

Michel Chrysos

TOUT EN FICHES

EXERCICES ET MÉTHODES DE

MÉCANIQUE QUANTIQUE

DUNOD

Le pictogramme qui figure ci-contre mérite une explication. Son objet est d'alerter le lecteur sur la menace que représente pour l'avenir de l'écrit, particulièrement dans le domaine de l'édition technique et universitaire, le développement massif du photocopillage.

Le Code de la propriété intellectuelle du 1^{er} juillet 1992 interdit en effet expressément la photocopie à usage collectif sans autorisation des ayants droit. Or, cette pratique s'est généralisée dans les établissements

d'enseignement supérieur, provoquant une baisse brutale des achats de livres et de revues, au point que la possibilité même pour

les auteurs de créer des œuvres nouvelles et de les faire éditer correctement est aujourd'hui menacée.

Nous rappelons donc que toute reproduction, partielle ou totale, de la présente publication est interdite sans autorisation de l'auteur, de son éditeur ou du

Centre français d'exploitation du droit de copie (CFC, 20, rue des Grands-Augustins, 75006 Paris).



© Dunod, 2022

11, rue Paul Bert, 92240 Malakoff

www.dunod.com

ISBN 978-2-10-081944-7

Le Code de la propriété intellectuelle n'autorisant, aux termes de l'article L. 122-5, 2° et 3° a), d'une part, que les « copies ou reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective » et, d'autre part, que les analyses et les courtes citations dans un but d'exemple et d'illustration, « toute représentation ou reproduction intégrale ou partielle faite sans le consentement de l'auteur ou de ses ayants droit ou ayants cause est illicite » (art. L. 122-4).

Cette représentation ou reproduction, par quelque procédé que ce soit, constituerait donc une contrefaçon sanctionnée par les articles L. 335-2 et suivants du Code de la propriété intellectuelle.

Και ξαφνικά πλημμύρισε κενό το πατρικό μας σπίτι.

Προσευχή στην ιερή της μνήμη.

Table des matières

Avant-propos	ix
1 Éléments de physique statistique	1
Fiche 1 Optimisation contrainte	1
Fiche 2 Définitions générales et vocabulaire	2
Fiche 3 Micro-état et macro-état	2
Fiche 4 Approximations, erreurs, et le bienfait du logarithme	3
Fiche 5 Approximation de Stirling	4
Fiche 6 Principaux concepts	4
Fiche 7 Statistiques : définitions et analyse	5
QCM	7
Vrai ou faux ?	10
Exercices	12
2 Les prémices d'une révolution	21
Fiche 1 Corps noir : formules de base et vocabulaire	21
Fiche 2 Survol historique	22
Fiche 3 Densité spectrale et loi de Planck-Einstein	24
Fiche 4 Loi de Wien	24
Fiche 5 Intensité \mathcal{I} et loi de Stefan-Boltzmann	25
Fiche 6 Effet photoélectrique	25
Fiche 7 Effet Compton	27
Fiche 8 Traitement dans un cadre relativiste	28
QCM	29
Vrai ou faux ?	32
Exercices	34
3 Spectre de H : modèles atomiques	47
Fiche 1 Raies visibles de H	47
Fiche 2 Généralisation de la formule de Balmer	49
Fiche 3 Atome de Thomson	50
Fiche 4 Atome de Rutherford	50
Fiche 5 Atome de Bohr et hypothèses de Bohr	51
Fiche 6 Atome de Bohr et spectre de H	51
Fiche 7 Atome de Bohr et dualité	53
Fiche 8 Atome de Sommerfeld-Wilson	54

	QCM.....	55
	Vrai ou faux ?.....	59
	Exercices.....	61
4	Équation de Schrödinger	73
	Fiche 1 Principe de dualité.....	73
	Fiche 2 Principe d'indétermination.....	74
	Fiche 3 Ondes de matière et fonctions d'onde.....	74
	Fiche 4 Équation de Schrödinger.....	75
	Fiche 5 Grandeurs classiques et opérateurs quantiques.....	76
	Fiche 6 ψ et $ \psi ^2$: interprétations.....	77
	Fiche 7 Au-delà de l'équation de Schrödinger.....	78
	QCM.....	80
	Vrai ou faux ?.....	83
	Exercices.....	85
5	Puits et barrières de potentiel	97
	Fiche 1 Puits de potentiel infini.....	97
	Fiche 2 Dégénérescences par symétrie et accidentelle.....	99
	Fiche 3 Au-delà du puits infini.....	100
	Fiche 4 Effet tunnel.....	101
	Fiche 5 Barrière de potentiel de forme quelconque.....	103
	Fiche 6 Transformations et invariances de jauge.....	104
	QCM.....	106
	Vrai ou faux ?.....	109
	Exercices.....	111
6	Formalisme de Dirac: vecteurs d'état, observables, mesures	121
	Fiche 1 Notation de Dirac.....	121
	Fiche 2 Opérateurs linéaires.....	123
	Fiche 3 Opérateurs hermitiens et observables.....	124
	Fiche 4 Opérateur appliqué sur un état quantique.....	124
	Fiche 5 Analyse d'une fonction en ondes planes.....	125
	Fiche 6 Amplitudes et fonctions d'onde : TF.....	126
	Fiche 7 Calcul de $\psi(x, t)$	127
	Fiche 8 Mesure quantique.....	128
	QCM.....	129
	Vrai ou faux ?.....	132
	Exercices.....	134
7	Moment cinétique	147
	Fiche 1 Moment cinétique.....	147
	Fiche 2 L_x, L_y, L_z , et L_{\pm} en coordonnées sphériques.....	148
	Fiche 3 Opérateur \vec{L}^2	148
	Fiche 4 Nombres quantiques l, m	148
	Fiche 5 L_+, L_- , et échelle $ l, m\rangle$: socle mathématique.....	150
	Fiche 6 Nombres quantiques secondaire et tertiaire.....	150

	Fiche 7	Au-delà d'une particule ou d'un moment \vec{L}	151
		QCM.....	153
		Vrai ou faux ?.....	157
		Exercices.....	159
8		Harmoniques sphériques : introduction aux orbitales	167
	Fiche 1	Fonctions harmoniques et harmoniques sphériques.....	167
	Fiche 2	Calcul des harmoniques sphériques.....	168
	Fiche 3	Propriétés d'une harmonique sphérique.....	168
	Fiche 4	Illustrations graphiques.....	169
	Fiche 5	Cercles d'annulation.....	170
	Fiche 6	Orbitales atomiques.....	170
	Fiche 7	Notation utilisée pour désigner une OA.....	170
	Fiche 8	Orbitales moléculaires.....	172
		QCM.....	173
		Vrai ou faux ?.....	177
		Exercices.....	179
9		Molécules simples et leurs spectres	189
	Fiche 1	Centre de masse et masse réduite.....	189
	Fiche 2	Rotation d'une molécule diatomique AB	191
	Fiche 3	Spectroscopie d'absorption.....	192
	Fiche 4	Techniques d'approximation.....	192
	Fiche 5	Oscillateur harmonique.....	193
	Fiche 6	A, A^\dagger, N : socle mathématique.....	194
	Fiche 7	Éléments de matrice.....	194
	Fiche 8	Oscillateur anharmonique.....	195
		QCM.....	197
		Vrai ou faux ?.....	200
		Exercices.....	202
10		Atome de Schrödinger	215
	Fiche 1	Vocabulaire et principaux concepts.....	215
	Fiche 2	Séparation du degré de liberté radial.....	216
	Fiche 3	Équations à coefficients variables : méthodologie.....	216
	Fiche 4	Résolution de l'équation radiale : feuille de route.....	218
	Fiche 5	Développement en série de Frobenius.....	219
	Fiche 6	Fonction d'onde radiale : formules compactes.....	221
	Fiche 7	Illustrations.....	222
	Fiche 8	Ions hydrogénoïdes.....	222
		QCM.....	223
		Vrai ou faux ?.....	226
		Exercices.....	228
		Constantes, unités atomiques, conversions	238
		Index	239

Avant-propos

À la fois déroutante au premier abord et fascinante, la mécanique quantique ne laisse personne indifférent. Redoutée pour certains, confondant avec l'absurde ou avec le non-sens pour d'autres, incompréhensible ou tout simplement merveilleusement compliquée, cette discipline est au cœur de la science moderne et a su s'imposer au fil des décennies pour faire partie intégrante du paysage universitaire. Défiant constamment l'intuition, cette théorie fait des prédictions sans cesse vérifiées qui offrent la quasi-preuve de sa déconcertante exactitude, et d'une ingéniosité sans commune mesure des grands esprits qui l'ont conçue, ou qui font bouger ses lignes. L'ouvrage que je propose se veut adapté à un public de physiciens de niveau licence. À la fois complet et pédagogique, il est prêt à l'utilisation en enseignement supérieur, éventuellement dispensé de manière compartimentée en une série de trois ou quatre modules de cours, d'une vingtaine d'heures par module environ, à commencer par la L2 et à surtout approfondir au cours de la L3, semestres 5 et 6. Certains de ses concepts sont parfois abordés en Master. Au cours des dix chapitres de l'ouvrage, 75 fiches permettent au lecteur de prendre immédiatement connaissance des définitions et principales notions et formules. Des questionnaires à choix multiples (QCM) sont soigneusement préparés et corrigés au sein de chaque chapitre en vue d'une auto-évaluation pertinente. Quatre options, A à D, sont proposées pour chaque question, qui très souvent admet plus d'une bonne réponse. À la suite de chaque QCM, une série de questions « vrai/faux » est mise à disposition. Puis, à raison de plus d'une douzaine d'exercices par chapitre, 130 exercices minutieusement corrigés qui, en parcourant un large éventail de concepts (allant du formalisme quantique à la physique atomique, moléculaire, nucléaire, ou encore à la chimie ou la spectroscopie), permettent au lecteur un entraînement optimal. Tout au long de l'ouvrage, le logiciel de calcul formel et graphique MAPLE a été abondamment utilisé. Cet ouvrage trouvera sa place sur le bureau de tout étudiant (ou enseignant) universitaire de physique, fondamentale ou appliquée, licence des sciences physiques, licence de physique et applications, chimie théorique. Les élèves ingénieurs, les élèves des classes préparatoires, les candidats au CAPES et à l'agrégation en sont également des publics privilégiés. Au cœur de la mécanique quantique se trouve un formalisme mathématique inhabituel ardu. Ses outils forment un arsenal que le lecteur, pris par la main dès le premier chapitre, sera amené à maîtriser. À l'aide d'une série d'exemples, de méthodes, et de conseils méthodologiques, développés tout au long de l'ouvrage, le lecteur s'y habituera progressivement et aura même l'impression de jouer un rôle fondateur dans l'établissement des concepts qui sont abordés. Rendre physicien aguerri un nouvel arrivant est ma plus grande ambition. J'ai la ferme conviction que les clés pour atteindre ce but se trouvent dans les pages de ce livre et n'attendent que le lecteur motivé pour être saisies.

Michel Chrysos

Éléments de physique statistique

1

MOTS-CLÉS

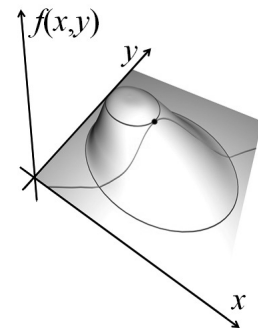
États, micro-états, macro-états, dégénérescence, approximation de Stirling, statistiques, statistique de Maxwell-Boltzmann, statistique de Bose-Einstein, statistique de Fermi-Dirac, optimisation contrainte, lagrangien, multiplicateurs de Lagrange.

Le but est de se familiariser avec des concepts de base de physique statistique. Ceux-ci forment le socle des observations quantiques puisqu'ils permettent de comprendre comment un grand nombre de particules, qu'elles soient matérielles ($m \neq 0$; électrons, atomes...) ou non ($m = 0$; photons...), peuplent les niveaux quantiques d'un système physique.

Fiche 1

Optimisation contrainte

Puissante méthode d'analyse mathématique, elle permet d'optimiser (extrémiser, soit minimiser ou maximiser) une fonction en présence de contraintes. La fonction doit être dérivable et peut être à plusieurs variables. À l'aide de paramètres $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ nommés les **multiplicateurs de Lagrange**, le problème d'optimisation d'une fonction à n dimensions $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ soumise à m contraintes est transformé en un simple problème d'optimisation d'une fonction L dépourvu de contraintes. La fonction L , souvent appelée le **lagrangien**, est une fonction à $n + m$ dimensions. La nappe illustrée ci-contre représente une fonction $f(x, y)$ soumise à une contrainte $g(x, y) = 0$. La courbe en forme de cloche représente la contrainte. Son intersection avec la nappe indique le maximum de $f(x, y)$ sous contrainte.



Définition 1.1 Lagrangien. Le lagrangien dans un problème quelconque, puis celui du problème évoqué en dernier ci-dessus, sont définis par :

$$L(x_1, x_2, \dots, x_n; \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) - \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1.1)$$

$$L(x, y; \lambda) = f(x, y) - \lambda g(x, y) \quad (1.2)$$



Conseil méthodologique On calcule $\frac{\partial L}{\partial x}$, $\frac{\partial L}{\partial y}$, et $\frac{\partial L}{\partial \lambda}$. Puis, on résout le système $\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial y} = \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0$ pour enfin déterminer la solution $(x_0, y_0; \lambda_0)$. Le point (x_0, y_0) est l'extrémum cherché. Sa nature (maximum, minimum) nécessite un recours aux dérivées secondes. Cette partie ne sera pas abordée.

Exercice Optimisation contrainte d'une fonction à deux variables. Déterminer les extrémums de la fonction $f(x, y) = x^2 + y^2 - 4xy$ soumise à la contrainte $x^2 + y^2 = 8$.

Solution

$$L(x, y; \lambda) = x^2 + y^2 - 4xy - \lambda(8 - x^2 - y^2) \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 2x - 4y + 2\lambda x = 0 \quad ; \quad \frac{\partial L}{\partial y} = 2y - 4x + 2\lambda y = 0 \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = x^2 + y^2 - 8 = 0 \Rightarrow x^2 + y^2 = 8 \quad (1.5)$$

Si x est nul, y l'est aussi (Éq. (1.4 a)). Si y est nul, x l'est aussi (Éq. (1.4 b)). Or $x \neq 0$ et $y \neq 0$ ($x = y = 0$ est exclue par l'Éq. (1.5)). Divisons l'expression $2y = x + \lambda x$ issue de l'Éq. (1.4 a) par x et l'expression issue de l'Éq. (1.4 b) par y . Il vient :

$$\frac{y}{x} = \frac{x}{y} = \frac{1 + \lambda}{2} \Rightarrow x = \begin{cases} y \Rightarrow \lambda = 1 \\ \text{ou} \\ -y \Rightarrow \lambda = -3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = \pm 2 & \text{et } y = \pm 2 \\ \text{ou} \\ x = \pm 2 & \text{et } y = \mp 2 \end{cases} \quad (1.6)$$

Les extrémums de $f(x, y)$ sont $(x_0, y_0) = (\pm 2, \pm 2)$, $(\pm 2, \mp 2)$. Les points $(\pm 2, \pm 2)$ correspondent à $\lambda = 1$, tandis que $(\pm 2, \mp 2)$ à $\lambda = -3$. Une étude plus poussée, basée sur le calcul des dérivées secondes, montre que $(\pm 2, \pm 2)$ sont des minimums ; $(\pm 2, \mp 2)$ sont des maximums. On ne s'attardera pas sur cette analyse.

Fiche 2

Définitions générales et vocabulaire

Définition 1.2 Mécanique quantique. Théorie fondamentale et branche majeure de la physique moderne. Elle a pour but la description mathématique de la structure de la matière et du rayonnement, et l'évolution dans l'espace et le temps des phénomènes physiques à l'échelle de l'infiniment petit (atomes, molécules, noyaux atomiques...).

Fruit intellectuel de savants notamment du XX^e siècle, la mécanique quantique est souvent considérée comme le plus formidable exploit de l'esprit humain. La place singulière qu'elle occupe s'explique par l'extraordinaire et infaillible précision sans cesse vérifiée dont elle fait preuve, et par sa capacité à décrire la quasi-totalité des phénomènes naturels. L'immense majorité de ces derniers survient par suite d'échanges d'énergie entre la matière et la lumière.

Définition 1.3 Constante de Planck. Constante universelle $h = 6,626\,070\,04 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. Introduite par Max Planck en 1900, son rôle est central en mécanique quantique.

Fiche 3

Micro-état et macro-état

Définition 1.4 Micro-état. Il désigne chacune des configurations microscopiques spécifiques qu'un système thermodynamique peut occuper au cours de ses fluctuations.

Définition 1.5 Macro-état. Nombre de particules qui occupent chaque niveau d'énergie du système. D'ordinaire, il englobe un grand nombre de micro-états, ces derniers pouvant être perçus comme les différentes manières pour le système d'arriver à un macro-état donné.

Définition 1.6 Fonction de distribution $f(E)$. Probabilité de trouver une particule dans un état d'énergie E .

Fiche 4

Approximations, erreurs, et le bienfait du logarithme

Lorsqu'on manipule des grands nombres, tel le nombre N de particules d'un gaz, on se retrouve souvent confronté à un dilemme : peut-on écrire $(N+1)^{N+1} \approx (N+1)^N \approx N^{N+1} \approx N^N$? Aussi tentant que cela puisse paraître, aucune de ces approximations n'est permise. En revanche, recourir au logarithme de ces expressions peut s'avérer salvateur. Or, le concept de logarithme intervient dans le calcul d'entropie S puisque $S = k_B \ln W$ où W est le nombre de micro-états du système. Ainsi que nous le verrons au cours de ce chapitre, des simplifications significatives auront alors lieu lors d'un tel calcul, et ce sont ces simplifications qui permettront d'aboutir sans ambiguïté à la forme de N_i pour les différentes statistiques cherchées. L'exemple ci-dessous illustre la situation dans le calcul de l'erreur relative $\frac{\text{valeur approchée} - \text{valeur réelle}}{\text{valeur réelle}}$ que l'on commet lors d'une telle approximation.

Exemple

◇ Cas N^{N+1}

$$\frac{(N+1)^{N+1} - N^{N+1}}{(N+1)^{N+1}} = 1 - \left(\frac{N}{N+1}\right)^{N+1} = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{N}\right)^N} \frac{1}{1 + \frac{1}{N}} \quad (1.7)$$

Or $\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{N}\right)^N \rightarrow e$. Il vient $\frac{(N+1)^{N+1} - N^{N+1}}{(N+1)^{N+1}} \approx 1 - \frac{1}{e} \frac{N}{N+1} \approx 1 - \frac{1}{e} = 0,632$.

◇ Cas $(N+1)^N$

$$\frac{(N+1)^{N+1} - (N+1)^N}{(N+1)^{N+1}} = 1 - \frac{1}{N+1} \approx 1 \quad (1.8)$$

L'erreur pour ces deux cas est respectivement de 63,2 % et de 100 %, ce qui est inacceptable. En revanche, au niveau logarithmique, les erreurs commises sont négligeables :

◇ Cas $\ln N^{N+1}$

$$\frac{\ln(N+1)^{N+1} - \ln N^{N+1}}{\ln(N+1)^{N+1}} = 1 - \frac{\cancel{(N+1)} \ln N}{\cancel{(N+1)} \ln(N+1)} \approx 1 - 1 = 0 \quad (1.9)$$

◇ Cas $\ln(N+1)^N$

$$\frac{\ln(N+1)^{N+1} - \ln(N+1)^N}{\ln(N+1)^{N+1}} = 1 - \frac{N \cancel{\ln(N+1)}}{(N+1) \cancel{\ln(N+1)}} \approx 1 - 1 = 0 \quad (1.10)$$

Approximation de Stirling

Elle permet d'approcher la fonction « factoriel $N!$ », lorsque $N \gg 1$, par une formule simple :

$$N! \approx \sqrt{2\pi N} N^N e^{-N} \quad (1.11)$$

En pratique, la précision de cette approximation reste satisfaisante même pour de petites valeurs de N , ainsi qu'en atteste le tableau ci-dessous.

N	$N!$	$\sqrt{2\pi N} N^N e^{-N}$	Erreur (%)
1	1	0,92	8
2	2	1,92	4
3	6	5,84	2,7
4	24	23,51	2,0
5	120	118,02	1,7
...
9	362 880	359 536,9	0,9
10	3 628 800	3 598 696	0,8

Appliquée à $\ln N!$, l'Éq. (1.11) acquiert une forme très simple, et utile pour des grands N :

$$\ln N! \approx N \ln N - N \quad (1.12)$$

Exemple Pour $N = 1\,000$, l'erreur de l'Éq. (1.12) est de seulement 0,07 %. Une comparaison est aussi faite avec la plus fastidieuse approximation $\ln N! \approx \ln X$ ($X = \sqrt{2\pi N} N^N e^{-N}$).

N	$\ln N!$	$\ln X$	$N \ln N - N$	Erreurs (%)	
...
9	12,802	12,793	10,775	0,07	15,83
10	15,104	15,096	13,026	0,05	13,76
...
100	$\sum_{i=1}^{100} \ln i = 363,74$	363,74	360,52	0,00	0,89
...
1 000	$\sum_{i=1}^{1\,000} \ln i = 5\,912,1$	5 912,1	5 907,8	0,00	0,07

Principaux concepts

En théorie, la connaissance d'un micro-état, dans un gaz de particules, permet d'accéder à la connaissance la plus complète du gaz. Sur le plan pratique, cette connaissance est impossible au vu du nombre gigantesque de particules. Il en va tout autrement pour un macro-état, qui est une connaissance macroscopique et donc accessible et exploitable.

Exemple

On lance simultanément N pièces de monnaie. L'expérience est effectuée un grand nombre de fois. À chaque lancer, un seul micro-état pile (p) ou face (f) correspond. L'Éq. (1.13) en est un exemple :

$$\underbrace{1 = p, 2 = f, 3 = f, 4 = p, 5 = f, 6 = p, 7 = p, \dots, N = f}_{N \text{ termes}} \quad (1.13)$$



Chacun de ses termes indique le côté de la pièce i ($i = 1, 2, \dots, N$) apparu lors du lancer. Le macro-état quant à lui est tout simplement défini par (l'état) N_p ou N_f ($N_f = N - N_p$), où N_p (N_f) indique le nombre de fois où un côté pile (face) est apparu lors du lancer. À la suite d'un grand nombre d'expériences, le nombre de micro-états deviendra gigantesque et donc inexploitable puisqu'il est vraisemblable que, lors de chaque expérience, une configuration différente sera produite. En revanche, le nombre de macro-états aura tendance à converger vers une limite bien déterminée : $N_p \approx N_f \approx \frac{N}{2}$.

Définition 1.7 Bosons. Particules qui obéissent à la statistique de Bose-Einstein. Ce sont des particules de spin entier : $s = 0, 1, 2, \dots$. Le photon est leur représentant le plus emblématique ($s = 1$). Le boson de Higgs en est un autre ($s = 0$). Le graviton, particule hypothétique censée véhiculer l'interaction gravitationnelle, est également un boson ($s = 2$). Pour les bosons, et par extension pour la statistique de Bose-Einstein, le nombre de particules dans un système occupant le même état n'est soumis à aucune restriction.

Définition 1.8 Fermions. Particules qui obéissent à la statistique de Fermi-Dirac. Ce sont des particules de spin demi-entier : $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$. L'électron est leur représentant le plus emblématique. D'autres représentants célèbres sont le neutrino, les quarks, ou encore le proton et le neutron, tous ayant $s = \frac{1}{2}$. Il en va de même pour le noyau ^{13}C .

Définition 1.9 Principe d'exclusion de Pauli. Énoncé par Wolfgang Pauli en 1925, il stipule que les électrons appartenant à un même système ne peuvent pas occuper simultanément le même état quantique. Le principe d'exclusion s'est par la suite généralisé à toutes les particules de spin demi-entier, nommées depuis fermions.

Fiche 7

Statistiques : définitions et analyse

Soit un gaz de N particules identiques enfermées dans une enceinte de volume V . On cherche à calculer le nombre total d'états dans le gaz lorsque les états de chaque particule sont supposés connus. Selon la nature du système étudié, on distingue trois statistiques.

Définition 1.10 Statistique de Maxwell-Boltzmann (MB). Statistique classique traitant les particules comme des entités discernables (par exemple, des boules de billard identiques mais numérotées, ①, ②, ③, ④..., et donc parfaitement identifiables).

Définition 1.11 Statistique de Bose-Einstein (BE). Statistique quantique traitant les particules comme des entités indiscernables (ensemble de boules identiques, de même couleur, non-numérotées, et donc pas identifiables par leur aspect). Dans cette statistique, le nombre de particules occupant le même état n'est soumis à aucune restriction.

Définition 1.12 Statistique de Fermi-Dirac (FD). Également quantique, cette statistique se distingue de la précédente par le fait que le nombre de particules occupant le même état est restreint par le principe d'exclusion de Pauli. Ainsi, il ne peut y avoir qu'une seule ou aucune particule pouvant occuper un état donné.

Chacune des trois statistiques ci-dessus obéit à sa propre fonction de distribution :

$$f_{MB} = \frac{1}{A_{MB}e^{\beta E}} ; f_{BE} = \frac{1}{A_{BE}e^{\beta E} - 1} ; f_{FD} = \frac{1}{A_{FD}e^{\beta E} + 1} \quad (1.14)$$

A_{MB} est une constante de normalisation, souvent notée Z et nommée **fonction de partition**. Selon que l'étude est classique ou préquantique (voir l'astuce de Planck, Chap. 2), la fonction Z s'exprime d'une façon respectivement continue ou discrète :

$$Z = \int_{\tau} e^{-\beta E} d\tau ; Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (1.15)$$

L'intégrale de l'Éq. (1.15) s'effectue sur l'espace des phases (voir Chap. 2) ; $\beta = \frac{1}{k_B T}$; $A_{BE} \neq 1$ pour un gaz de particules matérielles ; $A_{BE} = 1$ pour un gaz de photons.

N particules identiques à deux états chacune

Considérons le cas très simplifié d'un gaz composé de N particules dont chacune ne possède que deux états. Combien y a-t-il de façons $W(N, 2)$ distinctes de caser les particules dans les états disponibles ? Si, pour la statistique de Fermi-Dirac, il est impossible de loger plus de deux particules dans les deux cases, pour les autres deux statistiques les réponses sont :

$$W_{MB}(N, 2) = 2^N \quad \text{et} \quad W_{BE}(N, 2) = N + 1 \quad (1.16)$$

L'exemple qui suit permet de recenser les réponses sous forme graphique pour chacune des trois statistiques dans un cas simplifié à l'extrême. S'en suit la méthodologie à suivre pour démontrer l'Éq. (1.16) ainsi que sa généralisation ultime.

Exemple Soit un gaz de deux particules ($N = 2$) dont chacune ne possède que deux états ($G = 2$). Soit ① et ② les labels des particules. Soit A et B les labels des états. Pour la statistique MB, il n'y a pas de restriction sur le nombre de particules pouvant occuper le même état. Cette propriété permet aussitôt d'énumérer le nombre total des états du gaz : $W_{MB}(2, 2) = 4$ (A). En B, le nombre d'états se voit réduit à $W_{BE}(2, 2) = 3$. Enfin, en C, il ne reste plus qu'un seul état possible pour les particules du gaz : $W_{FD}(2, 2) = 1$.

(A)

A	B
①	②
②	①
① ②	
	① ②

(B)

A	B
●	●
● ●	
	● ●

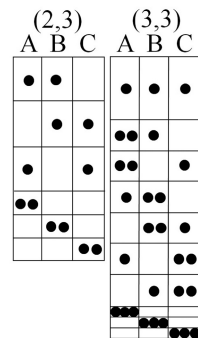
(C)

A	B
●	●

Démonstration. Une simple observation montre $W_{BE}(N, 1) = 1 = \frac{N!}{N!0!}$. Puis, d'après la Fig. (B) ci-dessus, $W_{BE}(2, 2) = 3$. Un simple essai basé sur la même idée donne $W_{BE}(3, 2) = 4$, puis : $W_{BE}(N, 2) = N + 1 = \frac{(N+1)!}{N!1!}$. Le calcul de $W_{BE}(N, 3) = \frac{(N+1)(N+2)}{2} = \frac{(N+2)!}{N!2!}$, moins évident, est illustré ci-contre. $W_{BE}(N, G)$ se généralise par analogie à un nombre d'états G :

$$W_{BE}(N, G) = \frac{(N + G - 1)!}{N!(G - 1)!} \quad (1.17)$$

□



Entraînement

QCM

- 1.** Soit un solide composé de N atomes identiques dont n sont aléatoirement placés sur des sites interstitiels. Soit N' le nombre total de sites interstitiels, eux-mêmes disposés aléatoirement au sein du solide. Calculer le nombre de micro-états.

- A. $\frac{(N' + n)!}{n!N!}$ C. $\frac{N!}{n!(N' + n)!}$
 B. $\frac{N!}{n!(N' + n)!} \frac{N!}{n!(N + n)!}$ D. $\frac{N!}{n!(N' - n)!} \frac{N!}{n!(N - n)!}$

- 2.** Lors d'une marche aléatoire unidimensionnelle, un ivrogne effectue des pas vers la gauche ou la droite avec des probabilités égales. Quelle est la probabilité qu'à l'issue d'une marche de N pas l'ivrogne retrouve sa position initiale ?

- A. $\frac{N!}{(\frac{N}{2})!(\frac{N}{2})!}$ B. $\frac{N!}{(\frac{N}{2})!}$ C. $\frac{N!}{(\frac{N}{2})! (\frac{N}{2})!} \frac{1}{2^N}$ D. $N!$

- 3.** Soit un immeuble de trois étages, de hauteur h chacun, et soit trois personnes différentes dans cet immeuble ayant chacune le même poids p . De combien de manières peut-on obtenir une énergie potentielle égale à $8ph$?

- A. 6 B. 3 C. 1 D. 7

- 4.** Pour le système de la question précédente, quelle est la valeur d'énergie potentielle qui apparaîtra le plus souvent ?

- A. $3ph$ B. $9ph$ C. $6ph$ D. $4ph$

- 5.** Soit un marche-pied ayant trois marches disposées respectivement à une hauteur de 20, 40 et 60 cm du sol, et soit trois plaques identiques de poids p chacune. De combien de façons peut-on obtenir une énergie potentielle égale à $120p$?

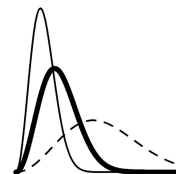
- A. 1 B. 2 C. 7 D. 5

- 6.** Cinq particules discernables sont distribuées dans trois niveaux d'énergie non-dégénérés $E_1 = 0$, $E_2 = E$, $E_3 = 2E$. Soit N_1 , N_2 et N_3 les nombre de particules occupant respectivement ces niveaux. Chercher la combinaison la plus probable de N_1 , N_2 , N_3 qui assure une énergie totale égale à $3E$.

- A. $N_1 = 2$ B. $N_3 = 1$ C. $N_1 = 3$ D. $N_2 = 1$

- 7.** Les courbes en traits fin, épais et tiré ci-dessous montrent à trois températures, respectivement T_1 , T_2 et T_3 , la fraction des molécules d'un gaz en fonction de leurs vitesses.

- A. $T_1 > T_2 > T_3$.
 B. $T_3 > T_2 > T_1$.
 C. $T_1 > T_3 > T_2$.
 D. Données insuffisantes.



8. L'expression de la statistique MB dans un gaz de molécules est la suivante (a est une constante appropriée, n désigne la densité de molécules du gaz) :

- A. $\exp\left(-a - n \frac{E}{k_B T}\right)$;
- B. $\exp\left(-a - \frac{E}{k_B T}\right)$;
- C. $\exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$;
- D. $\exp\left(-1 - \frac{E}{k_B T}\right)$.

9. La statistique MB n'est pas applicable aux :

- A. particules discernables ;
- B. particules indiscernables ;
- C. molécules ;
- D. photons.

10. Supposons que la règle qui a été fixée lors d'un jeu avec deux dés est que les joueurs parient sur la parité paire ou impaire de la somme ou du produit des nombres sortis.

- A. On a surtout pas intérêt à parier sur une somme paire.
- B. On a surtout pas intérêt à parier sur un produit impair.
- C. On a intérêt à parier sur un produit pair.
- D. Peu importe, aussi bien les sommes que les produits sont équiprobables.