Série 8.
Gaz réel. Modèle d'Ising.

Exercice 8.1 Gaz réel: développement du viriel et équation de Van der Waals.

On considère un système de particules impénétrables de rayon r_0 (noyaux durs) interagissant avec un potentiel attractif $U(r) = -U_0(r_0/r)^6$ (force de Van der Waals).

(1) Montrer qu'à haute température $T \gg U_0$, le deuxième coefficient du développement du viriel

$$\frac{p}{T} = \rho + b_2(T)\rho^2 + b_3(T)\rho^3 + \dots \tag{1}$$

devient

$$b_2(T) = \frac{2\pi}{3} r_0^3 \left(1 - \frac{U_0}{T}\right) . \tag{2}$$

(2) En prenant l'hypothèse supplémentaire que la distance interparticule ($\sim \rho^{-1/3}$) est beaucoup plus grande que le rayon r_0 de la particule ($\rho^{-1/3} \gg r_0$), montrer que dans ce régime l'équation d'état prend la forme de l'équation de Van der Waals:

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = T \tag{3}$$

avec $v = V/N$ le volume par particule. Identifier les paramètres a et b en terme de r_0 et U_0.

Exercice 8.2

Montrer que l'approximation de champ moyen pour le modèle d'Ising est équivalente à la méthode variationnelle avec spins indépendants.

Procéder de la manière suivante:

Considérer le modèle d'Ising

$$H = -\sum_{ij} J_{ij}\, \sigma_i \sigma_j \tag{4}$$

[pour simplifier, on considère uniquement des couplages entre plus proches voisins i et j; le même calcul peut être effectué dans le cas de couplages arbitraires J_{ij}].

Considérer un ensemble de configurations où tous les spins sont indépendants et ont des probabilités p_+ et p_- d'être dans leurs deux états (p_+ et p_- sont identiques pour les différents sites). Les probabilités $p_\pm$ satisfont $p_+ + p_- = 1$, et l'aimantation moyenne est donnée par $m = p_+ - p_-$.

(1) En exprimant les probabilités $p_\pm$ à partir de m, obtenir l'expression pour l'énergie libre

$$F(m, T) = U - TS \tag{5}$$

en fonction de m et T [utiliser $S = -\sum_k p_k \ln p_k$ et $U = \langle H \rangle$].

(2) A température T fixée, minimiser l'énergie libre $F(m,T)$ en fonction de m. Vérifier que de cette méthode variationnelle découle la même équation que celle obtenue à l'aide de l'approximation de champ moyen:

$$m = \tanh\left(\frac{\bar{J}}{T} m\right) \tag{6}$$

où $\bar{J} = \sum_j J_{ij}$ est la somme de toutes les constantes de couplage concernant un site particulier i.

(3) Dessiner $F(m,T)$ en fonction de m à deux températures: $T < T_c$ et $T > T_c$.

Exercice 8.3*

Considérer le modèle d'Ising avec un champ extérieur:

$$H = -\sum_{ij} J_{ij}\, \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i . \tag{7}$$

Dans l'approximation de champ moyen, l'aimantation m est donnée par

$$m = \tanh\left(\frac{\bar{J}}{T} m + \frac{B}{T}\right). \tag{8}$$

Considérer la susceptibilité magnétique

$$\chi(T) = \left(\frac{\partial m}{\partial B}\right)_{T=\mathrm{const}, B=0} \tag{9}$$

dans la phase paramagnétique ($T > T_c$).

Dans l'approximation de champ moyen, montrer que $\chi(T)$ diverge lorsque T s'approche de T_c. Calculer le comportement asymptotique de $\chi(T)$ lorsque $T - T_c \to 0$.