CT DE PHYSIQUE STATISTIQUE - Juin 2022

1 Théorie de l'ensemble canonique (6 points)

a) Définir l'entropie statistique de Shannon S.

b) Pour quelle distribution de probabilité S est-elle maximale ?

c) Donnez la définition de la fonction de partition Z dans l'ensemble canonique.

d) Donnez la relation entre l'énergie libre F et la fonction de partition Z.

2 Marches aléatoires (8 points)

Une molécule se déplace sur un nanoruban de TiO_2 à la température de 280K. Le ruban est rectiligne et sa direction est prise arbitrairement comme celle de l'axe X des coordonnées. Le déplacement de la molécule est mesuré en temps réel par microscopie à effet tunnel. Une image est prise toutes les minutes. On constate que la molécule 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 moyenne entre deux sites d'adsorption, soit $d = 3.0$ Å . On constate qu'à chaque observation, la molécule s'est déplacée. Un biais est cependant observé dans le mouvement moléculaire: la probabilité de se déplacer à gauche est de $p = 0.6$ et celle d'aller à droite $q = 0.4$. On définit x_N la position de la molécule avec N observations. Tous les sauts sont supposés statistiquement indépendants. On appelle n le nombre de sauts de la molécule vers la gauche parmi N et $x_N = md$ la distance parcourue après N sauts. On demande de répondre aux questions suivantes.

a) Quelle est la probabilité $P(n)$ que la molécule ait effectué n sauts vers la gauche ? Donnez la formule sans démonstration.

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

c) Démontrez les équations pour $< n >$, $< m >$, σ_n, σ_m en utilisant une variable binaire u_i prenant 1 avec la probabilité p et 0 avec la probabilité q et une variable binaire v_i prenant $+1$ avec la probabilté p et -1 sinon.

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

3 Distribution binomiale (6 points)

Démontrez que la distribution binomiale a son maximum à la valeur moyenne de sa variable.