Examen de **physique statistique**, durée 3h.
Une feuille manuscrite et calculatrice autorisées.

Encadrer vos résultats.

1 Température de fusion

Dans le modèle d'un solide où chaque atome est identifié à un oscillateur harmonique classique indépendant et d est la distance interatomique, Lindemann (1910) a suggéré que le solide doit fondre lorsque le déplacement moyen des atomes x_0 atteint une certaine fraction $r = \frac{x_0}{d}$ indépendante du matériau. On va étudier cette hypothèse.

Considérons une particule classique de masse m à un degré de liberté, i.e. dont l'état est caractérisé par sa position $x \in \mathbb{R}$ et son impulsion $p \in \mathbb{R}$. On suppose que son énergie est donnée par

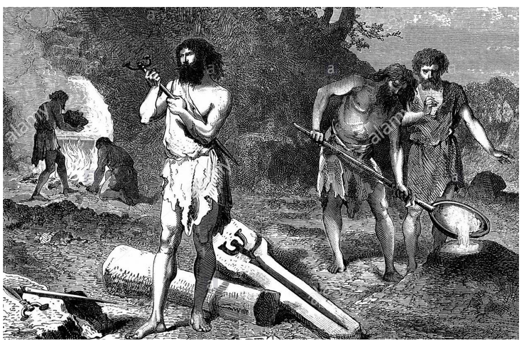
$$E = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}Kx^2,$$

avec $K > 0$. La particule est dans un environnement à la température T. On notera N_A le nombre d'Avogadro et $R = N_A k = 8.31\, J/K$

1. Exprimer la loi de Boltzmann qui donne la mesure de probabilité $P(x,p)\, dxdp$. Déduire la probabilité $P(x)\, dx$ pour que $x \in [x, x+dx]$, en fonction de kT, K. Aide : $\int_{\mathbb{R}} e^{-X^2} dX = \sqrt{\pi}$ et $\int_{\mathbb{R}} X^2 e^{-X^2} dX = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$.
2. Déduire les valeurs moyennes $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ en fonction de kT, K.
3. On note la masse atomique $M = N_A m$, la température d'Einstein $\Theta = \frac{\hbar\omega}{k}$ avec $\omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$ et la distance entre atomes voisins d. Calculer l'amplitude moyenne de vibration $x_0 := \langle x^2 \rangle^{1/2}$ en fonction de $\Theta, T, M, R, \hbar, N_A$.
4. D'après les données suivantes pour différents métaux, on calcule $\frac{x_0}{d}$ à la température de fusion :

	Mg	Al	Cu	Zn	Ag	Pb
$M \quad (g/mole)$	24.3	27.0	63.5	65.4	107.9	207.2
$T_F \quad (K)$	924	933	1356	692	1234	601
$\Theta \quad (K)$	340	400	320	230	220	92
$d \quad$ (Å)	3.19	2.86	2.55	2.66	2.88	3.49
x_0/d	0.04	0.036	0.039	0.037	0.037	0.037

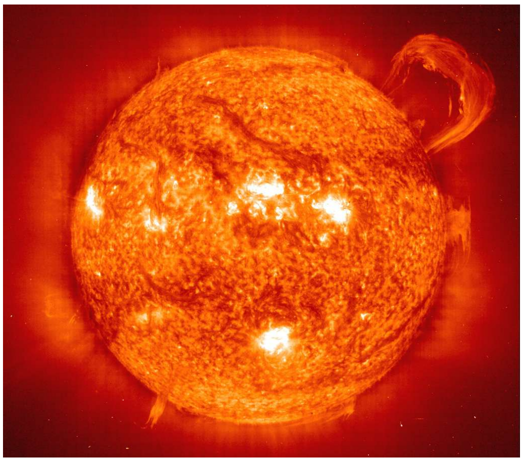
Est-ce que l'hypothèse de Lindemann est validée ? Quelle formule pouvez proposer en général pour exprimer Θ à partir de la température de fusion ?



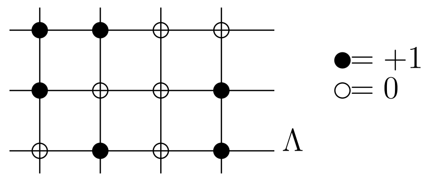
2 Taux de ionisation d'un plasma

L'hydrogène est l'élément le plus abondant dans l'univers, présent sous forme atomique H si le proton p^+ et l'électron e^- sont liés, ou sous forme ionisée, aussi appelée **plasma** si p^+ et e^- sont séparés. On suppose que les particules p^+, e^- ont toujours la même densité moyenne garantissant ainsi la neutralité électrique. On traitera H, p^+, e^- comme des particules ponctuelles sans interaction mutuelles, i.e. comme des **gaz parfaits**. On notera $\epsilon = 13.6\,\mathrm{eV}$ l'**énergie interne de liaison** de chaque atome d'hydrogène.

1. On étudie au préalable le modèle général d'un gaz parfait. On considère N particules **indiscernables** ponctuelles de masse m, possédant chacune éventuellement une énergie interne $\epsilon \geq 0$, libres dans un volume V, et d'énergie totale E.
   (a) Calculer l'expression de l'entropie $S(E, V, N)$. Aides : appliquer la formule de Weyl de comptage d'états. Diviser le nombre de configurations par $N!$ pour tenir compte de l'indiscernabilité. Le volume de la boule de rayon R dans $\mathbb{R}^d$ est $V = C_d R^d$ avec $\ln(C_d) = \frac{d}{2}\ln\left(\frac{2\pi e}{d}\right) + o(d)$ et $\ln(d!) = d\ln\left(\frac{d}{e}\right) + o(d)$ si $d \gg 1$.
   (b) Rappeler les définitions de T, P, μ (température, pression, potentiel chimique) et déduire les trois relations
   $$E + N\epsilon = N\frac{3}{2}kT, \quad P = nkT, \quad e^{\frac{\mu+\epsilon}{kT}} = n\lambda^3$$
   avec la densité $n = \frac{N}{V}$ et $\lambda := \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}\right)^{1/2}$ appelée longueur thermique de De Broglie.
2. On applique maintenant le modèle du gaz parfait à chaque type de particules H, p^+, e^- qui co-existent. Expliquer pourquoi à l'équilibre on a égalité des températures de chaque gaz et la relation suivante appelée **loi d'action de masse**
   $$\mu_H = \mu_p + \mu_e$$
3. Déduire la relation suivante pour le plasma appelée équation de Saha (1920)
   $$\frac{n_e n_p}{n_H} = \lambda_e^{-3} e^{-\frac{\epsilon}{kT}}$$
   où $\lambda_e := \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e kT}\right)^{1/2}$ fait intervenir la masse de l'électron m_e.
4. On pose $n := n_H + n_p$. Utiliser la neutralité du plasma et exprimer le **taux de ionisation** $r := \frac{n_p}{n} \in [0, 1]$ en fonction de $\alpha := \frac{1}{n}\lambda_e^{-3} e^{-\frac{\epsilon}{kT}}$. Discuter les cas limites $\alpha \gg 1$ et $\alpha \ll 1$. Application numérique : calculer r pour la photosphère du soleil où $T = 6000K$, $n = 10^{23} m^{-3}$ donnant $\alpha = 4\ 10^{-8}$ et calculer r pour une nébuleuse où $T = 10^4 K$, $n = 10^{12} m^{-3}$, $\alpha = 3\ 10^{8}$.
5. Commenter le sens physique de α et cette observation : dans l'univers, la matière se trouve dans l'état de plasma dans la plupart des cas, parce que soit (a) la température est trop élevée (ex : étoile) ou parce que (b) la densité est trop faible (ex : gaz des nébuleuses).



3 Modèle simple de transition gaz-liquide



On va étudier un **modèle très simplifié de condensation d'un gaz de particules en liquide** (modèle de Lee-Yang 1952). Ce modèle est discret et utilise un réseau Λ de taille finie (mais grande) où chaque case est soit vide ou contient une particule. Chaque site est noté $x \in \Lambda$ et possède une variable $n_x \in \{0,1\}$ qui est la présence ou non d'une particule à ce site. Une **configuration (ou micro-état)**

$$n : x \in \Lambda \to n_x \in \{0,1\}$$

est un choix $n_x \in \{0,1\}$ pour chaque point $x \in \Lambda$ du réseau. Soit $\mu \in \mathbb{R}$ donné qui est le potentiel chimique (imposé par un environnement extérieur). On note $x \sim y$ si les sites x, y sont des proches voisins. L'énergie de la configuration n est

$$E_{\text{gaz}}(n) := \sum_{x \sim y} (-n_x n_y) \tag{3.1}$$

où la somme porte sur toutes les paires de sites voisins.

Pour une configuration donnée n, on note $N(n)$ le nombre total de particules,

$$E_{GC}(n) := E_{\text{gaz}}(n) - \mu N(n)$$

l'énergie grand canonique et $\rho(n) := \frac{1}{|\Lambda|} N(n)$ la densité de particules, où $|\Lambda|$ le nombre de sites sur le réseau. D'après la loi de Boltzmann, la probabilité qu'une configuration n apparaissent est

$$p_T(n) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{1}{kT} E_{GC}(n)\right)$$

où T est la température et k la constante de Boltzmann. L'objectif du problème est d'étudier la **densité moyenne**

$$\langle \rho \rangle := \sum_n p_T(n)\, \rho(n)$$

en fonction de la température T et du potentiel chimique μ (i.e. diagramme de phase). Pour cela on va utiliser les résultats connus du modèle d'Ising.

On rappelle que dans le **modèle d'Ising**, sur le même réseau Λ, on note $f_x \in \{-1,+1\}$ l'aimantation au site $x \in \Lambda$, on note

$$f : x \in \Lambda \to f_x \in \{-1,1\}$$

une configuration. L'énergie est

$$E_{\text{Ising}}(f) := \sum_{x \sim y} (-f_x f_y) - B \sum_{x \in \Lambda} f_x$$

où $B \in \mathbb{R}$ est le champ magnétique extérieur. L'aimantation est

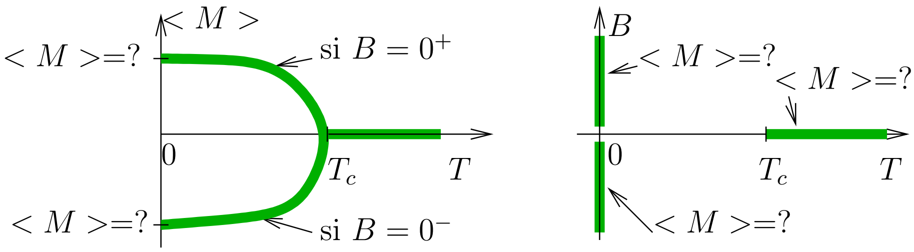
$$M(f) := \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x \in \Lambda} f_x.$$

1. Pour une configuration donnée n, exprimer le nombre total de particules $N(n)$.

   On va montrer que l'on peut faire correspondre le modèle de gaz Lee-Yang au le modèle d'Ising.

2. Une configuration $n : x \in \Lambda \to n_x \in \{0,1\}$ correspond à une configuration $f : x \in \Lambda \to f_x \in \{-1,1\}$. Pour chaque $x \in \Lambda$, exprimer $f_x \in \{-1,1\}$ à partir de $n_x \in \{0,1\}$ par une formule simple ?
3. Avec cette correspondance, on écrit $\frac{1}{kT_{\text{gaz}}} E_{GC}(n) = \frac{1}{kT_{\text{Ising}}} E_{\text{Ising}}(f) + C$ où C est une constante. Exprimer T_{gaz} à partir de T_{Ising} et exprimer μ à partir de B.
4. Exprimer la densité $\rho(n)$ à partir de l'aimantation $M(f)$ et de même pour la densité moyenne $\langle \rho \rangle$ à partir de l'aimantation moyenne $\langle M \rangle$.

On rappelle quelques résultats connus pour le modèle d'Ising dans un réseau bi-dimensionnel carré : Il y a une température de transition de phase $kT_c = \left(\frac{1}{2}\ln\left(1+\sqrt{2}\right)\right)^{-1}$ et un diagramme de phase de la forme suivante (où $B = 0^{\pm}$ signifie $0 < \pm B \ll 1$).



5. Compléter ce diagramme de phase en remplaçant les signes « ? » par des valeurs précises pour le modèle d'Ising.
6. Déduire le diagramme de phase analogue pour le modèle du gaz en remplaçant les axes, les grandeurs et valeurs par ce qu'il faut. Commentez.