

UNIVERSITÉ DE BRETAGNE OCCIDENTALE

NOTE DE COURS

Physique statistique

Malo Kerebel

Cours par
Jean-Philippe JAY

Semestre 6, année 2020-2021

Table des matières

1	Introduction générale	2
1.1	Buts de la physique statistique	2
1.2	Combinatoire	2
1.3	Probabilités - Statistiques	3
1.3.1	Loi de Poisson	4
1.3.2	Loi Gaussienne ou loi normale	5
1.3.3	Théorème de la limite centrale	5
1.4	Entropie statistique	5
1.4.1	Définition de l'entropie statistique	5
1.5	Quelques résultat de maths	6
1.5.1	Approximation de Stirling	6
1.5.2	Intégrales gaussiennes	6
1.5.3	Méthode des multiplicateurs de Lagrange	6
1.5.4	Volume sphère de dimension n - Fonction Γ	6
2	Description statistique d'un système physique	7
2.1	Description quantique	7
2.1.1	N particules dans une boîte de volume V-Gaz parfait	8
2.1.2	Particules discernables - indiscernables	8

Chapitre 1

Introduction générale

CM1 (2021-01-12)

physique statistique : étude du mouvement de gaz à l'échelle macroscopique. Différences entre fermion et boson : leur spin, fermion spin demi entier (eg. les électrons), boson particule à spin entier (eg photon)

Bibliographie : Physique Statistique, B. Diu, C. uthmann, D.Lederer
Physique Statistique, H. Ngp, C. Ngo

1.1 Buts de la physique statistique

Unifier le macroscopique et le microscopique, au XIV^{ème} siècle, on a la thermodynamique, la mécanique et l'électro-magnétisme mais rien qui relie les uns aux autres.

Au niveau microscopique on a $\approx 10^{23}$ paramètres (de l'ordre du nombre d'Avogadro), auquel il faut avoir la vitesse et la position, il est impossible d'appliquer les résultats de la mécanique macroscopique dessus. La physique statistique a donc pour but d'expliquer les comportements collectifs, de particules mais les résultats peuvent s'étendre à des réseaux de neurones ou des comportements de foules.

1.2 Combinatoire

Le dénombrement des objets ou des configuration. 2 système indépendant A et B, ayant Ω_a et Ω_b configurations, il y a $\Omega_a \times \Omega_b$ configurations possible pour la juxtaposition de A et B.

CM2 (2021-01-14)

Le nombre de permutations de N objets parmi N est $N!$

Le nombre de combinaison sans répétition s'obtient avec :

$$C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$$

1.3 Probabilités - Statistiques

événement aléatoire : résultat possible d'une expérience

Variable aléatoire : variable qui peut prendre l'une quelconque de ses valeurs possibles, inconnue d'avance. Discrète il y a un nombre finie de valeur, continue il y a un nombre infinie de valeur possible

Propriétés

1. $0 \leq P_m \leq 1 \quad \forall m$
2. $\sum_m P_m = 1$ (normalisation)

Pour une variable aléatoire continue on utilise la densité de probabilité, qu'une la variable $\in [x, x + \delta x]$

$$w(x) = \lim_{\delta x \rightarrow 0^+} \frac{\delta P(x)}{\delta x}$$

$$dP(x) = w(x)dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{dN(x)}{N}$$

De même il y a la normalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w(x)dx = 1$$

Quand on est dans les bonne conditions :

$$P(e_1 \text{ ou } e_2) = P(e_1) + P(e_2)$$

$$P(e_1 \text{ et } e_2) = P(e_1) \cdot P(e_2)$$

L'écart quadratique moyen, ou variance, caractérise la dispersion de la distribution statistique, il est défini par :

$$(\Delta_f)^2 = \overline{(f - \bar{f})^2} = \overline{f^2} - (\bar{f})^2$$

De même on définit l'écart-type σ comme la racine carré de la variance :

$$\sigma = \sqrt{(\Delta_f)^2} = \Delta_f$$

La moyenne de résultat est :

$$\bar{n} = pN$$

CM3 (2021-01-19)

Après calculs : $\overline{n^2} = pN + p^2N(N-1)$ Donc $\sigma^2 = \overline{n^2} - (\bar{n})^2 = pN + p^2N^2 - p^2N - p^2N^2 = pN - p^2N$

$$\sigma^2 = Npq = Np(1-p)$$

Ainsi on voit que l'écart type croît avec N : (Cependant, la dispersion relative à la moyenne décroît)

$$\frac{\sigma}{\bar{n}} \sim \frac{\sqrt{N}}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

1.3.1 Loi de Poisson

Hypothèses :

- $p \rightarrow 0$
- $N \rightarrow +\infty$
- MAIS $pN = \lambda$ reste une valeur finie.

La loi de poisson dit donc que la loi binomiale devient :

$$P(N, n) = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda}$$

La proba ne dépend pas du nombre d'expériences N Exercice : Vérifier que c'est bien normalisé.

$$\sum_n P(N, n) = 1 = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda} = e^{\lambda} e^{-\lambda} = 1$$

On a :

$$\bar{n} = \sigma^2 = \lambda$$

On peut donc aussi écrire la loi de poisson sous la forme :

$$P = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}}$$

1.3.2 Loi Gaussienne ou loi normale

La densité de probabilité est :

$$w_G(c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\left[\frac{-(x-x_0)^2}{2\sigma^2} \right]}$$

w_G dépend de 2 paramètres, le centre (ou la moyenne) x_0 et la largeur σ

1.3.3 Théorème de la limite centrale

La distribution de la somme de N variables aléatoires indépendantes et de même loi devient gaussienne lorsque N devient grand

En particulier la loi binomiale \rightarrow loi gaussienne

Théorème important en physique stats, car les systèmes macroscopiques sont souvent constitué d'un très grand nombre d'éléments faiblement couplés.

Les variables libres de fluctuer ont alors une distribution gaussienne.

1.4 Entropie statistique

Les informations concernant le système physique est incomplète L'entropie statistique mesure le manque d'information

1.4.1 Définition de l'entropie statistique

Ensemble fini d'événements $e_m (m = 1, 2, \dots, M)$ de proba P_m . Tout autre distribution implique un manque d'information Entropie statistique :

$$S(P_1, P_2, \dots, P_M) = -k \sum_{m=1}^M P_m \ln(P_m)$$

Avec $P_m \ln(P_m) = 0$ si $P_m = 0$ et $k = k_B = 1,380649 \times 10^{-23} J \cdot K^{-1}$ la constante de Boltzmann, seule l'ordre de grandeur et l'unité sont à retenir.

L'entropie est nulle si une des proba des événement possible est de 1. Inversement l'entropie est maximale quand tous les événements sont équiprobable. L'entropie augmente avec le nombre d'événement possible.

1.5 Quelques résultats de maths

1.5.1 Approximation de Stirling

Approximation utile pour plus tard : Pour $N \gg 1$, on a :

$$\ln(N!) \sim N \ln(N) - N$$

1.5.2 Intégrales gaussiennes

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

1.5.3 Méthode des multiplicateurs de Lagrange

f fonction de n variables indépendantes. Il y a un maxima si :

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \dots = \frac{\partial f}{\partial x_n} = 0$$

Si il y a une contrainte entre les variables, ex $g(x_1, \dots, x_n) = 0$ Pour prendre en compte cette contrainte, on introduit une nouvelle fonction, $F = f \pm \lambda g$, λ paramètre de Lagrange.

$$dF = 0 \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial x_j} \pm \lambda \frac{\partial g}{\partial x_j} \text{ avec } j = 1, \dots, n$$

1.5.4 Volume sphère de dimension n - Fonction Γ

Le volume d'une hypersphère dans un espace à n dimensions est :

$$V_n = C_n r^n \text{ avec } C_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)}$$

La fonction Γ est telle que :

$$\begin{aligned}\Gamma(x) &= \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{x-1} dt \\ \Gamma(x+1) &= x\Gamma(x) \\ \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) &= \sqrt{\pi} \\ \Gamma(1) &= 1\end{aligned}$$

Si $n \in \mathbb{N}$ on a :

$$\Gamma(n+1) = n!$$

CM4 (2021-01-26)

Chapitre 2

Description statistique d'un système physique

2.1 Description quantique

Un état quantique est défini par un ket : $|\varphi\rangle$ Son évolution est donné par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial |\varphi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\varphi\rangle$$

Avec \hat{H} l'hamiltonien du système (opérateur associé à l'énergie)

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}$$

Si \hat{H} est indépendant du temps on a alors un système conservatif. les valeurs propres de \hat{H} donnent les valeurs possibles de l'énergie.

En général, les énergies sont dégénérées : plusieurs états peuvent avoir la même énergie.

Pour un état quantique macroscopique, on a un mélange statistique des états purs. On a donc la valeur moyenne dans l'état pur $|\varphi\rangle$: $\langle A_m \rangle = \langle \varphi_m | \hat{A} | \varphi_m \rangle$

On aura à calculer des sommes sur les états stationnaires (ℓ) de la forme :

$$\overline{A} = \sum_{(\ell)} P_{\ell} A_{\ell}$$

Il ne faut pas confondre les niveaux d'énergie et les états stationnaires, en général, plusieurs états microscopiques (ℓ) distincts correspondent à la même énergie

Mais la quantité à sommer peut dépendre que de l'énergie E_ℓ de l'état (ℓ)

On peut remplacer $\sum_{\text{état}(\ell)}$ par $\sum_{\text{Niveau d'énergie}}$

Pour un système macroscopique, l'écart entre 2 niveaux consécutifs d'énergie est très faible et on peut l'approximer comme continue pour pouvoir intégrer plutôt que faire la somme discrète.

On définit la densité d'états $dn(E)$ nombre d'état dont l'énergie est comprise entre E et $E + dE$. On peut faire :

$$\overline{A} = \sum_{E_\ell} g(E_\ell) f(E_\ell) = \int_{E_0}^{\infty} \rho(E) f(E) dE$$

Cette approximation n'est plus bonne si $f(E)$ varie très brusquement.

En pratique il est plus facile de calculer le nombre d'état ne dépassant pas une certaine énergie $\Phi(E)$, on a donc $dn(E) = \Phi(E + dE) - \Phi(E)$ d'où comme $dE \rightarrow 0$:

$$\rho(E) = \frac{d\Phi}{dE}$$

2.1.1 N particules dans une boîte de volume V-Gaz parfait

N particules sans interaction dans une boîte de volume $V \equiv GP$

Énergies totale :

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i = (n_{x1}^2 + n_{y1}^2 + n_{z1}^2 + \dots + n_{xN}^2 + n_{yN}^2 + n_{zN}^2) \varepsilon_0$$

Donc le nombre d'état à une énergie inférieure à E est :

$$\Phi(E) = \frac{1}{2^{3N}} \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(3N/2 + 1)} \left(\frac{E}{\varepsilon_0} \right)^{3N/2}$$

La densité d'état est donc :

$$\rho(E) \propto E^{\frac{3N}{2}-1}$$

2.1.2 Particules discernables - indiscernables

En physique classiques les particules sont discernables car on peut suivre les trajectoires de chacune d'entre elles. En quantique, la notion de trajectoire n'existe pas. Il est donc impossible de distinguer deux quantons identiques indépendants, ils sont indiscernables. En fait ce sont les positions occupées par les quantons qui seront discernables, ou pas.

La fonction d'onde d'un système de particule identique est symétrique ou antisymétrique par rapport à leur permutation

Si la fonction d'onde est symétrique on a des bosons. Les bosons ont donc un spin entier : $s = n\hbar$ $n \in \mathbb{N}$

Si la fonction est antisymétrique, on a des fermions, avec un spin demi-entier $s = (n + \frac{1}{2})\hbar$ $n \in \mathbb{N}$