Examen — 1re session

Aucun document ni calculatrice ne sont autorisés
Durée de l'épreuve : 2h
Le sujet comprend 2 pages au total

Modèle simple à deux particules

On considère un modèle très simple où deux particules se trouvent à la température T dans une boîte contenant deux compartiments. On note r_i la position de la i^{e} particule ($i = 1, 2$) qui prend la valeur -1 si la particule est dans le compartiment de gauche et la valeur $+1$ si elle est à droite. On note $-A_i$ l'énergie de la particule i si elle est dans le compartiment de gauche et $+A_i$ si elle est à droite, avec $A_i > 0$. Finalement on considère que si les deux particules sont du même côté on gagne l'énergie $\kappa > 0$.

1 Position moyenne des particules

1/ Justifier que l'énergie du système s'écrit $\mathcal{H} = A_1 r_1 + A_2 r_2 - \kappa \delta_{r_1, r_2}$, où δ_{r_1, r_2} est le symbole de Kroenecker.

2/ Donner qualitativement l'état du système (i) à $T = 0$ et (ii) $T \to +\infty$.

3/ Donner les différents états microscopiques du système et en déduire l'expression de la fonction de partition Z du système.

4/ Montrer que l'énergie libre du système a pour expression

$$F = -k_{\mathrm{B}} T \ln 2 - k_{\mathrm{B}} T \ln \left(\mathrm{e}^{\beta \kappa} \cosh \left(\beta [A_1 + A_2] \right) + \cosh \left(\beta [A_1 - A_2] \right) \right),$$

où $\beta = 1/k_{\mathrm{B}} T$.

5/ Montrer que la valeur moyenne $\langle r_i \rangle$ de la position de la particule i s'écrit

$$\langle r_i \rangle = \left(\frac{\partial F}{\partial A_i} \right)_{A_{j \neq i}}.$$

6/ Calculer explicitement $\langle r_1 \rangle$ et $\langle r_2 \rangle$ dans le cas où $A_1 = A_2 = A$. Tracer l'allure des courbes $\langle r_i \rangle$ en fonction de βA et commenter physiquement votre résultat.

2 Fonction de corrélation

1/ *Question de cours :* Rappeler la définition de la fonction de corrélation des positions pour un fluide classique. Quelle est son allure dans le cas d'un gaz, d'un liquide et d'un solide ? Comment peut-on déterminer expérimentalement cette fonction ?

2/ On s'intéresse aux corrélations entre les deux particules. Pour cela on définit la fonction de corrélation $G^{(2)}(1, 2) = \langle r_1 r_2 \rangle - \langle r_1 \rangle \langle r_2 \rangle$. Commenter cette définition et montrer que

$$G^{(2)}(1, 2) = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 F}{\partial A_1 \partial A_2}.$$

3/ Calculer explicitement $G^{(2)}(1, 2)$ dans le cas où $A_1 = A_2 = A$. Quelle est la valeur de $G^{(2)}(1, 2)$ pour $\kappa = 0$. Commenter.

3 Énergie interne et capacité calorifique

1/ *Question de cours :* Rappeler la définition de la capacité calorifique $\mathcal{C}$ d'un système. Comment se comporte-t-elle dans une transition de phase du premier ordre et du deuxième ordre ? Essayer de donner une image physique intuitive de ce résultat.

2/ Montrer que l'énergie interne du système se met sous la forme

$$U(T) = -\frac{(A_1 - A_2)\sinh\left[\beta\left(A_1 - A_2\right)\right] + \mathrm{e}^{\beta\kappa}\left\{\kappa\cosh\left[\beta\left(A_1 + A_2\right)\right] + \left(A_1 + A_2\right)\sinh\left[\beta\left(A_1 + A_2\right)\right]\right\}}{\cosh\left[\beta\left(A_1 - A_2\right)\right] + \mathrm{e}^{\beta\kappa}\cosh\left[\beta\left(A_1 + A_2\right)\right]}.$$

On cherche à étudier le comportement de la capacité calorifique $\mathcal{C}$ du système en fonction de la température. L'expression précédente étant complexe on va commencer par s'intéresser à deux cas limites ($A_1 = A_2 = A$, $\kappa = 0$) et ($A_1 = A_2 = 0$, $\kappa \neq 0$).

3/ On se place d'abord dans le cas ($A_1 = A_2 = A$, $\kappa = 0$). Montrer que la capacité calorifique se met sous la forme

$$\mathcal{C}(T) = k_B \frac{(2\beta A)^2}{1 + \cosh\left(2\beta A\right)}.$$

À partir de l'étude rapide de la fonction $x^2/(1 + \cosh x)$ (on donnera les valeurs limites et on justifiera que cette fonction à un maximum), donner le comportement de la capacité calorifique en fonction de la température pour ($A_1 = A_2 = A$, $\kappa = 0$). Interpréter physiquement votre résultat.

4/ On se place maintenant dans le cas ($A_1 = A_2 = 0$, $\kappa \neq 0$). Montrer que la capacité calorifique se met sous la forme

$$\mathcal{C}(T) = k_B\left(\beta\kappa\right)^2 \frac{\mathrm{e}^{\beta\kappa}}{(1 + \mathrm{e}^{\beta\kappa})^2}.$$

Donner le comportement de la capacité calorifique en fonction de la température pour ($A_1 = A_2 = 0$, $\kappa \neq 0$). Interpréter physiquement votre résultat.

5/ Donner l'allure générale de la courbe $\mathcal{C}(T)$ pour $(A_1 = A_2 = A, \kappa)$ quelconques et discuter physiquement cette allure, en particulier comparer cette courbe à l'allure de la fonction de corrélation $G^{(2)}(1, 2)$.