L3 et Magistère de physique fondamentale,
DLMP & ENS-PSay

Examen partiel de Physique statistique
Mercredi 10 mars 2021

Durée de l'épreuve : **2h.**

L'utilisation de documents, calculatrices, téléphones portables,... est interdite.

Recommandations :
Lisez attentivement l'énoncé et rédigez *succinctement* et *clairement* votre réponse.
Vérifiez vos calculs (analyse dimensionnelle, etc) ; n'oubliez pas de vous **relire**.
Pensez aux **informations en annexe**.

1 Défauts de Frenkel (∼ 30mn)

Considérons un solide cristallin constitué de N atomes. Dans l'état fondamental, les atomes occupent les N sites du réseau cristallin, néanmoins, un atome peut quitter un site du réseau pour se placer sur un site interstitiel, ce qui a un coût énergétique $\varepsilon > 0$. On note N' le nombre de sites interstitiels disponibles (en général N et N' sont du même ordre de grandeur). Si n atomes occupent des sites interstitiels (donc $N - n$ atomes restent sur les N sites du réseau cristallin), l'énergie des atomes est $E = n\,\varepsilon$.

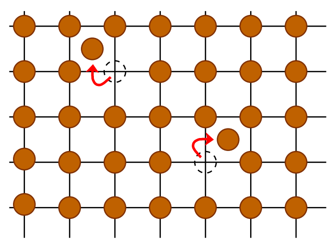

Figure 1 : *Cristal de $N = 35$ atomes avec deux défauts de Frenkel.*

1/ Énoncer le postulat fondamental de la physique statistique.

2/ Rappeler les définitions de l'entropie S^* et de la température T^* microcanoniques.

3/ Combien y a-t-il de manières de choisir les n atomes quittant les N sites du réseau ? Combien y a-t-il de manières pour que ces n atomes se placent parmi les N' sites interstitiels ?

4/ Déduire le nombre de microétats Ω correspondant à n atomes sur les sites interstitiels. Montrer que pour $n \ll N,\ N'$ on a

$$\Omega \simeq \frac{(N'N)^n}{(n!)^2} \tag{1}$$

5/ Déduire l'entropie microcanonique S^* des atomes du cristal et donner son expression dans la limite $N,\ N' \gg n \gg 1$.

6/ Déduire l'expression de la température $T^*(E)$. Inverser cette fonction afin de déterminer comment le nombre n d'atomes sur les sites interstitiels dépend de la température T^*, de N et de N'. L'hypothèse $n \ll N,\ N'$ de la question **4**/ correspond-elle aux hautes ou basses températures ? Tracer l'allure de n en fonction de T^* dans ce régime et commenter.

2 Variables conjuguées dans l'ensemble microcanonique (∼ 40mn)

Considérons un système dont l'énergie dépend d'un paramètre ϕ, une « force », conjugué à une observable X (par exemple le champ magnétique $\phi \to \mathcal{B}$ et l'aimantation $X \to M$). Autrement dit, la valeur de l'observable dans un microétat $|\,\ell\,\rangle$ est reliée à son énergie par

$$X_\ell = -\partial E_\ell / \partial \phi \,. \tag{2}$$

Si le système est isolé, on note $\overline{X}^*$ la moyenne microcanonique de l'observable (i.e. la moyenne sur les états accessibles $\in [E, E+\delta E]$). Notons S^* et T^* l'entropie et la température microcanoniques. L'objectif de l'exercice est de montrer la relation

$$\boxed{\overline{X}^* = T^* \frac{\partial S^*}{\partial \phi}} \tag{3}$$

et de discuter une application simple de cette formule très générale.

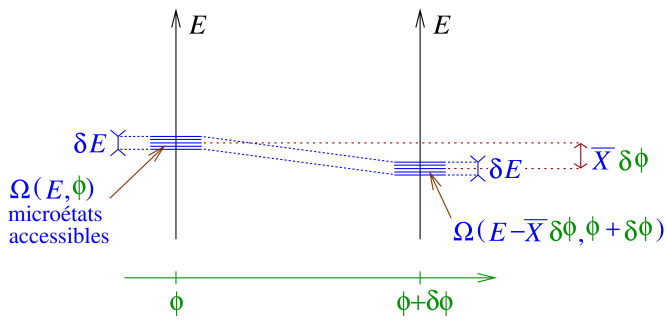

FIGURE 2 : *Évolution des microétats accessibles lors d'un changement du paramètre* $\phi \to \phi + \delta\phi$.

On note $\Omega(E, \phi)$ le nombre de microétats accessibles.

1/ Si l'on considère une transformation suffisamment lente, pilotée par une "petite" variation de la force, $\phi \to \phi + \delta\phi$, l'énergie du système change comme $E \to E - \overline{X}^*\,\delta\phi$, d'après (2). Sous une telle transformation, le nombre de microétats accessibles est conservé (Fig. 2). Démontrer alors la relation (3).

2/ Application : cristal de spins 1/2

On applique ces considérations dans un cas très simple : on considère un cristal (isolé) de N spins 1/2, soumis à un champ magnétique $\mathcal{B}$. On note $n_\pm$ le nombre de spins dans l'état $|\pm\rangle$ d'énergie $\varepsilon_\pm = \mp\varepsilon_\mathcal{B}$ avec $\varepsilon_\mathcal{B} = m_0\,\mathcal{B}$ où m_0 est l'aimantation d'un spin.

a) Donner l'expression du nombre de microétats accessibles Ω en fonction de N, n_+ et n_-.

b) Déduire l'entropie microcanonique S^* (en supposant N, $n_\pm \gg 1$). Justifier qu'elle peut s'écrire sous la forme $S^*(E, N, \mathcal{B}) = N\,k_\mathrm{B}\,s(E/N\varepsilon_\mathcal{B})$ et donner l'expression de la fonction adimensionnée $s(x)$.

c) Appliquer la formule (3) pour l'aimantation (i.e. $X \to M$ et $\phi \to \mathcal{B}$) et interpréter le résultat.

d) *Limite de haute température.*– Montrer que $s(x) \simeq \ln 2 - x^2/2$ pour $x \ll 1$. Déduire une expression approchée de la température magnétique T^*. Donner $\overline{M}^*$ en fonction de N, m_0, $\mathcal{B}$ et T^*. Interpréter le résultat.

e) Bonus (facultatif) : dans le cas plus général de spins $s > 1/2$, quelle partie de l'analyse changerait et quels résultats seraient inchangés ?

3 Oscillateur anharmonique ($\sim$ 45mn)

On considère un système en contact avec un thermostat à température T.

1/ Donner la définition de la fonction de partition canonique Z (on note $|\,\ell\,\rangle$ les microétats et E_ℓ les énergies).

2/ Comment déduit-on l'énergie moyenne $\overline{E}^{\mathrm{c}}$ de la fonction de partition (rappeler la démonstration).

3/ On considère un système unidimensionnel décrit par son hamiltonien $H(x,p)=\frac{p^2}{2m}+V(x)$. Le système est traité classiquement.

a) Montrer que la fonction de partition se factorise sous la forme $Z=Z_{\mathrm{cin}}Z_{\mathrm{pot}}$ où Z_{cin} et Z_{pot} sont respectivement associées aux parties cinétique et potentielle de l'énergie.

b) Calculer Z_{cin} et déduire l'énergie cinétique moyenne $\overline{E}^{\mathrm{c}}_{\mathrm{cin}}$.

c) Nous allons analyser Z_{pot} de manière approchée pour un potentiel $V(x)=\frac{1}{2}\kappa\,x^2+\lambda\,x^4$. Pour cela on écrit $\mathrm{e}^{-\beta V(x)}=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(x/a_2)^2}\,\mathrm{e}^{-(x/a_4)^4}$. Donner les expressions des deux échelles de longueurs a_2 et a_4 en fonction de T.

d) En traçant les allures de $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(x/a_2)^2}$ et $\mathrm{e}^{-(x/a_4)^4}$, justifier que le terme quartique est négligeable dans la limite des basses températures. Déduire Z_{pot} puis la contribution potentielle $\overline{E}^{\mathrm{c}}_{\mathrm{pot}}$ à l'énergie moyenne dans cette limite.

e) Dans la limite des hautes températures, le terme quadratique de $V(x)$ est négligeable. Montrer alors que $Z_{\mathrm{pot}}\propto\beta^{-\theta}$ et préciser la valeur de l'exposant θ. Déduire $\overline{E}^{\mathrm{c}}_{\mathrm{pot}}$.

f) Calculer la capacité calorifique $C_V=\partial\overline{E}^{\mathrm{c}}/\partial T$ dans les deux limites (avec $\overline{E}^{\mathrm{c}}=\overline{E}^{\mathrm{c}}_{\mathrm{cin}}+\overline{E}^{\mathrm{c}}_{\mathrm{pot}}$). Identifier l'échelle de température $T_{\mathrm{crossover}}$ séparant les deux régimes, qu'on exprimera en fonction de κ et λ. Tracer l'allure de C_V et interpréter physiquement.

Relisez-vous ($\sim$ 5mn)

Annexe

- Formule de Stirling : $\ln N!\approx N\ln N-N$ pour $N\gg1$.
- $N!/(N-m)!\simeq N^m$ pour $N\gg m$.
- $\int_{\mathbb{R}}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-a\,x^2}=\sqrt{\pi/a}$

Solutions sur la page du cours `http://lptms.u-psud.fr/christophe_texier/`