Physique Statistique

Chapitre 1 :
Etats Quantiques Stationnaires d'un Système de Particules

1 Etats stationnaires d'un système à N particules

En mécanique quantique, chaque particule est caractérisée par sa fonction d'onde $\Psi(\vec{r},t)$ et d'énergie ε_s solution de l'équation de Schrödinger :

$$\boxed{H\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}} \qquad (1)$$

A l'équilibre, quand le nombre N de particules et l'énergie E ne varient pas avec le temps, cette équation devient :

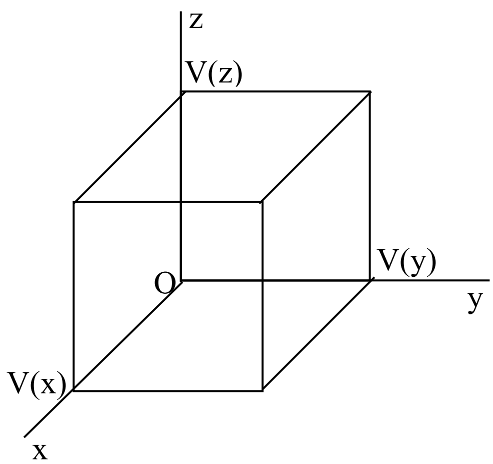
$$\boxed{H\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})} \qquad (2)$$

Cas d'une particule dans une boîte

Dans ce cas, l'équation (2) devient :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)\right]\Psi = E\Psi \qquad (3)$$

On suppose V = 0 dans la boîte, et V = ∞ sur les bords.



L'équation (3) s'écrit donc :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right] = E\Psi \qquad (4)$$

Si la boîte est cubique de côté « L », la solution sera :

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right) \qquad \text{avec } n_x, n_y, n_z \text{ entiers } >0 \qquad (5)$$

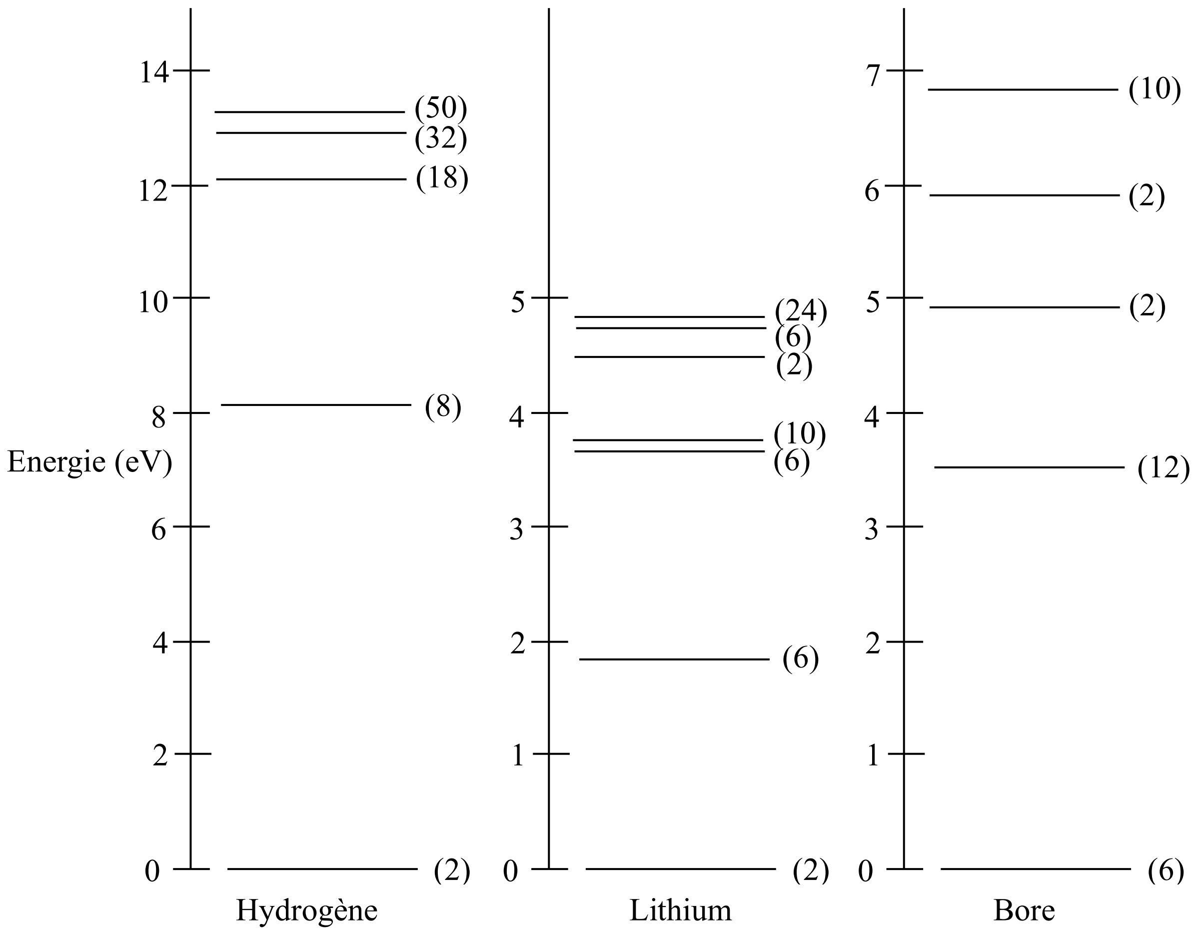
Chaque fonction d'onde décrit un état quantique caractérisé par une énergie donnée.

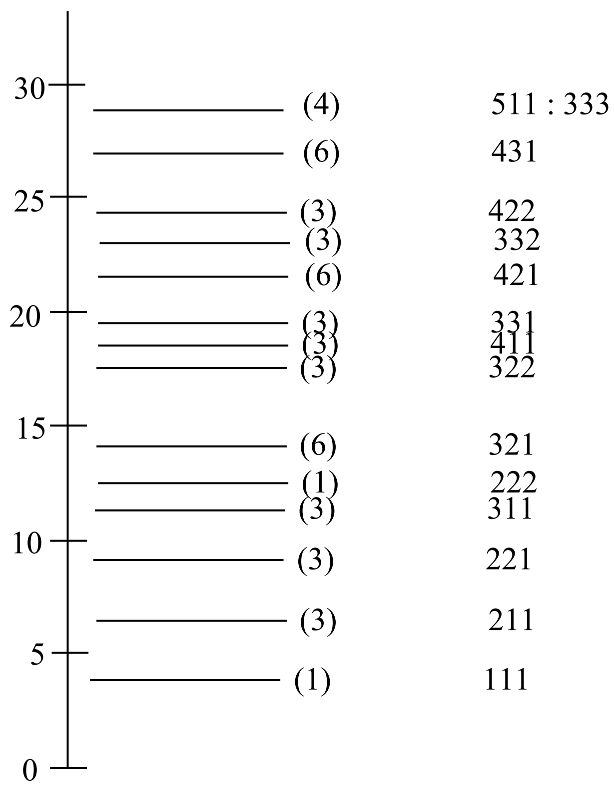
Pour une particule, la fonction d'onde est souvent appelée « **orbitale** »

Pour un système à **N** particules, il peut y avoir plusieurs fonctions d'onde (états quantiques) correspondant à une seule énergie. On dit que ce niveau est dégénéré. Le nombre d'états ayant la même énergie est appelé : ***la multiplicité d'états*** ou ***le nombre de dégénérescences.***

En physique statistique, il est important de dénombrer le nombre d'états, c'est ce qui va permettre de déterminer les propriétés thermodynamiques du système physique.

2 Exemples simples des états quantiques et des multiplicités

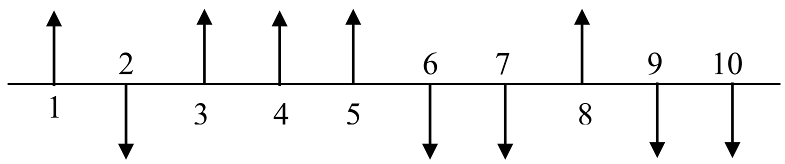




Particules dans une boîte cubique

<u>3 Système modèle à deux états quantiques</u>

Pour simplifier l'étude, on suppose que les **N** particules n'ont que deux états possibles. On dit que c'est un système binaire. Par exemple une chaîne de petits aimants (spins) situés le long d'une ligne séparée d'une distance **a** et numérotés de **1** à **N**.



N=10

Si aucun champ magnétique n'est appliqué, les aimants possèdent chacun un champ magnétique $\vec{m}$ orienté de façon aléatoire vers le haut ou le bas. Par exemple, **+m** si le champ est vers le haut, et **-m** s'il est vers le bas.

Autre exemple de système binaire :

- Un parking avec 10 places occupées ou vides.
- Un lancer de 10 pièces en regardant le résultat pile ou face.

Question :

Combien y a-t-il de façons de ranger ces **N** petits aimants indépendants et discernables ? C'est le nombre de configurations.

Réponse :

Pour le premier aimant :**+/- m**

Pour le deuxième aimant :**+/- m**

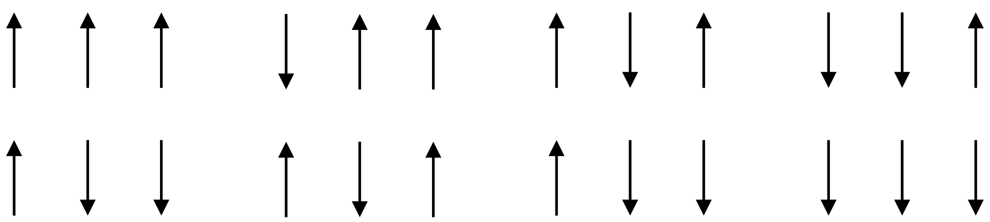
……..

Il y a donc $\mathbf{2^N}$ configurations possibles. Chaque façon représente une configuration possible pour le système, c'est à dire un état quantique possible.

Si N=2, les états quantiques seront :

$2^2=4$

Si N=3, les états quantiques seront :



$2^3=8$

<u>4 Moment magnétique total du système</u>

Soit $\vec{M} = \sum_{i=1}^{N} \vec{m}_i$, le moment magnétique total des **N** aimants de moment magnétique $\vec{m}_i$.

Les valeurs possibles de $\vec{M}$ seront :

Nm, (N-2)m, (N-4)m, (N-6)m, ……-Nm

Il y a donc N+1 valeurs possibles pour 2^N états quantiques. Dans le cas général N>>1, alors 2^N>>N+1.

Il y a beaucoup plus d'états quantiques que de valeurs de moments magnétiques $\vec{M}$. Certaines valeurs des moments magnétiques $\vec{M}$ sont donc dégénérées.

Exemples :

N=2

$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\downarrow$
+2m	0	0	-2m

	dégénérescence
+2m	1
0	2
-2m	1

N=3

$\uparrow\uparrow\uparrow$	$\downarrow\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow$	$\downarrow\downarrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow\downarrow$	$\downarrow\downarrow\downarrow$
+3m	+m	+m	-m	-m	+m	-m	-3m

	dégénérescence
+3m	1
+m	3
-m	3
-3m	1

Cas général

Dans le cas général, M=Nm, et M= - Nm sont les seuls états singuliers.

Il y a « N » façons d'avoir un seul aimant vers le bas et tous les autres vers le haut, et réciproquement. Dans ce cas, le champ magnétique sera :

$$M=(N-1)m + (-m)=(N-2)m$$

C'est ce que l'on vérifie :

N=2	M=0	2 états
N=3	M=1	3 états

5 Représentation symbolique

On peut retrouver les résultats précédents en faisant des multiplications symboliques :

Cas N=2

$$(\uparrow + \downarrow).(\uparrow + \downarrow) = \uparrow\uparrow + \uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow + \downarrow\downarrow$$

On retrouve les 4 cas précédents

6 Enumération des états et leurs multiplicités (dégénérescences)

On appelle ces petits aimants à deux états des systèmes de moment $\vec{m}$.

On appelle N_+ le nombre de systèmes ↑
On appelle N_- le nombre de systèmes ↓

Donc :

$N_+ + N_- = N$	**N** est le nombre total de systèmes
$N_+ - N_- = s$	**s** est l'excès de spin

Quand on inverse l'orientation d'un spin, l'excès varie de deux unités. Donc **s** est toujours un entier pair. **s** est une variable aléatoire qui varie de –**N** à +**N**.

On peut écrire :

$$\vec{M} = \sum_{i=1}^{N} \vec{m}_i = N_+\vec{m} - N_-\vec{m} = \left(N_+ - N_-\right).\vec{m}$$

$\vec{M} = s\vec{m}$

$M = sm$ avec **s** positif ou négatif $m = |\vec{m}|$

Les valeurs de **s** varient de –**N** à +**N** (entier pair). Par commodité, comme on traite de grands nombres, on prendra **N** entier très grand et pair.

On aura alors :

$$N_+ = \frac{N+s}{2} \quad \text{et} \quad N_- = \frac{N-s}{2}$$

Exemple : N=2, alors 2^N=4 configurations possibles

s=-2	↓↓	une seule configuration
s=0	↑↓ ou ↓↑	deux configurations
s=+2	↑↑	une seule configuration

Si on applique un champ magnétique externe au système on lui communique de l'énergie dont la valeur est :

$E_s = -\vec{M}.\vec{B}$ $\qquad\qquad$ $\vec{B}$ est l'induction magnétique appliquée

$E_s = -smB$

Dans l'exemple à deux spins, on trouve trois niveaux d'énergie E_S dépendant des trois valeurs de s (-2, 0, +2).

E_{-2} et E_{+2} ne sont pas dégénérés

E_0 est doublement dégénéré (multiplicité double)

$$\left(\underset{1}{\uparrow} + \underset{1}{\downarrow}\right) \times \left(\underset{2}{\downarrow} + \underset{2}{\uparrow}\right) = \underset{1\ \text{état}}{\uparrow\ \uparrow} + \underset{2\ \text{états}}{2\uparrow\ \downarrow} + \underset{1\ \text{état}}{\downarrow\ \downarrow}$$

On peut écrire :

Pour N=2

$$\left(\uparrow + \downarrow\right)^2 = \uparrow\ \uparrow + 2\uparrow\ \downarrow + \downarrow\ \downarrow$$

Pour N=3

$$\left(\uparrow + \downarrow\right)^3 = \uparrow\uparrow\uparrow + 3\downarrow\uparrow\uparrow + 3\downarrow\downarrow\uparrow + \downarrow\downarrow\downarrow$$

Pour n'importe quel N :

$$\left(\uparrow + \downarrow\right)^N = \text{---------------}$$

On trouve ce développement par le développement du binôme :

$$(x+y)^N = x^N + Nx^{N-1}y + \frac{N(N-1)}{2}x^{N-2}y^2 + \frac{N(N-1).(N-2)}{3.2}x^{N-3}y^3 + ...+ y^N$$

$$(x+y)^N = \sum_{t=0}^{N} \frac{N!}{(N-t).!.t!} x^{N-t} y^t$$

Si $t = N_- = \dfrac{N-s}{2}$ avec t=0, s=N et avec t=N, s=-N

$$(x+y)^N = \sum_{s=-N}^{+N} \frac{N!}{\left(\frac{N-s}{2}\right)!.\left(\frac{N+s}{2}\right)!} x^{\frac{N+s}{2}} y^{\frac{N-s}{2}}$$

$$\left(x+y\right)^{N}=\sum_{s=-N}^{+N}\frac{N!}{N_{-}!.N_{+}!}x^{N+}y^{N-}$$

La loi binomiale pour les spins s'écrit :

$$\left(\uparrow+\downarrow\right)^{N}=\sum_{s=-N}^{+N}\frac{N!}{N_{-}!N_{+}!}\uparrow^{N+}\downarrow^{N-}$$

Le coefficient du terme $\uparrow^{N+}\downarrow^{N-}$ donne le nombre de configurations ayant $\mathbf{N_+}$ spins vers le haut et $\mathbf{N_-}$ spins vers le bas d'excès de spins **s**. C'est donc la multiplicité de cet état caractérisé par le nombre **s**.

On note $$g(N,s)=\frac{N!}{\left(\frac{N+s}{2}\right)!.\left(\frac{N-s}{2}\right)!}=\frac{N!}{N_{+}!.N_{-}!}$$

C'est le nombre de configurations possibles (configurations) pour produire avec N spins le moment magnétique total M=sm.

Le nombre total de configurations est :

$$2^{N}=\sum_{s=-N}^{+N}g\left(N,s\right)$$

Pour un système de N particules ayant chacune 2 états propres, le nombre d'états possibles (configurations possibles) est $\mathbf{2^N}$.

Si N=10, 2^{10}=1024

s=0, $g(10,0)=\dfrac{10!}{5!.5!}=252$

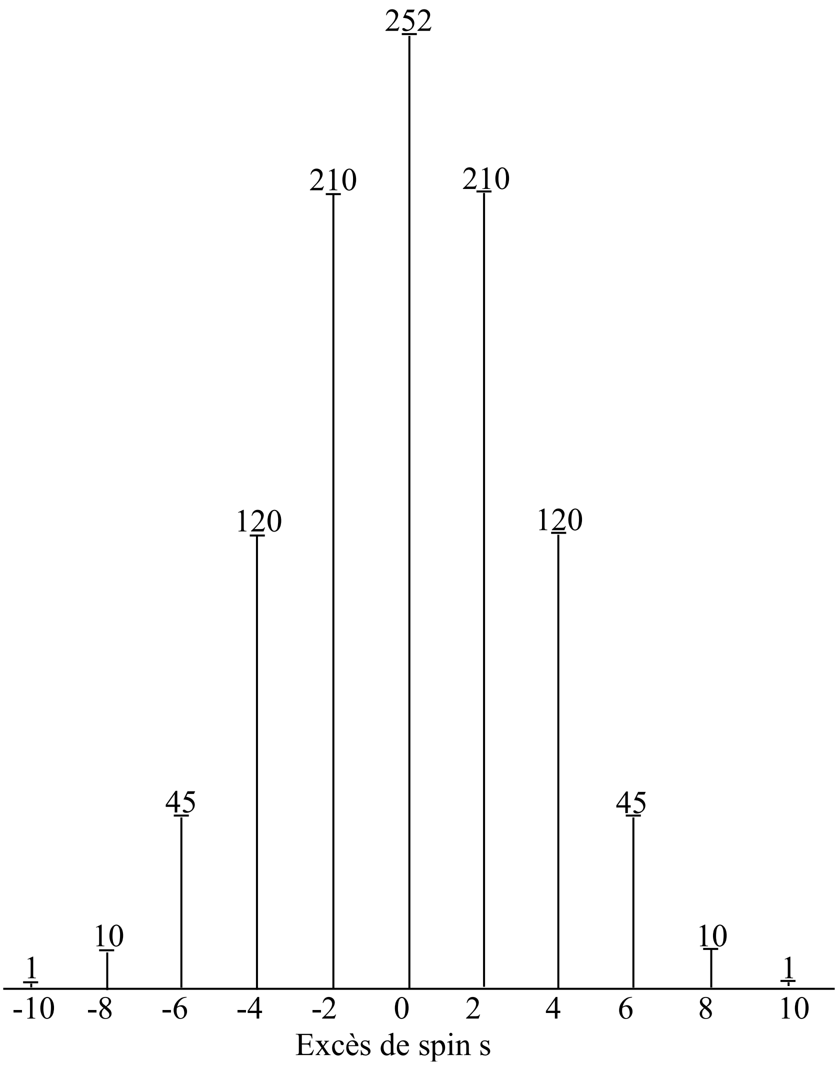
s=±2, $g(10,\pm2)=\dfrac{10!}{6!.4!}=210$

s=±4, $g(10,\pm4)=\dfrac{10!}{7!.3!}=120$

s=±6, $g(10,\pm6)=\dfrac{10!}{8!.2!}=45$

s=±8, $g(10,\pm8)=\dfrac{10!}{9!.1!}=10$

s=±10, $g(10,\pm10)=\dfrac{10!}{10!.0!}=1$



Quelle est la probabilité d'avoir une configuration (un état) présentant le moment magnétique M=sm :

$$\boxed{P(sm) = \frac{g(N,s)}{2^N}}$$

7 Largeur de la fonction multiplicité d'états $g(N,s)$

Par expérience, un système physique en équilibre thermique (à température constante) conserve des propriétés bien définies proches des valeurs moyennes stationnaires, c'est à dire à probabilité maximum. La fonction $g(N,s)$ doit être très raide comme un pic, comme on le voit ci-dessus avec le schéma pour N=10.

En général N est très grand, et on cherche donc une approximation analytique de $g(N,s)$.

7.1 Approximation de $g(N,s)$ pour N grand

Comme N est grand, $g(N,s)$ est grand aussi. On préfère donc travailler avec le logarithme Népérien : $\ln g(N,s)$.

Or nous avons vu que :

$$g(N,s) = \frac{N!}{\left(\frac{N+s}{2}\right)!.\left(\frac{N-s}{2}\right)!} = \frac{N!}{N_+!.N_-!}$$

donc :

$$\ln g(N,s) = \ln(N!) - \ln\left(\frac{N+s}{2}\right)! - \ln\left(\frac{N-s}{2}\right)!$$

ou

$$\ln g(N,s) = \ln(N!) - \ln(N_+!) - \ln(N_-!)$$

Formule de Sterling :

Pour **N** grand, il existe l'approximation :

$$N! = (2\pi N)^{1/2} N^N \exp\left(-N + \frac{1}{12N} + ...\right)$$

N étant grand, on peut négliger $\frac{1}{12N}$ devant N

Donc $$N! = (2\pi N)^{1/2} N^N \exp(-N)$$

En prenant le logarithme des deux membres, on obtient :

$$\ln(N!) = \frac{1}{2}\ln(2\pi) + \frac{1}{2}\ln(N) + N\ln(N) - N$$

Ou encore :

$$\ln(N!) = \frac{1}{2}\ln(2\pi) + \left(N + \frac{1}{2}\right)\ln(N) - N$$

Calcul de $\ln(g(N,s))$

$$\ln(N!) = \frac{1}{2}\ln(2\pi) + \left(N + \frac{1}{2}\right).\ln(N) - N \qquad (6)$$

de la même façon :

$$\ln(N_+!) = \frac{1}{2}\ln(2\pi) + \left(N_+ + \frac{1}{2}\right).\ln(N_+) - N_+ \qquad (7)$$

$$\ln(N_-!) = \frac{1}{2}\ln(2\pi) + \left(N_- + \frac{1}{2}\right).\ln(N_-) - N_- \qquad (8)$$

En remplaçant **N** par **N₊+N₋** dans (6), on obtient :

$$\ln(N!)=\frac{1}{2}\ln(2\pi)-\frac{1}{2}\ln N+\ln N+(N_{+}+N_{-}).\ln(N)-N_{+}-N_{-}$$

$$\ln(N!)=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{2\pi}{N}\right)+\left(N_{+}+\frac{1}{2}+N_{-}+\frac{1}{2}\right).\ln(N)-N_{+}-N_{-} \qquad (9)$$

Si on fait l'opération : (9)-(8)-(7), sachant que :

$$\ln g(N,s)=\ln(N!)-\ln(N_{+}!)-\ln(N_{-}!)$$

On obtient :

$$\ln g(N,s)=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{2\pi}{N}\right)+\left(N_{+}+\frac{1}{2}\right)\ln(N)+\left(N_{-}+\frac{1}{2}\right)\ln(N)-(N_{+}+N_{-})-\frac{1}{2}\ln(2\pi)-\left(N_{+}+\frac{1}{2}\right)\ln(N_{+})+N_{+}-\frac{1}{2}\ln(2\pi)-\left(N_{-}+\frac{1}{2}\right)\ln(N_{-})+N_{+}$$

$$\ln g(N,s)=-\frac{1}{2}\ln(2\pi)-\frac{1}{2}\ln(N)+\left(N_{+}+\frac{1}{2}\right).\ln\frac{N}{N_{+}}+\left(N_{-}+\frac{1}{2}\right).\ln\frac{N}{N_{-}}$$

$$\ln g(N,s)=-\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1}{2\pi N}\right)-\left(N_{+}+\frac{1}{2}\right).\ln\frac{N_{+}}{N}-\left(N_{-}+\frac{1}{2}\right).\ln\frac{N_{-}}{N}$$

Or $N_{+}=\dfrac{N+s}{2}$

donc $\dfrac{N_{+}}{N}=\dfrac{1}{2}\left(1+\dfrac{s}{N}\right)$

et $\ln\dfrac{N_{+}}{N}=-\ln 2+\ln\left(1+\dfrac{s}{N}\right)$

or si on fait un développement limité : $\ln(1+\varepsilon)=\varepsilon-\dfrac{\varepsilon^{2}}{2}+\dfrac{\varepsilon^{3}}{3}-......$

on obtient : $\ln\dfrac{N_{+}}{N}=-\ln 2+\dfrac{s}{N}-\dfrac{s^{2}}{2N^{2}}$

de même : $\ln\dfrac{N_{-}}{N}=-\ln 2-\dfrac{s}{N}-\dfrac{s^{2}}{2N^{2}}$

Donc :

$$\ln(g(N,s))=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1}{2\pi N}\right)-\left(N_{+}+\frac{1}{2}\right).\left(-\ln 2+\frac{s}{N}-\frac{s^{2}}{2N^{2}}\right)-\left(N_{-}+\frac{1}{2}\right).\left(-\ln 2-\frac{s}{N}-\frac{s^{2}}{2N^{2}}\right)$$

En regroupant les termes :

$$\ln(g(N,s))=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1}{2\pi N}\right)-\left(N_{+}+\frac{1}{2}\right).\left(-\ln 2+\frac{s}{N}-\frac{s^{2}}{2N^{2}}\right)-\left(N_{-}+\frac{1}{2}\right).\left(-\ln 2-\frac{s}{N}-\frac{s^{2}}{2N^{2}}\right)$$

$$\ln(g(N,s))=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1}{2\pi N}\right)+(N+1).\left(\ln 2+\frac{s^{2}}{2N^{2}}\right)+\frac{s}{N}\left(N_{-}+\frac{1}{2}-N_{+}-\frac{1}{2}\right)$$

$$\text{or } N_{-}+\frac{1}{2}-N_{+}-\frac{1}{2}=-s$$

$$\ln(g(N,s))=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1}{2\pi N}\right)+N\ln 2+\frac{s^{2}}{2N}+\ln 2+\frac{s^{2}}{2N^{2}}-\frac{s^{2}}{N}$$

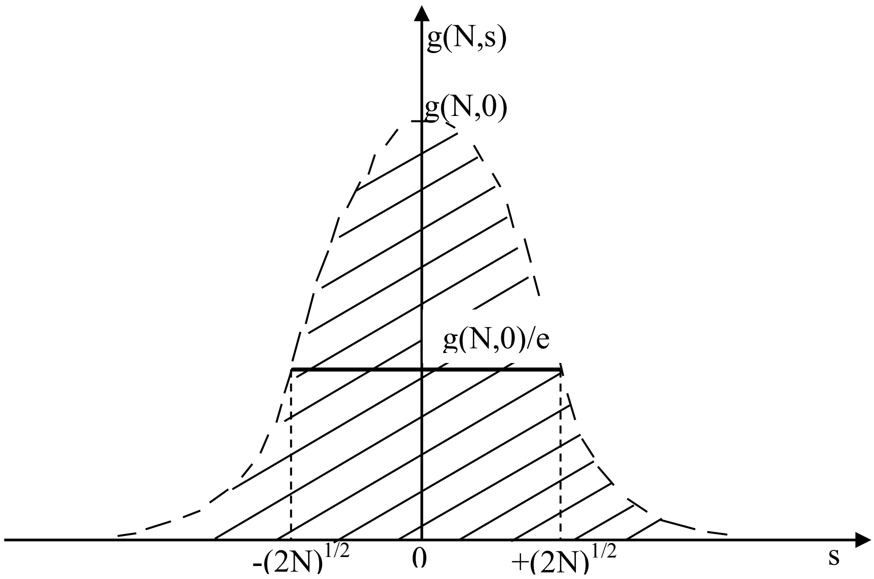
Finalement : $$\boxed{\ln\left(g\left(N,s\right)\right)=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{2}{\pi N}\right)+N\ln 2-\frac{s^2}{2N}}$$

Si s=0, $$\ln\left(g\left(N,0\right)\right)=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{2}{\pi N}\right)+N\ln 2$$

$$g\left(N,0\right)=\sqrt{\frac{2}{\pi N}}2^N$$

$$\boxed{g\left(N,s\right)=g\left(N,0\right)e^{\frac{-s^2}{2N}}}$$

g(N,s) que l'on note aussi $g_N(s)$, est appelée distribution de Gauss.



7.2 Nombre total de configurations possibles

Le nombre total de configurations est l'intégrale de moins l'infini à plus l'infini du nombre de configurations.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g\left(N,s\right)ds=2^N$$ C'est l'aire hachurée sous la courbe

Nous comparons le calcul exact avec N=50, à la valeur approchée obtenue avec la relation des grands nombres : $g\left(N,0\right)=\sqrt{\frac{2}{\pi N}}2^N$

Valeur exacte : $g(N,0) = \dfrac{N!}{\frac{N}{2}!.\frac{N}{2}!} = \dfrac{50!}{25!x25!} = 1{,}264.10^{14}$

Valeur approchée : $g(N,0) = 2^{50}\sqrt{\dfrac{2}{3{,}14x50}} = 1{,}270.10^{14}$

On voit que pour N=50 la valeur approchée est quasiment identique à la valeur exacte.

Largeur de la distribution de Gauss

On calcule la largeur de la distribution de Gauss quand la hauteur vaut $\dfrac{g(N,0)}{e}$

Quand $s^2 = 2N$, c'est à dire $s = \sqrt{2N}$, alors $g\left(N,\sqrt{2N}\right) = \dfrac{g(N,0)}{e}$

La largeur de la fonction de distribution Gaussienne sera :

$$\Delta s = 2\sqrt{2N}$$

Il est intéressant de comparer la largeur Δs à la variation de **s** qui va de **–N** à **+N**

$$\frac{\Delta s}{2N} = \frac{2\sqrt{2N}}{2N} = \sqrt{\frac{2}{N}}$$

La largeur est d'autant plus faible que N est grand.

<u>8 Rappels des probabilités</u>

Pour continuer avec la physique statistique, nous avons besoin de certains outils du calcul des probabilités.

Cas du lancer d'une pièce de monnaie

Soit η le nombre de lancers d'une pièce de monnaie, il y aura η mesures.
Soit η_F le nombre de mesures donnant face.
Soit η_P le nombre de mesures donnant pile.

On aura donc : $\eta_F + \eta_P = \eta$

La probabilité de trouver face sera : $P_F = \dfrac{\eta_F}{\eta}$

La probabilité de trouver pile sera : $P_P = \dfrac{\eta_P}{\eta}$

Donc : $P_P + P_F = 1$

8.1 Valeur moyenne d'ensemble

Au lieu d'envoyer η pièces de monnaies en même temps, on peut jeter η pièces de monnaie en même temps.

On peut donc dire que :

$\boxed{\text{Un système de } \eta \text{ mesures est équivalent à } \eta \text{ systèmes de une mesure}}$

Exemple :Valeur moyenne des notes d'une classe de N élèves

Soit **s** la note de chaque élève, elle varie de 0 à 20.

N_s est le nombre d'élèves ayant obtenus la note **s**.

$P_s = \dfrac{N_s}{N}$ est la probabilité d'avoir la note **s** dans cette classe.

La note moyenne $\bar{s}$ est donc : $\bar{s} = \dfrac{N_0.0 + N_1.1 + N_2.2 + ...N_{20}.20}{N} = \displaystyle\sum_{s=0}^{20} \frac{N_s.s}{N}$

$$\boxed{\bar{s} = \sum_s P_s.s}$$

Théorème ergodique (ou d'ergodicité)

La valeur moyenne d'ensembles est supposée égale à la valeur moyenne de la fonction f(t) qui prendra des valeurs différentes f(t) à des temps « t » différents au cours d'une période « T ».

$$\boxed{\bar{f}(t) \equiv f = \frac{1}{T}\int_0^T f(t)dt}$$

En pratique cela signifie qu'un système qui peut atteindre un certain nombre d'états, si on lui en laisse le temps, passera par tous ces états à un moment ou à un autre. Evidemment si le nombre de particules est très élevé, les chances que le système passe par certains états est très faible. Par exemple dans une pièce où se trouve un très grand nombre de molécules de gaz, d'après le théorème d'ergodicité, à un moment donné, toutes les molécules pourraient se retrouver dans un coin de la pièce, laissant le reste de la pièce vide. Ceci est vrai, mais il faudrait attendre des temps astronomiques pour que cela ait une chance de se produire.

8.2 Conséquences

Soient **f(s)** et **g(s)** deux observables dépendant de la variable aléatoire **s** :

i) $\overline{f+g} = \sum_s P_s\left[f(s)+g(s)\right]$

$$\overline{f+g} = \sum_s P_s f(s) + \sum_s P_s g(s)$$

$$\boxed{\overline{f+g} = \bar{f} + \bar{g}}$$

ii) Si **C** est une constante :

$$\overline{Cf} = \sum_s P_s \, Cf(s)$$
$$\overline{Cf} = C\sum_s P_s \, f(s)$$
$$\boxed{\overline{Cf} = C\overline{f}}$$

iii) Soient **f(s)** et **g(t)** deux observables dépendant de **s** et **t**, variables aléatoires indépendantes :

$$P_{st} = P_s \, P_t$$
$$\overline{f(s).g(t)} = \sum_s \sum_t P_{st} f(s).g(t)$$
$$\overline{f(s).g(t)} = \sum_s \sum_t P_s \, P_t \, f(s).g(t)$$
$$\overline{f(s).g(t)} = \sum_s P_s \, f(s) \sum_t P_t \, g(t)$$
$$\boxed{\overline{f.g} = \overline{f}.\overline{g}}$$

8.3 Dispersion ou variance

Soit **s** la valeur d'une variable aléatoire. Soit $\overline{s}$ sa valeur moyenne.
L'écart absolu ou la fluctuation est donnée par :

$$\boxed{\Delta s = s - \overline{s}}$$

La valeur moyenne des écarts Δs est :

$$\overline{\Delta s} = \overline{s - \overline{s}} = \overline{s} - \overline{\overline{s}}$$

$$\boxed{\overline{\Delta s} = 0}$$

la valeur moyenne des écarts étant nulle, on définit la variance ou l'écart quadratique moyen de **s** :

$$\overline{(\Delta s)^2} = \overline{(s - \overline{s})^2} = \sum_s P_s \, (s - \overline{s})^2$$
$$\boxed{\overline{(\Delta s)^2} \geq 0}$$

On mesure donc mieux avec la variance les fluctuations de la valeur de **s**.

$$\overline{(\Delta s)^2} = \overline{(s - \overline{s})^2} = \overline{s^2 - 2s\overline{s} + (\overline{s})^2} = \overline{s^2} - \overline{2s\overline{s}} + (\overline{s})^2$$
$$\boxed{\overline{(\Delta s)^2} = \overline{s^2} - (\overline{s})^2}$$

La dimension de l'écart quadratique moyen est celui du carré de **s**

8.4 Déviation standard ou écart type

$\tilde{\Delta} s = \sqrt{\overline{(\Delta s)^2}}$ est appelée déviation standard ou écart type

Il a la dimension de **s**.

Remarques à retenir :

Dans le cas d'un système de N particules identiques dépendant de la variable s, on a :

Dispersion ou variance ou écart quadratique moyen : $\overline{(\Delta s)^2} \approx N$

La déviation standard ou écart type $\tilde{\Delta} s = \sqrt{\overline{(\Delta s)^2}} \approx \sqrt{N}$

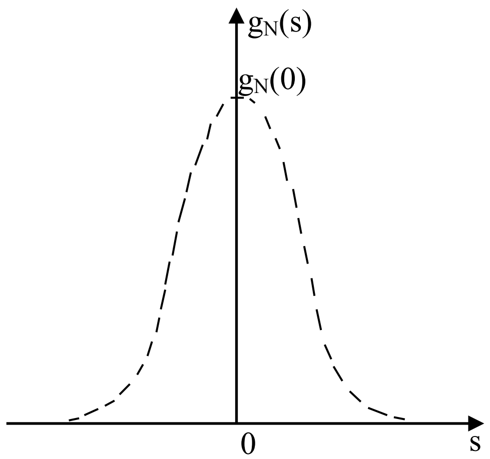
L'écart type fractionnel relatif est : $\dfrac{\tilde{\Delta} s}{N} = \dfrac{1}{\sqrt{N}}$

9 - <u>Valeurs moyennes de la distribution de Gauss</u>

Revenons à la distribution de Gauss de la fonction multiplicité $g_N(s)$ du système modèle à 2 états précédents.

$$g(N,s) = g(N,0)\exp\frac{-s^2}{2N}$$

$$g(N,0) = \left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} 2^N$$



Valeurs moyennes

$$\bar{s} = 0$$
$$\Delta s = s - \bar{s} = s$$
$$\overline{\Delta s} = \bar{s} = 0$$

Ce qui correspond au cas général.

Dispersion

$$\overline{(\Delta s)^2} = \overline{(s-\bar{s})^2} = \overline{(s-0)^2} = \overline{s^2} \geq 0$$

Calcul de cette dispersion :

La définition d'une valeur moyenne est : $\overline{f(s)} = \sum_s P_s f(s)$

$P_s = \dfrac{g(N,s)}{2^N}$ donc : $\overline{s^2} = \sum_s \dfrac{g(N,s)}{2^N} s^2$

Dans le cas de la distribution de Gauss :

$$\overline{s^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g(N,0)\exp\frac{-s^2}{2N}}{2^N} s^2 ds$$

Pour N grand :

On pose : $\frac{s^2}{2N} = X^2 \quad \Rightarrow s^2 = 2NX^2 \Rightarrow s = \sqrt{2N}X \quad \Rightarrow \quad ds = \sqrt{2N}dX$

Donc $\quad \overline{s^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g(N,0)}{2^N} \exp - X^2 .2NX^2 \sqrt{2N} dX$

$$\overline{s^2} = \frac{g(N,0)}{2^N}(2N)^{3/2} \int_{-\infty}^{+\infty} X^2 \exp(-X^2) dX$$

Or, $\int_{-\infty}^{+\infty} X^2 \exp(-X^2) dX = \sqrt{\frac{\pi}{4}}$

Et $g(N,0) = \left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} 2^N$

Donc $\quad \overline{s^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi N}}(2N)^{3/2}\sqrt{\frac{\pi}{4}} = 2N$

La variance (dispersion) est donc :

$$\overline{(\Delta s)^2} = \overline{(s - \overline{s})^2}$$

dans le cas de la Gaussienne : $\overline{s}=0$ donc $\overline{(\Delta s)^2} = \overline{s^2} = 2N \approx N$

L'écart type sera alors : $\widetilde{\Delta s} = \sqrt{\overline{(\Delta s)^2}} = \sqrt{2N} \approx \sqrt{N}$

L'écart type fractionnel sera :

$$\frac{\widetilde{\Delta s}}{2N} = \frac{\sqrt{2N}}{2N} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \approx \frac{1}{\sqrt{N}}$$

10 Energie du système binaire (modèle)

Soient N spins à l'équilibre thermique sans champ magnétique externe. Chaque spin a l'équiprobabilité de se trouver $\uparrow ou \downarrow$

En moyenne : $N_+ = \dfrac{N}{2}$ et $N_- = \dfrac{N}{2}$ et $\overline{s} = 0$

Si on applique un champ magnétique $\vec{B}$, l'énergie sera $u = -\vec{m}\vec{B}$
avec $\vec{m}$ comme moment magnétique d'un aimant

L'énergie totale sera :

$$U_s = \sum_1^N u_i = -\vec{B}\sum_i \vec{m}_i$$
$$U_s = -\vec{B}(N_+\vec{m} - N_-\vec{m})$$

avec l'excès de spin $s = N_+ - N_-$ on obtient : $U_s = -\vec{B}s\vec{m}$

En posant $\vec{M} = s\vec{m}$ on obtient : $U_s = -\vec{M}\vec{B}$

Chaque changement de spin fait varier l'énergie de 2mB