint p(x, p_x, T)\mathrm{d}x\mathrm{d}p_x = 1$$

Remarque : $p(x, p_x, T)$ est plus rigoureusement appelée "densité de probabilité".

Donc

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}x}{z}\sqrt{\frac{\pi}{\beta/2m}}\frac{1}{h}\underbrace{\left(\exp^{-\beta\frac{1}{2}m\omega^2x^2} \cdot x\right)}_{\text{impaire}} = 0$$

Car l'intégrale d'une fonction impaire est nulle.

Alors,

$$\boxed{\langle x \rangle = 0}$$

On s'y attendait, car en moyenne, autant de collisions venant de la droite que de la gauche

5. **Calculer de manière similaire la valeur moyenne $\langle p \rangle$ que prend la quantité de mouvement de la particule.**

$$\langle p_x \rangle(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p_x \tilde{\tilde{p}}(p_x, T)$$

avec

$$\tilde{\tilde{p}}(p_x, T)\mathrm{d}p_x = \int_{x=-\infty}^{x=+\infty} \mathrm{d}x\mathrm{d}p_x p(x, p_x, T)$$

$$\tilde{\tilde{p}}(p_x, T)\mathrm{d}p_x = \sqrt{\frac{\pi}{\beta\frac{1}{2}m\omega^2}}\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}p_x}{z}\exp^{-\beta\frac{p_x^2}{2m}}$$

Donc,

$$\boxed{\langle p_x \rangle = 0}$$

On s'y attendait aussi.

6.

7.