

Cours 02 – Système de particules

Survol:

- Pour décrire le comportement d'un système...
 - o Approche vers l'équilibre
- Nombre d'états pour un gaz parfait classique
- Nombre d'états pour un ensemble d'oscillateurs harmoniques classiques

Pour décrire le comportement d'un système...

1) Décrire les états possibles du système

- état de spin d'un ensemble de n particules: $m_1 \dots m_N = \pm 1/2$
- ensemble d'oscillateurs harmoniques:
 $E_{n,i} = (n_i + 1/2) h \nu$, $n_i = 1, 2, 3, \dots$

2) Considérer un ensemble statistique: l'ensemble des états possibles pour le système

- classiquement: l'état final est déterministe
 - o en principe: on pourrait trouver le côté sur lequel tombera une pièce en calculant précisément sa trajectoire
 - o en pratique: on établira plutôt des probabilités de trouver un état à l'issue d'un grand nombre d'expériences
- quantique: l'évolution du système est fondamentalement non déterministe, mais les probabilités sont calculables
 - o on doit effectuer une mesure pour connaître l'état d'une particule
 - o cela perturbe le système
 - ex: interférence de la lumière

3) Énumérer les états du système

- Exemple: ensemble de 3 atomes dans un champ magnétique
 - o n'interagissent avec l'extérieur que par leur spin
 - o n'interagissent pas entre eux
 - o États du système

$$\text{Énergie } E = -\sum 2m_i \mu B$$

▪ 1	+++	$-3\mu B$
▪ 2	++-	$-1\mu B$
▪ 3	+ - +	$-1\mu B$
▪ 4	- ++	$-1\mu B$
▪ 5	- + -	$+1\mu B$
▪ 6	--+	$+1\mu B$
▪ 7	+ --	$+1\mu B$
▪ 8	---	$+3\mu B$

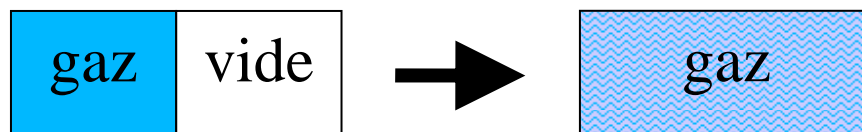
états accessibles
si l'énergie est fixe à
 $E = -\mu B$

4) Poser des postulats fondamentaux sur les états

- à partir de notre connaissance du système
- ceci nous permettra de calculer des probabilités
- exemples:
 - o les deux côtés d'une pièce sont équiprobables (postulat: $p=q$)
 - o tous les photons réagissent de façon identique à leur passage dans les fentes
- On posera le plus souvent comme postulat que:
 - o le système est isolé
 - o donc l'énergie est conservée
- Mais plusieurs états peuvent avoir la même énergie (multiplicité). Comment déterminer la probabilité de chaque état? On posera comme postulat que le système est à l'équilibre:
 - o pas d'évolution dans le temps
 - o tous les états accessibles deviennent équiprobables puisque passer d'un à l'autre ne change pas l'énergie
 - o le système peut passer librement d'un état à l'autre
 - o pour $N \sim 10^{23}$, le nombre d'états de même énergie devient énorme

Approche vers l'équilibre:

- un système est contraint dans un état accessible mais peu probable
- en relâchant la contrainte, le système passera d'un état accessible à un autre (et éventuellement à par tous ses états) pour atteindre un état beaucoup plus probable (e. g. de grande multiplicité)
- exemples:
 - 1) les cartes
 - initialement, un jeu de cartes est ordonné
 - on le brasse quelques secondes : il subsiste des séquences ordonnées normalement hautement improbables
 - on brasse plusieurs minutes : il n'est plus possible d'y distinguer de telles séquences; le système a atteint son état d'équilibre
 - 2) un gaz
 - un gaz est contraint à la moitié d'un volume, l'autre étant vide
 - on retire rapidement la partition, le gaz s'étant à tout le volume (\sim ms)
 - le système occupe tous les états de position

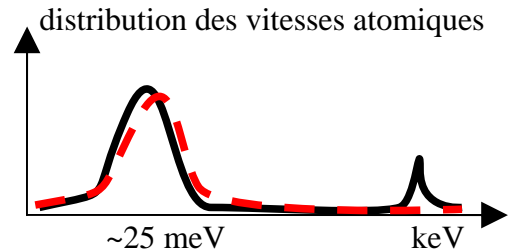


3) les spins

- initialement: + + + + + + + - - - - -
- un peu plus tard: + + + - + + + - - - - -
- après longtemps (combien?):
+ + - - + - - - + + - - + - +

4) ions

- un ion accéléré à quelques keV entre dans un matériau
 - matériau ~ collection d'oscillateurs harmoniques
- en quelques ps, il est "thermalisé"



- temps de relaxation
 - o très dépendant du problème
 - taux d'interactions, de fluctuations, etc.
 - o hors équilibre, le traitement statistique n'est plus général
 - o si on attend longtemps comparé au temps de relaxation, on se retrouve en situation d'équilibre
 - o on peut alors tirer des conclusions sur le système beaucoup plus facilement

Calcul des probabilités

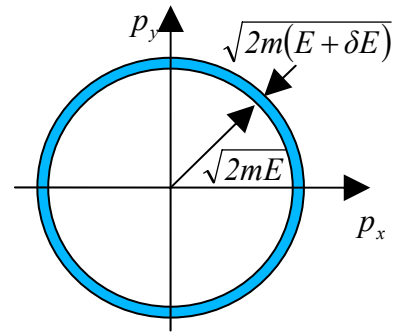
- Soit $\Omega(E)$ le nombre total d'états accessibles dans une plage d'énergie $[E, E + \delta E]$
- Soit y une variable du système pour laquelle il existe un sous-ensemble de $\Omega(E, y_i)$ états (y peut être par exemple une vitesse particulière des molécules dans un gaz)
- $$P(y_i) = \frac{\Omega(E, y_i)}{\Omega(E)}$$
- $$\bar{y} = \frac{\sum \Omega(E, y_i) y_i \delta E}{\Omega(E)}$$

Densité d'états

- δE est une valeur finie (qui peut être par exemple la précision de notre mesure d'énergie)
- plus δE est grand, plus le nombre d'états accessibles est grand.
- pour δE petit:
 - o $\Omega(E) \propto \delta E \Rightarrow \Omega(E) = \omega(E) \delta E$
 - o où $\omega(E)$ est la densité d'états accessibles à l'énergie E

Nombre d'états pour un gaz parfait classique { au tableau }

- pour N particules en 3D
 - o coquille des p_i en $3N$ dimensions
 - o le système à un instant donné ne peut occuper qu'un point de cette "hypercoquille"
 - chaque molécule n'a qu'une quantité de mouvement
 - o l'énergie est conservée: si p diminue pour une molécule, p doit augmenter pour une ou plusieurs autres
 - o évolution du système: déplacement d'un point à la surface de l'hypercoquille
 - o si f degrés de liberté par particule, fN degrés de liberté pour le système



- Nombre d'états
 - o Nombre total d'états accessibles pour la plage d'énergie $[0, E]$ est égale au volume de l'hypersphère située à l'intérieur de l'hypercoquille : $V \sim r^{\text{ndim}} \Rightarrow \Omega_{\text{tot}} \propto (2mE)^{3N/2}$
 - o le nombre d'états accessibles entre $[E, E + \delta E]$ est donné par

$$\frac{\partial \Omega_{\text{tot}}}{\partial E} \delta E \propto 2m \frac{3N}{2} (2mE)^{3N/2-1} \sim E^{3N/2}$$

où $\partial \Omega_{\text{tot}} / \partial E$ taux de grossissement de l'hypersphère en fonction de E

- En résumé, pour le nombre d'états accessibles :
 - o dépendance en \vec{r}_i : $\Omega(E) \propto V^N$
 - o dépendance en \vec{p}_i : $\Omega(E) \propto E^{3N/2}$
 - o donc: $\Omega(E) = C V^N E^{3N/2}$, $C \equiv \text{constante}$
- pour les grands N , $\Omega(E)$ devient une fonction qui augmente extraordinairement rapidement avec E
- approximation valide uniquement pour un gaz
 - o monoatomique: pas de modes internes
 - o classique: les molécules occupent un espace infinitésimal, p continu
 - o parfait: aucune interaction entre atomes
 - o isolé: on ne considère pas pour l'instant la possibilité d'échanger de l'énergie avec d'autres systèmes
 - o à l'équilibre: nous avons dépassé le temps de relaxation

Nombre d'états pour un ensemble d'oscillateurs harmoniques classiques {au tableau}

notions à retenir

- le calcul des probabilités dépend avant tout des postulats qu'on formule sur les états accessibles
- le concept d'atteinte de l'équilibre et de temps de relaxation
- espaces à fN dimensions pour décrire les systèmes de N particules à f degrés de liberté
- nombre d'états occupés par un gaz monoatomique parfait classique