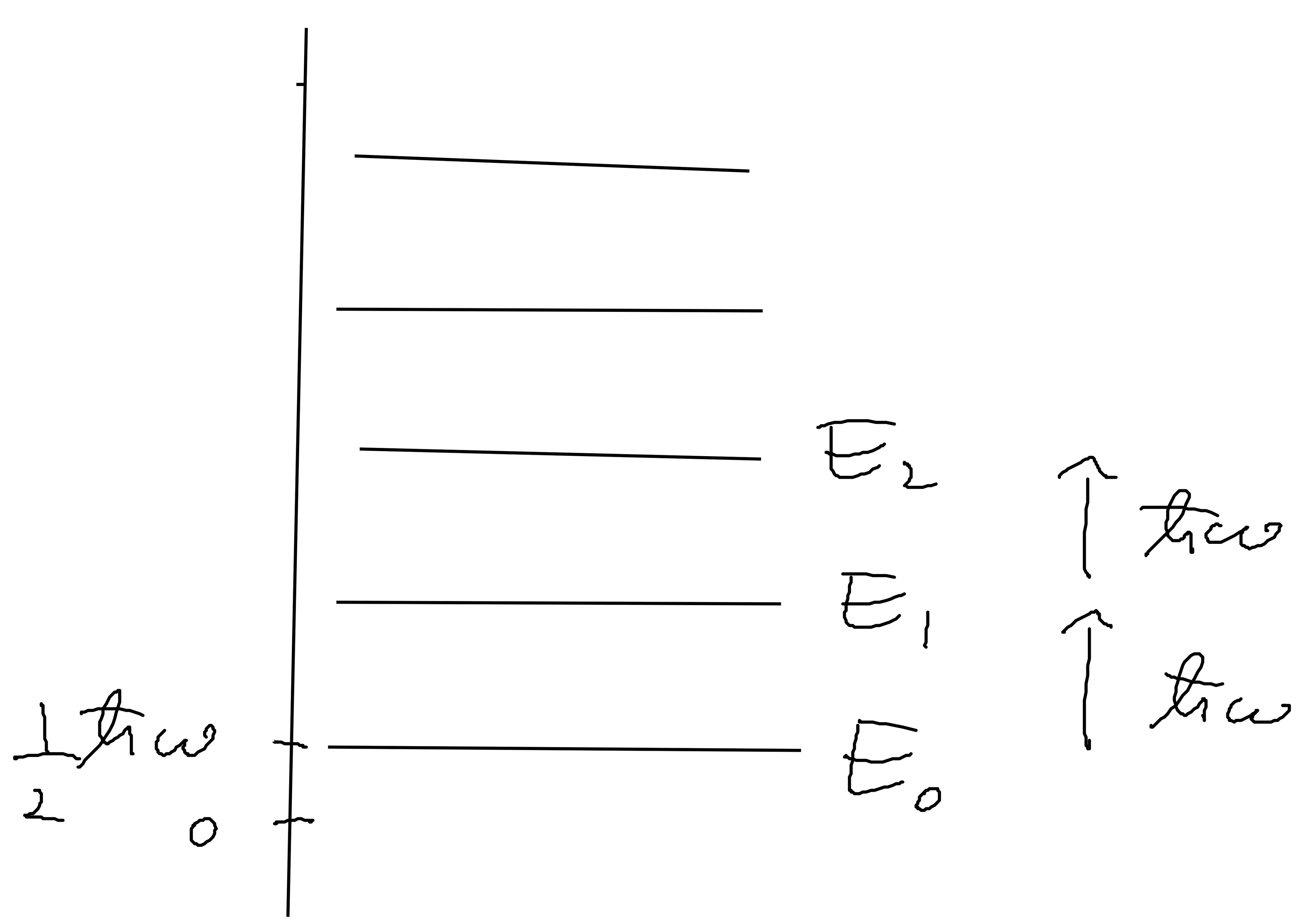
Capacité thermique : modèle quantique d'un oscillateur (Einstein 1907)

① Pour un oscillateur harmonique quantique à <u>1 dimension</u>, $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} k \hat{q}^2$

les niveaux d'énergie sont

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \geq 0, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$



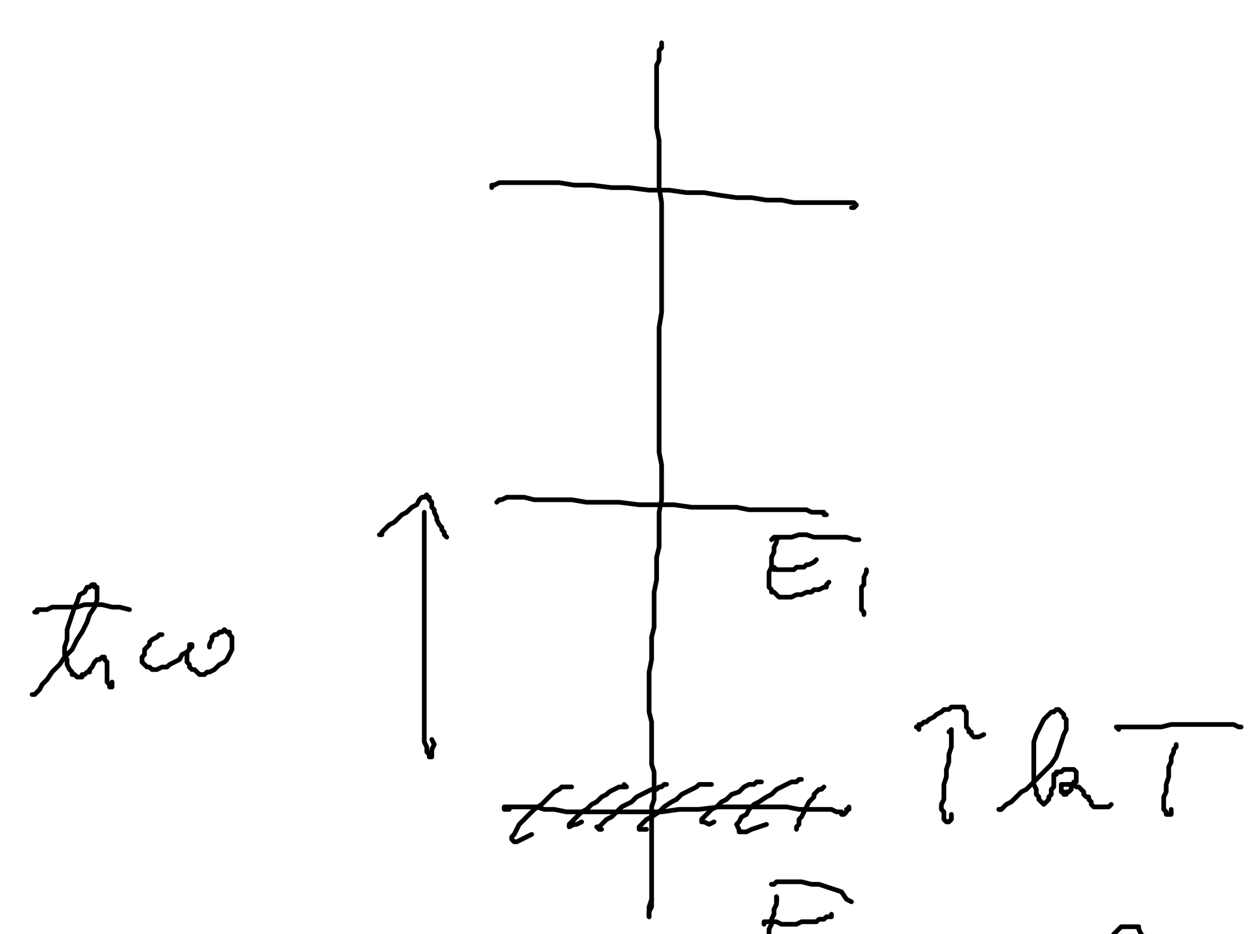
(2) à température T, les fluctuations d'énergie de l'atome sont de <u>l'ordre de kT</u>.

Or l'écart entre niveaux est $\hbar\omega$.

On pose $x := \dfrac{kT}{\hbar\omega} = \dfrac{T}{\Theta_E}$: sans dimension

avec $\Theta_E = \dfrac{\hbar\omega}{k}$

- si $x \ll 1 \iff T \ll \Theta_E \iff kT \ll \hbar\omega$

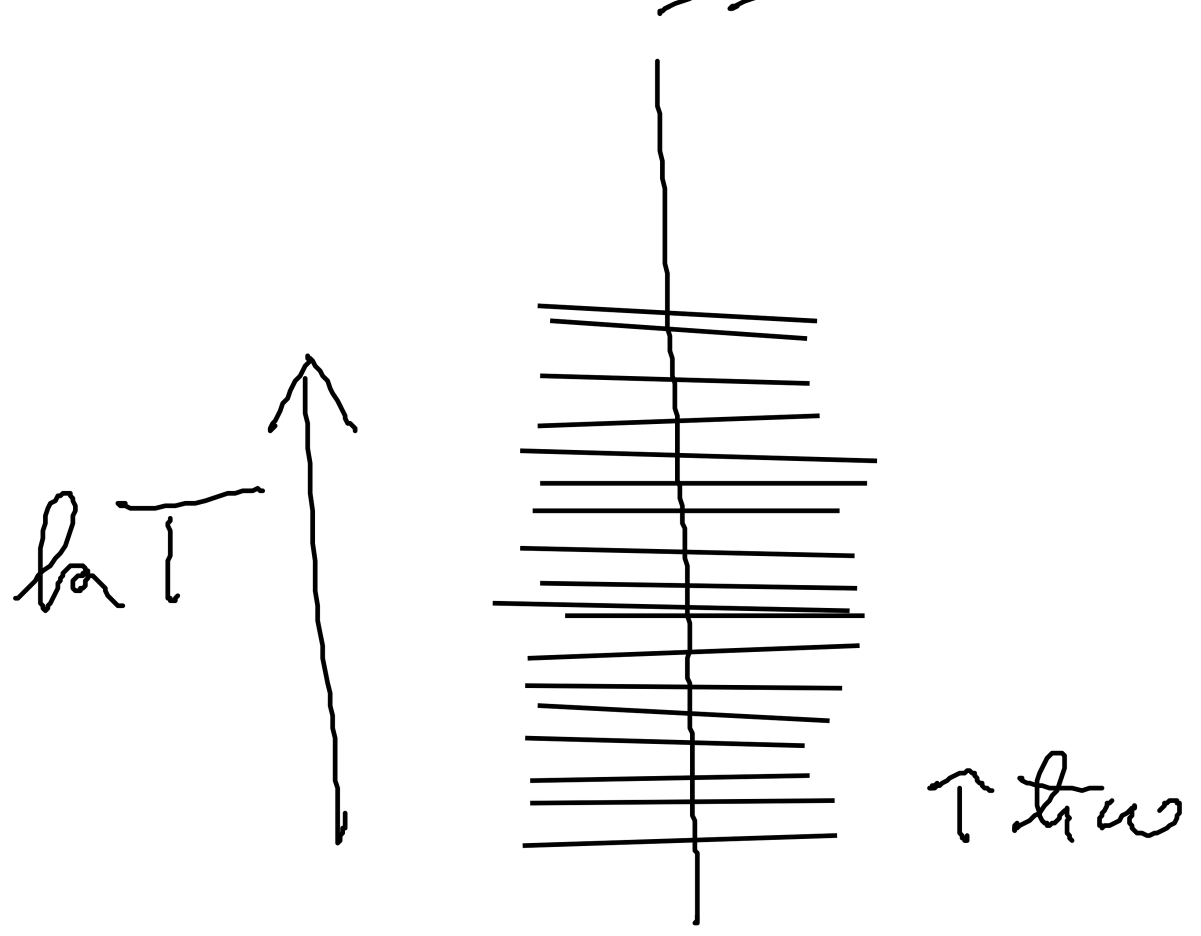


: l'oscillateur reste dans l'état fondamental E_0

donc $E \simeq E_0$,

$C(T) = \dfrac{dE}{dT} = 0$.

- si $x \gg 1 \iff kT \gg \hbar\omega$

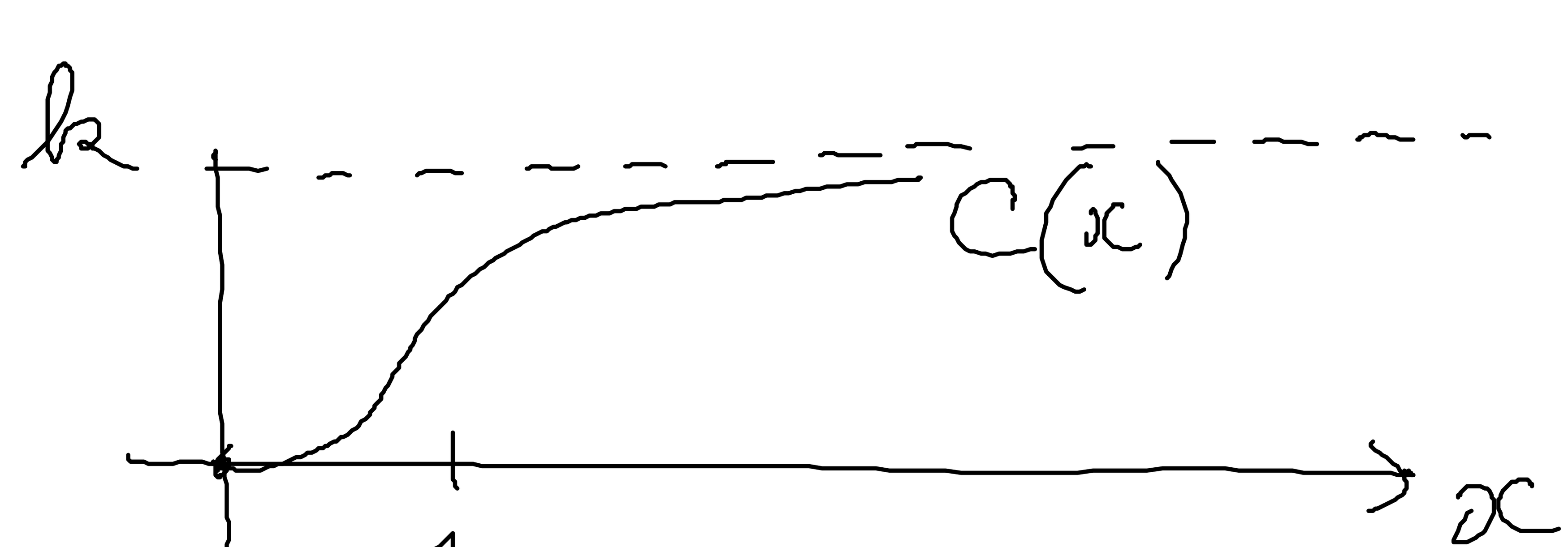


: d'après la correspondance semiclassique

on a $\langle E \rangle \simeq \langle E_{classique} \rangle = 2 \cdot \frac{1}{2} kT$

$C(T) = \dfrac{d\langle E \rangle}{dT} \simeq k$.

car il y a 2 termes quadratiques dans le modèle de l'O.H $H(q,p)$



(3) $p_n = \frac{1}{} e^{-E_n}$