

Christophe Texier, Guillaume Roux

Physique statistique en pratique

52 problèmes corrigés avec
résumé du cours

DUNOD

Direction et conception graphiques de la couverture :
Nicolas Wiel et Elizabeth Riba (Graphiste)

© Dunod, 2025
11, rue Paul Bert, 92240 Malakoff
www.dunod.com
ISBN 978-2-10-088661-6

Table des matières

Avant-propos & Mode d'emploi	vii
Notations & Constantes fondamentales	viii
Résumé du cours	3
À quoi sert la physique statistique ?	3
1 Description microscopique des systèmes macroscopiques	3
1.1 Équilibre macroscopique	3
1.2 Description classique	4
1.3 Description quantique	5
2 Entropie	7
3 Les ensembles de la physique statistique	8
3.1 Ensemble microcanonique (système isolé)	8
3.2 Ensemble canonique (système thermostaté)	11
3.3 Ensemble grand canonique (contact avec un réservoir)	19
3.4 L'équivalence des ensembles à la limite thermodynamique	21
3.5 Relâchement de contraintes	22
4 Statistiques quantiques	25
4.1 L'ensemble grand canonique reformulé	26
4.2 Statistique de Bose-Einstein	27
4.3 Statistique de Fermi-Dirac	28
4.4 Limite diluée (régime classique, Maxwell-Boltzmann)	28
4.5 Le gaz de photons (thermodynamique du rayonnement)	29
4.6 La condensation de Bose-Einstein dans un gaz atomique	30
4.7 Le gaz parfait de fermions dégénéré	31
Annexe a : Compter les microétats – densité d'états	34
Annexe b : Correction des exercices du cours	38

Problèmes	45
5 Ensemble microcanonique	45
Pb. 1 : Défauts dans les cristaux (Schottky & Frenkel)	45
Pb. 2 : Polymère dirigé et force entropique	46
Pb. 3 : Pression osmotique	48
Pb. 4 : Énergie cinétique moyenne dans un gaz réel isolé	49
6 Ensembles canonique & grand canonique	50
Pb. 5 : Oscillateur anharmonique	51
Pb. 6 : Gaussianité des fluctuations de l'énergie	52
Pb. 7 : Loi d'action de masse	52
Pb. 8 : Refroidissement magnétique	54
Pb. 9 : Capacité calorifique d'un solide amorphe	55
Pb. 10 : Gaz en rotation et « ensemble isotherme-isomoment cinétique »	57
Pb. 11 : Capacité calorifique du soleil et sa stabilité	58
Pb. 12 : Potentiel chimique local	60
Pb. 13 : Contribution de l'adsorption à la capacité calorifique	61
Pb. 14 : Adsorption sur une surface - modèles de Langmuir et modèle B.E.T.	62
Pb. 15 : Adsorption du dihydrogène sur une surface	63
Pb. 16 : Allostérie dans l'hémoglobine	65
7 Équivalence entre ensembles	66
Pb. 17 : Fluctuations de l'énergie dans un gaz parfait	66
Pb. 18 : Piston et ensemble isotherme-isobare	67
8 Gaz	69
Pb. 19 : Capacité calorifique rotationnelle d'un gaz de molécules HD	69
Pb. 20 : Équation d'état d'un gaz réel et développement du viriel	72
Pb. 21 : Détente de Joule-Thomson	74
9 Thermodynamique des oscillateurs	76
Pb. 22 : Équation d'état de Mie-Grüneisen des corps solides	76
Pb. 23 : Thermodynamique d'une corde vibrante	78
Pb. 24 : Élasticité de l'ADN	80
Pb. 25 : Fluctuations électriques et théorème de Johnson-Nyquist	82
Pb. 26 : Modes magnons dans un ferromagnétique	85
10 Modèle d'Ising et transitions de phase	87
Introduction : le modèle d'Ising	87
Pb. 27 : Interaction ferromagnétique <i>versus</i> anti-ferromagnétique	88
Pb. 28 : Chaîne d'Ising et matrices de transfert	89
Pb. 29 : Chaîne d'Ising et chaîne de spins vectoriels	91
Pb. 30 : Modèle de Curie-Weiss et transition para-ferro	92
Pb. 31 : Modèle d'Ising pour une interaction arbitraire et champ moyen	94
Pb. 32 : Susceptibilité du modèle d'Ising antiferromagnétique	97
Pb. 33 : Paramètres d'ordre couplés	98
11 Statistiques quantiques	101
Pb. 34 : Statistiques quantiques dans l'ensemble microcanonique	101
Pb. 35 : Gaz parfaits quantiques sur réseau (ensemble microcanonique)	102
Pb. 36 : Second coefficient du viriel des gaz parfaits quantiques	103

12 Fermions	106
Pb. 37 : Gaz d'électrons bidimensionnel	106
Pb. 38 : Magnétisme d'un gaz d'électrons bidimensionnel	108
Pb. 39 : Gaz d'atomes fermioniques dans un piège harmonique	110
13 Bosons	112
Pb. 40 : Bosons libres en deux dimensions	112
Pb. 41 : Loi de Bloch et magnons dans un ferromagnétique	113
Pb. 42 : Fluctuations dans un condensat de Bose-Einstein	114
Pb. 43 : BEC dans un piège harmonique : effet de taille finie	115
14 Physique statistique hors équilibre	117
Introduction : la théorie cinétique	117
Pb. 44 : Théorème H de Boltzmann	118
Pb. 45 : Élargissement Doppler d'une raie d'absorption et mesure de k_B	120
Pb. 46 : Taches de l'expérience de Stern & Gerlach	122
Pb. 47 : Refroidissement évaporatif	124
Pb. 48 : Collisions dans un gaz et réaction chimique	125
Pb. 49 : Mouvement d'un objet macroscopique dans un gaz et friction	127
Pb. 50 : Polymérisation d'un filament d'actine	129
Pb. 51 : Effet thermo-ionique et effet photoélectrique	132
Pb. 52 : La résistance de Sharvin	134

Solutions **139**

Sol. du Pb. 1 : Défauts dans les cristaux (Schottky & Frenkel)	139
Sol. du Pb. 2 : Polymère dirigé et force entropique	140
Sol. du Pb. 3 : Pression osmotique	144
Sol. du Pb. 4 : Énergie cinétique moyenne dans un gaz réel isolé	146
Sol. du Pb. 5 : Oscillateur anharmonique	148
Sol. du Pb. 6 : Gaussianité des fluctuations de l'énergie	151
Sol. du Pb. 7 : Loi d'action de masse	152
Sol. du Pb. 8 : Refroidissement magnétique	154
Sol. du Pb. 9 : Capacité calorifique d'un solide amorphe	156
Sol. du Pb. 10 : Gaz en rotation et ensemble isotherme-isomoment cinétique	158
Sol. du Pb. 11 : Capacité calorifique du soleil et sa stabilité	161
Sol. du Pb. 12 : Potentiel chimique local	163
Sol. du Pb. 13 : Contribution de l'adsorption à la capacité calorifique	164
Sol. du Pb. 14 : Adsorption sur une surface - modèle de Langmuir et modèle B.E.T.	166
Sol. du Pb. 15 : Adsorption du dihydrogène sur une surface	167
Sol. du Pb. 16 : Allostérie dans l'hémoglobine	170
Sol. du Pb. 17 : Fluctuations de l'énergie dans un gaz parfait	172
Sol. du Pb. 18 : Piston et ensemble isotherme-isobare	173
Sol. du Pb. 19 : Capacité calorifique rotationnelle d'un gaz de molécules HD	177
Sol. du Pb. 20 : Équation d'état d'un gaz réel et développement du viriel	180
Sol. du Pb. 21 : Détente de Joule-Thomson	184
Sol. du Pb. 22 : Équation d'état de Mie-Grüneisen des corps solides	186
Sol. du Pb. 23 : Thermodynamique d'une corde vibrante	188
Sol. du Pb. 24 : Élasticité de l'ADN	190
Sol. du Pb. 25 : Fluctuations électriques et théorème de Johnson-Nyquist	193

Sol. du Pb. 26 : Modes magnons dans un ferromagnétique	195
Sol. du Pb. 27 : Interaction ferro vs antiferro	198
Sol. du Pb. 28 : Chaîne d'Ising et matrices de transfert	201
Sol. du Pb. 29 : Chaîne d'Ising et chaîne de spins vectoriels	206
Sol. du Pb. 30 : Modèle de Curie-Weiss et transition para-ferro	209
Sol. du Pb. 31 : Modèle d'Ising pour une interaction arbitraire et champ moyen . .	214
Sol. du Pb. 32 : Susceptibilité du modèle d'Ising antiferromagnétique	220
Sol. du Pb. 33 : Paramètres d'ordre couplés	222
Sol. du Pb. 34 : Statistiques quantiques dans l'ensemble microcanonique	225
Sol. du Pb. 35 : Gaz parfaits quantiques sur réseau (ensemble microcanonique) . .	227
Sol. du Pb. 36 : Second coefficient du viriel des gaz parfaits quantiques	229
Sol. du Pb. 37 : Gaz d'électrons bidimensionnel	232
Sol. du Pb. 38 : Magnétisme d'un gaz d'électrons bidimensionnel	234
Sol. du Pb. 39 : Gaz d'atomes fermioniques dans un piège harmonique	237
Sol. du Pb. 40 : Bosons libres en deux dimensions	240
Sol. du Pb. 41 : Loi de Bloch et magnons dans un ferromagnétique	241
Sol. du Pb. 42 : Fluctuations dans un condensat de Bose-Einstein	242
Sol. du Pb. 43 : BEC dans un piège harmonique : effet de taille finie	244
Sol. du Pb. 44 : Théorème H de Boltzmann	246
Sol. du Pb. 45 : Élargissement Doppler d'une raie d'absorption et mesure de k_B . .	247
Sol. du Pb. 46 : Taches de l'expérience de Stern & Gerlach	249
Sol. du Pb. 47 : Refroidissement évaporatif	251
Sol. du Pb. 48 : Collisions dans un gaz et réaction chimique	253
Sol. du Pb. 49 : Mouvement d'un objet macroscopique dans un gaz et friction . . .	256
Sol. du Pb. 50 : Polymérisation d'un filament d'actine	260
Sol. du Pb. 51 : Effet thermo-ionique et effet photoélectrique	263
Sol. du Pb. 52 : La résistance de Sharvin	265

Formulaire **269**

Fonction Gamma d'Euler	269
Formule de Stirling	270
Intégrales gaussiennes	270
Volume et surface de l'hypersphère	270
Fonction Beta d'Euler	271
Fonction Zeta de Riemann	271
Fonction polylogarithme	271
Transformation de Fourier	272
Distribution de Dirac	273
Formule de Poisson	274
Méthode du col	274

Bibliographie **275**

Index **276**

Avant-propos

Cet ouvrage propose une série de problèmes de physique statistique à l'usage des étudiants de premier et deuxième cycles universitaires (L3 et M1). Pendant plusieurs années, nous avons participé à « l'équipe physique statistique » (L3) au magistère de physique fondamentale d'Orsay à travers le cours magistral, les séances de travaux dirigés et les cours-TD du soir aux élèves d'écoles d'ingénieurs (Centrale-Supélec, IOGS...). C'est aussi le cours dispensé aux élèves de l'ENS Paris-Saclay. Nous avons également participé à un cours de M1 du magistère sur les « Transitions de phase » et au cours de physique statistique de la licence de Physique (L3). Dans le cadre de ces enseignements, nous avons produit un grand nombre de sujets d'examens : si quelques uns sont classiques, la majorité sont originaux. Après avoir quitté ces enseignements, il nous a semblé utile de publier une sélection des sujets (proposés entre 2010 et 2024), avec leurs corrigés, qui complètent notre ouvrage de cours [14] (ce dernier contient également de nombreux exercices et d'autres sujets de problèmes).

Nous souhaitons remercier certains collègues avec qui nous avons eu un plaisir particulier à travailler au sein de l'équipe d'enseignement pendant que l'un d'entre nous en avait la responsabilité : Meydi Ferrier, Giuseppe Foffi, Silvio Franz, Henk Hilhorst (auteur de trois sujets présentés ici), Roland Mastropolito, Leonardo Mazza, Corentin Morice, Pascal Simon et Bartjan van Tent. Nous remercions également Matthieu Barbier, Georges Gauthier et Claire Marrache-Kikuchi. Travailler dans un laboratoire spécialisé en physique statistique est certainement un avantage pour enseigner cette discipline magnifique et dynamique. Nous remercions spécialement nos collègues avec qui nous avons échangé sur l'enseignement de la physique statistique : Martin Lenz, Satya Majumdar, Nicolas Pavloff et Emmanuel Trizac (aficionado de la théorie cinétique : nos discussions sont à l'origine du problème 46).

Orsay, le 10 mars 2025.

Mode d'emploi

Les sujets présentés ont été posés en examen. Les revoir avec un peu de recul nous a conduit à reformuler quelques parties pour les rendre plus accessibles, ou à ajouter quelques questions. Si quelques sujets ont été remaniés en profondeur, la majorité n'ont subi que des modifications superficielles. Trois problèmes sont des adaptations d'exercices de TD. *A priori*, le livre est plutôt destiné à un lecteur ou une lectrice suivant un cours de physique statistique et ayant déjà une petite familiarité avec le sujet. Une présentation approfondie est disponible dans notre livre [14] réédité récemment. Néanmoins, pour ceux ou celles qui souhaiteraient se « jeter directement dans le bain », nous avons tâché de rendre cet ouvrage de problèmes autonome en lui adjoignant un résumé de cours qui rappelle de manière synthétique les principales idées et méthodes de la physique statistique des systèmes à l'équilibre. Quelques petits exercices d'application ont été insérés dans ce résumé de cours pour permettre des illustrations simples et immédiates des outils. Ce résumé d'une trentaine de pages ne remplace pas un cours complet, mais en présente le squelette, et on y trouvera les principales formules utiles. Surtout, il cherche à dégager la méthode générale et à en donner une vision globale.

Les problèmes d'examen sont classés selon une organisation qui reprend celle de notre ouvrage [14]. En tête de chaque chapitre nous avons classé les problèmes selon la difficulté : **F**=facile, **M**=moyen, **D**=difficile. Au sein des problèmes, certaines questions plus difficiles sont repérées par des étoiles (*=un peu difficile, **=difficile, ***=très difficile...). Ces questions « étoilées » sont soit des questions d'examen en bonus, soit des questions ajoutées a posteriori, sur des points qui nous sont apparus intéressants en préparant ce livre.

Notations

$\stackrel{\text{def}}{=}$	égal par définition	dW	quantité infinitésimale de travail
$\simeq$ ou $\approx$	approximativement égal à	dQ	quantité infinitésimale de chaleur
$\sim$	de l'ordre de	$\rho(E)$	densité d'états
$\propto$	proportionnel à	$\Phi(E)$	densité d'états intégrée
$\forall$	quel que soit	$\Omega(E)$	nombre de microétats accessibles
$\mathbb{N}$	ens. des entiers naturels	S^*	entropie microcanonique
$\mathbb{Z}$	ens. des nombres relatifs	T^*	température microcanonique
$\mathbb{R}$	ens. des nombres réels	p^*	pression microcanonique
$\mathbb{C}$	ens. des nombres complexes	μ^*	potentiel chimique microcanonique
$\delta_{i,j}$	symbole de Kronecker	Z	fonction de partition canonique
$\delta(x)$	distribution de Dirac	F	énergie libre
$\theta_H(x)$	fonction de Heaviside	$\overline{E}^c$	moyenne canonique de l'énergie
$\text{Tr}\{\dots\}$	trace	p^c	pression canonique
$\times$	produit vectoriel	S^c	entropie canonique
$\otimes$	produit tensoriel	μ^c	potentiel chimique canonique
$\langle X \rangle$	moyenne de X	Ξ	fonction de grand partition
$\text{Var}(X)$	variance ($= \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$)	ξ_λ	fonction de grand partition pour l'état individuel λ
σ_X	écart-type ($= \sqrt{\text{Var}(X)}$)	J	grand potentiel
H	Hamiltonien	$\overline{N}^g$	moyenne grand canonique du nombre de particules
s	spin d'une particule	$\overline{E}^g$	moyenne grand canonique de l'énergie
γ	facteur gyromagnétique	p^g	pression grand canonique
		μ^g	potentiel chimique grand canonique
		S^g	entropie grand canonique

Constantes fondamentales

constante de Planck	$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
constante de Boltzmann	$k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$
nombre d'Avogadro	$\mathcal{N}_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
constante des gaz parfaits	$R = 8,31 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
vitesse de la lumière	$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$
charge élémentaire	$q_e = -1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$
masse de l'électron	$m_e = 0,91 \times 10^{-30} \text{ kg}$
masse du proton	$m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
magnéton de Bohr	$\mu_B = \frac{\hbar q_e }{2m_e} = 0,93 \times 10^{-23} \text{ J.T}^{-1}$
constante de gravitation	$G = 6,67 \times 10^{-11} \text{ m}^3.\text{kg}^{-1}.\text{s}^{-2}$

Résumé du cours

À quoi sert la physique statistique ?

La physique statistique permet de déduire, par l'utilisation de méthodes probabilistes, les propriétés des systèmes aux échelles macroscopiques à partir des lois qui gouvernent les constituants élémentaires aux échelles microscopiques.

La physique statistique a donc le statut d'une « *théorie sur-couche* » puisqu'il faut injecter l'information sur la description de l'échelle microscopique. Par exemple : à partir des lois décrivant le mouvement et les interactions entre les atomes (le principe fondamental de la dynamique de la mécanique newtonienne, la nature de l'interaction interatomique...), la physique statistique permet de prédire, et donc de comprendre, les propriétés à l'échelle macroscopique, comme les notions de température et de pression, ou l'existence de différentes phases de la matière (gazeuse, liquide, solide...).

Émergence : Il faut toutefois bien comprendre que le niveau *fondamental*¹ ne se trouve pas dans la description microscopique. En atteste que *différents* types de description de l'échelle microscopique peuvent conduire à des résultats *analogues* à l'échelle macroscopique.

Élémentaire $\neq$ Fondamental

Par exemple, l'existence de différentes phases (gazeuse, liquide, solide) n'est pas contenue dans les lois de Newton et des détails du potentiel d'interaction interatomique (mais seulement dans quelques propriétés générales). C'est le passage à la limite $N \rightarrow \infty$ atomes (en fait $N \sim \mathcal{N}_A \simeq 6 \times 10^{23}$) qui permet de comprendre l'*émergence* de ces différentes organisations de la matière au niveau macroscopique.

1 Description microscopique des systèmes macroscopiques

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

1.1 Équilibre macroscopique

Le cours s'intéresse aux systèmes à l'équilibre macroscopique, lorsque (i) toutes les grandeurs macroscopiques sont *stationnaires* et (ii) les flux macroscopiques sont nuls.

1. dans le sens de « fondements ».

1.2 Description classique

Considérons le cas concret (et important) d'un gaz d'atomes, (sans degrés de liberté internes). 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 :

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

Connaissant l'état initial, la logique de la mécanique classique consiste à déterminer la trajectoire $\vec{\Gamma}(t)$ en résolvant les équations du mouvement (en général $6N$ équations différentielles non linéaires du premier ordre couplées) :

$$\frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} = \frac{1}{m} \vec{p}_i(t) \quad \text{et} \quad \frac{d\vec{p}_i(t)}{dt} = \vec{F}_i(\vec{r}_1(t), \dots, \vec{r}_N(t)) \quad , \quad i = 1, \dots, N$$

où $\vec{F}_i$ est la force agissant sur l'atome i . Comme le nombre d'atomes est en général faramineux, de l'ordre du nombre d'Avogadro $N \sim \mathcal{N}_A \simeq 6 \times 10^{23}$, la résolution de ces équations est une entreprise désespérée... Au lieu de déterminer l'état $\vec{\Gamma}(t)$ (information déterministe), la physique statistique permet d'obtenir avec quelle probabilité le système occupe un microétat $\vec{\Gamma}$. Cette information probabiliste est encodée dans une distribution de probabilité dans l'espace des phases, que nous notons $\rho(\vec{\Gamma})$.

Un 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. $\rho(\vec{\Gamma}) d^{6N}\vec{\Gamma}$ est la probabilité pour que le système se trouve dans le volume élémentaire $d^{6N}\vec{\Gamma}$ autour de $\vec{\Gamma}$. Elle satisfait la condition de normalisation $\int \rho(\vec{\Gamma}) d^{6N}\vec{\Gamma} = 1$.

Objectif : La physique statistique permet 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.).

$$\ll \text{macroétat} \gg : \rho(\vec{\Gamma})$$

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 $H(x, p_x) = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Si le système est *isolé*, l'énergie E est conservée et le système est dans un microétat (x, p_x) sur la « surface » $H(x, p_x) = E$, i.e. sur une ellipse. Si l'on suppose que tous les points de l'ellipse sont équiprobables, la distribution dans l'espace des phases a la forme $\rho(x, p_x) = C \delta(E - \frac{1}{2m}p_x^2 - \frac{1}{2}m\omega^2x^2)$. On pourra vérifier que $C = \omega/(2\pi)$.

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* particulière de la dynamique

$$\overline{\mathcal{A}}^{(\mathcal{T})} \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{\mathcal{T}} \frac{dt}{\mathcal{T}} \mathcal{A}(\vec{\Gamma}(t)) . \quad (1.1)$$

Exemple d'observable : l'énergie cinétique totale, $\mathcal{A}(\vec{\Gamma}) \rightarrow E_c = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i^2 / 2m$.

L'approche de la physique statistique consiste à caractériser les propriétés statistiques. On peut ainsi considérer la *moyenne probabiliste*

$$\langle \mathcal{A} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int d^{6N} \vec{\Gamma} \rho(\vec{\Gamma}) \mathcal{A}(\vec{\Gamma}) . \quad (1.2)$$

L'**hypothèse ergodique** implique l'équivalence entre les deux moyennes

$$\lim_{\mathcal{T} \rightarrow \infty} \overline{\mathcal{A}}^{(\mathcal{T})} = \langle \mathcal{A} \rangle . \quad (1.3)$$

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*, repose sur la connaissance de $\rho(\vec{\Gamma})$, et se révèlera très simple car ne nécessitant que très peu d'information, comme on le verra.

1.3 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 $\mathcal{H}$) :

« microétat » : $|\psi_\ell\rangle \in \mathcal{H}$

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 1 : états orbitaux d'une particule libre.— Les états quantiques stationnaires d'une particule libre de masse m sont des ondes planes. Dans une boîte cubique de côté L avec conditions aux limites de Dirichlet, les fonctions d'onde sont de la forme

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

où l'on a noté $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$. L'énergie de l'état est $E_{\vec{n}} = \pi^2 \hbar^2 \vec{n}^2 / (2mL^2)$. Il sera parfois plus commode de considérer une autre base d'ondes planes satisfaisant des conditions aux limites *périodiques*, telles que $\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z)$ (et idem pour les deux autres directions) :

$$\tilde{\psi}_{\vec{n}}(\vec{r}) = L^{-3/2} \exp \{2i\pi \vec{n} \cdot \vec{r}/L\} \text{ avec } n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}.$$

L'énergie est alors $\tilde{E}_{\vec{n}} = 2\pi^2 \hbar^2 \vec{n}^2 / (mL^2)$. Sur ces deux exemples $\ell \equiv (n_x, n_y, n_z)$.

Exemple 2 : états de spin.— Les particules élémentaires portent un moment cinétique intrinsèque appelé spin. La dimension de l'espace des états de spin est $(2s+1)$, où $2s$ est un entier. Un exemple important est le cas du spin $s = 1/2$ (électron, proton, neutron...) caractérisé par deux états de spin : par exemple la base des états propres de la composante S_z du vecteur spin : $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Contrairement aux états orbitaux de la particule dans la boîte que nous venons de discuter, *les états de spin n'admettent pas de description classique*.

Au lieu de suivre l'évolution temporelle de l'état quantique $|\Psi(t)\rangle$ solution de l'équation de Schrödinger $i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$, la physique statistique s'intéresse à la probabilité P_ℓ d'occuper un microétat $|\psi_\ell\rangle$ à un instant donné. La notion de macroétat correspond à se donner l'ensemble des probabilités d'occupation des microétats :

$$\ll \text{macroétat} \gg : \{P_\ell\}$$

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

Vocabulaire : par souci de simplicité, nous identifions ici « macroétat » = « mélange statistique » = « ensemble de la physique statistique ».

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 [13]). D'une mesure à l'autre, on observera toutefois des fluctuations (d'origine quantique) autour de cette valeur moyenne, caractérisées par $\Delta \mathcal{A}_{\psi_\ell}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \langle \mathcal{A}^2 \rangle_{\psi_\ell} - \langle \mathcal{A} \rangle_{\psi_\ell}^2$. Si le système est dans un macroétat $\{P_\ell\}$, on doit également tenir compte de notre ignorance de l'état quantique : la moyenne de l'observable est donnée par

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\text{macroétat}} = \overbrace{\sum_\ell P_\ell}^{\text{moyenne statistique}} \underbrace{\langle \psi_\ell | \mathcal{A} | \psi_\ell \rangle}_{\text{moyenne quantique}}. \quad (1.4)$$