Physique Statistique

PHY432

Marc Mézard, Jean-Philippe Bouchaud

Jean-Sébastien Bernier, Maxime Dahan,
Emilian Dudas, Michel Ferrero, Bruno Gérard,
Julien Fuchs, Jean-Yves Ollitrault, Luca Perfetti,
Mathis Plapp, Massimo Vergassola

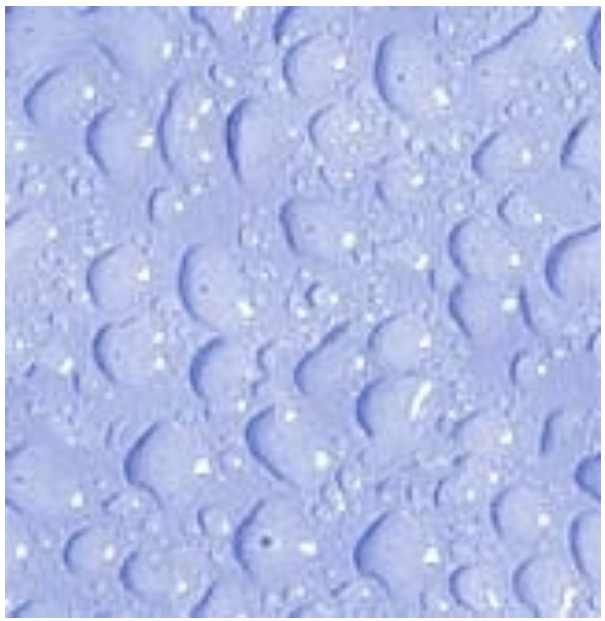
Newton: $\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt}$

Schrödinger: $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$

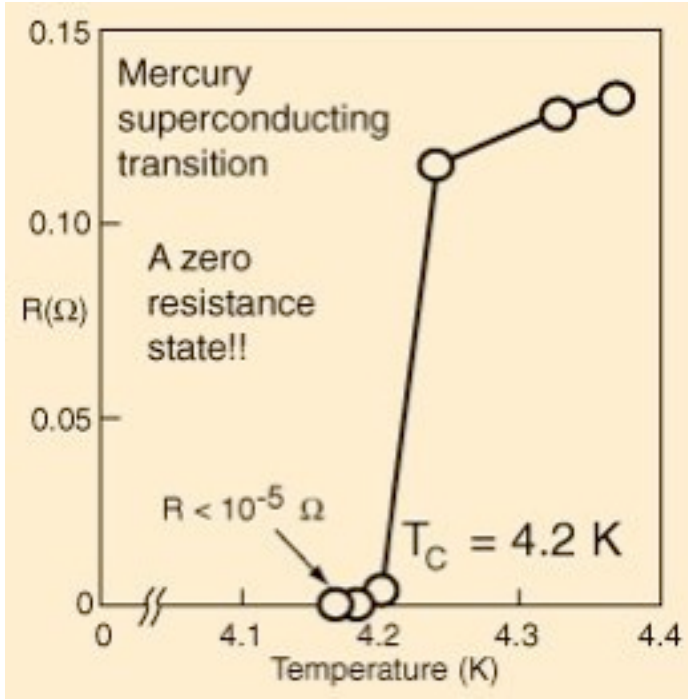
Forces électromagnétique, gravitationnelle (+ faible et forte)

On sait tout!...

Pourtant:

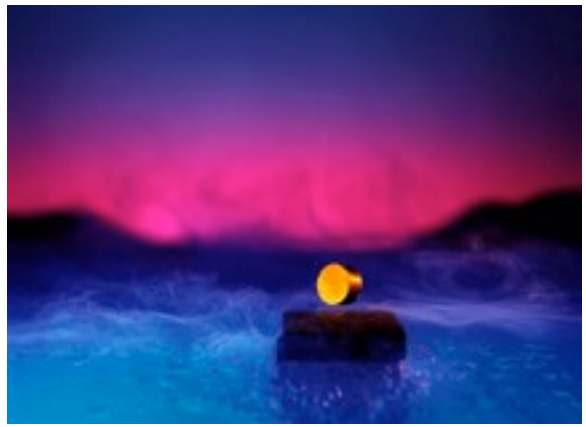


Transitions de phase: Eau - glace; mais aussi...



Kammerlingh Onnes
Leiden 1911
Métal - Supra

$Ca_2Ba_2Cu_3HgO_8$:
130 K

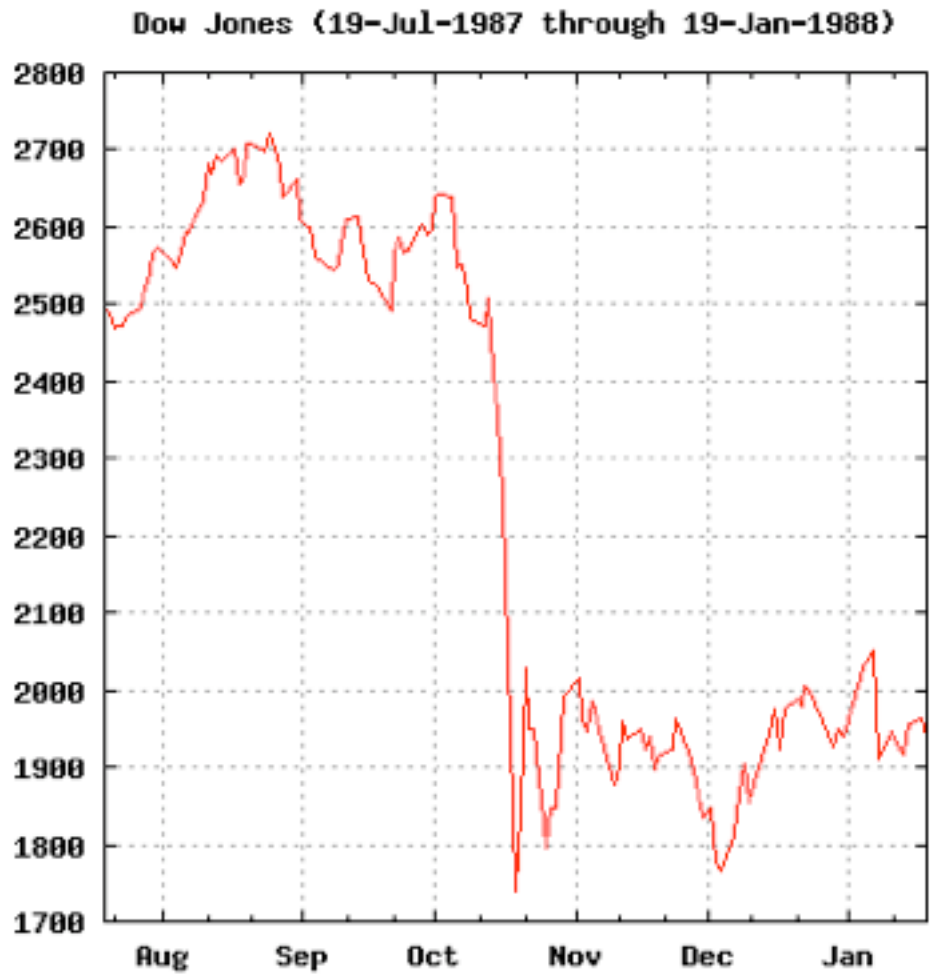


RMN, accélérateurs, trains à lévitation magnétique,...

Comportement collectif

Petit changement d'un paramètre:

→ amplification



Comportement collectif : Dynamique d'un groupe

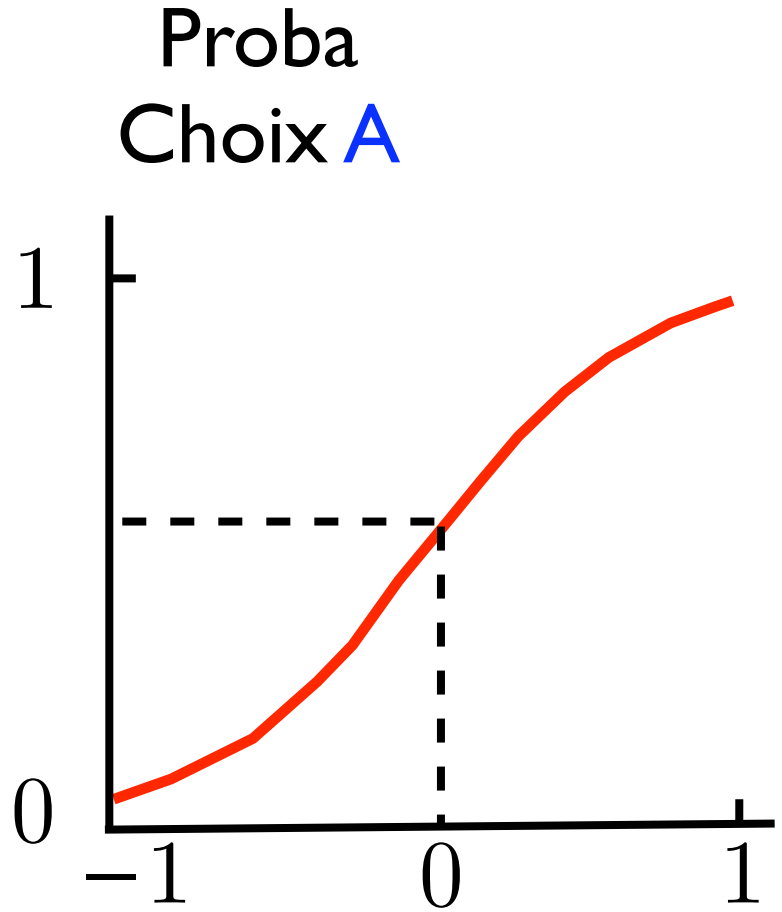
Vote binaire : A ou B.

Individu n:

$$S_n(t) = \begin{cases} +1 & \text{Choix A} \\ -1 & \text{Choix B} \end{cases}$$

Choix aléatoire, biaisé par l'opinion moyenne des autres à l'instant $t-1$

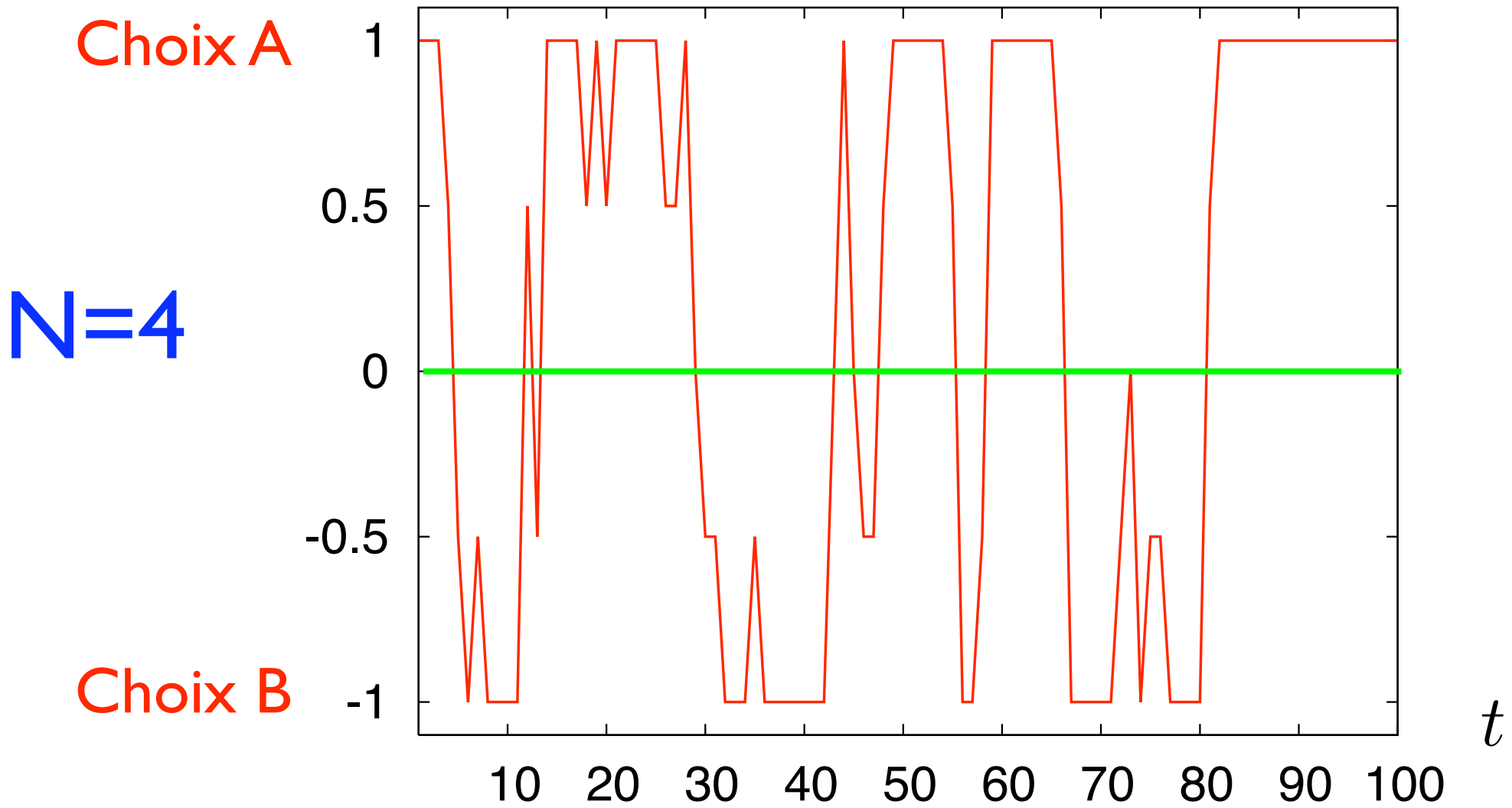
Condition initiale: proba $\frac{1}{2}$ A ou B



Symétrie A - B

Dynamique du vote: évolution du choix moyen

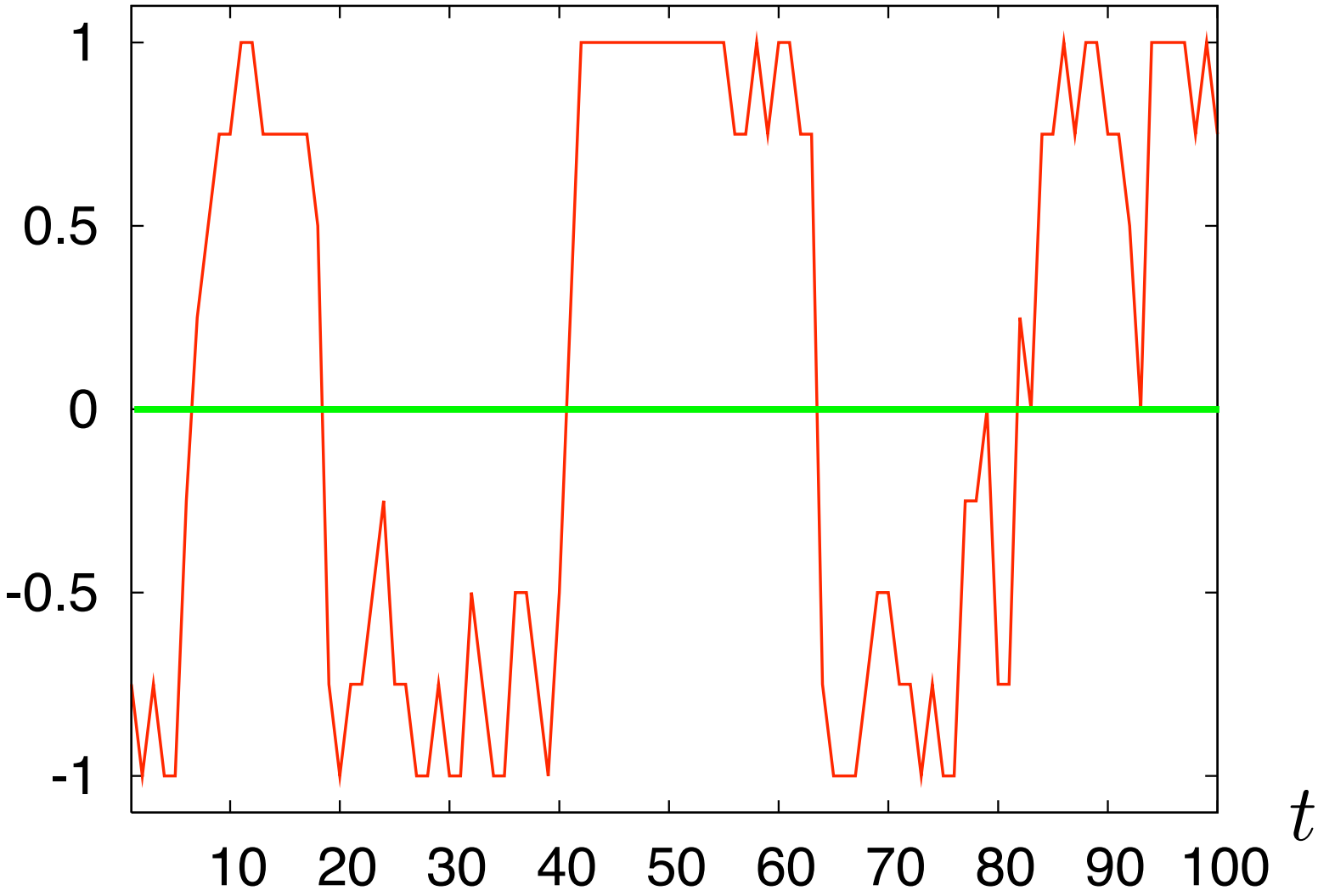
$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} S_n(t)$$



Dynamique du vote: évolution du choix moyen

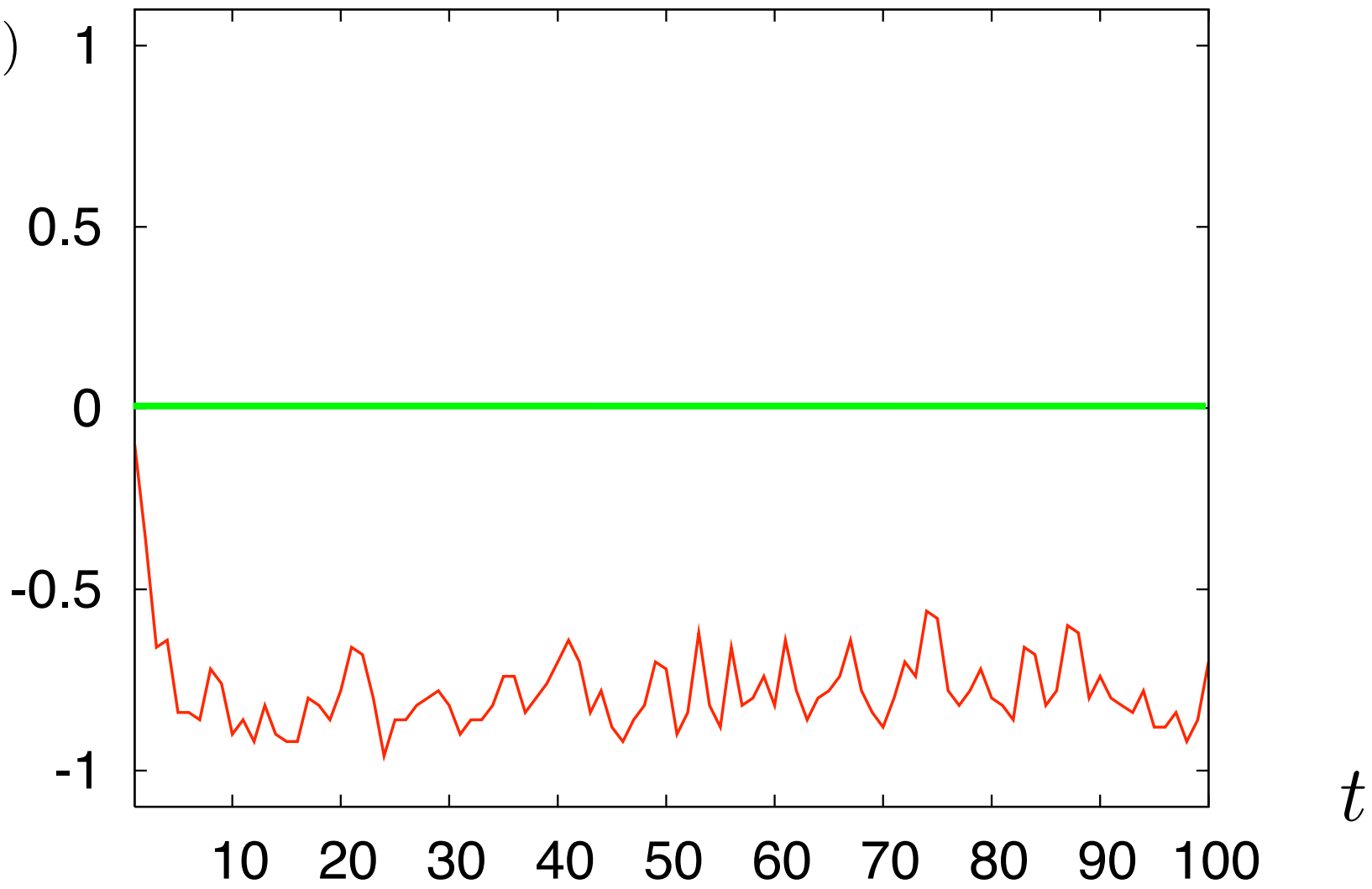
$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} S_n(t)$$

N=8



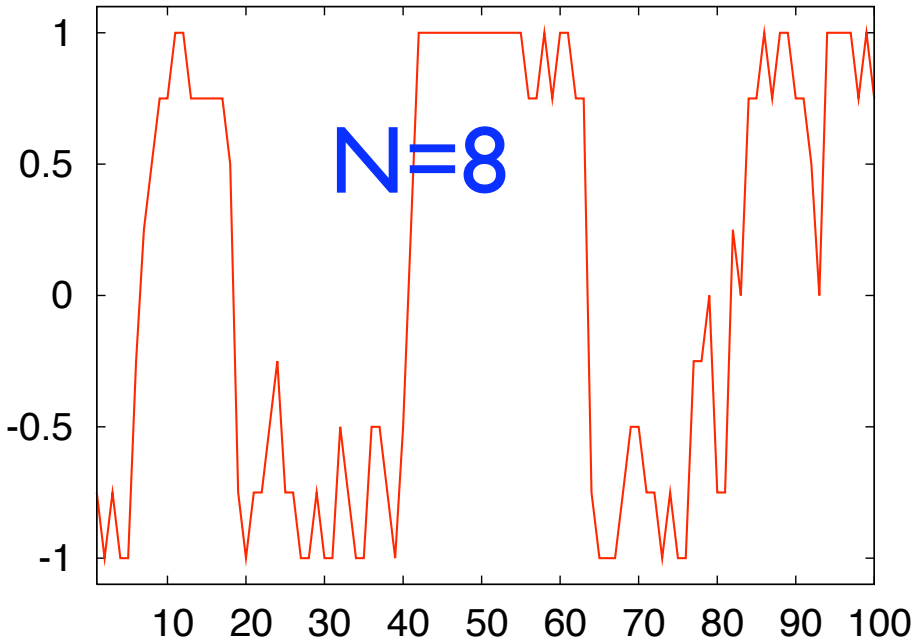
Dynamique du vote: évolution du choix moyen

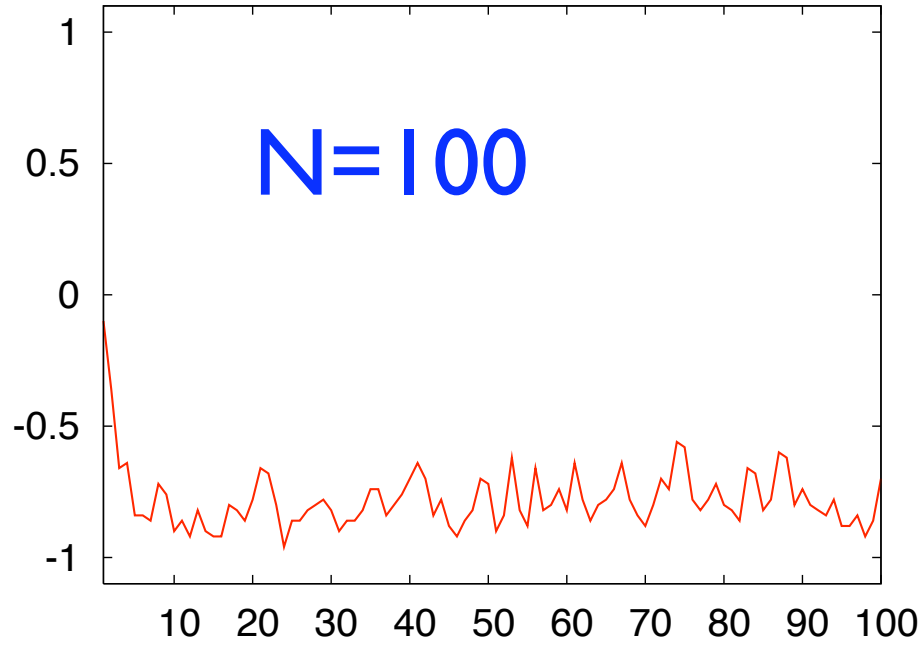
$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} S_n(t)$$



N=100

Dynamique du vote: évolution du choix moyen





Règles inchangées, mais...

Transition de phase
Brisure de la symétrie A-B
pour N grand... Ferromagnétisme

Physique Statistique

Passage du microscopique au macroscopique.

I) Comportement collectif de systèmes comportant un grand nombre d'atomes dont on connaît les interactions au niveau microscopique.

Comportement macroscopique déterminé par quelques variables: pression, température, entropie,...

→ Explication des lois de la thermodynamique

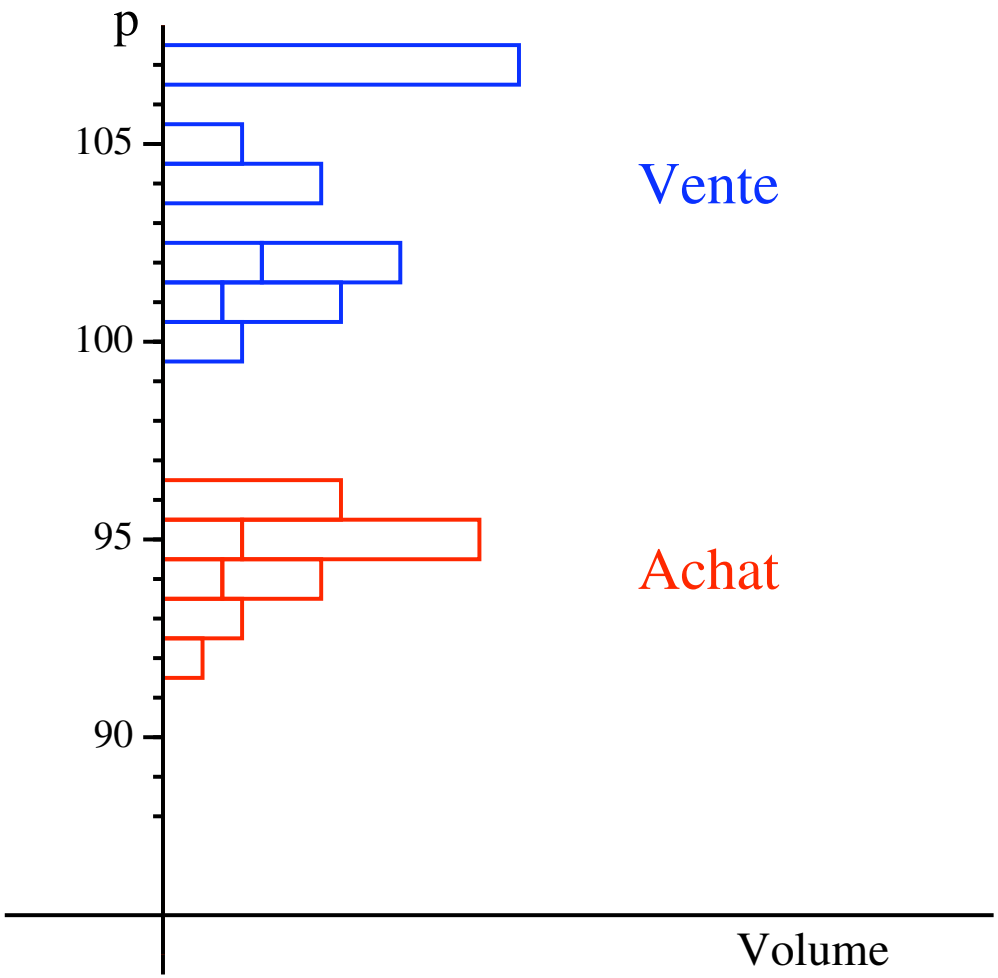
II) Propriétés d'un atome (...) dans un grand système

"Atomes"= molécules, électrons, neutrons, spins, vortex, polymères,...., variables logiques, agents économiques, etc...

Changement d'échelle: comportement collectif

Molécules	Pression, densité
Spins	Aimantation
Electrons	Conductivité
Photons	Rayonnement
Neurones	Mémoire, calcul
Grains de sable	Forces, silos
Agents économiques	Cours des actifs
Gènes	Comportement cellule

Un exemple: carnet d'ordre en finance



Ordres d'achat ou vente:

- ordre 'marché'
- ordre 'limite'

= Processus de déposition annihilation

Forme du carnet?

Fluctuations?

"More is different"

(P.W. Anderson , Science 177 (1971) 393

La physique statistique au coeur d'un grand défi scientifique: systèmes complexes.

On peut relier le comportement collectif aux lois microscopiques, mais chaque nouvelle échelle demande son propre niveau d'analyse: On ne démontre pas la supra-conductivité du mercure en résolvant une équation de Schrödinger à 10^{23} particules, ni en prenant en compte les quarks des noyaux....

Quelques ordres de grandeur

Distances

Solide: 10^{24} atomes par cm^3

Gaz: 6 10^{23} atomes dans 22 litres à pression et température ambiantes

Energies

1 eV = 1,6 10^{-19} J

Ex: Spin dans un champ B: énergie ~ $\mu_B B$
où μ_B est d'ordre 10^{-23} J/T.

Temps

Collisions dans un gaz: 10^{-9} s.

$\hbar$ /1eV = 6 10^{-14} s

Quelques ordres de grandeur

Neurones ~ 10^{10} neurones, 10^4 synapses par neurone

DNA 3 10^9 paires de base, ~25000 gènes

Marché financier Nombre de transactions sur une action liquide en un mois: ~ 10^5 à 10^6

Suite du programme amphi 1:

1. La physique statistique, qu'est-ce que c'est?

2. Ordres de grandeur

3. Nécessité d'une description statistique

4. Postulats de base de la physique statistique

Nécessité d'une description statistique

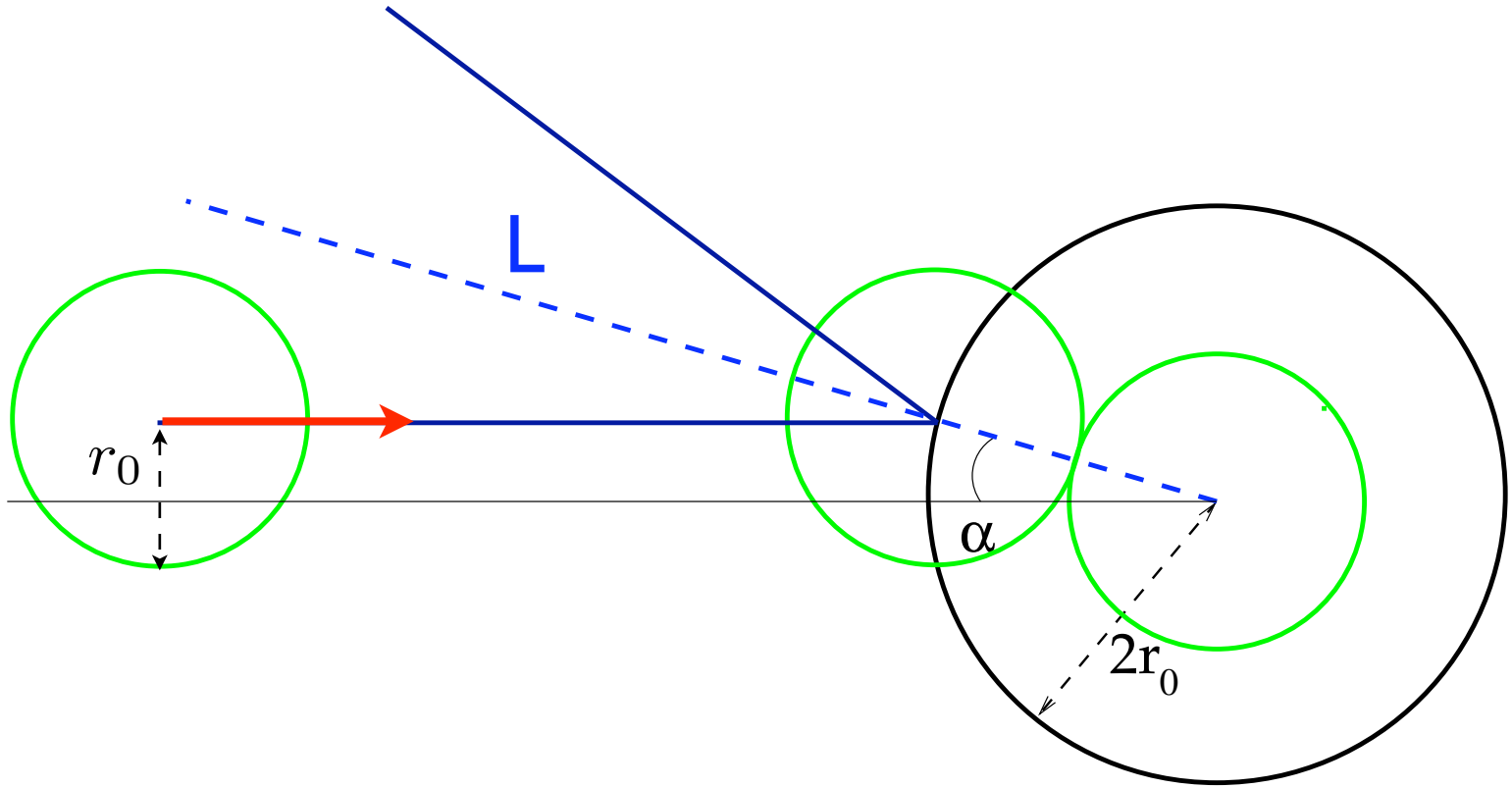
Clausius, Maxwell, Boltzmann, fin du 19ème. Une ambition démesurée?

1- On ne peut pas décrire 1 litre de gaz à un instant donné: 10^{23} particules, 6 réels, 10 octets :~10^{15} giga-octets.

Dynamique moléculaire: 10^3 à 10^4 particules sur 10^{-8} s

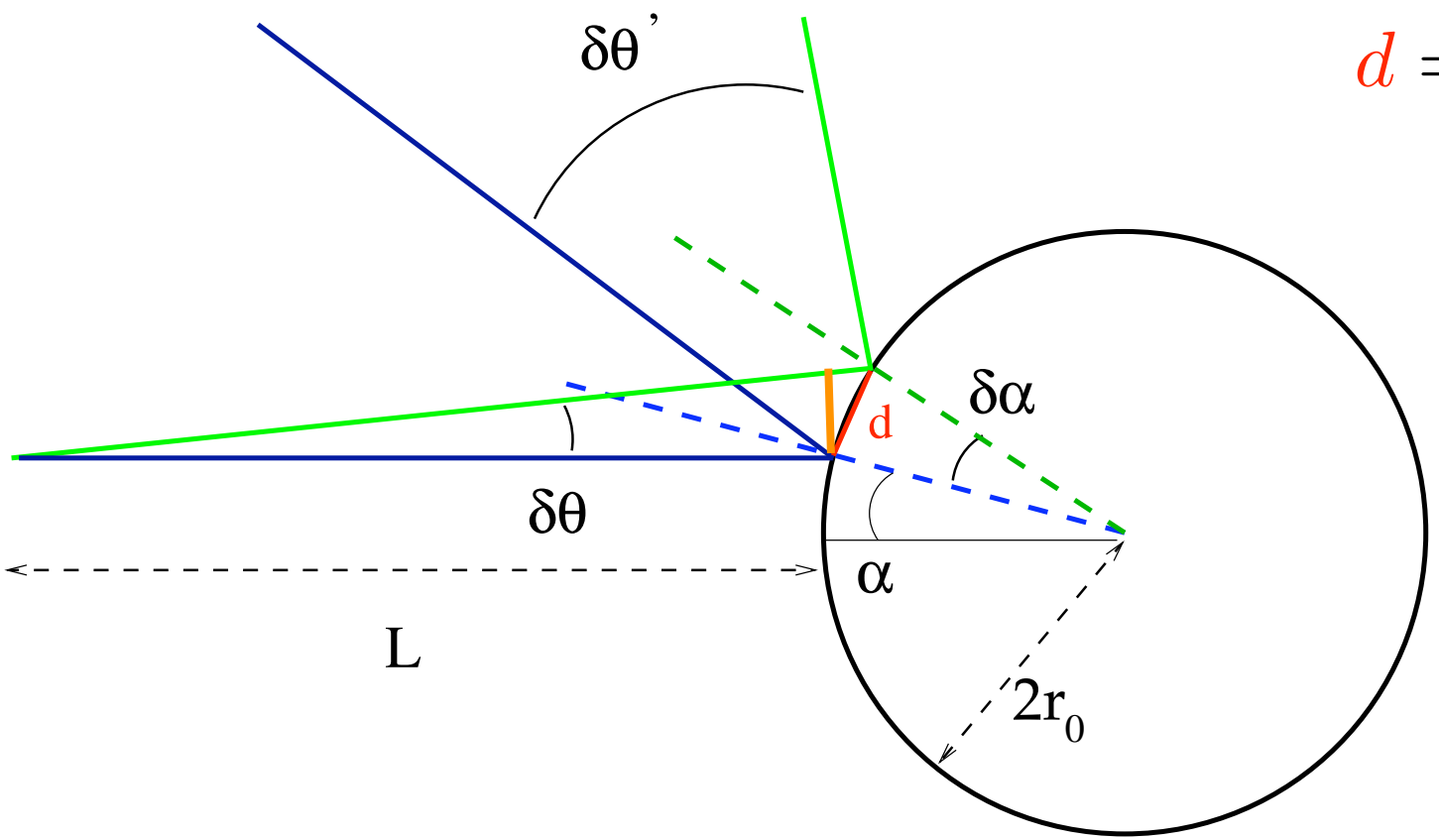
2- On ne veut pas décrire 1 litre de gaz parfait à un instant donné: chaos déterministe

Collisions de sphères dures



Gaz: $v \sim 10^3$m/s, $L \sim 10^{-6}$m, $r_0 \sim 3\ 10^{-10}$m, $t \sim 10^{-9}$s

Collisions de sphères dures



$$d = \frac{L\delta\theta}{\cos\alpha} = 2r_0\delta\alpha$$

$$\delta\theta' = 2\delta\alpha = \frac{L\delta\theta}{r_0\cos\alpha} \geq \frac{L}{r_0}\delta\theta \qquad (\delta\theta)_n \geq \left(\frac{L}{r_0}\right)^n \delta\theta \sim 10^{4n}\delta\theta$$

Collisions de sphères dures

Exemple: effet gravitationnel de l'expérimentateur

$$\delta F = \frac{GMm}{d^2}\,\frac{l}{d}$$

Différence de F entre deux atomes distance l

$$M = 50\mathrm{kg}; \quad m = 10^{-27}\mathrm{kg}; \quad d = 1\mathrm{m}; \qquad l = 10^{-6}\mathrm{m}$$

$$G = 6,7\ 10^{-11}\ \mathrm{m^3 kg^{-1} s^{-2}}$$

$$\delta\theta = \frac{\delta x}{l} = \frac{1}{2}\frac{\delta F t^2}{ml} = 2\ 10^{-27}\mathrm{rad} \qquad t = 10^{-9}\mathrm{s}$$

$$(\delta\theta)_n \geq \left(\frac{L}{r_0}\right)^n \delta\theta \sim 10^{4n}\delta\theta$$

Après n=8 collisions ($\sim 10^{-8}$s): trajectoires complètement différentes

Conséquences du chaos

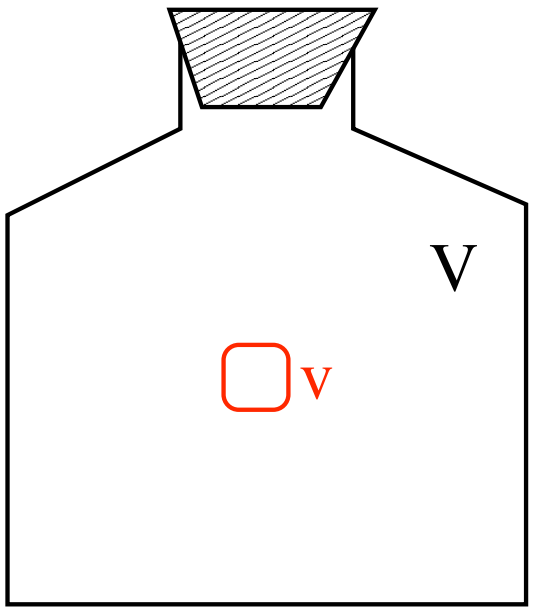
- Impossible de suivre la trajectoire d'une particule
- Temps macroscopique >> temps microscopique

Boltzmann ~1870:

Hypothèse de vitesses non corrélées après chaque choc. Très critiqué car introduit un processus non réversible, "incompatible" avec l'invariance par renversement du temps des lois de Newton. Mais vrai après quelques chocs...

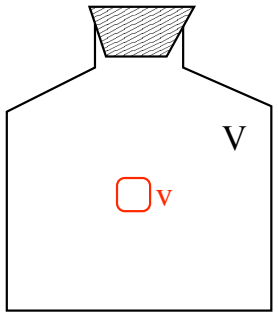
Conséquences du chaos

- Impossible de suivre la trajectoire d'une particule
- Temps macroscopique >> temps microscopique
- Hypothèse: le système rejoint un équilibre statistique



Equilibre statistique et loi des grands nombres: les grandeurs macroscopiques ne fluctuent presque pas

Un exemple de passage microscopique - macroscopique par une approche probabiliste



$V = 22,4\ \mathrm{dm}^3 \qquad N = 6\ 10^{23} \qquad v = 1\ \mathrm{mm}^3$

Particule j: présente dans v

avec probabilité $p = v/V = 4.5\ 10^{-8}$

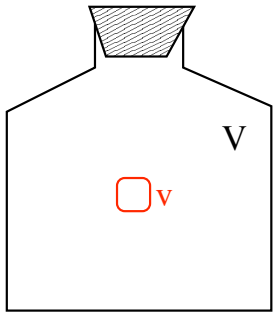
$$x_j = \begin{cases} 1 \text{ avec probabilité } p \\ 0 \text{ avec probabilité } 1-p \end{cases} \qquad n = \sum_{j=1}^{N} x_j$$

Moyenne: $\langle n \rangle = N \langle x_1 \rangle = Np \simeq 2.5\ 10^{16}$

Fluctuations: $\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = \sum_{i,j} \left(\langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle \right)$

$$= \sum_i \left(\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2 \right) = N(p - p^2)$$

Un exemple de passage microscopique - macroscopique par une approche probabiliste



$V = 22,4\ \mathrm{dm}^3 \qquad N = 6\ 10^{23} \qquad v = 1\ \mathrm{mm}^3$

Particule j: présente dans v

avec probabilité $p = v/V = 4.5\ 10^{-8}$

$$x_j = \begin{cases} 1 \text{ avec probabilité } p \\ 0 \text{ avec probabilité } 1-p \end{cases} \qquad n = \sum_{j=1}^{N} x_j$$

Moyenne: $\langle n \rangle = N \langle x_1 \rangle = Np \simeq 2.5\ 10^{16}$

Fluctuations relatives:

$$\frac{\sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}}{\langle n \rangle} \simeq \frac{\sqrt{1-p}}{\sqrt{Np}} \simeq \frac{1}{\sqrt{\langle n \rangle}} \simeq 6\ 10^{-9}$$

Loi des grands nombres. Distribution de n: gaussienne (TLC)

Description statistique d'un système "thermodynamique" (N>>1) isolé: le postulat de base de la physique statistique = " ensemble micro-canonique"

Boltzmann, fin 19ème

Description statistique d'un système isolé

1) Mécanique classique: N particules

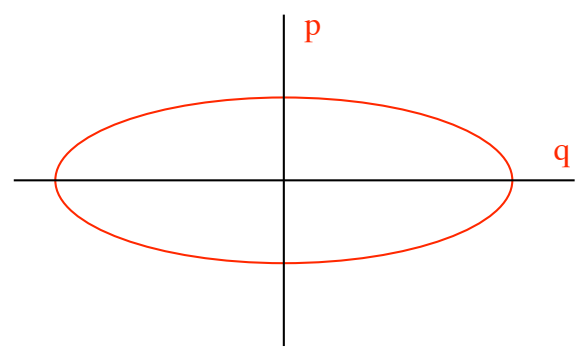
3N composantes de position
3N composantes d'impulsion

Hamiltonien $H\left(\{q_n, p_n\}\right)$ Ex: $H = \sum_n \frac{p_n^2}{2m} + V(q_1, \ldots, q_{3N})$

Dynamique: $\frac{dq_n}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_n}$ $\frac{dp_n}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_n}$

Trajectoire dans l'espace des phases: $\{q_n(t), p_n(t)\}$

Ex: o.h. 1 dimension, $q(t) = q_0 \cos \omega t$
$p(t) = p_0 \sin \omega t$



Description statistique d'un système isolé

Moyennes temporelles: temps d'observation

Observable $O\left(\{q_n, p_n\}\right)$ ex. énergie cinétique $\sum_n \frac{p_n^2}{2m}$

$$\overline{O_{\mathcal{T}}} = \frac{1}{T}\int_0^{\mathcal{T}} dt\, O\left(\{q_n(t), p_n(t)\}\right)$$

Postulat I) Equilibre. Si $\mathcal{T} \gg \tau_{\text{micro}}$, $N \gg 1$

il existe une "densité de probabilité d'équilibre" dans l'espace des phases, $D\left(\{q_n, p_n\}\right)$, telle que:

$$\overline{O_{\mathcal{T}}} = \langle O \rangle = \int \prod_n dq_n dp_n \; D\left(\{q_n, p_n\}\right) O\left(\{q_n, p_n\}\right)$$

Moyenne temporelle = Moyenne avec mesure D

Ensemble micro-canonique: Système isolé énergie E

Postulat I) Equilibre. $D\left(\{q_n, p_n\}\right)$, telle que:

$$\overline{O_{\mathcal{T}}} = \int \prod_n dq_n dp_n \; D\left(\{q_n, p_n\}\right) O\left(\{q_n, p_n\}\right) = \langle O \rangle$$

Postulat II) Expression de la densité:

$$\begin{aligned} D_{E,\delta E}\left(\{q_n, p_n\}\right) &= C \quad \text{si} \quad E < H\left(\{q_n, p_n\}\right) < E + \delta E \\ &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned}$$

Pour toutes les observables qui nous intéressent:

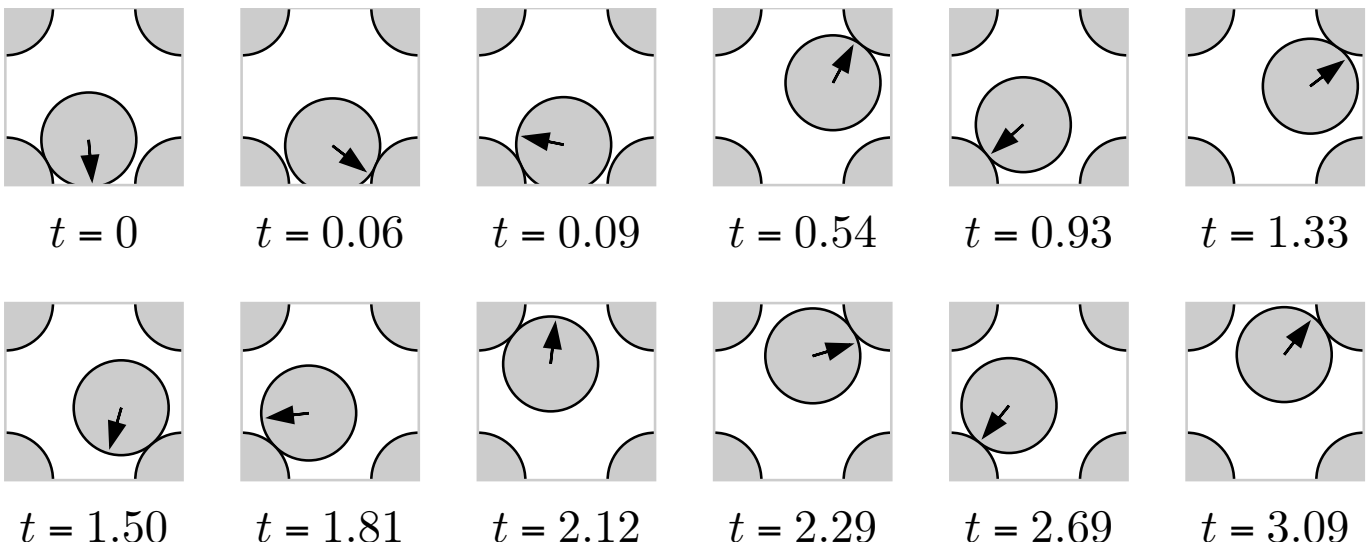
$\langle O \rangle$ est indépendante de δE tant que:

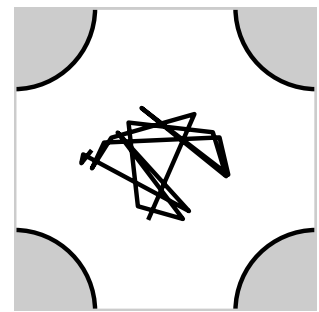
$$\varepsilon_{\text{micro}} \ll \delta E \ll E_{\text{Macro}}$$

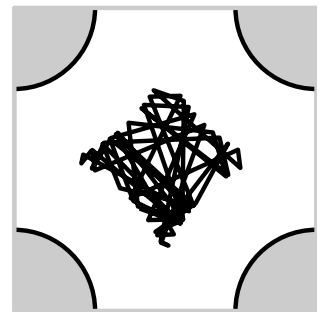
Pas intuitif!!

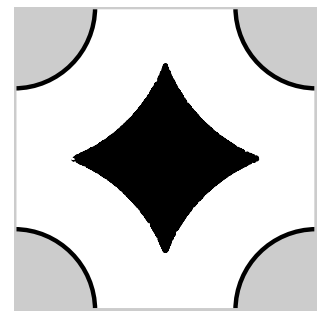
"Justification"

Théorie ergodique: pour des systèmes très simples, on peut montrer que la trajectoire remplit uniformément l'espace des phases à temps très long. Ex: sphères dures









W. Krauth: Statistical Mechanics: Algorithms and Computations

"Justification"

Théorie ergodique: pour des systèmes très simples, on peut montrer que la trajectoire remplit uniformément l'espace des phases à temps très long.

(Mais: le temps de "récurrence de Poincaré" est extrêmement long, bien supérieur à l'âge de l'univers... En fait le postulat micro-canonique ne vaut que pour des observables variant assez lentement (subtil, cf Chapitre "dynamique"))

Description statistique d'un système isolé

II) Mécanique quantique: N particules

3N composantes de position
3N composantes d'impulsion

Hamiltonien $\widehat{H}\left(\{q_n, p_n\}\right)$

Schrödinger, états propres: $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

Rappel mécanique quantique: Soit une observable $\hat{O}$

Valeur moyenne dans l'état $|\psi_n\rangle$: $\langle\psi_n|\hat{O}|\psi_n\rangle$

Postulat I quantique: équilibre A l'équilibre, le système est décrit par une loi de probabilité sur l'ensemble des états propres de $\widehat{H}$: $P_n =$ Proba d'être dans l'état $|\psi_n\rangle$

Description statistique d'un système isolé

Postulat II quantique: ensemble micro-canonique

$$\begin{aligned} P_n &= C \quad \text{si} \quad E < E_n < E + \delta E \\ &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned}$$

NB: Deux niveaux de probabilités, quantique et statistique.

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_n P_n \langle \psi_n | \hat{O} | \psi_n \rangle$$

Si $\hat{O}|\alpha\rangle = \lambda_\alpha |\alpha\rangle$ sont les états propres:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_n P_n \langle \psi_n | \hat{O} | \psi_n \rangle = \sum_n P_n \sum_\alpha \lambda_\alpha |\langle \psi_n | \alpha \rangle|^2$$

Entropie et Température Statistiques

Quantique: Soit $W_{\delta E}(E)$ le nombre d'états accessibles, d'énergie $E < E_n < E + \delta E$

On appelle "entropie statistique": $S(E) = k \log W_{\delta E}(E)$

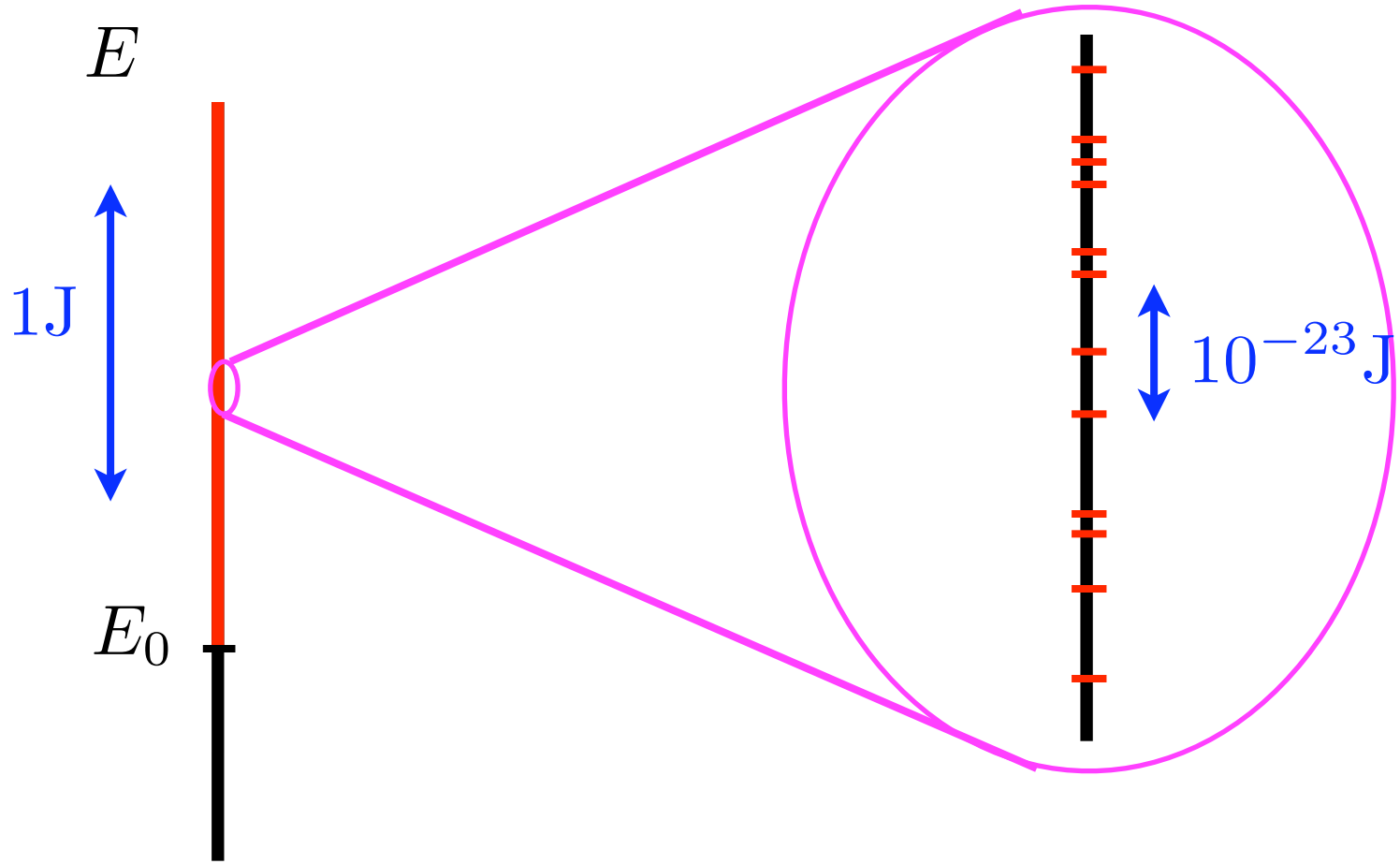
Où: $k = 1.38\ 10^{-23}$ J/K est la constante de Boltzmann

NB: $W_{\delta E}(E)$ est une grandeur d'ordre $\exp(NC)$ où N est le nombre de particules, et C ne dépend pas de δE tant que δE est petit devant les énergies macroscopiques et grand devant les énergies microscopiques

Ordres de grandeur

Niveaux d'énergie d'un système macroscopique:

$$10^{-23}\mathrm{J} \ll \delta E \ll 1\mathrm{J}$$



Entropie et Température Statistiques

Quantique: Soit $W_{\delta E}(E)$ le nombre d'états accessibles, d'énergie $E < E_n < E + \delta E$

On appelle "entropie statistique": $S(E) = k \log W_{\delta E}(E)$

Où: $k = 1.38\ 10^{-23}$ J/K est la constante de Boltzmann

Limite classique:

$$W_{\delta E}(E) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int_{E<H(\{q_n,p_n\})<E+\delta E} \prod_n dq_n dp_n$$

Volume d'espace des phases accessibles, divisé par h^{3N}

Si les particules sont indiscernables (Pauli): divisé par $N!$

Entropie et Température Statistiques

Ludwig Boltzmann 1844-1906

On appelle "entropie statistique": $S(E) = k \log W_{\delta E}(E)$

Où: $k = 1.38\ 10^{-23}$ J/K est la constante de Boltzmann

On appelle "température statistique": $\frac{1}{T} = \frac{dS}{dE}$

NB: Nous verrons que ce sont l'entropie et la température habituels de la thermodynamique

Une petite illustration de la puissance des méthodes probabilistes: raréfaction des nombres premiers dans l'approximation de champ moyen

Gauss 1848 (15 ans!): $\rho(n) \simeq \frac{1}{\log n}$

Théorème d'Hadamard et de la Vallée - Poussin (1896)
Si $\pi(n)$ est le nombre de premiers inférieurs à n: $\lim_{n\to\infty} \frac{\pi(n)}{n/\log(n)} = 1$

Un petit argument probabiliste (pas une démonstration!):
Si il existe une distribution $\rho(n)$,et les nombres premiers sont aléatoires indépendants ("chaos déterministe" fort!):

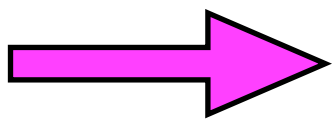
$$\cdots,\ kp, kp+1, kp+2, \ldots, (k+1)p-1, (k+1)p\ \ , (k+1)p+1, \ldots$$

Densité des non- multiples de p : $(1-1/p)$

n : premier ssi non-multiple de chacun des premiers $p < \sqrt{n}$

$$\rho(n) \simeq \prod_{p \text{ premier } =2}^{\sqrt{n}} \left(1-\frac{1}{p}\right) \simeq \exp\left(\sum_{p \text{ premier } =2}^{\sqrt{n}} \log\left(1-\frac{1}{p}\right)\right)$$

$$\rho(n) \simeq \exp\left(\int_{x=2}^{\sqrt{n}} dx\ \rho(x)\ \log\left(1-\frac{1}{x}\right)\right)$$



$$\boxed{\rho(n) \simeq \frac{1}{\log n}}$$

Plan du cours

- Du microscopique au macroscopique
- Description statistique d'un système isolé
- La distribution canonique
- Le gaz parfait
- Systèmes en interaction, transitions de phases
- Dynamique et équilibre
- Physique Statistique et théorie de l'Information
- Les gaz parfaits quantiques: effet du principe de Pauli
- Fermions libres à basse température
- Introduction aux propriétés électroniques des solides
- Introduction à la physique des semi-conducteurs
- Gaz parfait de bosons et condensation de Bose
- Phonons, photons et thermodynamique du rayonnement

Résumé des points les plus importants

- Système isolé: ensemble "microcanonique"

Quantique:

$$\begin{aligned} P_n &= C \quad \text{si} \quad E < E_n < E + \delta E \\ &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned}$$

Classique:

$$\begin{aligned} D_{E,\delta E}\left(\{q_n, p_n\}\right) &= C \quad \text{si} \quad E < H\left(\{q_n, p_n\}\right) < E + \delta E \\ &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned}$$

Entropie statistique:

$$S(E) = k \log W_{\delta E}(E)$$

$$\frac{1}{T} = \frac{dS}{dE}$$

W= nombre d'états accessibles

Limite classique:

$$W_{\delta E}(E) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int_{E < H(\{q_n, p_n\}) < E + \delta E} \prod_n dq_n dp_n$$

Physique Statistique

Supports:

- 'Physique Statistique', A. Georges et M. Mézard
- 'Physique Statistique: Exercices et corrigés', C. Hermann
- 'Recueil de problèmes des dernières années'
- 'Physique Statistique: Problèmes et corrigés', C. Herman

http://www.lptms.u-psud.fr/membres/mezard/X.html

→ Informations diverses, sujets de réflexion, liens, exercices adaptés à chaque amphi

---

QCM:
www.enseignement.polytechnique.fr/profs/physique/Manuel.Joffre/qcm/