Préparation à l'Agrégation de Sciences Physiques
ENSP - Montrouge

François Levrier

Physique Statistique - TD 3

Ensemble grand-canonique

25 octobre 2005

I - Système de particules identiques

La description grand-canonique s'applique aux systèmes en équilibre avec un thermostat et un réservoir de particules, qui imposent respectivement une température T et un potentiel chimique μ. Dans ce cas, la probabilité P_l d'un état microscopique $|l\rangle$, caractérisé par une énergie E_l et un nombre de particules N_l, est donnée par

$$P_l = \frac{1}{\Xi} e^{-\beta(E_l - \mu N_l)} \quad \text{avec} \quad \Xi = \sum_{|l\rangle} e^{-\beta(E_l - \mu N_l)} \quad \text{la grande fonction de partition.}$$

1. Établir une relation entre la grande fonction de partition et la fonction de partition canonique Z, puis les relations donnant le nombre moyen de particules $\overline{N}$ et l'énergie moyenne $\overline{E}$, en fonction de Ξ puis du grand potentiel $J = -k_B T \ln \Xi$.
2. Le système étudié est un ensemble de particules identiques, indépendantes et indiscernables. Les états microscopiques individuels de ces particules sont notés $|\lambda\rangle$, et les énergies correspondantes sont désignées par ϵ_λ. Montrer que la grande fonction de partition peut se factoriser suivant ces états individuels. Commenter par rapport à la situation canonique.
3. Calculer le nombre d'occupation moyen de l'état $|\lambda\rangle$ en faisant l'hypothèse que les particules sont des fermions. Discuter du comportement de ce nombre avec l'énergie de l'état, en fonction du potentiel chimique μ et de la température T.
4. Même chose lorsque les particules sont des bosons. On indiquera une condition d'existence de l'équilibre portant sur le potentiel chimique imposé par le réservoir de particules.
5. À quelle condition les distributions de Bose-Einstein et de Fermi-Dirac tendent-elles toutes deux vers la distribution de Maxwell-Boltzmann? Montrer que cette limite correspond effectivement à l'approximation de Maxwell-Boltzmann.

II - Gaz parfaits quantiques

Pour un système macroscopique, le grand nombre N de particules mis en jeu implique que la distribution d'une variable interne est une Gaussienne, avec une valeur moyenne égale à la valeur la plus probable et un rapport variance/moyenne inversement proportionnel à N. Autrement dit, les fluctuations des variables internes deviennent négligeables, ceci étant valable quelles que soient les conditions imposées au système.

Préliminaire
1. Dans ces conditions, appelées "limite thermodynamique", montrer comment on peut

utiliser le formalisme grand-canonique pour résoudre exactement, du moins en théorie, le problème de dénombrement posé par les gaz parfaits quantiques en canonique.
2. Donner la relation donnant implicitement le potentiel chimique lorsque T et N sont fixées.
3. Calculer la densité d'états du gaz parfait, en incluant les effets du spin.

Gaz parfait de fermions

1. Dans cette partie, on se place à température nulle. Calculer le potentiel chimique μ_0 appelé "niveau de Fermi" et en déduire la température de Fermi T_F définie par $\mu_0 = k_B T_F$.
2. Calculer l'énergie E du système.
3. Calculer la pression du gaz, qui est donnée en grand-canonique par

$$P = -\frac{\partial J}{\partial V} = -\frac{J}{V}.$$

Justifier cette dernière égalité pour un fluide simple, c'est-à-dire ne dépendant que de T, V et μ. Interpréter les résultats obtenus.

Gaz parfait de bosons

1. Déterminer l'équation donnant implicitement le potentiel chimique μ dans le cadre canonique. Montrer qu'il existe une température T_B, dite température de Bose, en deçà de laquelle la condition d'équilibre écrite au **4.** du premier exercice ne peut pas être remplie.
2. Soit un réel α, inférieur à 1 mais tel que αN représente encore une quantité macroscopique de particules. Calculer le potentiel chimique μ d'un système tel que le nombre moyen de particules dans l'état fondamental soit αN. En considérant l'énergie du premier état excité, montrer que celui-ci est largement sous-peuplé par rapport au fondamental lorsque $T \leqslant T_B$. Ce phénomène est appelé "condensation de Bose".
3. En déduire la relation remplaçant celle obtenue à la première question. Quelle est la contrainte expérimentale nécessaire pour obtenir la condensation de Bose? Peut-on observer ce phénomène dans un gaz de photons?
4. Calculer le nombre de particules condensées en fonction de la température.