
Notes de cours de Physique Statistique

Mohammad El-Moussawi
2022-2023

Contents

1	RAPPELS DE THERMODYNAMIQUE	3
1.1	Definitions	3
1.1.1	Système	3
1.1.2	État macroscopique	3
1.1.3	Thermomètre	3
1.1.4	L'équilibre	4
1.1.5	Le travail mécanique	4
1.1.6	Chaleur	4
1.1.7	Grandeur intensive et extensive	4
1.2	Principes de la thermodynamique	4
1.2.1	Principe numéro zéro	4
1.2.2	Premier principe	4
1.2.3	Deuxième principe	5
1.2.4	Troisième principe	7
1.3	Fonctions thermodynamiques et conditions d'équilibre	7
2	LE MONDE MICROSCOPIQUE	9
2.1	Micro-états quantique	9
2.1.1	L'atome d'hydrogène	9
2.1.2	L'oscillateur harmonique à une dimension	10
2.1.3	Une particule libre dans une boîte cubique	11
2.1.4	Les systèmes à N particules	12
2.2	Bosons et Fermions	12
2.2.1	Definitions	12
2.2.2	Micro-état et spin	13
2.3	Systèmes a N particules indépendantes	14
2.3.1	Particules discernables	14
2.3.2	Particules indiscernables	14
2.4	Micro-état et macro-états	15
2.5	L'espace de phase	15
2.5.1	Trajectoire d'oscillateur harmonique	16
2.5.2	A N particules	16
2.6	Micro-État classique	16
2.6.1	Configurations et micro-états classiques	16
2.6.2	Micro-états classiques et spin	17
2.7	Travail et Chaleur a l'échelle microscopique	17



3	POSTULATS DE LA PHYSIQUE STATISTIQUE	19
3.1	Énoncé des postulats	19
3.1.1	Postulat 1	19
3.1.2	Postulat 2	19
3.2	L'entropie statistique	20
3.3	Notions de théorie de l'information	20
3.3.1	L'information	20
3.3.2	Entropie et théorie de l'information	20
3.4	Irréversibilité	21
3.5	Valeurs moyennes et fluctuations	21

supahaka

Chapter 1

RAPPELS DE THERMODYNAMIQUE

Le thermodynamique est la branche de la physique dont le principal but est de décrire les transformations entre les deux formes d'énergie le travail et la chaleur. C'est une science qui s'applique aux corps macroscopiques.

1.1 Définitions

1.1.1 Système

On appelle système une partie de l'univers entourée par une surface fermée.

Un système est isolé (ou fermé) s'il n'a pas d'interaction avec le reste de l'univers.

Il est ouvert dans le cas contraire.

Un système est homogène si, en l'absence de champ extérieur, la concentration de ses constituants est la même en tout point.

Dans le cas contraire il est dit hétérogène.

1.1.2 État macroscopique

Nous appellerons état macroscopique ou macroétat la configuration qui est associée à la valeur des paramètres qui décrivent les propriétés thermodynamiques d'un système, ce sont par exemple :

- La température absolue T .
- La pression P .
- le nombre de particules N .

L'équation d'état des gaz parfaits :

$$PV = nRT$$

1.1.3 Thermomètre

Un thermomètre est un petit système permettant de mesurer la température d'un corps.

Pour effectuer une mesure correcte de T il faut que la capacité calorifique du thermomètre soit très petite comparée à celle du système sur lequel on effectue la mesure, sinon la température du corps serait modifiée après l'opération.



l'unité de température est le Kelvin (K).

La température Celsius, t_c est reliée a la température absolue, T , par la relation :

$$t_c = T - 273,15$$

1.1.4 L'équilibre

Un système est en équilibre si ses variables macroscopiques ne varient pas au cours du temps.

Un système, initialement hors d'équilibre, évolue de manière à atteindre l'équilibre.

La thermodynamique ne s'intéresse qu'aux systèmes en équilibre.

1.1.5 Le travail mécanique

Le travail mécanique est un transfert d'énergie à l'échelle macroscopique.

Si l'interaction de deux systèmes se traduit par un changement des paramètres macroscopiques autres que la température, on dit qu'il y a échange d'une quantité de travail W .

1.1.6 Chaleur

Un échange de chaleur est un transfert d'énergie à l'échelle microscopique.

Si l'interaction entre deux systèmes se traduit par un changement de température à l'exclusion de tout changement des autres variables macroscopiques, on dit qu'il y a échange d'une quantité de chaleur Q .

1.1.7 Grandeur intensive et extensive

Pour un système à un constituant, une variable intensive ne dépend pas de la masse de celui-ci, alors qu'elle lui est proportionnelle si cette variable est extensive.

1.2 Principes de la thermodynamique

1.2.1 Principe numéro zéro

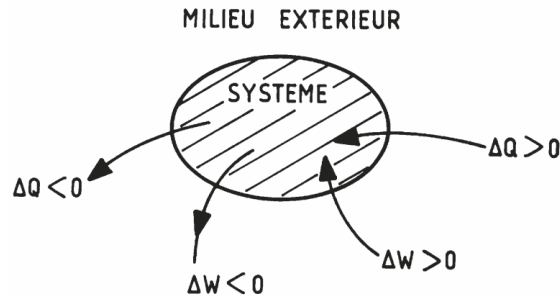
Si deux systèmes sont en équilibre thermodynamique avec un même troisième, ils sont en équilibre entre eux.

1.2.2 Premier principe

Conservation de l'énergie totale d'un système isolé.

Si le système considéré n'est plus isolé et interagit avec le milieu extérieur.

Dans ce cas, le système échange avec le milieu extérieur des quantités de travail W et de chaleur Q .



Le premier principe se traduit par :

$$\Delta E = W + Q$$

avec ΔE ne dépend que de l'état initial et final du système.

pour une transformation infinitésimale :

$$dE = \delta W + \delta Q$$

L'échange de travail W , ou de chaleur Q , dépend du chemin suivi par le système au cours de son évolution.

Transformations quasistatiques, réversibles et irréversibles

Considérons un système effectuons une transformation, Si son évolution est telle qu'il reste toujours en équilibre thermodynamique la transformation est dite quasistatique.

Si, de plus, par une simple inversion de la transformation on peut retrouver l'état initial, elle est réversible.

Une transformation qui n'est pas réversible est dite irréversible.

1.2.3 Deuxième principe

Énoncé de Clausius

Il n'existe pas de processus dont le seul résultat soit de transférer de la chaleur d'un corps froid à un corps chaud.

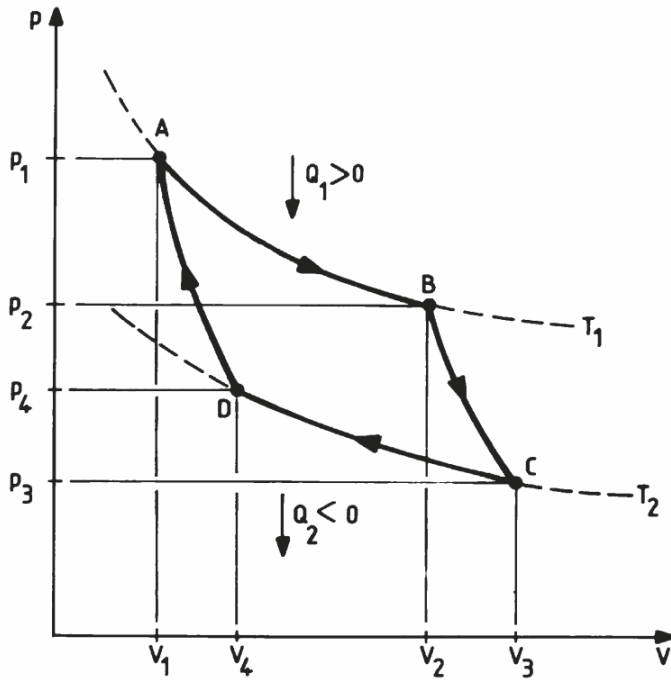
Énoncé de Kelvin-Planck

Il n'existe pas de transformation dont le seul résultat soit de produire du travail à partir d'une seule source de chaleur à température constante.

Cela signifie qu'il faut au moins deux sources à des températures différentes pour réaliser une conversion d'énergie calorifique en énergie mécanique.

Les cycles de Carnot

Les cycles de Carnot sont une suite cyclique de transformations quasistatiques, utilisant deux sources de chaleur aux températures T_1 et T_2 , ($T_1 > T_2$).



- AB- isotherme réversible.
- BC- adiabatique réversible.
- CD- isotherme quasistatique.
- DA- adiabatique réversible.

Poserons $W'_1 = -W_1$ et $Q'_2 = -Q_2$.
 D'après le premier principe :

$$\Delta E = W + Q = W_1 + W_2 + Q_1 + Q_2 = 0$$

$$W'_1 - W_2 = Q_1 - Q'_2$$

Le rendement, η , du cycle est défini comme le rapport entre la quantité de travail fournie par le système et la quantité de chaleur prise à la source chaude.

Il vaut :

$$\eta = \frac{W'_1 - W_2}{Q_1} = \frac{Q_1 - Q'_2}{Q_1}$$

Le cycle de Carnot permet de définir l'échelle de température absolue par la relation:

$$\frac{Q_1}{Q_2} = \frac{T_1}{T_2}$$

Cette équation peut être généralisée à tout cycle quasistatique sous la forme:

$$\oint \frac{\delta Q_{qs}}{T} = 0$$

Cette équation constitue le théorème de Clausius.

L'entropie

Le théorème de Clausius nous permet d'introduire l'entropie par la relation :

$$dS = \frac{\delta Q_{qs}}{T}$$

L'entropie est une fonction d'état, et une variable extensive.

L'entropie permet une autre formulation importante du second principe :

L'entropie d'un système isolé ne peut qu'augmenter



1.2.4 Troisième principe

L'entropie d'un solide ou d'un liquide pur en équilibre thermodynamique est nulle au zéro absolu.

1.3 Fonctions thermodynamiques et conditions d'équilibre

Considérons un système homogène de r constituants ayant N_1, N_2, \dots, N_r particules de type 1, 2, ..., r . L'énergie interne E est une fonction des paramètres extensifs $S, V, N_1, N_2, \dots, N_r$:

$$E = E(S, V, N_1, \dots, N_r)$$

À chaque paramètre extensif correspond un paramètre intensif qui est, sauf pour la pression, égal à la dérivée partielle de E par rapport à ce paramètre, les autres paramètres restant constants. Dans le cas de la pression, il y a un signe moins :

- Le paramètre intensif associé à l'entropie est la température :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V, N_1, \dots, N_r} = T$$

- Le paramètre intensif associé au volume est la pression :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{S, N_1, \dots, N_r} = -P$$

- Le paramètre intensif associé au nombre de particules N_j est le potentiel chimique μ_j :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial N_j}\right)_{S, V, N_1, \dots, N_{j-1}, N_{j+1}, \dots, N_r} = \mu_j$$

L'équation différentielle totale de l'énergie devient :

$$dE = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V, N_1, \dots, N_r} dS + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{S, N_1, \dots, N_r} dV + \sum_{j=1}^r \left(\frac{\partial E}{\partial N_j}\right)_{S, V, N_1, \dots, N_{j-1}, N_{j+1}, \dots, N_r} dN_j$$

$$dE = TdS - PdV + \sum_{j=1}^r \mu_j dN_j$$

Cette expression ne s'applique qu'aux transformations quasistatiques. Elle est aussi égale à :

$$dE = TdS - PdV = \delta Q + \delta W$$

L'expression suivante s'appelle la forme d'Euler de l'énergie interne.

$$E = TS - PV + \mu N$$

Beaucoup d'expériences ont ainsi lieu à température et/ou à pression constante. Lorsque c'est le cas, il est plus commode d'utiliser d'autres fonctions d'état pour étudier la thermodynamique du système.



- Si l'on travaille a pression constante, on introduite l'enthalpie H :

$$H = E + PV = TS + \sum_{j=1}^r \mu_j N_j$$

$$dH = TdS + VdP + \sum_{j=1}^r \mu_j dN_j$$

- Si l'on travaille a température constant, on introduit l'énergie libre F :

$$F = E - TS = -PV + \sum_{j=1}^r \mu_j N_j$$

$$dF = -SdT - PdV + \sum_{j=1}^r \mu_j dN_j$$

- Si l'on travaille a pression et temperature constanes on introduit l'enthalpie libre G :

$$G = E + PV - TS = \sum_{j=1}^r \mu_j N_j$$

$$dG = -SdT + VdP + \sum_{j=1}^r \mu_j dN_j$$

Chapter 2

LE MONDE MICROSCOPIQUE

La physique statistique permet de faire la liaison entre les mondes macroscopiques et microscopiques. Les caractéristiques des constituants élémentaires au niveau microscopique :

- Ils sont extrêmement petits (propriétés quantiques)
- Ils sont extrêmement nombreux (Leur évolution ne peut donc pas être traitée individuellement)

2.1 Micro-états quantique

Un micro-état est une configuration microscopique particulière d'un système.

2.1.1 L'atome d'hydrogène

Un atome d'hydrogène est un système constitué d'un proton et d'un électron qui interagissent par l'intermédiaire d'une force coulombienne attractive.

Le proton est 1836 fois plus lourd que l'électron, alors on peut prendre l'approximation qu'il est immobile et que l'électron tourne autour de lui.

E est l'énergie totale du système

- Si $E \geq 0$, on a un état de diffusion.
 E peut varier de façon continue et prendre toutes les valeurs possibles entre zéro et l'infini.
- Si $E \leq 0$, on a un état lié.
seules certaines valeurs de E sont permises:

$$\varepsilon_n = -\frac{13,6}{n^2} eV$$

n est le nombre quantique principal.

L'état fondamental de l'atome d'hydrogène correspond à $n = 1$ et vaut $\varepsilon_1 = 1 = -13,6 eV$.

Les états d'énergie supérieure sont appelés états excités.

Pour un état d'énergie donnée, ε_n , on a plusieurs configurations possibles correspondant aux nombres quantiques l, m, s, s_z qui obéissent aux lois suivantes :

- $0 \leq l \leq n - 1$, l est le nombre quantique secondaire.
Il est lié au moment angulaire orbital de l'électron.
- $-l \leq m \leq l$, m est le nombre quantique magnétique.
Il est lié à la projection du moment angulaire orbital sur l'axe z .



- $s = \frac{1}{2}$, ce nombre quantique, que l'on appelle nombre quantique de spin, correspond à un degré de liberté purement interne de l'électron.
- $-\frac{1}{2} \leq s_z \leq +\frac{1}{2}$. s_z est le nombre quantique lié à la projection du spin sur l'axe z.
Ce nombre ne peut varier que par sauts d'une unité. Ici, il ne peut prendre que 2 valeurs : $\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$.

On définit un micro-état par un ensemble complet de nombres quantiques correspondant à des observables qui peuvent être mesurées simultanément (les opérateurs associés à ces grandeurs commutent).

- l'énergie.
- le carré du moment angulaire orbital L^2 .
- Le projection du moment angulaire orbital sur l'axe z L_z .
- Le carré du spin s^2 .
- Le projection du spin sur l'axe z s_z .

Ce choix particulier conduit à introduire l'ensemble des nombres quantiques n, l, m, s et s_z .

La donnée d'un ensemble complet de nombres quantiques (n, l, m, s, s_z) est nécessaire pour préciser exactement la configuration microscopique d'un système.

En effet, si cet ensemble est incomplet, on ne définit pas un micro-état mais une famille de micro-états.

Dégénérescence

Dans le cas où une même valeur de l'énergie correspond à plusieurs configurations, ou micro-états, on dit que le niveau est dégénéré.

Le degré de dégénérescence est le nombre de configurations associées à ce niveau d'énergie.

Par exemple, si $n = 1$, (ε_1) la dégénérescence est égale à 2 ($n = 1, l = 0, m = 0, s = \frac{1}{2}, s_z = \pm \frac{1}{2}$), pour $n = 2, \varepsilon_2$ il existe 8 micro-états.

2.1.2 L'oscillateur harmonique à une dimension

Classiquement

L'évolution d'un poids suspendu à un ressort autour de sa position d'équilibre, après qu'il en ait été légèrement écarté, représente un exemple d'oscillateur harmonique classique.

Supposons que le poids ait une masse m .

La position d'équilibre correspond à $x = 0$.

Son énergie potentielle, U , est de la forme :

$$U = \frac{1}{2} K x^2$$

avec K une constante.

le corps est soumis à une force : $\frac{-\partial U}{\partial x} = -Kx$.

L'équation du mouvement s'écrit :

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -Kx$$

La solution de cette équation est une sinusoïde dont la pulsation w est donnée par: $w = \sqrt{\frac{K}{m}}$.

Classiquement, toutes les valeurs positives de l'énergie sont permises.

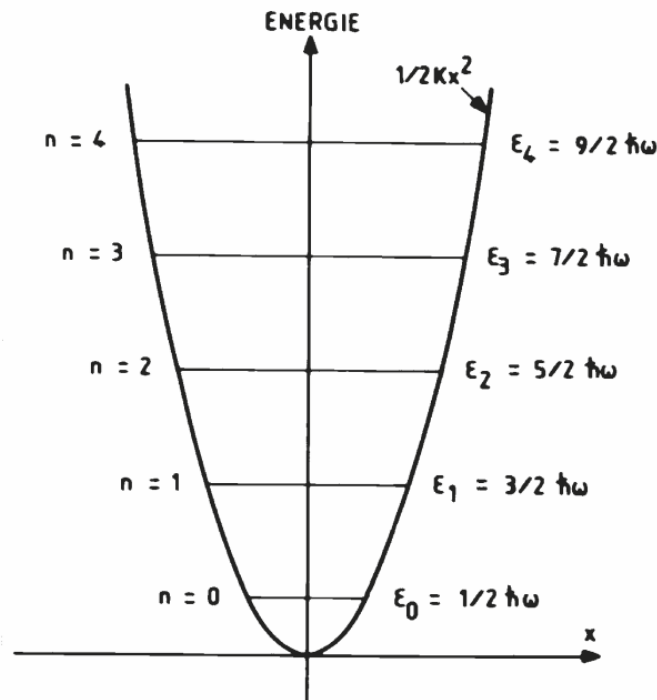
Au niveau microscopique

Un exemple très simple est donné par la molécule d'hydrogène dont les deux atomes peuvent osciller le long de l'axe de symétrie de la molécule.

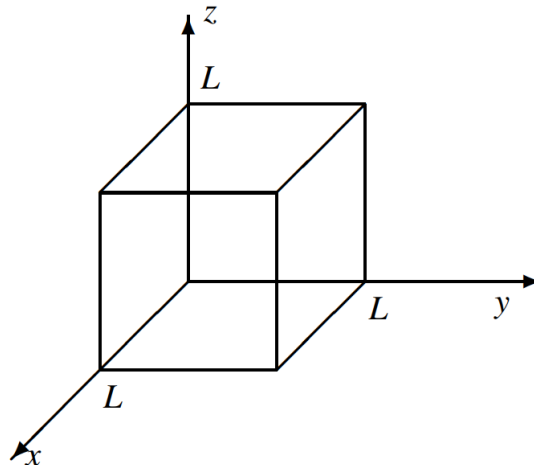
Les niveaux d'énergie et du pulsation sont quantifiés.

les niveaux d'énergie sont donnés par l'expression :

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar w$$



2.1.3 Une particule libre dans une boîte cubique



Une particule libre, de masse m et de spin nul, placée dans une boîte cubique de côté L .

L'énergie potentielle de ce système est nulle à l'intérieur de la boîte et infiniment répulsive ($U = +\infty$) à



l'extérieur.

Seules certaines valeurs d'énergie sont permises :

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

avec n_x, n_y et n_z sont les nombres quantiques associés à chacune des directions de l'espace : x, y et z.

Posons : $\varepsilon_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \implies \varepsilon_{n_x n_y n_z} = \varepsilon_0 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$

L'état fondamental correspond à $n_x = n_y = n_z = 1$ et son énergie vaut $\varepsilon_{111} = 3\varepsilon_0$. Il n'est pas dégénéré.

Le premier état excité peut être construit de 3 manières différentes:

$$\begin{cases} \varepsilon_{211} = 6\varepsilon_0 : n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1 \\ \varepsilon_{121} = 6\varepsilon_0 : n_x = 1, n_y = 2, n_z = 1 \\ \varepsilon_{112} = 6\varepsilon_0 : n_x = 1, n_y = 1, n_z = 2 \end{cases}$$

2.1.4 Les systèmes à N particules

Les systèmes réels sont complexes car ils comportent un nombre élevé, N , de particules identiques.

Dans le cas le plus général, les N particules ont des interactions entre elles qui mettent en jeu deux ou même plusieurs particules.

Par exemple, le cas pour un ensemble de N électrons. Chacun d'entre eux interagit avec les $N - 1$ autres par l'intermédiaire de la force de Coulomb.

On peut aussi avoir des interactions plus complexes : c'est le cas des nucléons dans le noyau. l'énergie totale d'un tel système n'est pas égale à la somme des énergies associées à chaque particule car il n'est pas possible de séparer l'énergie potentielle totale en contributions individuelles associées à chaque particule et ne dépendant que de la position de celle-ci.

Il arrive parfois que les interactions complexes entre les particules se traduisent, avec une bonne approximation, par un potentiel moyen.

Dans une telle situation, le problème se simplifie beaucoup car il suffit de considérer que chaque particule évolue dans ce potentiel moyen sans interaction avec les autres particules.

On peut alors encore de parler d'états individuels.

L'interaction entre les électrons peut se traduire approximativement par un potentiel moyen.

2.2 Bosons et Fermions

2.2.1 Définitions

Au niveau microscopique les particules sont indiscernables.

Toutes les particules de la nature ont un spin s qui est soit entier soit demi-entier.

les bosons (comme l'électron) si s est entier, et les fermions (comme le photon) s'il est demi-entier.

- La fonction d'onde d'un système constitué de plusieurs fermions est antisymétrique par rapport à l'échange de deux particules.

Cette propriété implique que deux particules ne peuvent pas être dans le même état quantique.

C'est ce que l'on appelle le principe d'exclusion de Pauli.



- La fonction d'onde d'un système de bosons doit être symétrique par rapport à l'échange de deux particules.
Plusieurs bosons peuvent se trouver dans la même configuration quantique.
On dit qu'ils obéissent à la statistique de Bose-Einstein.

2.2.2 Micro-état et spin

Soit une particule libre dans une boîte cubique et ait un spin s .

Dans ce cas il est nécessaire d'introduire deux nombres quantiques supplémentaires : s et s_z .

- Pour une particule de spin nul, les micro-états sont complètement déterminés par la simple donnée de n_x, n_y, n_z
- Lorsque le spin de la particule est différent de zéro il faut préciser les valeurs de s et s_z .
Par exemple, si $s = 1$, et pour n_x, n_y et n_z fixes, on peut définir trois micro-états:

$$\begin{cases} n_x, n_y, n_z, 1, -1 \\ n_x, n_y, n_z, 1, 0 \\ n_x, n_y, n_z, 1, 1 \end{cases}$$

Une particule libre

Considérons une particule libre, de spin s , dans une boîte cubique.

Supposons que son énergie soit égale à $12\varepsilon_0$ ($n_x = n_y = n_z = 2$).

Pour une particule sans spin, cet état d'énergie n'est pas dégénéré et correspond à une seule configuration.

- Si $s = 0 \rightarrow (2, 2, 2, 0, 0)$
- Si $s = \frac{1}{2} \rightarrow (2, 2, 2, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2})$ et $(2, 2, 2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
- Si $s = \frac{3}{2}, s_z$ peut prendre $2s + 1 = 4 \rightarrow \begin{cases} (2, 2, 2, \frac{3}{2}, \frac{-3}{2}) \\ (2, 2, 2, \frac{3}{2}, \frac{-1}{2}) \\ (2, 2, 2, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}) \\ (2, 2, 2, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}) \end{cases}$

Deux particules libres

Considérons deux particules libres, de spin s , dans une boîte cubique.

Supposons que son énergie soit égale à $15\varepsilon_0$.

Une des particules soit sur le niveau $3\varepsilon_0$ et l'autre sur le niveau $12\varepsilon_0$, ou par la combinaison $9\varepsilon_0$ et $6\varepsilon_0$.

Un micro-état associé à ce système de deux particules est déterminé par la donnée de 10 nombres quantiques $(n_{x1}, n_{y1}, n_{z1}, s_1, s_{z1}, n_{x2}, n_{y2}, n_{z2}, s_2, s_{z2})$.

- Pour $s = 0 \rightarrow (1, 1, 1, 0, 0, 2, 2, 2, 0, 0)$
- Pour $s = \frac{1}{2} \rightarrow \begin{cases} (1, 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}, 2, 2, 2, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}) \\ (1, 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}, 2, 2, 2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ (1, 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2, 2, 2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ (1, 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2, 2, 2, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}) \end{cases}$

2.3 Systèmes a N particules indépendantes

2.3.1 Particules discernables

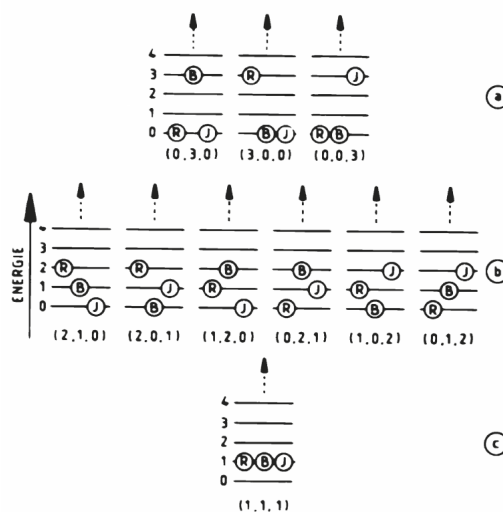
Supposons qu'une particule soit bleue (B), l'autre rouge (R) et la dernière jaune (J).

Cherchons de combien de manières différentes trois particules peuvent conduire à 3 unités d'énergie.

- Une particule sur le niveau 3 et deux sur le niveau zéro.
- Une particule sur chacun des trois premiers niveaux.
- Trois particules sur le premier niveau.

Nous noterons un micro-état par (n_B, n_R, n_J) où n_B, n_R et n_J repèrent les niveaux occupés par les particules B, R et J.

- Pour la première configuration nous avons trois micro-états possibles.
- Pour la première configuration nous avons 6 micro-états possibles.
- Pour la première configuration nous avons 1 micro-état possible.



Au total, pour ce système à trois particules, la dégénérescence du niveau d'énergie est égale à 10 et nous avons 10 micro-états différents à trois particules.

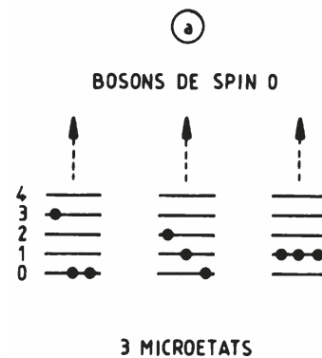
2.3.2 Particules indiscernables

Bosons

Supposons que les trois particules soient des bosons de spin nul.

Il n'y a pas de restriction pour l'occupation des niveaux à une particule.

Nous n'avons au total que trois micro-états.



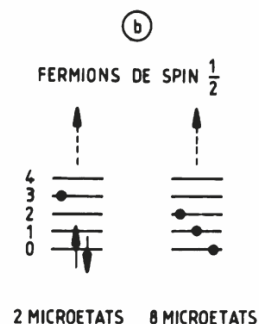


Fermions

Supposons que les trois particules soient des fermions de spin $\frac{1}{2}$.

Le principe d'exclusion de Pauli empêche deux fermions d'avoir les mêmes nombres quantiques.

la configuration où l'on a trois particules dans l'état 1 est impossible.



2.4 Micro-état et macro-états

Un macroétat est complètement déterminé si l'on connaît 2 paramètres macroscopiques (P et T par exemple).

Il faudrait connaître $3N$ nombres quantiques pour déterminer un micro-état.

Soit $\Omega(E)$ est le nombre de micro-états accessibles au système lorsque son énergie totale est égale à E .

Un système à N particules a $f = 3N$ degrés de liberté.

On peut montrer que le nombre de micro-états varie très approximativement comme:

$$\Omega(E) \approx E^f$$

Remarque :

Les particules de la nature sont soit des bosons, soit des fermions.

Cette distinction n'est importante que lorsque le système a un comportement quantique.

2.5 L'espace de phase

Considérer un système constitué d'une particule de masse m .

Au temps t il est possible de calculer la position r de la particule et son impulsion p si l'on connaît :

- Les forces auxquelles elle est soumise en chaque point de l'espace.
- Sa position r_0 et son impulsion p_0 au temps $t = 0$.

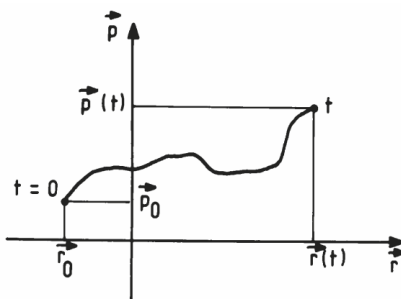
Dans le cas d'une force dérivant d'un potentiel U :

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial r} = -\nabla U$$

p est défini par l'équation:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{p}{m}$$

L'espace de phase de la particule est un espace cartésien à six dimensions dont les axes sont associés aux variables x, y, z, p_x, p_y, p_z .





2.5.1 Trajectoire d'oscillateur harmonique

Étudions la trajectoire dans l'espace de phase associée à un oscillateur harmonique à une dimension dont l'énergie totale est égale à E .

une masse m suspendue à un ressort dont la rigidité est égale à K .

l'énergie totale est :

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kq^2$$

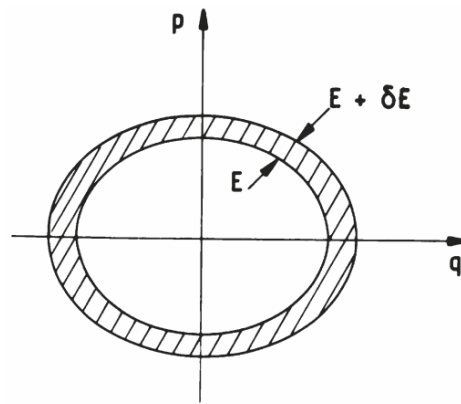
p et q désignent respectivement l'impulsion et la coordonnée.

Cette equation est une ellipse dont les demi-axes sont respectivement $\sqrt{2mE}$ et $\sqrt{\frac{2E}{K}}$.

L'énergie du système est comprise entre E et $E + \delta E$.

Les trajectoires dans l'espace de phase seront donc toutes comprises entre deux surfaces d'énergie:

$$E + \delta E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kq^2$$



2.5.2 A N particules

La généralisation à un système à N particules est immédiate.

La configuration d'un tel système est déterminée si l'on connaît $3N$ positions et $3N$ impulsions.

L'espace de phase a donc $6N$ dimensions.

La dimension de l'espace de phase est égale à $2f$.

Au cours de son évolution, le système décrit une trajectoire dans cet espace, deux trajectoires ne peuvent se couper.

2.6 Micro-État classique

2.6.1 Configurations et micro-états classiques

Si nous voulons développer une physique statistique classique, il faut retrouver, pour une énergie totale donnée, le même nombre de micro-états classiques que dans l'approche quantique.

la mécanique classique prévoit une infinité de configurations puisque les variables de l'espace de phase peuvent varier de manière continue.

Par exemple pour un oscillateur harmonique il y a une infinité de points (configurations) compris entre les ellipses associées à E et $E + \delta E$.



A un système à f degrés de liberté on subdivise l'espace de phase en cellules élémentaires de côté δq , pour les coordonnées q_i , et δp , pour les coordonnées p_i .

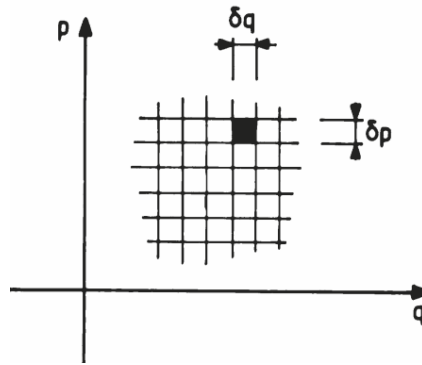
Chacune de ces cellules, dont le volume est égal à $(\delta q \delta p)^f$, est associée à un micro-état classique.

Soit V est le volume accessible au système lorsque son énergie est comprise entre E et $E + \delta E$.

Le nombre de micro-états classiques accessibles au système est égal à :

$$\frac{V}{(\delta q \delta p)^f}$$

A une dimension pour $V = S = \delta q \delta p$ et $f = 1$:



La plus petite cellule de l'espace de phase compatible avec les lois de la mécanique quantique est pour :

$$\delta q \delta p = h$$

\Rightarrow Le nombre de micro-états classiques accessibles au système est égal à $\frac{V}{h^f}$

2.6.2 Micro-états classiques et spin

Pour tenir compte du spin s , on introduit une dégénérescence additionnelle égale à $2s + 1$ (égale à deux seulement dans le cas des photons).

Le nombre total de micro-états classiques est alors égal à :

$$(2s + 1) \frac{V}{h^f}$$

2.7 Travail et Chaleur a l'échelle microscopique

Soit N particules indépendantes dans une boîte cubique de côté L .

Le volume de cette boîte vaut L^3 .

Travail

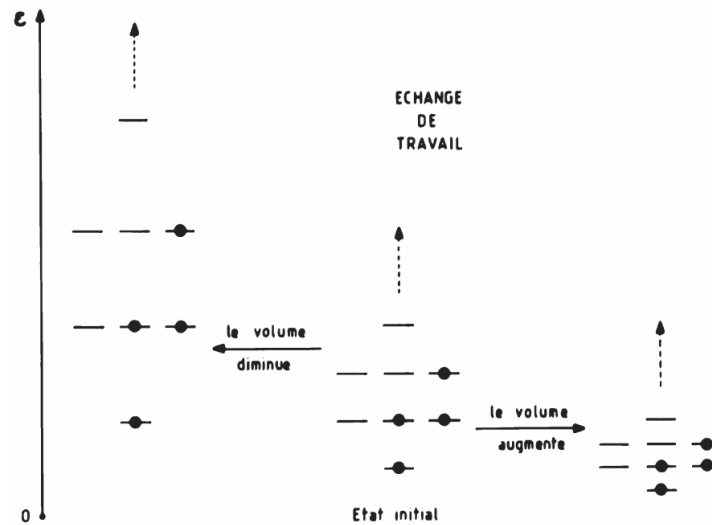
Le travail mécanique correspond à une variation du volume V du système. Les niveaux d'énergie à une particule sont donnés par :

$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mV^{2/3}} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

D'après l'équation :



- Si V diminue les niveaux d'énergie s'espacent.
- Si V augmente les niveaux d'énergie se rapprochent.



Un transfert d'énergie mécanique se traduit donc par un changement des niveaux d'énergie sans changement de l'occupation de ceux-ci par les particules.

Le travail mécanique est un transfert d'énergie au niveau macroscopique puisqu'on l'obtient par changement d'un paramètre externe.

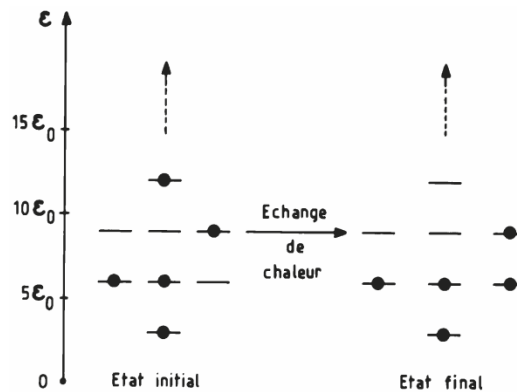
Chaleur

Supposons à présent que le volume reste constant.

Les niveaux d'énergie sont fixés et il n'y a pas d'échange d'énergie mécanique.

Par contre, on peut changer l'occupation des niveaux à une particule.

Ceci se traduit par une variation d'énergie du système et correspond à un échange de chaleur.



la chaleur est un transfert d'énergie au niveau microscopique car elle correspond à un changement d'occupation des niveaux de particule individuelle.

Chapter 3

POSTULATS DE LA PHYSIQUE STATISTIQUE

3.1 Énoncé des postulats

3.1.1 Postulat 1

Tous les micro-états accessibles à un système isolé en équilibre sont équiprobables.

La probability pour qu'il soit dans un micro-état donné est égal a $\frac{1}{\Omega(E)}$

3.1.2 Postulat 2

La moyenne dans le temps d'un paramètre quelconque est égale à la moyenne de ce paramètre prise sur un ensemble de systèmes.

Pour expliciter un peu plus le second postulat de la physique statistique, plaçons-nous dans le cadre de la mécanique classique et considérons une grandeur macroscopique quelconque y associée à un système de N particules.

Cette grandeur dépend des coordonnées q_i et des impulsions p_i de chaque particule.

Elle dépend donc du temps t car les coordonnées et les impulsions sont des fonctions du temps.

La moyenne dans le temps de la grandeur y est définie par :

$$\langle y \rangle_t = \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} y(t') dt'$$

Considérons un ensemble $\{\varepsilon\}$ de N systèmes au temps t .

La moyenne de la variable y , pris sur l'ensemble $\{\varepsilon\}$, est égal a :

$$\langle y \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i(t)$$

avec $y_i(t)$ est la valeur de $y(t)$ pour le système i appartenant a l'ensemble $\{\varepsilon\}$.

Le second postulat pose que

$$\langle y \rangle_t = \langle y \rangle$$



3.2 L'entropie statistique

Pour un système en équilibre L'entropie statistique :

$$S = k \log(\Omega(E))$$

Avec $\begin{cases} k : \text{est le constant de boltzmann} \\ \Omega(E) : \text{le nombre de micro-etats accessibles a la système dont l'énergie est egal a E} \end{cases}$

3.3 Notions de théorie de l'information

3.3.1 L'information

L'information est une quantité liée à la connaissance d'une situation.

Soit une boule dans N boîtes identiques.

Nous allons introduire une quantité I qui va nous permettre de chiffrer le manque d'information sur le système.

Il est clair que I doit être une fonction de N .

Si le nombre de boîtes augmente, l'information sur le système va diminuer:

$$I(M) > I(N) \text{ si } M > N$$

Supposons à présent que chacune des boîtes soit divisée en M compartiments équiprobables.

Il y a au total NM compartiments équiprobables.

L'additivité de l'information manquante s'exprime par :

$$I(MN) = I(M) + I(N)$$

Nous appellerons l'information manquante : L'entropie d'information

$$I = -k \sum_{i=1}^N P_i \log(P_i)$$

Avec P_i sera la probabilité d'occuper un micro-état.

Si $P_i = \frac{1}{N}$, toutes les configurations sont équiprobables et $I = k \log(N)$.

On note que L'équilibre statistique est atteint lorsque tous les micro-états accessibles sont équiprobables ,lorsque $P_i = \frac{1}{\Omega(E)}$.

Dans ce cas : $I = S = k \log(\Omega(E))$

3.3.2 Entropie et théorie de l'information

A partir de la théorie de l'information en remplaçant le premier postulat par l'énoncé suivant :

L'information sur un système en équilibre est minimum.

$$S = -k \sum_{i \in M} P_i \log(P_i)$$

la loi du maximum de l'entropie, à E fixée, est équivalente à avoir le minimum d'information sur le système.



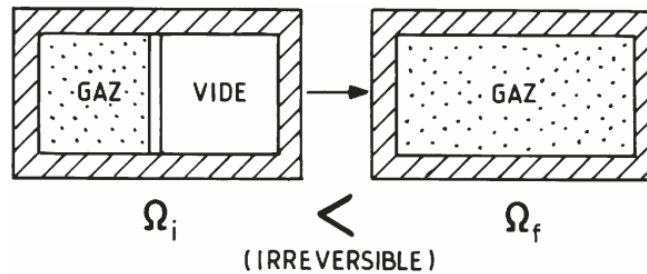
3.4 Irréversibilité

Considérons un système isolé en équilibre statistique dont l'état macroscopique est déterminé par un ensemble de contraintes externes.

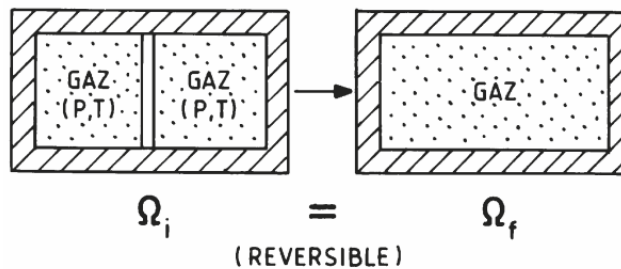
Soit Ω_i le nombre de micro-états accessibles à ce système.

Soit Ω_f le nombre de micro-états accessibles dans l'état final lorsque les contraintes ont été enlevées.

- Si $\Omega_f > \Omega_i$ la transformation est irréversible car même si on rétablit les contraintes, on ne reviendra pas dans la situation initiale.



- Si $\Omega_f = \Omega_i$ la transformation est réversible. Si l'on remet les contraintes sur le système on revient dans l'état initial.



Une transformation réversible se fait donc à entropie constante puisque le nombre de micro-états ne change pas.

Si, à chaque étape de l'évolution du système, celui-ci passe par une séquence d'états en équilibre statistique, la transformation est dite quasistatique.

3.5 Valeurs moyennes et fluctuations

considérons un système de quatre fermions de spin $s = \frac{1}{2}$.

le système de quatre fermions ait une énergie totale égale à 5.

On néglige d'abord le spin, les configurations à quatre particules conduisant à une énergie totale égale à 5:

$$\begin{aligned}
 5 &= 5 + 0 + 0 + 0 & 5 &= 4 + 1 + 0 + 0 & 5 &= 3 + 2 + 0 + 0 \\
 5 &= 3 + 1 + 1 + 0 & 5 &= 2 + 2 + 1 + 0 & 5 &= 2 + 1 + 1 + 1
 \end{aligned}$$

Tenons compte maintenant du spin les fermions obéissent au principe de Pauli et on ne peut pas mettre plus de deux particules sur chaque niveau de particule individuelle car le spin est égal à $\frac{1}{2}$

Le configuration devient

$$\begin{aligned}
 5 &= 4 + 1 + 0 + 0 & 5 &= 3 + 2 + 0 + 0 \\
 5 &= 3 + 1 + 1 + 0 & 5 &= 2 + 2 + 1 + 0
 \end{aligned}$$



Les 4 configurations possibles correspondent toujours à deux particules sur des niveaux différents et deux sur un troisième.

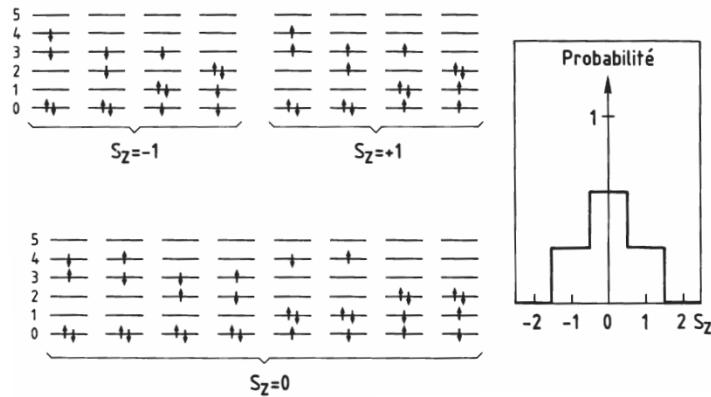
Pour le niveau qui contient deux particules, les spins sont appariés.

Par contre, pour les deux particules qui se trouvent sur des niveaux différents, nous avons le choix entre deux possibilités ($s_z = \pm \frac{1}{2}$)

Nous allons maintenant nous intéresser à la projection S_z du spin total de cet ensemble de fermions.

S_z peut varier de -2 à $+2$ par sauts d'une unité.

Les deux valeurs extrêmes, -2 et $+2$, sont obtenues lorsque le spin des quatre particules sont alignés parallèlement ou antiparallèlement à l'axe z .



50% des cas on obtient un système de l'ensemble avec $S_z = 0$ et que dans 0% des cas on a $S_z = \pm 2$.

La valeur la plus probable est $\tilde{S}_z = 0$.

La valeur moyenne $\langle S_z \rangle$ est également nulle.

L'existence d'une distribution de probabilité implique que le résultat d'une mesure est incertain.

Un résultat est plus probable que l'autres mais il existe une dispersion autour de cette valeur.

Cette dispersion constitue ce que l'on appelle des fluctuations.

Pour les systèmes macroscopiques, la distribution de probabilité d'une variable macroscopique, y , est extrêmement piquée et les fluctuations autour de la valeur la plus probable, y , sont extrêmement faibles ~