

EXAMEN FINAL DE PHYSIQUE STATISTIQUE

Jeudi 11 Mai 2023

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**.

Problème 1 : Taches de l'expérience de Stern & Gerlach (~ 40mn)

Introduction.— L'expérience de Stern & Gerlach (1922) permet de mettre en évidence la quantification du spin de l'électron. Le principe est rappelé sur la figure 1 : des atomes d'argent contenus dans une enceinte s'échappent par un trou, puis le faisceau est collimaté avant d'être dirigé dans une région où règne un fort gradient de champ magnétique. Les atomes sont ainsi déviés proportionnellement à la composante de leur moment magnétique \mathcal{M}_z . La position d'un atome à la sortie de l'appareil est donnée par

$$z(t_{\text{sortie}}) = \frac{\partial_z B_z}{2m_{\text{Ag}}} \mathcal{M}_z t_{\text{sortie}}^2 \quad \text{avec } t_{\text{sortie}} = \frac{L}{v_x} \quad \Rightarrow \quad z(t_{\text{sortie}}) = \frac{C}{v_x^2} \frac{2S_z}{\hbar} \quad (1)$$

où $C = (\partial_z B_z / (2m_{\text{Ag}})) L^2 (\hbar \gamma_e / 2)$. Le moment de l'atome Ag étant dominé par les spins électroniques, le facteur gyromagnétique est $\gamma_e = q_e / m_e$. L'atome d'argent a un spin 1/2 ([Ag]=[Kr]4d¹⁰5s¹), donc la projection du spin ne peut prendre que deux valeurs $S_z = \pm \hbar / 2$. Un atome sortant de l'enceinte avec une vitesse v_x sera donc détecté sur l'écran à une des deux positions $z = \pm C / v_x^2$. Les fluctuations thermiques sont responsables d'une certaine dispersion des vitesses, et donc de l'étalement des taches observées, ce que nous étudions ici.

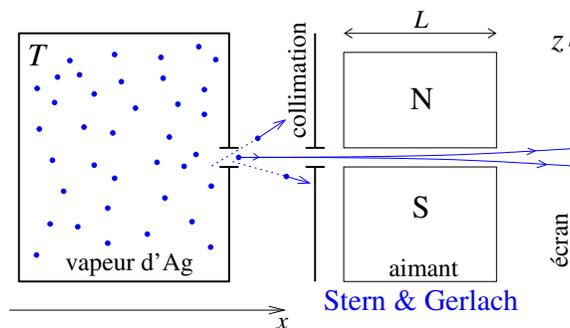


FIGURE 1 : *Principe de l'expérience de Stern & Gerlach.*

- 1/ Gaz parfait dans l'enceinte.**— L'enceinte contient N atomes à température T (N est supposé fixé dans cette question). Rappeler la définition des microétats dans le cadre classique et leur probabilité d'occupation (i.e. la distribution canonique). Dédurre la distribution de Maxwell $f(\vec{v})$ des vitesses des atomes.

2/ Distribution de v_x à l'entrée de l'appareil de Stern et Gerlach.

a) Justifier que le nombre d'atomes sortant pendant δt par le trou avec une vitesse \vec{v} est proportionnel à $v_x f(\vec{v})$. La distribution des vitesses à la sortie de l'enceinte est donc $p_{\text{out}}(\vec{v}) \propto v_x f(\vec{v})$.

b) Parmi les atomes qui sont sortis, la collimation sélectionne ceux ayant des vitesses quasiment alignées avec l'axe Ox et dans un petit angle solide $\delta\Omega$; on déduit que la distribution de la composante v_x à l'entrée de l'appareil de Stern et Gerlach est

$$p_{\text{coll}}(v_x) \propto v_x^2 \delta\Omega p_{\text{out}}(v_x \vec{u}_x) \propto v_x^3 f(v_x \vec{u}_x) \quad \text{pour } v_x > 0 \quad (2)$$

(\vec{u}_x est le vecteur unitaire pointant selon Ox). Normaliser la distribution $p_{\text{coll}}(v_x)$.

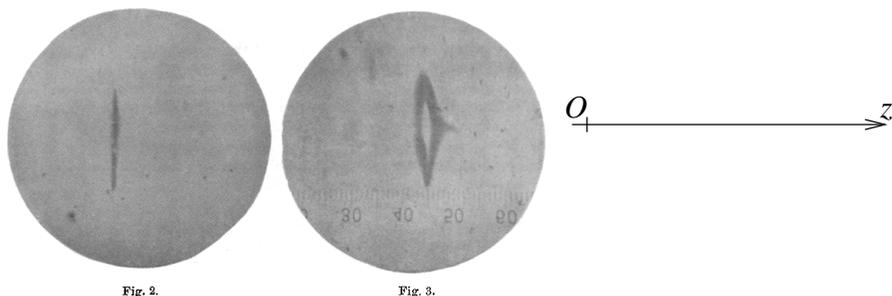


FIGURE 2 : Taches à $\partial_z B_z = 0$ et $\partial_z B_z \neq 0$. Tirée de : W. Gerlach and O. Stern, « *Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld* », Zeitschrift für Physik **9**(1), 349 (1922).

3/ Profil de densité selon Oz .

a) Dédire la distribution $w(z)$ de la position z des atomes de spin $S_z = +\hbar/2$ détectés sur l'écran. Introduire $b = mC/(2k_B T)$. Quelle est la dimension de b ? Vérifier la normalisation de $w(z)$.

b) Donner la valeur la plus probable z_{typ} pour laquelle $w(z)$ est maximale. Comparer à la valeur moyenne $\langle z \rangle$. Tracer *très soigneusement* $w(z)$ (montrer les comportements limites).

c) Quel est le profil de densité attendu pour les deux taches? Comment aurait-on pu compléter l'analyse (cf. Fig. 2)?

Problème 2 : Adsorption d'hydrogène sur une surface (~ 1h20mn)

On considère un gaz d'hydrogène (molécules H_2) dans une enceinte *fermée* à température T fixée. Le gaz est décrit comme un gaz parfait *classique*.

A. Préliminaires

- 1/ On considère un gaz parfait classique de N atomes de masse m occupant un volume V . Montrer que la fonction de partition canonique du gaz est $Z_g \sim e^N [V/(N\lambda_T^3)]^N$. Donner l'expression de la longueur thermique λ_T en fonction de T et m .
- 2/ Justifier (sans calcul) que la fonction de partition d'un gaz parfait de molécules diatomiques est de la forme $Z_g \sim e^N [\zeta(T)V/(N\lambda_T^3)]^N$. Quelle est l'origine de la fonction $\zeta(T)$? Est-elle une fonction croissante ou décroissante de T ?
- 3/ Rappeler les définitions de la pression p et du potentiel chimique μ canoniques. Exprimer la pression du gaz moléculaire, puis son potentiel chimique en fonction de $n = N/V$, λ_T et $\zeta(T)$.
- 4/ Rappeler quelle situation physique est décrite par l'ensemble grand canonique. Donner la définition de la fonction de partition grand canonique Ξ (pour une température T et un potentiel chimique μ).

5/ Démontrer la formule donnant le nombre moyen de particules \overline{N}^g à partir de Ξ (où \overline{N}^g est la moyenne vis à vis de la distribution grand canonique).

B. Adsorption des molécules.— La surface de l'enceinte peut accrocher des molécules H_2 sur des pièges ; on note N_P le nombre de pièges de surface. Un piège est soit vide, soit occupé par une molécule (énergie $-\varepsilon_0 < 0$). On note N_a le nombre de molécules adsorbées à la surface. Le gaz de N_g molécules joue le rôle de réservoir (car $N_g \gg N_P \geq N_a$) et fixe le potentiel chimique pour les molécules adsorbées.

- 1/ Donner la fonction de grand partition $\xi_{\text{piège}}$ d'un piège en fonction de T , μ et ε_0 . Dédurre la fonction de grand partition Ξ des N_P pièges.
- 2/ Calculer le nombre moyen de molécules adsorbées à la surface \overline{N}_a^g . Dédurre la probabilité d'adsorption $\theta = \overline{N}_a^g / N_P$ en fonction de T , μ et ε_0 .
- 3/ Si μ est le potentiel chimique du gaz, exprimer $e^{\beta\mu}$ en fonction de la pression du gaz, de T et $\zeta(T)$. Montrer que

$$\theta(T, p) = \frac{p}{p + p_0(T)}, \quad (3)$$

donner l'expression $p_0(T)$ en fonction de T . Tracer *soigneusement* $\theta(T, p)$ en fonction de p pour deux températures (indiquer la courbe correspondant à la température la plus élevée). Interpréter physiquement.

C. Dissociation des molécules adsorbées.— Lorsque les molécules H_2 du gaz sont adsorbées sur une surface de platine ou de tungstène, elles se dissocient : les N_P pièges accrochent alors des *atomes* d'hydrogène. Lorsque les atomes se décrochent de la surface, ils reforment des molécules H_2 dans le gaz. Un atome accroché à la surface a une énergie $-\varepsilon_0 < 0$. On commence par déterminer la condition d'équilibre entre molécules du gaz et atomes accrochés à la surface.

- 1/ On note N_g le nombre de molécules H_2 dans le gaz et N_a le nombre d'atomes H adsorbés à la surface. Justifier que N_g et N_a satisfont une loi de conservation.
- 2/ Soit $Z_g(T, N_g)$ la fonction de partition canonique du gaz de molécules H_2 et $Z_a(T, N_a)$ celle des atomes H de surface. Si le gaz et la surface échangent des molécules, la fonction de partition du système est

$$Z = \sum_{N_a} Z_g(T, N_g) Z_a(T, N_a) \quad (4)$$

Justifier que la condition d'équilibre est donnée en minimisant $\tilde{F}(N_a) = F_g(T, N_g) + F_a(T, N_a)$ par rapport à N_a , où $F_g(T, N_g)$ et $F_a(T, N_a)$ sont respectivement les énergies libres du gaz moléculaire et des atomes de surface. Montrer que les potentiels chimiques sont reliés par

$$\mu_g = 2\mu_a. \quad (5)$$

- 3/ L'expression de $\theta = \overline{N}_a^g / N_P$ trouvée à la question **B.2** en fonction de T et $\mu \equiv \mu_a$ est inchangée. Exprimer $e^{\beta\mu_a}$ en fonction de la pression du gaz et T . Dédurre la nouvelle expression de $\theta(T, p)$ prenant en compte l'effet de la dissociation des molécules, en fonction de p et de $\tilde{p}_0(T) = p_0(T) e^{-\beta\varepsilon_0}$.
- 4/ Tracer soigneusement $\theta(T, p)$ pour deux températures. Comparer avec le cas étudié au **B**.

Problème 3 : Chaîne de spins d'Ising et de spins vectoriels (~ 55mn)

A. Spins d'Ising.— On considère une chaîne de N spins d'Ising $\sigma_n = \pm 1$ en interaction

$$H_N = -J \sum_{n=1}^{N-1} \sigma_n \sigma_{n+1} \quad (6)$$

- 1/ Décrire les microétats de la chaîne de N spins. Donner l'expression de la fonction de partition canonique Z_N . Que vaut Z_1 ? Montrer que Z_N obéit à une équation de récurrence et déduire son expression.
- 2/ Calculer l'énergie moyenne \overline{E}^c en fonction de J et $k_B T$. Donner le comportement de haute température ($k_B T \gg J$). Quelle est l'origine physique de la saturation de l'énergie?
- 3/ Montrer que le comportement de basse température ($k_B T \ll J$) est de la forme $\overline{E}^c \simeq E_0 + (N - 1)\Delta e^{-\beta\Delta}$. Interpréter physiquement ce type de comportement. Donner l'expression de E_0 et de Δ . Expliquer physiquement l'origine des valeurs de E_0 et Δ .
- 4/ Tracer soigneusement \overline{E}^c/N (pour $N \gg 1$) en fonction de T .

B. Spins vectoriels.— On considère maintenant une chaîne de spins vectoriels en interaction

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{n=1}^{N-1} \vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1} \quad (7)$$

où $\vec{\sigma}_n$ est un vecteur unitaire à trois composantes, $\|\vec{\sigma}_n\| = 1$.

- 1/ *Préliminaire* : Calculer l'intégrale $\int d^2\vec{\sigma} e^{\vec{\sigma}\cdot\vec{B}} = \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{|\vec{B}|\cos\theta}$ (un changement de variable dans l'intégrale permet toujours de placer \vec{B} sur l'axe Oz du vecteur $\vec{\sigma}$).
- 2/ Montrer que la fonction de partition canonique \mathcal{Z}_N obéit à une récurrence. Déduire \mathcal{Z}_N .
- 3/ Montrer que l'énergie moyenne \overline{E}^c s'exprime à l'aide de la fonction de Langevin $\mathcal{L}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \coth x - 1/x$.
 Rappel : $\coth x \simeq 1/x + x/3$ pour $x \rightarrow 0$ et $\coth x \simeq 1 + 2e^{-2x}$ pour $x \rightarrow +\infty$
- 4/ Donner le comportement de haute température de \overline{E}^c .
- 5/ Donner le comportement de basse T : donner la valeur limite E_0 et le premier terme correctif.
- 6/ Tracer soigneusement \overline{E}^c/N en fonction de T .

C. Comparaison.

- 1/ Comparer les comportements de *basse température* des capacités calorifiques pour les spins d'Ising et pour les spins vectoriels, qu'on notera respectivement $C_{\text{Ising}}(T)$ et $C_{\text{vect}}(T)$. Expliquer physiquement la différence.
- 2/ (BONUS) Donner les expressions des capacités calorifiques par spin $C_{\text{Ising}}(T)/N$ et $C_{\text{vect}}(T)/N$ (pour $N \gg 1$). Tracer soigneusement les deux fonctions.

Relecture (~ 5mn)

Annexe

- Formule de Stirling : $\ln N! \simeq N \ln N - N$
- Identité fondamentale de la *thermodynamique* : $dE = T dS - p dV + \mu dN + \dots$
- Intégrale gaussienne $\int_{\mathbb{R}} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\pi/a}$
- Fonction Gamma $\Gamma(z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\infty dt t^{z-1} e^{-t}$; relation fonctionnelle $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ et quelques valeurs : $\Gamma(n+1) = n!$ et $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.
- $\hbar = 10^{-34}$ J.s et $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J.K⁻¹.