

CORRECTION DE L'EXAMEN DE PHYSIQUE STATISTIQUE DU 17 MAI 2021

cf. cours

$$4/ -\frac{\partial J}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} [k_B T \ln \Xi] = k_B \ln \Xi - k_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln \Xi = k_B \ln \Xi + k_B \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi = k_B \ln \Xi - k_B \beta \overline{E - \mu N^g} = \frac{\overline{E^g} - \mu \overline{N^g} - J}{T} = S^g. \text{ QED.}$$

Attention : écrire S et T sont conjuguées donc $S = -\frac{\partial J}{\partial T}$ est une démo de *thermo*, pas de *phystat*.

2 Capacité calorifique du soleil et sa stabilité

1/ Convertissons la température de cœur, $T_{\text{cœur}} = 15 \times 10^6$ K, en eV : $k_B T_{\text{cœur}} = 1.38 \times 10^{-23} \times 1.5 \times 10^7 / (1.6 \times 10^{-19}) \approx 1.3$ keV, ce qui est petit devant $m_e c^2 = 511$ keV, et encore plus devant $m_p c^2 = 938$ MeV. Ni les protons ni même les électrons ne sont dans un régime relativiste puisque $\varepsilon_{\text{cin}} \sim k_B T \ll m c^2$.

2/ On peut faire les calculs dans le cadre de n'importe quel ensemble puis utiliser l'équivalence entre les ensembles à la limite thermodynamique.

3/ Dans le cadre classique, les microétats sont les coordonnées et les impulsions des particules $\vec{\Gamma} = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$. La distribution canonique est $\rho^c(\vec{\Gamma}) = C e^{-\beta H(\vec{\Gamma})}$ où C est une normalisation ($\propto 1/Z$).

4/ On écrit la moyenne

$$\left\langle \Gamma_i \frac{\partial H(\vec{\Gamma})}{\partial \Gamma_j} \right\rangle = \int d^{6N} \vec{\Gamma} \rho^c(\vec{\Gamma}) \Gamma_i \frac{\partial H(\vec{\Gamma})}{\partial \Gamma_j} = -\frac{C}{\beta} \int d^{6N} \vec{\Gamma} \Gamma_i \frac{\partial e^{-\beta H(\vec{\Gamma})}}{\partial \Gamma_j} \quad (1)$$

on fait une I.P.P sur Γ_j

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\Gamma_j \Gamma_i \frac{\partial e^{-\beta H(\vec{\Gamma})}}{\partial \Gamma_j} = \left[\Gamma_i e^{-\beta H(\vec{\Gamma})} \right]_{\Gamma_j=-\infty}^{\Gamma_j=+\infty} - \int d\Gamma_j \overbrace{\frac{\partial \Gamma_i}{\partial \Gamma_j}}^{=\delta_{i,j}} e^{-\beta H(\vec{\Gamma})}$$

En admettant que $H(\vec{\Gamma}) \rightarrow +\infty$ si $\Gamma_j \rightarrow \pm\infty$, les termes de bord s'annulent, d'où finalement

$$\boxed{\left\langle \Gamma_i \frac{\partial H(\vec{\Gamma})}{\partial \Gamma_j} \right\rangle = k_B T \delta_{i,j}} \quad (2)$$

Appelons cette relation le **théorème d'équipartition généralisé**. La beauté de la relation est que nous n'avons fait *aucune hypothèse supplémentaire* sur la forme de H (contrairement au cas du th. d'équipartition qui s'applique aux hamiltoniens quadratiques).

5/ Première application : $\Gamma_i \rightarrow$ une impulsion. $\left\langle \vec{p}_i \cdot \frac{\partial H(\vec{\Gamma})}{\partial \vec{p}_i} \right\rangle = 3k_B T$ or $\frac{\partial H(\vec{\Gamma})}{\partial \vec{p}_i} = \frac{1}{m} \vec{p}_i$. On déduit $\sum_{i=1}^N \left\langle \vec{p}_i \cdot \frac{\partial H(\vec{\Gamma})}{\partial \vec{p}_i} \right\rangle = \sum_{i=1}^N \langle \vec{p}_i^2 \rangle = 2 \overline{E_{\text{cin}}^c}$. Le théorème (2) nous donne donc $2 \overline{E_{\text{cin}}^c} = 3Nk_B T$. Le théorème contient le théorème d'équipartition, et donc le généralise. Joli!

6/ Seconde application : d'après l'expression de l'hamiltonien, on trouve la force exercée sur la i -ème particule $\vec{F}_i = -\frac{\partial H(\vec{\Gamma})}{\partial \vec{r}_i} = -\sum_{j(\neq i)} Gm_i m_j \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|^3}$. Petite manipulation

$$\sum_{i=1}^N \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i = -\sum_{i,j(\neq)} Gm_i m_j \frac{\vec{r}_i \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|^3} = -\sum_{i,j(\neq)} \frac{Gm_i m_j}{\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|^3} \frac{1}{2} [\vec{r}_i \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j) + \vec{r}_j \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)]$$

où la somme a été symétrisée. On reconnaît précisément l'énergie potentielle

$$\sum_{i=1}^N \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i = -\frac{1}{2} \sum_{i,j(\neq)} \frac{Gm_i m_j}{\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|} = E_G \quad (3)$$

C'est une propriété liée à la nature des forces *en loi de puissance*.

On moyenne

$$\overline{E_G^c} = \sum_{i=1}^N \langle \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \rangle = -\sum_{i=1}^N \left\langle \vec{r}_i \cdot \frac{\partial H(\vec{\Gamma})}{\partial \vec{r}_i} \right\rangle = -3Nk_B T \quad (4)$$

d'après (2). Finalement on peut écrire (théorème du viriel sous la forme donnée par Clausius)

$$\overline{E_G^c} = -2\overline{E_{\text{cin}}^c} \quad (5)$$

7/ On déduit donc l'énergie totale et la capacité calorifique

$$\overline{E^c} = \overline{E_{\text{cin}}^c} + \overline{E_G^c} = -\overline{E_{\text{cin}}^c} \quad \boxed{C_{\odot} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \overline{E^c}}{\partial T} = -\frac{3Nk_B}{2} < 0} \quad (6)$$

8/ Dans le cours, on a vu que la positivité de la capacité calorifique, i.e. la convexité de l'énergie libre (ou la concavité de l'entropie), est une propriété essentielle pour justifier la stabilité des échanges thermiques. Néanmoins, ce résultat repose sur la propriété d'*extensivité*. Or, ici l'énergie potentielle n'est pas extensive à cause de la force de gravitation à longue portée.

À première vue, une capacité calorifique négative semble bizarre... Mais nous allons voir que cela joue un rôle important pour expliquer la stabilité du soleil...

9/ **Stabilité du soleil** : Dans le soleil, il y a un flux d'énergie entrant, l'énergie injectée par les réactions de fusion, caractérisée par la puissance P_f , et un flux d'énergie sortant, la luminosité de l'étoile L . Le soleil est dans un état *stationnaire* (c'est une observation) mais donc *hors de l'équilibre*. Il doit donc y avoir parfaite compensation, $\frac{d}{dt} E = P_f - L = 0$. Comment cela se fait-il ?

Supposons que le cœur soit soumis à une fluctuation de température $\delta T_{\text{cœur}} > 0$, les réactions de fusion sont alors favorisées $\delta P_f \simeq \alpha \delta T_{\text{cœur}} > 0$. La luminosité n'a pas le temps de changer (la diffusion de l'énergie vers les couches externes est très lente). Donc une telle fluctuation conduit à une augmentation de l'énergie $\delta E \simeq \Delta t \delta P_f > 0$, où Δt est la durée pendant laquelle s'établit la fluctuation de température.

La capacité calorifique est un coefficient qui caractérise la "réponse" de la température à une variation d'énergie : $\delta T \simeq \delta E / C_{\odot} < 0$. Ici il s'agit d'une rétroaction de la température. Résumons : une fluctuation $\delta T > 0$ augmente le taux de réaction de fusion et donc l'énergie injectée $\delta E > 0$, mais *en réponse la température est abaissée* $\delta T \simeq \delta E / C_{\odot} < 0$, ce qui réduit la production d'énergie par fusion, etc. Ainsi est expliquée la stabilité de l'étoile.

Pour en savoir plus : cf. article de R. Balian, « *Pourquoi le soleil n'explose pas, ou les bienfaits d'une chaleur spécifique négative* », Reflets de la physique, vol. **10**, p. 14-15 (2008), <https://doi.org/10.1051/refdp/2008015> (voir les références de cet article).

3 Interaction ferromagnétique *versus* anti-ferromagnétique

Considérons deux spins d'Ising décrits par l'hamiltonien

$$H(\sigma_1, \sigma_2) = -J \sigma_1 \sigma_2 - B (\sigma_1 + \sigma_2) \quad (7)$$

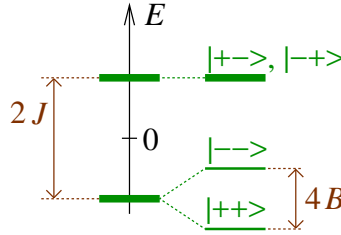
A. Cas $J = 0$

- 1/ Les spins sont indépendants, $Z_0 = z_{\text{spin}}^2 = [2 \text{ch}(\beta B)]^2$
- 2/ L'aimantation (l'observable) est donnée par une dérivation par rapport au paramètre conjugué, $\overline{M}^c = -\frac{\partial F}{\partial B} = 2 \text{th}(B/T)$ (je fais $k_B = 1$).
- 3/ On applique la définition générale ($\chi \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial \overline{M}^c}{\partial B} \right|_{B=0}$) au cas sans interaction. On trouve la loi de Curie $\chi_0(T) = 2/T$. La décroissance avec T traduit l'effet de l'entropie (les spins se désalignent du champ en allant vers les hautes T).

B. Interaction ferromagnétique $J > 0$

- 1/ Il y a quatre états, d'énergies :

$$E_{++} = -J - 2B \text{ (le fondamental si } B > 0), E_{--} = -J + 2B \text{ et } E_{+-} = E_{-+} = +J.$$



D'où

$$Z = 2e^{\beta J} \text{ch}(2\beta B) + 2e^{-\beta J} = 2e^{\beta J} [\text{ch}(2\beta B) + e^{-2\beta J}] \quad (8)$$

(on vérifie que l'on retrouve Z_0 pour $J = 0$, grâce à $\text{ch} 2y + 1 = 2 \text{ch}^2 y$).

- 2/ Par symétrie on a $\overline{\sigma}_1^c = \overline{\sigma}_2^c = \frac{1}{2} \overline{M}^c$. Posons $m \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \overline{M}^c$, on trouve

$$m = \frac{\text{sh}(2\beta B)}{\text{ch}(2\beta B) + e^{-2\beta J}} \quad (9)$$

(on retrouve $m = \text{th}(\beta B)$ si $J = 0$; Ok).

- 3/ On déduit facilement la susceptibilité (faire un d.l. pour $B \rightarrow 0$)

$$\chi = \chi_0 \frac{2}{1 + e^{-2\beta J}} \quad (10)$$

- Dans la limite de haute température, $T \gg J$, l'interaction ne joue que peu de rôle, $\chi \simeq \chi_0$
- Dans la limite de basse température, $T \ll J$, on a $\chi \simeq 2\chi_0$, la réponse au champ est *augmentée* (l'aimantation $\overline{M}^c \simeq \chi B$ est plus grande à $J > 0$ que à $J = 0$).

- 4/ Étudions la corrélation $\mathcal{C} \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\sigma_1 \sigma_2^c} - \overline{\sigma_1^c} \times \overline{\sigma_2^c}$.

a) Dans "l'état paramagnétique", les spins sont indépendants, donc $\mathcal{C} = 0$.

b) $Z(B)$ est une fonction paire de B (comme l'énergie), donc $m(B)$ est une fonction *impaire* et $m = 0$ si $B = 0$ (sauf s'il y a une transition de phase... mais pas avec deux spins!).

c) À $B = 0$ on a donc $m = \overline{\sigma_1^c} = \overline{\sigma_2^c} = 0$ (donc l'aimantation n'est pas une "bonne" observable). Si les spins sont alignés (corrélation Ferro), on a $\mathcal{C} = \overline{\sigma_1 \sigma_2^c} > 0$.

Si les spins sont anti-alignés (corrélation Anti-Ferro), $\mathcal{C} = \overline{\sigma_1 \sigma_2^c} < 0$

5/ Le poids canonique est $P^c(\sigma_1, \sigma_2) \propto e^{-\beta H} \propto e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2}$, d'où

$$\overline{\sigma_1 \sigma_2}^c = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J} \ln Z = -\frac{\partial F}{\partial J} \quad (11)$$

(pour la même raison que $\overline{M}^c = \overline{\sigma_1 + \sigma_2}^c = -\frac{\partial F}{\partial B}$ car $P^c(\sigma_1, \sigma_2) \propto e^{\beta B(\sigma_1 + \sigma_2)}$)

6/ La dérivation de $\ln Z$ donne

$$\overline{\sigma_1 \sigma_2}^c = \frac{e^{\beta J} \operatorname{ch}(2\beta B) - e^{-\beta J}}{e^{\beta J} \operatorname{ch}(2\beta B) + e^{-\beta J}} \quad (12)$$

on retranche m^2

$$\mathcal{C} = \frac{1 - e^{-4\beta J}}{[\operatorname{ch}(2\beta B) + e^{-2\beta J}]^2} \quad (13)$$

(si $J = 0$ on a bien $\mathcal{C} = 0$).

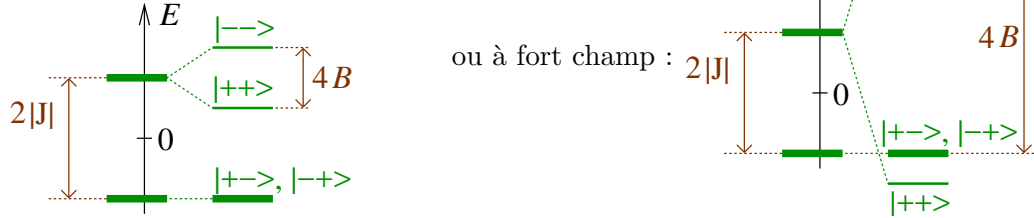
7/ Considérons le régime de forte interaction (Ferro), i.e. $\beta J \gg 1$: on obtient $\mathcal{C} \simeq 1/\operatorname{ch}^2(2\beta B)$.

Soit le champ est nul, et les corrélations sont de nature Ferro $\mathcal{C} = +1$, soit $\beta|B| \gg 1$ et les corrélations disparaissent $\mathcal{C} \ll 1$.

C'est en fait un peu trompeur, d'après le spectre, l'état fondamental est E_{++} (si $B > 0$) caractérisant un "état Ferro" ... (cf. remarque finale)

C. Interaction anti-ferromagnétique $J < 0$:

Le schéma des niveaux d'énergie est maintenant



1/ On peut tout simplement reprendre les expressions précédentes en faisant $J = -K < 0$.

$$m = \frac{\operatorname{sh}(2\beta B)}{\operatorname{ch}(2\beta B) + e^{+2\beta K}} \quad \text{et} \quad \mathcal{C} = \frac{1 - e^{+4\beta K}}{[\operatorname{ch}(2\beta B) + e^{+2\beta K}]^2}$$

2/ À basse température ($\beta|B| \gg 1$ et $\beta K \gg 1$), on peut écrire $\operatorname{ch}(2\beta B) \simeq |\operatorname{sh}(2\beta B)| \simeq \frac{1}{2}e^{2\beta|B|}$.

(a) $|B| > K$, alors $m \simeq \operatorname{sign}(B)$ et $\mathcal{C} \simeq 0$ (le champ domine l'interaction Anti-Ferro)

(c) $|B| < K$, on trouve $m \simeq 0$ et $\mathcal{C} \simeq -1$ (l'interaction Anti-Ferro domine). La transition entre (c) et (a) correspond au passage du fondamental de $E_{\pm\mp}$ à bas champ à $E_{\pm\pm}$ à fort champ (cf. diagrammes).

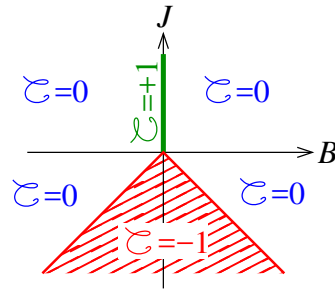
(b) Sur la ligne de transition entre les deux comportements, $|B| = K$, on trouve

$$m \simeq \frac{1}{3} \operatorname{sign}(B) \quad \text{et} \quad \mathcal{C} \simeq -\frac{4}{9} \quad (14)$$

[hybride entre (a) et (c)].

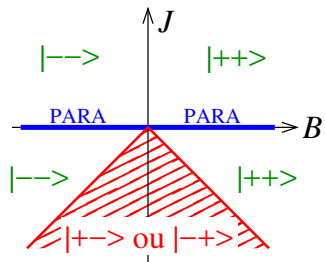
L'explication du $m = \pm 1/3$ est simple : la transition à $|B| = |J|$ correspond au croisement de niveaux (cf. schémas). Il y a trois états dégénérés $|+-\rangle, |-+\rangle, |++\rangle$ (pour $B > 0$) ; ils sont tous équiprobables mais un seul porte une aimantation (le dernier).

D. Conclusion : Dessinons un "diagramme de phases" dans le plan (B, J) pour caractériser l'état à $T \rightarrow 0$. Si on base notre critère sur \mathcal{C} , on a



Il pourrait sembler que les corrélations Ferro n'existent que sur la ligne $B = 0$.

Mais comme on l'a remarqué, le cas de l'interaction Ferro est un peu trompeur : même à $B \neq 0$, l'état fondamental d'énergie E_{++} est de type "Ferro" ; on a $\mathcal{C} \simeq 0$ car $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ (pour $B > 0$) ne fluctue pas ! Il est plus judicieux de dessiner le diagramme suivant, où l'on représente l'état fondamental dans les différentes régions :



Remarque : corrélations et indépendance

Cet exemple montre que

"spins indépendants" $\Rightarrow \mathcal{C} = 0$, **mais la réciproque n'est pas toujours vraie**

pour une paire de variables aléatoires ! Dans "l'état Ferro" à $B \neq 0$, on a $\mathcal{C} = 0$ pour une raison triviale, car $\sigma_1 = \sigma_2 = \text{sign}(B)$, mais les spins ne sont pas indépendants (ils valent la même chose).