Physique Statistique (PHY433)
Maxime Dahan
Année 2016-2017

Petite Classe n° 2
Mardi 31 Janvier 2017

Introduction à l'ensemble canonique

1 Formalisme canonique

On considère deux systèmes en *contact thermique*, c'est-à-dire qu'ils peuvent échanger de l'énergie. L'ensemble des deux systèmes est supposé isolé, de telle sorte que l'énergie totale $E = E_1 + E_2$ soit constante. On suppose ici le système 2 beaucoup plus grand que le système 1, $E_1 \ll E_2$: on dit alors que le système 2 est un *thermostat* pour le système 1. On note $W_2(E_2)$ le nombre d'états d'énergie E_2 pour le système 2.

1. Déduire du principe microcanonique, appliqué au système global, la probabilité que l'énergie du système 1 soit égale à une valeur E_1 donnée, et la probabilité qu'il soit dans *un microétat* d'énergie E_1.
2. Montrer que la deuxième de ces probabilités peut se mettre sous la forme
$$P(E_1) = \frac{e^{-\beta E_1}}{Z(\beta)}$$
où $\beta = 1/k_B T$, T étant la température du système 2, et
$$Z(\beta) = \sum_{\text{microetats du syst. 1}} e^{-\beta E_1}$$
est la *fonction de partition canonique* du système 1. Pour cela, on développe l'entropie du système 2 en tenant compte du fait que $E_1 \ll E_2$.
3. Vérifier que la valeur moyenne de l'énergie du système 1 est donnée par $\bar{E} = -\partial \ln Z/\partial\beta$.
4. Montrer que l'écart-type de la distribution de E_1 est donné par $(\Delta E)^2 = \partial^2 \ln Z/\partial\beta^2$. Comment est ce que ΔE varie avec la taille N du système ?

2 Distributions d'entropie maximale et physique statistique

On considère un système physique ayant N états, indexés par $i = 1...N$ et dont la probabilité d'occupation est p_i. On cherche les distributions $(p_i)_{i=1...N}$ qui maximisent l'entropie statistique définie par :
$$S(p_1, \ldots, p_n) = -k \sum_i p_i \log p_i$$
Ces distributions d'entropie maximale sont celles qui traduisent au mieux notre connaissance (en fait, notre ignorance) d'un système physique. La procédure de calcul consiste à maximiser l'entropie de la distribution en imposant les contraintes connues via des multiplicateurs de Lagrange. Ceci permet de repartir la probabilité le plus équitablement possible sous les contraintes connues.

1. Montrer que si la seule contrainte est la normalisation, $\sum_i p_i = 1$, le résultat de la maximisation de $S(p_1, .., p_i, .., p_n)$ est la distribution uniforme.
2. Chaque état du système à une énergie E_i et on impose que l'énergie moyenne $\sum_i p_i E_i$ soit égale à U. Quel est le résultat de la maximisation ? Quelle est l'interprétation physique du multiplicateur de Lagrange ?

3 Traitement canonique de spins indépendants

On revient au paramagnétisme d'un système de spins considéré à la PC n° 1. Les spins sont maintenant mis en contact thermique avec un thermostat à la température T. On rappelle que le moment magnétique associé au spin vaut

$$\hat{\vec{\mu}}_i = -\mu_B \,\hat{\vec{\sigma}}_i \,, \quad \mu_B = \frac{|q|\hbar}{2m_{el}} = 9,27 \cdot 10^{-24}\, J/T$$

1. Comparer l'énergie d'un spin dans un champ B réaliste ($B = 1$ Tesla) avec l'énergie thermique $k_B T$ à température ambiante. Qu'en déduisez vous ?
2. On considère un des spins. Calculer la fonction de partition.
3. En déduire l'énergie moyenne de l'atome en fonction de T, et représenter la courbe.
4. Que vaut la fonction de partition pour N spins identiques et indépendants ? Que vaut l'énergie moyenne ? Que peut-on dire des fluctuations de l'énergie autour de sa valeur moyenne si $N \gg 1$?
5. Calculer l'aimantation moyenne. Montrer qu'elle peut être obtenue par

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln Z.$$

6. Vérifier qu'on retrouve en champ faible la loi de Curie : l'aimantation est proportionnelle à B/T. Discuter qualitativement l'allure des courbe $M(B)$ à température fixe et $M(T)$ à champ magnétique fixe.
7. Montrer que les fluctuations de l'aimantation sont reliées à la susceptibilité par : $\beta \Delta M^2 = \chi$

4 Désaimantation adiabatique

1. Trouvez le rapport N_-/N_+ entre le nombre de spins orientés parallèlement et anti-parallèlement au champ B. Comment pouvez vous expliquer la situation des températures négatives rencontrée à la PC n° 1 ?
2. Exprimer l'entropie S en fonction de β, B et N.
3. On effectue des transformations adiabatiques du système en modifiant lentement le champ magnétique extérieur. Pouvez-vous alors proposer une méthode pour refroidir un échantillon à très basse température ?

5 Oscillateur harmonique quantique à l'équilibre thermodynamique

1. Rappeler les niveaux d'énergie E_n d'un oscillateur harmonique quantique unidimensionnel de fréquence ω et leur dégénérescence.
2. On couple cet oscillateur a un grand réservoir de température T. Calculer la fonction de partition canonique $z(\beta)$ de l'oscillateur harmonique.
3. Calculer l'énergie moyenne associée $u(\beta)$. Que vaut-elle à haute température ? A basse température ?
4. Calculer la capacité thermique $C(T)$ (dite aussi chaleur spécifique, specific heat en anglais) et mettre le résultat sous la forme $C(T) = k_B f(x)$, avec $x = \hbar\omega/k_B T$. Représenter graphiquement la variation de C en fonction de T. Commenter les valeurs à basse et haute température.
5. En utilisant la relation $(\Delta u)^2 = \partial^2 \ln z / \partial \beta^2$, montrer que l'écart type de la distribution de l'énergie est simplement relié a la chaleur spécifique.