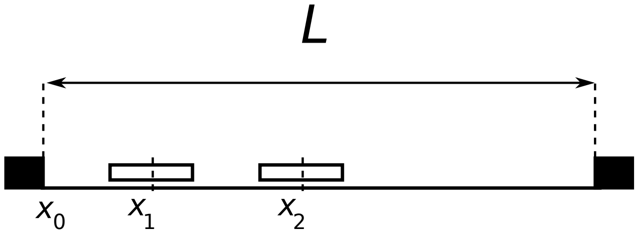
Examen – 2e session

Aucun document ni calculatrice ne sont autorisés
Durée de l'épreuve : 2h
Le sujet comprend 3 pages au total

1 Fluide classique de bâtonnets durs (gaz de Tonks)

On considère un modèle de fluide classique à une dimension, composé de N batônnets de longueur ℓ et de masse m, confinés dans un espace de taille L à la température T. On appelle ρ la densité de bâtonnets. Les bâtonnets interagissent par un potentiel à deux corps $V(x)$. On se limite par la suite à une interaction de cœur dur. On note x_i la position du i-ème bâtonnet (voir figure ci-dessous). Dans toute la suite du problème, on se place dans l'ensemble canonique.



(a) Justifiez très soigneusement l'expression suivante pour la fonction de partition canonique :

$$Z(T,L,N) = \left(\frac{2\pi m k_\mathrm{B} T}{h^2}\right)^{N/2} I_N(L),$$

avec l'intégrale

$$I_N(L) = \int_{\ell/2}^{L-(N-1)\ell-\ell/2} \mathrm{d}x_1 \ldots \int_{x_{i-1}+\ell}^{L-(N-i)\ell-\ell/2} \mathrm{d}x_i \ldots \int_{x_{N-1}+\ell}^{L-\ell/2} \mathrm{d}x_N. \tag{1.1}$$

On rappelle que $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}u \exp(-u^2) = \pi^{1/2}$.

(b) Effectuez soigneusement le changement de variable

$$y_i = x_i + (N-i)\,\ell + \frac{\ell}{2} \qquad (i = 1, \ldots, N)$$

dans l'intégrale (1.1). Calculez l'intégrale $I_N(L)$. En déduire la fonction de partition du gaz de bâtonnets.

(c) En déduire l'équation d'état du système. Existe-t-il une transition de phase dans ce modèle ?

(d) On rappelle le développement du viriel

$$\beta P = \sum_{i=1}^{\infty} B_n(T)\rho^n,$$

où $\beta = 1/k_\mathrm{B}T$, où P est la pression du système, et où

$$B_2(T) = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x \left[1 - \mathrm{e}^{-\beta V(x)}\right].$$

Calculez le second coefficient du viriel $B_2(T)$ de deux manières différentes et vérifiez la cohérence de vos résultats.

(e) Définissez et calculez le cœfficient de compressibilité isotherme κ_T du fluide. Commentez votre résultat.

2 Modèle de Blume-Emery-Griffiths

L'hélium-4 (^{4}He) pur passe d'une phase fluide à une phase superfluide à basse température (transition λ). Lorsque l'on ajoute des atomes d'hélium-3, la transition est modifiée. On cherche à décrire un tel mélange ^{3}He-^{4}He. Pour cela on utilise le modèle sur réseau de Blume, Emery et Griffiths. Chacun des N sites du réseau est occupé par un atome (soit d'hélium-4, soit d'hélium-3) et possède z proches voisins. On associe à chaque site un spin S_i. Lorsque le site est occupé par un atome de ^{3}He, on attribue la valeur 0 au spin S_i, et la valeur ± 1 si c'est un atome de ^{4}He. Le degré de liberté de spin décrit la nature du système : si $m = \langle S_i \rangle$ est nul, le fluide est normal et si $m \neq 0$ il est superfluide.

Afin de décrire ce système, on introduit tout d'abord un hamiltonien d'Ising $\mathcal{H}_{\text{Ising}}$ avec champ extérieur H et un couplage entre proches voisins $-J$ qui décrit la tendance du système à être superfluide à basse température,

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^{N} S_i,$$

où $\langle i, j \rangle$ représente une somme sur les proches voisins du réseau. On décrit ensuite les interactions entre les proches voisins par un hamiltonien d'interaction

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -u_{33} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - S_i^2\right)\left(1 - S_j^2\right) - u_{44} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 - u_{34} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\left(1 - S_i^2\right) S_j^2 + S_i^2 \left(1 - S_j^2\right)\right],$$

où $-u_{33}$, $-u_{44}$ et $-u_{34} = -u_{43}$ représentent l'énergie d'interaction de chaque type de paire (^{3}He-^{3}He, ^{4}He-^{4}He, ^{3}He-^{4}He et ^{4}He-^{3}He, respectivement). Finalement, on prend en compte les potentiels chimiques μ_3 et μ_4 des deux espèces (^{3}He et ^{4}He). Le hamiltonien total s'écrit donc

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Ising}} + \mathcal{H}_{\text{int}} - \mu_3 N_3 - \mu_4 N_4, \tag{2.1}$$

où N_3 et N_4 sont les nombres d'atomes de ^{3}He et ^{4}He.

2.1 Hamiltonien du modèle

Montrez que le hamiltonien (2.1) se met sous la forme

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 - H \sum_{i=1}^{N} S_i - \Delta \sum_{i=1}^{N} S_i^2 + C.$$

On exprimera les constantes K, Δ et C en fonction des paramètres du problème. Dans la suite on pose $C = 0$. Justifiez brièvement ce choix.

2.2 Approximation de champ moyen

(a) Exprimez la relation entre $\langle S_i^2 \rangle$ et la fraction moyenne x de ^{3}He par site.

(b) Définir la fonction de corrélation de spins C_{ij}. Que vaut-elle dans l'approximation de champ moyen ?

(c) Montrez que dans cette approximation on peut remplacer le produit $S_i S_j$ par $S_i m + m S_j - m^2$. Par quoi doit-on remplacer $S_i^2 S_j^2$?

(d) En déduire l'expression de la grande fonction de partition Ξ puis du grand potentiel Ω.

(e) Écrire les relations d'auto-cohérences qui donnent m et x. Montrez qu'elles se mettent sous la forme

$$m = (1 - x) \tanh\left(\beta[H + zJm]\right),$$

$$x = \frac{1}{1 + 2\cosh\left(\beta[H + zJm]\right) \exp\left(\beta[\Delta + zK(1 - x)]\right)},$$

où $\beta = 1/k_{\mathrm{B}} T$.

2.3 Description de la transition de phase par la théorie de Landau

On se place désormais dans le cas où $K = 0$ (justifiez brièvement ce choix). On se place à champ nul ($H = 0$) et près de la transition, c'est-à-dire à m voisin de 0.

(a) On introduit le potentiel

$$G(T, m, \Delta) = \Omega(T, \Delta, H) + Hm.$$

Justifiez l'utilisation de ce potentiel pour étudier la transition de phase à champ nul.

(b) On cherche à développer ce potentiel sous la forme

$$G(T, m, \Delta) = G(T, 0, \Delta) + \frac{1}{2}a(T, \Delta)m^2 + \frac{1}{4}b(T, \Delta)m^4 + \frac{1}{6}c(T, \Delta)m^6 + \mathcal{O}(m^8).$$

En vous limitant au deuxième ordre en m, montrez que

$$a(T, \Delta) = \delta k_B T - zJ,$$

où l'on a posé $\delta = 1 + e^{-\beta\Delta}/2$. Dans la suite, on admettra que

$$b(T, \Delta) = \frac{k_B T}{8}\left(\delta^2 - \frac{\delta^3}{3}\right),$$

$$c(T, \Delta) = \frac{k_B T}{6}\left(\frac{\delta^3}{2} - \frac{3\delta^4}{8} + \frac{3\delta^5}{40}\right).$$

(c) Donnez qualitativement l'allure de $G(T, m, \Delta)$ lorsque $b(T, \Delta) > 0$. En déduire qu'il existe une transition de phase pour une température $T_c(x) = T_c(0)(1 - x)$.

(d) On suppose que $c(T, \Delta) > 0$. Donnez qualitativement l'allure de $G(T, m, \Delta)$ lorsque $b(T, \Delta) < 0$. Que se passe-t-il dans ce cas là ? Montrez que l'équation de la ligne de transition du premier ordre s'écrit $a = 3b^2/16c$.

(e) Montrez qu'il existe un point triciritique (T_t, x_t) dont on calculera les coordonnées.