

Titre : Facteur de Boltzmann

Présentée par : Izia Pétillon

Rapport écrit par : Guilhem Mariette

Correcteur : Jules Fillette

Date : 07/01/2021

Bibliographie

Titre	Auteurs	Éditeur
Physique MP-MP*, Tout-En-Un	C. Deschamps	Dunod
Éléments de physique statistique	Bernard Diu	Hermann
Leçons de thermodynamique	Bruno Latour	Ellipses

Plan détaillé

Niveau choisi pour la leçon: CPGE [L'ensemble du contenu de physique statistique de cette leçon est au programme de MP exclusivement]

Prérequis :

- Thermodynamique
- Dipôle magnétique
- Hydrostatique

Intro (1 min) : Lien entre les échelles microscopique et macroscopique.

I/ Modélisation de l'atmosphère isotherme (~16')

1) Pression dans un champ de pesanteur (~8')

Cylindre de gaz parfait au repos macroscopique, à l'équilibre avec un thermostat à T. Equation des gaz parfaits :

$$p(z) = \frac{\mu(z)RT}{M}$$

Plus la statique des fluides :

$p(z) = p_0 e^{-\frac{z}{H}}$ avec $H = RT/Mg$ le facteur d'échelle. Température moyenne de -20°C : AN
 $H \sim 7,4 \text{ km}$.

2) Distribution de particules (~8')

Densité de particule : $dN(z) = \frac{N_A \mu_0 S}{M} e^{-\frac{z}{H}} dz$ donc $N(h) = \frac{N_A \mu_0 S}{M} \int_0^h e^{-z/H} dz = \frac{N_A \mu_0 S}{M} \left(1 - e^{-\frac{h}{H}}\right)$

Facteur de Boltzmann : probabilité de présence $dP(z) \propto e^{-\frac{mgz}{k_B T}}$

Constante de Boltzmann et $k_B T \sim 25 \text{ meV}$ à l'ambiante - Rapport d'énergie $E_p/k_B T$

II/ Du microscopique au macroscopique (~9')

1) Microétat et macroétat (~5')

Analogie avec le lancer de pièce.

Microétat : état microscopique du système spécifié par les détails atomiques

Macroétat : état macroscopique du système décrit par des propriétés macroscopiques (P,T,V...)

2) Loi de Boltzmann (~4')

Hypothèses : Equilibre avec un thermostat + système total isolé + particules indépendantes + Niveaux d'énergie discrets implique que la probabilité d'une particule i d'être dans un état d'énergie E_i : $P_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$.

Fonction de partition $Z = \sum_{\text{états}} e^{-\beta E_i}$ et $\beta = \frac{1}{k_B T}$

III/ Système à 2 niveaux non dégénérés (~11')

1) Exemple d'un système à deux niveaux (~3')

N dipôles magnétiques indépendants dans thermostat T, de moment magnétique $\vec{\mu} = \pm \mu \vec{e}_z$

Soumis à un champ extérieur $\vec{B} = B \vec{u}_z$

$$E_p = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

2 niveaux d'énergie possibles :

$$\varepsilon_1 = -\mu B$$

$$\varepsilon_2 = +\mu B$$

2) Etude des niveaux d'énergie (~6')

Calcul de la fonction de partition

$$Z = 2 \cosh \mu B \beta$$

Calcul de $\langle N_1 \rangle = N * P(\varepsilon_1) = \frac{N e^{\mu B \beta}}{2 \cosh \mu B \beta}$ et $\langle N_2 \rangle = N * P(\varepsilon_2) = \frac{N e^{-\mu B \beta}}{2 \cosh \mu B \beta}$

Cas à basse température et à haute température à l'équilibre

3) Energie moyenne (~2')

$$\langle E \rangle = P(\varepsilon_1) \varepsilon_1 + P(\varepsilon_2) \varepsilon_2 = -\mu B \tanh \mu B \beta$$

Conclusion (~1') : retour sur les choses faites + comparaison au laser avec l'inversion de population

Questions posées par l'enseignant (avec réponses)

Prérequis : Au programme ?

→ Hydrostatique au lycée (Tout ce dont on s'est servi ici est $\frac{dP}{dz} = -\rho g$), dipôle magnétique de manière succincte (idem, on se sert du strict minimum qui est au programme de MPSI, dans la partie sur l'induction) et bien sûr tout ce qui concerne la thermo est au programme.

Pression dans un champ de pesanteur : y a-t-il besoin d'échelle mésoscopique ?

→ L'échelle mésoscopique permet de faire un bilan infinitésimal à l'équilibre tandis qu'à l'échelle microscopique le système n'est pas à l'équilibre. Il est à l'équilibre thermique avec le thermostat à T et à l'équilibre mécanique (au « repos ») mais toutes ses grandeurs macroscopiques ne sont pas homogènes puisque par définition P et μ dépendent de z .

Le petit h de la hauteur du cylindre, quel est son ordre de grandeur ?

→ ~40 – 50km pour aller jusqu'à la stratosphère avec un facteur 1000 entre la pression atmosphérique et la pression stratosphérique.

Etait-ce nécessaire d'imposer une hauteur h au cylindre ?

→ Non effectivement on aurait pu faire tendre $h \rightarrow \infty$ et cela aurait simplifié les calculs sans changer la physique du résultat puisque de fait $h \gg H$.

Facteurs d'ordre et de désordre ?

→ Sous l'effet de la gravité les particules ont tendance à s'accumuler au sol et à toutes se retrouver dans un même microétat ($z = 0$) alors que l'agitation thermique a tendance au contraire à multiplier les microétats accessibles, donc le désordre du système.

Hypothèse de l'atmosphère isotherme ?

→ Diminution de la température jusqu'à -50°C dans la troposphère due à l'éloignement de la surface de la Terre. C'est la présence du sol dont la température varie assez peu au cours du temps qui assure la température des premiers kilomètres d'atmosphère. Au-delà la température diminue effectivement puis augmente à nouveau au niveau de la couche d'ozone dans la stratosphère où les molécules absorbent les UV du rayonnement solaire selon un cycle d'excitation et de désexcitations.

Analogie avec un vrai système thermodynamique pour exprimer les notions de microétats et macroétats ?

→ Avec le système paramagnétique : la grandeur macroscopique qu'on observe c'est l'aimantation et le microétat correspond à la valeur exacte de l'ensemble des dipôles au sein de la matière paramagnétique à l'instant t .

En terme de physique statistique dans quel ensemble se place-t-on ?

→ On se place dans l'ensemble canonique puisqu'on a un thermostat à la température T .

Que peut-on dire de l'hypothèse d'indépendance des particules ?

→ Il y aurait des interactions entre les particules, comme par exemple dans le diamagnétisme ou le ferromagnétisme, cf le modèle d'Ising.

Prenons par exemple une chaîne de spins 1D :

→ Les spins alignés donnent une interaction favorable et les spins non alignés apportent une énergie défavorable en $E_i = -\vec{\mu}_i \cdot \vec{B} - J \sum_{\text{voisin}} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_{\text{voisin}}$ ($J > 0$). On peut moyenner ces interactions pour revenir à la statistique de Boltzmann grâce à l'approximation du champ moyen (cf. Leçon spécifique sur ce thème plus tard dans l'année).

Comment définit-on la fonction de partition ?

→ C'est le facteur de normalisation qui s'exprime de différente manière en fonction du système et de l'ensemble dans lequel on travaille.

Pourquoi un système à 2 niveaux ?

→ Le mauvais argument à invoquer c'est la simplicité des calculs ! Mieux vaut voir le système à deux niveaux comme un cas très général de la physique. Il couvre à la fois les systèmes comme le paramagnétisme où il y a vraiment 2 niveaux d'énergie, les cas comme les transitions électroniques d'un atome où il y a beaucoup plus de niveaux en théorie mais seuls 2 sont effectivement accessibles dans certains cas (ie certaines gammes de températures). Il y a aussi une troisième catégorie, celle des systèmes comme la molécule d'ammoniac, qui n'ont pas a priori de niveaux d'énergie imposée mais qu'on ramène à des systèmes à deux niveaux en décomposant leur fonction d'onde sur la base de deux états propres symétriques et antisymétriques.

C'est quoi l'étape d'après dans ton cours ?

→ Je ferais bien le lien entre l'énergie interne et la valeur moyenne. On fait le calcul des fluctuations (la variance)

$$V(E) = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = (\mu B)^2 (1 - \tanh^2 \mu B \beta) = \frac{(\mu B)^2}{\cosh^2 \mu B \beta}$$

$$\langle E \rangle_{\text{total}} = N \langle E \rangle \text{ et } V(E)_{\text{total}} = N V(E)$$

Donc l'écart-type présente un facteur en $1/\sqrt{N}$

Le système thermodynamique c'est quoi comparé au système statistique ?

→ C'est quand on fait tendre $N \rightarrow \infty$ en gardant des grandeurs constantes (en canonique ici les grandeurs à garder constantes sont E/N et V/N).

Les questions qu'on aurait pu aborder : la capacité thermique et les statistiques en mécanique quantique. Lever l'hypothèse d'états discrets pour passer à un cas continu, par exemple les vitesses dans un gaz.

Commentaires lors de la correction de la leçon

Se placer dans le programme de MP et ne pas en sortir est une bonne stratégie, elle a été bien menée ici. C'est une très bonne leçon.

Cette leçon se prête effectivement bien au programme de CPGE mais rien n'indique qu'une leçon très proche ne pourrait pas apparaître sous un titre du type « Statistique dans l'ensemble canonique » ou équivalent. Il faudrait alors parler de capacités thermiques et placer la leçon au niveau L3. La partie sur l'atmosphère isotherme n'aurait plus lieu d'occuper autant de place.

Il serait difficile d'accorder plus de temps à l'ensemble à deux niveaux et moins de temps à l'atmosphère isotherme même si c'est ce qu'on a tous envie de faire puisqu'il faut reconnaître que c'est cette deuxième partie qui est la plus intéressante.

Les courbes sont tracées avec rigueur et ce sont des courbes qu'on avait envie de voir. Elles sont clairement essentielles. On pourra même envisager de faire tourner les scripts python en live pour se faire mousser (tout est bon à prendre !)

Les applications des systèmes à deux niveaux sont présentes et l'interprétation a été correctement faite, le calcul de l'énergie moyenne était bien mené.

La conclusion sur l'inversion de population dans les lasers était une ouverture très judicieuse. On peut aussi envisager d'ouvrir sur les capacités thermiques. Gardez à l'esprit que vos ouvertures peuvent donner lieu à des questions ensuite et que vous pourriez préférer répondre à des questions sur les capacités thermiques que sur le LASER. C'est un avis très personnel.

Pour aller plus loin, faire attention à la notion d'équilibre dans l'atmosphère isotherme et spécifier l'équilibre thermique et l'équilibre mécanique car la masse volumique n'est pas homogène.

La probabilité qu'on a calculée dans la partie I.2. a été nommée probabilité de présence de particules dans la tranche, je pense que c'est plutôt la probabilité pour une particule prise au hasard dans le système d'être dans cette tranche-là. D'ailleurs c'est plus habile de l'appeler ainsi pour faire le lien avec Boltzmann ensuite.

Dans l'ordre il serait plus logique de définir les outils avant d'écrire la formule finale (définir m et k_B avant d'écrire la loi de pression dans l'atmosphère, définir β avant d'écrire boltzmann...).

Pour présenter les microétats et macroétats on peut aussi utiliser la somme de deux dés qui me paraît plus parlante que l'affaire des pièces (qui est tout à fait juste mais peut-être

moins pratique à exposer). Le macro-état est alors la somme des dés, le microétat leur valeur respective. On voit bien la différence entre les deux et l'idée qu'à un macroétat donné peuvent correspondre plusieurs microétats. Sur les pièces le macroétat est moins clair : c'est en fait l'ensemble {pièce 1, pièce 2} tandis que le microétat est la paire (pièce 1, pièce 2). Le premier ne comprend pas de notion d'ordre, tandis que le second fait la différence entre la paire (1,2) et la paire (2,1).

Encore une fois quand vous commencez la partie sur le système à deux niveaux il faut ancrer ces systèmes dans la physique. De manière générale ne faites rien « parce que c'est simple » : il y a toujours une meilleure raison !

Il est important de préciser qu'on fait de la physique statistique et essayer d'en parler le plus tôt possible dans la présentation même si c'est difficile de faire apparaître le facteur de Boltzmann avant 17 minutes.

Aller jusqu'à la capacité thermique et le théorème d'équipartition en 23 minutes c'est possible mais on ne peut pas se passer de l'aspect pédagogique pendant le reste de la présentation. Mieux vaut, à mon avis, faire cette leçon-là comme ça et manquer d'originalité que d'aller plus loin mais ne pas le faire aussi bien.

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.) :

Comme déjà noté plus haut c'était une leçon très satisfaisante tant du point de vue du contenu que de la présentation.

En guise d'amélioration on peut essayer d'insister encore plus lourdement, dans la première partie notamment sur l'intérêt de ce qu'on fait vis-à-vis du titre. Pourquoi cela va nous mener à la physique statistique, comment voit-on le facteur de Boltzmann apparaître au fur et à mesure du calcul, à quel moment c'est vraiment le facteur de Boltzmann ? La conclusion du I est indéniablement en plein dans le mille du sujet de la leçon mais il y a un risque de passer plus de 15min à ne pas voir ce qui nous y relie.

Par ailleurs, attention en question à rester éloigné de vos notes sauf mention contraire du jury. S'il vous interroge sur un résultat spécifique que vous n'avez plus en tête, demandez-lui à vérifier vos notes, recopier ledit résultat au tableau, et éloignez-les. S'il soupçonne que vous vous référez à vos notes en question il va penser que vous ne maîtrisez pas le sujet ce qui serait dommageable et pourrait nuire à l'excellente impression donnée en leçon.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates :

Dans cette leçon on ne peut échapper à traiter la physique statistique des systèmes à deux niveaux discrets d'énergie : les probabilités d'occupation, les populations moyennes, l'énergie moyenne du système sont un minimum.

Le reste doit être adapté en fonction de son intitulé exact : sous cette forme vous ne pouvez pas échapper à une introduction la plus pédagogique possible du facteur de Boltzmann, l'atmosphère isotherme est un bon sujet d'appui. Sous une forme plus « licence » au contraire il faudra aborder le théorème d'équipartition et les capacités thermiques,

éventuellement parlé de niveaux continus d'énergie, de particules indiscernables, de particules en interaction (à choisir !).

Je mets en garde ici à ne pas vous engager dans la discussion de notions plus délicates comme le principe ergodique ou la notion d'ensemble sauf si c'est explicitement requis ou que vous vous sentez vraiment en confiance.

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur) :

N.A.

Bibliographie conseillée :

La bibliographie utilisée ici convient parfaitement.