Corrigé de l'examen de Physique Statistique : Conformation d'un polymère à 2 dimensions.

M1PC, Université Joseph Fourier, Mars 2009

1. fonction de partition approchée. Donner la densité de probabilité $p(\theta)$ d'observer un angle θ entre deux bâtonnets quelconque.

$$p(\theta) = \sqrt{\frac{J}{2\pi T}} e^{-(J/2T)\theta^2}$$

2. fluctuations d'angle entre voisins. Montrer que l'angle moyen $\langle\theta\rangle = 0$: Ceci est évident puisque la fonction $\theta\exp(-a\theta^2)$ est impaire et qu'on l'intégre sur un intervalle paire.

Les fluctuations d'angle entre deux bâtonnets voisins

$$\langle\theta^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2 \; p(\theta) d\theta$$

Cela nous donne

$$\langle\theta^2\rangle = \frac{T}{J}$$

Comme nous avons supposé $\delta \sim \sqrt{\langle\theta^2\rangle}$ petit, c'est donc J qui fixe l'échelle de la température, et BT veut dire $T \ll J$.

3. fluctuations d'angle entre monomère distants Une autre quantité intéressante est Ψ_n, l'angle entre le monomère $n+1$ et le monomère 1 :

$$\Psi_n = \sum_{i=1}^{n} \theta_i$$

Ψ_n est la somme de n variables indépendantes, nous avons donc

$$\langle\Psi_n\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle\theta_i\rangle = 0$$

et

$$\langle\Psi_n^2\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle\theta_i^2\rangle = n\frac{T}{J}$$

I. CALCUL SANS APPROXIMATION.

4. fonction de partition. Calculer la fonction de partition exacte Z_1 d'un angle θ_i. En déduire la densité de probabilité $p(\theta)$ d'observer un angle θ entre deux monomère.

$$p(\theta) = \frac{1}{2\pi I_0(J/T)} e^{(J/T)\cos\theta}$$

5. moyenne du cosinus d'angle. La valeur moyenne du cosinus d'un angle

$$\begin{aligned}\langle\cos\theta\rangle &= \int_{-\pi}^{\pi} \cos\theta \; p(\theta) d\theta \\ &= \frac{I_1(J/T)}{I_0(J/T)}\end{aligned}$$

La limite quand $T \ll J$ est $\langle\cos\theta\rangle = 1$. Donc l'angle $\theta \approx 0$. Si nous connaissions les termes supplémentaires du développement, nous aurions pu écrire que

$$\langle\cos\theta\rangle = \frac{1-(3/8)(T/J)}{1+(1/8)(T/J)} \approx 1-(1/2)(T/J)$$

et comme $\cos\theta \approx 1-\theta^2/2$, nous retrouvons bien $\langle\theta^2\rangle = (T/J)$. Cette partie n'était pas exigée.

6. HT. Que vaut $\langle \cos\theta \rangle$ à haute température quand $T \gg J$ (donner l'expression comme un polynôme de J/T) ?

$$\langle \cos\theta \rangle = \frac{I_1(J/T)}{I_0(J/T)} \approx \frac{\frac{J}{2T}}{1} = \frac{J}{2T}$$

Et nous avons évidément (intégration de fonction impaire)

$$\langle \sin\theta \rangle = 0$$

7. Corrélation. En remarquant que

$$\Psi_n = \Psi_{n-1} + \theta_n$$

et en utilisant l'indépendance de Ψ_{n-1} et θ_n, et sachant que $\langle \sin\theta_n \rangle = 0$ Nous avons :

$$\begin{aligned} \langle \cos\Psi_n \rangle &= \langle \cos\Psi_{n-1} \rangle \langle \cos\theta_n \rangle - \langle \sin\Psi_{n-1} \rangle \langle \sin\theta_n \rangle \\ &= \langle \cos\Psi_{n-1} \rangle \lambda \end{aligned}$$

où

$$\lambda = \frac{I_1(J/T)}{I_0(J/T)}$$

En continuant l'opération, nous trouvons bien

$$\langle \cos\Psi_n \rangle = \lambda^n \tag{1}$$

A. Quantités thermodynamique.

8. Energie moyenne. L'énergie moyen par angle entre bâtonnets voisins :

$$\begin{aligned} u &= -\frac{1}{Z_1}\frac{\partial Z_1}{\partial \beta} \\ &= -J\frac{I_1(J/T)}{I_0(J/T)} \end{aligned}$$

9. Chaleur spécifique. La chaleur spécifique par angle C_v :

$$C_v = \frac{J^2}{T^2}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\frac{I_2(J/T)}{I_0(J/T)} - \frac{I_1^2(J/T)}{I_0^2(J/T)}\right)$$

La limite $T \gg J$:

$$C_v = \frac{1}{2}\frac{J^2}{T^2}$$