Université de Paris
PhStat1

Année 2019-2020

PHYSIQUE STATISTIQUE

TD n°2 : Densités d'états

---

1 Densité d'états d'une particule libre

1. Rappel : Conditions aux limites.
On considère une particule libre de masse m enfermée dans une boite de volume $V = L_x L_y L_z$. L'équation de Schrödinger pour cette particule se résoud par séparation des variables : la fonction d'onde $\psi(\vec{x},t)$ s'écrit $\psi(\vec{x},t) = \Phi(\vec{x})e^{-iEt/\hbar}$. En posant $\Phi(\vec{x}) = u(x)v(y)w(z)$, l'équation de Schrödinger indépendante du temps (i.e. pour $\Phi(\vec{x})$) se ramène au système d'équations découplées :

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} &= E_x\, u(x) \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2v}{dy^2} &= E_y\, v(y) \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2w}{dz^2} &= E_z\, w(z)
\end{aligned}$$

avec $E_x + E_y + E_z = E$. Résoudre ce système pour des conditions aux limites : $u(L_x) = u(0) = 0$, $v(L_y) = v(0) = 0$, $w(L_z) = w(0) = 0$, puis (conditions périodiques) : $u(x + L_x) = u(x)$, $v(y + L_y) = v(y)$, $w(z+L_z) = w(z)$. Dans ce dernier cas on cherchera la solution sous la forme $a\, e^{i\vec{k}.\vec{x}}$. On précisera le domaine de variation des nombres quantiques introduits et on normalisera chaque fonction u, v, w.

2. Calculer la densité énergétique des états stationnaires d'une particule quantique non-relativiste de masse m, de spin nul, et dont les déplacements sont restreints à un segment de longueur L.

3. Comparer avec le cas où la particule se déplace sur une droite infinie, librement à cela près que l'on impose à sa fonction d'onde d'être périodique avec la période L.

4. Calculer la densité d'états de la même particule dans le cas où ses déplacements sont restreints à une surface rectangulaire d'aire S.

5. Même question dans le cas d'une boîte parallélépipédique de volume V.

6. Comment sont modifiés les résultats précédents pour une particule de spin s ?

7. Dans le cas d'un atome de gaz rare (par exemple de l'hélium), enfermé dans un volume de 1 litre, à température ambiante, estimer l'énergie moyenne $\bar{\epsilon}$ de l'atome. Estimer le nombre d'états stationnaires d'énergie comprise entre $\bar{\epsilon}$ et $1,01\ \bar{\epsilon}$. (On rappelle ceci, qu'on devrait savoir : volume molaire d'un gaz parfait 22 litres, $R \simeq 8,3$ J.mole^{-1}.K^{-1}, $\mathcal{N}_A \simeq 6.10^{23}$, $\hbar \simeq 10^{-34}$ S.I.)

---

2 Densité d'états de N particules

On considère un système de N particules sans interactions (gaz parfait) et discernables, sans spin, enfermées dans une boîte de volume $\mathcal{V}$.

1. Montrer qu'un état stationnaire du système est caractérisé par un vecteur $\vec{K}$ d'un espace à $3N$ dimensions, défini par ses composantes $\vec{K} = (k_{1x}, k_{1y}, \ldots, k_{Nz})$.

2. Montrer que le nombre d'états stationnaires caractérisés par un $3N$-vecteur $\vec{K}$ dont le module est compris entre K et $K + dK$ est donné par :

$$N(K, dK) = \frac{S_{3N}}{(2\pi)^{3N}} \mathcal{V}^N K^{3N-1} dK,$$

où S_{3N} est l'*aire* de la sphère de rayon unité en $3N$ dimensions.

3. En déduire que le nombre d'états stationnaires dont l'énergie est dans le domaine $(E, E + dE)$ est donné par :

$$\rho(E)dE = \frac{S_{3N}}{2(2\pi)^{3N}} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3N/2} \mathcal{V}^N \, E^{3N/2-1} \, dE. \tag{1}$$

4. On admet que le volume d'une sphère de rayon R à D dimensions vaut $V_D(R) = \frac{\pi^{D/2}}{\Gamma(1+\frac{D}{2})} R^D$. Déduisez-en que l'aire de la sphère unité vaut :

$$S_D = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)}. \tag{2}$$

En déduire la densité d'états $\rho(E)$ de ce gaz parfait, ainsi que son expression approchée dans le cas $N \gg 1$.

---

3 Oscillateurs harmoniques classiques et quantiques

On considère un système constitué de N oscillateurs harmoniques à une dimension, indépendants et identiques. On note q_i et p_i la position et l'impulsion de l'oscillateur i. Le hamiltonien du système est :

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 \right). \tag{3}$$

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 V_{2N} , volume de l'hypersphère de rayon 1 dans cet espace (on rappelle que $V_{2N} = \frac{\pi^N}{N!}$).

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'energie inférieure à E (la densité d'états intégrée $\Phi(E)$), 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 : $\epsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ (n étant un entier ≥ 0). Calculer le nombre d'états accessibles au système lorsque son énergie vaut E.

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**.