Université Joseph Fourier. Master 1 Physique
TD de mécanique quantique, Frédéric Faure.

TD n^{o}2 Solution
Formule d'approximation semi-classique de Weyl

1 Formule d'approximation semi-classique de Weyl

1. Dans le cas d'une particule libre se déplaçant dans une boîte de longueur L, alors $E = H(x, p) = p^2/(2m)$ si $0 < x < L$. La trajectoire d'énergie est un rectangle de cotés $x = 0$, $x = L$, $p = p_{\max} = \sqrt{2mE}$, et $p = -p_{\max}$.
2. La surface est surface $S(E) = L2p_{\max} = 2L\sqrt{2mE}$. La formule de Weyl donne :
$$N(E) \simeq \frac{S(E)}{2\pi\hbar} = \frac{L\sqrt{2mE}}{\pi\hbar}$$
à comparer du résultat exact déduit de $E_n = \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m}$:
$$N(E) = \left[\frac{L\sqrt{2mE}}{\pi\hbar}\right]$$
c'est donc identique. La densité d'état est
$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{L\sqrt{2m}}{2\pi\hbar\sqrt{E}}$$
elle décroit avec E.
3. Dans le cas d'une particule libre se déplaçant dans une boîte de volume V, l'espace de phase est formé par les points (états classiques) de coordonnées $\vec{x} = (x, y, z) \in V$ et $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z) \in \mathbb{R}^3$. L'énergie d'un état est $E = |\vec{p}|^2/(2m)$. Soit $S(E)$ le volume (dans l'espace de phase) formé par les états d'énergie inférieure à E. Cela impose à $\vec{x}$ d'appartenir au volume V et à $\vec{p}$ d'appartenir à la sphère de rayon $|p_{max}| = \sqrt{2mE}$. On a donc le produit des volumes
$$S(E) = V\left(\frac{4}{3}\pi|p_{max}|^3\right) = V\frac{4}{3}\pi(2mE)^{3/2}$$
La formule de Weyl donne alors :
$$N(E) \simeq \frac{S(E)}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V\frac{4}{3}\pi(2mE)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (1)$$
La densité d'état est donc :
$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V2\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\sqrt{E}$$
Elle augmente avec E.
Remarque : La formule (1) ne dépend pas de la forme de la boite mais seulement du volume V. Il faut savoir que la formule exacte des niveaux d'énergie E_n n'est connue sauf dans des cas très particuliers, comme le parallépipède ou la sphère, ou l'ellipsoide. Cela est lié au problème du "chaos quantique", car dans ces boites la trajectoire d'une particule libre est simple et prédictible, alors que dans une forme plus générale, la trajectoire est "chaotique".

4. Application : Si la particule a deux états de spins, chaque cellule de Planck peut contenir deux états. On multiplie les résultats précédent par 2. On trouve

$$E_F = \frac{1}{2m}\left(\frac{n3\,(2\pi\hbar)^3}{V8\pi}\right)^{2/3} \simeq 3 \;\; \text{eV}$$

et $E_F = \frac{1}{2}mv_F^2$ donc $v_F \simeq 10^6 \text{m.s}^{-1}$.

2 Spectre du corps noir : gaz de photons à l'équilibre thermique

1. Un mode occupe le volume élémentaire $\Delta^3\vec{x}\Delta^3\vec{k} = (2\pi)^3$ dans l'espace de phase $\left(\vec{x},\vec{k}\right)$. Considérons un intervalle de fréquence $d\nu$. D'après $\omega = 2\pi\nu = ck$, cela correspond à $dk = \frac{2\pi}{c}d\nu$ et à un volume dans l'espace $\vec{k}$ de $\mathcal{V}_k = 4\pi k^2 dk$ (volume de la sphère de rayon k et épaisseur dk). Donc dans un volume V et un intervalle de fréquence $d\nu$ contiennent $dn = 2\,(V\,\mathcal{V}_k)\,/\,(2\pi)^3$ modes. Le facteur 2 tient compte des deux états de polarisation possibles d'un mode (droite/gauche). Donc

$$dn = \frac{2V\left(4\pi k^2 \frac{(2\pi)}{c}d\nu\right)}{(2\pi)^3} = \frac{8\pi V\nu^2}{c^3}d\nu$$

2. On a $\langle N_{mode}\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} P_N N$, avec la probabilité $P_N = \frac{1}{Z}\exp\left(-E_N/kT\right)$. Comme $1 = \sum_N P_N$, on déduit que la constante Z est donnée par

$$\begin{aligned} Z &= \sum_N \exp\left(-E_N/kT\right) = \sum_N \exp\left(-\alpha\left(N+1/2\right)\right) \\ &= e^{-\alpha/2}\underbrace{\sum_{N\geq 0} e^{-\alpha N}}_{S} \end{aligned}$$

avec $\alpha = (\hbar\omega)/kT$ et la série géométrique $S = \sum_{N\geq 0} e^{-\alpha N} = \frac{1}{1-e^{-\alpha}}$. Alors

$$\begin{aligned} \langle N_{mode}\rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} P_N N \\ &= \frac{1}{Z}\sum_N N\exp\left(-\alpha\left(N+1/2\right)\right) \\ &= \frac{1}{e^{-\alpha/2}S}e^{-\alpha/2}\left(-\frac{dS}{d\alpha}\right) = \frac{1}{S}\left(-\frac{dS}{d\alpha}\right) = \frac{1}{e^\alpha - 1} \\ &= \frac{1}{e^{h\nu/(kT)} - 1} \end{aligned}$$

appelée **distribution de Bose-Einstein.** Ensuite

$$\frac{dN}{d\nu} = \frac{dN}{dn}\frac{dn}{d\nu} =< N_{mode} > \frac{dn}{d\nu}$$

3. $u(\nu) = \frac{1}{V}\left(h\nu\right)\frac{dN}{d\nu} = \ldots = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3\left(e^{\frac{h\nu}{kT}}-1\right)}$

3 Equidistribution de l'énergie des ondes sismiques

1. Un mode occupe $\Delta^3\vec{x}\Delta^3\vec{k} = (2\pi)^3$. Considérons un intervalle de fréquence $d\nu$. Pour les ondes S, cela correspond à $dk = \frac{2\pi}{v_S}d\nu$, et un volume dans l'espace $\vec{k}$ de $\mathcal{V}_k = 4\pi k^2 dk$ (volume de la sphère de rayon k et épaisseur dk). Donc dans un volume V et un intervalle de fréquence

$d\nu = \frac{v_S}{2\pi} dk$ contiennent $dn_S = 2\left(V\,\mathcal{V}_k\right)/\left(2\pi\right)^3$ modes. Le facteur 2 tient compte des deux états de polarisation possibles d'un mode. Donc

$$dn_S = \frac{2\left(4\pi\right) V \nu^2 d\nu}{v_s^3}$$

de même pour les ondes P :

$$dn_P = \frac{\left(4\pi\right) V \nu^2 d\nu}{v_P^3}$$

2. D'après l'hypothèse d'équidistribution entre les modes, le rapport d'énergie est égal au rapport du nombre de modes :

$$\frac{E_P}{E_S} = \frac{dn_P}{dn_S} = \frac{1}{2}\left(\frac{v_S}{v_P}\right)^3 = \frac{1}{2\left(1,73\right)^3} \simeq \frac{1}{10}$$