Modèle simple de transition gaz-Liquide

① au site $x \in \Lambda$, $n_x \in \{0,1\}$ est le nombre de particule, donc le nombre total de particules est

$$\boxed{N(n) = \sum_{x \in \Lambda} n_x}$$

② En un site donné, $f_x \in \{-1,-1\}$ et $n_x \in \{0,1\}$.

On peut proposer la formule simple :

$$\boxed{f_x = 2n_x - 1}$$

ainsi $\begin{cases} n_x = 0 \Rightarrow f_x = -1 \\ n_x = 1 \Rightarrow f_x = 1 \end{cases}$

③ $f_x = 2n_x - 1 \iff n_x = \frac{1}{2} f_x + \frac{1}{2}$

$$\frac{1}{k T_{gaz}} E_{GC}(n) = \frac{1}{k T_{gaz}} \left(\sum_{x \sim y} (-n_x n_y) - \mu \sum_x n_x \right)$$

$$= \frac{1}{k T_{gaz}} \left(\sum_{x \sim y} - \left(\frac{1}{2} f_x + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} f_y + \frac{1}{2}\right) - \mu \sum_x \left(\frac{1}{2} f_x + \frac{1}{2}\right) \right)$$

$$= \frac{1}{k T_{gaz}} \Bigg(\frac{1}{4} \sum_{x \sim y} - f_x f_y - \frac{1}{4} \underbrace{\sum_{x \sim y} f_x}_{4 \text{ voisins}} - \frac{1}{4} \underbrace{\sum_{x \sim y} f_y}_{4 \text{ voisins}}$$
$$- \underbrace{\sum_{x \sim y} \frac{1}{4}}_{4|\Lambda| \text{ termes}} - \frac{1}{2} \mu \sum_x f_x - \underbrace{\sum_x \frac{1}{2} \mu}_{|\Lambda| \text{ termes}} \Bigg)$$

$$= \frac{1}{k T_{gaz}} \left(\frac{1}{4} \sum_{x \sim y} - f_x f_y - \left(2 + \frac{\mu}{2}\right) \sum_x f_x - \left(4 + \frac{\mu}{2}\right) |\Lambda| \right)$$

$$= \frac{1}{k(4 T_{gaz})} \left(\sum_{x \sim y} - f_x f_y - 4\left(2 + \frac{\mu}{2}\right) \sum_x f_x \right) - \frac{1}{k T_{gaz}} \left(4 + \frac{\mu}{2}\right) |\Lambda|$$

$$= \frac{1}{k_B T_{ising}} E_{ising}(f) + C$$

avec $T_{Ising} = 4\, T_{gaz}$

$$B = 4\left(2 + \frac{\mu}{2}\right) = 8 + 2\mu$$

$$C = -\frac{1}{k_B T_{gaz}} \left(4 + \frac{\mu}{2}\right) |\Lambda|$$

$$\Longleftrightarrow \boxed{\begin{aligned} T_{gaz} &= \frac{1}{4} T_{Ising} \\ \mu &= \frac{B-8}{2} = \frac{1}{2} B - 4 \end{aligned}}$$

④ $$\rho(n) = \frac{1}{|\Lambda|} N(n) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x\in\Lambda} n_x$$

$$= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x\in\Lambda} \left(\frac{1}{2} \sigma_x + \frac{1}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x\in\Lambda} \sigma_x\right) + \frac{1}{|\Lambda|} \underbrace{\left(\sum_{x} \frac{1}{2}\right)}_{\frac{1}{2}|\Lambda|}$$

$$\boxed{\rho(n) = \frac{1}{2} M(\sigma) + \frac{1}{2}}$$

On a $P_{gaz}(n) = \frac{1}{Z_g} e^{-\frac{1}{kT_g} E_{GC}(n)} = \frac{1}{Z_I} e^{-\frac{1}{kT_I} E_I(\sigma)}$

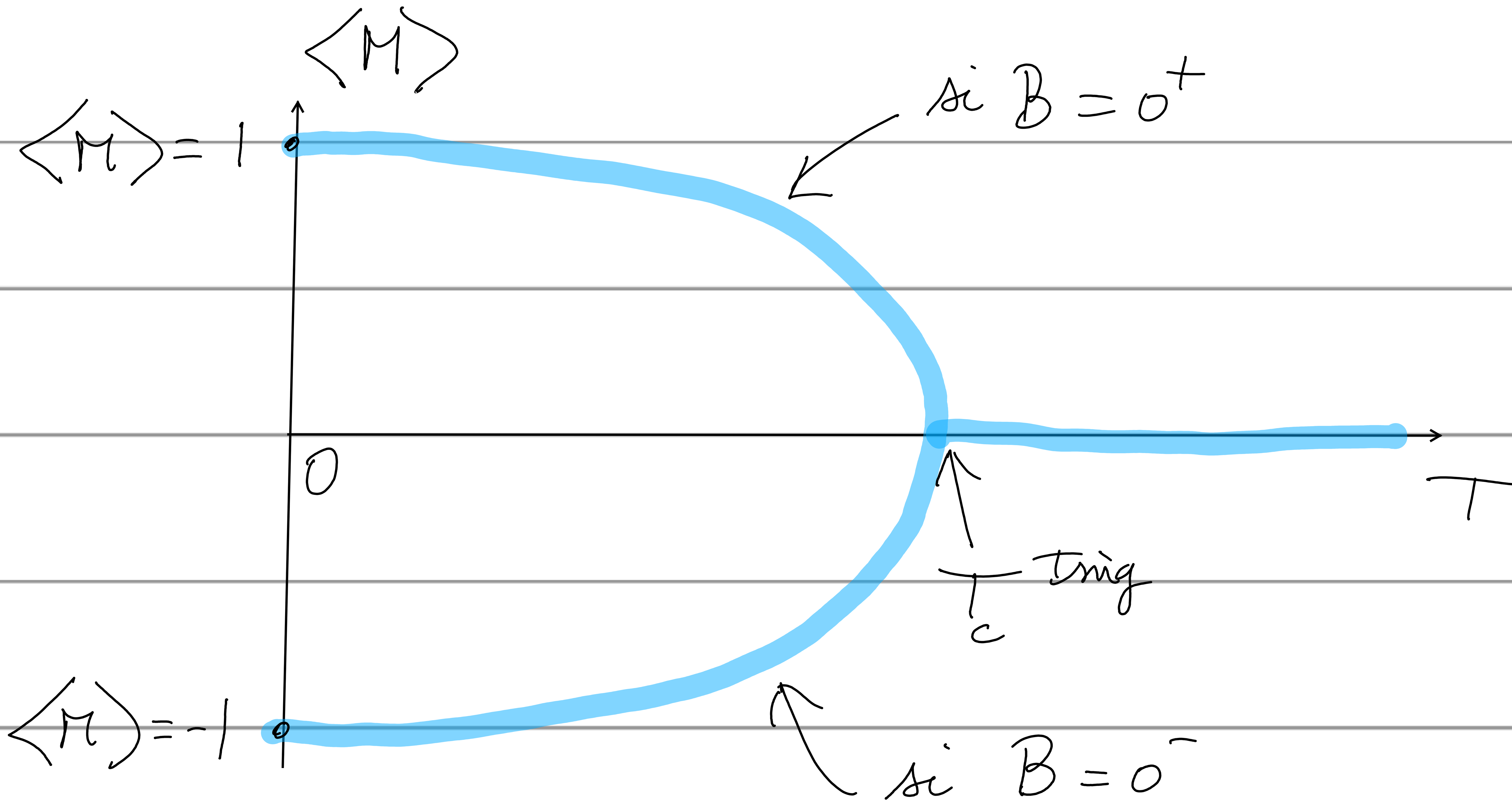
$$= P_{Ising}(\sigma)$$

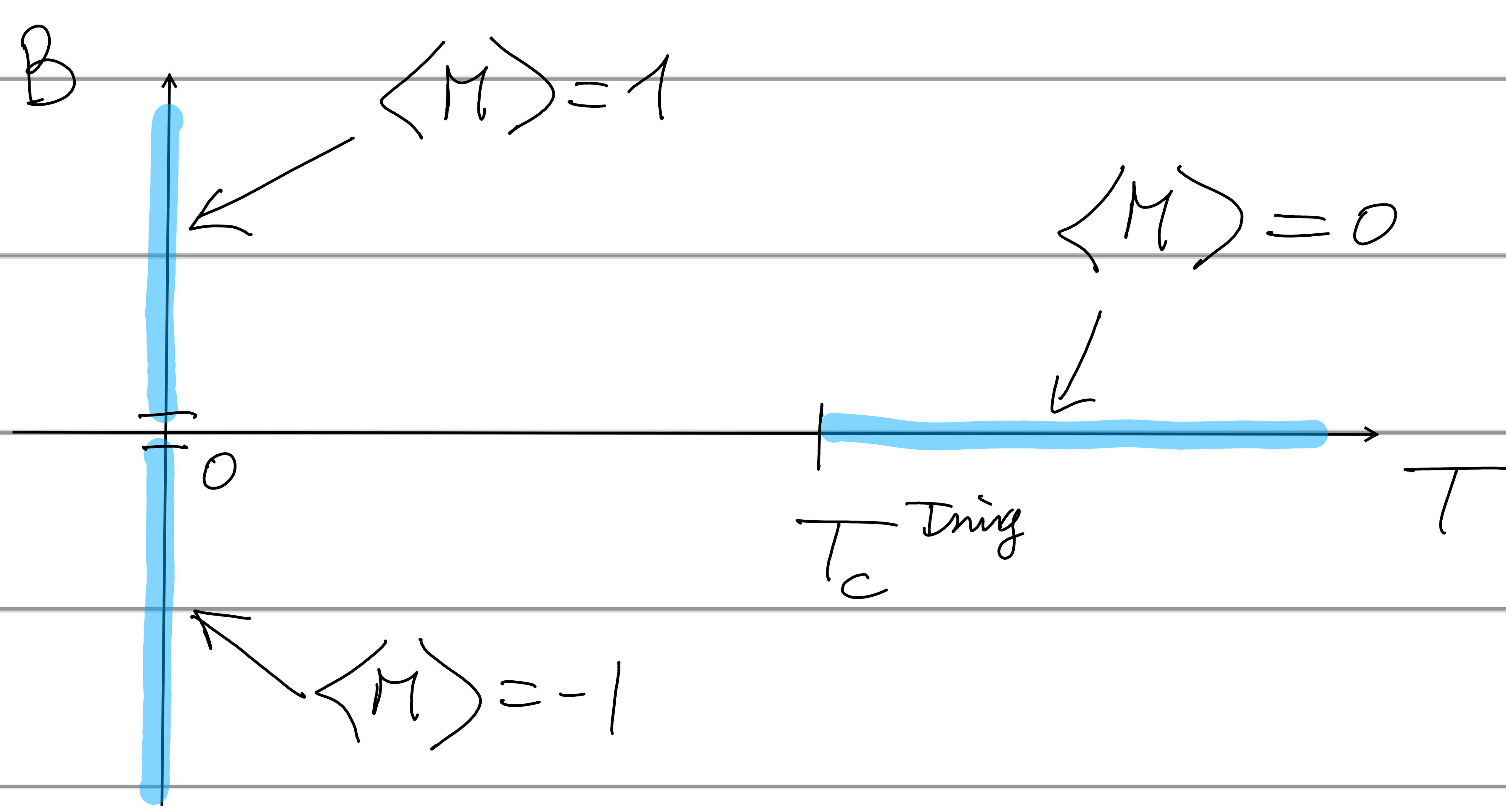
donc

$$\langle \rho \rangle = \sum_n P_{gaz}(n) \rho(n) = \sum_\sigma p_I(\sigma) \left(\frac{1}{2} M(\sigma) + \frac{1}{2}\right)$$

$$\boxed{\langle \rho \rangle = \frac{1}{2} \langle M \rangle + \frac{1}{2}}$$ car $\sum_\sigma p_I(\sigma) = 1$

⑤ Pour le modèle d'Ising (vrai cas)



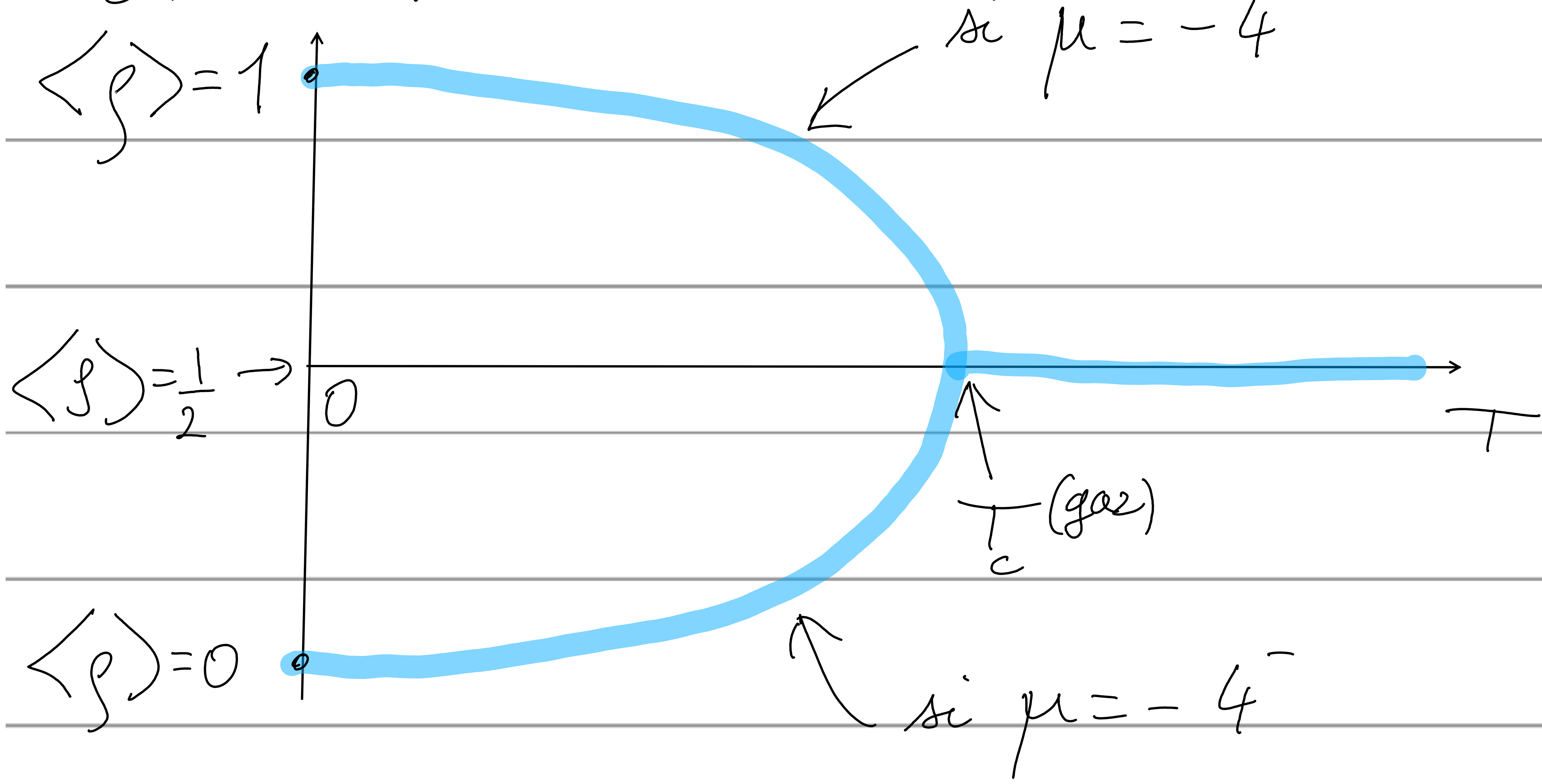


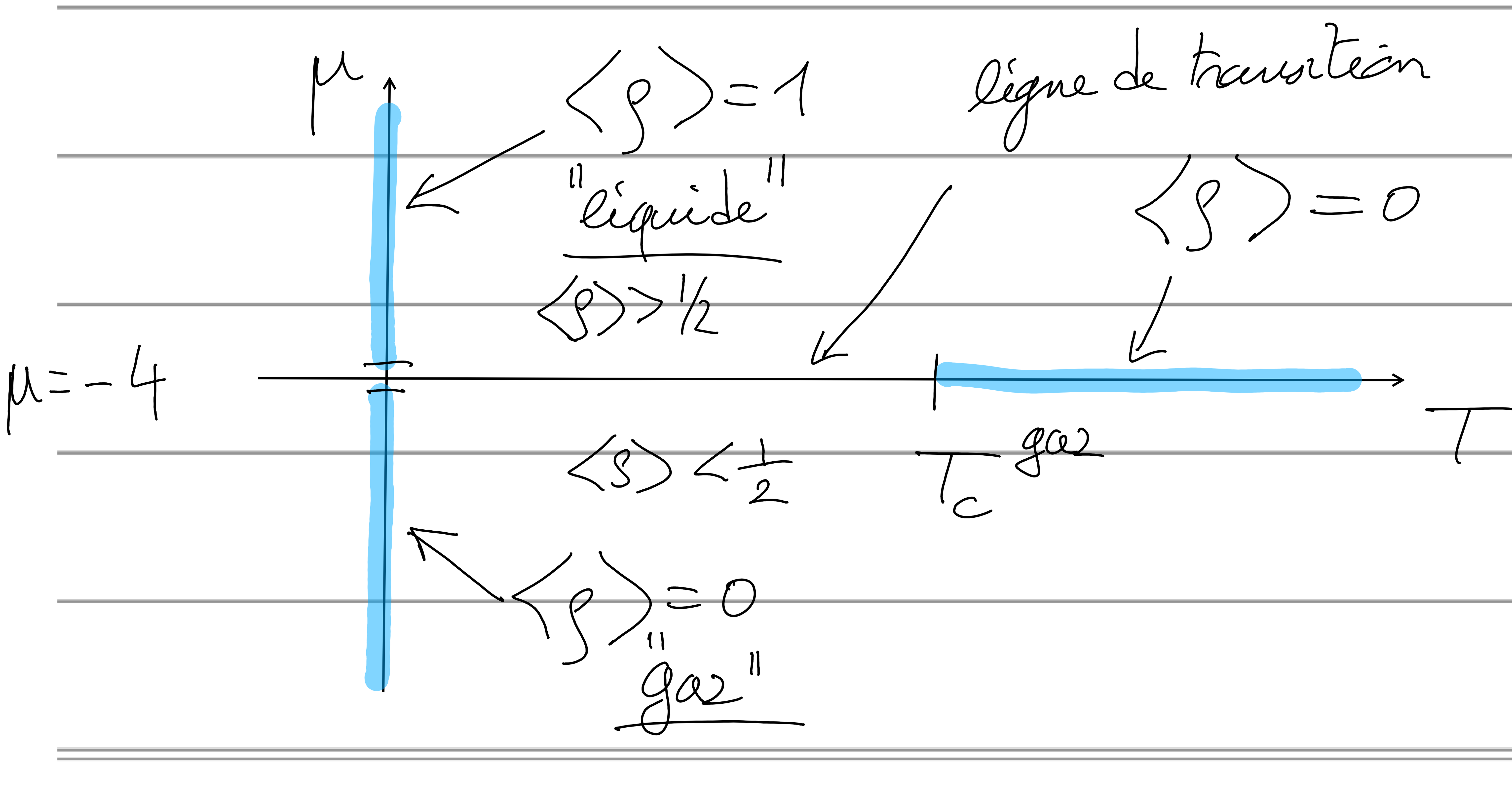
6 Pour le modèle du gaz,

d'après la formule $\mu = \dfrac{B-8}{2}$

et $\langle \rho \rangle = \frac{1}{2}\langle M \rangle + \frac{1}{2} = \begin{cases} 1 \text{ si } \langle M \rangle = 1 \\ 0 \text{ si } \langle M \rangle = -1 \end{cases}$

on déduit :





<u>Remarques</u> : dans ce modèle on observe la <u>densité moyenne</u> $\langle \rho \rangle (T, \mu)$ appelée "paramètre d'ordre".