PA201 - Professeur Pascal Debu
Examen - 20 mars 2024

Durée de l'épreuve : 3 heures.
Aucun document autorisé.
L'évaluation tiendra compte de la rédaction : on prendra soin de bien justifier les réponses.

1 Gaz parfait dans un champ gravitationnel

Un gaz parfait de N particules de masse m est contenu dans un cylindre de section A posé sur le sol et de hauteur considérée comme infinie. Il subit l'attraction gravitationnelle, et on note g l'accélération de la pesanteur supposée constante. Le gaz est à l'équilibre thermique à la température T.

1. Exprimer l'énergie ε_i d'une particule i du gaz.
2. Calculer la fonction de partition Z du système.
3. Calculer l'énergie E du système.
4. Calculer la capacité calorifique C_V à volume constant.
5. Calculer l'entropie S du système.
6. Cette entropie est-elle extensive ?

2 Modèle de Heisenberg

On considère un cristal possédant N sites. Chaque site i est occupé par une particule possédant un spin $\vec{S}_i$, tous les spins ayant le même module S. On rappelle qu'en mécanique quantique, les valeurs possibles de la projection du spin sur un axe sont $-S$, $-S+1$ ... $S-1$, S, soit $2S+1$ valeurs possibles.
L'énergie d'interaction entre les spins i et j est donnée par :

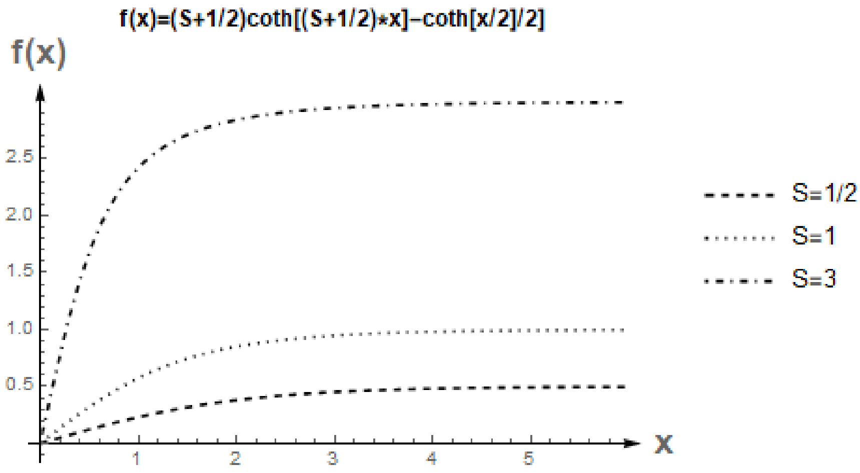
$$-J_{ij}\,\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

On suppose que J_{ij} vaut $2J > 0$ si les sites i et j sont plus proches voisins, et vaut 0 sinon. Chaque site a C plus proches voisins.

1. Que vaut C pour une chaine linéaire d'atomes ? Pour un réseau cubique ? Pour un réseau cubique centré ?

On fait l'approximation du champ moyen, pour laquelle on remplace le spin d'un plus proche voisin par la moyenne des spins du réseau notée $< \vec{S} >$. On définit l'axe Oz comme l'axe dirigé suivant $< \vec{S} >$. Ainsi, par définition $< S^x >=< S^y >= 0$. L'aimantation du système est ainsi donnée par $M = Ng\mu_B < S^z > /V$, où g est le facteur de Landé, μ_B le magnéton de Bohr, et V le volume du système.

2. Exprimer l'énergie H du système dans l'approximation du champ moyen.
3. Calculer la fonction de partition z d'un site. On écrira z sous la forme $\sinh\left[(S+\frac{1}{2})A\right] / \sinh[A/2]$ en explicitant la valeur de A.
4. Calculer la fonction de partition Z du cristal. On justifiera précisément la réponse.
5. En déduire une relation d'autocohérence sur $< S^z >$.
6. Que vaut $< S^z >$ si $T \to 0$? Obtenir le résultat avec deux arguments différents.
7. On pose : $x = CJ < S^z > /kT$. Écrire la relation d'autocohérence sur x et en déduire qu'il existe une température critique et donner sa valeur.
   On donne l'allure des fonctions $\left(S+\frac{1}{2}\right)\coth\left[\left(S+\frac{1}{2}\right)x\right] - \frac{1}{2}\coth[x/2]$:



On admettra en particulier qu'elles ont toutes une concavité tournée vers les y négatifs pour $x \geq 0$ (dérivée positive décroissante).

8. On pose $\varepsilon = 1 - T/T_c$. Donner l'expression de $< S^z >^2$ pour $0 < \varepsilon \ll 1$ au premier ordre en ε, en fonction de S et ε.
   Indication : remarquer que, près de la température critique, x est petit devant 1.
   On donne le développement en puissances de x autour de $x = 0$ de la fonction $\coth x$:
   $\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + o(x^4)$.
9. On suppose à présent $kT \ll CJ < S^z >$. Donner une expression approchée de $< S^z >$.

3 Système à trois états

On considère un système microscopique ayant trois micro-états possibles d'énergies e_1, e_2, e_3, en contact avec un thermostat à la température T. On note P_i la probabilité que le système se trouve dans l'état i, et a_{ji} le taux de transition (probabilité de transition par unité de temps) de l'état i vers l'état j.

1. Écrire les équations de bilan détaillé qui relient les taux de transition et les énergies des différents états
2. Écrire sous forme matricielle les équations d'évolution des probabilités P_i.

On pose :
$a = a_{23} \exp(-e_3/kT)$ $\;b = a_{31} \exp(-e_1/kT)$ $\;c = a_{12} \exp(-e_2/kT)$
On suppose dans un premier temps : $e_1 = e_2 = e_3 = e$. On peut sans perte de généralité prendre $e = 0$.

3. Calculer les valeurs propres de la matrice précédente, qu'on notera M, en fonction de a, b et c. On montrera qu'une des valeurs propres est nulle et que les deux autres sont négatives.
4. Quelles sont les valeurs d'équilibre des probabilités P_i.
5. Quel est le temps de relaxation pour atteindre l'équilibre à partir d'un état hors d'équilibre ?

On reprend à présent le cas général où les énergies sont différentes.

6. Montrer que la nouvelle matrice d'évolution M' a aussi une valeur propre nulle.
   On posera $E_i = \exp(e_i/kt)$ pour alléger l'écriture.
7. Donner, sans calculs, le vecteur propre correspondant.
8. Vérifier que ce vecteur propre est bien un état d'équilibre.
9. Expliquer pourquoi on peut, sans perte de généralité, imposer $E_1 = 1$ et $a = 1$.
10. En posant alors $E_2 = b + x$ et $E_3 = c + y$, on peut montrer par un calcul simple mais fastidieux, et on l'admettra, que les deux valeurs propres non nulles de M' sont réelles et négatives. Pourquoi peut-on s'y attendre ?