

Durée : 3 h.

La qualité de la rédaction sera prise en compte dans la notation : **on justifiera soigneusement les réponses.**

Exercice 1 : Atome d'hydrogène

On considère l'électron de l'atome d'hydrogène, mis en contact avec un thermostat à la température T . Dans le modèle non relativiste et sans prise en compte des effets nucléaires, l'électron peut occuper des orbitales d'énergie $E_n = -\frac{E_0}{n^2}$, chacune $2n^2$ fois dégénérée. La constante E_0 vaut 13,6 eV.

- 1) Pourquoi ne peut-on pas définir la fonction de partition de ce système sans hypothèse supplémentaire ?
- 2) On suppose que l'atome est contraint à occuper un volume fini $V_0 < 10^{-14} \text{ m}^3$, et on rappelle que le rayon de l'atome d'hydrogène excité au niveau n est $n^2 r_0$, où $r_0 = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m}$. Montrer qu'on peut alors définir la fonction de partition. On ne cherchera pas à la calculer.
- 3) Montrer qu'à température ordinaire $T \approx 300 \text{ K}$, la probabilité que l'électron occupe un niveau $n > 1$ est négligeable par rapport à la probabilité qu'il occupe le niveau 1. On donne :

$$k = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K} ; \sum_{i=1}^n i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} .$$

Exercice 2 : Equation d'état d'un fluide

On considère un fluide composé de $N \gg 1$ molécules monoatomiques de masse m en contact avec un thermostat à la température T . Deux molécules à distance r l'une de l'autre sont en interaction suivant l'énergie potentielle $u(r)$ donnée par :

$$r : \quad r < r_0 \quad r_0 \leq r \leq r_1 \quad r_1 < r$$

$$u(r) : \quad +\infty \quad u_0 \ln \frac{r}{r_1} \quad 0$$

où u_0 , r_0 et r_1 sont des constantes positives caractéristiques du fluide.

- 1) Donner, sans la calculer, l'expression de la fonction de partition du système composé de N molécules de ce fluide. Exprimer cette fonction de partition sous la forme du produit de deux intégrales Z_C et Z_U , la première portant sur les impulsions des molécules, l'autre sur leurs positions. On mettra toutes les constantes dans l'intégrale Z_C .
- 2) Calculer Z_C .
- 3) On se place dans l'approximation du champ moyen, et on suppose que les molécules subissent de

$$\text{leurs voisins un potentiel moyen } \bar{u}(\beta) = \frac{\int u(r) \exp(-\beta u(r)) d^3 r}{\int \exp(-\beta u(r)) d^3 r} .$$

$$\text{Exprimer } \bar{u}(\beta) \text{ en fonction de } z_u = \int \exp(-\beta u(r)) d^3 r .$$

- 4) Calculer $z_u(\beta)$ et l'exprimer sous la forme : $z_u = V(1 + \frac{I(\beta)}{V})$ où $I(\beta) \ll V$. z_u est-elle continue et dérivable en $\beta u_0 = 3$?

- 5) En déduire $\bar{u}(\beta)$ au premier ordre en $\frac{1}{V}$ en fonction de $I(\beta)$. On ne cherchera pas à calculer la dérivée de $I(\beta)$.
- 6) Dans l'approximation du champ moyen, justifier, pour un fluide très peu dense, l'expression de l'énergie potentielle des molécules du fluides : $E_p(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \simeq \frac{N^2}{2} \bar{u}(\beta)$.
- 7) Exprimer E_p en fonction de Z_U et la pression P en fonction de l'énergie libre, puis de Z puis de Z_U .
- 8) Montrer que si on fait l'approximation : $E_p(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^N u(\vec{r}_i)$, alors $Z_U(\beta) \rightarrow (V - V_0)^N$ quand $\beta \rightarrow 0$, où V_0 est le volume inaccessible à une molécule compte tenu de la présence des autres et du potentiel d'interaction. On utilisera cette relation pour la suite, et on donnera une valeur approchée de V_0 / N en fonction de r_0 pour ce fluide très peu dense.
- 9) Calculer $Z_U(\beta)$ en fonction de $I(\beta)$. En déduire P au deuxième ordre en $\frac{1}{V}$.
- 10) On se place à présent à haute température : $\beta u_0 \ll 1$. Montrer que l'équation d'état du fluide s'écrit sous la forme :

$$\left[P + \frac{a}{v^2} \right] = \frac{kT}{v - b} \quad \text{où } v \text{ est le volume molaire du fluide.}$$

Donner l'expression de a et b .

Exercice 3 : Ondes de spin

On considère un cristal ferromagnétique de volume V en contact avec un thermostat à la température T plongé dans un champ magnétique $B\vec{u}_z$. Il est modélisé par un hamiltonien d'Ising : $H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \mu B \sum_i \sigma_i$, où J est une constante positive, et $\sigma_i = \pm 1$ donne la direction du spin porté par le site i . Le site i porte alors un moment magnétique Il y a N sites avec $N \gg 1$ et on néglige les effets de bord.

A) Approximation du champ moyen

On suppose dans un premier temps qu'on peut écrire H sous la forme :

$H = -J \sum_i \left(\sum_{j \text{ voisins de } i} m \right) \sigma_i - \mu B \sum_i \sigma_i$, où chaque site a q voisins et où m désigne l'orientation moyenne des spins du cristal.

- 1) Calculer la fonction de partition z d'un spin i et en déduire sa valeur moyenne $\langle \sigma_i \rangle$.
- 2) En déduire une relation d'auto-cohérence sur m .
- 3) On se place en champ magnétique nul. Montrer qu'il existe une température critique T_c que l'on calculera en-dessous de laquelle le système acquiert une aimantation M_0 non nulle, qu'on ne cherchera pas à calculer.

4) On se place à une température $T \ll T_C$. Donner une valeur approchée de $\delta m = 1 - m$ en fonction de $\exp(-T_C / T)$.

B) Ondes de spin

On prend en compte le fait que les spins peuvent prendre une orientation quelconque dans l'espace.

On se place en champ magnétique nul : $H = -J \sum_{i,j} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j$.

A température nulle, tous les spins sont alignés dans une même direction \vec{u}_z . A basse température, les spins oscillent autour de cette direction à cause des fluctuations thermiques. L'énergie du système est alors la somme des énergies de ces oscillateurs supposés harmoniques. Pour chaque site il y a deux oscillateurs

(directions \vec{u}_x et \vec{u}_y). L'énergie de chaque oscillateur s'écrit $\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$, où n est le nombre d'excitations

(ou magnons) et ω la pulsation du mode d'oscillation.

5) Calculer la fonction de partition z_ω d'un mode et en déduire la valeur moyenne ε_ω de son énergie et le nombre moyen n_ω de magnons correspondants.

6) On admet que le nombre de modes entre ω et $\omega + d\omega$ vaut :

$$\rho(\omega)d\omega = K \left(\frac{\hbar}{JM_0} \right)^{3/2} \sqrt{\omega} d\omega \text{ pour } \omega \in [0, \omega_c] \text{ et } 0 \text{ ailleurs, où } K \text{ est une constante et } \omega_c \text{ la fréquence}$$

de coupure liée à la géométrie du réseau. On suppose que $kT \ll \hbar\omega_c$.

Calculer le nombre moyen de magnons N_M .

On rappelle :

$$I_n = \int_0^\infty \frac{x^n}{\exp(x) - 1} dx = \Gamma(n+1) \zeta(n+1) \text{ avec } \Gamma(a) = \int_0^\infty x^{a-1} \exp(-x) dx \text{ et } \zeta(a) = \sum_{i=1}^\infty \frac{1}{i^a} \text{ pour } \operatorname{Re}(a) > 1.$$

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}; \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2,61$$

7) La présence de magnons diminue l'aimantation du cristal, on a :

$$\frac{M}{M_0} \simeq 1 - \frac{N_M}{N} \text{ pour } kT \ll \hbar\omega_c.$$

Donner le comportement de M en fonction de T aux basses températures (loi de Bloch).