

EXAMEN DE PHYSIQUE STATISTIQUE

Mercredi 27 avril 2022

Durée de l'épreuve : **3h.**

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 (~ 20mn)

On considère un système en contact avec un réservoir d'énergie et de particules à température T et potentiel chimique μ . On note ℓ un microétat du système, E_ℓ son énergie et N_ℓ le nombre de particules caractérisant le microétat.

- 1/ Rappeler l'expression de la distribution grand canonique P_ℓ^g et donner la définition de la fonction de partition grand canonique Ξ .
- 2/ Montrer que $\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi$ est relié à \overline{E}^g et \overline{N}^g .
- 3/ Rappeler la formule de Shannon pour l'entropie (pour une distribution $\{P_\ell\}$ arbitraire). Appliquer la formule à la distribution grand canonique et retrouver l'expression de l'entropie grand canonique S^g en fonction du grand potentiel J , de \overline{E}^g et \overline{N}^g .
- 4/ Démontrer la relation $S^g = -\frac{\partial J}{\partial T}$ à partir de la définition $J \stackrel{\text{def}}{=} -k_B T \ln \Xi$.

2 Allostérie dans l'hémoglobine (~ 1h)

L'hémoglobine (Hb) a pour fonction de fixer les molécules de dioxygène au niveau de l'appareil respiratoire et de le transporter vers les organes. Pour expliquer l'efficacité du processus de fixation, Monod, Wyman et Changeux ont proposé en 1965 le concept d'*allostérie* : lorsqu'une molécule O_2 est fixée, elle modifie les conditions de fixation d'autres molécules sur les autres sites. Hb a 4 sites de fixation de O_2 , cependant nous étudions ici un modèle simplifié d'une molécule réceptrice (Hb) avec **deux sites**, décrite par l'hamiltonien

$$H(n_1, n_2) = -\varepsilon_0 (n_1 + n_2) - J n_1 n_2 \quad \text{avec } \varepsilon_0 > 0 \text{ et } J > 0. \quad (1)$$

$n_{1,2} \in \{0, 1\}$ sont les occupations des deux sites de fixation. Chaque site ($i = 1$ ou 2) peut être soit vide ($n_i = 0$) soit occupé par une molécule O_2 ($n_i = 1$). La molécule Hb est en contact avec un réservoir de molécules O_2 à potentiel chimique μ et température T .

- 1/ Faire la liste des microétats du système (Hb), en précisant l'énergie et le nombre de O_2 .
- 2/ Dédire la fonction de partition grand canonique Ξ . Discuter le cas $J = 0$: montrer que l'expression de Ξ se simplifie dans ce cas et expliquer pourquoi.
- 3/ Calculer l'occupation moyenne du système \overline{N}^g . Exprimer le résultat en fonction de $x = e^{\beta(\varepsilon_0 + \mu)}$ et $y = e^{\beta J}$.
- 4/ Quel est l'effet du terme $-J n_1 n_2$ de $H(n_1, n_2)$ sur l'occupation \overline{N}^g (donner \overline{N}^g pour $J = 0$ et discuter comment varie \overline{N}^g lorsque J augmente, toutes choses égales par ailleurs) ? Justifier physiquement.

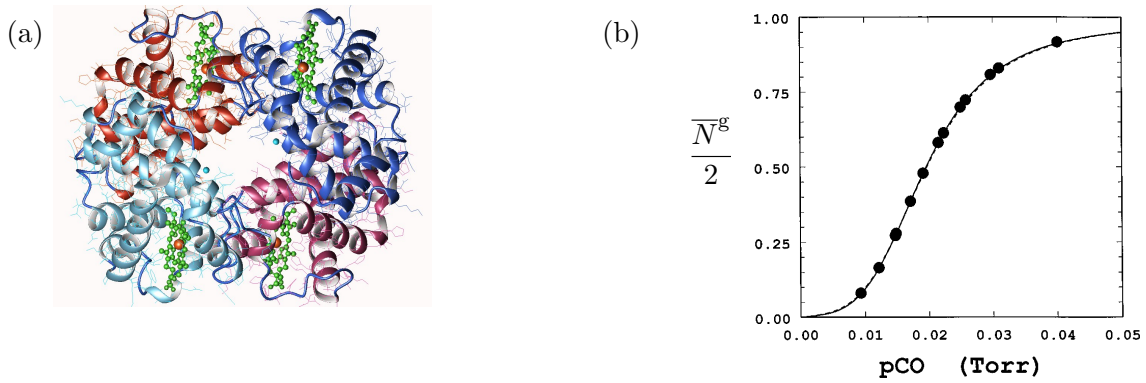


FIGURE 1 : (a) Structure de l'hémoglobine avec les quatre sites de fixation de l'oxygène. (b) Occupation des sites de Hb par des molécules de monoxyde de carbone (CO) en fonction de la pression partielle en CO (figure tirée de M. Perrella & E. Di Cera, Journal of Biological Chemistry **274**, p. 2605 (1999)).

- 5/ Donner le développement limité de \overline{N}^g pour $x \rightarrow 0$ jusqu'au second ordre : $\overline{N}^g \simeq ax + bx^2 + \mathcal{O}(x^3)$. Donner les expressions des coefficients a et b et discuter le comportement de b en fonction de J . Tracer *soigneusement* \overline{N}^g en fonction de x pour $J = 0$, puis tracer l'allure de \overline{N}^g pour $y = e^{\beta J} \gg 1$.
- 6/ Une expérience a été réalisée où l'hémoglobine est à l'équilibre avec du monoxyde de carbone (CO), qui se fixe sur Hb (à la place de O_2). On note P_{CO} la pression partielle du CO.
- On décrit le gaz de CO comme un gaz parfait. On note N le nombre de molécules de CO et V le volume. Justifier que la fonction de partition canonique du gaz est de la forme $Z_{CO} \sim e^N \left(\frac{V\zeta(T)}{N}\right)^N$, à des facteurs non exponentiels en N près. $\zeta(T)$ une fonction de la température (qu'il est *inutile d'essayer de calculer* mais dont on expliquera l'origine).
 - Rappeler les définitions de la pression canonique et du potentiel chimique canonique μ . Déduire l'expression de la pression en fonction de $n = N/V$ et de T . Exprimer μ en fonction de n et $\zeta(T)$ puis en fonction de la pression.
 - Quelle est la relation entre le paramètre x introduit plus haut et la pression P_{CO} ? La Fig. 1.b montre l'occupation de Hb en fonction de la pression P_{CO} . Commenter la courbe à la lumière du modèle étudié (en particulier, discuter le rôle du paramètre J).

3 Mouvement d'un objet macroscopique dans un gaz (~ 1h30mn)

Nous étudions le mouvement d'un objet macroscopique dans un gaz. Le gaz, composé de N atomes occupant un volume Vol , est supposé à température T et sera décrit dans le cadre de la mécanique classique et de l'ensemble *canonique*. Les atomes sont supposés *sans interaction* :

$$H_{\text{gaz}} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \quad \text{avec } \vec{r}_i \in \text{Vol}. \quad (2)$$

A. Préliminaires : le gaz

- Décrire les microétats pour le gaz d'atomes. Rappeler l'expression de la densité de probabilité canonique $\rho^c(\dots)$ dans l'espace des phases pour les N atomes du gaz (inutile de donner la normalisation).
- Déduire la distribution de Maxwell $f(\vec{v})$ (i.e. la densité de probabilité pour la vitesse \vec{v} d'un atome).
- Utiliser $f(\vec{v})$ pour calculer $\langle |v_x| \rangle$ et $\langle v_x^2 \rangle$. Rappeler la relation entre le calcul de $\langle v_x^2 \rangle$ et un théorème vu en cours.

B. Objet immobile.— Dans un premier temps on considère que l'objet macroscopique est immobile. Il est de forme cubique et l'on note \mathcal{A} l'aire d'une face. Pour simplifier on suppose que la surface est parfaitement plane et que lors de la collision d'un atome sur l'objet, la vitesse de l'atome est changée comme (Fig. 2.b)

$$v_x^{(i)} \rightarrow v_x^{(f)} = -v_x^{(i)} \quad (3)$$

Le transfert d'impulsion est donc $\Delta \vec{p}_{\text{atome} \rightarrow \text{objet}} = \vec{p}^{(i)} - \vec{p}^{(f)} = 2 m v_x \vec{u}_x$ (où $v_x \equiv v_x^{(i)}$).

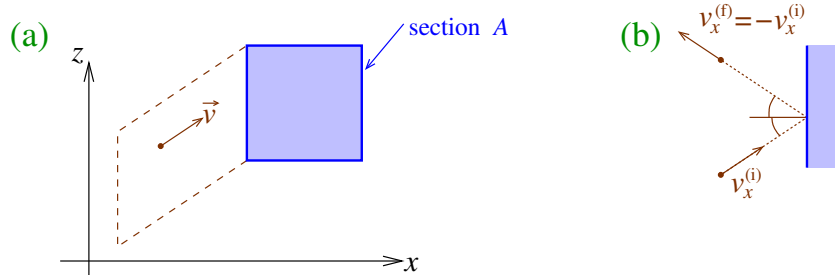


FIGURE 2 : (a) Un objet macroscopique de section \mathcal{A} est soumis aux chocs des atomes. (b) Un atome arrivant avec une vitesse \vec{v} transfère une impulsion $2m v_x \vec{u}_x$ à l'objet.

- 4/ Si l'on considère un atome de vitesse \vec{v} , à quelles conditions sur v_x et sur sa position va-t-il se collisionner sur la face gauche de l'objet pendant un intervalle de temps δt (Fig. 2.a)?
- 5/ Donner l'expression (sous forme d'une intégrale) de la quantité de mouvement moyenne transférée à l'objet pendant δt (pour la face gauche). Dédire que la force exercée par le gaz sur la paroi de gauche est $\vec{F}_g = \frac{2}{3} n \mathcal{A} \vec{u}_x \langle \varepsilon_c \rangle$ où $\varepsilon_c = \frac{1}{2} m \vec{v}^2$ et $n = N/\text{Vol}$ est la densité moyenne du gaz. Calculer $\langle \varepsilon_c \rangle$ et interpréter physiquement l'expression de \vec{F}_g .

C. Objet en mouvement.— On considère maintenant la situation où l'objet a une vitesse $V \vec{u}_x$ par rapport au référentiel du laboratoire, dans lequel le gaz est à l'équilibre macroscopique (figure 3). On suppose que V est suffisamment petite pour que la densité du gaz reste uniforme autour de l'objet.

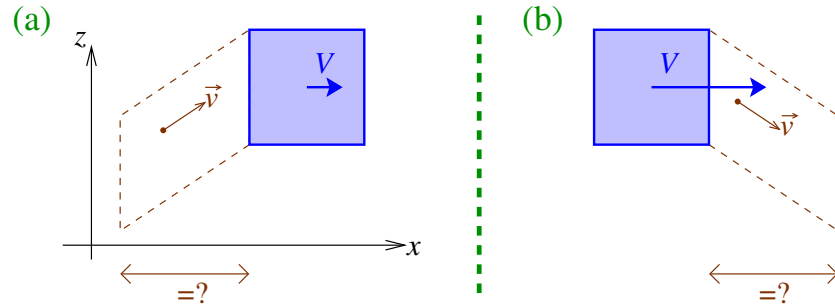


FIGURE 3 : (a) Les atomes suffisamment rapides pourront se collisionner sur l'objet. (b) Les atomes suffisamment lents ou de v_x négative pourront se collisionner sur l'objet.

- 6/ Si la règle (3) reste vraie dans le référentiel de l'objet, quelle est la règle correspondante dans le référentiel du laboratoire? Dédire l'expression du transfert d'impulsion $\Delta \vec{p}_{\text{atome} \rightarrow \text{objet}}$ entre l'atome et l'objet en mouvement, en fonction de $v_x \equiv v_x^{(i)}$ et V (la formule s'applique aux deux cas (a) et (b) de la figure 3; il suffit d'en considérer un).
- 7/ On considère un atome de vitesse \vec{v} venant de la gauche et se cognant sur la paroi de gauche au cours d'un intervalle de temps δt (Fig. 3.a). Quelle est la condition sur v_x ? À quelle distance de l'objet doit-il se trouver?

8/ Dédurre que la force exercée par le gaz sur la paroi gauche de l'objet est

$$\vec{F}_g = 2 n m \mathcal{A} \vec{u}_x \int_{v_x > V} d^3 \vec{v} f(\vec{v}) (v_x - V)^2 . \quad (4)$$

9/ **BONUS : (sauter la question et admettre le résultat si vous n'avez pas le temps)**
En procédant de manière analogue (cf. Fig. 3.b), montrer que le gaz exerce une force

$$\vec{F}_d = -2 n m \mathcal{A} \vec{u}_x \int_{v_x < V} d^3 \vec{v} f(\vec{v}) (V - v_x)^2 \quad (5)$$

sur la paroi droite de l'objet en mouvement.

10/ Quel est l'ordre de grandeur de la vitesse des atomes (en fonction de T et m) ?

A.N. : (calculatrice interdite) on considère un gaz de molécules de di-azote à température $T = 300$ K. Donner une valeur numérique pour la vitesse typique des molécules (l'atome d'azote a une masse $m_N \simeq 14 m_p$ où m_p est la masse du proton).

11/ Si la vitesse V de l'objet est "petite" (critère à préciser), **on admet** que l'on peut faire $\int_{v_x > V} \rightarrow \int_{v_x > 0}$ et $\int_{v_x < V} \rightarrow \int_{v_x < 0}$ dans les expressions précédentes. Montrer que l'équation du mouvement pour l'objet macroscopique est de la forme

$$M \frac{dV}{dt} \simeq -\gamma V , \quad (6)$$

où M est la masse de l'objet. Donner l'expression du coefficient γ en fonction de n , m , \mathcal{A} et $\langle |v_x| \rangle$. Quel est le sens physique du paramètre γ ? Remplacer $\langle |v_x| \rangle$ par son expression en fonction de T et déduire γ en fonction des paramètres du problème. Vérifier que son expression satisfait l'analyse dimensionnelle.

12/ **BONUS** : Discuter l'intérêt du modèle.

Relecture (~ 10mn)

Annexe :

- Formule de Stirling $\ln N! \simeq N \ln N - N + \mathcal{O}(\ln N)$ pour $N \gg 1$.
- Intégrale gaussienne : $\int_{\mathbb{R}} dx e^{-a x^2} = \sqrt{\pi/a}$.
- Identité fondamentale de la *thermodynamique* : $dE = T dS - p dV + \mu dN + \dots$
- **Constantes fondamentales** : $k_B \simeq 1.38 \times 10^{-23}$ J/K ; $c \simeq 3 \times 10^8$ m/s ; $q_e \simeq -1.6 \times 10^{-19}$ C ;
masse du proton $m_p \simeq 1.67 \times 10^{-27}$ kg ; masse de l'électron $m_e \simeq 0.9 \times 10^{-30}$ kg.