Structure et dynamique de particules chargées en interaction

DEA de physique statistique et phénomènes non linéaires
Cours de physique de la matière condensée

Première partie: facteur de structure de particules en interaction

On considère un gaz classique, de densité moyenne ρ, à la température T. Les atomes de ce gaz interagissent deux à deux par un potentiel d'interaction $v(r)$, fonction de leur distance r. On supposera que ce potentiel admet une transformée de Fourier $\hat{v}(k)$, définie par

$$\hat{v}(k) = \int d^3\vec{r} \exp(i\vec{k}.\vec{r}) v(r) \tag{1}$$

On se propose de calculer approximativement le facteur de structure $S(k) = \frac{1}{N} < \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} >$ de ce système, en utilisant la théorie de la réponse linéaire. N est le nombre d'atomes, $\rho_{\vec{k}} = \sum_{p=1}^{N} \exp(i\vec{k}.\vec{r}_p)$ la composante de Fourier $\vec{k}$ de la densité microscopique.

1. On suppose que les atomes sont soumis à un potentiel extérieur faible $U(\vec{r})$. Rappeler la relation de réponse linéaire entre les composantes de Fourier de la densité moyenne $< \rho(\vec{r}) >$ (notées $< \rho(\vec{k}) >$) et celles de $U(\vec{r})$.

2. Lorsque le gaz a une densité non uniforme $< \rho(\vec{r}) >$, il crée au point $\vec{r}$ un potentiel non uniforme. Montrer que la composante de Fourier $U_i(\vec{k})$ de ce potentiel "interne" est reliée à la composante de Fourier $\vec{k}$ de la densité et au potentiel d'interaction par $U_i(\vec{k}) =< \rho(\vec{k}) > \hat{v}(k)$

3. Pour calculer $S(k)$, on supposera que la modulation de densité produite dans le système par le potentiel extérieur est identique à celle que crée dans un système *sans interactions* la superposition du potentiel externe U et du potentiel "interne" calculé à la question précédente. Montrer que cette hypothèse conduit pour $S(k)$ à l'équation

$$\frac{1}{S(k)} = \frac{1}{S_0(k)} + \beta\rho\hat{v}(k) \tag{2}$$

où $S_0(k)$ est le facteur de structure pour un gaz classique sans interactions et $\beta = (k_B T)^{-1}$. Montrer que $S_0(k) = 1$.

4. Utiliser cette relation pour obtenir une équation d'état approximative du gaz de particules en interactions. Discuter le résultat.

5. On veut appliquer ces résultats au cas du potentiel coulombien, $v(r) = e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$. Dans ce cas il est nécessaire de supposer que les particules du gaz, supposées toutes de même charge e, se déplacent dans un fond continu de densité uniforme et constante qui assure l'électroneutralité (modèle du "jellium")

Calculer $S(k)$ en utilisant (1). Montrer que $S(k) \to 0$ quand $|\vec{k}| \to 0$. Interpréter.

NB: On rappelle que si $v(r) = e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$, $\hat{v}(k) = e^2/(\epsilon_0 k^2)$

Deuxième partie: fluctuations de densité dans un système de particules chargées

On veut étudier plus en détail les propriétés de transport du modèle du "jellium" (question I.5.). Ce modèle décrit un fluide de particules chargées classiques, de charge e, de densité ρ_0, dans un fond continu rigide (densité uniforme et constante) de charge opposée, (densité de charge $n_0 = -e\rho_0$), dont le seul rôle est d'assurer l'électroneutralité du système. La température est T, le volume du système et le nombre de particules seront notés V et N respectivement.

1. On néglige d'abord les interactions entre particules chargées. Soit D leur coefficient de diffusion. Montrer que la conductivité σ du système est donnée par la formule de Nernst-Einstein,

$$\sigma = \frac{e^2 \rho_0 D}{k_B T} \tag{3}$$

2. Pour tenir compte des interactions électrostatiques entre particules, on écrit la relation phénoménologique qui donne le courant de particules $\vec{j}(\vec{r})$ en présence d'une force extérieure $\vec{F}(\vec{r})$ et d'un gradient de densité sous la forme

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{D}{k_B T}\left(\rho \vec{F}(\vec{r}) + \rho e \vec{E}_{int}(\vec{r}) - k_B T \vec{\nabla}\rho(\vec{r})\right) \tag{4}$$

où $\rho(\vec{r})$ est la densité de particules au point $\vec{r}$, $\vec{E}_{int}(\vec{r})$ est le champ électrique créé par les particules chargées et le fond continu au point $\vec{r}$. Ce champ électrique vérifie l'équation de Poisson, $\vec{\nabla}.\vec{E} = \rho_q(\vec{r})/\epsilon_0$, où $\rho_q(\vec{r})$ est la densité de charge au point $\vec{r}$.

Ecrire l'équation implicite qui donne la densité de particules *à l'équilibre* $\rho(\vec{r})$, en présence d'une force extérieure $\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} U(\vec{r})$.

3. Dans le cas de potentiels extérieurs $U(\vec{r})$ faibles, on peut linéariser cette équation. Montrer que la composante de Fourier $\rho(\vec{k})$ de la densité est alors proportionnelle à la composante de Fourier $U(\vec{k})$ du potentiel. Calculer le coefficient de proportionnalité, et en déduire le facteur de structure du fluide de particules chargées. On pourra vérifier qu'on retrouve ainsi le résultat de la question I.5.

On introduira la notation $\kappa^2 = (\rho_0 e^2)/(\epsilon_0 k_B T)$.

4. On veut maintenant étudier la dynamique des fluctuations de densité dans le système. En utilisant l'hypothèse d'Onsager, montrer que la fonction de corrélation d'équilibre $F(k,t) = \frac{1}{N} < \rho(\vec{k},t)\rho(-\vec{k},0) >$ a une décroissance exponentielle, avec un temps de relaxation $\tau(k)$ que l'on calculera.

5. Comparer le résultat au résultat pour des particules sans interactions. Pourquoi, dans le cas des particules chargées, $1/\tau(k)$ ne tend il pas vers 0 quand $k \to 0$?

6. Généraliser le calcul des questions 2,3,4 au cas plus général de la partie I (particules interagissant par un potentiel qui admet une transformée de Fourier $\hat{v}(k)$. Quelle est la condition sur $\hat{v}(k)$ pour que le taux de relaxation $\tau(k)^{-1}$ tende vers 0 quand $k \to 0$?