

**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

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	---	$+3\mu B$

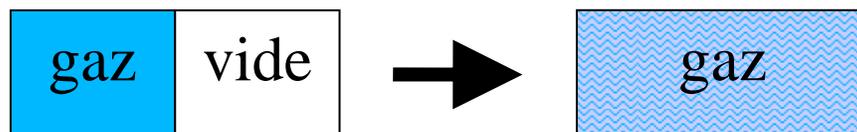
états accessibles  
 si l'énergie est fixe à  
 $E = -\mu B$

#### 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

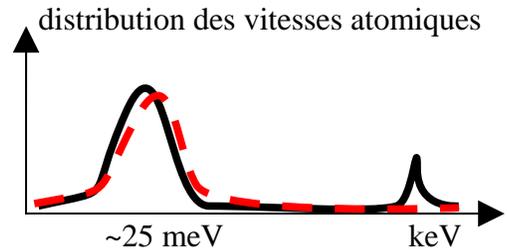


### 3) les spins

- 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

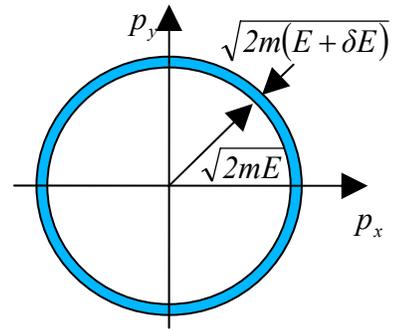
- Soit  $\Omega(E)$  le nombre total d'états accessibles dans une plage d'énergie  $[E, E + \delta E]$
- Soit  $y$  une variable du système pour laquelle il existe un sous-ensemble de  $\Omega(E, y_i)$  états ( $y$  peut être par exemple une vitesse particulière des molécules dans un gaz)
- $$P(y_i)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

### Densité d'états

- $\delta E$  est une valeur finie (qui peut être par exemple la précision de notre mesure d'énergie)
- plus  $\delta E$  est grand, plus le nombre d'états accessibles est grand.
- pour  $\delta E$  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