

CHAPITRE 4

Comment compter le nombre de microétats d'un système physique ?

Objectifs :

- calculer le nombre de microétats par dénombrements
- calculer le nombre de microétats en utilisant l'espace des phases pour un gaz

4.1 Deux grands types de situation

L'espace des phases nommé Γ est **l'espace de l'ensemble des nombres ordonnés qui représentent un microétat**.

Exemple

Dans notre exemple de la boîte de pile ou phase, nous pouvons représenter un microétat par une série de 1 et 0 (1 pour face et 0 pour pile). Chaque série de nombre représente un microétat. Nous pouvons par exemple créer un espace à 2^N dimensions où la valeur de chaque pièce est reportée sur un axe.

- Nous verrons que faire appel à la notion d'espace des phases n'est pas toujours nécessaire, ou utile, pour calculer le nombre de microétats accessibles à un système. C'est le cas par exemple du nombre de pièces cotés face dans l'exemple précédent puisque **le nombre de microétat est obtenu par un simple calcul de dénombrement**. Plus généralement, pour les système de particules sur réseau le nombre de microétats est obtenu par une calcul de dénombrement.
- Cependant, nous rencontrons des situations où nous devons utiliser la notion d'espace des phases pour déterminer le nombre de microétats accessibles au système. C'est par exemple le cas lorsque nous étudions un gaz. En effet, une particule d'un gaz peut occuper n'importe quelle

position dans l'espace réel ce qui nous empêche de dénombrer les microétats mais nous allons voir qu'il est possible de calculer le nombre de microétats dans l'espace des phases.

Pour calculer le nombre de microétats d'un système isolé, nous devons déjà noter que l'énergie d'un système, même isolé, n'est jamais connue avec une précision aussi grande que l'on veut. En effet, mesurer l'énergie avec une précision infinie nécessiterait une durée infinie de la mesure d'après les lois de la mécanique quantique. Ainsi, l'énergie d'un système, même isolé, **est uniquement connue à une quantité δE près**. Classiquement, nous pouvons également dire que les perturbations gravitationnelles liées à l'observateur par exemple induisent une incertitude δE sur l'énergie d'un système isolé.

4.2 Point de vue quantique

Considérons 1 particule de gaz dans une enceinte. La description physique de ce problème la plus rigoureuse se fait dans le cadre de la mécanique quantique. Dans ce cadre, l'espace des phases est discret et il est possible de compter le nombre de microétats. Cette approche n'est cependant pas utilisable pour N particules.

Cependant, pour un système de taille macroscopique, l'écart entre les niveaux d'énergie est négligeable devant l'énergie d'une particule et nous pouvons alors adopter un espace des phases continu et utiliser la physique classique pour dénombrer l'ensemble des microétats et faire les calculs pour un gaz de N particules.

4.3 Point de vue semi-classique

Si nous adoptons un point de vue classique pour décrire la matière, un microétat est défini à partir de la position et de l'impulsion de chaque particules du système. Un microétat du système est donc un point dans l'espace des phases repéré par les N triplés de la position d'une particule (q_{ix}, q_{iy}, q_{iz}) et l'impulsion d'une particule (p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}). Pour **un système de N particules l'espace des phases est donc un espace continu de $6N$ dimensions**.

Au cours du temps, ce point dans l'espace des phases décrit une trajectoire. Cette trajectoire se situe dans un volume compris entre les surfaces $E = \text{constante}$ et $E + \delta E = \text{constante}$ pour un système isolé. D'après **le principe ergotique, cette trajectoire va visiter tous les microétats accessibles au cours du temps**.

Cependant, compter le nombre de microétats nécessitent de prendre en compte la mécanique quantique. En effet, étant donné que les variables sont continues en mécanique classique, il existe à priori une infinité de microétat quelque soit le système avec cette approche. Nous devons donc tenir compte du fait que la position et l'impulsion d'une particule ne peuvent pas être connu en même temps avec une précision aussi grande que possible. Le principe d'incertitude d'Heisenberg implique que le plus petit volume possible occupé dans l'espace des phase par une particule a pour dimension h^3 (figure 4.1). Ainsi, **un microétat d'un système de N particules occupent un volume élémentaire h^{3N} dans l'espace des phases**.

Le nombre de microétat est alors donné par $\Omega = \frac{V_{\text{accessible}}}{h^{3N}}$ où $V_{\text{accessible}}$ représente le volume de l'espace des phases accessible au système.

Nous devons également rajouter un ingrédient. Dans notre description classique d'un système, nous ne pouvons pas prendre en compte le spin

☞ En mécanique quantique, les valeurs propres de l'opérateur représentant l'observable que nous mesurons permettent de repérer la position d'un microétat dans l'espace de phases. L'espace des phases est alors discret et la loi de probabilité de trouver le système dans un microétat donné est également discrète dans ce cas.

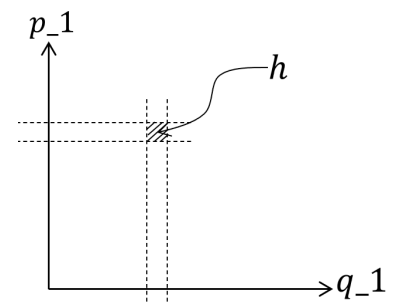


FIGURE 4.1: Plus petit volume occupé dans l'espace des phases d'une particule à 1D.

des particules qui est une quantité intrinsèquement quantique. Ainsi, il est possible de placer dans le même volume accessible classiquement par le système, $(2s + 1) \frac{V_{\text{accessible}}}{h^{3N}}$ microétats où le facteur $2s + 1$ est le nombre d'états de spin possibles. Par exemple, pour un ensemble de particules de spin $s = \frac{1}{2}$, il y a deux états de spins possibles et il faut donc multiplier par deux le nombre de microétats.

4.3.1 Prise en compte de l'indiscernabilité des particules et du caractère quantique des particules

considérons un système de N particules. Si les particules sont discernables, alors chaque volume élémentaire de l'espace des phases est occupé par un microétat différent. Par contre, si les particules sont indiscernables, il faut exclure tous les états équivalents.

Physiquement, des particules de même nature sont indiscernables. Les particules seront considérées discernables lorsqu'elles occupent des sites et qu'il est possible de les localiser spatialement.

Il existe deux types de particules dans la nature : les bosons et les fermions. Dans les cas où les particules occupent des niveaux différents (c'est le cas des fermions ou des bosons dans le cas d'un système dilué), toutes les permutations des particules entre elles conduisent au même microétat. Dans ce cas, **plusieurs volumes élémentaires de l'espace des phases représentent le même microétat et le nombre total de microétat est donné par $\Omega = \frac{V_{\text{accessible}}}{N!h^{3N}}$ pour des particules indiscernables.**

4.4 Exemple avec une particule dans une boîte à 1D

4.4.1 L'espace des phases est discret ...

Prenons l'exemple d'une particule unique de masse m se déplaçant dans une boîte à une dimension de longueur L . La dynamique de la particule est solution de l'équation de Schrodinger $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi = E\Psi$ soit $\Psi = C_1 \sin(kx) + C_2 \cos(kx)$ avec $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. La fonction d'onde doit respecter les conditions aux limites $\Psi(x = 0) = 0$ et $\Psi(x = L) = 0$. La première condition aux limites implique que $C_2 = 0$ tandis que la deuxième condition aux limites quantifie les valeurs possibles de k puisque $k = n\frac{\pi}{L}$ avec $n = 1, 2, 3, \dots$. Les niveaux d'énergie de la particule sont donc quantifiés et données par $E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$. La valeur de n est donnée par :

$$n = \frac{L}{\pi \hbar} (2mE)^{1/2}$$

et permet donc de compter le nombre de microétat d'énergie inférieure à E , c'est tout simplement la valeur de n pour l'énergie E correspondante. Ainsi :

$$N(E) = n = \frac{L}{\pi \hbar} (2mE)^{1/2}$$

La densité de microétats a donc pour expression $\rho = \frac{dN}{dE} = \frac{L}{2\pi \hbar} (2m)^{1/2} E^{-1/2}$ et le nombre de microétats accessibles pour une énergie comprise entre E et $E + \delta E$ a pour expression :

$$\Omega = \frac{L}{2\pi \hbar} (2m)^{1/2} E^{-1/2} \delta E$$

Si **la boîte est de taille macroscopique** alors le coefficient $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ est très petit ce qui signifie que **n est très grand pour une énergie de**

☞ L'expression de C_1 est obtenue par la condition de normalisation de la fonction d'onde $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1$. Nous obtenons $C_1 = \sqrt{\frac{2}{L}}$.

particule typique à T ambiant. La valeur de n est donnée par :

$$n = \frac{L}{\pi \hbar} (2mE)^{1/2}$$

donc l'écart relatif entre deux valeurs consécutives de n a pour expression $\frac{n+1-n}{n} = \frac{\pi \hbar}{L} (2mE)^{-1/2}$ et est donc très petit devant 1.

Ainsi, **pour un système de taille macroscopique, l'écart est les niveaux d'énergie est négligeable devant l'énergie d'une particule et nous pouvons alors adopter un espace des phases continu et utiliser la physique classique pour calculer le volume occuper dans l'espace des phases** comme nous allons le montrer dans la sous-section suivante.

... mais il peut être considéré continu

Reprenons l'exemple d'une particule unique de masse m se déplaçant dans une boîte à une dimension de longueur L . Nous traitons maintenant le problème en utilisant la physique classique et l'espace des phases n'est plus constitué des nombres quantiques mais de la position x et de l'impulsion p_x de la particule.

Le nombre total de microétat d'énergie égale ou inférieure à E est donnée par :

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{1}{h^3} \int_0^L dx \int_{-\sqrt{2mE}}^{\sqrt{2mE}} dp_x \\ &= \frac{2L}{h^3} \sqrt{2mE} \\ &= \frac{L}{\pi \hbar} (2mE)^{1/2} \end{aligned}$$

La densité de microétats a donc pour expression $\rho = \frac{dN}{dE} = \frac{L\sqrt{2m}}{h^3} E^{-1/2}$ et le nombre de microétats accessibles pour une énergie comprise entre E et $E + \delta E$ a pour expression :

$$\Omega = \frac{dN}{dE} = \frac{L\sqrt{2m}}{h^3} E^{-1/2} \delta E$$

Nous retrouvons donc bien l'expression de sous-section précédente en utilisant le fait que $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

4.5 Exemple avec une particule dans une boîte à 3D

Prenons l'exemple d'une particule unique de masse m se déplaçant dans une boîte de dimensions L_x, L_y, L_z . La dynamique de la particule est solution de l'équation de Schrodinger $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = E \Psi$ avec $\Psi = \Psi_x(x) \Psi_y(y) \Psi_z(z)$. La fonction d'onde doit respecter les conditions aux limites $\Psi_x(x=0) = 0, \Psi_x(x=L_x) = 0, \Psi_y(y=0) = 0, \Psi_y(y=L_y) = 0, \Psi_z(z=0) = 0, \Psi_z(z=L_z) = 0$. On trouve que $\Psi = C \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$ où les valeurs permises de k sont données par $k_x = n_x \frac{\pi}{L_x}, k_y = n_y \frac{\pi}{L_y}, k_z = n_z \frac{\pi}{L_z}$ avec $n_x = n_y = n_z = 1, 2, 3, \dots$. Les niveaux d'énergie de la particule sont données par $\frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E$. Les niveaux d'énergie de la particule sont donc quantifiées et données par $E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\left(\frac{n_x}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z} \right)^2 \right)$ d'où $1 = \left(\left(\frac{n_x}{\frac{L_x \sqrt{2mE}}{\hbar \pi}} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{\frac{L_y \sqrt{2mE}}{\hbar \pi}} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{\frac{L_z \sqrt{2mE}}{\hbar \pi}} \right)^2 \right)$. Les microétats sont donc contenues dans une ellipsoïde de volume $\frac{4}{3} \pi \frac{L_x L_y L_z (2mE)^{3/2}}{\hbar^3 \pi^3}$. Les valeurs de n_x, n_y

☞ Nous pouvons séparer les variables car la particule se déplace dans une direction indépendamment des autres directions.

ou n_z sont positives, les microétats sont donc contenues dans un huitième du volume précédent. Dans l'espace n_x, n_y, n_z , le plus petit volume occupé par une particule a pour dimension 1.

Le nombre de microétats d'énergie égale ou inférieure à E a donc pour expression :

$$\begin{aligned}\Phi &= \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi \frac{L_x L_y L_z (2mE)^{3/2}}{\hbar^3 \pi^3} \\ &= \frac{4}{3} \pi \frac{L_x L_y L_z (2mE)^{3/2}}{\hbar^3}\end{aligned}$$

Ce qui est le résultat obtenu dans l'espace des phases classiques.