Université de Paris
PhStat1

Année 2019-2020

PHYSIQUE STATISTIQUE

Corrigés des exercices [S] du TD n°3 :

Les exercices estampillés [S] sont des exercices supplémentaires qui ne pourront être traités en séances de travaux dirigés dans l'horaire imparti, mais qu'il est utile d'étudier dans un travail personnel.

---

4 Deux boîtes cubiques [S]

1. On se livre à un petit exercice préliminaire de comptage :

$$\begin{array}{c|c|c|c|r} \text{dégérescence} & i & j & k & \varepsilon_{ijk} \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & 3\varepsilon_0 \\ 3 & 2 & 1 & 1 & 6\varepsilon_0 \\ 3 & 1 & 2 & 2 & 9\varepsilon_0 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 12\varepsilon_0 \\ 6 & 3 & 2 & 1 & 14\varepsilon_0 \\ 3 & 2 & 2 & 3 & 17\varepsilon_0 \\ 3 & 3 & 1 & 1 & 11\varepsilon_0 \\ 3 & 3 & 3 & 1 & 19\varepsilon_0 \\ 3 & 4 & 1 & 1 & 18\varepsilon_0 \\ 6 & 4 & 2 & 1 & 21\varepsilon_0 \\ 3 & 4 & 2 & 2 & 24\varepsilon_0 \end{array} \tag{1}$$

On constate donc que le E_{I} peut être atteinte soit sous la forme $3\varepsilon_0 + 9\varepsilon_0$, de 3×2 manières (les particules étant discernables), soit sous la forme $6\varepsilon_0 + 6\varepsilon_9$, de 3×3 manières. On en conclut $\Omega_{\text{I}} = 3 \times 2 + 3 \times 3 = 15$.
Pour le système II, on peut obtenir E_{II} de deux façons également : soit sous la forme $9\varepsilon_0 + 9\varepsilon_0$, de 9 manières, soit sous la forme $6\varepsilon_0 + 12\varepsilon_0$, de 6 manières, si bien que $\Omega_{\text{II}} = 15$.
Pour le système total $t = 1 \cup 2$ on trouve

$$\Omega_t = \Omega_{\text{I}}\Omega_{\text{II}} = 225 \tag{2}$$

2. La quantité conservée est l'énergie totale $E_t = 30\varepsilon_0$. On recommence avec un peu de comptage :

$$\begin{array}{r|r|r|r|r|r|r|r} & a & b & c & d & e & f & g \\ \hline E_{\text{I}} & 6 & 9 & 12 & 15 & 18 & 21 & 24 \\ E_{\text{II}} & 24 & 21 & 18 & 15 & 12 & 9 & 6 \end{array} \tag{3}$$

Pour trouver la dégénérescence de chaque état :
— a ou g : Il y a une possibilité pour I et pour II il y a 31 possibilités (18 pour $18\varepsilon_0 + 6\varepsilon_0$ 12 pour $3\varepsilon_0 + 21\varepsilon_0$ et 1 pour $12\varepsilon_0 + 12\varepsilon_0$), d'où $1 \times 31 = 31$ possibilités au total.
— b ou f : Il y a 6 possibilités pour I ($3\varepsilon_0 + 6\varepsilon_0$) et pour II il y a 12 possibilités (6 pour $9\varepsilon_0 + 12\varepsilon_0$, 6 pour $18\varepsilon_0 + 3\varepsilon_0$), d'où $6 \times 12 = 72$ possibilités au total.
— c ou e : Il y a 15 possibilités pour I et 15 pour II d'où 225 au total.
— d : Pour I : $3\varepsilon_0 + 12\varepsilon_0$ ou $6\varepsilon_0 + 9\varepsilon_0$, soit $2 \times 1 + 3 \times 3 \times 2 = 20$ possibilités, et autant pour II, soit 400 au total.

Par conséquent,

$$\Omega_t = 2\times 31 + 2\times 72 + 2\times 225 + 400 = 1056. \tag{4}$$

Le nombre de mico-états accessibles a donc (beaucoup) augmenté. Ainsi lorsque l'on retire une contrainte à un système microcanonique, celui-ci relaxe toujours vers un état d'équilibre d'entropie plus élevée.

3. Tous les micro-états étant équiprobables à l'équilibre, la probabilité d'observer un micro-état donné est 1/1056. L'état le plus probable est celui de poids 400. Par ailleurs, on détermine facilement la probabilité de trouver I dans un état d'énergie E_{I} : cette probabilité est nulle sauf pour 7 valeurs particulières.

$$\begin{array}{l} \mathrm{Prob}(E_{\mathrm{I}} = 6\varepsilon_0 \text{ ou } 24\varepsilon_0) = \frac{31}{1056}, \quad \mathrm{Prob}(E_{\mathrm{I}} = 9\varepsilon_0 \text{ ou } 21\varepsilon_0) = \frac{72}{1056}, \\ \mathrm{Prob}(E_{\mathrm{I}} = 12\varepsilon_0 \text{ ou } 18\varepsilon_0) = \frac{225}{1056}, \quad \mathrm{Prob}(E_{\mathrm{I}} = 15\varepsilon_0) = \frac{400}{1056} \end{array} \tag{5}$$

La moyenne de E_{I} en découle directement :

$$\langle E_{\mathrm{I}}\rangle = \frac{31}{1056}(6\varepsilon_0+24\varepsilon_0)+\frac{72}{1056}(9\varepsilon_0+21\varepsilon_0)+\frac{225}{1056}(12\varepsilon_0+18\varepsilon_0)+\frac{400}{1056}15\varepsilon_0 = \langle E_{\mathrm{II}}\rangle = 15\varepsilon_0. \tag{6}$$

La valeur moyenne $\langle E_{\mathrm{I}}\rangle$ est ici confondue avec la valeur la plus probable, la distribution étant symétrique. On peut estimer la largeur relative de cette distribution : on trouve $\langle E_{\mathrm{I}}^2\rangle = \frac{251856}{1056}\varepsilon_0^2$, et donc :

$$\frac{\Delta E_{\mathrm{I}}}{\langle E_{\mathrm{I}}\rangle} = \frac{1}{15}\sqrt{\frac{251856}{1056} - 15^2} \simeq 0.25.$$

---

6 Défauts de Frenkel [S]

On a N sites et N' interstices, tous discernables (mais les atomes sont eux indiscernables entre-eux). L'énergie d'un micro-état avec n atomes sur des interstices est $E = n\varepsilon$. Le système étant isolé, n est donc fixé, et le nombre d'états accessibles est simplement égal au nombre de façons de distribuer n atomes sur les N' interstices, multiplié par le nombre de façons de distribuer les $N-n$ atomes restants sur les N sites :

$$\Omega = C_{N'}^n C_N^{N-n} = C_{N'}^n C_N^n.$$

La température microcanique est définie par :

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial S}{\partial n}.$$

En utilisant la formule de Stirling, il vient :

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} &\simeq \frac{k_{\mathrm{B}}}{\varepsilon}\left\{-2\ln n + \ln(N-n) + \ln(N'-n)\right\} \\ &\simeq \frac{k_{\mathrm{B}}}{\varepsilon}\ln\left(\frac{NN'}{n^2}\right), \end{aligned}$$

ce qui est équivalent au résultat demandé.