Physique Statistique (PHY434)
Maxime Dahan
Année 2016-2017

Petite Classe n° 2
Mardi 18 Avril 2017

Modèle de gaz sur réseau pour la transition liquide-gaz
Approche en champ moyen

Un modèle très simple de liquide ou de gaz consiste à considérer un ensemble de particules qui peuvent occuper des positions discrètes et discernables, correspondant aux nœuds d'un réseau. On considère un réseau cubique contenant $M = L^3$ points de coordonnées entières $q = (q_1, q_2, q_3)$, où $q_i \in \{1 \dots L\}$. Chaque site occupe un volume b et peut être rempli par **au plus** une molécule. Qu'il soit occupé ou non par une molécule, l'énergie du site est nulle. Le système est en contact avec un thermostat à la température T qui est aussi un réservoir de particules de potentiel chimique μ. On néglige l'énergie cinétique des particules.

1 Particules sans interaction

On se place dans l'ensemble grand-canonique et on cherche à caractériser le comportement du système en l'absence d'interactions.

1. Calculer la fonction de partition grand-canonique Z_g.
2. Calculer la pression P et le nombre moyen de particules $\langle N \rangle$ en fonction de T et μ.
3. Déterminer l'équation d'état du fluide reliant P à la température et à la densité moyenne $\rho(T, \mu) = \langle N \rangle / M$
4. **Question facultative** : Calculer l'énergie interne U et montrer que l'entropie du système en fonction de ρ et M est égale à : $S = -k_B M(\rho \log \rho + (1-\rho) \log(1-\rho))$.

2 Transition de phase par couplage entre particules

L'interaction entre particules voisines sur le réseau modifie l'énergie d'une configuration qui devient

$$H = -\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j,$$

avec $\varepsilon > 0$, où n_i est le nombre de molécules sur le site i et la somme porte sur toutes les paires de voisins du réseau cubique.

1. Quel aspect de l'interaction entre molécules est pris en compte par ce hamiltonien ?
2. On traite cette interaction dans le cadre de l'approximation du champ moyen. Exprimer la loi de probabilité du nombre d'occupation n_i en fonction de $u_i = -\varepsilon \sum_{j(i)} \rho_j$, la somme portant sur tous les sites j voisins de i.
3. En déduire la relation de champ moyen entre ρ_i et les densités moyennes ρ_j sur les sites voisins de j.
4. On cherche une solution uniforme $\rho_i = \rho_j = \rho$ de cette équation. En déduire une relation entre la densité ρ, le potentiel chimique μ, β et ε sous la forme $e^{\beta\mu} = g(x = z\beta\varepsilon, \rho)$ où z est le nombre de sites voisins.

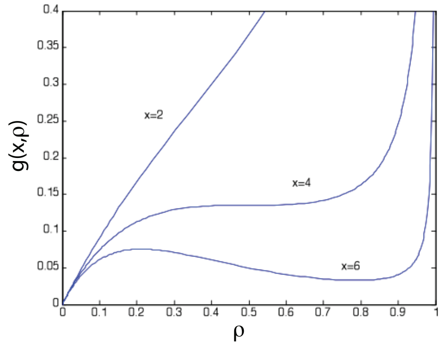

FIGURE 1 – *Variation de $g(x, \rho)$ pour différentes valeurs de x.*

5. Les seules solutions acceptables (i.e. correspondant à des minima du grand potentiel A) de cette dernière équation sont celles pour lesquelles $\partial g/\partial \rho > 0$. D'après les courbes ci-dessous, de quel effet physique peut-on rendre compte par ce modèle ?
6. Calculer les valeurs T_c et ρ_c donnant la position du point critique. (Indication : on pourra faire ce calcul en utilisant la fonction $\ln(g)$.)
7. On cherche maintenant l'équation d'état de la phase ainsi décrite. Démontrer à partir de la différentielle de l'énergie libre que $\partial p/\partial N)_{V,T} = -\partial \mu/\partial V)_{N,T}$. En déduire l'expression de $\partial p/\partial \rho)_{V,T}$ en fonction de x, ρ et β. On notera que $V = Mb$ et $\rho = N/M$.
8. Intégrer cette dernière équation pour obtenir p. Vérifier qu'à faible densité l'équation d'état trouvée correspond à la loi des gaz parfaits.

3 Relation avec le modèle d'Ising

On peut noter la grande similarité du modèle de gaz sur réseau avec le modèle d'Ising du ferromagnétisme pour lequel :

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i,$$

avec s_i une variable de spin égale à ± 1. Le fait que le comportement critique soit analogue dans deux systèmes microscopiquement différents illustre la notion d'*universalité*.

1. Donner les relations entre n_i, ρ, et μ et les analogues magnétiques s_i (le spin), m (l'aimantation) et B (le champ magnétique).
2. A partir de l'équation reliant μ à ρ, retrouver l'équation auto-cohérente de champ moyen $m = \tanh(\beta(Jzm + B))$ introduite en amphi.
3. Pour $B = 0$, faire un développement limité au voisinage de $m = 0$. Montrer que l'aimantation $m(T)$ varie comme $(T_c - T)^b$ et déterminer la valeur de l'exposant critique b. (*Indication* : pour x petit, $\tanh x \approx x - x^3/3$).