Chapitre III

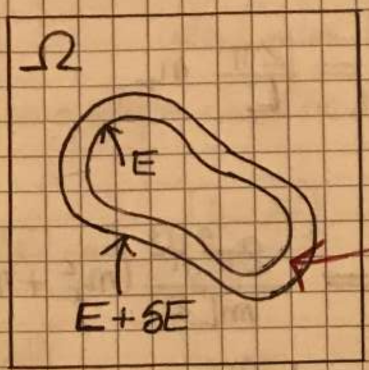
Densité d'états en physique statistique

I - Energie et densité d'états

Ω espace de phases

X micro état de Ω

E_X : énergie de X



couche d'énergie $\Omega(E, \delta E)$

= ensemble des micro-états X de Ω

tq $E \leqslant E_X \leqslant E + \delta E$

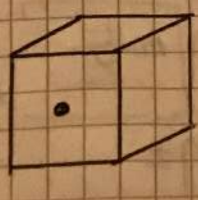
La densité d'états $\rho(E)$ est définie par $\rho(E)\delta E = \mathrm{card}(\Omega(E, \delta E))$

= nombre de micro-états dans $\Omega(E, \delta E)$

La densité d'états intégrée $\boxed{N(E) = \int_{-\infty}^{E} \rho(\tilde{E})\,d\tilde{E}}$

= nombre de micro-états d'énergie inférieure à E

- Prenons une particule de gaz dans une boîte cubique



avec des conditions aux bords périodiques.

II - Particule libre en mécanique quantique

- On cherche les micro-états Ψ solution de $\hat{H}\Psi = E\Psi$

où $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) = E\Psi$$

Solutions : $\Psi(x,y,z) = C e^{i\vec{k}.\vec{r}}$

Comme $\Psi(x+L, y, z) = \Psi(x) \Rightarrow k_x L = n_x 2\pi$

De même $k_y = \dfrac{2\pi}{L} n_y$; $k_z = \dfrac{2\pi}{L} n_z$

$\Psi(x,y,z) = C \cdot e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k_x^2 - k_y^2 - k_z^2\right)\Psi = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\Psi$$

$$= E\Psi$$

$$\Rightarrow E(n_x, n_y, n_z) = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Or $N(E) = \text{card}\left\{\Psi / E_\Psi \leqslant E\right\}$

$$= \text{card}\left\{(n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{Z}^3 / \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \leqslant E\right\}$$

$$\Leftrightarrow (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \leqslant \frac{mL^2E}{2\pi^2\hbar^2}$$

$\Rightarrow$ Points à coordonnées entières à l'intérieur d'une sphère de rayon $\sqrt{\dfrac{mL^2E}{2\pi^2\hbar^2}} = \dfrac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\dfrac{mE}{2}}$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\left(\frac{\pi\hbar\, n_x}{\sqrt{m\frac{E}{2}}\,L}\right)}_{q_x}^2 + \underbrace{\left(\frac{\pi\hbar\, n_y}{L\sqrt{m\frac{E}{2}}}\right)}_{q_y}^2 + \underbrace{\left(\frac{\pi\hbar\, n_z}{L\sqrt{m\frac{E}{2}}}\right)}_{q_z}^2 \leqslant 1$$

Les (q_x, q_y, q_z) sont sur un réseau cubique de maille $\dfrac{\pi\hbar}{L\sqrt{m\frac{E}{2}}} \xrightarrow[L\to\infty]{} 0$

(avec $E \neq 0$)

$$\Rightarrow N(E) = \frac{4/3\,\pi\,1^3}{\left(\frac{\pi\hbar}{L\sqrt{mE/2}}\right)^3}$$

$\Rightarrow$ sphère de rayon 1

Rq: erreur sur les bords négligeable si $L \to \infty$

Donc avec $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $V = L^3$ on a $\boxed{N(E) = \frac{4\pi V}{3h^3}(2mE)^{\frac{3}{2}}}$

$\Rightarrow$ valable pour $V \to \infty$ de forme quelconque

Rq: la formule donne $N(0) = 0$
alors que $N(0) = 1$ $(n_x, n_y, n_z = 0)$
$\Rightarrow$ quelque chose ne tourne pas rond pour les très basses énergies

$$\Rightarrow \rho(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\sqrt{E}$$

III - Passage du quantique au classique

1 - Une particule classique dans une boîte

Micro-état : $X = (\vec{r}, \vec{p})$ position $\vec{r}$, impulsion $\vec{p}$

L'espace de phases étant continu, $N(E)$ ne peut pas être le nombre d'états puisqu'il y a à priori une infinité de micro-états d'énergie inférieure à E.

On tente : $\tilde{N}(E) = \int_{\text{Energie} \leqslant E} d^3\vec{r}\, d^3\vec{p}$ volume dans l'espace de phase

$$= \int_V d\vec{r} \int_{\frac{p^2}{2m} \leqslant E} d\vec{p} = V \underbrace{\int_{\frac{p^2}{2m} \leqslant E} d\vec{p}}_{\text{sphère de rayon } \sqrt{2mE}}$$

$$= V\frac{4\pi}{3}(2mE)^{3/2}$$

$\Rightarrow$ cas quantique $= \dfrac{\text{cas classique}}{h^3}$ ← volume de l'espace des phases

sans dimension

$[h] = [r][p]$

$\Rightarrow [h]^3 = [r]^3[p]^3$

donc h^3 volume de l'espace de phases. aussi

Pour passer du classique au quantique, il faut diviser $N(E)$ (et donc $\rho(E)$) par un volume élémentaire de l'espace de phases (pour des raisons d'homogénéité). La mécanique quantique donne ce volume : h^3.

2 - N particules, libres ou en interaction

Quantique : $N(E)$: nombre

Classique : $N(E) = \dfrac{\int d^3\vec{r}_1 \int d^3\vec{r}_2 \ldots \int d^3\vec{r}_N \int d^3\vec{p}_1 \ldots \int d^3\vec{p}_N}{h^{3N}}$

(sans dimension)