

## PHYSIQUE STATISTIQUE - Juin 2022

### Théorie de l'ensemble canonique (14 points)

a) Démontrez que la distribution de probabilité à l'équilibre thermique dans l'ensemble NVT est donné par:

$$p_i = \frac{\exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)}{Z} \quad (1)$$

où  $p_i$  est la probabilité d'un micro-état  $i$ ,  $E_i$  son énergie et  $Z$  la fonction de partition.

b) Démontrez que l'entropie de Shannon admet un minimum et un maximum. Donnez leurs valeurs et leur signification physique.

### Marches aléatoires (16 points)

Un atome se déplace le long d'une marche d'une surface de Cu à la température de 280K. La marche est rectiligne et sa direction est prise arbitrairement comme celle de l'axe  $X$  des coordonnées. Le déplacement de l'atome est mesuré en temps réel par microscopie à effet tunnel. Une image est prise toutes les secondes. On constate que l'atome effectue un mouvement aléatoire avec un saut vers la gauche (pris comme le sens des coordonnées  $x < 0$ ) ou vers la droite de manière aléatoire. Le saut correspond à la distance entre deux sites d'adsorption, soit  $d = 4.0 \text{ \AA}$ . On constate qu'à chaque observation, l'atome s'est déplacé. Un biais est cependant observé dans le mouvement de l'atome: la probabilité de se déplacer à droite est  $p = 0.6$  et celle d'aller à gauche est  $q = 0.4$ . On définit  $x_N$  la position de l'atome après  $N$  observations. Tous les sauts sont supposés statistiquement indépendants et on suppose que l'atome n'a fait qu'un saut entre deux mesures. On appelle  $n$  le nombre de sauts vers la droite parmi  $N$  et  $x_N = md$  la distance parcourue après  $N$  sauts.

a) Quelle est la probabilité  $P(n)$  que l'atome ait effectué  $n$  sauts vers la droite ? Donnez la formule sans démonstration.

b) Quelle est la probabilité  $P(m)$  avec  $m > 0$  ?

c) Démontrez les équations pour  $\langle n \rangle$ ,  $\langle m \rangle$ ,  $\sigma_n$ ,  $\sigma_m$  en utilisant une variable binaire  $u_i$  prenant 1 avec la probabilité  $q$  et 0 avec la probabilité  $p$  et une variable binaire  $v_i$  prenant +1 avec la probabilité  $q$  et -1 sinon.

d) Démontrez la formule donnant le coefficient de diffusion de l'atome dans la formule d'Einstein à une dimension pour cette marche aléatoire.

d) En considérant que l'on peut approximer le temps d'un saut de l'atome entre deux sites comme étant le temps écoulé entre deux mesures, calculer la valeur du coefficient de diffusion.