Licence 3 et Magistère de physique

Physique Statistique
Chapitre 2 : Ergodicité

(cours perturbé par la neige...)

Christophe Texier

30 janvier 2019

2 Description microscopique des systèmes macroscopiques

L'utilisation du langage probabiliste consiste à **remplacer l'étude de la dynamique temporelle** (complexe) du système, i.e. caractériser par quelle succession d'états passe le système, **par une information de nature probabiliste**, i.e. déterminer avec quelle probabilité le système occupe un état particulier à un instant arbitraire.

2.1 Équilibre macroscopique

Le cours s'intéresse aux systèmes à l'équilibre macroscopique :

- Toutes les grandeurs macroscopiques sont *stationnaires*.
- Les flux macroscopiques sont nuls.

Exemple : Le gaz dans une salle est à l'équilibre macroscopique (température, densité,... constants). Il n'y a pas de flux (pas de phénomène de convection entretenu par un ventilateur, par exemple). L'équilibre macroscopique est à distinguer de l'équilibre mécanique (immobilité).

2.2 Description classique

Considérons le cas concret (et important) d'un gaz d'atomes (sans degrés de liberté internes), des atomes d'hélium par exemple. Dans le cadre de la mécanique classique, l'état du système est caractérisé à un instant donné par l'ensemble des positions et impulsions des atomes, i.e. un point de l'espace des phases :

$$\boxed{\ll \textbf{microétat} \gg : \quad (\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \cdots, \vec{p}_N) \equiv \vec{\Gamma} \in \text{ espace des phases}}$$

Connaissant $\vec{\Gamma}_0 = \vec{\Gamma}(t_0)$, la logique de la mécanique classique consiste à déterminer la trajectoire $\vec{\Gamma}(t)$ pour $t \geqslant t_0$, en résolvant les équations du mouvement (en général $6N$ équations différentielles non linéaires du premier ordre couplées) :

$$\frac{\mathrm{d}\vec{r}_i(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}\,\vec{p}_i(t) \quad \text{et} \quad \frac{\mathrm{d}\vec{p}_i(t)}{\mathrm{d}t} = -\vec{\nabla}_i V(\vec{r}_1(t), \cdots, \vec{r}_N(t)) \quad , \ i = 1, \cdots, N$$

Comme le nombre d'atomes est typiquement énorme, $N \sim 10^{23}$, cette entreprise est désespérée...

L'information probabiliste est encodée dans une distribution de probabilité dans l'espace des phase, que nous notons $\rho(\vec{\Gamma})$.

> Le microétat est caractérisé par un vecteur (à $6N$ composantes) $\vec{\Gamma}$ qui varie continûment dans l'espace des phases. $\rho(\vec{\Gamma})$ est une *densité de probabilité*, i.e. $\rho(\vec{\Gamma})\,\mathrm{d}^{6N}\vec{\Gamma}$ est la probabilité pour que le système se trouve dans le volume élémentaire $\mathrm{d}^{6N}\vec{\Gamma}$ autour de $\vec{\Gamma}$. Elle satisfait la condition de normalisation $\int \rho(\vec{\Gamma})\,\mathrm{d}^{6N}\vec{\Gamma} = 1$.

Objectif : L'objet du cours sera de *définir quelques règles simples permettant de déterminer la distribution* $\rho(\vec{\Gamma})$, qui dépendra seulement d'un petit nombre de paramètres macroscopiques (l'énergie totale pour un système isolé, le volume, etc). On parlera ainsi de

$$\boxed{\ll \textbf{macroétat} \gg : \qquad \rho(\vec{\Gamma})}$$

Exemple : oscillateur harmonique 1D.– L'espace des phases est l'espace des coordonnées (x, p_x), identifié avec $\mathbb{R}^2$. La dynamique classique est encodée dans l'Hamiltonien $H(x, p_x) = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Si le système est *isolé*, l'énergie est conservée et le système est dans un microétat (x, p_x) sur la ≪ surface ≫ $H(x, p_x) = E$ (cste), i.e. sur une ellipse.

Hypothèse ergodique et moyenne des observables

Dans une expérience, l'étude d'une observable $\mathcal{A}(\vec{\Gamma})$ est faite pendant un certain temps $\mathcal{T}$ et l'on mesure typiquement une moyenne temporelle, sur *une réalisation*

$$\overline{\mathcal{A}}^{(\mathcal{T})} \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{\mathcal{T}} \frac{\mathrm{d}t}{\mathcal{T}}\, \mathcal{A}(\vec{\Gamma}(t))\,. \tag{1}$$

Exemple d'observable : $\mathcal{A}(\vec{\Gamma}) \to E_c = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^N \vec{p}_i^{\,2}$.

L'approche de la physique statistique est de caractériser des propriétés statistiques. On peut ainsi introduire une moyenne probabiliste

$$\langle \mathcal{A} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int \mathrm{d}^{6N}\vec{\Gamma}\, \rho(\vec{\Gamma})\, \mathcal{A}(\vec{\Gamma})\,. \tag{2}$$

Dans la pratique, déterminer $\overline{\mathcal{A}}^{(\mathcal{T})}$ requiert une mesure de l'observable sur l'intervalle $[0, \mathcal{T}]$, mais est difficile à manipuler concrètement (sauf expérimentalement, ou éventuellement numériquement). En revanche le *calcul* de $\langle \mathcal{A} \rangle$, en vue de faire des *prédictions*, se révèlera simple en pratique car reposant sur la connaissance de $\rho(\vec{\Gamma})$ qui ne nécessite que peu d'information, comme on le verra. L'**hypothèse ergodique** consiste à postuler l'équivalence entre les deux moyennes

$$\boxed{\lim_{\mathcal{T}\to\infty} \overline{\mathcal{A}}^{(\mathcal{T})} = \langle \mathcal{A} \rangle} \tag{3}$$

Illustration : Exercice 2.5 des TD.

Lien avec le théorème de la limite centrale.— Nous découpons l'intégrale sur $[0, \mathcal{T}]$ en $\mathcal{N}_{\mathcal{T}}$ morceaux associés à des intervalles de temps $\Delta T = \mathcal{T}/\mathcal{N}_T \gtrsim \tau_{\text{corr}}^A$ où τ_{corr}^A est un temps de corrélation pour l'observable :

$$\overline{\mathcal{A}}^{(\mathcal{T})} = \frac{1}{\mathcal{N}_{\mathcal{T}}}\left[\int_0^{\Delta T} \frac{\mathrm{d}t}{\Delta T}\, \mathcal{A}(t) + \int_{\Delta T}^{2\Delta T} \frac{\mathrm{d}t}{\Delta T}\, \mathcal{A}(t) + \cdots + \int_{(\mathcal{N}_T - 1)\Delta T}^{\mathcal{N}_T \Delta T} \frac{\mathrm{d}t}{\Delta T}\, \mathcal{A}(t)\right]\,. \tag{4}$$

Puisque $\Delta T \gtrsim \tau^A_{\mathrm{corr}}$, les morceaux d'intégrales sont statistiquement indépendants. Le théorème de la limite centrale nous montre que $\overline{\mathcal{A}}^{(\mathcal{T})}$ est une quantité fluctuante dont les fluctuations sont d'ordre $1/\sqrt{\mathcal{N}_T}$, i.e.

$$\overline{\mathcal{A}}^{(T)} = \langle \mathcal{A} \rangle + \underbrace{\mathcal{O}(1/\sqrt{T})}_{\text{terme aléatoire}} \tag{5}$$

La recherche de résultats rigoureux sur la question de l'ergodicité fait l'objet d'un domaine appelé ≪ théorie ergodique ≫. Toutefois assez peu de résultats exacts ont été prouvés (on peut néanmoins citer la preuve de l'ergodicité pour le gaz classique de sphères dures par Ya. Sinai en 1963).

2.3 Description quantique

On aura parfois besoin de se placer dans le cadre de la mécanique quantique (par exemple pour étudier la vibration moléculaire dans les gaz ou la vibration des corps solides). L'information microscopique est cette fois encodée dans un vecteur d'état, élément de l'espace des états quantiques (un espace de Hilbert $\mathscr{H}$) :

$$\boxed{\ll \textbf{microétat} \gg : \qquad |\,\psi_\ell\,\rangle \in \mathscr{H}}$$

où en pratique l'état quantique $|\,\psi_\ell\,\rangle$ est repéré par un ensemble de ≪ nombres quantiques ≫ regroupés dans la notation ≪ ℓ ≫.

La mécanique quantique assure le caractère *discret* des microétats.

Exemple : si l'on considère une particule libre dans une boîte cubique, pour des conditions aux limites de Dirichlet, les états quantiques (stationnaires) sont de la forme

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(\vec{r}) = (2/L)^{3/2}\,\sin(n_x\pi x/L)\,\sin(n_y\pi y/L)\,\sin(n_z\pi z/L) \text{ avec } n_x,\, n_y,\, n_z \in \mathbb{N}^*$$

pour une énergie $E_{n_x,n_y,n_z} = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\pi^2\hbar^2/(2mL^2)$. Sur cet exemple $\ell \equiv (n_x, n_y, n_z)$.

Exemple 2 : état de spin.– Les particules élémentaires portent un moment cinétique intrinsèque appelé spin (qu'on pourrait interpréter, incorrectement, comme le moment cinétique caractérisant la rotation de la particule sur elle-même). La dimension de l'espace des états de spins est $(2s+1)$. Un exemple important est le cas du spin 1/2 (électron, proton, neutron,...) caractérisé par deux états de spin : par exemple la base des états propres de la composante S_z du vecteur spin : $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Évidemment, contrairement aux états orbitaux de la particule dans la boîte que nous venons de discuter, *les états de spins n'admettent pas de description classique.*

La notion de macroétat correspond à se donner l'ensemble des probabilités d'occupation des microétats :

$$\boxed{\ll \textbf{macroétat} \gg : \qquad \{P_\ell\}}$$

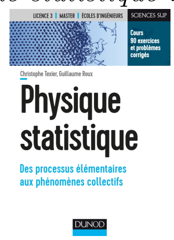
où P_ℓ est la probabilité pour que le système soit dans l'état $|\,\psi_\ell\,\rangle$. On a bien sûr $\sum_\ell P_\ell = 1$.

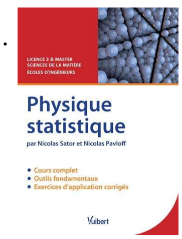
Moyenne des observables

On appliquera également l'hypothèse ergodique afin de faire des prédictions sur les observables. L'esprit est le même que dans le cas classique, sinon que la moyenne statistique prend une autre forme : étant donné l'état quantique $|\,\psi_\ell\,\rangle$ (le microétat), une mesure répétée d'une observable $\mathcal{A}$, toujours à partir du même état, donne *en moyenne* le résultat $\langle \mathcal{A} \rangle_{\psi_\ell} = \langle\,\psi_\ell\,|\mathcal{A}|\,\psi_\ell\,\rangle$ (cf. postulats de mesure de la MQ). D'une mesure à l'autre, on observera toutefois des fluctuations (d'origine quantique) autour de cette valeur moyenne. Si le système est dans un macroétat $\{P_\ell\}$, on doit également tenir compte de l'incertitude sur l'état quantique : la moyenne de l'observable sera donnée par

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\text{macroetat}} = \overbrace{\sum_{\ell} P_{\ell}}^{\text{moyenne statistique}} \; \underbrace{\langle \psi_{\ell} | \mathcal{A} | \psi_{\ell} \rangle}_{\text{moyenne quantique}} \quad . \tag{6}$$

Pour en savoir plus :

- Chapitre 3 de : C. Texier and G. Roux, *Physique statistique : des processus élémentaires aux phénomènes collectifs*, Dunod, Paris (2017). 

- Chapitre 1 de : N. Sator and N. Pavloff, *Physique statistique*, Vuibert (2016). 

- Autres ouvrages de la bibliographie... cf. `http://lptms.u-psud.fr/christophe_texier/enseignements/enseignement-en-licence/l3-physique-statistique/`