

EXAMEN PARTIEL DE PHYSIQUE STATISTIQUE

Mercredi 9 mars 2022

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 Questions de cours (~ 15mn)

On considère un système en contact avec un thermostat à température T . On note ℓ un microétat du système et E_ℓ l'énergie correspondante.

- 1/ Rappeler l'expression de la distribution canonique P_ℓ^c et donner la définition de la fonction de partition Z .
- 2/ Comment peut-on déduire l'énergie moyenne \bar{E}^c de la fonction de partition ? (démontrer la formule).
- 3/ Rappeler la définition de l'énergie libre F . Soit X une observable et ϕ la force conjuguée (i.e. la valeur de l'observable dans un microétat ℓ est $X_\ell = -\partial E_\ell / \partial \phi$). Démontrer que $\bar{X}^c = -\partial F / \partial \phi$.

2 Théorie d'Einstein de la chaleur spécifique (~ 40mn)

On considère N oscillateurs harmoniques quantiques identiques

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_i^2 \right) \quad (1)$$

On rappelle que les niveaux d'énergies $E_M = \hbar \omega (M + N/2)$, avec $M \in \mathbb{N}$, sont dégénérés $g_M = \frac{(M+N-1)!}{M!(N-1)!}$ fois (cf. TD).

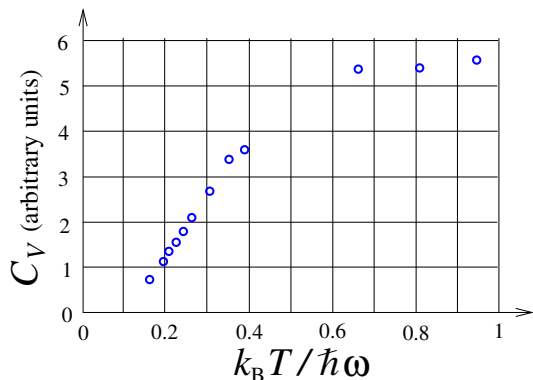


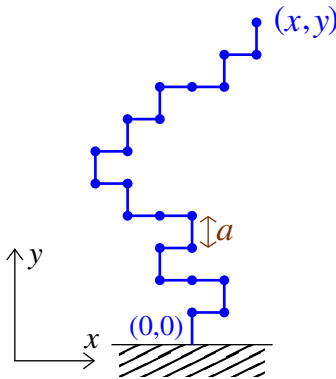
FIGURE 1 : C_V (pour une mole) en fonction de $k_B T^* / \hbar \omega$ pour différents corps solides. Données tirées de l'article : A. Einstein, « *Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme* » *Annalen der Physik*, **22**, p. 180 (1907).

- 1/ **Question de cours :** Soit Ω le nombre de microétats accessibles. Rappeler l'expression de l'entropie microcanonique S^* et la définition de la température microcanonique T^* .
- 2/ Si l'énergie du système est $E = \hbar \omega (M + N/2)$ fixée, donner l'expression de $S^*(E)$ en fonction de M et N (supposer que $M \gg 1$ et $N \gg 1$).

- 3/ Calculer la température microcanonique T^* . Dédire une expression de E en fonction de T^* .
- 4/ Calculer la capacité calorifique $C_V = \partial E / \partial T^*$. Montrer que l'on peut écrire le résultat sous la forme $C_V(T^*) = Nk_B \psi(\hbar\omega/k_B T^*)$ où $\psi(x)$ est une fonction sans dimension que l'on donnera. Analyser les comportements limites dans les régimes de basse et haute température (préciser la définition précise de ces deux régimes). Tracer *très soigneusement* C_V en fonction de T^* .
- 5/ Dans son article de 1907 sur la chaleur spécifique des solides, Einstein a rapporté quelques valeurs expérimentales de la capacité calorifique de divers corps solides (figure 1). Comparer à votre résultat et discuter physiquement.

3 Polymère dirigé (~ 60mn)

On considère un polymère **isolé** constitué de N monomères de longueur a . Les monomères sont libres de **choisir une des trois orientations** dans le plan xOy : vers la gauche, vers la droite ou vers le haut (mais pas vers le bas, c'est pourquoi on parle de « polymère dirigé »). Une extrémité du polymère est fixée à l'origine en $(0,0)$ et l'autre se trouve aux coordonnées (x,y) . Les différents choix d'orientation des monomères correspondent aux différents "microétats" du polymère.



Les 3 états
des monomères:
← ↑ →

FIGURE 2 : Un polymère est fixé à l'origine sur un substrat. Chaque monomère peut prendre trois orientations.

Dans un premier temps, on suppose que (x,y) sont **fixés**. On note n_+ et n_- les nombres de monomères orientés respectivement vers la droite et vers la gauche, et m le nombre de monomères orientés vers le haut (par exemple, sur la figure : $N = 22$, $n_+ = 7$, $n_- = 5$ et $m = 10$).

- 1/ On souhaite relier n_{\pm} et m à x , y et $L = Na$. Donner l'expression de m et montrer que $n_{\pm} = (L - y \pm x)/2a$.
- 2/ Donner l'expression du nombre de microétats accessibles $\Omega(x,y)$, en fonction de N , m , n_+ et n_- . Vérifier le résultat en calculant $\Omega_{\text{tot}} = \sum_{x,y} \Omega(x,y)$ (en pratique $\sum_{x,y} \rightarrow \sum_{n_+, n_-, m}$ avec la contrainte $n_+ + n_- + m = N$).
- 3/ Montrer que l'entropie microcanonique du polymère (pour N , m , $n_{\pm} \gg 1$) est donnée par

$$S(x,y) \simeq -k_B \left(n_+ \ln \frac{n_+}{N} + n_- \ln \frac{n_-}{N} + m \ln \frac{m}{N} \right) \quad (2)$$

- 4/ Calculer $\frac{\partial S}{\partial x}$ et $\frac{\partial S}{\partial y}$ (en fonction de m , n_+ et n_-). Dédire les valeurs de m , n_+ et n_- (en fonction de N) qui maximisent cette entropie. On les notera m^* , n_+^* et n_-^* . Donner les valeurs correspondantes x^* et y^* (en fonction de L).
- 5/ On introduit la grandeur $\phi_y(x,y) \stackrel{\text{def}}{=} T \frac{\partial S(x,y)}{\partial y}$ où T est la température (microcanonique). Que représente physiquement cette grandeur? Donner son expression en fonction de x et y . Préciser pour quelle valeur de y on a $\phi_y(0,y) = 0$ et tracer *soigneusement* $\phi_y(0,y)$ pour $y \in [0, L]$. Interpréter physiquement (en particulier, le comportement pour $y \sim y^*$).

- 6/ Pour des valeurs de (x, y) proches de (x^*, y^*) , montrer que l'entropie admet le développement de la forme

$$S(x, y) \simeq \text{cste} - \frac{k_B}{2} \left[\frac{(x - x^*)^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y - y^*)^2}{\sigma_y^2} \right] \quad \text{pour } x \sim x^* \text{ et } y \sim y^* \quad (3)$$

et donner les expressions de σ_x^2 et σ_y^2 .

- 7/ On suppose maintenant que l'on relâche les contraintes sur x et y (i.e. x et y sont maintenant considérées comme des variables *internes*). Exprimer la distribution de l'extrémité du polymère $p(x, y)$ en fonction de $\Omega(x, y)$ et Ω_{tot} , puis en fonction de $S(x, y)$. Discuter le résultat (où se trouve en moyenne l'extrémité du polymère et quelle est son extension typique dans les deux directions).

Relecture (~ 5mn)

Annexe :

- Formule du multinôme de Newton :

$$(x_1 + \dots + x_d)^N = \sum_{\substack{n_1, \dots, n_d=0 \\ \text{avec } n_1 + \dots + n_d = N}}^N \frac{N!}{n_1! \dots n_d!} x_1^{n_1} \dots x_d^{n_d}$$

- Formule de Stirling $\ln N! \simeq N \ln N - N + \mathcal{O}(\ln N)$ pour $N \gg 1$.
- Identité fondamentale de la *thermodynamique* : $dE = T dS - p dV + \mu dN + \dots$