ENS Cachan - UPMC

Introduction à la Physique Statistique LP357
2014-2015

TD 7 : Particules en interaction I : Le gaz sur réseau

Pour simplifier l'étude des fluides réels, on suppose que les positions des particules sont discrétisées. Dans le modèle de "gaz sur réseau", le volume V du récipient est découpé en petits cubes élémentaires de volume v_0 (de l'ordre de grandeur d'un volume atomique) ; les centres des cubes forment donc les sites d'un réseau cubique simple (de coordinence $q = 6$), les atomes du fluide ne pouvant occuper que l'un des $N_0 = V/v_0$ sites, à raison d'un atome au plus par site. L'interaction entre les atomes est supposée à courte portée (limitée aux plus proches voisins) et attractive ; elle est prise en compte via le Hamiltonien :

$$H_{GR} = -\epsilon \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j \ , \qquad (1)$$

où le taux d'occupation vaut $n_i = 1$ si le site i est occupé par un atome, $n_i = 0$ s'il est vide et où $\langle i, j\rangle$ indique que la somme est prise sur toutes les paires de plus proches voisins. La constante ϵ est positive. Nous allons étudier ce système dans le cadre du formalisme grand-canonique.

1 Le fluide de sphères dures

On considère tout d'abord le cas $\epsilon = 0$.

▷ **1-1** En quoi ce modèle décrit-il bien un fluide de sphères dures ?

▷ **1-2** Calculer la grande fonction de partition *d'un site*. En déduire la grande fonction de partition $\Xi(T, \mu)$ du système global.

▷ **1-3** Calculer la pression $P(T, \mu)$ du système ainsi que le nombre moyen $N(T, \mu)$ d'atomes dans le récipient.

▷ **1-4** Déterminer l'équation d'état du fluide en fonction de la densité $n = N/N_0$. Que devient cette équation dans la limite des faibles densités ?

2 Le fluide réel dans l'approximation du champ moyen

On considère maintenant le cas d'un fluide réel pour lequel $\epsilon > 0$. On traite le problème dans l'approximation dite du champ moyen. Pour ce faire on réécrit le Hamiltonien (1) en utilisant la décomposition suivante

$$n_i n_j = (n_i - n)(n_j - n) + n(n_i + n_j) - n^2,$$

où $n = N/N_0$ est la valeur moyenne du nombre d'occupation d'un site (densité), qui est *indépendante* du site considéré.

▷ **2-1** Dans l'approximation du champ moyen on néglige le terme de fluctuation $\sum_{\langle i,j\rangle}(n_i - n)(n_j - n)$. Montrer que dans ce cas, le Hamiltonien s'écrit

$$H \simeq \sum_{i=1}^{N_0} \Big(-6\epsilon n n_i + 3\epsilon n^2 \Big). \qquad (2)$$

Donner une interprétation du "champ moyen". Dans quelles conditions l'approximation du champ moyen est-elle valable ?

▷ **2-2** Calculer la grande fonction de partition $\Xi(T, \mu, n)$ pour n *fixé* ainsi que le grand potentiel $J(T, \mu, n)$.

▷ **2-3** Montrer que n doit vérifier une équation d'auto-cohérence et déterminer cette équation.

▷ **2-4** Calculer la pression du système et montrer que l'équation d'état est donnée par :

$$P = -\frac{kT}{v_0} \ln(1-n) - \frac{3\epsilon}{v_0} n^2. \tag{3}$$

Que devient cette équation d'état à basse densité ?

▷ **2-5** Donner l'allure générale des isothermes $P = f(n)$. Montrer que si T est inférieure à une température critique T_c, le système peut devenir instable, c'est-à-dire que sa compressibilité isotherme

$$\chi \hat{=} -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T = \frac{1}{n}\left(\frac{\partial n}{\partial P}\right)_T,$$

est négative pour certaines valeurs du taux d'occupation. Déterminer les coordonnées T_c, P_c et n_c du point critique.

3 Équivalence avec le modèle d'Ising (en supplément)

Nous allons montrer l'équivalence formelle entre le modèle de gaz sur réseau et le modèle d'Ising à la limite thermodynamique pour un réseau cubique de coordinence q.

▷ **3-1** Écrire la fonction de partition canonique du gaz sur réseau pour N particules. On introduira pour cela la contrainte $N = \sum_{i=1}^{N_0} n_i$ sous la forme d'une distribution de Dirac dans la somme sur les microétats.

▷ **3-2** À l'aide du changement de variables $n_i = \dfrac{1+\sigma_i}{2}$, réécrire la fonction de partition en terme d'une somme sur les variables de spins $\sigma_i = \pm 1$.

▷ **3-3** Donner l'expression de la grande fonction de partition du gaz sur réseau dans l'ensemble grand-canonique et montrer qu'elle est égale à la fonction de partition canonique du modèle d'Ising à un facteur multiplicatif près.