

BUT: Thermo stat \rightarrow compter # états microscopiques.
 \hookrightarrow nécessite de bien connaître la structure des états quantiques. (pour 1 particule/ N particules)

I. Particule libre dans une boîte

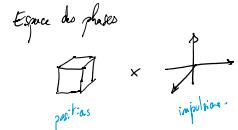
1. Rappel sur l'espace des phases classiques

(\vec{q}, \vec{p}) État = donnée de (\vec{q}, \vec{p}) i.e point dans l'espace des phases.

(Rel)

Boîte cubique de taille L

$$0 \leq q_i \leq L$$



$$\text{Energies données par } H(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} = E$$

$$\text{Espaces des états d'énergie } E \quad \boxed{\text{parties}} \times \boxed{E = \frac{\vec{p}^2}{2m}}$$

2. Espace des états quantiques

- * Espace de Hilbert
- * État du syst. donné par $| \psi \rangle$
- * Diverses bases possibles $\{| \vec{x} \rangle\}, \{| \vec{p} \rangle\}$
- * Important pour Thermo-stat = Base des états propres du \hat{H} (à cause des principes)
- * 1^{re} question = Conditions aux limites?

3. Force de la boîte et conditions aux limites

CL fixées par l'expérience TAIS syst. de très grandes tailles.

De manière plus précise = limite thermodynamique

$$\left\{ \begin{array}{l} N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty \end{array} \right. \quad \frac{N}{V} = \rho \text{ fixe}$$

On s'attend à ce que les conditions limites ne jouent pas de rôle

* le plus naturel = Boîte cubique et CL rigides i.e la fonction d'onde s'annule au bord de la boîte.

$$\psi(\vec{z}) = \langle \vec{z} | \psi \rangle$$

$$\psi(x=0, y, z) = 0 \quad \text{et idem pour } y \text{ et } z$$



4. Conditions aux limites périodiques

$$\left[\hat{H} \frac{\vec{p}^2}{2m}, \hat{p}_i \right] = 0 \Leftrightarrow \text{Diagonalisation simultanée}$$

$$|\vec{p}\rangle = \text{état propre de } \hat{p}^2 \quad \langle \vec{p} | \hat{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{z}}{\hbar}\right) \equiv \psi_p(\vec{z})$$

$$\text{CL périodique: } \psi_p(x+L, y, z) = \psi_p(x, y, z)$$

$$\boxed{\vec{p} = \frac{2\pi \vec{k}}{L}} \quad \vec{k} = \frac{2\pi \vec{n}}{L} \quad (n_x, n_y, n_z) \quad \text{avec } n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$$

m. n. t "visualiser" les valeurs possibles de \vec{p} qui correspondent à états propres de \hat{p}^2 avec CL périodique. \Rightarrow espace de Hilbert infini impossible à visualiser...

On peut "visualiser" les valeurs possibles de \vec{p} qui correspondent à des états propres de \hat{p}^2 avec CL périodique. \Rightarrow état de Rutherford infini impossible à visualiser...
 Réseau cubique avec volume de maille élémentaire $(\frac{h}{L})^3 = \frac{h^3}{V}$

Énergie propre correspondante

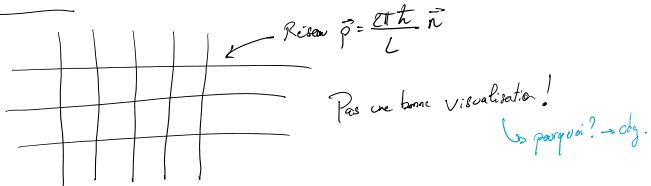
$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \left(\frac{h}{L}\right)^2 \frac{1}{2m} \vec{n}^2 = \frac{h^2}{2mL^2} \vec{n}^2$$

Degenerescence due au spin : état propre (\vec{p}, m_s)

m_s = valeur de la projection du spin selon \vec{z} : \vec{s}^\pm
 m_s prend $2s+1$ valeurs
 $\hookrightarrow (2s+1)$

$$\left. \begin{array}{l} \text{spin } S \quad m_s = \{-S, -S+1, \dots, +S-1, +S\} \\ S = \frac{1}{2} \quad m_s = \left\{ -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \end{array} \right\}$$

At Maille élémentaire



Ordre de grandeur : Taille de la maille

Particule d'énergie : (temp T → h₀ T) : $k_B T \approx 10^{-21} \text{ J}$

Masse $m \approx 10^{-26} \text{ kg}$

V : 10^{-1} m^3

$$\text{Propriété} \rightsquigarrow \frac{P_{\text{énergie}}}{2m} \propto k_B T$$

$$\frac{P_{\text{énergie}}}{h} \approx 10^3$$

\Rightarrow ① "Visualisation"

Bonne visualisation

\Rightarrow Possibilité dans le calcul de passer à la limite continue.

A 2D:

Classique

Etat de système:

Etat d'énergie $\in E$

Etat d'énergie entre E et $E + \delta E$

Quantique

Vecteurs de \vec{p} correspondant
Etat propres de \hat{p}^2 avec CL périodique



$$p_{\text{discret}} / \frac{h}{L} \leq E$$



S. Des états propres

5. Densité d'états propres

Maille petite et limite thermodynamique (où Maille $\rightarrow 0$)

\Rightarrow Dans la plupart des cas. On peut remplacer la somme discrète sur états propres de \vec{p} par la limite continue

$$\sum_{\text{état propre}} X(\vec{p}) \approx \int d\vec{p} D(\vec{p}, V, S) X(\vec{p})$$

spin

\approx vrai quasiment tjs sauf pour condensat de BE

$D(\vec{p}, V, S)$ = densité en états propres \approx

$D(\vec{p}, V, S) d\vec{p} = \text{Nb d'états propres de } \vec{p} \text{ tels que leurs impulsions valent } \vec{p} \text{ à } d\vec{p} \text{ près.}$

Calcul de $D(\vec{p}, V, S)$

Reasonner sur Nb pas sur densités \Rightarrow car plus facile.

$$d\vec{p} D(\vec{p}, V, S) = \text{Nb d'états propres entre } \vec{p} \text{ et } \vec{p} + d\vec{p}$$

$$= (2s+1) \frac{\text{Volume compris entre } \vec{p} \text{ et } \vec{p} + d\vec{p}}{\text{Volume maille élémentaire}} = \frac{(2s+1) d\vec{p}}{h^3/V} = (2s+1) \frac{V}{h^3} d\vec{p}$$

$$D(\vec{p}, V, S) = \frac{(2s+1)V}{h^3}$$

Très fréquent en Thermo stat de

- Sommer sur états propres $\sum_{\vec{p}} X(\vec{p})$

- Réorganisé cette somme et on somme sur énergies propres

- Il faut tenir compte de la densité $D_E(E, V, S)$ en énergie propre.

$$\sum_{\vec{p}} V(\vec{p}) \approx \int dE D_E(E, V, S) V(E)$$

$$\sum_{\text{énergies propres}} Y(E) \simeq \int dE D_E(E, V, S) Y(E)$$

$E = \frac{2\pi^2 k^2}{m} \frac{n^2}{L^2}$

$dE D_E(E, V, S) = \text{Nb d'états propres pour lesquels l'énergie vaut } E \text{ à } dE \text{ près}$

Calculer $dE D_E(E, V, S)$ à partir de $d\vec{p} D(\vec{p}, V, S)$ en utilisant $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$

Résultat

$$D_E(E, V, S) = (2s+1) \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} \quad \approx 3d$$

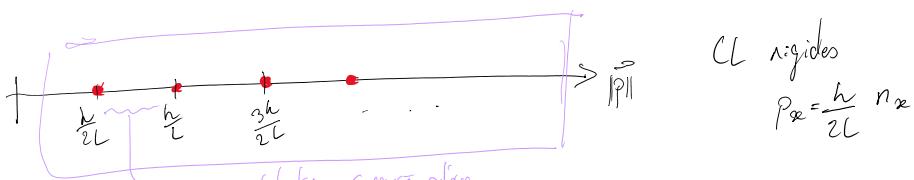
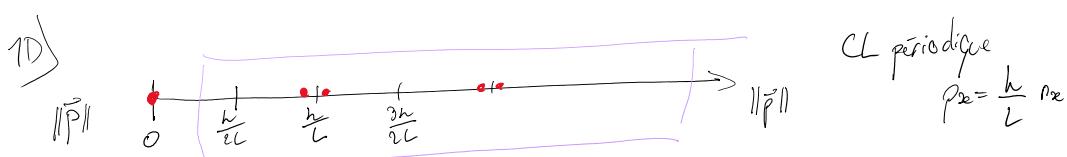
6. Retour sur CL rigides

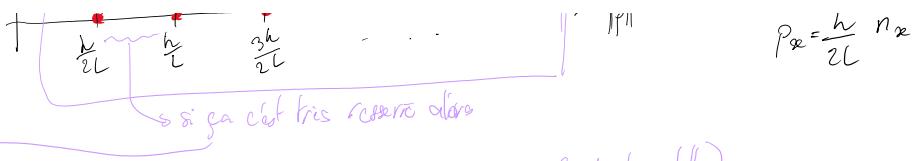
$$\psi_{\vec{p}}(0, y, z) = \psi_{\vec{p}}(L, y, z) = 0 \text{ et idem en } y, z = 0, L$$

Solutions: $\psi_{\vec{p}}(\vec{z}) = (\#) \sin\left(\frac{p_x z}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{p_y y}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{p_z z}{\hbar}\right)$

$\vec{p} = \frac{\pi \hbar}{L} \vec{n}$ $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N}$ $\cancel{\text{N}} \Rightarrow \text{N} \neq \text{pas de particule exclu.}$
 \uparrow $\frac{\pi \hbar}{L} n_x$ et $-\frac{\pi \hbar}{L} n_x$
 $\Rightarrow \psi \rightarrow -\psi$
 même état

Effet sur densité en états propres $D(\vec{p}, V, S)$





$$P_E = \frac{h}{2L} n_E$$

\Rightarrow Densité en état propre est la même (dans la boîte violette).
supposé ∞

Important $\frac{D_E(E, V, S)}{\sqrt{}}$

II. Particules identiques

1. Postulat

\exists Bosons / Fermions : Fonction d'onde symétrique / anti-symétrique dans l'échange entre deux particules.

2. Cas de particules sans interactions - Nombre d'occupations

→ manière le plus simple de faire cela.

Idée de "compter/comparer" sur états

$|12\rangle$ État propre de hamiltonien \hat{h} à 1 corps/part. ($|12\rangle = |n_x, n_y, n_z, m_s\rangle$)

Syst de N particules

$\{n_\alpha\}$ où $n_\alpha = \text{nb de particules dans l'état } |\alpha\rangle$

$$\text{tel que } \sum_\alpha n_\alpha = N$$

λ d'est un ou plusieurs nombres quantiques. Ici: $|12\rangle = (n_x, n_y, n_z, m_s)$

(B): $n_\alpha = 0, 1, \dots$

(F): Principe de Pauli: $\Rightarrow n_\alpha = 0, 1$

Ex \hat{h} avec 2 états propres représentés

$N=2$ État propre de \hat{H}_2

(B)

(B)

(F)

$$S: \hat{H}|\alpha\rangle = E_\alpha |\alpha\rangle$$

L'énergie propre de état correspondant aux $\{\alpha\}$: $\left[\sum_{\alpha} n_{\alpha} E_{\alpha} \right]$ (parce que particule sans interaction).

III. Remarque (1d)

$$\hat{F} = f(\hat{p}) g(\hat{q}) \rightsquigarrow F_{\text{classique}}(q, p) = f(p) g(q)$$

En théorie stat quantique, on est amené à calculer $\text{Tr } \hat{F}$

$$\text{Tr } \hat{F} = \int dq' \langle q' | \hat{F} | q' \rangle = \int dp' \langle p' | \hat{F} | p' \rangle$$

$$\text{Tr } \hat{F} = \int dq' \langle q' | f(\hat{p}) g(\hat{q}) | q' \rangle$$

$$= \int dq' g(q') \underbrace{\langle q' | f(\hat{p}) | q' \rangle}_{\text{II} = \int dp' \langle p' | f(p) \rangle}$$

$$\text{Tr } \hat{F} = \iint dq' dp' g(q') \langle q' | p' \rangle \underbrace{\langle p' | f(\hat{p}) | q' \rangle}_{\text{I}}$$

$$= \iint dq' dp' g(q') f(p') \underbrace{\langle q' | p' \rangle \langle p' | q' \rangle}_{|\langle q' | p' \rangle|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} - \frac{1}{\hbar}}$$

$$\text{Tr } \hat{F} = \iint \frac{dq dp}{h} F_{\text{cl}}(q, p) \text{ se généralise}$$

⇒ \hat{F} ... fonction au 1^{er} ordre dans la limite classique

Pour \hat{F} quelconque, au 1^{er} ordre dans la limite classique

$$\text{Tr } \hat{F} \rightarrow \iint \frac{dq dp}{h} F \delta(q, p) \quad \boxed{\text{Tr } \hat{F}} \rightsquigarrow \iint \frac{dp dq}{h}$$

Chapitre 2: Les principes de la thermodynamique Statistique classique

mardi 19 novembre 2024 10:17

I. Description Statistique

Comment arriver à l'idée statistique? ← par évidant du tout!

$$T^i(\vec{q}_i, \vec{p}_i) \text{ esp des phases}$$

indice de particules $i=1, \dots, N \sim 10^{23}$

Trajectoire dans espace des phases.

1. Réservoir et descriptions stat

Syst. macro Σ
Expériences / Réservoirs \rightarrow Valeurs moyennes dans le temps (car temps expérience/macro \gg échelle de temps micro (libre parcours moyen, ...)) \Rightarrow mesure = moyenne sur t)

$$\langle A \rangle_t = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \ A(\vec{q}_i(t), \vec{p}_i(t))$$

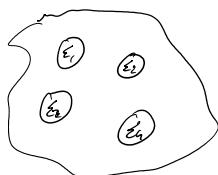
Moyenne le long de la trajectoire

Autre manière de calculer $\langle A \rangle_t$

$$\int d\Gamma \quad \text{d}q_i \text{d}p_i \quad \int d\Gamma$$

\Rightarrow on sait pas faire ni P/Γ ni l'autre ...

Approche stat:



Ensemble stat; formé par 1 grand nombre de copies du système Σ
avec distribution de probabilité $P(\vec{q}_i, \vec{p}_i)$

coursphystat2111

vendredi 22 novembre 2024 13:22



coursphyst
at2111

$$T_F = \int d\vec{q}' g(\vec{q}') \int dp' \langle \vec{q}' | p' | \vec{q}' | f(p') | \vec{q}' \rangle$$

$$= \underbrace{\int d\vec{q}' d\vec{p}' g(\vec{q}') f(p') \langle \vec{q}' | p' | \vec{q}' \rangle}_{|\langle \vec{q}' | p' \rangle|^2 = \frac{1}{h^3} = 1}$$

$T_F = \boxed{\int d\vec{q} d\vec{p} F_{\text{charge}}(\vec{q}, \vec{p})}$

Opérateur \hat{F}_{charge} de l'ordre 1 dans la limite chargée:

$$T_F = \boxed{\int d\vec{q} d\vec{p} F_{\text{charge}}(\vec{q}, \vec{p})}$$

Tr = $\boxed{\int d\vec{q} f}$

Chap 2 - Principes de la théorie classique.

I. Descript^o statistique

Comment avoir l'idée statistique?

Espace des phases $\Gamma(\vec{q}_i, \vec{p}_i)$

④ trajectoire de la particule i , $i = 1 \dots N_{\text{part}}$

⑤ Recue & descript^o stat.

Système macro Σ

Expériences \rightarrow valeur moyenne le temps!

Reposant le long de la trajectoire

$$\langle A \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt A(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$$

Autre méthode de calculer $\langle A \rangle_T$:

⑥ $\int d\vec{q} d\vec{p}$ $\langle A \rangle_{\text{stat}}$, densité stat. pour le système

STAT

+

Appareil statistique :

Ensemble de systèmes.



Les statistiques = ensemble des copies du système Σ , avec distribution de proba $P(\tilde{q}_1, \tilde{p}_1)$.

$P(\tilde{q}_1, \tilde{p}_1)$: proba que Σ soit un $(\tilde{q}_1, \tilde{p}_1)$ à l'époque \tilde{q}_1 .

Appareils statistiques :

$$\langle A \rangle_p = \int d\tilde{q} P(\tilde{q}_1, \tilde{p}_1) A(\tilde{q}_1, \tilde{p}_1) \quad \text{avec } P(\tilde{q}_1, \tilde{p}_1) \text{ une}\}$$

équation.

→ Inconvénient : p incomplète!

Avantage: si p possibles, on peut calculer.

?

Q: Quelle mesure a-t-on $\langle A \rangle_p = \langle A \rangle_{p_0}$?

⇒ Problème de stabilité.

② Probabilité p ?

Sous résultat → théorie de l'unité

En gen: système est à l'équilibre \Rightarrow Système stationnaire: $P(\tilde{q}_1, \tilde{p}_1, \tilde{\lambda})$, $\forall \tilde{t} = 0$
le réciproque donne alors

$$\left\{ \begin{array}{l} p, H \end{array} \right\} = 0.$$

↳ 2� possibles:
 ↳ p-théorique: $P_{\text{th}} = P(\tilde{q}_1, \tilde{p}_1, \tilde{\lambda})$
 ↳ empirique: $P_{\text{emp}} = P(\tilde{q}_1, \tilde{p}_1)$)
 $\left. \begin{array}{l} \text{équilibre} \\ \Rightarrow \{p, H\} = 0. \end{array} \right\}$

II Postulat d'équiprobabilité en phase.

Système réel et théorique: E, V, N → Est de pris.

Postulat: Tous les états microscopiques accessibles d'un système réel sont équiprobables.

$$\text{a: } P(\tilde{q}^*, \tilde{p}^*) = \underbrace{\text{actif } H(\tilde{q}, \tilde{p})}_{\text{énergie totale}} \cdot \text{etat prob.}$$

\circ siem

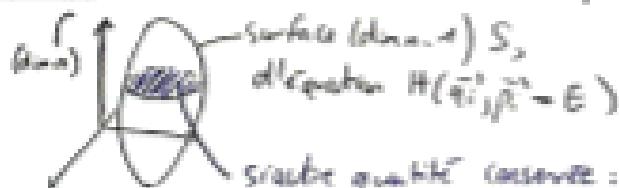
Res:

- lien avec Mécanique en théorie de Boltzmann.
- "différence" entre les états physiques accessibles.

III. Ergodicité en thermo stat.

Approche Statistique & postulat correct: $L\Delta q = L\Delta p \circledcirc$ Ergodicité.

Cette -exemple: un système avec deux quantités conservées q, h .



seule quantité conservée: état dans surface de dim. 2.

↳ Dans ce cas on va appeler les états S comme "accessibles".
Ils ne sont effectivement pas équiprobables. C'est facile à voir en étirant l'espace accessible.

Hypothèse ergodique (Boltzmann): le sys. ergodique n'a pas tout faire équitablement.

Hypothèse quasi-ergodique (P.L.T. Chomet): Pour un système isolé, si on attend assez longtemps, la trajectoire passe au voisinage d'un point dans la surface $H(\tilde{q}, \tilde{p}) = E$.

⚠ Hypo. ergodique fausse (on peut pas passer par tout pt dans un espace de dimension n si on dirige la trajectoire avec un paramètre réel, le temps. Son espace est de dimension 1.)

On suppose donc la suite "Hyp. ergodique", sans-retour en fait quasi-ergo.

{ Hyp. ergo + th. Liouville \Leftrightarrow Asstat. équiprobabilité.

STATS

Chap 3 - Ensemble p-canonical.

Système isolé : E, V, N fixes

I. Entropie

① probabilités

Nb total de p-é tats accessibles à l'énergie E et à part ($\frac{dE}{\epsilon}$ état) : $\Omega_p(E, V)$

Donc :

$$\Omega_p(E, V) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Gamma \quad \text{où } d\Gamma = \frac{\hbar}{V} dq dp \quad \text{et } \gamma = \frac{mv}{\hbar}$$

es équations de conservation

indépendance

En 3D, $v=3$

Total de 001 de p-é tats.
= 1 schéma de l'espace des phases pour un p-état.

⚠ Ne pas oublier la sp. dans Γ (il est en 001 intenses).

$\nu_p(E, V)$: nb d'états d'énergie $\in E$:

$$\nu_p(E, V) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Gamma$$

énergie

Alors : $\omega_p(E, V) = \nu_p(E + \Delta E, V) - \nu_p(E, V) \approx \frac{\partial \nu_p(E, V)}{\partial E} \Delta E$

② Entropie p-canonical.

$$S(E, V, N) = k_B \ln \Omega_p(E, V)$$

Postulat d'équilibre : la seule chose qui compte est donc $\Omega_p(E, V)$.

II. Gr

$$H(P) = - \sum_{i=1}^N P_i \ln P_i$$

$$v_p(E, V) = \frac{1}{h^N N!} \int_{\substack{\prod_{i=1}^N d\vec{q}_i d\vec{p}_i \\ p_i \leq E}} = \frac{V^N}{h^{3N} N!} \int_{\substack{d\vec{p}_i \\ p_i \leq E}}$$

$\int d\vec{q}_i = V$, volume.

Volume d'une boîte
de rayon $R = \sqrt[3]{V}$

en dimension $3N$:

$$V_{3N}(R) = \frac{\pi^{N/2}}{\Gamma(\frac{N+1}{2})} R^{3N} \text{ avec } \begin{cases} \Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt \\ (\Gamma(x+1)) = x \Gamma(x) \\ \Gamma(1) = 1 \end{cases}$$

Dès: $v_p(E, V) = \frac{V^N \pi^{3N/2}}{h^{3N} N! (2\pi E)^{3N/2}} (2\pi E)^{3N/2}$

Et: $v_{NP}(E, V) = \frac{3N}{2} \left(\frac{2\pi E}{h} \right) v_p(E, V)$.

Dès: $S_{NP}^{\text{eff}} = k_B \ln v_{NP}(E, V) = \begin{cases} \text{termes en } \ln N \\ \text{termes en } \ln \frac{2\pi E}{h} \\ \text{termes en } \ln \pi \end{cases} \approx k_B \ln v_p(E, V)$.

égalité termes en N . Donc!

Pq ce nombre? $v_p(E, V) \propto E^{3N/2}$: corrérence rapide!!

Faire le calcul (Stirling ...)

$$S_{NP}^{\text{eff}}(E, V, N) = Nk_B \left[\ln \left(\frac{V}{Nk_B} \right) + \frac{5}{2} \right]$$

longue échelle (thermique) de De Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}, T = \frac{E}{3k_B}$$

III. Propriétés de l'entropie

1 Extensivité

de la force globale ...

STAT

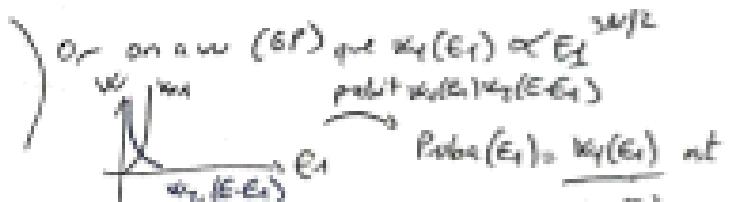
② Additivité



Contact thermique: $H = H_1 + H_2 + \kappa (H_{12})$ tension de contact fatale.

$$W_L(E) = \sum_{E_1} w_1(E_1) w_2(E - E_1)$$

\uparrow
système
isolé



Méthode du CDF pour faire le calcul proprement.

Imaginons que les valeurs possibles de E_1 sont discrètes: $E_{ij} = jE$.

$$\text{On a alors: } W_{tot}(E) = \sum_{j=0}^n w_1(E_{ij}) w_2(E - E_{ij}).$$

Soit E^* la valeur maximisant $w_1(E_1) w_2(E-E_1)$.

On trouve:

$$\ln \left(w_1(E^*) w_2(E-E^*) \right) \leq \ln W_{tot}(E) \leq \underbrace{n(w_1(E^*) w_2(E-E^*))}_{\text{tous les points}} \quad \text{en le bornant.}$$

$$\ln w_1(E^*) + \ln w_2(E-E^*) \leq \ln W_{tot}(E) \leq \ln w_1(E^*) + \ln w_2(E-E^*) + \cancel{\Delta}$$

$$\text{Soit: } \ln W_{tot}(E) \leq \ln w_1(E^*) + \ln w_2(E-E^*)$$

et on: $P_{tot}(E)$ est plus petite de E^* . Donc: $E_{tot} > E^*$ (tableau, indépendant du fond).

On a trouvé: $\ln W_{tot}(E) = S_{tot} \text{ de } L_1 + L_2$ à l'équilibre ou $S_{tot} = S_1(E^*) + S_2(E-E^*)$
 le résultat du contact thermique.

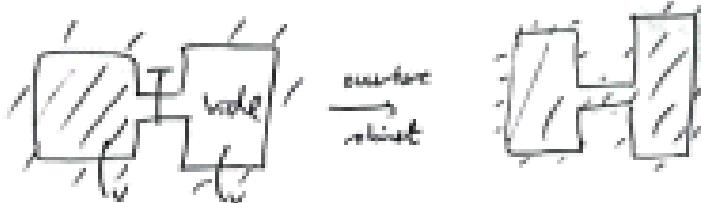
Car $L_1 + L_2$ indépendants sans interaction:

$$W_{tot} = w_{L1} w_{L2} \quad \& \quad S_{tot} = S_1 + S_2$$

indépendants.

③ Entropie & irréversibilité

Ex: Où est le Sade.



On a $\Delta S = k_B \ln \left(\frac{W_p(E, V)}{W_0(E, V)} \right) > 0$ car le nb de p-états augmente quand on passe de $V_0 \rightarrow V$.

S'il ya ergodicité : pas de vague d'irréversibilité.

Espace des états séparé entre { "Ordain" (Est droit) }
"Disordain" (Est droit $\downarrow \uparrow$).

Q) Quel de temps faut-il attendre après ouverture du robinet pour qu'à un instant, les 10^{23} particules soient toutes à gauche dans V ?

→ Donc être lié à : $\frac{W_p(E, V)}{W_0(E, V)} = 2^{-N}$ avec $N = 10^{23}$

Tps + grand que l'éq de Maxwell ...

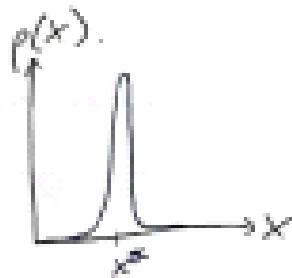
CLL, en pratique il y a donc irrév.

④ Valeur moyenne, valeur la + probable.

Imaginons comme par exemple $\begin{array}{|c|c|} \hline T_1 & T_2 \\ \hline \end{array}$, qui ait une distribution de prob.

$p(v) = \frac{W_p(E, V, v)}{W_{\text{tot.}}}$ et $\exp(S_p(E, V, v))$

En général (cas où points vibrent), ces probas sont très proches autour de la valeur la + probable x^* , telle que $\left. \frac{dp}{dx} \right|_{x^*} = 0$



STATAT \Rightarrow

$$\Rightarrow \langle x \rangle \approx x^0$$

Chap. 4 - Ensemble Canonique.

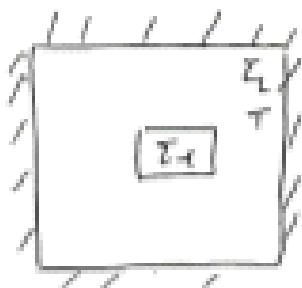
I. Distribut° canonique.

① Intro

(N, V, T) fixes en canonique.

On a un système Σ_1 qu'on va isoler, il a N_1 particules et un vol. V_1 . Σ_1 est en contact avec $\Sigma_2 =$ réservoir d'entropie à T est (thermostat).

On suppose Σ_2 bien + grand que Σ_1 , à T est, et $\Sigma_1 \ll \Sigma_2$.



$\Sigma_1 + \Sigma_2 \in$ ensemble p-can, énergie totale E .

Σ_2 thermostat $\approx \begin{cases} N_2 \text{ LCA} \\ \text{Teste} \end{cases}$

$\left\{ \begin{array}{l} E_2 \gg E \\ L_2 \gg L_1 \end{array} \right.$

② Distribution de proba $f(\vec{q}_1, \vec{p}_1)$

Soit C_1 une configuration de Σ_1 : $C_1 = (\vec{q}_{11}, \vec{p}_{11})$
(partie de Σ_1)

On cherche $f_1(C_1)$.

$$f_1(C_1) = \frac{w_1(E, N_1, C_1)}{\text{nb total de points}} = \frac{w_1(C_1)}{V_{\text{tot}}(E)}$$

"prob. que"

Σ_1 soit en C_1 (Δ ou la conf. réalisant "prob" et "max de prob" i.e. distribution unique réalisant le stat.)

plan de Σ_1 constant par tout : son rôle va dépendre des sites q.

Chapitre 4: Ensemble Canonique

vendredi 22 novembre 2024 13:23

$$p(c_i) \propto \exp \left\{ \frac{1}{kT} \underbrace{\left(\langle E_i \rangle - T \langle S_i \rangle \langle \langle E_i \rangle \right)}_{\text{type energie libre}} \right\} \exp(-\beta H_i(c_i))$$

$$c_i = (\vec{q}_i^{(i)}, \vec{p}_i^{(i)})$$

3. Conclusion :

① Distribution de probabilité $p(\vec{q}_i, \vec{p}_i) \propto \exp(-\beta H(\vec{q}_i, \vec{p}_i))$

② Fonction de partition canonique:

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N!} \int \frac{d\Gamma}{h^{VN}} e^{-\beta H(\vec{q}, \vec{p})}$$

g: indiscernabilité

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Q_N(V, T)} \frac{1}{N!} \int \frac{d\Gamma}{h^{VN}} e^{-\beta H(\vec{q}, \vec{p})} A(\vec{q}, \vec{p})$$

③ Thermo statistique (\Leftrightarrow une relation qui relie la thermo à la stat)

en microcanonique : $S(E, V, N) = k_B \ln W_0(E, V)$

en canonique : $F_{\text{canonique}}(T, V, N) = -k_B T \ln Q_N(V, T)$

↑ énergie libre canonique.

II. Propriétés de la distribution canonique

1. Énergie interne et fluctuations

• L'énergie du système n'est pas fixée.

$$U = \langle H \rangle$$

• Calcul d'une valeur moyenne

Dans 88,3% des cas, une valeur moyenne dans ensembles canoniques et grand canoniques se calcule en pratique en prenant la bonne dérivée

Observation :

$$\partial_p e^{-\beta H} = -H e^{-\beta H}$$

$$-\partial_p \ln Q_N(V, T) = -\frac{1}{Q_N(V, T)} \partial_p Q_N(V, T)$$

$$\begin{aligned}
 -\partial_p \ln Q_N(V, T) &= -\frac{1}{Q_N(V, T)} \partial_p \ln Q_N(V, T) \\
 &= -\frac{1}{Q_N(V, T)} \frac{1}{N!} \int \frac{d^N}{h^{NV}} \exp(-\beta H(\vec{q}_i, \vec{p}_i)) (-H(\vec{q}_i, \vec{p}_i)) = \langle H \rangle
 \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle H \rangle = -\partial_p \ln Q_N(V, T)}$$

Fluctuations:

implique de calculer $\langle H^2 \rangle$

$$\langle H \rangle^2 - \langle H^2 \rangle = \left(\frac{\partial U}{\partial p} \right)_{V, N} = -k_B T^2 \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V, N} \quad \text{et} \quad C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V, N}$$

$$\Rightarrow \boxed{\left| \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{\langle H \rangle^2} = \frac{k_B T^2 C_V}{U^2} \right|}$$

Pour des systèmes extensifs, $U \sim N$
 $C_V \sim N$

Fluctuations en énergie sont de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{N}}$

2. Somme sur Etats / Somme sur Energies

$$Q_N(V, T) = \sum_i \exp(-\beta E_i) \quad \text{résumé}$$

Réorganiser cette somme sur états en une somme sur l'énergie

$$Q_N(V, T) = \sum_E \exp(-\beta E) W_N(E, N) \quad \text{et} \quad S_{\text{micro}}(E, V, N) = k_B \ln |W_N(E, V)|$$

$$\begin{aligned}
 Q_N(V, T) &= \sum_E \exp(-\beta F^*(E, V, N)) \\
 &= \sum_E \exp(-\beta F^*(E, V, N))
 \end{aligned}$$

$$\text{avec } F^*(E, V, N) = E - T S_{\text{micro}}(E, V, N)$$

$$F_{\text{canonique}}(T, V, N) = -k_B T \ln Q_N(V, T)$$

3. Équivalence entre les ensembles

Sauf contre-exemple (point critique), les fluctuations de V sont très très faibles

Système en contact avec un thermostat $\rightarrow F_{\text{cano}}(T, V, N)$

$$\hookrightarrow V = \langle H \rangle \equiv E_0 \quad \text{qui varie très peu}$$

\hookrightarrow Tout se passe comme si le système agit comme un ensemble microcanonique (E_0, V, N)

$V = \langle H \rangle \equiv E_0$ qui varie avec T
 \Rightarrow Tout se passe comme si le système agit comme un ensemble microcanonique (E_0, V, N)

→ Thermo

$$S_{\text{micro}}(E_0, V, N) \rightarrow F_{\text{micro}}(E_0, V, N) = E_0 - TS_0(E, V, N)$$

Equivaut à l'ensemble si

$$F_{\text{cano}}(T, V, N) = F_{\text{micro}}(T, V, N)$$

On va montrer que plus précisément

$$\frac{F_{\text{cano}}(T, V, N)}{N} = \frac{F_{\text{micro}}(T, V, N)}{N} \quad \text{à la limite thermique} \quad \left| \begin{array}{l} N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty \\ \frac{N}{V} \rightarrow 0 \end{array} \right.$$

Et? → on cherche le maximum de $\exp(-\beta F^*(E, V, N))$

$$F^*(E, V, N) = E - TS_{\text{micro}}(E, V, N)$$

$$E_0 \sim E^*$$

$$E_0 / \left. \frac{1}{T} \left(1 - T \left(\frac{\partial S_{\text{micro}}(E, V, N)}{\partial E} \right) \right) \right|_{E=E_0} = 0$$

$$E_0 / \frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S_{\text{micro}}(E, V, N)}{\partial E} \right) (E = E_0, V, N)$$

$$E_0 - TS_{\text{micro}}(E, V, N) = E_0 - TS_{\text{micro}} - \frac{1}{2} (E - E_0)^2 \frac{\partial^2 S_{\text{micro}}(E = E_0, V, N)}{\partial E^2}$$

$$\exp(-\beta F^*) \approx \exp(-\beta (E_0 - TS_{\text{micro}}(E_0, V, N))) \exp\left(\frac{(E - E_0)^2}{2k_B} \left(\frac{\partial^2 S_{\text{micro}}}{\partial E^2}\right)(E_0)\right)$$

$$Q_N(V, T) \approx \exp(-\beta (E_0 - TS_{\text{micro}}(E_0, V, N))) \int_{-\infty}^{\infty} dE \exp\left(\frac{(E - E_0)^2}{2k_B} \left(\frac{\partial^2 S_{\text{micro}}}{\partial E^2}\right)(E_0)\right)$$

\downarrow

$$\sqrt{\frac{\partial^2 S_{\text{micro}}}{\partial E^2}(E_0, V, N)}$$

$$F_{\text{cano}}(T, V, N) = F_{\text{micro}}(E_0, V, N) + \text{correct. as} \quad \rightarrow \text{extensivité} \sim \ln N \quad (\text{ici l'extensivité est essentielle})$$

$$\text{d'où } \frac{F_{\text{can}}}{N} = \frac{F_{\text{micro}}}{N} + \frac{\ln N}{N} \Rightarrow \text{équivalence à la limite thermodynamique} \rightarrow \text{ce comprend aussi en regardant les facteurs de houle } \frac{1}{\hbar^3} \text{ dans } \frac{1}{N!} \text{ donc négligeable.}$$

III - Remarques

1. Gaz parfait

particules sans interactions

Dans 38.9% des cas. Calcul Fonction de partition d'un système.
entre ses constituants Réfexe = Fonction de partition de factorisé
sans interaction

$$Q_N(V, T) = \frac{1}{N!} q^{3N} \quad \text{où } q = \int \frac{d\sigma dp}{h} \exp\left(-\beta \frac{p^2}{2m}\right)$$

q^3 : fonction de partition pour 1 atome
degré de liberté.

$$q = \boxed{Q_N(V, T) = \frac{V^N}{N! \lambda^{3N}}} \quad \text{avec} \quad \boxed{\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}}$$

$$\rightarrow \text{Thermodynamique GP. } U = \langle H \rangle = -\partial_{\beta} \ln Q_N$$

2. Équipartition de l'énergie

Pour 1 Hamiltonien g_0 est la somme de termes quadratiques indépendants
(variables continues)

$$\text{Ex GP monoatomique } H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m}$$

Oscillateur harmonique :

on calcule la valeur moyenne d'un terme quadratique

$$\text{GP: } \left\langle \frac{\vec{p}^2}{2m} \right\rangle \text{ avec distribution proba gaussienne } \exp\left(-\frac{\beta \vec{p}^2}{2m}\right)$$

chaque terme quadratique indépendant pour 1 tel Hamiltonien contribue en $\frac{1}{2} k_B T$ à $U = \langle H \rangle$

$$\text{Ex GP monoatomique } U = \langle H \rangle = (\beta N) \times \left(\frac{1}{2} k_B T\right)$$

$$\rightarrow U(T, V, N) = \frac{3}{2} N k_B T$$

Chapitre 5 : Ensemble Grand Canonique.

vendredi 22 novembre 2024 14:37

Ensemble (T, V, μ) $N = \text{nb de particules}$

$(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \in \text{Ensemble microcanonique}$
↓
réserveur de particules et de température $\langle N_i \rangle \ll N$

I. Distribution Grand Canonique

$P_1(N_1, c_1)$?

c_1 ensemble des (q_i^{\pm}, p_i^{\pm}) quand ε_1 a N_1 particules

$$P_{11}(N_1, c_1) = \frac{W_e(N - N_1, E - H_1(c_1))}{W_{\text{rot}}(E, N)}$$

$$= \frac{W_e(N - N_1, E - E_1)}{W_{\text{rot}}(E, N)}$$

$$\approx \exp \left(\frac{1}{k} \left[-S_1(\langle E_1 \rangle, \langle N_1 \rangle) + \frac{\langle E_1 \rangle}{T} - \mu \frac{\langle N_1 \rangle}{T} - \frac{E_1}{T} + \frac{N_1 \mu}{T} \right] \right)$$

$$\Rightarrow \textcircled{1} \boxed{P(N, c) \propto \exp(-\beta H(q_i^{\pm}, p_i^{\pm}) + \beta \mu N)}$$

② Grande Fonction de Partition

$$f = e^{\beta \mu} = \text{Fugacité}$$

$$\boxed{- \left(\mu, T, V \right) = \sum_{N=0}^{\infty} f^N Q_N(T, V)}$$

$$\boxed{\textcircled{3} \left\langle A \right\rangle = \frac{1}{f} \sum_{N=0}^{\infty} f^N \int \frac{dM}{h^{VN!}} A(q_i^{\pm}, p_i^{\pm}) \exp(-\beta H(q_i^{\pm}, p_i^{\pm}) + \beta \mu N)}$$

Stat

Stat

⑨ Thermo
 grand potentiel $\Omega(\mu, T, V) = k_B T \ln \Xi(\mu, T, V)$
 \downarrow
 $\rightarrow -PV$

2 - Propriétés

Variables : μ, T, V et γ, T, V

Une relation très importante à calculer dans l'ensemble grand canonique c'est $\langle N \rangle$

$$\text{❸} \quad \boxed{\langle N \rangle = \gamma \frac{\partial \gamma}{\partial \gamma} \ln \Xi} \quad \rightarrow \langle N \rangle(\gamma, T, V) \text{ de } \langle N \rangle(\mu, T, V)$$

Ex de l'importance de cette relation

$$\Omega = -PV = -k_B T \ln \Xi \Rightarrow P(z, T, V) \text{ ou } P(\mu, T, V)$$

❹ donne relation entre $\langle N \rangle$ et (z, T, V)

P en fonction de $\begin{cases} z \\ T \\ V \end{cases}$

z la fugacité ça parle pas vraiment physique
 $\langle N \rangle$ ai...

$$\boxed{U = - \left(\frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi \right)_{z, N}} \quad \text{on veut faire descendre le H}$$

$$\text{Ex GP} \quad \boxed{\Xi = \exp \left(\frac{zV}{T^3} \right)}$$

Chapitre 6: Statistique Quantique

vendredi 22 novembre 2024 14:56

I- Principes statistiques quantiques ✓ vrai: honneur avec = matrice densité

Moyenne quantique:

Base orthonormée $\{|\psi_i\rangle\}$ si système dans état $|\psi\rangle$

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{int.}} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

Moyenne statistique:

Proba P_i d'être dans l'état $|\psi_i\rangle$

$$\text{Moy stat } \langle \hat{A} \rangle = \sum_i P_i \langle \hat{A} \rangle_{\text{int.}}$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i P_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle$$

Postulat d'équiprobabilité

Ensemble micro (N, V, E)

Base propre orthonormée de H $\{|\psi_i\rangle\}$ $\hat{f}_i |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle$

$W(E) = \text{Nombre d'états propres dont l'énergie vaut } E$

(caprice entre E et $E+dE$ à l'oral \rightarrow chpt d'rotation -?)

$$P_i = \begin{cases} \frac{1}{W(E)} & \text{si } E_i = E \quad (\text{+ } \delta E \text{ près}) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

\rightarrow base privilégié en TQ
 \hookrightarrow base propre \rightarrow guide de réf?

Ens canonique

$$Q_N(V, T) = \sum_i \exp(-\beta E_i)$$

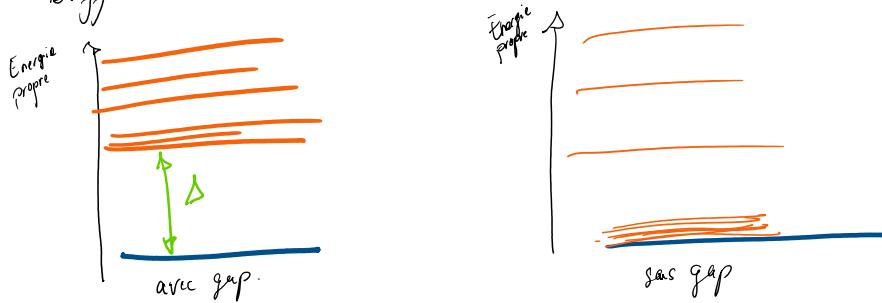
$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Q_N(V, T)} \sum_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle e^{-\beta E_i}$$

Remarque importante:

$$C_V = \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{V, N} \quad \text{et} \quad V = \langle \hat{f}_1 \rangle$$

Tz. Différence entre 2 types de spectre pour \hat{f}_1

Difference entre 2 types de spectre pour H



- fondamental de H

1^{er} état excité (continues et/ou discrets)

$\Delta = \text{gap entre la valeur de l'énergie pour fondamental et la valeur de l'énergie pour le 1^{er} état excité}$

Dans cas où \exists gap, quel est le comportement de C_V à très basse T ?

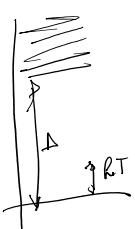
$T=0$ $e^{-\beta E_i} \rightarrow$ Syst $T=0$ est dans l'état de plus basse énergie.

$T \neq 0$ très petite

C_V ? $\partial_T U$

Température $T \rightarrow$ thermostat qui fournit une énergie typique de l'ordre de $k_B T$ au système

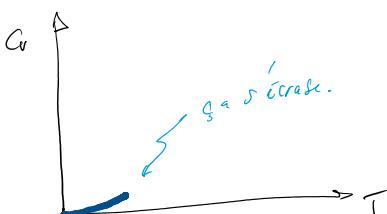
Si $k_B T \ll \Delta$, on ne fournit pas assez d'énergie pour exciter le système.

 \Rightarrow reste dans l'état fondamental \Rightarrow énergie ne varie pas
 $\Rightarrow C_V = \partial_T U$ doit être quasiment nul.

mais ici on a négligé les fluctuations quantiques et statistiques.

en général pour un système avec gap, le comportement auxquel on s'attend

$$C_V \propto \exp(-\beta \Delta) \quad k_B T \ll \Delta$$



3^e Troisième principe

$T=0$ Syst dans l'état de plus basse énergie mais il pourrait y avoir une dégénérescence
 g_0 : dégénérescence de l'énergie la plus basse

$$S = k_B \ln g_0$$

Donc en général g_0 petit $\rightarrow S \approx 0$

Mais si $g_0 \sim \exp(N) \rightarrow \underline{\underline{S \neq 0}}$

II. Gaz parfait quantique

$$N \text{ atomes} \quad \hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i \quad \text{avec} \quad \hat{h}_i = \frac{p_i^2}{2m}$$

1. Statistique de Bose-Einstein et de Fermi-Dirac

Description des états propres en termes nb d'occupations $\{n_\alpha\}$ des états propres $|\alpha\rangle$ à 1 corps

$$\text{avec } \sum_\alpha n_\alpha = N$$

$$(N, V, T) : \text{Ens canonique} \quad Q_N(V, T) = \sum_{\{n_\alpha\} / \sum_\alpha n_\alpha = N} \exp(-\beta E(\{n_\alpha\}))$$

$$\text{On a } E(\{n_\alpha\}) = \sum_\alpha n_\alpha E_\alpha \text{ avec } E_\alpha \text{ l'énergie propre de } |\alpha\rangle$$

À cause de contrainte $\sum_\alpha n_\alpha = N$, pas d'expression exacte de $Q_N(V, T)$
 \Rightarrow s'affranchir de $\sum_\alpha n_\alpha = N$? \Rightarrow on passe en grand canonique.

$$(\mu, V, T) \quad \boxed{\Xi}(\mu, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_\alpha\}}^N Q_N(V, T) \quad \{j\} = \text{fugacité} = e^{\beta \mu}$$

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_\alpha\} / \sum_\alpha n_\alpha = N} j^{\sum_\alpha n_\alpha} \exp\left(-\beta \sum_\alpha n_\alpha E_\alpha\right) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_\alpha\} / \sum_\alpha n_\alpha = N} \prod_\alpha \left(j e^{-\beta E_\alpha}\right)^{n_\alpha} = \sum_{\{n_\alpha\}} \prod_\alpha \left(z e^{-\beta E_\alpha}\right)^{n_\alpha} \xrightarrow{\text{se factorise}} \end{aligned}$$

exemple:

$$\sum_{n_1, n_2} (A_1^{n_1} A_2^{n_2}) = \underbrace{\left(1 + A_2 + A_2^2 + \dots\right)}_{P} + A_1 \underbrace{\left(1 + A_2 + A_2^2 + \dots\right)}_{n_1=1} + A_1^2 \left(\dots\right)$$

$$= (1 + A_1 + \dots)(1 + A_2 + \dots) \Rightarrow \sum \Pi = \Pi \sum$$

$$\Rightarrow \boxed{\Xi} = \prod_\alpha \sum_{n_\alpha} \left(z e^{-\beta E_\alpha}\right)^{n_\alpha}$$

cas des Bosons

Rappel $\langle z \rangle$ éventuellement un multi-index est propre unique de Hamiltonien à 1 corps $n_\alpha = 0, 1, \dots$

$$\boxed{\sum} = \prod_{\alpha} \sum_{n_\alpha=0}^{\infty} \left(z e^{-\beta E_\alpha} \right)^{n_\alpha}$$

$$\boxed{\sum} = \prod_{\alpha} \frac{1}{1 - z e^{-\beta E_\alpha}}$$

cas des Fermions

$n_\alpha = 0, 1$ principe de Pauli

$$\boxed{\sum} = \prod_{\alpha} \sum_{n_\alpha=0}^{\infty} \left(z e^{-\beta E_\alpha} \right)^{n_\alpha}$$

$$\boxed{\sum} = \prod_{\alpha} \left(1 + z e^{-\beta E_\alpha} \right)$$

2. Nombre moyen d'occupations

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{\sum} \sum_{n_\alpha=0}^{\infty} z^n \sum_{\substack{\text{énergies} \\ \text{éteintes}}} \left\{ n_\alpha \exp(\beta \epsilon_n) \right\}$$

$$= -kT \partial_{E_\alpha} \ln \boxed{\sum}$$

Résultat: Bosons: statistique de Bose-Einstein

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{\exp(\beta(E_\alpha - \mu)) - 1}$$

Fermions: stat de Fermi-Dirac

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{\exp(\beta(E_\alpha - \mu)) + 1}$$

Rappel Fermions on a $\langle n_\alpha \rangle \leq 1$

première quantité à calculer (par ensemble gd canope) $\langle N \rangle$!

$$\langle N \rangle (\mu, T, V) = \sum_{\alpha} \langle n_\alpha \rangle$$

On a aussi: $\langle E \rangle = \sum_{\alpha} \langle n_\alpha \rangle E_\alpha$

$$\boxed{N(E) = \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{1}{z}} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} C = +1 & \text{Bosons} \\ C = -1 & \text{Fermions} \end{cases}}$$

Où on a aussi

$$n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \beta = +1 & \text{Bosons} \\ \beta = -1 & \text{Fermions} \end{cases}$$

Rappel: \leftarrow Densité en énergie propre $D(E, V, S)$

$$\langle N \rangle = \int dE D(E, V, S) n(\epsilon) \quad \text{et} \quad \langle \epsilon \rangle = \int dE D(E, V, S) n(\epsilon) E$$

$$D(E, V, S) = (2s+1) \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E}$$

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty \frac{(2s+1)}{h^3} 2\pi V (2m)^{3/2} \frac{\sqrt{E} dE}{e^{\beta(E-\mu)} - 1} \quad X = \beta E$$

$$\hookrightarrow \rho \equiv \frac{\langle N \rangle}{V}$$

$$\rho(\mu, T) \Delta^3(T) = \frac{(2s+1)^2}{8\pi T} \int_0^\infty d\alpha \frac{\sqrt{\alpha}}{e^{\alpha - \beta \mu} - 1}$$

Cette équation fait le lien entre densité (moyenne) et fugacité.

$$\alpha = \rho^{-1/3}$$

$$\left(\frac{1}{\alpha} \right)^3 = \frac{(2s+1)^2}{8\pi T} \int d\alpha \frac{\sqrt{\alpha}}{e^{\alpha - \beta \mu} - 1}$$

$$\Omega(\mu, V, T) = -k_B T \ln \Xi \quad \text{avec} \quad \Xi = \prod_{\epsilon} \left(1 - e^{-\beta E_\epsilon} \right)^{-1}$$

$$= k_B T C \int_0^\infty dE D(E, V, S) \ln \left(1 - e^{-\beta E} \right)$$

III Limites classiques

1. Limite de faible fugacité

Si $\alpha \equiv e^{\beta \mu} \ll 1$

$$\int_0^\infty d\alpha \frac{\sqrt{\alpha}}{e^{-\alpha} - 1} \sim \alpha \int_0^\infty d\alpha \sqrt{\alpha} e^{-\alpha} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^2 \ll 1$$

$$\rightarrow \alpha \ll 1 \Leftrightarrow \rho \Delta^3(T) \ll 1$$

2. Calcul

$$\Omega(\mu, V, T) = \alpha k_B T \int_0^\infty dE D(E, V, S) \left(-e^{-\beta E} \right)$$

$$n(1, V, T) = -k_B T^2 \int_0^\infty dE D(E, V, S) e^{-\beta E}$$

$$\Omega(\mu, V, T) = -kT^2 \int_0^\infty dE D(E, N, S) e^{-\beta E}$$

calcul classique.

$$= -kT^2 e^{(2S+1)} \frac{V}{h^3} = -kT \ln \Xi$$

$$\Rightarrow \Xi = \exp \left(\frac{-V(2S+1)}{kT} \right)$$

→ résultat de la 1^{re} loi de partition du GP classique.

Dans la limite $S \ll 1$ on retrouve le résultat de la 1^{re} loi de partition du GP classique.

3- Qualitatif et discussion

$$Z \ll 1 \Leftrightarrow \int \lambda^3(T) \ll 1 \text{ avec } \lambda(T) = \frac{\hbar}{2\pi m k_B T}$$

$Z \ll 1$ Densité suffisamment faible ou température suffisamment élevée.

$Z \ll 1$ Densité suffisamment faible ou température suffisamment élevée.

Sur Limite GP où on néglige les interactions → suppose déjà que l'est pas important

Vrai critique = T.

$$Z \ll 1 \Leftrightarrow g \lambda^3 \ll 1 \Leftrightarrow \left(\frac{1}{a} \right)^3 \ll 1$$

Densité $g \rightarrow a = \frac{\lambda^3}{2\pi} \rightarrow$ représente la distance moyenne entre les particules/atomes.

$\lambda(T)$?

T → énergie typique de l'onde de RT

→ énergie de RT

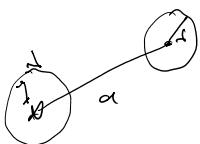
$\frac{p^2}{2m}$ typique de RT

$p^2 \rightarrow d \sim \sqrt{2mRT}$

$$p = \hbar k = \frac{\hbar}{\lambda} \Rightarrow \lambda_{typique} = \text{longueur de de Broglie [particule/onde]}$$

$\left(\frac{1}{a} \right)^3 \ll 1 \Rightarrow$ On peut négliger les effets des interférences quantiques

→ limite classique valide.



Exemple: On cherche l'effet inverse de condition pour lesquelles il faut stat quantique

[Balan] → ref cours école polytechnique

$$\text{Cond ordinaires } V = 22.6 \text{ l}, N = 10^{23}, a = 33 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$\text{O}_2: \lambda(T) = 0.2 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad g \lambda^3 = 10^{-7} \ll 1$$

→ On baisse à 1K $10^{-7} \rightarrow 10^{-4} \ll 1 \rightarrow$ pas classique

2) Atomes plus légers (H_2) → on gagne un facteur 60 → pas pas bon.

3) Masse si densité croît (Δ plus grosse!)

2) Hâves plus régulieres
3) Il existe une densité critique (Δ phase gazeuse !)

↳ Helium : ^3He , ^4He $T < 10\text{K}$.

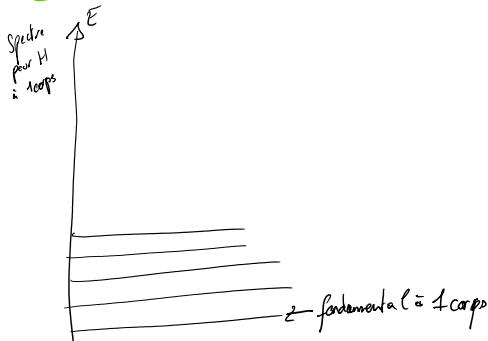
Chapitre 7: Fermion à Basse température.

mardi 26 novembre 2024 14:36

$$e^- : S = \frac{1}{2} \quad g_e = 2$$

I - Température nulle

1. Etude canonique ($N, V, T=0$)



Poids $e^{-\beta E}$ mais $\beta \rightarrow \infty$
 ↳ seul l'état de plus basse énergie (pour $H \approx N$ corps) est occupé
 à quoi correspond-il ?

E_F : énergie propre du dernier état 1D occupé

$$N = \int_0^{E_F} dE D(E, V, S=1) \quad \text{et} \quad U = \int_0^{E_F} dE D(E, V, S) E$$

$$F = U - TS \quad \left|_{T=0} \right. \quad \beta = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T=0} = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S=0}$$

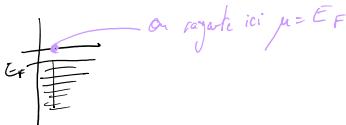
$$\text{et } \mu = \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{T=0, V} \quad \boxed{E_F = (\beta \pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{8m} \beta^{2/3}} \quad \ell = \frac{N}{V}$$

$$\boxed{U = \frac{3}{5} N E_F} \quad \boxed{\beta = \frac{2}{3} \frac{U}{V}} \quad (\text{à } T=0).$$

$$\boxed{\mu = E_F}$$

Remarque: $\partial/\partial \mu = (\partial U)/(\partial N)_{T=0, V}$ μ = énergie à fournir pour rajouter 1 particule i — constante (ici V)

Pour rajouter 1*i* à $T=0$



② Contrairement au GP de Bosons à $T=0$ où les N -bosons sont dans état $|p=0\rangle$

Fermions à $T=0K$, faux d'imager que les mouvements sont gelés

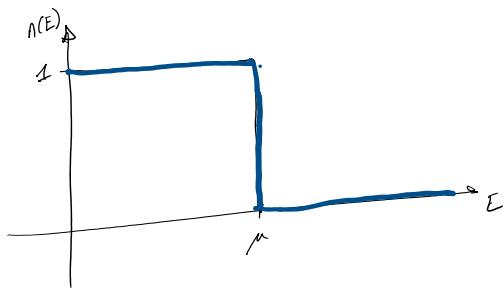
Fermions à $T=0K$, faux d'imager que les mouvements sont gelés
 par exemple les e^- qui sont juste au niveau de Fermi ont une impulsion $p_F \neq 0$ / $E_F = \frac{p_F^2}{2m}$

2. Ensemble grand canonique ($\mu, V, T=0$)

$$1 - e^{-\mu/kT} \quad \frac{1}{e^{-\mu/kT}}$$

2. Ensemble grand canonique ($\mu, V, T = 0$)

$$\text{Stat de F.D. } n(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1} \quad \text{à } T=0$$



rester éliminer μ en faveur de $\langle N \rangle$

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty dE D(E, V, S=\frac{1}{2}) n(E, T=0)$$

$$= \int_0^{\mu} dE D(E, V, S=\frac{1}{2})$$

On voit donc que la relation du G^o canonique entre $\langle N \rangle$ et μ est la même que celle du canonique entre N et E_F

$$\text{On retrouve la relation avec des canons } \mu = E_F \text{ avec } \int = \langle N \rangle \text{ et } E_F = (3\pi^2)^{1/3} \frac{\hbar^2}{2m} l^{2/3}$$

Remarques: Important à retenir: comportement GP quantique de Fermions à $T=0$ K et
à T très faible" est dicté par le principe de Pauli.

p_F = moment de Fermi:

$$E_F = p_B T_F \quad T_F = \text{Température de Fermi}$$

$p_F = m v_F = \text{Vitesse de Fermi}$

$$\text{à l'heure actuelle } T_F = 80 \text{ 000 K} \quad v_F = 1500 \text{ km/s}$$

II. Températures "très faibles".

$$T \ll T_F ? \quad \int \lambda^3(T) = \frac{2(2\pi l)^3}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^x + 1}$$

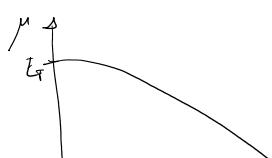
$$T_F(l) \quad \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^x + 1} = \frac{2}{3} \left(\frac{T_F}{T}\right)^{3/2}$$

↓ à gauche, fonction croissante de μ
vision canonique $\Rightarrow \mu$ décroît avec T

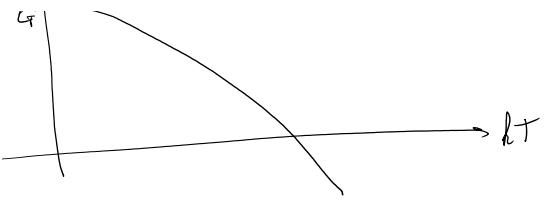
↓ $T \gg T_F \quad z^3 \rightarrow \infty \quad z \ll 1 \rightarrow \text{limite classique.}$

↓ $T \ll T_F \quad z^3 \rightarrow 0$

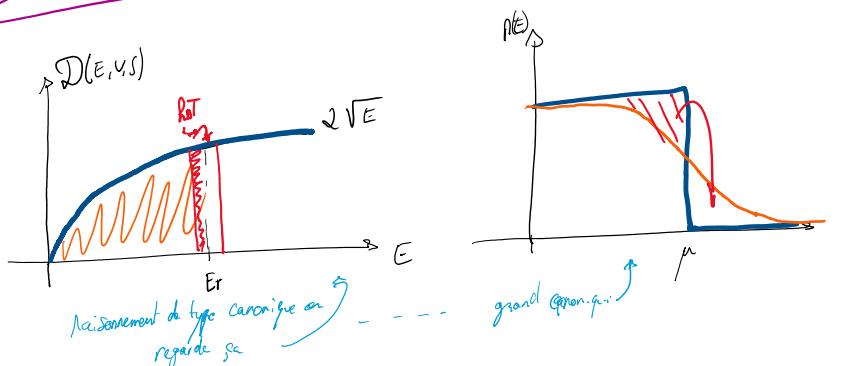
↳ on se concentre à $T \ll T_F$



$$\text{à } \text{cu } T_F = 80 \text{ 000 K} \\ \text{b) on est dans un régime } T \ll T_F$$



III - Raisonnement qualitatif pour $C_V \propto T \ll T_F$



$T = 0 \text{ K}$

$T \ll T_F$

$$n(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \quad \text{à } T \ll T_F$$

Temp $T \rightarrow$ énergie typique kT Thermostat est "disponible" pour donner kT à des électrons ?

↳ uniquement possible aux électrons propres du niveau de Fermi.
↳ excitations partielles / trou.

\Rightarrow La physique de passe au niveau de Fermi à $T \ll T_F$

À combien d'électrons ? Thermostat donne kT ?

Réponse : $D(E_F, V, S=1/e)$ = densité en énergie propre.

$$\hookrightarrow \sim D(E_F, V, S=1/e) \delta E \sim D(E_F, V, S=1/e) kT.$$

C_V ? De combien varie V quand on branche $T \neq 0$?

Réponse = $(nb \text{ d'électrons}) \times (\text{énergie donnée à } 1e)$

$$\propto D(E_F, V, S=1/e) (kT) \times (kT) \propto T^2$$

$C_V = \frac{dU}{dT}$ est donc linéaire en T

[La chaleur spécifique d'un GP de fermions à $T \ll T_F$ évolue linéairement en T]

IV - Quantitatif

Si on montre ...

$$n(E) \sim \Theta(\mu - E) - \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \int' (E - \mu)$$

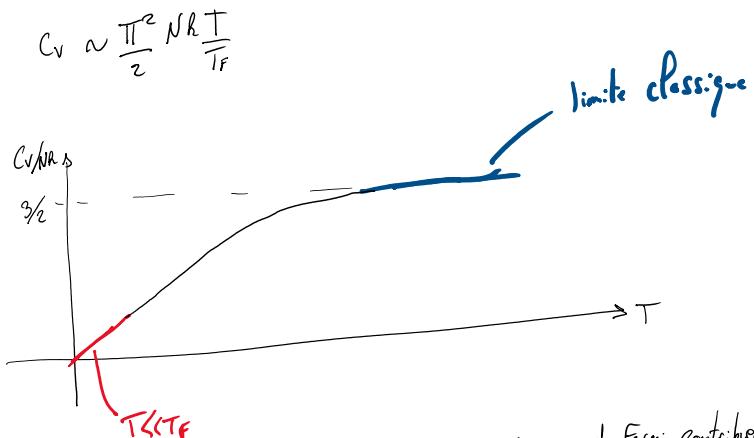
/ théorie

dérivé de $S(E_F)$

$$\Rightarrow \mu(T) = E_F - \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{D'(E_F, V, S=1/e)}{D(E_F, V, S=1/e)}$$

$$\Rightarrow \mu(T) = E_F - \frac{\pi^2}{6} \left(kT \right)^2 \frac{D(E_F, V, S=k)}{D(E_F, V, S=k)}$$

$$M \sim \frac{3}{5} N E_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right)$$



à cause du principe de Pauli les états au voisinage du niveau de Fermi contribuent à C_V .
 → à haute T les états sont établis dans le état, si on donne kT ya suffisamment d'état libre autour des ϵ que on

Chapitre 8: Condensation de Bose-Einstein

jeudi 28 novembre 2024 15:45

Effets quantiques $\xrightarrow{GP} \rho$ faibles

Nous effets quantique \neq élevés, HT $\Rightarrow T_{\text{basse}}$

I - Température de transition

$$\text{Boson spin } 0 : \rho(\mu, T) \lambda^3(T) = \frac{e}{\pi^2} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^{-\frac{x}{T}} - 1} = g_{3/2}(z)$$

$$\textcircled{2} \quad \langle n_0 \rangle = n(E_0) = \frac{1}{e^{(E_0 - \mu)/kT} - 1}$$

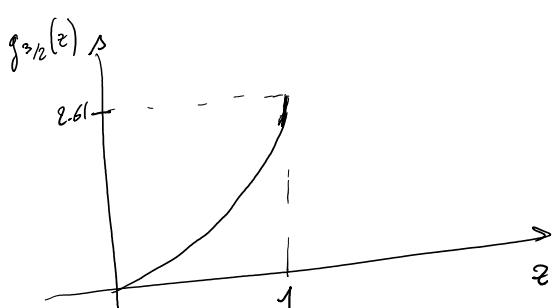
(2) Pour l'énergie la plus basse $E_0 = 0$

$$\langle n_0 \rangle = \frac{1}{e^{E_0/kT} - 1} = \frac{1}{e^{0/kT} - 1} = \frac{1}{1 - 1} > 0$$

$$\Rightarrow z \in [0, 1[\text{ et } \mu < 0$$

$$\text{et } \mu \rightarrow 0, z \rightarrow 1 \Rightarrow \langle n_0 \rangle \rightarrow \infty$$

On regarde $\rho(\mu, T)$ pour $\mu \leq 0$



$\Rightarrow \rho(\mu, T) \lambda^3(T) \leq g_{3/2}(1)$

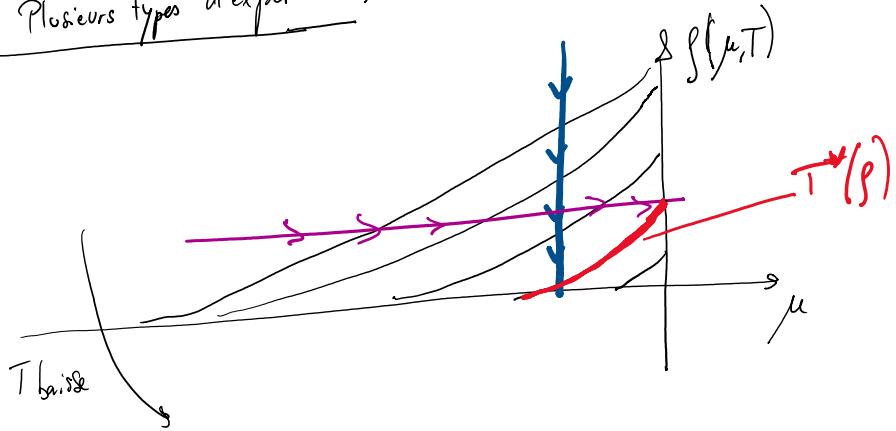
chacune se montre.
Fonction croissante
de μ et de T

$$\rho(\mu, T) \lambda^3(T) \leq g_{3/2}(1)$$

Plusieurs types d'expérience :

$$|\delta \rho(\mu, T)|$$

Plusieurs types d'expérience :



① μ fixée, Baisse T β diminue. Pas de problème.

② β fixée, Baisse T On n'arrive pas à atteindre les températures $T < T^*(\beta)$ caractérisée par $\mu = 0$, $z = 1$

A normal !

$$\rightarrow \rho(\mu, T^*) \Delta^3(T^*) = g_{3/2}(1)$$

$$T^*(\beta) = \frac{\hbar^2 \beta^{2/3}}{2\pi m k (g_{3/2}(1))^{2/3}}$$

$$T > T^* \quad \beta = \frac{1}{\Delta^3(T)} g_{3/2}(z)$$

$$T < T^* \quad ??$$

II. Condensation dans fondamental à 1 corps

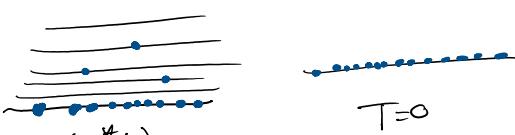
$$T \rightarrow T^* \quad \mu \rightarrow 0 \quad z \rightarrow 1 \quad \langle n_0 \rangle = \frac{z}{1-z} \approx -\frac{\hbar T^*}{\mu} \rightarrow \infty$$

Occupation macroscopique du fondamental à 1 corps

Bien sûr à $T=0$ tous les Bosons sont dans cet état fondamental à 1 corps

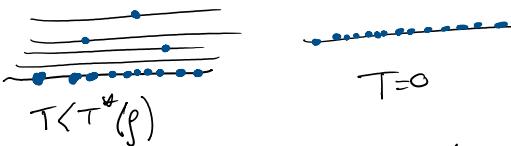
Ici $T^* \neq 0$.

$N = \langle n_0 \rangle$ Se convaincre :



$T \ll kT$

$N_0 = \langle n_0 \rangle$ Se convaincre :



& Comparaison entre N_0 et $\langle n_\alpha \rangle$ pour les états excités à 1 corps.

$$\langle N \rangle \geq N_0 \sim -\frac{hT}{\mu}$$

$$\frac{\langle N \rangle}{\sqrt{V}} \geq -\frac{hT}{\mu V}$$

Limite thermique : $\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty}} \frac{N}{V}$ finie $\Rightarrow \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty}} \left(-\frac{hT}{\mu V} \right)$ finie $= f_0 \equiv$ Densité dans l'état fondamental.

$$|\mu| \ll hT$$

$$\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{e^{(\beta(E_\alpha - \mu))} - 1} \leq \frac{1}{\beta E_\alpha} \quad \left\{ \begin{array}{l} \langle n_i \rangle \\ \end{array} \right.$$

$$E_1 = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{\sqrt{8m}} \quad (1er \text{ chapitre}).$$

$$\rightarrow \frac{\langle n_i \rangle}{N_0} \leq \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{\beta V^{1/3}} \left(-\frac{\mu V}{kT} \right) \quad \begin{array}{l} \text{limite} \\ \text{finie} \end{array}$$

$$\frac{\langle n_i \rangle}{N_0} \ll 1$$

\Rightarrow Occupation macroscopique de l'état fondamental à 1 corps

Conclusion : pour $0 < T \leq T^*(\beta)$ 2 phases

Condensat (Etat fondamental à 1 corps)
Très peu de particules dans autres états

III - Relation correcte pour β quand $T < T^*$

Problème : $\langle N \rangle = \sum_\alpha \langle n_\alpha \rangle \rightarrow \int_0^\infty dE D(E, V, S=0) n(E)$ pas bon !

Eg corrigé : $\langle N \rangle = \langle n_0 \rangle + \sum_{\text{d'état fond}} \langle n_\alpha \rangle$

$\langle \dots \rangle$ tend vers $\int_0^\infty dE D(E, V, S=0) n(E)$

$$\text{Eq corrigée: } \langle N \rangle = \langle n_0 \rangle + \sum_{\alpha \neq 0} \langle n_\alpha \rangle \xrightarrow{\text{tend vers}} \int_0^\infty dE D(E, V, S=0) n(E)$$

$$\Rightarrow \langle N \rangle = N_0 + \int_0^\infty dE D(E, V, S=0) n(E)$$

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{N_0}{V} + \frac{1}{V} \int_0^\infty dE D(E, V, S=0) n(E)$$

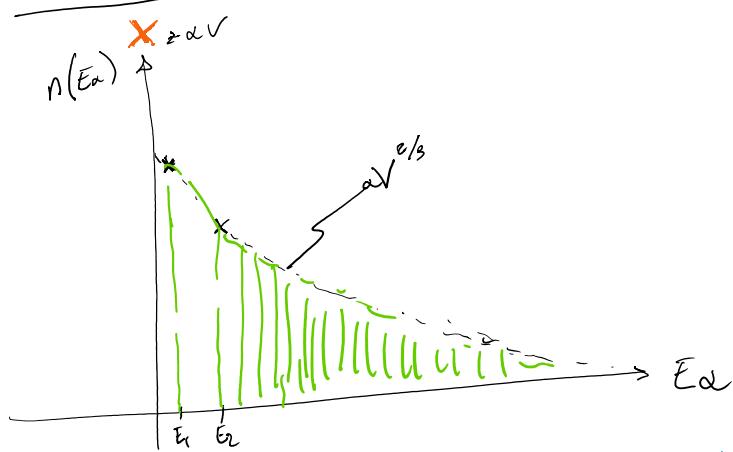
$$T \langle T^* \rangle_{\mu=0, \gamma=1} \quad \beta = \beta_0 + \frac{1}{\lambda^3(T)} g_{3/2}(1)$$

$$T^*(\beta) / \beta = \frac{1}{\lambda^3(T)} g_{3/2}(1)$$

$$\Rightarrow \beta_0 = \beta \left(1 - \left(\frac{T}{T^*} \right)^{3/2} \right)$$

dégénérescence de E_α
 $E_0 = 0 \quad g(E_0) = 1$
 $E_1 \quad g(E_1) = 6$
 \vdots

Discret $\langle N \rangle = \sum_{\alpha} n(E_{\alpha}) g(E_{\alpha})$



Limite continue $D(E, V, S=0) dE$

$$\boxed{g(E_0=0) = 1}$$

$$D(E=0, V, S=0) = 0$$

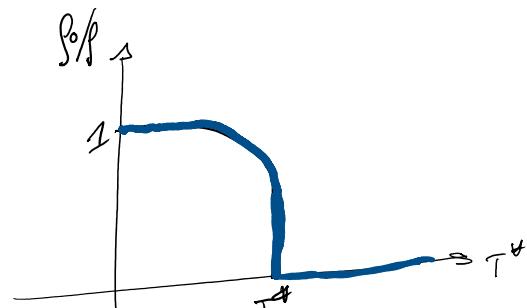
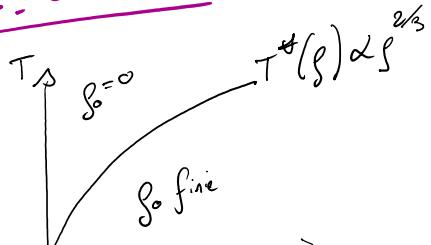
$$n(E_0) = N_0 = \beta_0 \quad \checkmark$$

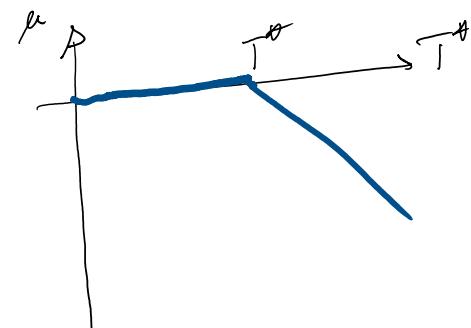
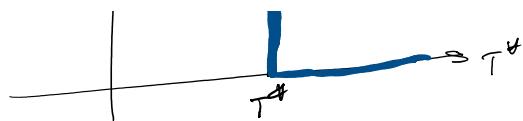
point singulier qui fait notre erreur à la limite continue.

$$n(E_0) \approx \frac{\beta_0}{V}$$

Exp petit

Discussion



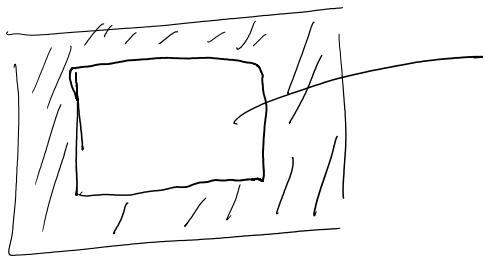


- Par rapport à une condensation "normale", ici condensation dans l'espace des impulsions i.e dans l'état $(\vec{p} = \vec{0})$
- Si $\beta \ll T^0$, $0 < T \leq T^*(\beta)$ toujours les 2 phases.
- Condensation / transition de phase pour 1 GP i.e sans interaction
- 1995: ^{87}Rb $T^* = 170 \text{ nK}$ $\beta = 2.5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$
Le cas où on pouvait négliger les interactions (^4He et ^3He avec interaction).

Chapitre 9: Photons

jeudi 28 novembre 2024 16:43

I - Gaz de photons à l'éq thermodynamique



Enceinte fermée, vide à la temp T

\Leftrightarrow courants produits par mouvements dus à l'agitation thermiques des particules chargées.
 \Rightarrow courants produits par mouvements dus à l'agitation thermiques des particules chargées.
 \Rightarrow champ électromagnétique à l'intérieur de l'enceinte et la paroi
 \Rightarrow champ électromagnétique à l'intérieur de l'enceinte

\Leftrightarrow Couplage faible entre gaz de photons à l'intérieur de l'enceinte et la paroi
 \hookrightarrow sans cesse Absorption/Emission de photons

\rightarrow Etats d'éq pour photons.

$\nabla A = 0$ solutions $A = \int d\vec{p} \vec{\xi}(\vec{p}) e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}}$ \leftarrow invariance de jauge
 & photons = Bosons, masse nulle, spin 1 \leftarrow 4-vector

$$\boxed{\nabla A = 0} \quad \text{solutions} \quad A = \int d\vec{p} \vec{\xi}(\vec{p}) e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \rightarrow \vec{\xi} \pm \vec{p}$$

$$\text{div } \vec{A} = 0$$

\Rightarrow (pour \vec{k} , $\epsilon = \pm 1 \leftarrow$ 2 états de polarisation)

Potentiel chimique nul

$\&$ Sans cesse Absorption/Emission de photons \Rightarrow nb de photons n'est pas conservé (mais $\mu = 0$?)

Arguments

- Utiliser langage des réactions chimiques
- Si on enlève particules de la paroi

$$\gamma \rightleftharpoons \text{Rich} \quad \sum_i \mu_i v_i = 0 \Rightarrow \mu = 0$$

$$n_1 n_2 \dots n_r \leq p_1 p_2 \dots p_r$$

Extremalise

\rightarrow multiplicateur de Lagrange

- Théo de l'information $S \rightarrow - \sum p_n \ln p_n$
 $\{p_n\}$

- Extremisation
 1) $\sum p_n = 1$ \rightarrow multiplicateur de Lagrange
 2) $\sum p_n = 1 \quad \sum p_n E_n = \langle E \rangle$
 3) $\mu = 0 \quad \rightarrow$ en g. canonique 2 dn pot en muo car th de l'info ...

Point important Particule sans masse

$$\vec{k} = 2\pi \frac{\vec{n}}{L} \quad \text{CL périodiques}$$

$D(\vec{p})$ ne change pas.

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

$$\left| \begin{array}{l} \text{ce qui change} \\ E = h\nu = pc = \frac{hc}{L} \|\vec{n}\| \\ D(E, \nu) \end{array} \right.$$

$$dE D(E) = dE \frac{8\pi}{c^3} \frac{V}{n^3} E^2$$

$$d\nu D(\nu) = d\nu \frac{8\pi}{c^3} V \nu^2$$

Comme il n'y a plus de contrainte sur nb total de photons, on peut faire le calcul dans canonique.
 Et on peut dire : Factorisation de la fct de partition canonique

Fct de partition pour un mode des (\vec{k}, E) avec $\vec{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z)$

$$q_{\vec{k}, E} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n E_{\vec{k}, E}) = \frac{1}{1 - \exp(-\beta E_{\vec{k}, E})}$$

\uparrow
 $\theta \rightarrow \infty$ &
 dans ce mode
 vu que N n'est
 pas fixé

$$\text{et } Q = \prod_{\vec{k}} \prod_{e=\pm 1} q_{\vec{k}, e}$$

fct de Bose-Einstein
 avec $\mu = 0$

$$\langle n_{\vec{k}, e} \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\vec{k}, e}} - 1}$$



Energie interne: $V = -\partial_\beta \ln Q$

$$\frac{V}{V} = \frac{\pi^2}{15} \frac{(kT)^4}{(\hbar c)^3}$$

Densité spectrale

$$u(\nu) d\nu = \frac{h\nu}{V} n(\nu) \tilde{D}(\nu) d\nu$$

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{-\beta h\nu} - 1}$$

Loi de Planck

$$\nu_{\max} \sim 3 \frac{kT}{h}$$

Observation / Corps noir

Corps noir idéal = Absorbant parfait pour le rayonnement électromagnétique
✓ 1 et ✓ direction du rayonnement

En particulier, il ne refléchit pas le rayonnement ER

Observer gaz photons à temp T



Chapitre 10: Transitions de phases

jeudi 28 novembre 2024 20:01

Notes-clé: compétition Énergie / Entropie
Brisure de symétrie
Paramètre d'ordre
Champ moyen

I - Compétition énergie - entropie

Description canonique

Énergie libre $F = U - TS$ (F^*) à minimiser

2 cas limites:

- $T=0 \rightarrow F = U \rightarrow$ minimum de $U \rightarrow$ fondamental $\theta = 0$ "ordonné"
- $T=\infty \rightarrow F = -TS$ Intérêt très grand \rightarrow "désordonné"

Entre $T=0$ et $T=\infty$:

• Système sans interaction
continuité de U , C_V, \dots entre ces deux situations

• Système avec interaction
possibilité de singularité
Vient du fait que énergie partielle i dépend des autres particules \Rightarrow effets collectifs
Transition de phase. Existence d'une singularité de la fonction de particule.

II - Paramagnétisme

Spin σ_i sans interaction $\sigma_i = \pm 1$

$H = -h \sum_{i=1}^N \sigma_i$ Interaction avec champ magnétique externe $h > 0$

$\sigma_i = +1$ Favorisé, spin aligné dans direction du champ magnétique.

Fonction de partition $Q_N = q^N$ Factorisation avec q fonct. de partition pour 1 σ_i

$$q = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \exp(\beta h \sigma_i) = e^{\beta h} + e^{-\beta h} = 2 \cosh(\beta h) \Rightarrow Q_N = 2^N \cosh^N(\beta h)$$

Erre 2
au tableau moins sûrement
loux

*crit 2
on tableau moins souvent
faut.*

III - Ferromagnétisme

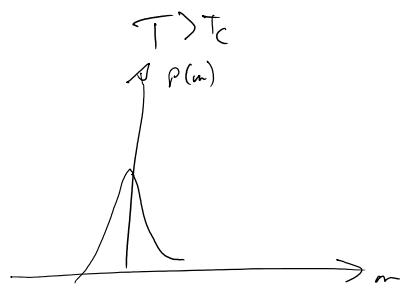
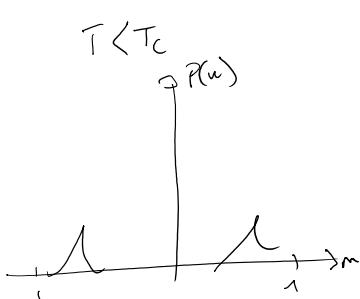
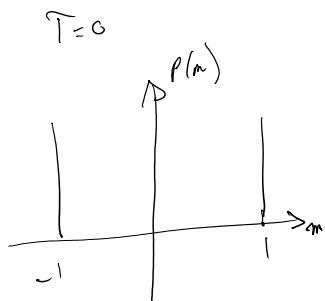
$$H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - h \sigma_i$$

$J > 0 \Rightarrow$ favorable d'avoir σ_i, σ_j dans le même sens.

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i$$

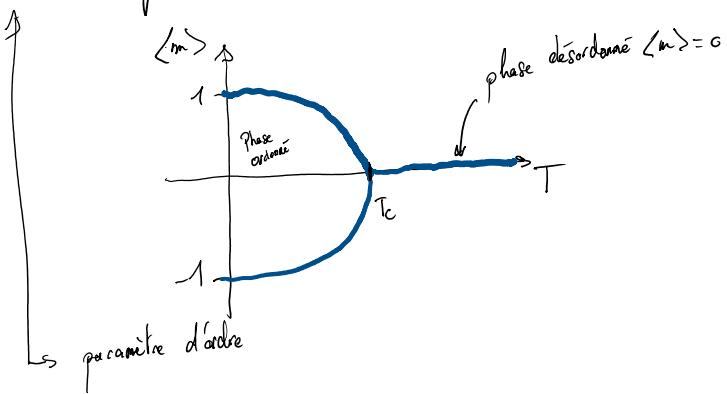
Distribution de proba de $P(m)$ si $h=0$

Transition de phase pour T_c



Autre manière de voir les choses

Ajustement moyenne $\langle m \rangle$:



Brisure de symétrie

$T > T_c$ $\langle m \rangle = 0$ invariant $m \rightarrow -m$

$T = 0$ syst est dans l'état $pppppp$ $m = +1$ pas invariant en $m \rightarrow -m$.

IV - Analogie avec gaz sur réseau

volume V divisé en cellules élémentaires de volume σ (typiquement $\sigma \sim$ Volume d'une molécule.)

cellule = { occupée, pas plus d'une molécule
 | vide

Variable $e_i = 0$ ou 1 , cell. n° i est occupée $T > 0$

Variable $e_i = 0$ ou 1
 Interaction à courte portée : appelle $-J$ si deux cellules voisines sont occupées $J > 0$

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} e_i e_j$$

proche voisin

Analogie avec les spins $\sigma_i = \pm 1 \rightarrow e_i = \frac{1}{2}(1 + \sigma_i)$
 Fonction de partition pour N molécules de gaz sur réseau

$$Q_N = \sum_{\substack{\{e_i = 0, 1\} \\ \sum e_i = N}} \exp \left(\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} e_i e_j \right)$$

\hookrightarrow principe \rightarrow grand canonique.

\Rightarrow grand canonique

$$\boxed{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N = \sum_{\substack{\{e_i = 0, 1\} \\ \sum e_i = N}} \left\{ z^{\sum e_i} \exp \left(\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} e_i e_j \right) \right\}$$

$z = e^{\beta h}$

$$\boxed{Z} = \sum_{\substack{\{e_i = 0, 1\}}} \exp \left\{ \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} e_i e_j + \ln z^{\sum e_i} \right\}$$

\boxed{Z} analogue à $\sum_{\{e_i = 0, 1\}} \exp \left(\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} e_i e_j + \beta h \sum e_i + \text{cst} \right) \quad e_i = \frac{1}{2}(1 + \sigma_i)$

I - Dimensionnalité critique inférieure

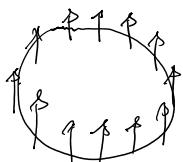
But: Déterminer si transition de phase existe en fonction de la dimension du système.

Question naturelle parce que plus la dimension augmente, plus nb d'interactions

(par exemple plus proches voisins sur réseau) augmente.

Méthode sur l'exemple: $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$
 " Regarder stabilité de l'état par rapport aux fluctuations (certaines ont tout cas)

PTD Basse température $T=0$



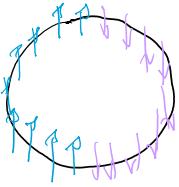
$$\text{Énergie} = -N J$$

Poids des configurations avec $m=0$

$T \neq 0$ et qui contient le moins d'énergie

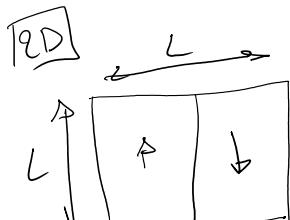
Poids des configurations

T < 0
On regarde configuration assurant $m=0$ et qui contient le moins d'énergie
→ Retourne la moitié des spins



Energie : $\Delta E \sim J$
 $\Delta S \sim k \ln N \leftarrow$ choix de la position pour laquelle on commence à retourner spins $\rightarrow N$
 $\Delta F \sim J - kT \ln N \text{ à } T = 0^+$

$\Delta F < 0$
 \Rightarrow L'état ordonné n'est pas favorisé.
 \Rightarrow pas de transitions de phase à 1D



$$N \sim L^d$$

$$\Delta E \sim JL$$

$$\Delta S \sim k \ln N \rightarrow \Delta F \sim JL - kT \ln N > 0$$

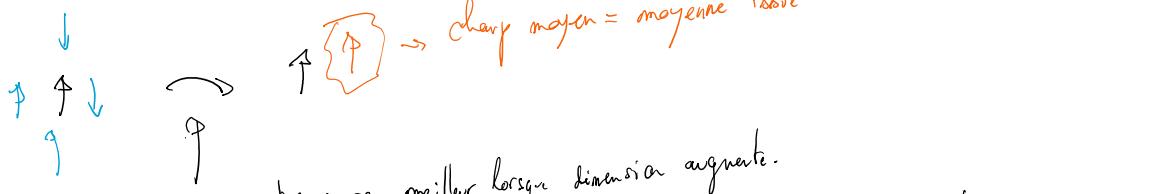
N'est pas "rentable" d'un point de vue thermo \Rightarrow "ordre préserve" \Rightarrow Transition de phase à partir de $d=2$

Dimension critique inférieure $= D=1$ $D > 1$ n'a transition de phase.

VI. Champ moyen

Très général !

Approximation : idée : remplacer les interactions d'une particule avec toute les autres par l'interaction avec champ moyen et négliger les fluctuations.



Approximation sera meilleure lorsque dimension augmente.

Approximation sera meilleure lorsque dimension augmente.

Δ néglige fluctuations \Rightarrow certaines predictions au voisinage des points critiques pas bonnes.

Grandes étapes

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$$

$$\textcircled{1} \quad \sigma_i = \langle \sigma_i \rangle + (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle) \rightarrow \sigma_i = m + (\sigma_i - m)$$

$m \equiv \langle \sigma_i \rangle$ indépendant de i

$$\textcircled{1} \quad \nabla_i = \langle \nabla_i \rangle + \nabla' - \langle \nabla' \rangle \rightarrow \nabla_i = m + (\nabla_i - m)$$

$m = \langle \nabla_i \rangle$ indépendant de i

$$\textcircled{2} \quad \sigma_i \sigma_j = (m + (\sigma_i - m))(m + (\sigma_j - m))$$

$$= m^2 + m(\sigma_i - m) + m(\sigma_j - m) + (\sigma_i - m)(\sigma_j - m)$$

Neglige les fluctuations.

Approximation : Hamiltonien HCM de champ moyen.

$$H_{CM} = -J \sum_{i,j} \left\{ m^2 - 2m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j) \right\} - h \sum_i \sigma_i$$

$$= -J \sum_{i,j} \left\{ m^2 + 2m\sigma_i \right\} - h \sum_i \sigma_i$$

$Z =$ nb de coordination de réseau

= nb de plus proches voisins

$$J \sum_{i,j} m^2 = N J z m^2$$

$$\sum_{i,j} \sigma_i = Z \sum_i \sigma_i$$

$$H_{CM} = 2Jm^2 N - \underbrace{(h + 2Jz m)}_{\substack{\text{cst} \\ \text{H d'un système paramagnétique dans champ moyen}}} \sum_i \sigma_i$$

$\underbrace{\text{sans interaction entre spin}}$

$$Q_N = \left[2 e^{-\beta J z m^2} \operatorname{ch}(\beta(h + 2Jz m^2)) \right]^N$$

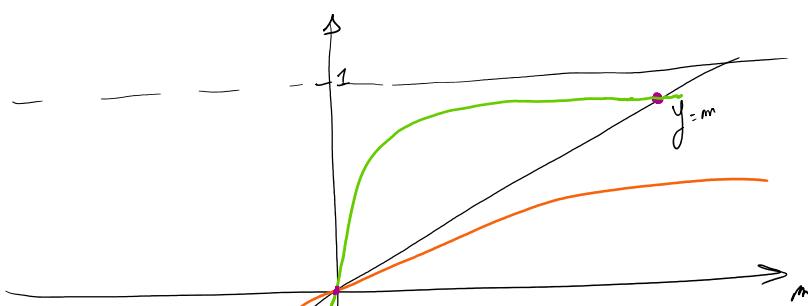
$\textcircled{3}$ Équation d'autoscohérence pour m .

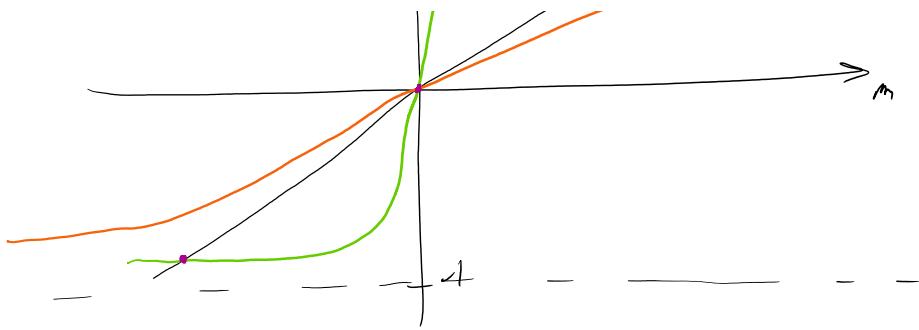
$$F = -kT \ln Q_N = -N kT \ln \left(\operatorname{ch}(\beta(2Jz m^2 + h)) \right)$$

$F(m)$ à minimiser

$$\left(\frac{\partial F}{\partial m} \right)_{T,J}(m) = 0 \iff m = \operatorname{th} \left(\frac{2Jz m + h}{kT} \right)$$

Analyse du résultat : $h=0 \quad m = \operatorname{th} \left(\frac{2Jz}{kT} m \right)$

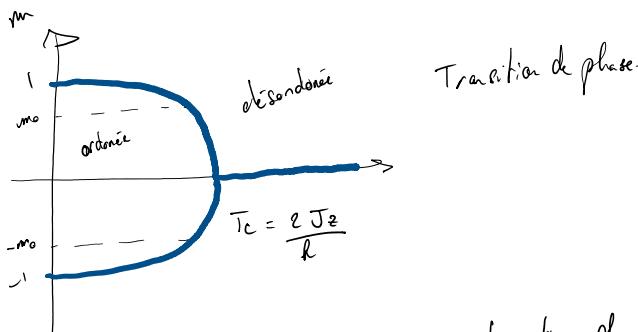




$$\frac{2Jz}{kT} > 1 \rightarrow kT < 2Jz \quad T < T_c = \frac{2Jz}{k} \quad 3 \text{ solutions } m=0, m=\pm m_0$$

$$\frac{2Jz}{kT} < 1 \rightarrow kT > 2Jz \quad T > T_c \text{ solution unique } m=0$$

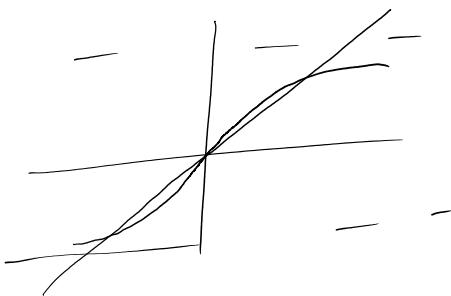
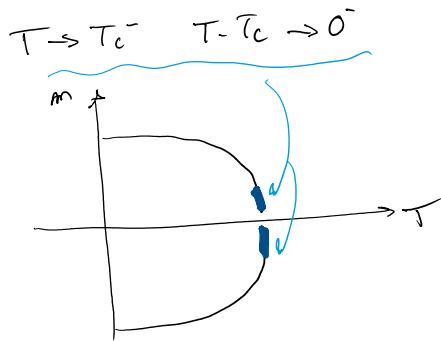
Il faut se convaincre que $T < T_c$, $m=0$ n'est pas un minimum
 $\rightarrow m = \pm m_0$ Minimisation spontanée. (champ extérieur nul).



L'approximation de champ moyen prévoit une transition de phase à dimension 1.
 L'approximation de champ moyen prévoit une transition de phase à dimension 2.
 L'approximation de champ moyen prévoit une transition de phase à dimension 3.

- Re: d=1 calcul exact y compris $h \neq 0$
 d=2 : Onsager ($h \neq 0$) et ... Théorie conforme
 d=3 : pas de résultats exact (Bootstrap conforme, recherche actuelle).

VII - Exposants critiques.



$$D_{\text{eff}} \propto m^3$$

$$m = \frac{1}{kT} \left(\frac{2Jz}{kT} - 1 \right) \sim \frac{2Jz}{kT} m - \frac{1}{3} \left(\frac{2Jz}{kT} \right)^3 m^3$$

$$m \left\{ 1 - \frac{2Jz}{kT} + \frac{1}{3} \left(\frac{2Jz}{kT} \right)^3 m^2 \right\}$$

↑
solution
 $m=0$ qui
nous intéresse
pas ici

$$\frac{T-T_c}{T} + \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 m^2 \sim 0$$

$$m^2 \sim \left(\frac{T_c - T}{T} \right)^3 \left(\frac{T}{T_c} \right)^3$$

$$\rightarrow m \propto (T_c - T)^{\frac{1}{2}}$$

$$\propto (T_c - T)^{\beta}$$

$$\beta = \text{Exposant critique préiction champ moyen } \beta = \frac{1}{2}$$