

## TD 1 : Dénombrement et calcul de probabilités

### Exercice 1 :

- 1.1. De combien de manières différentes peut-on disposer  $N$  objets discernables dans  $N$  boîtes différentes, sachant qu'on ne peut pas mettre plus d'un objet par boîte ?
- 1.2. Combien existe-t-il de manières différentes de tirer  $m$  objets parmi  $N$  objets discernables ? On distinguera le cas où l'ordre des tirages n'a pas d'importance de celui où il en a.
- 1.3. Combien y a-t-il de manières différentes de mettre  $N$  objets discernables dans  $r$  boîtes différentes, sachant qu'il y a  $N_1$  objets dans la première boîte,  $N_2$  dans la seconde, ... et  $N_r$  dans la boîte  $r$  ? L'ordre des objets au sein de chacune des boîtes est supposé sans importance.
- 1.4. Combien y a-t-il de manières de placer  $N$  objets discernables dans  $g$  boîtes distinctes ?
- 1.5. Combien y a-t-il de manières de placer  $N$  objets identiques dans  $g$  boîtes distinctes ?

### Exercice 2 :

- 2.1. On réalise six lancers de dés (non pipés) successifs.
  - 2.1.1. Quelle est la probabilité pour que le chiffre six n'apparaisse que sur un seul des six dés ?
  - 2.1.2. Quelle est la probabilité pour que le chiffre six apparaisse sur deux des six dés ?
  - 2.1.3. Quelle est la probabilité pour que le chiffre six apparaisse sur au moins un des six dés ?

### Exercice 3 :

- 3.1. Un nombre réel  $N$  est choisi au hasard dans l'intervalle  $[0; 1[$ . Quelle est la probabilité que cinq de ses dix premières décimales soient des nombres strictement inférieurs à 5 ?

## Exercice 4 : Fluctuations dans un gaz parfait

- 4.1.** On considère un récipient de volume  $V$  formés de deux compartiments de volume respectivement  $V_1$  et  $V_2 = V - V_1$ . Le récipient contient  $N$  molécules de gaz qui peuvent librement passer d'un compartiment à l'autre.
- 4.1.1.** En supposant que chaque élément de volume du récipient possède la même probabilité de contenir une molécule de gaz, déterminer la probabilité qu'une molécule se trouve dans le premier compartiment.
- 4.1.2.** Les molécules étant sans interaction, en déduire la probabilité  $\wp(N_1)$  de trouver  $N_1$  particules dans le premier compartiment.
- 4.1.3.** En déduire le nombre moyen de molécules  $\langle N_1 \rangle$  dans le premier compartiment.
- 4.1.4.** Calculer les fluctuations  $[\langle N_1^2 \rangle - \langle N_1 \rangle^2] / \langle N_1 \rangle^2$  du nombre de particules dans le premier compartiment et montrer que ces fluctuations s'annulent dans la limite thermodynamique.

## Exercice 5 :

Un sujet commun de Physique est créé par l'un des trois professeurs  $B.B.$ ,  $D.K.$  ou  $T.G.$  avec les probabilités  $\wp(B.B.) = 0.35$ ,  $\wp(D.K.) = 0.40$  et  $\wp(T.G.) = 0.25$ . Les étudiants craignent un sujet de mécanique analytique (événement  $M$ ) et, connaissant leurs professeurs, ils pronostiquent  $\wp(M|B.B.) = 0.2$ ,  $\wp(M|D.K.) = 0.5$  et  $\wp(M|T.G.) = 0.8$ .

- 5.1.** Calculer la probabilité que le sujet porte sur la mécanique analytique.
- 5.2.** Le sujet porte sur la mécanique analytique à l'examen. Quelle est alors la probabilité pour que le professeur  $B.B.$  soit le rédacteur du sujet ?

## Marche aléatoire

### Exercice 1 : Marche aléatoire : du réseau au continu

**1.1.** On considère un marcheur ne pouvant se déplacer que sur une droite par pas de longueur  $\Delta x$  au rythme d'un pas par intervalle de temps  $\Delta t$ . On note  $p$  la probabilité d'un pas vers la droite et  $q$  celle d'un pas vers la gauche. On définit  $\varphi(x, t)$  la probabilité de trouver le promeneur à une position  $x$  à un instant  $t$ . A l'instant  $t = 0$ , le promeneur se trouve au point  $x = 0$ , i.e.  $\varphi(x, 0) = \delta(x)$ . On se placera dans un premier temps dans le système d'unités où  $\Delta x = \Delta t = 1$  pour simplifier les calculs.

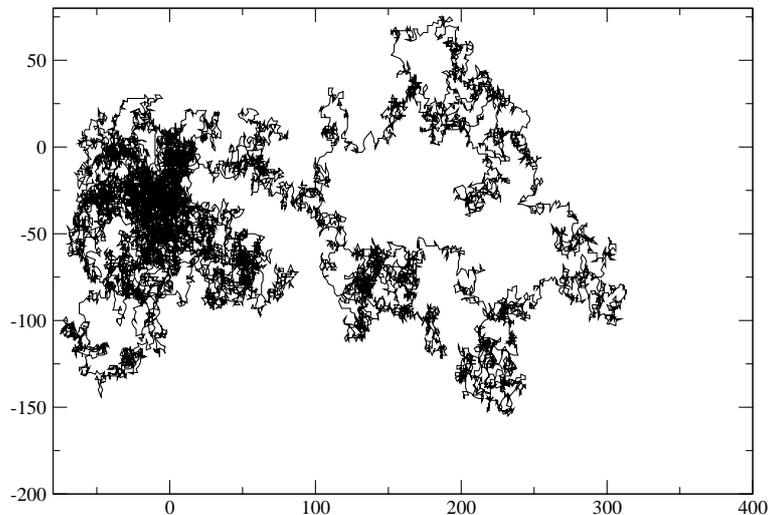


Figure 1.1 : Marche aléatoire après  $10^5$  pas.

**1.1.1.** Écrire la probabilité  $\varphi(x, t + 1)$  de trouver le promeneur à une position  $x$  à un instant  $t + 1$  en fonction de la probabilité à l'instant  $t$ .

**1.1.2.** Montrer que dans le cas particulier  $q = 1 - p$ , la loi binomiale est solution de cette équation. On pourra utiliser la relation

$$C_{N+1}^n = C_N^{n-1} + C_N^n$$

permettant par exemple de construire le triangle de Pascal.

**1.1.3.** Calculer la position moyenne  $\langle x(t) \rangle$  au bout d'un temps  $t$ . On pourra commencer par calculer le nombre de pas moyen vers la droite (ou la gauche). Calculer de la même manière la distance quadratique moyenne  $\langle x^2(t) \rangle$ .

**1.2.** On calcule à présent la fonction caractéristique de  $\wp(x, t)$ .

**1.2.1.** Récrire l'équation maîtresse en considérant que les pas sont de longueur  $\Delta x$  et de durée  $\Delta t$ .

**1.2.2.** A partir de l'équation maîtresse, calculer  $\wp(k, t + \Delta t)$  où la transformée de Fourier est définie comme :

$$\wp(k, t) = \sum_x \wp(x, t) e^{ikx}, \quad \wp(x, t) = \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \frac{dk}{2\pi/\Delta x} \wp(k, t) e^{-ikx}$$

**1.2.3.** On se place à présent dans la limite  $\Delta t \rightarrow 0$ . En développant l'expression de  $\wp(k, t + \Delta t)$  au premier ordre en  $\Delta t$  et en introduisant les taux de transition par unité de temps  $w_+ = p/\Delta$  et  $w_- = q/\Delta t$ , montrer qu'on obtient une équation différentielle pour  $\wp(k, t)$  dont on donnera la solution.

**1.2.4.** On prend maintenant la limite  $\Delta x \rightarrow 0$ . Récrire  $\wp(k, t)$  en développant l'argument de l'exponentielle à l'ordre deux en  $\Delta x$ . Montrer ensuite que  $\wp(x, t)$ , i.e. la transformée de Fourier inverse de  $\wp(k, t)$ , se réduit à une gaussienne centrée sur un point en mouvement rectiligne uniforme avec une vitesse que l'on précisera :

$$\wp(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-vt)^2}{4Dt}}.$$

**1.3.** On s'intéresse à présent à la limite continue de l'équation maîtresse.

**1.3.1.** On définit les taux de transition par unités de temps et de longueur de saut comme  $p = w_+ \Delta t / \Delta x^2$  et  $q = w_- \Delta t / \Delta x^2$ . Écrire l'équation maîtresse dans la limite  $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ .

**1.3.2.** Montrer qu'on obtient finalement l'équation de la diffusion dans le cas particulier  $w_- = w_+$  :

$$\frac{\partial \wp}{\partial t}(x, t) = D \frac{\partial^2 \wp}{\partial x^2}(x, t)$$

**1.3.3.** Supposons maintenant que les probabilités de saut du marcheur soient modifiées par un champ local  $\alpha(x)$  dû à une force extérieure de la manière suivante :

$$p \longrightarrow \frac{1}{2} + \Delta x \alpha(x), \quad q \longrightarrow \frac{1}{2} - \Delta x \alpha(x)$$

Montrer que dans la limite continue, l'équation maîtresse tend vers une équation de Smoluchowski :

$$\frac{\partial \wp}{\partial t}(x, t) = D \left[ -4 \frac{\partial}{\partial x} (\alpha(x) \wp(x, t)) + \frac{\partial^2 \wp}{\partial x^2}(x, t) \right]$$

## TD 2 : Ensemble microcanonique

### Exercice 1 : Particule dans une boîte

- 1.1. Une particule de masse  $m$ , astreinte à se déplacer dans une unique direction de l'espace est placée dans une boîte de largeur  $L$ . Représenter le domaine de l'espace des phases qui lui est accessible lorsqu'elle a une énergie comprise entre  $E$  et  $E + \delta E$  ( $\delta E \ll 1$ ).
- 1.2. On place maintenant deux particules identiques dans la boîte. On note  $x_1$  et  $x_2$  (resp.  $p_1$  et  $p_2$ ) les positions (resp. impulsions) de chacune des deux particules. Représenter le domaine de l'espace des positions  $(x_1, x_2)$  puis de l'espace des impulsions  $(p_1, p_2)$  accessibles au système lorsque son énergie est comprise entre  $E$  et  $E + \delta E$  ( $\delta E \ll 1$ ).

### Exercice 2 : Oscillateur harmonique tridimensionnel

On considère une masse  $m$  soumise à la force de rappel  $-kr$  d'un ressort. On négligera toute autre interaction.

- 2.1. On se placera dans le système de coordonnées sphériques défini par

$$\overrightarrow{OM} = \begin{pmatrix} x = r \cos \varphi \sin \theta \\ y = r \sin \varphi \sin \theta \\ z = r \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

- 2.1.1. Déterminer les vecteurs  $\vec{u}_r$ ,  $\vec{u}_\theta$  et  $\vec{u}_\varphi$  formant le repère local au point  $M$ .
- 2.1.2. Déterminer l'expression générale de la vitesse dans un système de coordonnées sphériques.
- 2.1.3. En déduire l'expression de l'énergie cinétique.
- 2.2. On traite tout d'abord le problème dans le cadre de la mécanique lagrangienne.
  - 2.2.1. Écrire le lagrangien de la masse  $m$ .
  - 2.2.2. Montrer que les trois équations de Lagrange conduisent d'un part à l'équation de la dynamique de la mécanique newtonienne et d'autre part à deux lois de conservation.
  - 2.2.3. Déterminer les impulsions généralisées  $p_r$ ,  $p_\theta$  et  $p_\varphi$  associées respectivement à  $r$ ,  $\theta$  et  $\varphi$ .
- 2.3. On se place désormais dans le cadre de la mécanique hamiltonienne.

- 2.3.1.** Écrire le hamiltonien du système.
- 2.3.2.** En déduire les équations d'Hamilton.
- 2.3.3.** Écrire l'équation d'Hamilton-Jacobi du système.
- 2.3.4.** Montrer que de manière générale, l'énergie est une quantité conservée si le potentiel ne dépend pas explicitement du temps.
- 2.3.5.** En déduire que la trajectoire de la masse dans l'espace des phases est un ellipsoïde dont on précisera les caractéristiques. Que se passerait-il si on ajoutait une force de friction ?

## TD 3 : Ensemble microcanonique (2)

### Exercice 1 : Assemblée d'oscillateurs harmoniques

On considère une assemblée de  $N$  oscillateurs harmoniques de masse  $m$  et de pulsation  $\omega$ . Les oscillateurs sont supposés sans interaction entre eux et avec le reste de l'univers. Le but de l'exercice est d'établir que les quanta d'énergie  $\hbar\omega$  sont des particules que l'on doit définir comme indiscernables pour retrouver le résultat classique.

- 1.1. On se place dans un premier temps dans le cadre de la mécanique classique.
  - 1.1.1. Écrire l'hamiltonien du système puis résoudre les équations d'Hamilton.
  - 1.1.2. Discuter de la forme du domaine de l'espace des phases accessible au système lorsque son énergie est comprise entre  $E$  et  $E + \delta E$  †.
  - 1.1.3. Déterminer la température microcanonique du système et montrer que l'énergie dépend linéairement de la température pour  $N \gg 1$ .
- 1.2. On se place maintenant dans le cadre de la mécanique quantique.
  - 1.2.1. En mettant en évidence dans l'équation de Schrödinger la séparabilité des variables associées à des oscillateurs différents, montrer que l'énergie totale s'écrit

$$E = \sum_{i=1}^N \left( n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (1.1)$$

- 1.2.2. On suppose dans un premier temps les quanta d'énergie  $\hbar\omega$  discernables. Déterminer la température microcanonique du système et montrer qu'on obtient une température constante en désaccord avec le résultat classique.
  - 1.2.3. On suppose à présent les quanta d'énergie  $\hbar\omega$  indiscernables. Déterminer la température microcanonique du système et montrer qu'on retrouve la relation classique entre l'énergie et la température dans la limite des grands nombres quantiques.

---

† La surface  $\Sigma_d(R)$  et le volume  $\Omega_d(R)$  d'une hypersphère de rayon  $R$  en dimension  $d$  peuvent être obtenus en calculant l'intégrale de la fonction  $e^{-r^2}$  sur  $\mathbb{R}^d$  en coordonnées cartésiennes et sphériques. On obtient

$$\Sigma_d(R) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} R^{d-1}, \quad \Omega_d(R) = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} R^d$$

## Exercice 2 : Températures négatives

On considère un sel paramagnétique composé d'un ensemble de  $N$  particules portant un moment magnétique et pouvant se trouver dans deux niveaux d'énergie différents,  $-\epsilon$  et  $\epsilon$ , correspondant aux états respectivement parallèle et anti-parallèle au champ magnétique appliqué. Aucun échange d'énergie n'est possible avec l'extérieur du système.

- 2.1.** Déterminer l'entropie du système dans la limite  $N \gg 1$ .
- 2.2.** Montrer que la température du système n'est pas une fonction strictement positive de l'énergie et qu'un corps à une température négative est plus chaud qu'à une température positive.

## TD 4 : Gaz parfait micro-canonique

### Exercice 1 : Gaz parfait de molécules

On considère un gaz constitué de  $N$  molécules supposées sans interaction.

- 1.1. On suppose que l'espace des configurations d'une molécule comporte non seulement les coordonnées  $q_i$  de son centre de masse mais aussi trois degrés de liberté de rotation  $\theta_i$ .
  - 1.1.1. Écrire le lagrangien du système.
  - 1.1.2. Montrer que les équations de Lagrange se réduisent à des lois de conservation de quantités qu'on précisera.
  - 1.1.3. Écrire les impulsions  $p_i$ ,  $J_i$  puis l'hamiltonien du système.
- 1.2. Le gaz est placé dans une enceinte de volume  $V$  interdisant tout échange de chaleur ou de particule avec l'extérieur.
  - 1.2.1. Calculer le nombre d'états microscopiques  $\Phi(E)$  dont l'énergie est inférieure ou égale à  $E$  puis en déduire le nombre d'états microscopiques  $\Omega(E)\delta E$  d'énergie comprise entre  $E$  et  $E + \delta E$  avec  $\delta E \ll 1$ . On rappelle que le volume d'une hypersphère de dimension  $d$  et de rayon  $R$  est

$$\Omega_d(R) = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(1 + \frac{d}{2})} R^d. \quad (1.1)$$

- 1.2.2. Calculer l'entropie  $S(E)$  d'un système dont l'énergie est comprise entre  $E$  et  $E + \delta E$ . On supposera négligeable le terme faisant intervenir  $\delta E$ .
  - 1.2.3. Déterminer la température  $T$  du système puis en déterminer l'expression de la l'énergie  $E$  en fonction de la température.
  - 1.2.4. Calculer la pression  $P$  du système et montrer qu'on retrouve l'équation d'état des gaz parfaits.
- 1.3. On considère désormais deux systèmes isolés d'énergies respectives  $E_1$  et  $E_2$ , comportant respectivement  $N_1$  et  $N_2$  particules et de volume  $V_1$  et  $V_2$ . On se placera dans la limite thermodynamique d'un grand nombre  $N_{1,2}$  de particules.
  - 1.3.1. Les deux systèmes étant tout d'abord isolés, écrire la température  $T_1$  et  $T_2$  de chacun des deux systèmes puis leur pression  $P_1$  et  $P_2$ .

- 1.3.2.** Les deux systèmes sont mis en contact et les particules peuvent aller librement de l'un à l'autre. L'ensemble reste isolé de l'extérieur. Le système résultant comporte donc  $N = N_1 + N_2$  particules confinées dans un volume  $V = V_1 + V_2$ . Quelle grandeur thermodynamique se conserve ?
- 1.3.3.** Écrire l'énergie totale  $E$  en fonction des températures  $T_1$  et  $T_2$  de chacun des deux sous-systèmes avant la mise en contact puis en déduire la température  $T$  du système final en fonction de  $T_1$  et  $T_2$ .
- 1.3.4.** Donner l'expression des pressions  $P_1$  et  $P_2$  de chacun des deux sous-systèmes avant la mise en contact puis en déduire la pression  $P$  du système final en fonction de  $P_1$  et  $P_2$ .

## TD 5 : Modèle de solide cristallin

### Exercice 1 :

On considère un cristal formé d'un arrangement régulier de  $N$  atomes en équilibre thermique avec un thermostat à une température  $T$ . Le problème sera traité dans le cadre de la mécanique classique.

- 1.1.** A basse température, les atomes oscillent autour de leur position d'équilibre  $\vec{r}_i^0$ . On pourra donc approcher l'énergie potentielle d'interaction d'un ion avec ses voisins par le développement de Taylor

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r}^0) + \sum_{\mu=1}^3 (x_{\mu} - x_{\mu}^0) \left( \frac{\partial V}{\partial x_{\mu}} \right)_{\vec{r}^0} + \sum_{\mu, \nu=1}^3 (x_{\mu} - x_{\mu}^0)(x_{\nu} - x_{\nu}^0) \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x_{\mu} \partial x_{\nu}} \right)_{\vec{r}^0} + \dots$$

où on a utilisé la notation  $\vec{r} = (x_1 \ x_2 \ x_3)$ . Le premier terme est constant donc ne contribue pas aux propriétés thermodynamiques. Le second terme est nul par définition de la position d'équilibre  $\vec{r}^0$ . Finalement, en effectuant le changement de variables

$$\vec{r} - \vec{r}^0 \longrightarrow \vec{r}$$

puis en se plaçant dans la base des états propre de la matrice  $3 \times 3$   $[V'']_{\mu\nu} = \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x_{\mu} \partial x_{\nu}} \right)_{\vec{r}^0}$ , le potentiel s'écrit

$$V(\vec{r}) = \sum_{\mu=1}^3 \frac{1}{2} m \omega_{\mu}^2 x_{\mu}^2 + \dots$$

Dans le cas isotrope, les trois valeurs propres  $m \omega_{\mu}^2$  sont égales et il reste

$$V(\vec{r}) = \sum_{\mu=1}^3 \frac{1}{2} m \omega^2 x_{\mu}^2 + \dots$$

Le cristal se comporte donc comme une assemblée de  $3N$  oscillateurs harmoniques unidimensionnels.

- 1.1.1.** Donner l'expression du nombre moyen  $d^2 n(x, p)$  d'oscillateurs unidimensionnels ayant une position comprise entre  $x$  et  $x + dx$  et une impulsion comprise entre  $p$  et  $p + dp$ .

- 1.1.2.** Déterminer l'expression de la fonction de partition  $\mathcal{Z}$ .
- 1.1.3.** Préciser le domaine de température dans lequel la fonction de partition classique est une bonne approximation de la fonction de partition quantique d'un oscillateur unidimensionnel.
- 1.1.4.** Trouver l'expression de l'énergie interne  $U$  du cristal et en déduire celle de la capacité calorifique molaire à volume constant  $C_V$  du solide. Comparer à la loi expérimentale de Dulong et Petit :

$$C_V = 25 J K^{-1} mol^{-1} \quad (1.1)$$

- 1.2.** Lindemann (1910) a suggéré qu'un solide devait fondre lorsque l'amplitude moyenne de vibration des atomes qui le constituent atteint une valeur égale à une certaine fraction de la distance interatomique.
- 1.2.1.** Calculer le nombre  $dn(x)$  d'oscillateurs ayant une position comprise entre  $x$  et  $x + dx$ .
- 1.2.2.** Calculer les valeurs moyennes  $\langle x \rangle$  et  $\langle x^2 \rangle$ .
- 1.2.3.** En déduire l'énergie potentielle moyenne  $\langle \epsilon_P \rangle$  d'un oscillateur ainsi que l'amplitude moyenne  $x_0$  des vibrations définie par  $\langle \epsilon_P \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0$ .
- 1.2.4.** Le tableau 1.1 rassemble la masse atomique  $M$ , la température de fusion  $T_F$ , la température d'Einstein  $\Theta_E = \hbar \omega / k_B$  et la distance  $d$  entre deux atomes voisins pour divers matériaux. Calculer l'amplitude moyenne de vibration à la température de fusion pour ces éléments.

|                  | Mg         | Al   | Cu   | Zn   | Ag    | Pb    |
|------------------|------------|------|------|------|-------|-------|
| $M (g.mol^{-1})$ | 24.3       | 27.0 | 63.5 | 65.4 | 107.9 | 207.2 |
| $T_F (K)$        | 924        | 933  | 1356 | 692  | 1234  | 601   |
| $\Theta_E (K)$   | $\sim 340$ | 400  | 320  | 230  | 220   | 92    |
| $d (10^{-10} m)$ | 3.19       | 2.86 | 2.55 | 2.66 | 2.88  | 3.49  |

- 1.3.** A température élevée, la capacité calorifique des solides présente une croissance linéaire en fonction de la température au lieu de tendre vers la limite donnée par la loi de Dulong et Petit. Pour le cuivre par exemple, on a  $C_V (J.K^{-1}.mol^{-1}) = 23.2 + 2.9.10^{-3}T (K)$  (R.E. Pawel et E.E Stanburry, J. Chem. Solids (1965) **26** 607). Une des causes de cette croissance peut être attribuée à l'anharmonicité des vibrations, c'est à dire au fait que l'énergie potentielle de chaque oscillateur est de la forme

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - f x^4 \quad (1.2)$$

où  $f$  est une constante.

- 1.3.1.** Exprimer la fonction de partition  $\mathcal{Z}$  à l'aide d'une intégrale ne portant que sur  $x$ .
- 1.3.2.** Calculer  $\mathcal{Z}$  en ne retenant que la contribution à l'ordre le bas du terme anharmonique.
- 1.3.3.** En déduire l'expression de  $C_V$  à cette approximation et comparer ce résultat théorique à la loi expérimentale donnée pour le cuivre.

## TD 6 : Gaz parfait diatomique

### Exercice 1 : Gaz de molécules diatomiques sans interaction

On considère une particule de masse  $m$  piégée dans une boîte de côté  $L$ . La molécule possède un moment d'inertie  $I$  et la liaison chimique entre les atomes vibre en réponse à une interaction qu'on supposera harmonique de pulsation propre  $\omega$ . Le système est en équilibre avec un thermostat à une température  $T$ .

**1.1.** On s'intéresse dans un premier temps à la thermodynamique associée aux degrés de liberté de translation de la molécule. On négligera les degrés de liberté de rotation et de vibration.

**1.1.1.** Résoudre l'équation de Schrödinger et calculer la fonction de partition du système dans la limite des hautes températures <sup>†</sup>.

**1.1.2.** Calculer l'énergie interne et en déduire la chaleur spécifique.

**1.1.3.** Calculer l'entropie du système.

**1.1.4.** Calculer la pression exercée par la particule sur les parois de la boîte et déterminer l'équation d'état du gaz parfait.

**1.2.** On s'intéresse à présent aux degrés de vibration de la molécule.

**1.2.1.** Calculer la fonction de partition du système.

**1.2.2.** Calculer l'énergie interne puis la chaleur spécifique. Tracer l'allure de la chaleur spécifique en fonction de la température.

**1.2.3.** Calculer la chaleur spécifique molaire à  $T = 300\text{ K}$  des gaz suivants dont on donne les températures caractéristiques de vibration  $\theta = \hbar\omega/k_B$  :

$$\text{H}_2 : 6140\text{ K}, \quad \text{HCl} : 4300\text{ K}, \quad \text{Cl}_2 : 810\text{ K}$$

**1.3.** On s'intéresse maintenant au mouvement de rotation des molécules.

**1.3.1.** Écrire l'hamiltonien du système et déterminer les niveaux d'énergie.

**1.3.2.** Calculer la fonction de partition.

**1.3.3.** Calculer l'énergie interne puis la chaleur spécifique.

---

<sup>†</sup> On pourra estimer l'erreur commise en utilisant le développement d'Euler Mac-Laurin

$$\sum_{n=0}^{+\infty} f(n) = \int_0^{+\infty} f(x) dx + \frac{1}{2}f(0) - \frac{1}{12}f'(0) + \frac{1}{720}f''(0) + \dots \quad (1.1)$$

## TD 7 : Paramagnétisme

### Exercice 1 : Paramagnétisme de Langevin et de Brillouin

On considère un solide formé d'ions portant un moment magnétique spontané  $\vec{\mu}$  dû à un moment cinétique total  $J$  non nul. Le solide est en équilibre avec un thermostat à une température  $T$  et est placé dans un champ magnétique  $\vec{B}$  orienté suivant l'axe  $Oz$ .

**1.1.** On traitera tout d'abord le problème de manière classique.

**1.1.1.** Calculer les aimantations moyennes  $\langle \mu_x \rangle$  et  $\langle \mu_z \rangle$  suivant les directions  $Ox$  et  $Oz$ .

**1.1.2.** Déterminer le comportement dans la limite d'un champ faible.

**1.1.3.** Montrer que la susceptibilité magnétique est inversement proportionnelle à la température (loi de Curie).

**1.2.** La mécanique quantique prédit la quantification du moment cinétique total  $J$  de l'ion et donc de son moment magnétique :

$$\mu_z = -m_J g_J \mu_B, \quad m_J \in \{-J; J\} \quad (1.1)$$

où  $g_J$  est le facteur de Landé.

**1.2.1.** Calculer l'aimantation moyenne  $\langle m_z \rangle$  dans le cadre de la mécanique quantique.

**1.2.2.** Déterminer l'aimantation dans la limite d'un champ faible.

**1.2.3.** Montrer qu'on retrouve la loi de Curie simplement corrigée d'un facteur  $J(J+1)g_J^2$  dont la racine carrée est appelé nombre de magnétons effectifs.

**1.3.** Discuter dans le cadre des théories de Langevin et Brillouin l'article W.E. Henry (1952) Phys. Rev. **88**, 559.

## TD 8 : Ensemble canonique

### Exercice 1 : Gaz parfait soumis à une accélération

On considère un gaz parfait monoatomique classique formé de  $N$  particules identiques de masse  $m$ . Il est placé dans un récipient cylindrique de section  $S$  et de hauteur  $L$ . La température est supposée uniforme.

- 1.1. On s'intéresse dans un premier temps aux effets de la pesanteur sur les propriétés du gaz.
  - 1.1.1. Calculer la fonction de partition du système. On notera  $g$  l'accélération de la pesanteur.
  - 1.1.2. Déterminer la densité de particules  $\rho(z)$  en fonction de l'altitude  $z$ .
  - 1.1.3. Calculer l'énergie moyenne puis la chaleur spécifique. Étudier les cas limites  $T \rightarrow 0$  et  $T \rightarrow +\infty$ .
- 1.2. On met maintenant le cylindre en rotation autour de son axe de révolution avec une pulsation constante  $\omega$ . Les effets de pesanteur sont maintenant supposés négligeables.
  - 1.2.1. Calculer la fonction de partition du système.
  - 1.2.2. Calculer la densité de particule  $\rho(r)$  en fonction de la distance à l'axe  $r$ .
  - 1.2.3. Calculer la pression exercée sur les parois du cylindre en fonction de sa vitesse angulaire.

### Exercice 2 : Fonctionnement du LASER

On se propose d'étudier le mode de fonctionnement d'un LASER à néon.

- 2.1. On s'intéresse dans un premier temps à un atome de néon et plus particulièrement à la transition  $^3S \rightarrow ^2P$  qui fait passer un électron du niveau  $3s$  au niveau  $2p$ . Le temps de vie du niveau excité  $3s$  est de  $7 \cdot 10^{-7}$  s.
  - 2.1.1. Déterminer l'ordre de grandeur de la largeur de raie naturelle de la transition et de la longueur du train d'onde correspondant.
  - 2.1.2. Mettre en évidence l'impossibilité de construire un LASER exploitant l'émission spontanée,
- 2.2. On considère une assemblée de  $N$  atomes de néon. On note respectivement  $N_1$  et  $N_2$  le nombre d'atomes dans les états fondamental d'énergie  $E_1$  et excité d'énergie  $E_2$ .

Le système est placé dans un bain de photons d'énergie  $h\nu = E_2 - E_1$ . On note  $u_\nu$  la densité d'énergie. Deux phénomènes peuvent avoir lieu : l'**absorption** d'un photon conduisant à l'excitation d'un atome de néon :

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt} = -Bu_\nu N_1$$

et l'émission spontanée d'un photon par un atome excité :

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt} = AN_2.$$

On suppose que le système formé des atomes de néon est en équilibre avec un thermostat à une température  $T$ .

- 2.2.1. Calculer les nombres moyen d'atomes  $\langle N_1 \rangle$  et  $\langle N_2 \rangle$  dans les niveaux d'énergie  $E_1$  et  $E_2$  et le rapport  $\langle N_2 \rangle / \langle N_1 \rangle$ .
- 2.2.2. Expliquer chacun des termes des deux équations cinétiques ci-dessus.
- 2.2.3. Calculer la densité d'énergie à l'équilibre des atomes de néon avec le bain de photons.
- 2.2.4. En 1900, Planck a obtenu une expression de la densité d'énergie  $u_\nu$

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

reproduisant pour la première fois correctement les données expérimentales. Montrer que l'expression de  $u_\nu$  obtenue précédemment correspond à la limite haute-température de la loi de Planck. En déduire le rapport  $A/B$ .

- 2.2.5. Pour expliquer la loi de Planck, Einstein a suggéré en 1905 qu'un atome excité pouvait être forcé à se désexciter par la présence d'un photon. Lors de la désexcitation, un photon de mêmes énergie et impulsion que le photon incident est émis. On parle d'**émission stimulée**. L'équation cinétique associée est alors

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt} = Bu_\nu N_2.$$

Montrer qu'on retrouve bien la loi de Planck.

- 2.2.6. Expliquer le mode de fonctionnement du LASER.

2.3. Le fonctionnement du LASER tel qu'il a été présenté conduit donc à une multiplication du nombre de photons avec tous la même fréquence. Cependant, les atomes de néon forment un gaz et l'agitation thermique conduit à une dispersion de la fréquence des photons émis par émission stimulée. On suppose le gaz parfait.

- 2.3.1. Calculer la fonction de partition du gaz.
- 2.3.2. Déterminer la distribution de probabilité  $\wp(v_x)$  d'une des composantes de la vitesse d'un atome.
- 2.3.3. Dans la limite des faibles vitesses, le décalage de la fréquence du photon émis est

$$\Delta\nu = \nu' - \nu, \quad \nu = \nu' \frac{\sqrt{1 - v/c}}{\sqrt{1 + v/c}} \simeq \nu' \left(1 - \frac{v}{c}\right)$$

Déterminer la probabilité que le photon soit émis à une fréquence  $\nu'$ .

- 2.3.4. Calculer la dispersion moyenne  $\sqrt{\langle \Delta\nu^2 \rangle}$ .
- 2.3.5. Une lumière monochromatique est obtenue en utilisant une cavité résonnante. Expliquer son fonctionnement et calculer la différence de fréquence entre deux modes résonnants en fonction de la longueur de la cavité.

## TD 9 : Théorie cinétique des gaz

### Exercice 1 : Répartition des vitesses dans un jet atomique

On considère une enceinte maintenue à température constante  $T$  et contenant un gaz supposé parfait. On notera  $m$  la masse des molécules formant le gaz. On perce l'enceinte d'un trou de section  $S$ , petit devant la surface totale de l'enceinte.

- 1.1. Déterminer la distribution des impulsions des molécules à l'intérieur de l'enceinte et de celles s'en échappant.
- 1.2. Calculer la vitesse moyenne, la plus probable et la vitesse quadratique à l'intérieur de l'enceinte et dans le jet s'en échappant.

### Exercice 2 : Condensation sur une paroi froide

Une enceinte sphérique de rayon  $R = 10 \text{ cm}$  est maintenue à la température  $T = 27^\circ\text{C}$  sauf sur une surface  $S = 1 \text{ cm}^2$  gardée à très basse température. L'enceinte contient de la vapeur d'eau initialement sous la pression de  $10 \text{ mm}$  de mercure. On suppose que toute molécule d'eau frappant la surface froide s'y condense et y reste collée.

- 2.1. Calculer la quantité d'eau se condensant sur la surface froide pendant un temps  $dt$  en fonction de la pression à l'intérieur de l'enceinte.
- 2.2. En déduire le temps nécessaire pour que la pression tombe à  $10^{-4} \text{ mm}$  de mercure.

### Exercice 3 : Libre parcours moyen dans un gaz

On considère un gaz en équilibre thermodynamique dans une enceinte à la température  $T$ . Soit  $n$  le nombre de molécules du gaz par unité de volume. Le libre parcours moyen  $\lambda$  d'une molécule de gaz est définie comme la distance parcourue par la molécule donnée entre deux chocs successifs avec les autres molécules.

- 3.1. On se propose de calculer  $\lambda$ . Pour cela, on considère un modèle simplifié dans lequel les molécules du gaz sont assimilées à des sphères rigides de rayon  $r$ . De plus, on suppose, dans un premier temps, que toutes les molécules du gaz sont immobiles sauf une, celle-ci étant animée de la vitesse moyenne des molécules  $\langle v \rangle$ .
  - 3.1.1. Calculer le nombre de chocs par unité de temps subis par la molécule mobile.

**3.1.2.** En déduire le libre parcours moyen de la molécule.

**3.2.** En fait, toutes les molécules du gaz étant en mouvement, on admet que la vitesse qui doit intervenir dans le calcul du nombre de chocs subis par une molécule est la vitesse relative moyenne de deux molécules. On suppose toujours que chaque molécule est animée de la vitesse moyenne  $\langle v \rangle$ .

**3.2.1.** On considère deux molécules du gaz telles que leurs vitesses fassent entre elles un angle  $\theta$ . Quelle est la vitesse relative de ces deux molécules en fonction de  $\langle v \rangle$  et  $\theta$  ?

**3.2.2.** Quelle la probabilité pour que l'angle entre les vitesses de deux molécules soit compris entre  $\theta$  et  $\theta + d\theta$  ?

**3.2.3.** Calculer la vitesse relative moyenne de deux molécules du gaz.

**3.2.4.** Donner la nouvelle expression du libre parcours moyen.

**3.3.** On peut calculer le rayon  $r$  d'une molécule à partir de la valeur du covolume  $b$  qui intervient dans l'équation d'état du gaz (par exemple l'équation de Van der Waals). Il est possible d'établir la relation

$$b = \frac{16}{3} \mathcal{N} \pi r^3 \quad (3.1)$$

où  $\mathcal{N}$  désigne le nombre d'Avogadro. Pour l'azote, l'expérience fournit  $b = 0.0394 \text{ l/mol}$ .

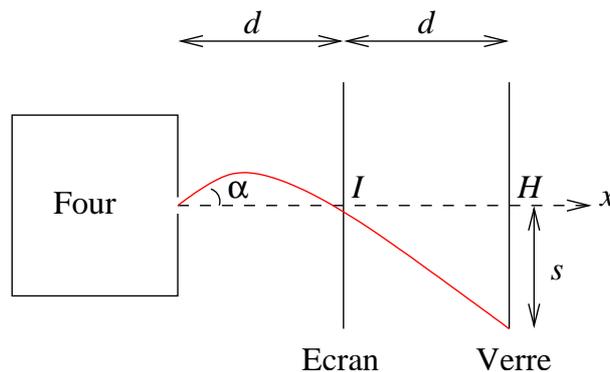
**3.3.1.** Calculer le libre parcours moyen d'une molécule d'azote à  $280 \text{ K}$  et sous les pressions de  $1 \text{ atm}$  et de  $10^{-3} \text{ mm}$  de mercure.

**3.3.2.** Calculer le nombre de chocs par seconde subis par une molécule d'azote dans les mêmes conditions (la masse molaire de l'azote est de  $28 \text{ g.mol}^{-1}$ ).

## TD 10 : Théorie cinétique des gaz (2)

### Exercice 1 : Jet atomique dans un champ de pesanteur

Les atomes sortant d'un petit orifice percé dans la paroi verticale d'un four subissent une déviation due au champ de pesanteur terrestre. On désigne par  $Ox$  l'axe horizontal passant par le centre  $O$  de l'orifice et perpendiculaire à celui-ci. Un atome quelconque, à sa sortie, est animée d'une certaine vitesse  $\vec{v}$  qu'on suppose contenue dans le plan vertical  $Oxz$ , l'angle  $\alpha$  de  $\vec{v}$  avec  $Ox$  étant supposé petit.



**Figure 1.1 :** Dispositif expérimental utilisé par Estermann, Simpson et Stern (1947) pour tester la distribution de Boltzmann.

- 1.1. Déterminer la relation existant entre le module de  $\vec{v}$  et l'angle  $\alpha$  pour que l'atome rencontre l'axe  $Ox$  en un point  $I$  à la distance  $d$  de  $O$ . Cette condition est matérialisée par le fait qu'il existe en  $I$  un orifice dans un écran vertical  $E$  parallèle à la paroi du four.
- 1.2. Les atomes du jet se déposent sur une plaque de verre verticale, perpendiculaire en  $H$  à  $Ox$  et située à une distance  $d$  de l'écran  $E$ . En considérant la trajectoire d'un atome aboutissant au point  $M$  sur la plaque de verre, trouver en fonction de  $\alpha$  (ou de  $v$ ) la distance  $s = HM$  du point d'impact de l'atome à l'axe  $Ox$ .
- 1.3. On fait dans un premier temps l'hypothèse simplificatrice que tous les atomes dans le jet possèdent la vitesse la plus probable  $v_{\max}$ .
  - 1.3.1. Calculer la déviation correspondante  $s_{\max}$  sur la plaque de verre.
  - 1.3.2. Calculer  $v_{\max}$  et  $s_{\max}$  pour des atomes de césium ( $M = 133 \text{ g.mol}^{-1}$ ) sortant d'un four à la température  $T = 400 \text{ K}$  si  $d = 1 \text{ m}$ .

**1.4.** On abandonne à présent l'hypothèse  $v = v_{\max}$ .

**1.4.1.** En utilisant la distribution des vitesses des atomes dans le jet, trouver la loi de variation de la densité superficielle du dépôt d'atomes condensés sur la plaque de verre.

**1.4.2.** Calculer la valeur  $s_{\max}$  pour laquelle cette densité est maximale.

## Exercice 2 : Libre parcours moyen

Soit  $\langle v \rangle$  la vitesse moyenne des molécules d'un gaz. On assimile les molécules à des sphères rigides de rayon  $R$  et on se limite au modèle où toutes les molécules ont la vitesse  $\langle v \rangle$  pour calculer le libre parcours moyen  $\lambda$ .

**2.1.** On se propose d'établir la probabilité  $\varphi(x)$  pour qu'une molécule donnée ait un libre parcours de longueur supérieur ou égal à  $x$ . On admettra que la probabilité pour qu'une molécule subisse un choc entre  $x$  et  $x + dx$  est  $dx/L$  où  $L$  est une longueur indépendante de  $x$ .

**2.1.1.** Établir l'équation différentielle à laquelle doit obéir  $\varphi(x)$ . En déduire l'expression de  $\varphi(x)$ .

**2.1.2.** Quelle est la probabilité d'un libre parcours de longueur comprise entre  $x$  et  $x + dx$  ? En déduire l'expression du libre parcours moyen en fonction de  $L$ .

**2.2.** On se propose maintenant de calculer le débit des molécules à travers une surface en tenant compte des collisions.

**2.2.1.** Quel est le nombre de molécules quittant un élément de volume  $d^3\vec{r}$  pendant l'intervalle de temps  $dt$  du fait des collisions ?

**2.2.2.** Parmi celles-ci, quel est le nombre qui passera à travers une surface  $dS$  sans avoir subi d'autres collisions ?

**2.2.3.** En déduire le débit total.

**2.2.4.** De quelle altitude moyenne proviennent les molécules quittant  $dS$  ?

## TD 11 : Au delà du gaz parfait classique

### Exercice 1 : Gaz classique en interaction

On considère un gaz constitué de  $N$  molécules indiscernables de masse  $m$ . On traitera le problème classiquement sans tenir compte des degrés de liberté de rotation et de vibration des molécules.

**1.1.** En supposant les molécules sans aucune interaction, calculer la fonction de partition du gaz et en déduire la loi d'état des gaz parfaits.

**1.2.** Déterminer la pression d'un gaz de sphères dures sans interaction dans la limite des faibles densités, i.e. en négligeant la probabilité que plus de deux sphères soient en contact. Montrer qu'on retrouve une loi d'état proche de celle de Van der Waals avec un covolume molaire

$$b = \frac{16\pi N r_0^3}{3} \quad (1.1)$$

**1.3.** On ajoute maintenant à l'énergie cinétique de translation un terme d'interaction de paires

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = \sum_{i < j} U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad (1.2)$$

qui ne dépend que de la distance entre les molécules.

**1.3.1.** Écrire la fonction de partition du gaz.

**1.3.2.** Déterminer la fonction de partition du gaz dans la limite d'une interaction faible. On posera

$$b = -\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} 4\pi r^2 U(r) dr \quad (1.3)$$

**1.3.3.** Calculer la pression du gaz aux premiers ordres en  $b$ .

**1.4.** On considère un modèle de gaz rare où les molécules sont assimilées à des sphères de rayon  $r_0$ . On supposera l'énergie potentielle égale à  $U_0$  lorsque deux sphères s'interpénètrent et de forme dipolaire sinon

$$U(r) = -\frac{A}{r^6} \quad (1.4)$$

Déterminer la pression du gaz rare.

## Exercice 2 : Gaz parfait ultra-relativiste

On considère un gaz constitué de  $N$  molécules indiscernables de masse au repos  $m_0$ . On rappelle que l'énergie relativiste d'une particule libre est

$$E^2 = p^2 c^2 + (m_0 c^2)^2 \quad (2.1)$$

On se place dans la limite ultra-relativiste  $pc \gg m_0 c^2$  de sorte qu'on utilisera l'énergie  $E = pc$ .

- 2.1.** Calculer la fonction de partition du gaz.
- 2.2.** Déterminer l'énergie interne du gaz, sa chaleur spécifique et sa pression.

## TD 12 : Ensemble grand-canonique

### Exercice 1 : Adsorption d'un gaz par un solide

Les molécules d'un gaz peuvent être piégées à la surface d'un solide : c'est le phénomène d'adsorption. On peut distinguer deux types d'adsorption : la chimisorption dans laquelle les molécules adsorbées forment une liaison chimique avec les atomes de la surface et l'adsorption physique dans laquelle les molécules du gaz sont liées à la surface par les forces de Van der Waals. Dans le premier type, les molécules sont adsorbées en un nombre fini de sites et forment une couche monomoléculaire ; dans le second type, les molécules peuvent se déposer en plusieurs couches sur la surface. Nous nous proposons d'étudier un modèle simple de chacun des types d'adsorption.

#### 1.1. Étude de la phase gazeuse

On considère tout d'abord la phase gazeuse que l'on assimile pour simplifier à un gaz parfait monoatomique de masse atomique  $m$ . Les atomes sont supposés indiscernables et on néglige les degrés de libertés de rotation.

- 1.1.1. Calculer la fonction de partition grand-canonique  $\Xi(T, V, \mu)$  en fonction de la température  $T$ , du volume  $V$  et du potentiel chimique  $\mu$ .
- 1.1.2. Déterminer le nombre moyen d'atomes  $\langle N_g \rangle$  dans la phase gazeuse et en déduire le potentiel chimique en fonction de  $\langle N_g \rangle$ .
- 1.1.3. Montrer que le potentiel chimique peut s'écrire sous la forme

$$\mu = k_B T \ln \frac{P}{P_0(T)}, \quad P_0(T) \sim T^{5/2} \quad (1.1)$$

#### 1.2. Modèle de Langmuir de la chimisorption

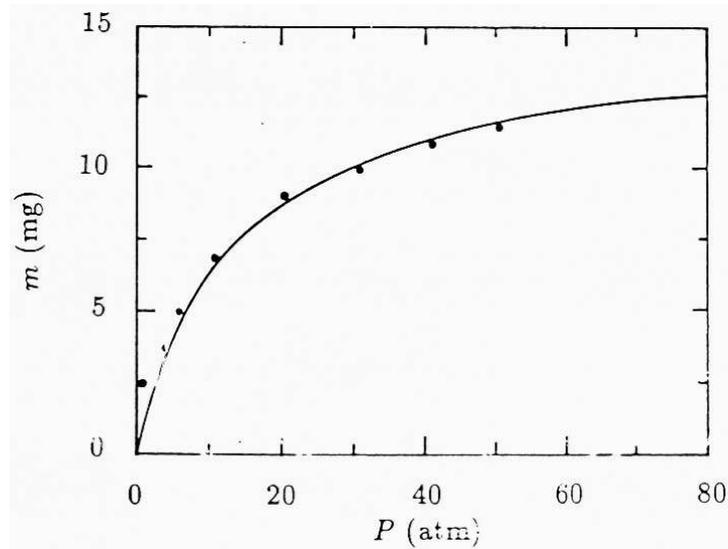
Dans le modèle de Langmuir, on suppose que le solide comporte  $N_0$  sites où les molécules de gaz peuvent être piégées avec l'énergie  $-\epsilon$ . A chaque site  $i$ , on associe une variable d'occupation  $n_i$  qui vaut 1 lorsqu'un atome est adsorbé à cet endroit et 0 sinon. Dans ce modèle, un site ne peut être occupé par plus d'un atome.

- 1.2.1. Calculer la fonction de partition grand-canonique  $\Xi$  pour la phase adsorbée.
- 1.2.2. Déterminer le nombre moyen d'atomes  $\langle N_a \rangle$  dans la phase adsorbée en fonction de  $T$  et  $\mu$  et en déduire le potentiel chimique  $\mu$ .
- 1.2.3. Écrire la condition d'équilibre des phases gazeuse et adsorbée. En déduire l'expression du nombre moyen d'atomes adsorbés  $\langle N_a \rangle$  en fonction de la pression  $P$  du gaz. Représenter une isotherme  $\langle N_a(P) \rangle$ .

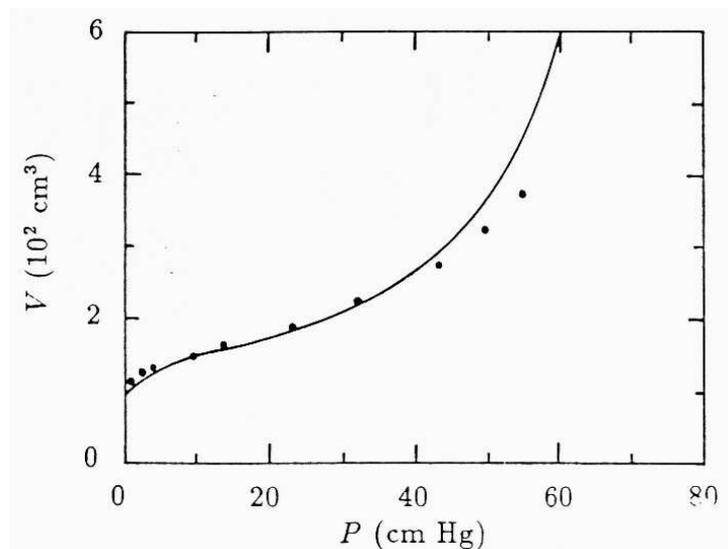
### 1.3. Modèle Brunauer, Emmett et Teller de la physisorption

Dans ce modèle, on suppose que chacun des atomes se déposent sur la surface sous l'effet de l'interaction de Van der Waals. On notera  $-\epsilon_1$  l'énergie d'interaction d'un atome du gaz avec la surface et  $-\epsilon_2$  celle d'un atome de gaz avec un autre atome déjà adsorbé. Chaque site peut ainsi accueillir en principe une infinité d'atomes de gaz.

- 1.3.1. Calculer la fonction de partition grand-canonique  $\Xi$  pour la phase adsorbée.
- 1.3.2. Déterminer le nombre moyen d'atomes  $\langle N_a \rangle$  dans la phase adsorbée.
- 1.3.3. Écrire la condition d'équilibre des phases gazeuse et adsorbée en fonction de  $\xi = \frac{P}{P_0(T)} e^{\beta \epsilon_2}$  et  $c = e^{\beta(\epsilon_1 - \epsilon_2)}$ .
- 1.3.4. Représenter graphiquement l'allure de  $\langle N_a \rangle$  en fonction de  $\xi$  et mettre en évidence l'existence d'une pression de vapeur saturante.



**Figure 1.1 :** Masse d'azote adsorbée sur du charbon de bois à 20 °C (J.W. McBain et G.T. Britton, *J. Am. Chem. Soc.* **52**, 2198 (1930)).



**Figure 1.2 :** Volume d'azote adsorbé sur un catalyseur à base de fer à 77.3 K (S. Brunauer, P.H. Emmet et E. Teller, *J. Am. Chem. Soc.* **60**, 309 (1938)).

## TD 13 : Statistique de Fermi-Dirac

### Exercice 1 : Étude de l'équilibre des naines blanches

Les étoiles sont maintenues en équilibre par la balance de l'attraction gravitationnelle du gaz les constituant et de la pression thermique produite par les réactions thermonucléaires. Lorsque ces réactions de fusion se ralentissent sous l'effet de la diminution de la concentration en hydrogène, l'attraction gravitationnelle reprend le dessus et provoque la contraction de l'étoile. Toutes les étoiles ne donnent toutefois pas lieu à un trou noir : la pression de Pauli peut contrebalancer l'attraction gravitationnelle dans les étoiles les moins massives. Il se forme alors une petite étoile très dense appelée **naine blanche**.

#### 1.1.

- 1.1.1. Écrire puis résoudre l'équation de Schrödinger d'une particule libre de masse  $m$  dans une boîte cubique de côté  $L$ . On utilisera des conditions aux bords fixes.
- 1.1.2. Calculer le nombre d'états quantiques  $\phi(\epsilon)$  d'énergie inférieure ou égale à  $\epsilon$ . En déduire la dégénérescence  $g(\epsilon)$ . On tiendra compte de la dégénérescence de spin  $g = 2$ .
- 1.1.3. Écrire la fonction de partition grand-canonique  $\Xi$  puis le grand-potentiel  $J$ .
- 1.1.4. Écrire le nombre moyen de particules  $\langle N \rangle$ . Montrer que le nombre de particule dans le niveau d'énergie  $\epsilon$  est donné par la fonction de Fermi

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$$

- 1.1.5. Montrer que les états stationnaires du système sont également états propres de l'impulsion.
- 1.1.6. Discuter de l'occupation des niveaux d'énergie à  $T = 0$ . Calculer le niveau de Fermi  $E_F$  et l'impulsion au niveau de Fermi  $p_F$ , i.e. le rayon de la sphère de Fermi dans l'espace des impulsions.
- 1.1.7. L'énergie  $\epsilon$  d'une particule d'impulsion  $p$  et de masse  $m$  est donnée par

$$\epsilon = (p^2 c^2 + m_0^2 c^4)^{1/2} \quad (1.1)$$

A la limite classique ( $p/mc \ll 1$ ), on retrouve la définition habituelle  $\epsilon \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m}$  et dans la limite ultra-relativiste ( $p/mc \gg 1$ ), on a  $\epsilon \simeq pc$ . Déterminer l'énergie de Fermi  $\epsilon_F$  en fonction de  $p_F$  et discuter les deux limites  $x_F = p_F/mc \ll 1$  et  $x_F = p_F/mc \gg 1$ .

**1.1.8.** Établir l'expression de l'énergie interne  $U_0$  du gaz d'électrons au zéro absolu en fonction du volume  $V$  et de  $x_F$ . On exprimera le résultat en fonction de  $h(x) = \int_0^x t^2(1+t^2)^{1/2} dt$  dont les formes limites sont

$$h(x) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} + \dots, \quad h(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{x^4}{4} + \dots \quad (1.2)$$

**1.1.9.** En déduire l'expression de la pression cinétique  $P_0$  des électrons en fonction de  $x_F$ ,  $h(x_F)$  et  $h'(x_F)$ .

**1.1.10.** Montrer que dans la limite classique ( $x_F \ll 1$ ), on obtient la loi des gaz parfaits

$$PV = \frac{2}{3}(U_0 - Nm_0c^2) \quad (1.3)$$

et que dans la limite ultra-relativiste ( $x_F \gg 1$ ),

$$PV = \frac{U_0}{3} \quad (1.4)$$

**1.2. Application au cas des naines blanches** Une naine blanche est une étoile vieille, constituée essentiellement d'hélium  ${}^4\text{He}$ , de masse  $M$  voisine de la masse du soleil  $M_S = 2.0 \cdot 10^{30} \text{ kg}$  et de masse volumique extrêmement élevée  $\rho \sim 10^{10} \text{ kg.m}^{-3}$  soit  $10^7$  fois celle du soleil. La température intérieure de l'étoile est de l'ordre de  $10^7 \text{ K}$ . A cette température, l'hélium est complètement ionisé et on peut considérer que l'étoile est formée de  $N$  électrons libres et de  $N/2$  noyaux d'hélium ayant pour effet de neutraliser la charge des électrons et de maintenir la cohésion de l'étoile par interaction gravitationnelle.

**1.2.1.** Calculer le volume  $V$ , puis le rayon  $R$  d'une naine blanche typique telle que  $M = M_S$  et  $\rho = 10^{10} \text{ kg.m}^{-3}$ . Comparer  $R$  au rayon terrestre  $6400 \text{ km}$ .

**1.2.2.** Calculer le nombre d'électrons  $N$  et le nombre volumique  $N/V$  de cette étoile. La masse atomique de l'hélium est  $M({}^4\text{He}) = 4.0 \text{ g.mol}^{-1}$ .

**1.2.3.** Calculer la valeur de  $p_F$  pour le gaz d'électrons de la naine blanche typique, ainsi que celle de  $x_F$ . En déduire qu'il est nécessaire d'utiliser la cinématique relativiste pour calculer l'énergie des électrons.

**1.2.4.** Calculer l'énergie de Fermi et en déduire que l'on peut faire l'étude de la naine blanche à l'approximation  $T = 0 \text{ K}$ .

**1.2.5.** L'énergie totale d'une naine blanche est la somme de l'énergie cinétique des électrons et de l'énergie gravitationnelle de l'étoile. L'énergie cinétique des noyaux est négligeables. L'énergie gravitationnelle d'une étoile de masse  $M$  et de rayon  $R$  est de la forme

$$E_G = -\alpha \mathcal{G} \frac{M^2}{R} \quad (1.5)$$

où  $\mathcal{G}$  est la constante de gravitation et  $\alpha$  un nombre dépendant de la répartition de la matière dans l'étoile ( $\alpha = \frac{3}{5}$  pour une répartition uniforme).

**1.2.6.** Exprimer le volume  $V$  et le rayon  $R$  de l'étoile en fonction de  $N$  et de  $x_F$ . On fera l'approximation que la masse d'un atome d'hélium est égale à  $4m_P$  où  $m_P$  est la masse du proton.

**1.2.7.** Exprimer l'énergie cinétique  $U_0$  des étoiles en fonction de  $M$  et  $x_F$ .

**1.2.8.** Mettre l'énergie gravitationnelle de l'étoile sous la forme

$$E = -\frac{3}{8}\alpha\gamma m_0 c^2 \left(\frac{M}{m_P}\right)^{5/3} x_F \quad (1.6)$$

où  $\gamma$  est une constante sans dimension dont on donnera l'expression.

**1.2.9.** Écrire la condition permettant de déterminer le rayon à l'équilibre  $R_0$  d'une étoile de masse  $M$  donnée.

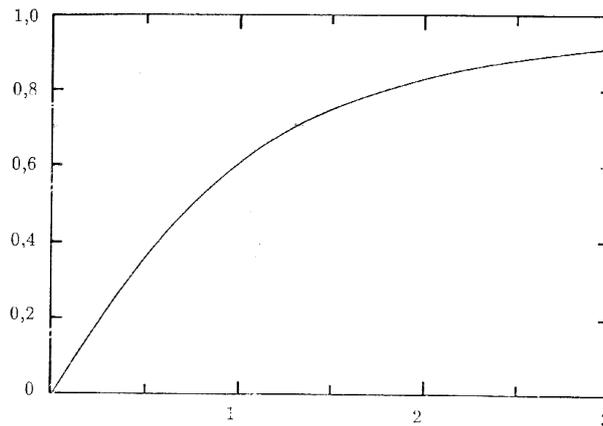
**1.2.10.** Expliciter cette condition d'équilibre et la mettre sous la forme

$$f(x_F) = \alpha\gamma \left(\frac{M}{m_P}\right)^{2/3} \quad (1.7)$$

où  $f(x)$  sera exprimé en fonction de  $h(x)$  et  $h'(x)$ .

**1.2.11.** La fonction  $f(x)$  est représentée sur la figure 1.1. Déterminer graphiquement le rayon d'équilibre  $R_0$  d'une naine blanche de masse  $M = M_S$ . On utilisera  $\alpha = \frac{3}{5}$  et  $\gamma = 1.03 \cdot 10^{-38}$ .

**1.2.12.** Montrer que les naines blanches ne peuvent avoir une masse supérieure à une masse limite  $M_l$  (limite de Chandrasekhar) que l'on exprimera en fonction de  $M_S$ .



**Figure 1.1 :** Fonction  $f(x)$ .

## TD 14 : Gaz parfait quantique ultra-relativiste

### Exercice 1 : Transition de déconfinement

On pense actuellement que la matière est formée de particules qui se décomposent en deux grandes familles : les leptons (électrons, neutrinos, ...) et les quarks. Ce sont toutes des fermions de spin 1/2 et chacune de ces particules a une anti-particule. Les interactions entre les particules sont véhiculées par des bosons : le photon pour l'interaction électromagnétique,  $W^+$ ,  $W^-$  et  $Z_0$  pour l'interaction nucléaire faible et 8 gluons pour l'interaction forte. Les photons sont échangés entre les particules possédant une charge électrique et les gluons seulement entre les quarks qui possèdent une "couleur" (rouge, vert ou bleu). A cause de l'interaction forte qui les "collent" ensemble, on ne rencontre pas dans la nature de quarks seuls mais seulement sous la forme de doublet quark/anti-quark, les mésons (particule  $\pi$ ,...), ou sous forme de triplets de quarks, les baryons (proton, neutron, ...). On pense que lorsque l'univers était beaucoup plus chaud qu'à l'heure actuelle, i.e. peu de temps après le Big-Bang, les fluctuations thermiques étaient plus importantes que l'interaction forte permettant ainsi aux quarks d'exister sous la forme d'un plasma.

#### 1.1. Gaz de bosons ultra-relativistes

1.1.1. L'équation de Schrödinger est non-relativiste. Pour traiter un système relativiste, on applique le principe de correspondance

$$(E, \vec{p}) \longrightarrow \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, -i\hbar \vec{\nabla} \right) \quad (1.1)$$

à l'expression classique de l'énergie  $E$  donnée par la relativité restreinte

$$E^2 = p^2 c^2 + (m_0 c^2)^2 \quad (1.2)$$

On obtient alors l'équation de Klein-Gordon

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + (m_0 c^2)^2 \psi \quad (1.3)$$

On se place dans la limite ultra-relativiste, i.e. on néglige l'énergie de masse devant l'énergie cinétique. Déterminer les fonctions d'onde stationnaires et l'énergie associée

pour un boson dans une boîte cubique de volume  $V$ . Montrer que le confinement induit une quantification des niveaux d'énergie.

**1.1.2.** Déterminer le nombre d'états quantiques  $\phi(\epsilon)$  d'énergie inférieure à une valeur donnée  $\epsilon$  dans la limite des nombres quantiques grands. En déduire la densité d'états  $g(\epsilon)$  entre  $\epsilon$  et  $\epsilon + d\epsilon$ .

**1.1.3.** Calculer la fonction de partition grand-canonique d'un gaz parfait de bosons. La relativité restreinte permettant la création d'un couple particule/anti-particule à partir du vide, le potentiel chimique  $\mu$  est nul. En déduire le grand-potentiel  $J$  dans la limite continue. On utilisera une intégration par partie et l'une des intégrales données à la fin du sujet.

**1.1.4.** Calculer la pression du gaz de bosons, son énergie interne et sa chaleur spécifique.

## 1.2. Gaz de fermions ultra-relativistes

**1.2.1.** L'équation de Klein-Gordon n'est pas appropriée pour traiter les fermions. Dirac a établi en 1927 une équation s'appliquant aux fermions de spin 1/2 dont on peut montrer qu'elle redonne le même spectre d'énergie que l'équation de Klein-Gordon pour une particule libre (seules les fonctions d'onde sont des objets mathématiques différents). Écrire la densité d'états  $g(\epsilon)$  entre les énergies  $\epsilon$  et  $\epsilon + d\epsilon$  en tenant compte de la dégénérescence de spin.

**1.2.2.** Calculer la fonction de partition grand-canonique d'un gaz parfait de fermions de spin 1/2 puis le grand-potentiel  $J$  dans la limite continue.

**1.2.3.** Calculer la pression du gaz de fermions, son énergie interne et sa chaleur spécifique.

## 1.3. Plasma quark-gluon

**1.3.1.** Les mésons du triplet  $\pi$  ( $\pi^0$ ,  $\pi^+$  et  $\pi^-$ ) sont formés de quarks et d'anti-quarks  $u$  et  $d$ . Ce sont des fermions de spin 1/2. Écrire la pression d'un gaz de mésons.

**1.3.2.** On pense qu'à très hautes températures, les mésons se dissocient en quarks et gluons. On rappelle que les 8 gluons sont des bosons et les quarks des fermions de spin 1/2 possédant une couleur. Écrire la pression totale d'un plasma quark-gluon. On peut montrer qu'on doit ajouter une constante  $-B$  à la pression d'origine cinétique pour rendre compte de l'interaction forte.

**1.3.3.** Écrire la condition d'équilibre entre un gaz de mésons et un plasma quarks-gluons. En déduire la température à laquelle a lieu la transition de déconfinement.

**1.3.4.** La température de transition a été estimée à  $144 \text{ MeV}$ . Que vaut cette température en  $K$  ?

$$\int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}, \quad \int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x + 1} dx = 7 \frac{\pi^4}{120} \quad (1.4)$$

## TD 15 : Systèmes quantiques à basses températures

### Exercice 1 : Propriétés thermodynamiques du gaz de Fermi

- 1.1.** L'isotope  $\text{He}^3$  de l'hélium reste liquide jusqu'aux plus basses températures si la pression est inférieure à quelques dizaines d'atmosphères. Les atomes  $\text{He}^3$  ayant un spin  $1/2$ , on peut supposer en première approximation que le liquide se comporte comme un gaz parfait de fermions de masse volumique  $\rho = 0.081 \text{ g/cm}^3$ .
- 1.1.1.** A partir des solutions de l'équation de Schrödinger dans un cube de volume  $V$ , établir l'expression de la densité d'états  $g(\epsilon)$  dans la limite des grands nombres quantiques.
- 1.1.2.** Calculer à  $T = 0$  le potentiel chimique  $\mu_0$  ainsi la température de Fermi  $T_F = \mu_0/k_B$ .
- 1.1.3.** Déterminer une valeur approchée du potentiel chimique  $\mu$  à une température  $T \ll T_F$  en fonction de  $\mu_0$ . On utilisera le développement de Sommerfeld :

$$\int_0^{+\infty} h(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon \underset{T \ll T_F}{\sim} \int_0^{\mu} h(\epsilon)d\epsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 h'(\mu) + \dots$$

où  $f(\epsilon)$  est la fonction de Fermi.

- 1.2.** Montrer que le chaleur spécifique peut alors s'écrire sous la forme  $C_V = \alpha N k_B T$  où  $N$  est le nombre de particules et  $\alpha$  une constante à déterminer.

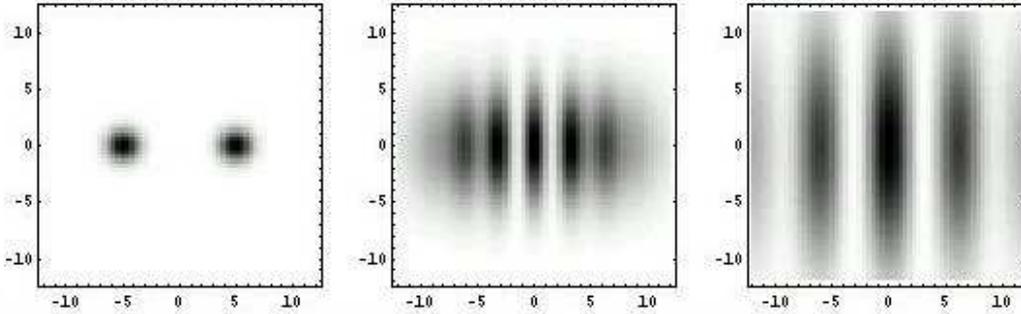
### Exercice 2 : Condensation de Bose-Einstein

- 2.1.** La condensation de Bose-Einstein, prédite théoriquement par Bose et Einstein en 1924, a été observée pour la première fois en 1995 (prix Nobel 2001). Un gaz d'atomes de spin entier, i.e. des bosons, est refroidi jusqu'à des températures de l'ordre du  $nK$ . A cette température, une fraction non-négligeable des atomes se trouvent dans l'état fondamental et se comportent comme un unique objet quantique macroscopique.
- 2.1.1.** A partir des solutions de l'équation de Schrödinger dans un cube de volume  $V$ , établir l'expression de la densité d'états  $g(\epsilon)$  dans la limite des grands nombres quantiques.
- 2.1.2.** Écrire le potentiel grand-canonique  $J$  d'un gaz parfait de bosons.

**2.1.3.** Montrer que le nombre moyen de bosons s'écrit sous la forme

$$\langle N \rangle = V \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \int_0^{+\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} \quad (2.1)$$

et que l'intégrale ne converge que si  $\mu \leq 0$ .



**Figure 2.1 :** Deux condensats de Bose-Einstein forment une figure d'interférence. Les régions obscures correspondent à une densité de particule importante.

**2.2.** La divergence de l'intégrale provient de la limite continue utilisée lors du calcul du potentiel  $J$  et traduit le fait qu'à basses températures, les fluctuations thermiques sont rares et les bosons occupent préférentiellement les niveaux de basses énergies. On doit donc tenir compte du fait que le spectre d'énergie est discret. On se propose de montrer à présent que la condensation de Bose-Einstein ne se produit pas en dimension  $d = 2$ .

**2.2.1.** A partir des solutions de l'équation de Schrödinger sur un carré de surface  $S$ , montrer que la densité d'états  $g(\epsilon)$  est constante dans la limite des grands nombres quantiques.

**2.2.2.** Écrire le potentiel grand-canonique  $J$  d'un gaz bidimensionnel de bosons.

**2.2.3.** Calculer le nombre moyen de particule puis en déduire l'expression du potentiel chimique  $\mu$  si on fixe le nombre de particules.

**2.2.4.** Montrer que le potentiel chimique restant toujours négatif, il ne peut y avoir de condensation de Bose-Einstein.