



HAL
open science

Signaux de transitions de phase des systèmes finis

Véronique Duflot-Flandrois

► **To cite this version:**

Véronique Duflot-Flandrois. Signaux de transitions de phase des systèmes finis. Physique Nucléaire Théorique [nucl-th]. Université de Caen, 2001. Français. NNT : . tel-00708230

HAL Id: tel-00708230

<https://theses.hal.science/tel-00708230>

Submitted on 14 Jun 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université de Caen / Basse-Normandie

U. F. R. Sciences

Ecole doctorale SIMEM

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 10 décembre 2001

par

Véronique DUFLOT-FLANDROIS

pour l'obtention du

Doctorat de l'université de Caen

Spécialité : Constituants élémentaires
(Arrêté du 30 mars 1992)

Sujet :

Signaux de transitions de phase des systèmes finis

sous la direction de Ph. Chomaz

Composition du jury

- Rapporteurs :* J. Richert, université de Strasbourg
B. Borderie, I.P.N. Orsay
- Président :* O. Navillat, université de Caen
- Examineurs :* M. D'Agostino, université de Bologne
R. Balian, SphT Saclay
Ph. Chomaz, G.A.N.I.L.
F. Gulminelli, université de Caen
P. Labastie, université de Toulouse III

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 10 décembre 2001

par

Véronique DUFLOT-FLANDROIS

pour l'obtention du

Doctorat de l'université de Caen

Spécialité : Constituants élémentaires
(Arrêté du 30 mars 1992)

Sujet :

Signaux de transitions de phase des systèmes finis

sous la direction de Ph. Chomaz

Composition du jury

- Rapporteurs :* J. Richert, université de Strasbourg
B. Borderie, I.P.N. Orsay
- Président :* O. Navillat, université de Caen
- Examineurs :* M. D'Agostino, université de Bologne
R. Balian, Spht Saclay
Ph. Chomaz, G.A.N.I.L.
F. Gulminelli, université de Caen
P. Labastie, université de Toulouse III

Table des matières

| | |
|--|-----------|
| Introduction | 1 |
| 1 Transition de phase dans les noyaux | 5 |
| 1.1 Transition de phase du premier ordre dans les systèmes infinis | 5 |
| 1.2 Systèmes finis | 7 |
| 1.2.1 Choix de l'ensemble statistique | 7 |
| 1.2.2 Influence des interfaces | 8 |
| 1.3 Fluctuations d'énergie partielle | 9 |
| 1.3.1 Température | 10 |
| 1.3.2 Capacité calorifique et fluctuations d'énergie cinétique | 10 |
| 1.3.3 Comparaison avec l'ensemble canonique | 12 |
| 1.3.4 Conclusion | 13 |
| 1.4 Application dans le cadre de la mécanique statistique | 13 |
| 1.4.1 L'équilibre thermodynamique | 15 |
| 1.4.2 Le volume moyen comme observable | 17 |
| 2 Modèle de gaz sur réseau | 19 |
| 2.1 Présentation du modèle | 19 |
| 2.2 Réalisation numérique du modèle | 20 |
| 2.3 Champ moyen et calcul exact | 23 |
| 2.4 Ensembles isobare et isochore | 28 |
| 3 Signaux de transition de phase dans le modèle de gaz sur réseau | 31 |
| 3.1 Générer un ensemble microcanonique | 31 |
| 3.1.1 Relation entre les ensembles canonique et microcanonique | 32 |
| 3.1.2 Mise en œuvre numérique | 32 |
| 3.2 Tri en enthalpie | 33 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.2.1 | Application numérique de la méthode | 34 |
| 3.2.2 | Illustration | 34 |
| 3.2.3 | Energies partielles | 36 |
| 3.2.4 | Valeur moyenne et valeur la plus probable de l'enthalpie des distributions canoniques | 39 |
| 3.3 | Tri en énergie | 40 |
| 3.3.1 | Courbe calorique et fluctuations d'énergie cinétique | 41 |
| 3.3.2 | Entropie microcanonique | 41 |
| 3.3.3 | Rôle du volume | 44 |
| 3.4 | Ensembles et transformations | 45 |
| 3.5 | Effets de taille finie | 49 |
| 3.6 | Volume constant | 50 |
| 3.7 | Zone de coexistence | 50 |
| 3.7.1 | Détermination de la zone de coexistence | 52 |
| 3.7.2 | Résultats | 53 |
| 3.8 | Conclusion | 54 |
| 4 | Généralisation de la définition des transitions de phase | 57 |
| 4.1 | Anomalies dans l'ensemble grand-canonique | 57 |
| 4.1.1 | Distribution en volume | 58 |
| 4.1.2 | Ensembles non extensifs | 59 |
| 4.2 | La limite thermodynamique | 61 |
| 4.2.1 | Courbe calorique | 61 |
| 4.2.2 | Zéros de la fonction de partition | 62 |
| 5 | Analyse des fragments | 65 |
| 5.1 | Caractéristiques principales des transitions de phase du deuxième ordre . . | 65 |
| 5.2 | Lois d'échelle dans la distribution des fragments | 66 |
| 5.3 | Application au modèle du gaz sur réseau | 67 |
| 5.3.1 | Algorithme Coniglio-Klein | 67 |
| 5.3.2 | Volume | 69 |
| 5.4 | Méthode de détermination des exposants critiques | 71 |
| 5.4.1 | Distributions en masse | 71 |
| 5.4.2 | Détermination de τ | 72 |
| 5.4.3 | Détermination de la température critique | 73 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 5.4.4 | Détermination de σ | 75 |
| 5.4.5 | Fonction d'échelle | 75 |
| 5.4.6 | Méthode du χ^2 | 76 |
| 5.5 | Influence de la taille et du volume | 78 |
| 5.5.1 | Taille de la source | 78 |
| 5.5.2 | Volume | 79 |
| 5.5.3 | Conclusions | 81 |
| 5.6 | Choix de la grandeur fixée | 82 |
| 5.7 | Choix de l'ensemble statistique: l'ensemble microcanonique | 83 |
| 5.7.1 | Générer des partitions microcanoniques | 83 |
| 5.7.2 | Distributions en masses microcanoniques | 83 |
| 5.8 | Conclusions | 85 |
| 6 | Effets coulombiens | 87 |
| 6.1 | Implémentation dans le modèle du gaz sur réseau | 87 |
| 6.1.1 | Hamiltonien | 88 |
| 6.1.2 | Vérifications numériques | 88 |
| 6.2 | Mesure de la taille du système | 89 |
| 6.3 | Courbes caloriques | 90 |
| 6.3.1 | Système de $A = 40$ particules | 91 |
| 6.3.2 | Contribution coulombienne à la courbe calorique | 91 |
| 6.3.3 | Influence de la charge | 93 |
| 6.4 | Distributions des événements | 95 |
| 6.4.1 | Corrélations énergie potentielle-énergie coulombienne | 95 |
| 6.4.2 | Paramètre d'ordre | 96 |
| 6.4.3 | Ensemble multicanonique | 98 |
| 7 | Perspectives | 103 |
| 7.1 | Fragments en présence d'une force à longue portée | 103 |
| 7.1.1 | Algorithme | 103 |
| 7.1.2 | Propriétés énergétiques des fragments | 107 |
| 7.2 | Introduction des effets quantiques | 108 |
| 7.2.1 | Représentation des fonctions d'onde sur la base des états cohérents | 109 |
| 7.2.2 | L'opérateur statistique | 111 |
| 7.2.3 | Tri microcanonique | 112 |

| | |
|----------------------|------------|
| 8 Conclusions | 115 |
| Bibliographie | 117 |

Introduction

Cette thèse se propose d'étudier, à l'aide du modèle du gaz sur réseau, quelques unes des caractéristiques des transitions de phase dans les systèmes finis, afin de proposer des observables pertinentes pour la mise en évidence d'une éventuelle transition de phase de type liquide gaz dans la multifragmentation nucléaire. Les transitions de phase sont des phénomènes communs à tous les systèmes complexes en interaction. Elles sont universelles et leurs caractéristiques ne dépendent que de la classe d'universalité des systèmes étudiés. Différents types de transition de phase peuvent être considérés : thermodynamiques [1] ou percolatives [2] par exemple ; elles peuvent être également vues comme un changement des propriétés de symétrie du système [3]. Nous concentrerons notre étude sur les transitions de phase thermodynamiques. Celles-ci dépendent de l'hamiltonien d'interaction entre les éléments constitutifs du système, en particulier lorsque l'interaction est attractive à moyenne portée et répulsive à plus courte portée : le potentiel de Lennard Jones en est un exemple typique. Les systèmes interagissant par une telle interaction (systèmes de Van der Waals) subissent une transition de phase du premier et deuxième ordre qui appartiennent à la classe d'universalité connue sous le nom de liquide gaz.

Toute transition de phase thermodynamique est caractérisée par le potentiel thermodynamique correspondant au choix de l'ensemble statistique : il est défini comme la variable minimale à l'équilibre ; par exemple l'énergie libre est minimale dans l'ensemble canonique. La discontinuité de la dérivée n ième du potentiel définit la transition du n ième ordre. Nous nous limiterons principalement à l'étude des transitions thermodynamiques du premier ordre. Dans ce cas, pour une transition de type liquide gaz, le paramètre d'ordre est défini par la différence des densités liquide et gaz. La discontinuité des potentiels thermodynamiques peut être reliée au passage par zéro de la fonction de partition canonique dans le cadre de la théorie développée par Lee et Yang [1].

Lors d'une transition du premier ordre liquide gaz, le passage de la phase liquide à la phase gazeuse passe par une zone de coexistence de phases. Dans le cadre des théories de champ moyen (comme par exemple la théorie de Van der Waals) la coexistence de phases est différenciée par l'instabilité du système homogène par rapport à une séparation en deux phases. En effet, le potentiel thermodynamique calculé à partir de la fonction de partition devient convexe dans la région de la transition de phase. Une interpolation linéaire dans cette région minimise la valeur du potentiel thermodynamique et donc correspond à la véritable configuration d'équilibre. Cette interpolation linéaire est connue sous le nom de construction de Maxwell. D'un point de vue physique, elle consiste à mélanger en proportions linéaires les deux types de configurations homogènes (phases) accessibles à l'approximation de champ moyen. D'un point de vue mathématique elle implique que

le potentiel thermodynamique présente des non-analyticités dans les transitions de phase du premier ordre. Un exemple bien connu est la prédiction pour la transition de phase liquide-gaz d'un plateau de température constante en fonction de l'énergie dans la zone de coexistence si la transition est faite à pression constante.

Le nombre fini de constituants d'un petit système ne nous permet pas d'appliquer directement la thermodynamique que nous venons de présenter. En effet, il induit des contributions importantes, notamment en énergie, de la surface. Par conséquent l'énergie libre d'une combinaison linéaire de deux phases ne sera pas la combinaison linéaire des énergies libres, ce qui signifie que l'introduction d'une phase mixte ne conduit pas à la construction de Maxwell dans un système fini. De plus, le calcul de la fonction de partition [4] aboutit à une somme de fonctions analytiques: on s'attend à ce qu'aucune discontinuité ne nous permette de signer une transition. Ceci n'implique pas que le concept de transition de phase ne puisse pas s'appliquer aux systèmes finis. Une définition rigoureuse de transition de phase a été introduite dans la littérature et concerne la thermodynamique ainsi que les propriétés des agrégats issus de la fragmentation des systèmes finis. Il a été démontré que pour un système fini, tout défaut de courbure dans le potentiel thermodynamique en fonction de la variable extensive associée, signe la transition de phase. Ceci amène naturellement à considérer l'existence de capacités calorifiques négatives [5] [6].

D'autre part le groupe de renormalisation [2] [7] prédit des lois d'échelle bien définies aux alentours du point critique, avec des comportements en loi de puissance caractérisées par des exposants critiques qui ne dépendent que de la classe d'universalité. Par exemple, la distribution en taille des fragments devrait être une loi de puissance d'exposant τ au point critique pour les systèmes infinis. La transition de phase du deuxième ordre est reconnue dans le système fini en étudiant l'évolution des exposants critiques avec la taille du système ("finite size scaling"). Les effets de taille finie aboutissent à une observation de ce comportement aussi en transition de phase du premier ordre, *i.e.* à l'intérieur de la zone de coexistence. Dans ce dernier cas le comportement "pseudocritique" disparaît vers la limite thermodynamique.

D'un point de vue expérimental, les transitions de phase sont recherchées en physique nucléaire depuis une vingtaine d'années [8] dans la multifragmentation des noyaux chauds induits par collisions [9] [10]. Cet effort doit être mis en parallèle avec la physique des agrégats d'atomes, où des observables analogues sont mesurées [11] [12]. Dans le premier chapitre de cette thèse nous introduirons un formalisme statistique qui permet de décrire de tels systèmes ouverts et nous illustrerons ce formalisme dans le cadre du modèle du gaz sur réseau dans les chapitres 2 et 3. Nous proposerons les fluctuations d'énergies partielles comme observable directement mesurable de capacité calorifique négative. Nous proposerons une généralisation de la définition des transitions de phase dans les systèmes finis dans le chapitre 4. Cependant la mesure directe [9] de grandeurs thermodynamiques est demandée une détection quasi-parfaite et une sélection des données très perfectionnée. Ainsi les fragments issus de la multifragmentation sont-ils la principale observable, dont le comportement (en multiplicités, en distributions en taille) est relié à l'occurrence d'une transition de phase à travers plusieurs approches théoriques [5] [13] [14] [15] [16] [17] [18] [19] [20] [21] [22] [23] [24] [25]. Dans le chapitre 5 nous chercherons à corrélérer la thermodynamique et les informations issues des fragments.

Afin de considérer une description la plus réaliste possible dans un système nucléaire,

nous considérerons les effets coulombiens (chapitre 6). Enfin, nous aborderons l'inclusion de la nature fermionique des nucléons, qui se traduit par des effets d'isospin et quantiques. Ces points seront abordés en partie dans les perspectives du chapitre 7.

Chapitre 1

Transition de phase dans les noyaux

La forme du potentiel nucléaire, attractif à longue portée et fortement répulsif à courte portée, ressemble à un potentiel intermoléculaire de Van der Waals. Cette analogie laisse supposer que la matière nucléaire infinie a le même comportement qu'un fluide de Van der Waals, présentant une transition de phase de type liquide-gaz. A température nulle, le noyau a en outre des propriétés proches de celles d'une goutte liquide: la formule de Bethe-Weizsäcker en est un exemple. Lors de collisions nucléaires où il est fortement chauffé, ce liquide peut traverser des zones de température, de pression et de volume qui le conduisent vers une transition de phase liquide-gaz.

De façon générale, une transition de phase est caractérisée dans les systèmes infinis par :

- un paramètre d'ordre, qui caractérise chaque phase. Par exemple, pour une transition liquide-gaz, il est donné par la différence des densités liquide et gaz ;
- la discontinuité de la dérivée d'ordre n du potentiel thermodynamique par rapport à l'une (ou plusieurs) de ces variables indique une transition de phase d'ordre n .

1.1 Transition de phase du premier ordre dans les systèmes infinis

Nous nous intéressons ici particulièrement aux transitions du premier ordre: le paramètre d'ordre est discontinu, ainsi que la dérivée première du potentiel thermodynamique. Ses dérivées premières sont les équations d'état, reliant les variables extensives aux variables intensives. Si la température est le seul paramètre intensif, une transition du premier ordre correspond à une discontinuité de l'énergie en fonction de la température. Ceci implique de se placer dans l'ensemble canonique, puisque l'on suppose le contrôle des paramètres extensifs comme le montre la figure (1.1).

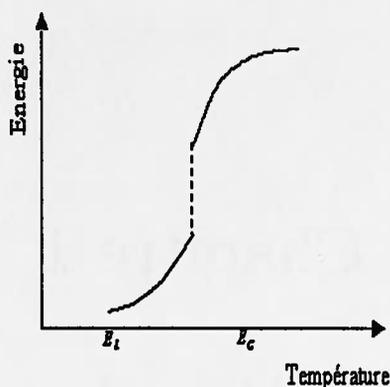


FIG. 1.1 – Lorsque la température est fixée, la courbe calorique est discontinue entre deux valeurs de l'énergie lorsque l'on traverse la zone de coexistence.

Plaçons-nous maintenant dans l'ensemble microcanonique à l'énergie E ; nous focaliserons notre intérêt sur cet ensemble par la suite. Vu que la température T et l'entropie sont reliées par :

$$T^{-1} = \frac{\partial S}{\partial E} \quad (1.1)$$

si l'on choisit l'ensemble associé aux variables intensives, dans le cas d'un système fini, la divergence des dérivées de la fonction de partition qui conduit aux discontinuités dans les variables thermodynamiques ne peut pas se présenter, la fonction de partition étant une somme analytique sur un nombre fini de termes. La discontinuité de l'ensemble canonique est devenue une température constante dans toute la zone de transition. La construction de Maxwell correspond à une telle transition. A pression constante, la température présente un plateau quand l'énergie augmente. En conséquence, l'entropie S a un comportement linéaire en fonction de l'énergie entre les énergies E_L du liquide et E_G du gaz, comme le montre la figure (1.2). La chaleur latente est $E_G - E_L$.

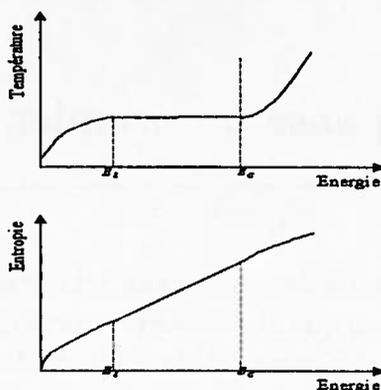


FIG. 1.2 – L'entropie est une fonction linéaire entre l'énergie du liquide E_L et du gaz E_G .

La linéarité de l'entropie en fonction de l'énergie provient de son additivité qui s'écrit :

$$S(E) = \alpha(E)S_L(E_L) + (1 - \alpha(E))S_G(E_G)$$

avec $E = \alpha(E)E_L + (1 - \alpha(E))E_G$ et où S_L (S_G) est l'entropie de la phase pure liquide (gaz). En mélangeant de façon linéaire des proportions linéaires α de liquide L et $(1 - \alpha)$ de gaz G , l'entropie augmente linéairement entre E_L et E_G . Ceci montre qu'une transition du premier ordre correspond à une coexistence de phases.

Le comportement des dérivées de l'entropie d'ordre supérieur signalent également la transition et, par exemple, à l'ordre 2, on obtient la capacité calorifique, qui est discontinue et diverge entre E_L et E_G car :

$$C^{-1} = -\frac{1}{T^2} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \right) \quad (1.2)$$

Nous avons rappelé la définition des transitions de phase des systèmes infinis, à travers l'entropie, la température et la capacité calorifique. Nous allons évaluer les effets de taille finie sur ces grandeurs.

1.2 Systèmes finis

1.2.1 Choix de l'ensemble statistique

L'étude des systèmes infinis repose sur le calcul de valeurs moyennes d'observables dont les fluctuations statistiques relatives sont négligeables. En effet celles-ci se comportent comme $1/\sqrt{N}$ en notant N le nombre total de particules. N étant de l'ordre du nombre d'Avogadro pour les systèmes macroscopiques, cette hypothèse est en général tout à fait justifiée.

Considérons maintenant des systèmes constitués d'une centaine de particules : la distribution d'énergie canonique ne peut plus se ramener à une Dirac $\delta(\langle E \rangle)$ comme dans l'ensemble microcanonique. Ainsi les fluctuations statistiques aboutissent, dans un système fini, à la non-équivalence des ensembles statistiques. Il est donc nécessaire de choisir un ensemble particulier, selon la pertinence des informations qu'il permet d'extraire.

Du point de vue de la phénoménologie nucléaire, il est donc nécessaire de définir un signal de transition de phase, si elle existe, dans un système fini, et ce dans le cadre d'un ensemble statistique particulier, où au moins une variable thermodynamique est extensive. Dans le cas de la transition liquide-gaz, les ensembles canonique et grand-canonique [14] permettent de définir comme signaux de transitions de phase une anomalie de la thermodynamique : dans les deux ensembles, ils sont associés à une compressibilité (dérivée de la pression par rapport au volume) négative, et à une dérivée négative du potentiel chimique par rapport au nombre de particules dans l'ensemble canonique. La pertinence d'un ensemble microcanonique a été également mise en évidence depuis plusieurs années [29] à travers une capacité calorifique négative [30]. Le choix de cet ensemble est principalement basé sur des considérations d'énergie de surface du système et sur le fait que l'énergie est un paramètre d'ordre.

1.2.2 Influence des interfaces

Dans le système infini (à la limite thermodynamique) l'énergie de surface n'est jamais considérée, car elle est négligeable par rapport aux termes de volume. L'énergie est donc une grandeur additive.

En revanche, un nombre fini de constituants induit un rôle relatif important aux surfaces dont nous allons évaluer les conséquences sur les grandeurs thermodynamiques dans l'ensemble microcanonique. Pour cela, nous étudions la densité d'états microcanonique W , qui est reliée à l'entropie par :

$$S = \ln W$$

Si l'on répartit les états en deux catégories, l'une de type liquide et l'autre de type gaz, nous notons W_L le nombre d'états de type liquide et W_G celui du gaz. Nous pouvons classer les événements selon leur configuration : par exemple, les événements avec un gros fragment et quelques monomères, ou les événements ayant des fragments de petite taille. A la limite thermodynamique, ces deux catégories choisies en exemples pourront être identifiées respectivement comme le liquide et le gaz.

Le gaz apparaît après une énergie seuil comme le montre la figure (1.3). La densité d'états W_G croît en général plus vite que W_L car elle correspond à une phase plus désordonnée. Si l'ouverture de seuil se fait de façon brutale, *i.e.* si la croissance relative de W_G par rapport à W_L est suffisamment forte, le logarithme de la densité d'états totale $W = W_L + W_G$ peut présenter une région convexe. La conséquence directe de la présence d'une région convexe de S est une inversion de pente dans la courbe calorifique d'après la relation 1.1 et, de façon équivalente, une capacité calorifique négative 1.2. Dans la suite, nous allons définir des observables qui donnent directement accès à la capacité calorifique. Ceci est complètement différent d'une approche purement canonique à chaque température canonique β^{-1} correspond une seule énergie moyenne, ce qui signifie que la courbe calorifique canonique est par construction monotone et ne peut présenter une inversion de pente. En effet, dans l'ensemble microcanonique, la convexité dans l'entropie ne peut être supprimée par une construction de Maxwell car dans un système fini l'interface entre les deux phases ne peut être négligée. Tout mélange α de liquide E_L et $(1 - \alpha)$ de gaz E_G aboutit à l'énergie $\alpha E'_L + (1 - \alpha) E'_G$. L'énergie du liquide est $E'_L > E_L$ du fait de l'énergie de surface : les partitions du système fini appartenant à la zone de coexistence sont décalées vers les énergies supérieures [29] [31].

A la limite thermodynamique, les surfaces étant négligeables par rapport au volume, le défaut de concavité dans l'entropie microcanonique disparaît et les ensembles deviennent équivalents. On pourrait penser que dans la région de coexistence les différentes configurations obtenues en considérant l'emplacement relatif des deux phases donnent une contribution positive à l'entropie, qui pourrait compenser l'effet de suppression dû à l'énergie de surface, et ainsi combler le défaut de concavité. Toutefois la positivité de la tension superficielle implique que l'énergie libre $F = \langle E \rangle - TS$ est une fonction décroissante de la taille, c'est-à-dire que le gain entropique dû à une surface accrue ne compense pas la perte énergétique : en diminuant la taille du système de ΔA , pour une énergie microcanonique déterminée, le nombre de configurations diminue d'un facteur

$$\frac{\Delta W}{W} = \frac{\Delta F}{F}$$

ce qui signifie que l'entropie du système fini se situe au-dessous de la construction de Maxwell.

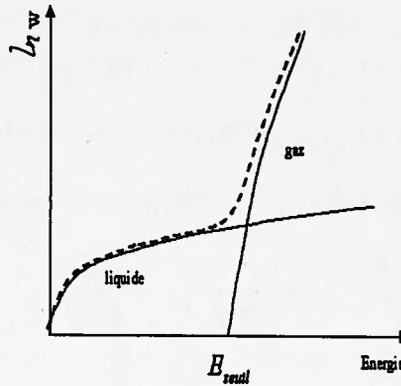


FIG. 1.3 - L'entropie du liquide croît avec l'énergie. Après une énergie seuil E_{seuil} , la densité d'états de la deuxième phase croît plus vite que celle du liquide. L'entropie totale $\ln W = \ln(W_L + W_G)$ est représentée en pointillés.

1.3 Fluctuations d'énergie partielle

Si l'on se place dans l'ensemble microcanonique, nous pouvons proposer une observable accessible expérimentalement qui correspond au signal de capacité calorifique négative : des fluctuations "anormales" d'énergie cinétique [30]. Afin de les extraire, nous partitionnons l'énergie en énergie cinétique E_1 et potentielle E_2 . Elles sont contraintes par la conservation de l'énergie totale $E = E_1 + E_2$ si l'espace des positions \vec{r} est indépendant de celui des impulsions \vec{p} i.e. pour un système classique dans lequel les interactions ne dépendent pas de l'impulsion [30]. Dans ce cas la densité d'états totale s'écrit :

$$W(E) = e^{S(E)} = \int_0^E W_1(E_1)W_2(E - E_1)dE_1 \quad (1.3)$$

Afin d'extraire les fluctuations d'énergie cinétique nous pouvons écrire la distribution d'énergie cinétique pour une énergie totale donnée E :

$$P_E(E_1) = \frac{W_1(E_1)W_2(E - E_1)}{W(E)} \quad (1.4)$$

et nous allons étudier les moments d'ordre 1 et 2 de cette distribution.

1.3.1 Température

La température est calculée à partir de la dérivée première de $P_E(E_1)$. Elle est représentée schématiquement sur la figure (1.4.). Il existe des cas modèles [32] pour des systèmes interagissant avec des forces à longue portée dans lesquels la distribution d'énergie cinétique peut devenir bimodale (ce qui implique que l'énergie cinétique joue le rôle d'un paramètre d'ordre, voir chapitre 4). Toutefois, pour les interactions à courte portée les distributions d'énergie cinétique sont en général normales [33] et tendent vers une gaussienne à la limite des grands systèmes à cause du théorème central limite.

Réécrivons l'équation 1.4 en fonction des entropies partielles :

$$P_E(E_1) = e^{S_1(E_1) + S_2(E - E_1) - S(E)}$$

La dérivée de $P_E(E_1)$, ou de $\ln P_E(E_1)$ s'annule pour l'énergie E_1 la plus probable, \bar{E}_1 :

$$\frac{\partial \ln P_E(E_1)}{\partial E_1} \Big|_{E_1} = \frac{\partial S_1}{\partial E_1} \Big|_{E_1} - \frac{\partial S_2}{\partial E_1} \Big|_{E - E_1} = 0$$

ce qui nous permet d'écrire :

$$T_1(\bar{E}_1) = T_2(E - \bar{E}_1)$$

Pour la valeur la plus probable de l'énergie \bar{E}_1 , les températures cinétiques et potentielle sont égales. En toute rigueur, ces deux températures sont différentes de la température totale $T = (\partial_E S)^{-1}$ à cause des effets de taille finie. Cette correction peut être explicitement évaluée si $W(E)$ (équation 1.3) est intégrée dans une approximation gaussienne de $P_E(E_1)$:

$$P_E(E_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_1^2}} e^{-\frac{(E_1 - \bar{E}_1)^2}{2\sigma_1^2}} \quad (1.5)$$

et en estimant \bar{E}_1 par $\langle E_1 \rangle$, la température T s'écrit :

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{T_1(\bar{E}_1)} + \frac{\partial \ln \sigma_1}{\partial E} \quad (1.6)$$

1.3.2 Capacité calorifique et fluctuations d'énergie cinétique

La dérivation à l'ordre 2 de l'équation 1.4 nous donne accès à la capacité calorifique. C'est la courbure de $P_E(E_1)$ qui s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \ln P_E(E_1)}{\partial E_1^2} = T^2 \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2}$$

Le terme de gauche se ramène à la largeur σ_1^2 de la distribution $P_E(E_1)$ si l'on se place dans une approximation gaussienne (équation 1.5) :

$$\sigma_1^2 \simeq T^2 \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2}$$

où les capacités calorifiques partielles valent $C_i^{-1} = \frac{\partial T_i}{\partial E_i}$. On peut ajouter que, pour l'utilisation pratique de cette équation, il faut vérifier la validité de 1.5 dans le cas physique du système étudié. Ainsi les fluctuations d'énergie cinétique σ_1^2 s'expriment en fonction de la température et des capacités calorifiques partielles.

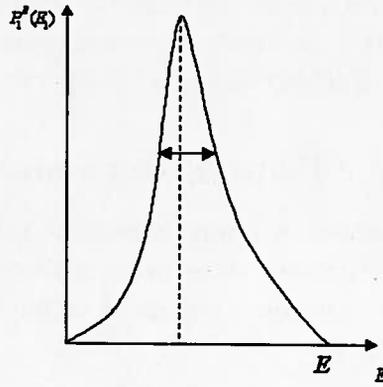


FIG. 1.4 - Représentation schématique de la distribution d'énergie cinétique à énergie totale fixée; pointillés : \bar{E}_1 ; flèches : σ_1 .

Inverser cette équation revient à déterminer la capacité calorifique totale C :

$$C = C_1 + C_2 + \text{termes correctifs}$$

Les termes correctifs dus à la présence de fluctuations ont été calculés dans l'approximation gaussienne dans la référence [30]. Nous les évaluerons au chapitre suivant dans le modèle du gaz sur réseau. A l'ordre le plus bas :

$$C \simeq C_1 + C_2 \simeq \frac{T^2 C_1^2}{T^2 C_1 - \sigma_1^2} \quad (1.7)$$

La capacité calorifique totale devient négative lorsque les fluctuations d'énergie cinétiques deviennent grandes :

$$C_1 < \frac{\sigma_1^2}{T^2} \rightarrow C < 0 \quad (1.8)$$

Lorsque $\frac{\sigma_1^2}{T^2}$ approche C_1 , la capacité calorifique diverge. Il faut noter que C_1 est en général facile à évaluer. En effet pour un système classique à $3N$ degrés de liberté la densité d'états

$$W_1(E_1) = \int d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N \delta(E_1 - \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m})$$

représente l'hypersurface d'une sphère à N dimensions et peut être calculée analytiquement [34], ce qui aboutit à l'expression de l'équation d'état cinétique

$$T^{-1} = \frac{3N - 2}{2E_1}$$

d'où

$$C_1 = \frac{3N}{2}$$

Il est intéressant de remarquer que même pour l'énergie cinétique le résultat canonique $C_1 = \frac{3N}{2}$ est obtenu seulement à la limite thermodynamique. Nous allons maintenant comparer le comportement des fluctuations à celui attendu dans l'ensemble canonique.

1.3.3 Comparaison avec l'ensemble canonique

Comparons l'équation 1.7 obtenue pour l'ensemble microcanonique avec la relation entre capacité calorifique et fluctuations dans l'ensemble canonique. La fonction de partition à la température $1/\beta$ d'un système décomposé en énergie cinétique (1) et en énergie potentielle (2) indépendantes se factorise :

$$Z_{can}(\beta) = Z_{can,1}(\beta) * Z_{can,2}(\beta)$$

On déduit simplement de la fonction de partition canonique l'énergie moyenne totale et ses fluctuations par les relations :

$$\langle E_1 \rangle = -\frac{\partial \ln(Z_{can,1}(\beta))}{\partial \beta} \text{ et } \sigma_1^2 = \frac{\partial^2 \ln(Z_{can,1}(\beta))}{\partial^2 \beta}$$

Comme la capacité calorifique canonique est donnée par $C_1 = \frac{\partial \langle E_1 \rangle}{\partial (1/\beta)}$, on en déduit la relation entre fluctuations σ_1^2 et C_1 :

$$\sigma_1^2 = C_1 / \beta^2$$

Dans l'ensemble canonique, l'énergie totale est libre de fluctuer et les fluctuations d'énergie cinétique sont strictement égales à C_1 . Au contraire, dans l'ensemble microcanonique où l'énergie totale est fixée, les fluctuations dépassent la valeur canonique quand le système subit une transition de phase du premier ordre. C'est dans ce sens que l'on parle de fluctuations "anormalement" grandes. Ce paradoxe apparent peut être intuitivement compris si l'on considère que, dans la zone de coexistence, dans l'ensemble canonique, les événements oscillent entre des configurations de type liquide (à basse énergie potentielle) et des configurations de type gaz (à énergie potentielle plus élevée). La conservation de

l'énergie induite par la contrainte microcanonique ($\sigma_1^2 = \sigma_2^2$) implique que ces grandes fluctuations d'énergie potentielle se reflètent sur la distribution d'énergie cinétique.

On peut même imaginer, selon la nature de l'interaction, que si la capacité calorifique cinétique est grande par rapport à celle d'origine potentielle, l'énergie cinétique de l'ensemble microcanonique puisse jouer le rôle d'un (petit) bain thermique. La distribution d'énergie potentielle peut donc devenir bimodale, comme la distribution d'énergie totale dans l'ensemble canonique, ce qui induirait des fluctuations énormes. Il est important de remarquer toutefois que dans ce dernier cas les expressions obtenues au chapitre 1.3.2. sur la base d'une approximation gaussienne pour $P_E(E_1)$ ne sont plus valables [33]. Cet argument sera développé en plus grand détail au chapitre 4.

1.3.4 Conclusion

Nous avons rappelé une extension possible du concept de "transition de phase" des systèmes infinis vers les systèmes finis. Celles-ci sont bien définies dans un système infini par la discontinuité des dérivées des potentiels thermodynamiques. Nous avons montré que l'ensemble microcanonique peut présenter des régions de convexité de l'entropie en fonction de l'énergie. Ces régions sont les zones de transition. La figure (1.5) en montre les conséquences. La courbe calorifique présente une inversion de pente et la capacité calorifique est négative. De façon équivalente, les fluctuations d'énergie cinétique normalisées au carré de la température, sont "anormalement" grandes, *i.e.* plus grandes que la prédiction canonique (condition (1.8)).

Dans le chapitre 3, nous allons mettre en évidence la transition de phase d'un système fini dans le cadre du modèle du gaz sur réseau, présenté au chapitre 2, à travers les signaux que nous venons de présenter. On s'attend à ce que les défauts de convexité disparaissent à la limite thermodynamique et deviennent négligeables dans les systèmes macroscopiques. Ce point sera discuté dans le chapitre 4. Pour les très grands systèmes, cette phénoménologie perdra donc sa pertinence, ou du moins son pouvoir prédictif. Toutefois dans le cadre de la multifragmentation des noyaux atomiques, nous montrerons qu'une anomalie de convexité extrêmement claire est prévue à cause de leur petit nombre de constituants.

1.4 Application dans le cadre de la mécanique statistique

La mécanique statistique nous permet d'étudier un système composé d'un nombre fini de particules en forte interaction. Dans un premier temps, nous rappellerons l'équilibre thermodynamique atteint pour un nombre quelconque d'observables connues en valeur moyenne; nous appliquerons ensuite ce formalisme à un volume connu seulement en

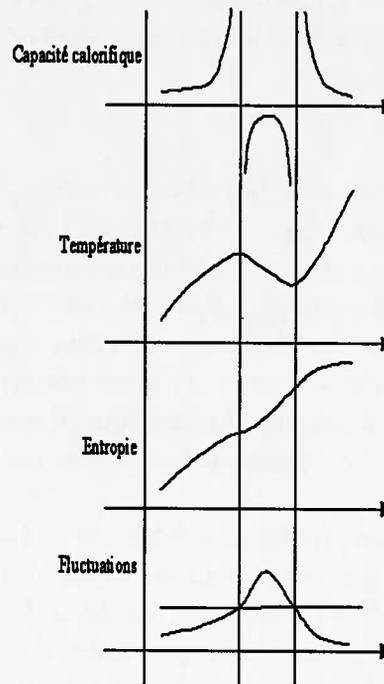


FIG. 1.5 – *Illustration schématique de quatre signaux équivalents en fonction de l'énergie qui indiquent une transition du premier ordre dans l'ensemble microcanonique, où seule l'énergie est contrôlée : une capacité calorifique négative, une inversion de pente dans la courbe calorifique, un défaut de concavité dans l'entropie. Ces phénomènes induisent des fluctuations d'énergie cinétique, normalisées au carré de la température, anormalement grandes (figure du bas) : elles dépassent la valeur attendue dans l'ensemble canonique C_1 (ligne continue horizontale).*

moyenne. Ce cas particulier sera en fait très important dans toute la suite, comme étant celui pertinent pour des systèmes ouverts préparés dynamiquement. Nous commenterons le fait que cela se ramène à l'étude d'un ensemble isobare.

1.4.1 L'équilibre thermodynamique

Nous nous plaçons dans le cadre de la physique statistique, *i.e.* nous étudions une grande collection d'états dont nous mesurons des grandeurs collectives, connues en moyenne. La thermodynamique associée suppose un équilibre: il est obtenu en maximisant l'entropie S sous les contraintes caractéristiques de l'ensemble [4]. Dans le cadre de la théorie de l'information, l'expression générale de l'entropie est donnée par la formule de Shannon [35]. Pour M états, elle relie l'entropie à la probabilité $p^{(n)}$ de l'état (n):

$$S = -k \sum_{n=1}^M p^{(n)} \ln p^{(n)}$$

Dans toute la suite nous poserons k constante de Boltzmann égale à 1. Cette formule est valable pour une distribution quelconque des $p^{(n)}$, pourvu qu'elle soit normalisée. On peut montrer que cette définition de S aboutit aux propriétés attendues pour l'entropie, dont:

1. L'entropie est nulle si la connaissance du système est maximale: $p^{(n)} \rightarrow 1$ si $n = n_0$;
2. Elle est maximum si l'ignorance est maximale: $p^{(n)} = \frac{1}{M}$ pour tout n ;
3. Les états qui ont un poids négligeable ne modifient pas la valeur de l'entropie: $\lim_{p^{(n)} \rightarrow 0} p^{(n)} \ln p^{(n)} = 0$;
4. S est additive en composant deux probabilités indépendantes;
5. S reste concave entre deux distributions du même ensemble.

Nous allons exprimer la probabilité $p^{(n)}$ de façon générale, pour L observables A_l sur l'ensemble des états R . Nous nous plaçons explicitement dans le cadre de la mécanique classique pour éviter les problèmes de commutation des observables.

La mesure de l'observable A_l aboutit à sa valeur moyenne $\langle A_l \rangle$ sur R . L'ensemble des $\langle A_l \rangle$ définit l'ensemble thermodynamique choisi pour décrire le système: ainsi, si l'énergie est mesurée en moyenne, l'ensemble thermodynamique est l'ensemble canonique; grand-canonique si, en plus, la valeur moyenne du nombre de particules est également mesuré. L'équilibre est atteint par maximisation de l'entropie sous la contrainte des différents A_l . Ceci donne les probabilités des états (n) sous la forme [4]:

$$p^{(n)} = p_{\{\lambda_l\}}^{(n)} = \frac{1}{Z} \exp \left(-\sum_{l=1}^L \lambda_l A_l^{(n)} \right)$$

λ_l est le multiplicateur de Lagrange associé à $\langle A_l \rangle$. C'est la variable intensive conjuguée de la variable $\langle A_l \rangle$. Z est la fonction de partition, normalisant les probabilités:

$$Z = Z_{\{\lambda_l\}} = \sum_{n=1}^M \exp \left(-\sum_{l=1}^L \lambda_l A_l^{(n)} \right)$$

La connaissance de Z donne accès aux équations d'état, qui relient les variables intensives et extensives:

$$\langle A_i \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda_i}$$

L'entropie est alors donnée par la transformée de Legendre :

$$S = \ln Z + \sum_i \lambda_i A_i$$

montrant que les équations d'état peuvent aussi s'écrire :

$$\lambda_i = \frac{\partial S}{\partial \langle A_i \rangle}$$

Le potentiel thermodynamique est défini par $-T \ln Z$. Il est relié au maximum d'entropie de l'ensemble considéré par :

$$-T \ln Z_\lambda = -TS_{\langle A_i \rangle} + T \sum_{i=1}^L \lambda_i \langle A_i \rangle$$

Il est important de remarquer qu'aucune hypothèse sur la taille du système n'est nécessaire pour obtenir les équations précédentes.

Pour illustrer ce formalisme général, considérons l'ensemble canonique. Supposons l'énergie mesurée en moyenne $\langle E \rangle$, son multiplicateur de Lagrange associé est l'inverse de la température $\beta = \frac{1}{T}$ de telle sorte que la probabilité d'un état s'écrit :

$$p^{(n)} = \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta E^{(n)}}$$

Z_β est la fonction de partition canonique :

$$Z_\beta = \sum_{n=1}^M e^{-\beta E^{(n)}}$$

Les équations d'état s'écrivent :

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z_\beta}{\partial \beta}$$

Le potentiel thermodynamique est l'énergie libre $F = -T \ln Z_\beta$ qui respecte l'égalité :

$$F = \langle E \rangle - TS_{\langle E \rangle}$$

Comme deuxième exemple, nous considérons l'ensemble grand-canonique, où en outre le nombre moyen de particules $\langle A \rangle$ est mesuré :

$$Z_{\beta\alpha} = \sum_{n=1}^M e^{-\beta E^{(n)} + \alpha A^{(n)}}$$

où $\alpha = \mu\beta$ est la fugacité. Le grand potentiel s'écrit $\mathcal{F} = -T \ln Z = \langle E \rangle - TS_{\langle E \rangle} - T\alpha \langle A \rangle$.

Nous développons maintenant le cas où le volume est la variable mesurée en moyenne.

1.4.2 Le volume moyen comme observable

Le paramètre d'ordre de la transition liquide-gaz est, dans un système infini, bien défini : il est donné par la différence entre les densités liquide et gaz. Il est donc essentiel de définir la densité ou, de façon équivalente, le volume.

Nous avons envisagé deux façons différentes pour définir le volume d'un système fini : il peut être défini par un contenant de taille fixe dans lequel le système est placé, ce qui correspond à un ensemble statistique isochore ; on peut également le considérer comme la valeur moyenne d'un opérateur à un corps qui mesure la taille du système. Cette définition est particulièrement bien adaptée pour les systèmes ouverts¹, dont le volume est au mieux connu en moyenne. Par exemple, dans les expériences de physique nucléaire, le système est isolé et il n'échange pas d'énergie avec le milieu extérieur : il doit être décrit dans l'ensemble microcanonique. Par contre le système peut subir une expansion, évaporer, multifragmenter, ... Aucun récipient ne contient les événements : leur volume n'est pas fixé. En revanche la fragmentation se passe dans un volume fini : il est donc possible de définir un volume moyen.

Ce cas conduit naturellement à la définition d'une pression comme multiplicateur de Lagrange associé à un volume moyen : en effet, considérons un ensemble d'états pour lesquels le volume est libre de fluctuer autour d'une valeur moyenne $\langle V \rangle$. On peut écrire le potentiel thermodynamique :

$$-T \ln Z_{\beta\lambda} = \langle E \rangle - TS_{(\langle E \rangle, \langle V \rangle)} + T\lambda \langle V \rangle$$

Considérant la définition de l'enthalpie libre $G = \langle E \rangle - TS + PV$, il est immédiat d'identifier λ à une pression P divisée par la température T : $P = \lambda T$. Dans ce cas l'ensemble considéré est l'ensemble canonique isobare. Nous avons ensuite appliqué ce formalisme dans le cadre du modèle du gaz sur réseau.

1. Dans ce mémoire nous utiliserons l'expression "système ouvert" dans le sens d'un système avec un volume qui n'est pas fixé par des conditions aux bords. Ceci ne doit pas être confondu avec la notion standard thermodynamique de système ouvert comme système en relation avec un réservoir de particules.

Chapitre 2

Modèle de gaz sur réseau

Le modèle du gaz sur réseau a été souvent utilisé dans le cadre des transitions de phase. Lee et Yang ont montré l'existence de la transition de phase liquide-gaz grâce au modèle en 1952 [36]. Ce modèle simule A particules en interaction entre plus proches voisins. Le potentiel correspondant, attractif sur l'échelle du pas du réseau, infiniment répulsif à plus courte portée, et nul à plus longue portée, S donne bien les propriétés d'un fluide de Van der Waals. Ce modèle peut être directement relié au modèle d'Ising et nous montrerons l'isomorphisme des deux modèles.

Le modèle du gaz sur réseau nous permettra de faire l'étude de l'ensemble statistique caractérisé par un volume mesuré en moyenne, et ce dans le cadre de simulations numériques exactes. Nous présentons ici l'implémentation numérique d'un tel ensemble et les vérifications de l'échantillonnage. L'ensemble des résultats présentés sont obtenus dans l'ensemble canonique : nous nous attacherons, au chapitre suivant, à générer un ensemble microcanonique afin de mettre en évidence la transition de phase à travers les signaux développés au chapitre 1.3.

2.1 Présentation du modèle

Nous considérons un réseau de taille N et dans la suite nous étudierons seulement des réseaux cubiques pour lesquels $N = L^3$. Chaque site i est caractérisé par une occupation n_i et une impulsion \vec{p}_i . L'occupation n_i est nulle si le site est vide, 1 s'il est occupé par une particule. Les particules interagissent entre plus proches voisins et l'hamiltonien total s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} n_i - \frac{\epsilon}{2} \sum_{i=1}^N \sum_j' n_i n_j$$

La somme \sum_j' porte sur les plus proches voisins j du site i . L'interaction est attractive et vaut $\epsilon = 5.5 \text{ MeV}$ de telle sorte que l'énergie de saturation nucléaire soit reproduite. Nous nous intéressons pour l'instant à cette seule interaction ; l'interaction coulombienne sera introduite plus tard (chapitre 4).

Nous notons l'hamiltonien d'interaction entre plus proches voisins :

$$H_{LGM} = -\frac{\epsilon}{2} \sum_{i=1}^N \sum'_j n_i n_j$$

qui nous permet de faire le lien avec le modèle d'Ising: en effet, considérons N spins $s_i = \pm 1$ en interaction dont l'hamiltonien est :

$$H_{Ising} = -J \sum_{i=1}^N \sum'_j s_i s_j$$

où J est un couplage constant positif; H_{LGM} et H_{Ising} sont analogues, à la différence que $n_i = 0, 1$ et $s_i = \pm 1$.

Ainsi la correspondance entre n_i et s_i est donnée par :

$$n_i = \frac{1}{2} s_i + \frac{1}{2}$$

Par conséquent :

$$H_{LGM} = H_{Ising} - \frac{\epsilon}{4} z N \bar{s}_i - \frac{\epsilon}{8} z N$$

en prenant $J = \frac{\epsilon}{8}$ et \bar{s}_i la moyenne sur les sites.

Il est à noter que la valeur moyenne de l'occupation, $\rho = \bar{n}_i$, vaut A/N ; la magnétisation $m = \bar{s}_i$ est donnée par $(2\rho - 1)$.

Pour le système du gaz sur réseau, la fonction de partition dans l'ensemble grand-canonique s'écrit :

$$Z_{LGM} = \sum_{n_1=0,1} \dots \sum_{n_N=0,1} \exp(-\beta(H_{LGM} - \mu A))$$

où $\mu = \alpha\beta$ est le potentiel chimique. En considérant $A = N\rho = \frac{N}{2}(m + 1)$, le terme $\beta(H_{LGM} - \mu A)$ peut s'exprimer sous la forme :

$$\beta(H_{LGM} - \mu A) = \beta H_{Ising} - \frac{N\beta}{2} \left(\frac{z\epsilon}{2} + \mu \right) m - \frac{N\beta}{2} \left(\frac{z\epsilon}{4} + \mu \right)$$

Par identification à un système soumis à un champ $B = \frac{1}{2} \left(\frac{z\epsilon}{2} + \mu \right)$ externe, on peut réécrire le terme précédent comme :

$$\beta(H_{LGM} - \mu A) = \beta(H_{Ising} - M.B) + C$$

où $M = Nm$ est le moment magnétique total et C ne dépend pas de la magnétisation. Cette dernière relation montre l'isomorphisme entre le modèle du gaz sur réseau dans l'ensemble grand-canonique et le modèle d'Ising en champ magnétique externe.

Nous allons maintenant implémenter le volume moyen dans le modèle du gaz sur réseau.

2.2 Réalisation numérique du modèle

Le modèle du gaz sur réseau nous permet de réaliser un ensemble statistique avec le volume moyen comme observable. L'une des mesures possibles du volume pour un système à symétrie sphérique est la suivante :

$$V^{(n)} = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^N \frac{4\pi}{3} n_i r_i^3$$

pour chaque événement (n) . $r_i^{(n)}$ est la distance du site i par rapport au centre du réseau dans l'événement (n) et A le nombre de particules.

L'ensemble statistique dont on connaît l'énergie moyenne et le volume moyen correspond à l'ensemble isobare-isotherme [4] car nous avons introduit un multiplicateur de Lagrange pour assurer ces contraintes lors de la maximisation de l'entropie. Dans cet ensemble, la probabilité d'un état microscopique (n) d'énergie $E^{(n)}$ est :

$$p^{(n)} = \frac{1}{Z_{\beta\lambda}} \exp(-\beta E^{(n)} - \lambda V^{(n)})$$

La probabilité $p^{(n)}$ est équivalente à la probabilité canonique obtenue à partir de H en ajoutant le champ externe $\frac{\lambda_i}{\beta} = \frac{4\pi}{3A\beta} \lambda r_i^3$. Ceci explique la signification du concept de pression dans les systèmes ouverts : un système de volume moyen défini correspond à un système subissant la contrainte d'un champ externe qui peut être vu comme une pression bien définie.

Les événements de l'ensemble statistique sont générés par une méthode Metropolis [37]. Cette méthode permet de produire un ensemble d'événements respectant n'importe quelle loi de probabilité. A partir d'une configuration (1), un deuxième événement est généré : nous considérons une particule tirée au hasard dans la configuration (1) ; elle est sur le site i_1 , son occupation est n_{i_1} ; un site i_2 est choisi au hasard ; les occupations n_{i_1} et n_{i_2} sont échangées, afin de conserver le nombre de particules. On obtient la configuration (2). Le rapport $P = \frac{p^{(2)}}{p^{(1)}}$ est calculé. Dans le cas de l'ensemble canonique avec une contrainte en volume, $P = \exp(-\beta(E^{(2)} - E^{(1)}) - \lambda(V^{(2)} - V^{(1)}))$. La partie cinétique est traitée à part : en effet l'énergie cinétique est découplée de l'énergie potentielle dans l'ensemble canonique. Elle est calculée à partir des impulsions, tirées sur une maxwellienne.

Si $P > 1$ la configuration (2) est gardée. Sinon la configuration (1) est gardée avec la probabilité P . Ceci est illustré sur la figure (2.1). Nous avons initialisé les A particules de façon compacte, au centre du réseau. Ce choix est justifié par le fait que cette configuration correspond au minimum d'énergie du système à basse température. Elle est caractérisée par un ensemble de nombres d'occupations $\{n_i\}_{i=1,\dots,N}$ sous la contrainte $\sum_{i=1}^N n_i = A$ où A est le nombre de masse du système.

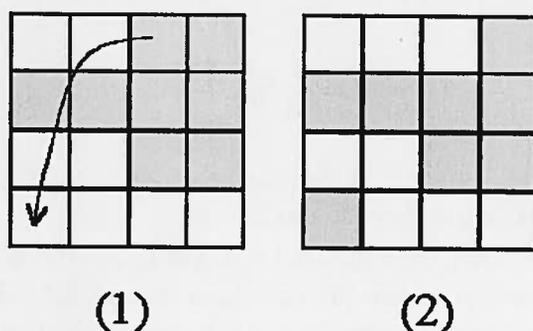


FIG. 2.1 – Principe de la méthode Metropolis illustrée dans un réseau plan 4×4 : les occupations de deux sites sont échangées entre les configurations (1) et (2). La configuration est acceptée avec un poids $P^{(2)}/P^{(1)}$.

L'algorithme est appliqué sur environ $A * 10000$ itérations avant de compter les événements. Ces tirages préliminaires ont pour but d'initialiser le Metropolis proche de l'équilibre recherché. Le nombre d'itérations préliminaires nécessaire est estimé en observant la convergence de différentes observables. Un exemple typique pour l'énergie d'interaction pour chaque événement est représentée sur la figure (2.2). Les partitions semblent déjà équilibrées à partir de $n = 25000$. Cette rapidité de convergence est assurée ici car nous partons de la configuration de l'état fondamental, qui est proche de la configuration recherchée. La vitesse aurait été beaucoup plus basse si le réseau avait été initialisé de façon aléatoire. Nous avons systématiquement commencé les itérations préliminaires à partir d'un événement obtenu à une température inférieure. En effet, les tirages aléatoires ont une plus forte probabilité d'apporter du désordre au système, tout comme une augmentation de la température.

Après les itérations préliminaires, l'échantillonnage est effectué. Cependant les événements (1) et (2) diffèrent seulement pour l'occupation de deux sites. Ils sont ainsi fortement corrélés, ce qui peut biaiser le tirage. Ainsi il est nécessaire de connaître le nombre d'événements successifs corrélés. Nous notons M le nombre moyen d'événements corrélés. M reflète la façon dont est exploré l'espace de phase. L'étude de ce paramètre a été faite pour un système de 216 particules : la figure (2.3) représente l'énergie d'interaction des événements Metropolis. Les événements oscillent entre deux solutions (liquide et gaz) à énergies différentes. Ceci est caractéristique des températures proches de la température de transition (voir chapitre 4). Chaque série d'événements correspond à une "phase" pure, qui comporte une position différente pour le centre de masse des événements, qui explorent ainsi la dégénérescence du volume des phases. En augmentant le volume du réseau, la barrière énergétique entre les deux solutions augmente en loi de puissance, ainsi que le nombre moyen d'itérations successives que l'algorithme passe dans chaque solution, ce qui rend très difficile et numériquement coûteux une exploration de l'espace des phases sans biais, surtout si la pression est faible ou nulle. Pour cette raison, nous avons limité nos études à des réseaux $20 \times 20 \times 20$.

La fonction d'autocorrélation f_y est également représentée. Elle est calculée par :

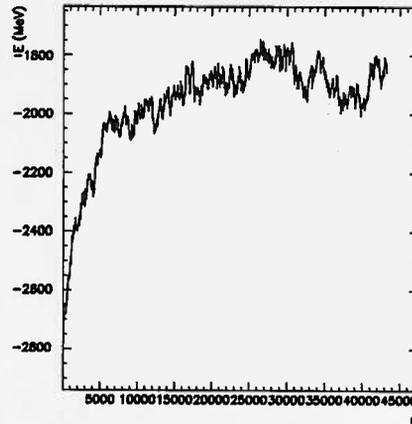


FIG. 2.2 – *Energie d'interaction en MeV en fonction de l'événement n pendant les itérations canoniques préliminaires pour les $A \times 200$ premiers événements, échantillonnées tous les $M = A + 1$; le système contient $A = 216$ particules dans un réseau de $20 \times 20 \times 20$. La température canonique est de 3 MeV ; $\lambda = 0$.*

$$f = \int_1^{\mathcal{N}} (E - \langle E \rangle) \cdot (E - \langle E \rangle + \tau) d\tau$$

où \mathcal{N} est le nombre total d'événements. Le nombre d'événements corrélés est défini par la largeur à mi-hauteur de la fonction de corrélation. Dans le cas présenté il vaut $M \simeq 2000$. Pour ne pas avoir d'événements corrélés nous ne prendrons qu'un événement tous les M tirages. Cependant, nous avons utilisé $M = A \times 100$ dans des cas particuliers, comme la recherche du point critique thermodynamique, qui nécessite un excellent échantillonnage de l'espace de phase, ou dans les calculs coulombiens.

Ces calculs nous permettent de connaître la façon dont l'espace de phase est exploré avec la méthode Metropolis et de savoir dans quelles conditions l'échantillonnage est effectué correctement. Ceci fournit un premier élément pour valider notre implémentation de la méthode.

2.3 Champ moyen et calcul exact

Afin de vérifier ultérieurement la numérique, nous avons effectué un calcul de champ moyen : hors de la zone de coexistence, et à haute température, le champ moyen est une excellente approximation. De plus, le champ moyen permet des calculs analytiques, qu'il est facile de comparer aux calculs numériques. Ainsi nous allons vérifier que les tirages Metropolis donnent les résultats analogues à ceux de champ moyen à haute température.

Considérons un hamiltonien à un corps

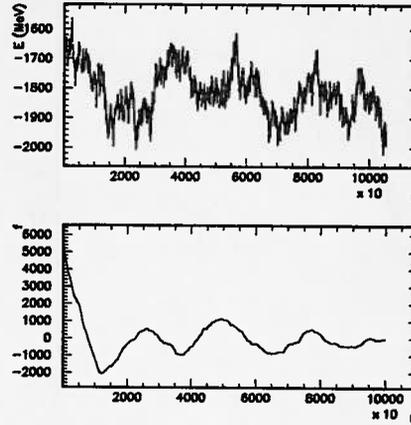


FIG. 2.3 – Haut : énergie d'interaction en MeV en fonction des événements n pour 100 itérations et $M = A+1$ ($N = M*100$) pour le même système, dans les mêmes conditions ; $\beta^{-1} = 3.0 \text{ MeV}$; $\lambda = 0$; $A = 216$. Bas : fonction d'autocorrélation.

$$H_{1b} = \sum_{i=1}^N h_i n_i$$

Dans l'ensemble grandcanonique isobare la fonction de partition s'écrit :

$$Z_{1b} = \sum_{n_1=0}^1 \dots \sum_{n_N=0}^1 \exp(-\beta H_{1b} - \alpha N - \lambda V)$$

En utilisant la mesure du volume du paragraphe 2.2. nous obtenons :

$$Z_{1b} = \prod_{i=1}^N z_i = \prod_{i=1}^N (1 + \exp(-\beta h_i - \lambda_i - \alpha))$$

avec $\lambda_i = \frac{4\lambda}{3\pi N} r_i^3$.

Ainsi la densité moyenne vaut :

$$\langle n_i \rangle = -\partial_{\lambda_i} \ln Z_{1b} = -\partial_{\lambda_i} \ln z_i$$

On obtient ainsi l'équation reliant la densité moyenne au multiplicateur de Lagrange λ_i :

$$\langle n_i \rangle = (1 + \exp(\beta h_i + \lambda_i + \alpha))^{-1}$$

Nous allons maintenant montrer que dans le cas du champ moyen cette équation est une équation autocohérente à résoudre itérativement.

Nous partons de l'hamiltonien d'interaction entre plus proches voisins H_{LGM} . L'approximation de champ moyen consiste à remplacer la valeur moyenne $\langle n_i n_j \rangle$ par le produit $\langle n_i \rangle \langle n_j \rangle$. Ainsi les corrélations à deux corps sont négligées [7]. L'hamiltonien de champ moyen s'obtient en différenciant l'énergie moyenne d'interaction de champ moyen $\langle E^{int} \rangle_{MF}$:

$$\langle E^{int} \rangle_{MF} = -\frac{\epsilon}{2} \sum_{i=1}^N \sum_j' \langle n_i \rangle \cdot \langle n_j \rangle$$

Calculons la variation d'énergie $\delta \langle E^{int} \rangle_{MF}$ induite par un δn_i :

$$\langle E^{int} \rangle_{MF} + \delta \langle E^{int} \rangle_{MF} = -\frac{\epsilon}{2} \sum_{i=1}^N \sum_j' (\langle n_i \rangle + \delta \langle n_i \rangle) \cdot (\langle n_j \rangle + \delta \langle n_j \rangle)$$

de telle sorte que :

$$\delta \langle E^{int} \rangle_{MF} \simeq -\epsilon z \sum_{i=1}^N \langle n_i \rangle \delta \langle n_i \rangle$$

si l'on fait l'approximation de densité locale et en négligeant les termes d'ordres supérieurs à $\delta \langle n_i \rangle$, la moyenne sur les sites voisins \sum_j' se ramène à $z \langle n_i \rangle$. z est le nombre de plus proches voisins.

Le terme $-\epsilon z \langle n_i \rangle$ peut être défini comme un hamiltonien h_{MF}^{int} à un corps s'appliquant pour chaque particule i . D'où :

$$H_{MF}^{int} = \sum_{i=1}^N h_{MF}^{int} n_i$$

Or l'hamiltonien du gaz sur réseau fait intervenir également les impulsions \vec{p}_i . Comme ce sont des termes à un corps, il ne sont pas modifiés dans l'hamiltonien de champ moyen et l'hamiltonien total de champ moyen H_{MF} s'écrit :

$$H_{MF} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} - \epsilon z \langle n_i \rangle \right) n_i = \sum_{i=1}^N h_i n_i$$

où h_i est l'hamiltonien total à un corps.

L'équation autocohérente liant la densité locale au multiplicateur de Lagrange associé est finalement :

$$\langle n_i \rangle = (1 + \exp(-\beta \epsilon z \langle n_i \rangle + \lambda_i + \alpha))^{-1}$$

D'un point de vue numérique la densité est déterminée par un calcul itératif utilisant la relation sur $\langle n_i \rangle$ ci-dessus. La densité de chaque point est initialisée à la densité exacte $\langle n_i \rangle_{H_0}$ d'un gaz parfait dont l'hamiltonien est le même que celui du champ moyen dans l'ensemble grand-canonique, mais à $\epsilon = 0$. Ainsi toutes les équations et dérivations sont identiques, avec la condition $\epsilon = 0$ et :

$$\langle n_i \rangle_{H_0} = \frac{1}{1 + e^{\lambda_i - \alpha}}$$

La figure (2.4) compare les calculs analytique et numérique du gaz parfait. La vérification de l'équation précédente fournit un test des tirages Metropolis.

Une fois le réseau initialisé à la densité de gaz parfait, la densité de champ moyen est calculée de façon itérative ; le potentiel chimique est évalué à chaque itération afin de conserver le nombre de particules A . Le processus est arrêté lorsque la densité a convergé vers la valeur à 0.01 près. Il est intéressant de noter que dans le cas d'un système en interaction (même dans l'approximation de champ moyen) la fonction de partition qui

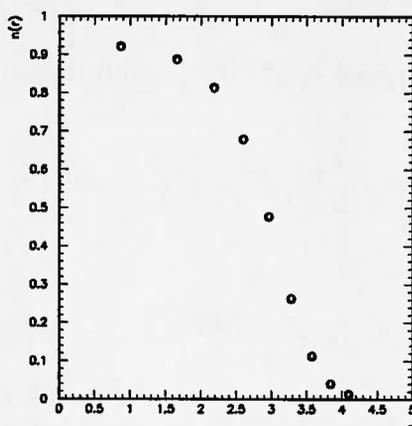


FIG. 2.4 – Densité radiale moyenne du gaz parfait: densité calculée (ronds) et densité analytique (losanges) pour un paramètre de Lagrange de 0.1. Les calculs ont été effectués pour $A = 108$ dans un réseau $12 \times 12 \times 12$.

apparaît dans le formalisme général (chapitre 1.4.1.) ne coïncide pas avec la fonction de partition à un corps calculée plus haut. En effet, en appliquant la définition de l'énergie libre pour l'approximation de champ moyen, on obtient :

$$-\beta F_{MF} = \ln Z_{MF} = S_{MF} - \beta \langle E_{int} \rangle - \alpha \langle N \rangle - \lambda \langle V \rangle$$

et ainsi [4] :

$$\ln Z_{MF} = \ln Z_{1b} + \beta \langle E_{int} \rangle$$

où $\langle E_{int} \rangle = -\frac{1}{2} \sum_i \epsilon_i \langle n_i \rangle^2$.

L'autocohérence de l'hamiltonien de champ moyen par rapport à un hamiltonien générique à un corps implique que la fonction de partition dépend explicitement de la densité locale

$$\ln Z_{MF} = \sum_{i=1}^N (1 + \exp(\beta \epsilon_i \langle n_i \rangle - \lambda_i - \alpha)) - \frac{1}{2} \beta \epsilon_i \langle n_i \rangle^2$$

En utilisant le formalisme du chapitre (1.4.1.) nous obtenons

$$\langle n_i \rangle = -\partial_{\lambda_i} \ln Z_{MF} - \partial_{\langle n_i \rangle} \ln Z_{MF} \frac{\partial \langle n_i \rangle}{\partial \lambda_i}$$

et

$$\langle n_i \rangle = (1 + \exp(-\beta \epsilon_i \langle n_i \rangle + \lambda_i + \alpha))^{-1}$$

L'accord avec l'équation déduite précédemment montre bien que d'un point de vue des observables, l'approximation de champ moyen élimine la complexité de l'interaction en ramenant le problème à un problème effectif à un corps.

Les isothermes d'un système de $A = 108$ particules ont été construites dans le plan pression(λ/β)-volume($\langle V^{(n)} \rangle$) pour un calcul champ moyen. Elles sont comparées sur la figure (2.5) au calcul numérique exact Metropolis, pour lequel la valeur moyenne du volume est évaluée sur un million d'événements, en fixant un couple (β, λ) . volume moyen) les deux calculs donnent les mêmes résultats. En effet, dans le premier cas, la pression est prépondérante et confine le système quelle que soit l'interaction ; à l'opposé, dans le second cas, les particules occupent de façon aléatoire l'ensemble du volume disponible (L^3).

A haute température, les deux calculs sont identiques. Ceci nous fournit une vérification supplémentaire de la numérique : l'échantillonnage des événements Métropolis n'est pas biaisé. En dessous de 10 MeV, de grandes différences apparaissent : le volume moyen est systématiquement surévalué en champ moyen. En effet, dans la zone de coexistence, le champ moyen n'est pas adapté. Dans cette région en effet les approximations de champ moyen présentent deux solutions homogènes, représentant chaque phase, et une solution instable correspondant à un maximum de l'entropie sous contrainte [4]. Il est bien connu que cette dernière solution est factice et est due seulement au fait qu'une phase mixte, donc non homogène, ne peut se retrouver dans le champ moyen. La solution habituelle [4] qui consiste à construire une troisième solution en considérant une coexistence spatiale des deux phases pures revient à une constructin de Maxwell et se révèle non acceptable dans les systèmes finis comme nous avons discuté au chapitre 1.

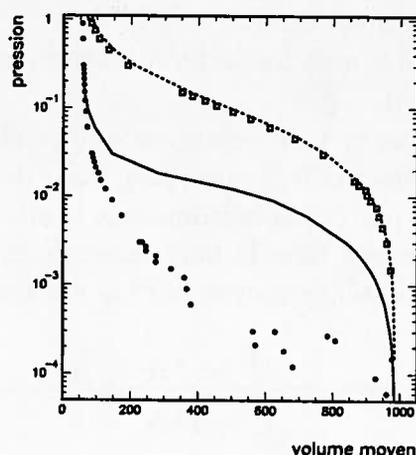


FIG. 2.5 - Isothermes Pression-Volume moyen pour $A = 108$ particules ; les calculs Metropolis sont représentés par les symboles ($T = 3$ points, $T = 15$ MeV carrés) ; les lignes correspondent au champ moyen ($T = 3$ ligne continue, $T = 15$ MeV tiretés.)

2.4 Ensembles isobare et isochore

Nous allons étudier précisément la signification d'un volume moyen et évaluer les différences entre un volume défini en moyenne et un volume défini par les conditions aux bords du réseau *i.e.* l'influence du choix de l'ensemble statistique: isochore (volume du réseau) ou isobare (volume moyen). En ce qui concerne la multifragmentation des noyaux atomiques, on peut penser que l'absence de conditions aux bords ainsi que de champ externe conduise à un ensemble isobare avec $P = 0$ (équivalent à un ensemble isochore avec V infini). Les théories de transport décrivent la multifragmentation comme la formation de corrélations à N corps à partir d'une configuration dense (à densité supérieure à la densité normale) en expansion. Quand la distance moyenne entre les particules dépasse la portée de la force nucléaire, les corrélations ne sont plus modifiées et les fragments ainsi formés s'éloignent les uns des autres sous l'effet de l'interaction coulombienne. Cette configuration typique de formation des fragments ("*freeze-out*") correspond à la définition d'un volume moyen, c'est-à-dire à un ensemble isobare à pression fixe.

Imposer un volume moyen permet de laisser fluctuer la taille des partitions d'un événement à l'autre. Elles restent cependant confinées dans une région privilégiée de l'espace et gardent en moyenne une symétrie sphérique. Afin d'évaluer dans quelle mesure les partitions sont modifiées par les conditions aux bords, nous avons calculé les profils de densité pour, d'une part, une sphère à bords francs et, d'autre part, un volume moyen (sphérique) $\langle V \rangle$ [38].

Afin d'imposer un volume moyen constant, nous avons exploré un ensemble large de pressions λ/β . Pour chaque pression, le volume moyen a été mesuré. A chaque température β^{-1} , nous avons effectué une série de régressions polynômiales pour en déduire la relation $\langle V \rangle (\lambda)$. Des exemples en sont donnés sur la figure (2.6). Comme le volume moyen varie rapidement en fonction de λ , obtenir des fits sur l'ensemble du domaine en λ est difficile. Nous nous sommes limités à des fits locaux dans la région en volume d'intérêt (ici $\ln \langle r^3 \rangle \sim 3.25$). Il est à noter qu'à haute température, le fit est beaucoup plus facile à obtenir, l'ordre 4 étant suffisant.

Nous avons choisi deux valeurs de volume moyen $\langle V \rangle$ (108 et 216) pour lesquels les profils de densité sont représentés sur la figure (2.7). Afin de les comparer à des calculs pour lesquels le volume est fixé par des conditions aux limites, comme par exemple avec une sphère de rayon R , nous devons faire le pont entre R et $\langle V \rangle$. Dans cette sphère uniformément remplie, le rayon cubique moyen $\langle r^3 \rangle$ est défini par :

$$\langle r^3 \rangle = \frac{\int_0^R 4\pi r^5 dr}{\int_0^R 4\pi r^2 dr} = \frac{R^3}{2} \quad (2.1)$$

de telle sorte que $\langle V \rangle = 4\pi R^3/6$. Ceci correspond au volume moitié d'une sphère uniformément remplie. Nous comparons les profils de densités pour des $\langle V \rangle$ égaux entre eux. Quelle que soit la densité moyenne considérée, les profils de densités sont analogues à $T = 3MeV$: le système est peu sensible aux conditions aux bords et il est globalement compact, centré au milieu du réseau. Des différences entre les deux calculs peuvent être présentes au niveau des fluctuations, mais seules les valeurs moyennes ont été mesurées pour cette étude. La situation est différente à une température élevée, ici $T = 15MeV$.

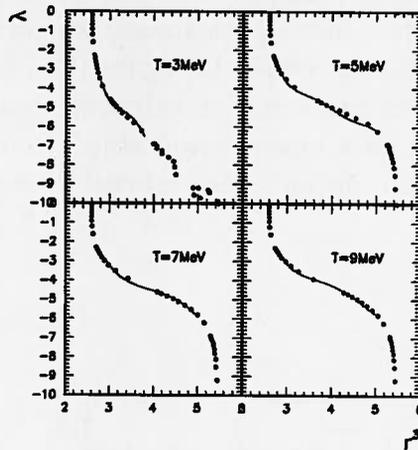


FIG. 2.6 - $\langle r^3 \rangle$ en fonction de λ en échelles logarithmiques pour des températures $1/\beta = 3\text{MeV}$ (haut gauche); $1/\beta = 5\text{MeV}$ (haut droite); $1/\beta = 7\text{MeV}$ (bas gauche); $1/\beta = 9\text{MeV}$ (bas droit); $A=108$, dans un réseau $20 \times 20 \times 20$. Points : simulations ; lignes : fits.

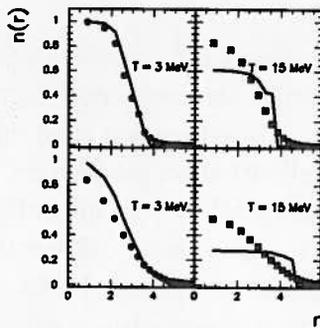


FIG. 2.7 - Profils de densité pour un système de $A = 108$ particules pour deux températures $T = 3\text{MeV}$ (gauche) et $T = 15\text{MeV}$ (droite). Les symboles représentent les calculs Metropolis avec un multiplicateur de Lagrange tel que $\langle V \rangle = 108$ (Haut) et $\langle V \rangle = 216$ (Bas). Les lignes représentent une boîte sphérique avec des conditions aux bords francs pour le même $(T, \langle V \rangle)$ que les symboles.

En effet, le système dont le volume moyen est fixé grâce à une pression reste diffus (même si la densité au centre diminue notablement), alors que celui dont le volume est imposé par les conditions aux bords remplit le réseau. Ces caractéristiques reflètent l'influence du champ de pression externe sur le système, mais aussi les corrélations importantes entre particules dues à l'interaction à deux corps. La figure (2.8) le montre en comparant les profils de densité issus d'un calcul exact et d'un calcul en champ moyen. A haute température, ils sont identiques, alors qu'à basse température, les bords du système sont plus abrupts dans un calcul de champ moyen. Ainsi les corrélations ne sont pas négligeables pour une température de 3MeV .

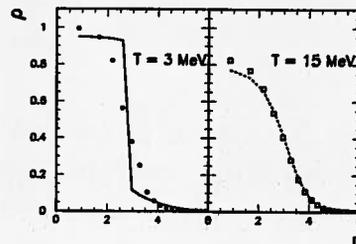


FIG. 2.8 – Profils de densité pour un système de $A = 108$ particules pour deux températures $T = 3\text{MeV}$ (gauche) et $T = 15\text{MeV}$ (droite). Les symboles et les lignes sont les mêmes que pour la figure (2.5).

En conclusion, nous avons montré que la mécanique statistique avec le volume moyen comme observable nous permet d'étudier des systèmes ouverts. Ceci nous a conduit à définir un ensemble statistique isobare, à une pression bien définie équivalente à un champ externe qui contraint le système. L'application au modèle du gaz sur réseau nous a montré que les partitions de l'ensemble isobare, défini par un volume moyen, et de l'ensemble isochore, défini par des conditions aux bords, sont différentes. En outre, les corrélations sont importantes dans la zone de transition de phase. L'étude sur la thermodynamique et les fragments (chapitres 2,3) donnera une vision plus précise de ces premiers résultats.

Chapitre 3

Signaux de transition de phase dans le modèle de gaz sur réseau

Nous avons utilisé dans le chapitre précédent le modèle du gaz sur réseau pour caractériser les transitions de phase des systèmes finis, dans un ensemble dont le volume est connu en moyenne. Nous avons défini la thermodynamique d'un tel ensemble dans le cadre de la mécanique statistique. Nous allons maintenant décrire la thermodynamique microcanonique dans le modèle. Ainsi nous pourrons faire le lien avec les expériences, dans lequel le tri en énergie est toujours possible. Nous testerons les fluctuations d'énergie cinétique comme observable de la transition de phase. Nous devons d'abord générer numériquement un ensemble microcanonique. Ensuite, nous définirons deux ensembles statistiques pertinents, pour lesquels nous extrairons la courbe calorifique, la capacité calorifique et les fluctuations d'énergie cinétique. Nous montrerons le rôle du volume dans la transition de phase et nous insisterons sur différentes transformations possibles dans un ensemble statistique donné: ceci nous permettra de conclure que la mesure de fluctuations "anormales" d'énergie cinétique est un signal "fort" de transition de phase. Enfin, l'influence de la taille finie du système et du choix de l'ensemble statistique sera évaluée sur les grandeurs thermodynamiques; nous concluerons en étudiant la zone de coexistence microcanonique.

3.1 Générer un ensemble microcanonique

Nous devons générer des partitions microcanoniques. Pour cela, nous considérons l'ensemble canonique trié en énergie, ce qui nous permet d'échantillonner plusieurs énergies simultanément. Dans un premier temps, nous considérons que la seule variable extensive mesurée est l'énergie. Or, dans la transition de phase liquide-gaz, l'énergie n'est pas la seule observable: en effet, au chapitre (2) nous avons rappelé que le volume est une variable nécessaire à la description correcte de la transition. Il faut donc appliquer le formalisme du chapitre 1.3 dans le cadre de deux observables²: l'énergie et le volume.

2. ici comme dans le reste de ce mémoire, nous utilisons le terme "observable" dans le sens de valeur moyenne d'un opérateur sur un état, *i.e.* variable extensive (chapitre 1.4.1.). Cette définition n'implique pas qu'une observable soit directement mesurable événement par événement dans un échantillon expéri-

3.1.1 Relation entre les ensembles canonique et microcanonique

La probabilité canonique d'une configuration d'énergie E à la température β est :

$$P_\beta(E) = \frac{W(E)}{Z(\beta)} e^{-\beta E}$$

Elle fait apparaître explicitement la densité d'états $W(E)$, reliée à l'entropie microcanonique par la relation :

$$S(E) = \ln W(E)$$

Il suffit de calculer le logarithme de la distribution de probabilité d'énergie canonique pour obtenir l'entropie microcanonique à une fonction linéaire près en énergie :

$$S(E) = \ln W(E) = \ln P_\beta(E) + \ln Z(\beta) + \beta E \quad (3.1)$$

La dérivation de cette relation aboutit directement à la courbe calorique microcanonique par la relation :

$$T^{-1}(E) = \frac{\partial S(E)}{\partial E} = \frac{\partial \ln P_\beta(E)}{\partial E} - \beta \quad (3.2)$$

C'est à ce niveau que l'on passe de la thermodynamique canonique à celle microcanonique : en effet, pour chaque β canonique, on obtient en principe toute la courbe calorique microcanonique $T(E)$.

3.1.2 Mise en œuvre numérique

Nous avons démontré que construire la courbe calorique nécessite de calculer numériquement la distribution de probabilité canonique en énergie. Celle-ci est obtenue à partir des tirages Metropolis : à chaque tirage, l'énergie totale (cinétique et potentielle) est calculée et les distributions en énergie $n_\beta(E)$ sont incrémentées. La distribution de probabilité est donnée par :

$$P_\beta(E) = \frac{n_\beta(E)}{N_0}$$

où N_0 est le nombre total d'événements sur lesquels la distribution d'énergie est calculée.

Comme la statistique est finie, les distributions d'énergie ont la forme représentée sur la figure (3.1). Seul un domaine en énergie est exploré. Ainsi nous pouvons avoir seulement accès à une partie de la courbe calorique. Les distributions autour de la valeur la plus probable \bar{E} sont celles qui aboutissent à une erreur relative $1/\sqrt{n_\beta(\bar{E})} |_{\bar{E}}$ la plus petite. Pour reconstruire l'ensemble de la courbe microcanonique, plusieurs calculs canoniques sont nécessaires. Afin de raccorder l'ensemble des contributions canoniques, les distributions en énergie doivent se recouvrir.

Nous allons étendre cette méthode au cas des deux variables E et V .

mental.

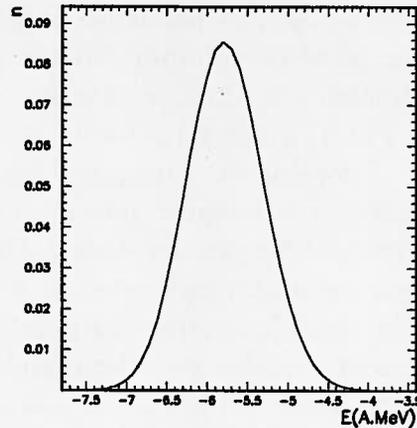


FIG. 3.1 – Distribution canonique d'énergie totale pour $\beta^{-1} = 3.50 \text{ MeV}$ dans le cas où l'énergie est la seule observable, dans un réseau $50 \times 50 \times 50$.

3.2 Tri en enthalpie

Comme nous l'avons indiqué au paragraphe précédent, nous nous plaçons d'abord dans l'ensemble canonique, en considérant cette fois l'énergie et le volume comme observables. Nous considérons la pression $P = \lambda/\beta$ constante. La probabilité d'une énergie E et d'un volume V s'écrit [?]:

$$P_{\beta P}(E, V) = \frac{W(E, V)}{Z_{\beta P}} \exp(-\beta E - P\beta V)$$

Le terme $E + PV$ s'identifie à l'enthalpie \mathcal{H} . Si la contrainte en volume est vue comme un potentiel externe confinant, \mathcal{H} est en fait une énergie; cela nous permet de traiter \mathcal{H} comme l'énergie du paragraphe précédent et:

$$P_{\beta P}(\mathcal{H}) = \frac{W_P(\mathcal{H})}{Z_{\beta P}} \exp(-\beta \mathcal{H})$$

en notant:

$$W_P(\mathcal{H}) = \sum_{E, V} W(E, V) \delta(\mathcal{H} - E - PV)$$

La température microcanonique s'écrit, lorsque \mathcal{H} est la variable de tri:

$$\frac{\partial S}{\partial \mathcal{H}} = \frac{\partial \ln W_P(\mathcal{H})}{\partial \mathcal{H}} = \frac{1}{T_P} = \frac{\partial \ln P_{\beta P}}{\partial \mathcal{H}} - \beta \quad (3.3)$$

3.2.1 Application numérique de la méthode

Nous avons choisi un système de $A=216$ particules identiques à une pression sous-critique (ici $P = 5.10^{-4} \text{ MeV}$ par unité de volume); nous avons calculé les distributions de probabilité en énergie pour différents β . Chaque valeur de β nous a permis de calculer la température microcanonique $T_P(\mathcal{H})$ grâce à l'équation 3.3. Le haut de la figure (3.2) représente $T_P(\mathcal{H} = 0)$ pour les β considérés. Puisque chaque β permet de calculer les températures associées à de nombreuses énergies, une moyenne sur tous les β améliore les résultats; pour prendre en compte les erreurs dues à l'échantillonnage fini à chaque β , les estimations de la température sont moyennées en les pondérant par le nombre d'événements à l'enthalpie considérée. L'ensemble des points donne approximativement la même valeur, ce qui est cohérent avec les considérations numériques du paragraphe 1.1.2. La déviation par rapport à la valeur moyenne est due aux queues de distributions: ceci peut être vu sur le bas de la figure (3.2), qui donne la statistique $n_{\beta P}(E) |_{T_\beta}$ pour chaque T_β .

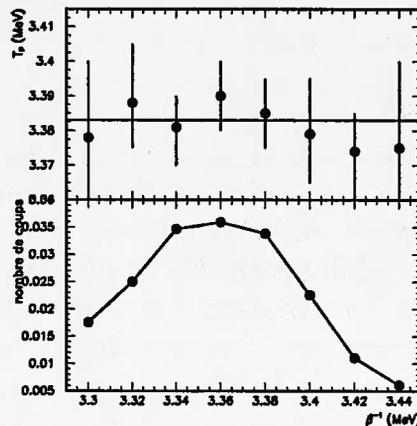


FIG. 3.2 – Température microcanonique donnée par différents β pour un énergie donnée $E = 0$; valeur moyenne pondérée par le nombre de coups (ligne); nombre de coups normalisé au nombre total de coups sur T_β pour chaque β . La pression vaut $P = 5.10^{-4} \text{ MeV}$.

3.2.2 Illustration

L'équation 3.1 nous permet de calculer l'entropie comme le logarithme de la distribution d'enthalpie. Elle est représentée sur le haut de la figure (3.3) à la fonction linéaire près $\beta E - \ln Z_\beta$ pour différentes valeurs de β . Ces distributions sont normales, voire gaussiennes en dehors de la zone de transition ($\beta^{-1} = 3.20$ et 3.60 MeV), ce qui signifie que l'entropie est une fonction concave de \mathcal{H} autour de la valeur de \mathcal{H} la plus probable à chaque température. Au contraire, la distribution est bimodale lorsque l'on traverse la

zone de transition de phase ($\beta^{-1} = 3.36, 3.40$ et 3.46 MeV). Il est ainsi possible de définir comme "phase liquide" ou quasi-liquide le premier pic en énergie de la bimodalité et "phase gazeuse" ou quasi-gaz le second, la transition de phase étant caractérisée par la présence simultanée de quasi-liquide et de quasi-gaz. A la limite thermodynamique, les distributions deviennent des distributions de Dirac et la zone de température décroissante tend vers un point : on observera donc soit le liquide, soit le gaz, comme nous l'avons évoqué au chapitre (1).

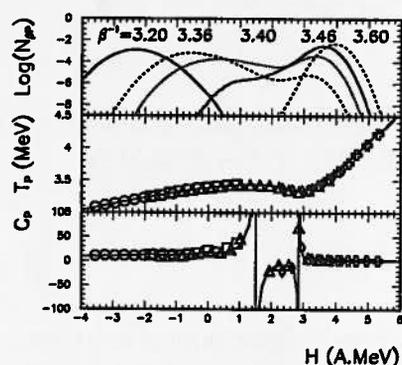


FIG. 3.3 – Haut : Logarithme des distributions en énergie pour différents β ; milieu : courbe calorifique microcanonique reconstruite (ligne) et différentes contributions de β (symboles) ; Bas : capacité calorifique dérivée de la courbe calorifique pour le même système de la figure (3.4). Symboles : $\beta^{-1} = 3.20 \text{ MeV}$ (ronds) ; 3.36 MeV (carrés) ; 3.40 MeV (triangles) ; 3.46 MeV (losanges) ; 3.60 MeV (croix). La droite verticale est ajoutée pour guider l'œil sur la divergence.

Du point de vue des tirages Metropolis, dans la zone de transition, l'énergie fluctue d'un événement à l'autre de l'enthalpie du quasi-liquide à celle du quasi-gaz comme le montre la figure (3.4) pour $\beta^{-1} = 3.40 \text{ MeV}$: les événements sont échantillonnés sur une gamme qui favorise les enthalpies autour de 0 MeV (quasi-liquide) et 3.5 MeV (quasi-gaz), ce qui correspond aux pics observés sur la figure (3.3) pour le même β : un seul calcul canonique à β fixé permet d'explorer les énergies du quasi-liquide et du quasi-gaz. Par contre, un tri microcanonique ne garde que les configurations soit quasi-liquides, soit quasi-gazeuses, soit mixtes.

Comme le laissait penser la figure (3.2), le raccord des différentes estimations de la courbe calorifique déduite des échantillonnages canoniques à différents β est excellent (deuxième partie de la figure (3.3)). Chaque contribution est calculée à partir de l'équation 3.3. Ceci indique que l'échantillonnage Metropolis a été effectué correctement et montre la qualité numérique de nos résultats, même dans la zone de transition où l'échantillonnage est plus difficile car l'on voit sur les distributions que cela correspond à un minimum de

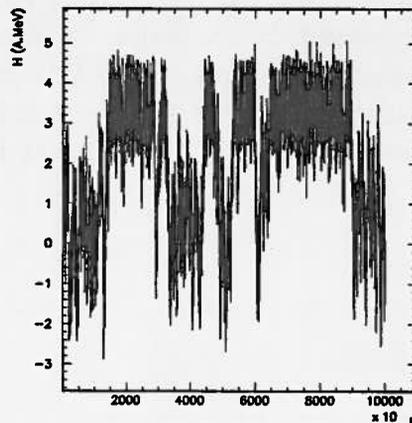


FIG. 3.4 – Enthalpie par particule événement par événement n gardé ; le système contient 216 particules à la pression 5.10^{-4}MeV ; $\beta^{-1} = 3.40 \text{MeV}$.

la probabilité canonique. La courbe calorique microcanonique, moyennée sur l'ensemble des contributions de chaque β , est également représentée. Elle présente une inversion de pente dans la région où la distribution en énergie est bimodale. Cette inversion se présente sur environ $\Delta H = 1.3 \text{MeV}$ en enthalpie et $\Delta T = 0.12 \text{MeV}$ en température. ΔT est très petit par rapport aux ordres de grandeur des températures microcanoniques ($\frac{\Delta T}{T} \simeq 3\%$). Ainsi, d'un point de vue expérimental, la mesure de cette inversion de pente est difficile. C'est une raison supplémentaire pour chercher des observables plus sensibles à la présence de capacité calorifique négative, comme les fluctuations d'énergie partielle. La qualité de la courbe calorique microcanonique moyenne nous permet de l'utiliser directement pour calculer la capacité calorifique en la dérivant. Celle-ci devient négative dans la zone de transition, et diverge au passage du quasi-liquide à la coexistence et de la coexistence au quasi-gaz. L'équivalence entre convexité de l'entropie, inversion de pente de la courbe calorique et capacité calorifique négative est ainsi parfaitement illustrée par ce modèle classique de transition de phase.

3.2.3 Energies partielles

Le modèle du gaz sur réseau va nous permettre de tester les méthodes discutées au chapitre 2 afin d'extraire la thermodynamique du système total en observant les partitions de l'énergie en deux composantes. Le premier point concerne l'utilisation de l'énergie cinétique comme thermomètre ; le second la mesure de fluctuations d'énergie cinétique signifiant une capacité calorifique négative.

Mesure des capacités calorifiques cinétique et potentielle

Nous avons calculé les températures et capacités calorifiques d'origine cinétique et potentielle. Celles-ci sont représentées sur la figure (3.5), qui montre l'ensemble des points obtenus et leur moyenne pondérée par la statistique. La température d'origine i , T_i , est calculée à partir des distributions d'énergie de type i , $p_{\beta P}(E_i)$, que nous calculons numériquement. La méthode utilisée est celle du chapitre 3.2.2. Ainsi, pour chaque type d'énergie partielle i (équation 3.3) :

$$\frac{1}{T_i(E)} = \frac{\partial \ln P_{\beta P}(E_i)}{\partial E_i} - \beta$$

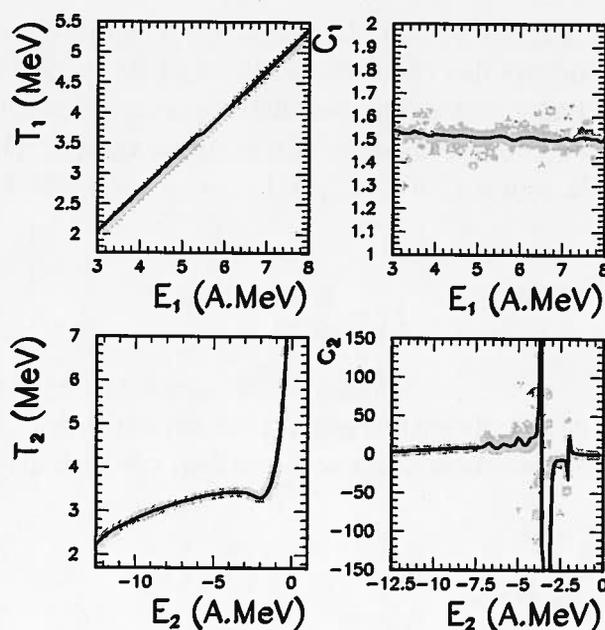


FIG. 3.5 - Haut: température calculée à partir des distributions en énergie cinétique et capacité calorifique cinétique; Bas: mêmes variables mais pour l'énergie potentielle. Symboles gris clair: ensemble des points, dont la statistique est supérieure à 1%; ligne: moyenne pondérée. Le système est le même que celui de la figure (3.4).

Considérons d'abord la contribution cinétique. Les impulsions sont tirées sur une maxwellienne à la température canonique $1/\beta$ donnée, avec une symétrie $p, -p$. Nous avons vu au chapitre (1) que la relation attendue entre T_1 et C_1 est :

$$E_1 = C_1 T_1$$

et l'on attend pour C_1 la valeur $\frac{3A-2}{2} \simeq 1.5A$, avec A nombre total de particules. Pour les systèmes que nous avons utilisés, ici de taille 216, la correction par rapport à 1.5 est inférieure à 1%. L'estimation numérique pour la température T_1 obtenue à partir de l'équation (3.3) en fonction de l'énergie cinétique, sur la figure (3.5) est une droite de pente environ $\frac{2}{3}$ et la capacité calorifique cinétique vaut bien $C_1/A = 1.5$ compte tenu des erreurs numériques.

Concernant l'énergie potentielle, une inversion de pente est observée dans le diagramme T_2, E_2 et elle correspond à une capacité calorifique négative. Ceci signifie que c'est l'énergie potentielle qui subit la transition de phase, l'énergie cinétique étant "spectateur" de la transition. Cependant, la corrélation entre énergie cinétique et énergie potentielle, induite par la conservation de l'énergie microcanonique, permet de signer la transition de phase à partir des fluctuations d'énergie cinétique.

L'énergie cinétique comme thermomètre

Nous avons montré au chapitre (1) que la température totale T_P était donnée par T_1 (équation 1.6), sans tenir compte des corrections dues aux largeurs. Nous avons repris ici la courbe calorifique $T_P(\mathcal{H})$ calculée à partir des distributions en enthalpie (équation 3.3). C'est la courbe calorifique que nous avons déterminée au paragraphe (1.2.1.). Nous l'avons comparée, sur le haut de la figure (3.6), à $T_1(\mathcal{H})$, qui est calculée à partir de l'énergie cinétique E_1 ;

$$T_1 = \frac{2}{3}E_1$$

L'accord entre T_1 et T montre que l'énergie cinétique est effectivement un bon thermomètre et que les termes correctifs entre T_1 et T sont négligeables. En fait nous pouvons aussi vérifier directement que les corrections sont petites, car nous possédons une expression analytique.

Fluctuations d'énergie cinétique

Nous nous proposons maintenant de comparer la capacité calorifique dérivée de la courbe calorifique et celle déduite des fluctuations d'énergie cinétique par la formule (1.7). Les fluctuations d'énergie cinétique ont la définition standard :

$$\sigma_1^2 = \left\langle \left(\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2 n_i}{2m} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2 n_i}{2m} \right\rangle^2$$

La capacité calorifique est reconstruite simplement à partir des fluctuations d'énergie cinétique :

$$C = \frac{C_1^2}{C_1 - \frac{\sigma_1^2}{T^2}}$$

et comparée à la dérivée de la courbe calorifique :

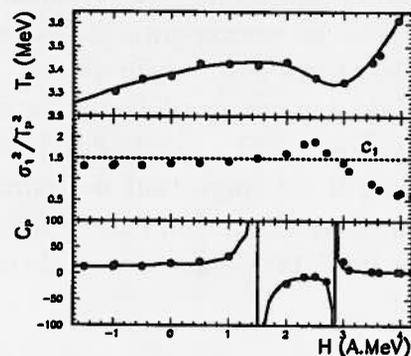


FIG. 3.6 – Haut: courbe calorique dérivée des distributions d'énergie canonique (ligne); température reconstruite à partir de l'énergie cinétique (points); Milieu: fluctuations d'énergie cinétique normalisées à T^2 (points) comparées à C_1 (tiretés); Bas: capacité calorifique dérivée de la courbe calorique (ligne) et déduite des fluctuations (points). Les droites verticales guident l'œil.

$$C = \left(\frac{\partial T}{\partial E} \right)^{-1}$$

La concordance des résultats sur la figure (3.6) montre que les fluctuations d'énergie partielle sont une bonne mesure de la capacité calorifique du système. De plus la figure illustre que l'observation de fluctuations anormalement grandes (équation 1.8) sont équivalentes à une capacité calorifique négative, c'est-à-dire supérieure à la limite canonique $C_1 T^2$.

3.2.4 Valeur moyenne et valeur la plus probable de l'enthalpie des distributions canoniques

Nous avons vu que l'ensemble des distributions canoniques en enthalpie permettent de reconstruire la courbe calorique microcanonique. Nous allons évaluer le comportement de la valeur moyenne et de la valeur la plus probable de ces distributions par rapport à la courbe calorique microcanonique. Celle-ci est reprise en ligne continue sur la figure (3.7). L'estimation de la valeur moyenne de l'énergie fournit en fait l'équation d'état canonique $\langle E \rangle$ en fonction de β . La valeur la plus probable n'a pas d'interprétation aussi simple, sauf à la limite thermodynamique des grands systèmes où elle coïncide avec la moyenne.

La valeur la plus probable de l'enthalpie fournit une unique valeur, qui correspond soit au quasi-liquide, soit au quasi-gaz. Ceci aboutit à une discontinuité de la courbe calorique dans la zone de coexistence. Cette situation rappelle la limite thermodynamique, qui dans

le cas d'un ensemble à pression constante, donne le même comportement. Ceci est tout à fait cohérent avec ce que l'on attendait : sélectionner l'enthalpie la plus probable revient à ne pas considérer le reste de la distribution de probabilité.

Considérons maintenant l'enthalpie moyenne : elle suit le comportement de l'enthalpie la plus probable, sauf dans la zone de coexistence, où la valeur moyenne donne une courbe calorifique monotone. En effet, dans le quasi-liquide ou le quasi-gaz, les distributions de probabilité sont monomodales, ce qui signifie que l'enthalpie la plus probable est approximativement l'enthalpie moyenne. La bimodalité des distributions, dans la zone de coexistence, sépare ces deux valeurs. Il est important de remarquer que calculer la valeur moyenne pour chaque β revient à considérer un ensemble canonique. Ainsi la courbe calorifique canonique ne présente aucun défaut dans la zone de coexistence.

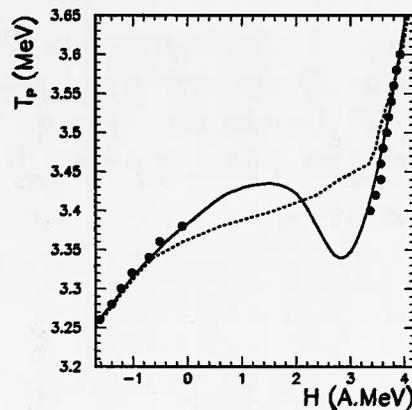


FIG. 3.7 – Courbes calorifiques microcanonique (ligne continue), canonique (tiretées), et issue de l'enthalpie la plus probable (points) pour le même système de la figure (3.4).

3.3 Tri en énergie

Dans le cas général où la pression n'est pas constante, on ne peut pas projeter sur l'enthalpie. La thermodynamique canonique dépend de deux variables β et λ de telle sorte que la distribution d'événements pour une énergie E et un volume V est :

$$P_{\beta\lambda}(E, V) = \frac{W(E, V)}{Z_{\beta\lambda}} \exp(-\beta E - \lambda V)$$

et l'ensemble microcanonique avec un volume défini en moyenne est caractérisé par les variables d'état E et λ . Pour obtenir les équations d'état, il nous faut connaître la densité d'états $W_{\lambda}(E)$

$$W_\lambda(E) = \sum_V W(E, V) \exp(-\lambda V)$$

et ces dérivées par rapport aux deux variables. En particulier la température est définie par :

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial \ln W_\lambda(E)}{\partial E} = \frac{1}{T_\lambda}$$

et la capacité calorifique est :

$$C_\lambda = \left(\frac{\partial T_\lambda}{\partial E} \right)^{-1} \Big|_\lambda$$

3.3.1 Courbe calorifique et fluctuations d'énergie cinétique

Nous avons calculé les grandeurs thermodynamiques, pour une série de λ successifs : l'ensemble des courbes calorifiques obtenues est représenté sur la figure (3.8). C'est la surface de température dans le plan (E, λ) . Sous forte contrainte ($\ln(\lambda) \simeq -6.5$) la courbe calorifique est monotone alors que pour un faible λ , une inversion de pente est observée. Ceci signifie qu'un système fortement contraint présente un comportement surcritique, alors qu'un système à faible contrainte ($\ln(\lambda) \simeq -9.0$) subit une transition de phase du premier ordre. La zone de transition est d'autant plus large en énergie que λ est faible. Cependant la gamme en température ΔT autour de la transition reste de l'ordre de 1%. La courbe calorifique critique iso- λ_C est par définition celle qui présente un point d'inflexion : des calculs précis ont montré que $\ln(\lambda_C) = -7.09$; $T_C = 4.2 \text{ MeV}$; $E_C = 2.80 \text{ MeV}$ [39].

Nous avons veillé à ce que les partitions ne soient pas sensibles aux conditions aux bords, même pour des pressions faibles, afin de travailler réellement dans un ensemble à volume moyen. Pour cela, nous avons comparé le volume moyen des partitions à celui du réseau $20 \times 20 \times 20$, $\langle V_{box} \rangle$, qui vaut approximativement (équation 2.1) :

$$\langle V_{box} \rangle = \frac{20^3}{2} = 4000$$

Sur la figure (3.9), on peut vérifier que $\langle V \rangle$ est bien inférieur à $\langle V_{box} \rangle$.

La figure (3.10) montre les fluctuations dans le plan (E, λ) : dans une région bien définie en (E, λ) , les fluctuations sont anormalement grandes. Pour les fortes contraintes, les fluctuations ne dépassent pas C_1 , ce qui est cohérent avec le comportement monotone de la courbe calorifique associée. La zone (E, λ) dans laquelle $\frac{\sigma_1^2}{T^2} > C_1$ correspond à celle d'anomalie de pente de la surface de température.

3.3.2 Entropie microcanonique

Afin d'observer la convexité de l'entropie dans la zone de coexistence, nous avons intégré la courbe calorifique pour un λ sous-critique. Ceci nous permet d'obtenir directement l'entropie, à une constante d'intégration près. Elle est représentée sur le haut de la figure (3.11) pour $\ln \lambda = -9.00$.

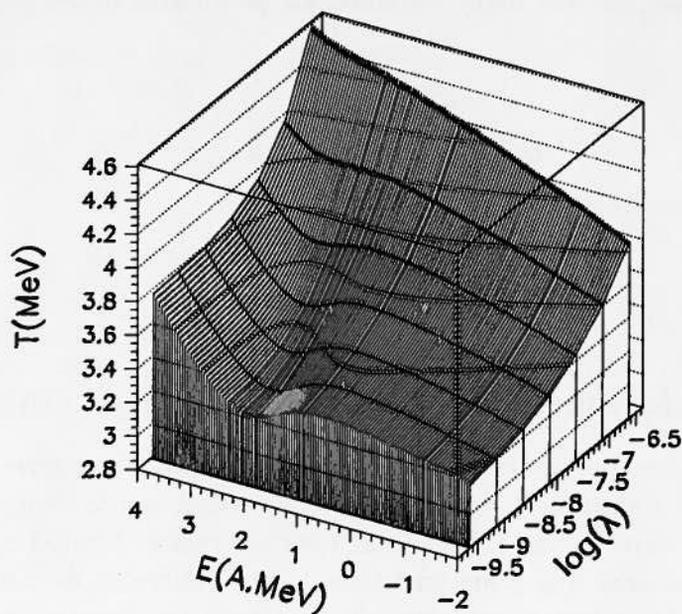


FIG. 3.8 – Equation d'état Température-Energie- λ pour un système de 216 particules.

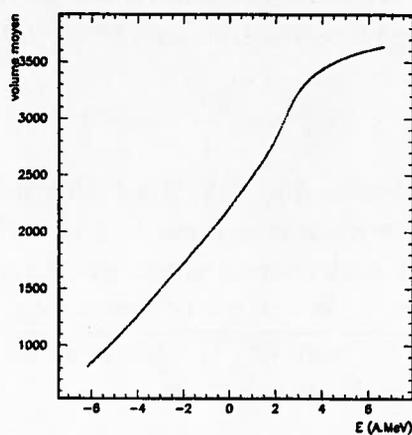


FIG. 3.9 – Volume moyen en fonction de l'énergie totale par particule pour 216 particules dans un réseau $20 \times 20 \times 20$. $\ln(\lambda) = -8.00$.

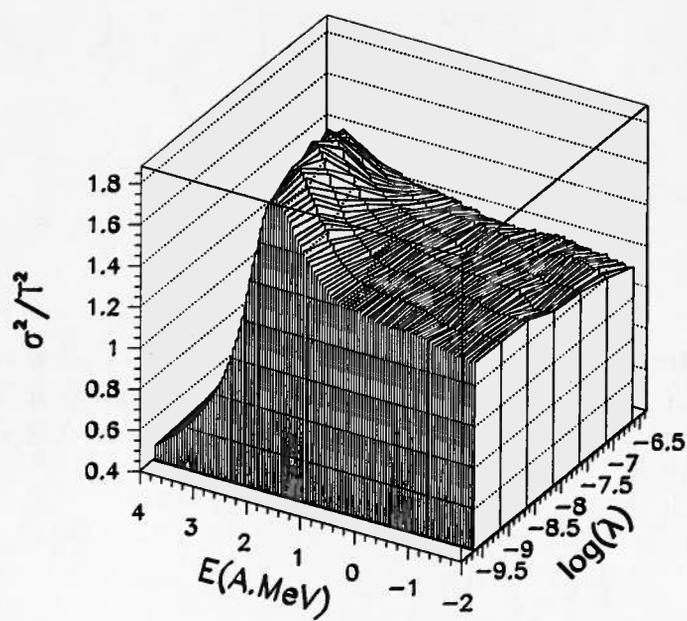


FIG. 3.10 - Fluctuations d'énergie cinétiques normalisées au carré de la température microcanonique en fonction de l'énergie et de $\ln\lambda$ pour le même système que sur la figure (3.8).

Il semble à l'œil que l'entropie ne présente aucun défaut. Elle suit un comportement quasiment linéaire dans la zone de coexistence entre l'énergie du quasi-liquide et du quasi-gaz. Nous avons considéré la partie linéaire qui rejoint les points quasi-liquide et quasi-gaz : elle peut s'écrire comme βE où β^{-1} correspond à la température de transition. Lorsque la partie linéaire est soustraite, la convexité de l'entropie apparaît. On peut vérifier que la plage en énergie sur laquelle l'entropie est convexe est la même que lorsque la courbe calorifique présente une inversion de pente sur la figure (3.8) .

Il faut noter que la mesure expérimentale d'une capacité calorifique négative implique une mesure de températures $\frac{\Delta T}{T} \sim 1\%$ ou une convexité de l'entropie $\frac{\Delta S}{S} < 1\%$.

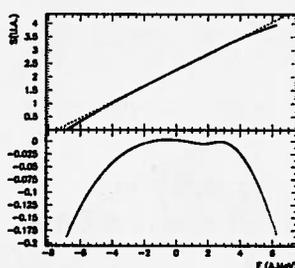


FIG. 3.11 – Haut : Entropie en fonction de l'énergie pour un système de 216 particules à $\ln\lambda = -9.00$. Elle est comparée à une fonction linéaire autour de la zone de capacité calorifique négative (tiretés) ; bas : entropie dont la partie linéaire $0.30 * E + 2.26$ a été soustraite.

3.3.3 Rôle du volume

Comme l'énergie, le volume est une variable extensive. Il est intéressant d'observer la distribution en volume dans l'ensemble isobare. C'est une variable particulièrement significative car elle est reliée au paramètre d'ordre de la transition liquide gaz.

Pour simplifier la discussion, nous étudions le volume à travers ses distributions canoniques $n_{\beta\lambda}(V)$. Quelques-unes sont représentées sur la figure (3.12). Une large gamme de volume est explorée, depuis 1500 dans le quasi-liquide jusqu'à 3800 pour le quasi-gaz. Une bimodalité apparaît sur une gamme en volume de 800 et l'ordre de grandeur typique du volume moyen vaut, dans la coexistence $\langle V \rangle \simeq 2500$, ce qui correspond à une densité $\rho/\rho_0 = A/2 \langle V \rangle = 0.04$. La corrélation moyennée sur les β entre énergie moyenne et volume moyen pour un λ donné est illustrée sur la figure (3.9). Au point critique, le volume moyen est estimé de façon précise à 2032 pm^20 .

La bimodalité de la distribution de probabilité $P_{\beta\lambda}(V)$ implique une inversion de pente dans le plan volume-pression "isochore" où l'on peut définir une pression dans l'ensemble trié en volume par :

$$P_\beta(V) = \frac{\partial S_\beta(V)}{\partial V} = \frac{\partial}{\partial V} \ln \sum_E W(E, V) \exp(-\beta E)$$

soit

$$P_\beta(V) = \frac{\lambda}{\beta} + \frac{\partial P_{\beta\lambda}(V)}{\partial V}$$

Nous avons reconstruit le diagramme P-V pour différentes isothermes sur la figure (3.13). La relation entre P_β et λ/β est la même qu'entre la température microcanonique T et la température canonique β^{-1} . En particulier si l'on a toujours $\frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \lambda} > 0$, l'inversion de pente $\frac{\partial P_\beta}{\partial V}$ correspond à une compressibilité négative.

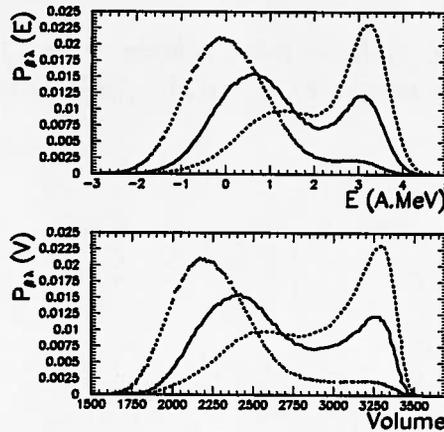


FIG. 3.12 - Haut: distributions en énergie pour $\ln(\lambda) = -8.0$ dans la zone de coexistence; $\beta^{-1} = 3.456 \text{ MeV}$ (points); $\beta^{-1} = 3.584 \text{ MeV}$ (ligne continue); $\beta^{-1} = 3.623 \text{ MeV}$ (tiretés). Bas: distributions en volume pour les mêmes (β, λ) .

3.4 Ensembles et transformations

Considérons de nouveau l'ensemble microcanonique isobare (E, λ) . Sur la figure (3.14), nous avons choisi deux transformations particulières qui traversent la zone de coexistence, *i.e.* la zone dans laquelle la surface de température présente une inversion de pente (3.8). La première transformation est à pression constante (partie gauche), la seconde à volume moyen constant (partie droite). Nous avons d'abord reconstruit la courbe calorique microcanonique dans les deux cas. Le comportement de la courbe calorique à pression constante est bien conforme à ce que l'on attend suite à l'étude menée au paragraphe 3.2. En effet, dans la zone de coexistence, les chemins à pression et à λ constant sont identiques d'un point de vue qualitatif du fait que la température y varie peu. La courbe

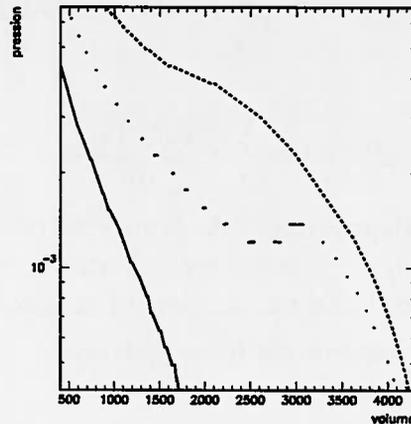


FIG. 3.13 – Isothermes dans le plan pression-volume pour 216 particules dans un réseau $20 \times 20 \times 20$: 3.1 MeV (ligne continue), 3.6 MeV (points), 4.2 MeV (ligne tiretée) à 10^{-2} MeV près.

calorique à pression constante présente donc une forte inversion de pente. En revanche, la courbe calorique à volume moyen constant ne présente pas d'inversion de pente. Ceci est cohérent avec le comportement à la limite thermodynamique, la courbe calorique à volume constant change seulement de dérivée lors de la traversée de la zone de coexistence, alors que celle à pression constante présente un plateau à l'intérieur de la zone de coexistence. Ceci est illustré sur la figure (3.15).

La deuxième partie de la figure (3.14) montre la capacité calorifique C_λ en fonction de E . Celle-ci est bien négative dans un domaine en énergie car nous avons choisi des transformations qui traversent la zone de coexistence. En bas, les fluctuations $\frac{\sigma_1^2}{T^2}$ deviennent supérieures à C_1 dans la même région, ce qui est tout à fait cohérent. Les fluctuations permettent de reconstruire la capacité calorifique de façon très précise.

Les points sur la partie centrale de la figure (3.14) représentent l'estimation de la capacité calorifique à partir des fluctuations d'énergie cinétique (équation 1.7). La différence par rapport à l'équation 3.4 représentée par la ligne tiretée donne une mesure des déviations par rapport à l'approximation gaussienne. Il est par contre évident qu'une dérivée numérique de la courbe calorique ne permettrait pas d'obtenir la même information.

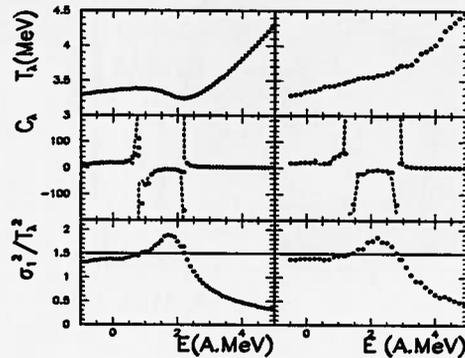


FIG. 3.14 – Haut : courbes caloriques ; Centre : C_λ calculée à partir de la courbe calorique (points) et des fluctuations (ligne tiretée) ; Bas : fluctuations d'énergie cinétique ; pour deux transformations : pr

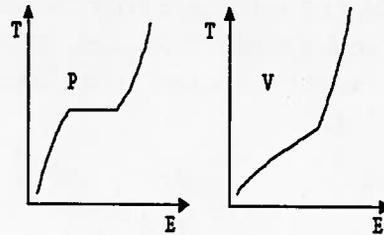


FIG. 3.15 – Courbe calorique schématique à la limite thermodynamique ; à pression constante (à gauche) et à volume constant (à droite)

En effet, dans un espace à deux dimensions, la connaissance de l'équation d'état nécessite l'exploration de l'ensemble des variables (E, λ) . Or, en général, les conditions guident le système dans une région plus ou moins restreinte de cet espace et il suit un chemin $\lambda(E)$. Les valeurs de T prises sur ce chemin donnent une forme à la courbe calorique qui peut être complexe selon la transformation $\lambda(E)$ considérée. Ceci est également valable pour la capacité calorifique $C_\lambda(E)$: les énergies de divergence tout comme la valeur de la chaleur latente et des capacités calorifiques ne sont pas les mêmes dans les deux cas considérés sur la figure (3.14) car les deux chemins $\lambda(E)$ sont différents. Cependant, si la valeur de $C_\lambda(E)$ est négative, le système est forcément dans la zone de coexistence. La différence entre C_λ et T est qu'aucune valeur spécifique de la température ne donne d'information sur la transition de phase ; c'est le comportement de la fonctionnelle $T(E)$ qui en fournit. En revanche, une valeur négative de C_λ implique que le système est dans une région de transition de phase du premier ordre. Il est important de bien différencier

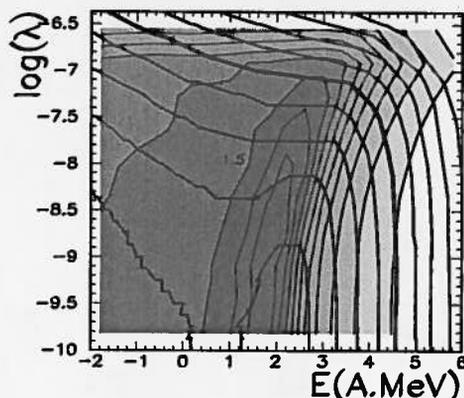


FIG. 3.16 – Projection des isothermes et des fluctuations $\frac{\sigma_1^2}{T^2}$ dans le plan $(\text{Ln}(\lambda), E)$.

la capacité calorifique extraite des fluctuations et la dérivée de la courbe calorique obtenue en suivant la transformation $\lambda(E)$. Dans la zone de coexistence, comme nous l'avons déjà observé, la courbe calorique à pression constante est très proche d'une iso- λ car la température y est approximativement constante et la dérivée de la courbe calorique n'est qualitativement pas différente de C_λ :

$$C_\lambda \simeq \left. \frac{dT}{dE} \right|_P$$

Par contre la dérivée de la courbe calorique à volume moyen constant est très différente de C_λ . En effet, elle reste positive. Ceci est dû à des variations rapides de λ sur ce chemin $\langle V \rangle_\lambda(E) = \text{constant}$:

$$\left. \frac{dT_\lambda}{dE} \right|_V = \left. \frac{\partial T}{\partial E} \right|_\lambda + \left. \frac{\partial T}{\partial \lambda} \right|_E \frac{\partial \lambda}{\partial E}$$

ce qui s'écrit dans ce cas :

$$C_V = C_\lambda + \left. \frac{\partial T}{\partial \lambda} \right|_E \frac{\partial \lambda}{\partial E}$$

Ainsi la courbe calorique dépend du chemin suivi et ne peut donner un accès direct à l'équation d'état (équation 3.2) si le chemin n'est pas connu. Les fluctuations d'énergie cinétique ne dépendent pas de l'état et elles mesurent directement l'équation d'état. Si $C_\lambda < 0$, le système est dans la région de coexistence et les fluctuations anormalement grandes signalent la transition de phase indépendamment de la transformation.

Ceci est plus clairement mis en évidence par la figure (3.16), où les isothermes, ainsi que les fluctuations d'énergie cinétique, sont projetées dans le plan (E, λ) . La partie dans le gris le plus foncé représente des fluctuations supérieures à 1.5. Les isothermes présentent

un défaut de courbure dans cette région. L'isotherme critique est représentée en gras ; elle tangente sur l'isocontour $\frac{\sigma^2}{T^2} = 1.5$.

3.5 Effets de taille finie

Les grandeurs thermodynamiques utilisées précédemment ont été données pour un système de 216 particules. Afin d'étudier la modification de la thermodynamique avec la taille du système, nous avons fait la même analyse pour un système de 40 particules. Cela nous a permis de vérifier l'approximation gaussienne de l'équation 1.5 ; l'additivité des capacités calorifiques partielles $C = C_1 + C_2$; la relation entre C_1 et σ_1^2 (équation 1.7) ; l'utilisation de l'énergie cinétique comme thermomètre. Nous avons calculé la courbe calorifique et la capacité calorifique pour $A=40$ dans l'ensemble microcanonique à pression constante, et $P = 5.10^{-4} MeV$. Nous avons comparé les résultats à $A = 40$ à ceux obtenus précédemment pour $A = 216$ sur la figure (3.17).

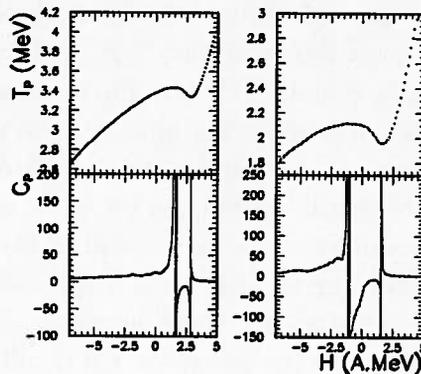


FIG. 3.17 - Haut : courbes calorifiques, Bas : capacités calorifiques ; pour un système de 216 (gauche) et 40 (droite) particules à une pression de $5.10^{-4} MeV$. Les lignes verticales guident l'œil.

Pour une masse plus petite, l'enthalpie pour laquelle se produit la transition est plus basse. Ceci s'explique par les surfaces, beaucoup plus importantes dans un petit système, qui le fragilisent. La température de transition est plus basse (environ $2 MeV$ au lieu de 3.5). Toutefois en augmentant la pression nous pouvons faire croître cette température. Cela ne signifie donc pas que la température critique est abaissée. La chaleur latente est deux fois plus grande. Les divergences de C sont toujours aussi bien définies.

3.6 Volume constant

Les modèles de type Ising ne considèrent en général pas un système ouvert. Le volume y est défini par les conditions aux bords. Or la thermodynamique doit être différente selon la façon dont est contraint le volume du réseau. En effet, dans le cas d'un volume défini par les conditions aux bords, les fluctuations en volume (figure (3.12)) sont contraintes par les bords. Ainsi les distributions de probabilité des événements seront différentes par rapport à celles étudiées aux chapitres précédents, où le volume était contraint en moyenne. Nous nous plaçons dans l'ensemble microcanonique isochore, pour comparer directement l'effet de la définition du volume dans un cadre microcanonique avec l'ensemble isobare étudié précédemment. Le volume du réseau est noté dans la suite V_{box} . Dans la limite $V_{box} \rightarrow \infty$, cet ensemble est équivalent à l'ensemble isobare à pression nulle.

Nous avons d'abord considéré le réseau de taille $11 \times 11 \times 11$ avec 216 particules. La densité d'un tel système est très faible par rapport aux précédentes : $\rho/\rho_0 = 216/11^3$. L'entropie est calculée grâce à un tri en énergie de l'ensemble canonique, selon la prescription donnée en début de chapitre. Nous avons représenté sur la figure (3.18) les distributions d'énergie canoniques pour différents β . *Aucun* défaut de courbure n'apparaît, quelle que soit la température canonique et les distributions d'énergie canoniques sont gaussiennes. Le logarithme des distributions canoniques d'énergie étant l'entropie à une fonction linéaire près, cela signifie que l'entropie n'a pas d'anomalie de courbure.

Une étude approfondie a été effectuée afin de déterminer si ce comportement se retrouve pour tous les volumes. La figure (3.19) montre la courbe calorique et les fluctuations d'énergie cinétiques σ_1^2/T^2 pour les volumes $6A$ et $27A$. Si le volume est "petit" ($6A$), la courbe calorique ne présente aucun défaut [17] et les fluctuations sont toujours inférieures à C_1 . Pour un très grand volume, des résultats analogues à ceux de l'ensemble isobare sont retrouvés. Ceci s'explique par le fait que des petits volumes contraignent fortement les partitions ; dans un grand volume le système n'est plus sensible aux conditions aux bords et l'on se retrouve effectivement dans un ensemble isobare ; dans ce cas, c'est le volume des partitions, ou l'encombrement, que nous avons associé au volume moyen qui contient les informations. En conclusion, de façon générale, l'ensemble isochore ne présente pas en général de capacité calorifique négative. Ce résultat est cohérent avec le fait que dans les systèmes infinis C_V ne diverge pas. Il a été démontré [6] qu'en fait la divergence et le comportement anormal se trouvent dans la pression et le potentiel chimique. La compressibilité et la susceptibilité sont négatives. Les conditions aux limites sont donc essentielles pour la thermodynamique des petits systèmes. Toutefois il faut noter que dans les expériences le volume n'est jamais défini par des conditions aux limites telles que celles de l'ensemble isochore. Les fluctuations de volume n'étant pas contrôlées, il semble que l'ensemble isobare soit mieux adapté à l'étude des systèmes ouverts.

3.7 Zone de coexistence

La zone de coexistence canonique dans le modèle du gaz sur réseau [14] a été déterminée avec un volume défini par les conditions aux bords. Elle est symétrique par rapport à $\rho/\rho_0 = 0.5$. Nous allons évaluer l'influence du choix de l'ensemble statistique et d'un

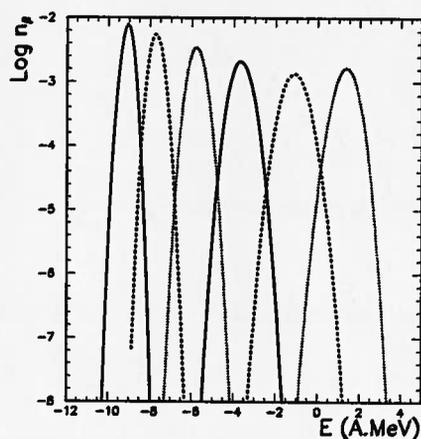


FIG. 3.18 – Logarithme des distributions de probabilité pour 216 particules dans un réseau $11 \times 11 \times 11$. Le volume est défini par les conditions aux bords.

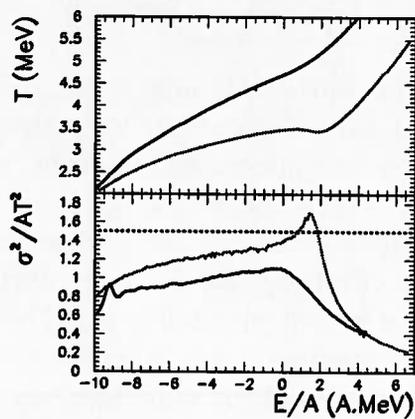


FIG. 3.19 – Haut : courbe calorique pour 216 particules dans le cas de deux volumes définis par les conditions aux bords : $6V_0$ (ligne continue) et $27V_0$ (ligne pointillée). Bas : Fluctuations d'énergie cinétique pour les mêmes volumes ; la ligne tiretée représente C_1 .

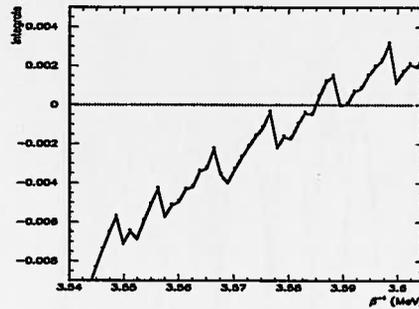


FIG. 3.20 – Intégrale de Maxwell pour $\ln\lambda = -8.00$: elle est nulle à la température de transition.

volume défini en moyenne.

3.7.1 Détermination de la zone de coexistence

Nous avons déterminé la zone de coexistence selon deux approches : la construction de Maxwell et l'étude des distributions en énergie. Dans le plan $1/T$ (intensif) en fonction de E (extensif), on recherche la température de transition T_{trans} dans la construction de Maxwell :

$$\int_{E_L}^{E_G} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{trans}} \right) dE = 0 \quad (3.6)$$

où E_L et E_G sont deux points de la courbe calorique à T_{trans} . Ceci revient à remplacer la zone d'inversion de pente de la courbe calorique par un plateau à la température T_{trans} , de telle sorte que lorsque l'on regarde l'inverse de la courbe calorique $1/T(E)$, les aires en-dessus et en-dessous de T_{trans}^{-1} soient égales. Le calcul de T_{trans} par cette méthode est illustré sur la figure (3.20). Nous avons calculé l'intégrale (équation 3.6) pour une série de températures T_{trans} . Nous effectuons ensuite une interpolation autour du zéro de l'intégrale. L'erreur sur T_{trans} est d'autant plus faible (de l'ordre de 1% que nous avons fait le calcul de l'intégrale pour de nombreux points (environ 300).

Les fluctuations visibles sur la figure (3.20) sont dues aux erreurs statistiques sur la courbe calorique qui affectent l'intégrale mais aussi les bornes de l'intégrale.

Une autre façon de déterminer la zone de coexistence consiste à utiliser les distributions canoniques $n_\beta(E)$:

$$n_\beta(E) = \frac{W(E)}{Z_\beta} e^{-\beta E}$$

qui est bivaluée dans la région où $S = \ln W$ est convexe. Lorsque le quasi-liquide et le quasi-gaz ont la même hauteur :

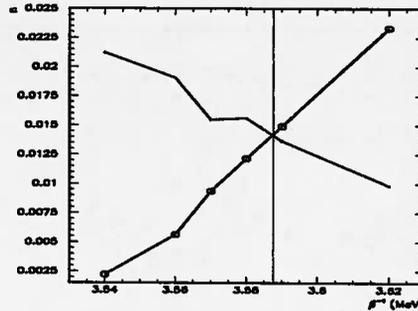


FIG. 3.21 – Hauteur des pics de probabilité en énergie pour $\ln(\lambda) = -8.00$; les points noirs correspondent à la phase quasi-liquide (branche (1)); les ronds à la phase quasi-gazeuse (branche (2)). L'intersection des deux donne la température de transition en abscisse (ligne verticale).

$$n_{\beta}(E_L) = n_{\beta}(E_G)$$

ce qui implique que :

$$S(E_G) - S(E_L) = \beta(E_2 - E_1)$$

En écrivant $dS = \frac{dE}{T}$, on aboutit directement à la construction de Maxwell (équation 3.6). La température de transition T_{trans} est donc celle pour laquelle les hauteurs des distributions canoniques de quasi-liquide et de quasi-gaz sont les mêmes. Afin d'estimer au mieux cette température, nous avons mesuré la hauteur de chaque pic pour différentes températures canoniques autour de la transition. Pour $\ln\lambda = -8.00$, la méthode est représentée sur la figure (3.21). T_{trans} est l'intersection des branches (1) et (2).

Les deux méthodes sont physiquement équivalentes. Toutefois leur mise en place est très différente du point de vue numérique. L'accord des résultats est une confirmation supplémentaire de la qualité de l'échantillonnage Metropolis. Par exemple, sur les calculs présentés ici $\ln\lambda = -8.00$, la température donnée par la construction de Maxwell est $3.590 \pm 0.002 \text{ MeV}$; par la méthode des maxima, $3.588 \pm 0.002 \text{ MeV}$.

3.7.2 Résultats

La zone de coexistence énergie- λ est représentée sur la figure (3.22) et en température- λ sur la figure (3.23). De façon équivalente, elle est représentée sur la figure (3.24) dans le plan température-volume moyen. Le point critique est situé au sommet de la zone de coexistence, approximativement à l'énergie $E_C = 2.75 \text{ MeV}$ et $\text{Log}(\lambda) = -7.05$. Cette dernière figure est très différente de celle obtenue dans un calcul canonique en Température-Volume comme les calculs de la référence [14] ou Température-Densité de [20] en système fini. En effet, certaines transformations à volume moyen constant traversent deux fois la zone de coexistence.

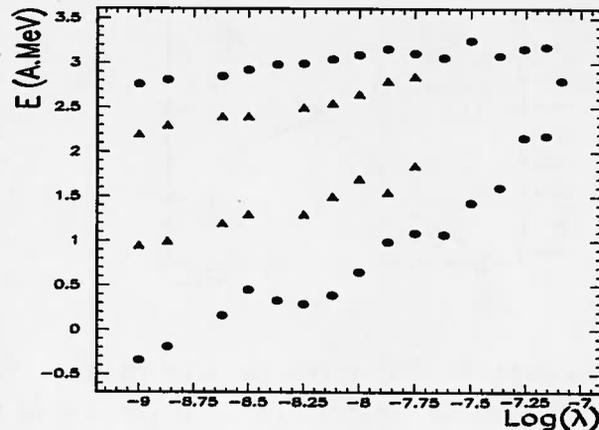


FIG. 3.22 – Zone de coexistence microcanonique en énergie - λ pour $A=216$ particules (points) et zone de capacité calorifique négative (triangles).

Nous avons en outre représenté la région de capacité calorifique négative sur la figure (3.22). Elle est à l'intérieur de la zone de coexistence et a le même sommet et n'est pas symétrique.

Or ces calculs ne sont pas directement comparables. En effet, [14] est effectué dans l'ensemble canonique dans un volume fixé, et nous avons calculé la zone de coexistence dans l'ensemble microcanonique à volume défini en moyenne. D'un point de vue de l'ensemble, pour les mêmes conditions de température et de densité, les partitions canoniques et microcanoniques sont différentes. Par exemple, à basse température, différents types de partitions coexistent dans l'ensemble canonique (car l'énergie peut fluctuer); dans l'ensemble microcanonique, seules les partitions compactes subsistent. Les diagrammes de phase ne sont donc pas forcément identiques. En outre, la "variable volume" n'est pas la même dans les deux cas.

3.8 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre caractérisé la transition de phase du premier ordre dans le modèle du gaz sur réseau pour un système fini. Nous avons vérifié que les hypothèses de validité des signaux du chapitre (1) étaient vérifiées déjà pour des systèmes aussi petits que $A = 40$. Ainsi nous avons mis en évidence une capacité calorifique négative, que l'on peut signer par des fluctuations d'énergies cinétiques "anormales". Celles-ci deviennent supérieures à la capacité calorifique cinétique dans la zone de coexistence. Elles ne dépendent pas du chemin suivi et signent sans ambiguïté la transition. Les distributions d'énergie canoniques permettent de remonter directement à l'entropie microcanonique et à ses dérivées. Une zone convexe dans l'entropie, même petite, est mise en évidence par une

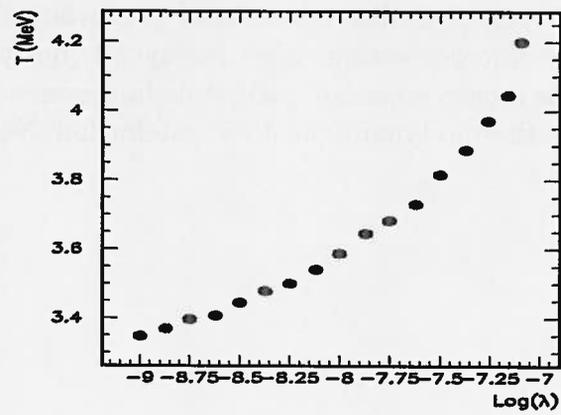


FIG. 3.23 – Zone de coexistence microcanonique en température- λ .

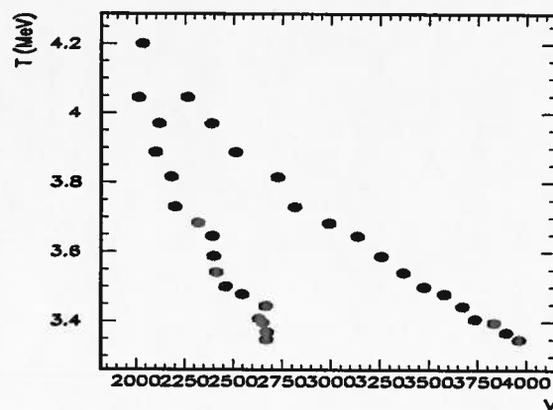


FIG. 3.24 – Zone de coexistence microcanonique en température-volume moyen pour $A=216$ particules.

bimodalité de ces distributions. L'introduction du volume moyen comme observable induit la définition d'un ensemble statistique avec deux multiplicateurs de Lagrange. Le rôle essentiel joué par le volume se retrouve dans ses distributions de probabilité, qui présentent également une bimodalité. Ceci nous a permis d'extraire un diagramme pression-volume dans lequel une inversion de pente, similaire à celle de la courbe calorique, est présente. Enfin, la zone de coexistence microcanonique n'est pas symétrique par rapport à $\rho_0/2$ et une transformation à volume moyen constant permet de la traverser deux fois.

Nous avons reconstruit la thermodynamique d'un système fini. Nous allons maintenant nous intéresser aux fragments.

Chapitre 4

Généralisation de la définition des transitions de phase

Nous avons mis en évidence, dans les chapitres (1) et (3), une anomalie dans la thermodynamique comme signal de transition de phase. Celle-ci s'exprime, dans l'ensemble microcanonique, par un défaut de concavité dans l'entropie en fonction de l'énergie. Dans un premier temps, nous montrerons que cette anomalie n'est pas spécifique au choix de l'ensemble statistique. Ceci nous amènera à généraliser la définition de transition de phase à tout défaut de courbure dans les distributions de probabilité des événements. Nous nous approcherons ensuite de la limite thermodynamique afin de vérifier que les signaux que nous obtenons en système fini ont le comportement attendu d'une transition de phase liquide-gaz dans le système infini.

Au chapitre (1), nous avons mis en évidence le lien entre bimodalité des distributions de probabilité canoniques à la température β^{-1} , $P_\beta(E)$, et une capacité calorifique négative. Ainsi la distribution de probabilité canonique reflète les propriétés de l'ensemble microcanonique car elle contient explicitement la densité d'états $W(E)$. Nous allons montrer qu'il existe une anomalie du même type dans l'ensemble grand-canonique.

4.1 Anomalies dans l'ensemble grand-canonique

Dans l'ensemble grand-canonique, on a accès aux grandeurs associées à l'ensemble canonique grâce à la distribution de probabilité

$$P_{\beta\alpha}(E, A) = \frac{W(E, A)}{Z_{\beta\alpha}} e^{-\beta E + \alpha A} \quad (4.1)$$

A est le nombre de particules et $\exp(\alpha)$ la fugacité. α est le multiplicateur de Lagrange associé à la valeur moyenne du nombre de particules $\langle A \rangle$ qui peut s'obtenir à partir du grand potentiel $\mathcal{F} = -\frac{\ln Z_{\beta\alpha}}{\beta}$:

$$\langle A \rangle = -\beta \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \alpha}$$

Dans l'ensemble canonique, $\bar{\alpha}$ n'est pas une contrainte extérieure. Elle est donnée par la variation de l'énergie libre F définie à partir de la fonction de partition canonique :

$$F = -T \ln Z_\beta(N)$$

et

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{T} \frac{\partial F}{\partial N}$$

Le logarithme de la fugacité canonique est reliée à la distribution en nombre de particules grand-canonique (et bien sûr au logarithme de la fugacité grand-canonique) à partir de la relation 4.1 :

$$\bar{\alpha} = -\frac{\partial \ln P_{\beta\alpha}(E, A)}{\partial A} + \alpha$$

La forme de cette expression est analogue à celle reliant la température microcanonique T et la distribution canonique d'énergie (équation 3.2) que nous avons obtenue au chapitre (3) :

$$T^{-1}(E) = \frac{\partial \ln P_\beta(E)}{\partial E} - \beta$$

S'il y a transition de phase, le potentiel thermodynamique $F = -T \ln Z_\beta$ peut avoir un défaut de courbure en fonction de A , de la même façon que S peut avoir un défaut de courbure en fonction de l'énergie dans l'ensemble microcanonique. Sa dérivée première par rapport à A , le potentiel chimique $\bar{\mu} = \bar{\alpha}/\beta$, présente une inversion de pente, où A joue le rôle d'une variable contrôlée [14] ou [6] [58].

4.1.1 Distribution en volume

Nous allons présenter ici un second exemple : celui du volume dans la transition l'quide gaz. Pour cela considérons l'ensemble des partitions contraintes par leur énergie moyenne $\langle E \rangle$ et leur volume moyen $\langle V \rangle$. La distribution de probabilité s'écrit :

$$P_{\beta\lambda}(E, V) = \frac{W(E, V)}{Z_{\beta\lambda}} e^{-\beta E - \lambda V} \quad (4.2)$$

où $W(E, V)$ est la densité d'états dont l'énergie est entre E et $E+dE$ et le volume entre V et $V+dV$. $Z_{\beta\lambda}$ est la fonction de partition associée aux deux paramètres de Lagrange β et α . La densités d'états $W(E, V)$ donne accès à l'entropie $S(E, V) = \ln W(E, V)$ et donc aux équations d'état :

$$T^{-1} = \frac{\partial S}{\partial E}$$

et

$$P = -T \frac{\partial S}{\partial V}$$

A partir de la probabilité canonique 4.2, il est naturel de trier les événements selon les deux observables E et V , et les représenter en fonction de ces deux variables, comme

le montre la figure (4.1). Cette figure est issue de [58]. Le tri donne directement accès à la densité d'états $W(E,V)$. Elle présente deux régions favorisées, que l'on associe au liquide ($E \simeq 30MeV$, $V \simeq 32$) et au gaz ($E \simeq 120MeV$, $V \simeq 44$). Ainsi, la bimodalité observée au chapitre (2) simultanément en énergie et en volume provient de la projection sur l'axe des énergies ou des volumes de $W(E,V)$. En effet puisque $\ln P_{\beta\lambda}(E,V)$ est $S(E,V) - \beta E - \lambda V - \ln Z_{\beta\lambda}$, les courbures de $\ln P_{\beta\lambda}(E,V)$ sont celles de l'entropie. On voit ici qu'à la fois la capacité calorifique et la compressibilité sont négatives.

Si le volume ne peut être mesuré, la distribution de probabilité s'écrit :

$$P_{\beta\lambda}(E) = \frac{W_{\lambda}(E)}{Z_{\beta\lambda}} e^{-\beta E}$$

où $W_{\lambda}(E)$ est la densité d'états intégrée sur le volume avec une poids $e^{-\lambda V}$ à λ constant :

$$W_{\lambda}(E) = \int W(E,V) e^{-\lambda V} dV$$

i.e. la densité d'états microcanonique à λ constant. Ainsi la capacité calorifique, définie comme la dérivée seconde de l'entropie qui est liée à la densité de probabilité, sera négative dans la zone convexe. D'autre part, si seul le volume est mesuré :

$$P_{\beta\lambda}(V) = \frac{W_{\beta}(V)}{Z_{\beta\lambda}} e^{-\lambda V}$$

où $W_{\beta}(V)$ est la fonction de partition intégrée à β . C'est la densité d'états canonique à volume constant : comme on le voit sur la projection de la figure (6.8) la compressibilité devient négative dans la zone de transition.

$W(E,V)$ présente une direction privilégiée selon laquelle le liquide et le gaz sont le mieux séparés. Ceci définit le paramètre d'ordre de la transition, c'est une combinaison linéaire de E et de V . La distribution des événements a été projetée sur cet axe. La bimodalité y est nettement mise en évidence, elle est plus marquée que sur l'axe de l'énergie ou du volume. Elle est représentée sur la figure (6.8). En conclusion, la connaissance de l'énergie et du volume du système dans la transition du premier ordre liquide-gaz permet de définir le paramètre d'ordre comme une combinaison linéaire de l'énergie et du volume. Cependant, lorsque l'une des informations manque *i. e.* l'une des observables n'est pas mesurée, les signaux de transitions de phase subsistent dans les variables mesurées à travers une capacité calorifique négative ou une compressibilité négative. La mesure d'un ensemble d'observables conduit à changer d'ensemble statistique, et en conséquence les signaux de transition de phase.

4.1.2 Ensembles non extensifs

La définition d'une transition de phase à travers un défaut de courbure des distributions de probabilité peut être généralisée à des ensembles non extensifs, comme celui défini par Tsallis [59]. Selon lui, des systèmes hors du cadre de la définition de l'équilibre de Boltzmann-Gibbs, ou par exemple des états hors équilibre indépendants du temps (turbulences) peuvent conduire à une non-extensivité, qui se ramène à l'introduction d'un

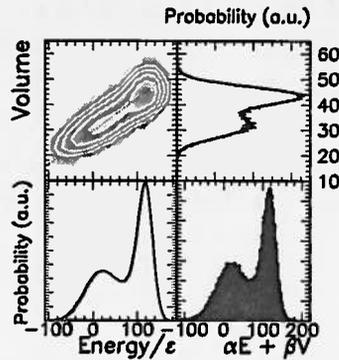


FIG. 4.1 – *Haut*: Distribution des événements dans le plan énergie-volume (gauche) et paramètre d'ordre (ligne pointillée); projection sur le volume (droite); *Bas*: projection sur les énergies (gauche); projection sur le paramètre d'ordre (droite). Le système contient $A = 216$ particules. Le volume est exprimé en unités de réseau au cube $/A$.

“paramètre de non-extensivité” q . Pour deux ensembles indépendants \mathcal{A} et \mathcal{B} , l'entropie totale $S_q(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ s'exprime en fonction des entropies partielles $S_q(\mathcal{A})$ et $S_q(\mathcal{B})$:

$$S_q(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = S_q(\mathcal{A}) + S_q(\mathcal{B}) + (1 - q)S_q(\mathcal{A})S_q(\mathcal{B})$$

On peut montrer [60] que le terme $p \ln p$ qui apparaît dans l'entropie de Shannon (chapitre (1), section (4.1.)) doit être remplacé par :

$$p \ln p \rightarrow \frac{1}{q-1} p(p^{q-1} - 1)$$

L'équilibre de Gibbs est retrouvé dans le cas extensif pour $q = 1$. Dans l'ensemble canonique de type Tsallis, la probabilité de l'état d'énergie E à β s'écrit

$$P_{q,\beta}(E) = \frac{W(E)}{Z_{q,\beta}} (1 + q_1 \beta E)^{-q/q_1}$$

en posant $q_1 = q-1$. Sans entrer dans le débat actuel sur la pertinence et la validité de cette entropie non extensive ou la signification physique du paramètre q , la distribution $P_{q,\beta}(E)$ peut être vu comme un exemple générique de distribution hors équilibre dans laquelle le lien entre probabilité des états et potentiel thermodynamique n'est pas directe: en particulier les dérivées successives des distributions de probabilité ne sont pas équivalentes à des dérivées successives de l'entropie. Pour un tel système hors équilibre, la définition de transition de phase comme défaut de courbure du potentiel thermodynamique perd sa signification, mais il est toujours possible d'utiliser la définition basée sur la bimodalité des distributions de probabilité. Nous allons montrer que si l'on interprète les distributions en

énergie comme une entropie généralisée, un signal de transition de phase peut encore être observé pour un tel ensemble hors équilibre. Pour cela nous appliquons la même méthode que celle développée au chapitre (3) pour déterminer les propriétés du système dans la zone de coexistence. L'énergie la plus probable \bar{E} annule la dérivée première de $\ln P_{q,\beta}$ pour un température microcanonique \bar{T} :

$$\frac{\partial \ln P_{q,\beta}(E)}{\partial E} \Big|_{E=\bar{E}} = 0 \rightarrow \bar{T} = \frac{1}{q} \left(\frac{1}{\beta} + q_1 \bar{E} \right) = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \Big|_{\bar{E}} \right)^{-1}$$

La capacité calorifique microcanonique \bar{C} vaut \bar{C} telle que :

$$\frac{\partial^2 \ln P_{q,\beta}(E)}{\partial E^2} \Big|_{\bar{T}} = -\frac{1}{\bar{T}^2 \bar{C}} + \frac{q_1 q \beta^2}{(1 + q_1 \beta \bar{E})^2}$$

Le deuxième terme de cette équation correspond à une correction par rapport à l'ensemble canonique, due au paramètre q . En effet, d'après [59], la limite $q \rightarrow 1$ correspond à l'ensemble canonique. Nous vérifions ici que $q = 1$ annule le terme supplémentaire. Au point critique de l'ensemble de Tsallis, la dérivée seconde de $\ln P_{q,\beta}(E)$ est nulle à \bar{T} et :

$$\bar{C} = \frac{q}{q_1}$$

Si $q_1 \rightarrow 0$, on retrouve le résultat $C \rightarrow \infty$ déterminé comme valeur critique dans l'ensemble microcanonique. Toutefois si dans l'ensemble de Tsallis on détermine le point critique par la disparition de la bimodalité, *i.e.* l'annulation de la dérivée seconde de $\ln P_{q,\beta}(E)$, cela se passe à $\bar{C} = \frac{q}{q_1}$. Si $q_1 > 0$, le point critique dans un tel ensemble non extensif est atteint pour une capacité calorifique microcanonique positive qui ne diverge pas, *i.e.* à pression plus élevée que dans l'ensemble canonique.

4.2 La limite thermodynamique

4.2.1 Courbe calorique

Il est intéressant de vérifier que les signaux de transition de phase que nous observons dans le système fini correspondent bien à une transition de phase liquide-gaz dans le système infini. Il est possible d'appliquer le "finite size scaling" pour trouver les exposants critiques, qui doivent tendre vers ceux du système infini lorsque la taille du système augmente. Le "finite size scaling" pour les transitions de phase du premier ordre peut aussi être appliqué en évaluant le comportement de la chaleur latente en fonction de la taille du système [61]. Dans cette thèse nous avons défini des changements d'états dans des systèmes finis. Ceci nous permet de comprendre le système fini [5], mais il est important de savoir dans quelle mesure les signaux proposés survivent à la limite thermodynamique. En particulier, nous avons associé une transition de phase à un défaut de courbure dans les distributions de probabilité et une phase à une distribution de probabilité monomodale. Ces transitions, que nous avons assimilées à des transitions de phase liquide-gaz du premier ordre, peuvent ne pas subsister à la limite thermodynamique. Celle-ci est définie pour un nombre de particules infini $N \rightarrow \infty$, tout en conservant la densité N/V

finie. Lorsque le nombre de particules augmente, la largeur statistique des distributions de probabilité diminue en \sqrt{N} . Ainsi, seul le pic le plus haut subsiste et aboutit à soit le liquide, soit le gaz. Ceci justifie qu'à pression constante, la courbe calorique présente un plateau à la limite thermodynamique. D'un point de vue pratique, dès qu'un système devient macroscopique, on s'attend à ce que les distributions de probabilité deviennent approximativement normales pour toute température T différente de la température de transition ; la transition de phase sera donc signalée par un saut en énergie, de façon compatible avec la thermodynamique classique. Il est toutefois intéressant de remarquer qu'une discontinuité à la température de transition dans la distribution de probabilité peut être obtenue seulement quand le nombre de particules est véritablement infini : formellement la définition en termes d'anomalie de convexité ne limite donc pas sa validité aux systèmes véritablement petits comme les systèmes nucléaires mais demeure rigoureusement correcte pour tout système physique petit.

Afin de justifier pleinement cette approche intuitive, des calculs, une possibilité consiste à se placer dans des réseaux de grande taille, comportant un grand nombre de particules ; ceci est difficile à mettre en oeuvre numériquement, et nous n'avons pas pu entreprendre une série de calculs afin de converger vers la limite thermodynamique. De tels calculs ont été menés en partie par Pleimlig et Hüller [61]. Malheureusement à volume constant, ce qui ne correspond pas au système présentant une divergence de capacité calorifique, la courbe calorique reste monotone jusqu'à des valeurs de taille longitudinale de réseau de 250. Au-delà, une inversion de pente apparaît et s'accroît lorsque la taille du réseau augmente. Ceci va à l'encontre de toute intuition si la densité n'est pas excessivement basse. En effet, à volume constant, on s'attend à la limite thermodynamique à observer un point anguleux au passage de la ligne de coexistence. Or chercher un point anguleux de la courbe calorique à volume (ou magnétisation dans le modèle d'Ising) constant est difficile, même avec une grande maîtrise de la numérique. Ceci revient à chercher un point anguleux dans les distributions de probabilité. En fait les distributions sont très analogues qu'il y ait transition ou non quand on travaille à volume constant. Ainsi des calculs à pression constante signeraient de façon plus précise le comportement asymptotique à la limite thermodynamique.

4.2.2 Zéros de la fonction de partition

Une approche analytique permet d'établir des conditions suffisantes pour que l'anomalie des distributions de probabilité observée dans les systèmes finis devienne une transition de phase à la limite thermodynamique. Dans un système infini, et dans l'ensemble canonique, toute discontinuité du potentiel thermodynamique $-T \ln Z$ est relié à l'annulation de Z . Cela se produit à la température de transition. Pour un système fini, la fonction de partition reste analytique. En considérant le plan complexe des températures, ses zéros se répartissent dans l'ensemble du plan, sauf sur l'axe réel. Le comportement des zéros est paramétrisé par leur distribution angulaire et leur densité [62] [26] [63]. Cette méthode est déjà utilisée dans les systèmes finis pour déterminer l'occurrence de transitions de phase du premier ordre [26]. La survivance à l'infini est déterminée par une extrapolation de la répartition des zéros du système fini. En particulier, pour qu'il y ait transition de phase du premier ordre, les zéros doivent asymptotiquement se répartir à égale distance sur une

droite perpendiculaire à l'axe des températures réelles (théorème du cercle unité de Lee et Yang [1]).

Nous allons maintenant vérifier que lorsque la bimodalité persiste quand $N \rightarrow \infty$, le système subit une transition de phase du premier ordre selon la définition basée sur les zéros de la fonction de partition. La fonction de partition s'écrit comme la transformée de Laplace de la densité d'états $W(E)$:

$$Z(\beta) = \int W(E)e^{-\beta E} dE$$

Cette intégrale est complexe, si l'on utilise β température complexe. Nous l'écrivons sous une forme réduite en prenant comme référence la température β_0^{-1} de telle sorte que :

$$Z(\beta) = z(b) = \int w(x)e^{bx} dx$$

ayant posé $x = \beta_0 E$ et $b = 1 - \beta/\beta_0$; $w(x) = \frac{1}{\beta_0} e^{-\beta_0 E} W(E)$ est aussi la distribution canonique d'énergie à la température β_0 à une constante près.

Si la distribution de probabilité totale est la somme de deux contributions w_1 et w_2 (ici liquide, noté 1, et gaz, noté 2), la fonction de partition s'exprime simplement en fonction des potentiels thermodynamiques partiels ψ_1 et ψ_2 comme suit. On définit ainsi la fonction de partition complexe de la contribution i :

$$z_i(b) = \int w_i(x)e^{bx} dx$$

et le potentiel thermodynamique partiel associé :

$$\psi_i(b) = \ln z_i(b)$$

Ainsi la fonction de partition $Z(b)$ s'écrit

$$Z(b) = 2e^{\bar{\psi}(b)} \cosh(\Psi(b))$$

ayant posé $\bar{\psi}(b) = \frac{1}{2}(\psi_1(b) + \psi_2(b))$ et $\Psi(b) = \frac{1}{2}(\psi_1(b) - \psi_2(b))$. Les zéros de la fonction de partition correspondent donc aux températures réduites telles que $\Psi(b)$ corresponde à un zéro de la fonction cosh. Cela correspond à :

$$i(2k+1)\frac{\pi}{2} = \Psi(b)$$

Afin de résoudre cette équation de façon simple, nous faisons une approximation gaussienne sur la forme des distributions de probabilité. Cette hypothèse est d'autant plus valide que la taille du système est grand (paragraphe 2.3.) :

$$w_i(x) = a_i e^{-\frac{(x-x_i)^2}{2\sigma_i^2}}$$

Ainsi l'équation précédente se ramène à une équation du second ordre en b :

$$\ln \left(\frac{a_1}{a_2} \right) - b(x_2 - x_1) + \frac{1}{2}(\sigma_2^2 - \sigma_1^2)b^2 = (2k+1)i\pi$$

Les solutions b_k se simplifient lorsque $a_1 = a_2$ et $\sigma_1^2 = \sigma_2^2$ [65]:

$$b_k = \frac{(2k + 1)i\pi}{x_1 - x_2}$$

Ceci démontre la répartition régulière des zéros sur un axe perpendiculaire à l'axe des réels: si la distribution peut être paramétrisée comme la somme de deux gaussiennes et la distance entre les deux maxima grandit comme la taille du système, la transition de phase existe à la limite thermodynamique et elle est du premier ordre.

Chapitre 5

Analyse des fragments

D'un point de vue phénoménologique, il est souvent plus facile d'accéder aux fragments qu'aux grandeurs thermodynamiques. Cependant, les informations qu'ils nous apportent n'ont pas de lien simple avec la thermodynamique, sauf à proximité du point critique thermodynamique. Il possède des propriétés spécifiques issues du groupe de renormalisation, qui y implique des propriétés d'invariance d'échelle et qui se traduisent par la loi d'échelle. Elle est universelle et ne dépend pas des détails de l'interaction, car la longueur de corrélation devient infinie au point critique. Ainsi, La connaissance du nombre de dimensions de l'espace physique et de la dimension du paramètre d'ordre permet souvent de prédire le comportement du système et définit sa classe d'universalité [7].

Nous allons dans ce chapitre appliquer les concepts du groupe de renormalisation dans le cadre de la transition de phase liquide-gaz. Nous rappellerons les caractéristiques fondamentales des transitions de phase du deuxième ordre. Nous introduirons les effets de taille finie à travers le modèle de Fisher. Nous l'utiliserons dans le modèle du gaz sur réseau pour déterminer quelle est la déviation des exposants critiques dans un système fini, par rapport à un système infini, en incluant un volume défini en moyenne. Nous définirons les fragments dans le modèle du gaz sur réseau. Ensuite nous montrerons notre méthode pour extraire les exposants et la température critique, ainsi que nos résultats. Enfin, nous discuterons l'influence du choix de l'ensemble statistique.

5.1 Caractéristiques principales des transitions de phase du deuxième ordre

Lors d'une transition de phase du second ordre, les potentiels thermodynamiques sont continus ainsi que ses dérivées premières. Certaines dérivées secondes divergent, comme la capacité calorifique ou la compressibilité. Ainsi la chaleur latente n'est pas définie et il n'y a pas coexistence de phase. La longueur de corrélation, associée à la fonction de corrélation pour le paramètre d'ordre, diverge: les fluctuations du paramètres d'ordre sont invariantes par changement d'échelle, ce qui implique des comportements en loi de puissance.

La variation de toute grandeur thermodynamique près du point critique est une loi en puissance. Par exemple, dans le modèle d'Ising, la magnétisation $M(T)$ à la température

T s'écrit :

$$M(T) \propto (T_C - T)^\beta$$

autour de la température critique T_C ; β est un exposant critique.

Deux exposants critiques indépendants caractérisent chaque classe d'universalité. Dans le cadre de la transition liquide-gaz, $\beta = 0.327$ et $\gamma = 1.239$. Les exposants critiques sont reliés entre eux par les lois d'échelle [28].

Nous nous sommes intéressés à la transition liquide-gaz. La classe d'universalité est donnée par le type d'interaction et le paramètre d'ordre. Nous avons vu que ces caractéristiques sont analogues à celles du modèle d'Ising : les potentiels d'interaction sont analogues et le paramètre d'ordre, qui est la différence des densités liquide et gaz, se ramène à la magnétisation du modèle d'Ising. Au point critique, le comportement d'un fluide ou d'un système de spins a les mêmes propriétés, et donc les mêmes exposants critiques. On s'attend donc à observer :

$$(\rho_L - \rho_G)(T) \sim (T_C - T)^\beta$$

Les fluctuations du paramètre d'ordre étant des fluctuations en densité, la divergence de la longueur de corrélation implique que les fluctuations en densité, *i.e.* en taille des fragments, sont invariantes d'échelle dans le cadre de la transition liquide-gaz.

5.2 Lois d'échelle dans la distribution des fragments

En toute rigueur, les phénomènes critiques ne peuvent pas apparaître dans les systèmes finis car la longueur de corrélation ne peut pas diverger. Toutefois des comportements analogues à une transition de phase du deuxième ordre peuvent s'observer si la longueur de corrélation atteint la taille du système. De façon générale, toute divergence des variables thermodynamique sera remplacée par un pic dans les systèmes finis. Cette problématique revient à extraire des signaux critiques malgré la taille finie du système, ce qui est connu sous le nom de "finite size scaling".

Dans ce cadre, pour la transition liquide-gaz, le paramètre d'ordre, qui est quasiment équivalent à la densité liquide ($\rho_G \ll \rho_L$), varie comme la taille du plus gros fragment. Ainsi, la taille du plus gros fragment devrait suivre une loi d'échelle autour du point critique thermodynamique.

L'utilisation du groupe de renormalisation pour caractériser les fragments peut être illustrée dans un modèle percolatif [2]. Chaque site d'un réseau est caractérisé par une probabilité de lien p avec un voisin. Il est possible de définir des fragments selon les sites plus proches voisins connectés. La probabilité critique p_C est définie lorsqu'un fragment de taille infinie apparaît dans le réseau de taille infinie. L'une des observables d'intérêt est le nombre moyen de fragments de taille A , $n(A, p)$. L'invariance du comportement de $n(A, p)$ par changement d'échelle $\lambda: A \rightarrow \lambda A$ permet d'écrire, autour du point critique p_C :

$$n(A, p) \propto A^{-\tau} e^{|p-p_C|^{1/\sigma}}$$

Cette expression reproduit correctement le comportement de $n(A, p)$ en fonction de p dans la limite des grandes tailles A et définit une loi d'échelle pour $n(A, p)$. σ et τ sont les exposants critiques.

Afin d'aller plus loin, nous utilisons le modèle de Fisher [43], qui est adapté à la fragmentation d'une goutte liquide et décrit son passage de l'état liquide à l'état gazeux. Dans l'ensemble canonique, à la température T , la taille des fragments A se distribue selon la loi d'échelle :

$$n(A, T) \propto e^{f_1(\Delta\mu) + f_2(A, T - T_C)} \quad (5.1)$$

où T_C est la température critique et $\Delta\mu$ la différence de potentiel chimique entre le liquide et le gaz. Cette loi d'échelle provient de l'invariance du nombre moyen de fragments de taille A par un changement d'échelle $A \rightarrow \lambda A$. A l'équilibre, dans la zone de coexistence, $\Delta\mu = 0$ ($f_1 = 0$) et f_2 représente l'énergie libre de surface pour un goutte liquide de taille A , à un facteur de température près. Cette loi d'échelle est observée dans les expériences de physique nucléaire [44] [45] [46] et de physique des agrégats [12].

Nous utilisons l'équation 5.1 sous la forme :

$$n(A, T) \propto A^{-\tau} f(A^\sigma(T - T_C)) \quad (5.2)$$

où nous explicitons A^τ et le terme de surface, relié à σ ; f est la fonction d'échelle. Dans un système infini, dans la classe d'universalité liquide-gaz, $\tau = 2.2$ et $\sigma = 0.64$. Les exposants critiques thermodynamiques β et γ se déduisent des lois d'échelle [28] :

$$\beta = \frac{\tau - 2}{\sigma}$$

$$\gamma = \frac{3 - \tau}{\sigma}$$

Nous nous proposons maintenant de valider l'équation 5.2 dans le modèle du gaz sur réseau dans le cadre d'un ensemble canonique dans lequel le volume est défini en moyenne.

5.3 Application au modèle du gaz sur réseau

Afin de travailler sur les fragments, nous devons les définir dans le cadre du modèle du gaz sur réseau. La première approche consiste à définir les fragments issus des tirages Metropolis comme un ensemble de sites avec les plus proches voisins occupés : ceci correspond à des "fragments d'Ising". Or, au point critique thermodynamique, ces fragments ne suivent pas la loi attendue dans l'équation 5.2.

5.3.1 Algorithme Coniglio-Klein

Une définition des fragments cohérente avec la thermodynamique du modèle est obtenue si l'on contraint les distributions en fragments à suivre une loi en puissance (équation 5.2) au point critique thermodynamique. Ceci est assuré en appliquant l'algorithme de Coniglio et Klein. Ils ont démontré [47] dans le cadre du modèle d'Ising canonique

que les liens d'Ising sont brisés avec une probabilité de Boltzmann $\exp(-\frac{\epsilon}{2T})$, où T est la température et ϵ l'énergie associée au lien, *i.e.* l'énergie d'interaction entre deux proches voisins. Ainsi la probabilité de lien actif de Coniglio-Klein est donné par :

$$p_{CK} = 1 - \exp\left(-\frac{\epsilon}{2T}\right) \quad (5.3)$$

La probabilité de lien actif vaut, dans le modèle du gaz sur réseau [48] :

$$p_{LG} = p_{MB}^T \left(\frac{p_{rel}^2}{2\mu} < \epsilon \right) \quad (5.4)$$

où p_{MB} dénote la distribution de type Maxwell-Boltzman ; $p_{rel} = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$ est l'impulsion relative entre les deux sites, et $\mu = m/2$ la masse réduite.

p_{CK} est un critère local percolatif ; p_{LG} est un critère à deux corps dans l'esprit d'un modèle dynamique. Toutefois p_{LG} est une fonction de ϵ/T comme p_{CK} car p_{MB} est la probabilité de Maxwell-Boltzmann, donc dépendante de la température :

$$p_{LG} \left(\frac{\epsilon}{T} \right) = \frac{\int_0^{\sqrt{2\mu\epsilon}} p_{rel}^2 e^{-p_{rel}^2/2mT} dp_{rel}}{\int_0^{\infty} e^{-p_{rel}^2/2mT} dp_{rel}}$$

et qui vaut :

$$p_{LG} \left(\frac{\epsilon}{T} \right) = 1 - \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_{\sqrt{\epsilon/T}}^{\infty} u^2 e^{-u^2} du \quad (5.5)$$

S. Das Gupta et al. [48] ont montré que $p_{CK} \simeq p_{LG}$. En effet un développement de Laguerre de l'équation (5.5) s'écrit :

$$p_{LG} \left(\frac{\epsilon}{T} \right) = 1 - e^{-\epsilon/2T} (c_0 + c_1 L_1(\epsilon/T) + \dots c_n L_n(\epsilon/T) + \dots)$$

où $c_0 \simeq 0.911$, $c_1 \simeq 0.177$ et $c_2 \simeq 0.041$ et L_n sont les polynômes de Laguerre dans la limite de haute température $\epsilon \ll 2T$ où l'on retrouve bien Coniglio-Klein. Que les deux fonctions se ressemblent pour des valeurs habituelles de ϵ et de T que nous utilisons peut se voir dans la référence [48] où les deux expressions sont représentées explicitement l'une sur l'autre.

X. Campi et H. Krivine [18] [49] proposent un troisième algorithme. Le lien est gardé avec une probabilité :

$$p_B \left(\frac{\epsilon}{T} \right) = p_{MB}^T \left(\frac{p^2}{2m} < \epsilon \right) \quad (5.6)$$

i.e. un algorithme local de type énergétique. Vu que la distribution d'énergie relative $p_{rel}^2/2\mu$ est maxwellienne comme la distribution d'énergie $p^2/2m$;

$$p_B \left(\frac{\epsilon}{T} \right) = p_{CK} \left(\frac{\epsilon}{T} \right)$$

car on peut suivre la même démarche que pour l'équation 5.5 et faire ensuite l'expansion de Laguerre comme plus haut. X. Campi et H. Krivine ont en plus démontré [50] que cet algorithme implique en moyenne une énergie de séparation positive pour les fragments

(énergie de liaison négative). En effet si la particule est liée au fragment par un seul lien l'énergie de séparation est :

$$E_N = \epsilon - p^2/2m$$

et $p_B\left(\frac{\epsilon}{T}\right) = p(E_N > 0)$, où l'on a négligé l'énergie du centre de masse du fragment par rapport à l'énergie de la particule (à un facteur A plus petite). Si la particule est liée par deux liens nous avons :

$$E_N = 2\epsilon - p^2/2m$$

et $p(E_N > 0) = p_B(2\epsilon/T)$. D'un autre côté la probabilité qu'au moins l'un des deux liens soit actif (et donc que la particule appartienne au fragment) est :

$$p_B(2 \text{ liens}) = 2p_B\left(\frac{\epsilon}{T}\right) - p_B^2\left(\frac{\epsilon}{T}\right)$$

où le deuxième terme évite le double comptage des liens. L'équation 5.6 correspond dans ce cas à garantir en moyenne une énergie de séparation positive si :

$$p_B\left(\frac{2\epsilon}{T}\right) = 2p_B\left(\frac{\epsilon}{T}\right) - p_B^2\left(\frac{\epsilon}{T}\right)$$

ce qui implique que :

$$p_B\left(\frac{\epsilon}{T}\right) = 1 - e^{\alpha\epsilon/T}$$

avec α une constante arbitraire, ce qui est (approximativement) vrai avec $\alpha = -1/2$ comme on vient de le montrer avec l'expansion de Laguerre.

On peut donc résumer que :

$$p_B\left(\frac{\epsilon}{T}\right) = p_{LG}\left(\frac{\epsilon}{T}\right) \simeq p_{CK}\left(\frac{\epsilon}{T}\right) \quad (5.7)$$

ce qui implique :

- les fragments que nous considérons sont compatibles avec ceux définis par Coniglio et Klein, donc critiques, au point critique ;
- ils sont identiques à ceux de Campi-Krivine, donc notre algorithme peut être vu comme une approximation pour traiter l'évaporation secondaire, bien que le critère soit à deux corps.

5.3.2 Volume

Volume défini aux bords

Les considérations sur les fragments doivent être mises en parallèle avec la thermodynamique. Pour cela, nous raisonnons dans un plan température-densité. Dans le cadre de l'ensemble canonique, avec un volume défini par les conditions aux bords, la zone de coexistence est représentée sur la figure (5.1). Elle a été calculée par F. Gulminelli et Ph.

Chomaz dans un réseau $8 \times 8 \times 8$ en mesurant pour chaque température le point de croisement de la branche liquide et de la branche gaz dans le plan potentiel chimique - pression. Ces deux dernières variables ont été obtenues par dérivation numérique de la fonction de partition canonique isochore, calculée directement à partir des distributions en énergie [6] [14]. Le point critique est à densité $\rho_0/2$ et la courbe est symétrique par rapport à ce point. Ceci est dû à la symétrie des rôles joués par les occupations et les vacances. Un comportement similaire est observé dans le modèle d'Ising [20]. Dans la référence [6], des comportements critiques sont mis en évidence pour toutes les densités. A haute densité apparaît la ligne de Kertész [21], qui correspond à une loi d'échelle respectée au-delà de la densité critique. Elle peut s'interpréter comme une limite percolative, *i.e.* l'effet de la géométrie domine les interactions. A l'intérieur de la coexistence, un comportement critique est également observé. Ceci peut apparaître contradictoire : des comportements caractéristique du second ordre sont observés dans la zone de transition de phase du premier ordre. Ce comportement y est interprété comme étant dû aux effets de taille finie.

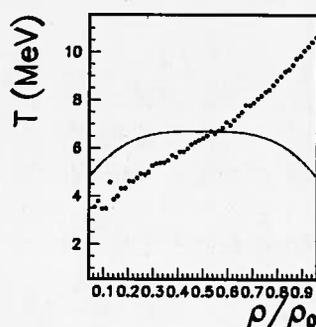


FIG. 5.1 – Zone de coexistence pour un réseau de taille $8 \times 8 \times 8$ (ligne) et ligne d'observation des comportements critiques (points) [6].

Choix de l'analyse à volume moyen constant

Toutes ces études ont été effectuées pour des systèmes fermés par des conditions aux limites périodiques ou non. Toutefois nous avons vu que ces calculs n'étaient pas adaptés aux systèmes ouverts pour lesquels le volume n'est pas défini par les conditions aux limites, mais peut être au mieux contraint comme un rayon moyen constant. Il est donc légitime de se poser la question de l'effet de la définition du volume sur les lois d'échelle. Il est possible que la loi d'échelle ne soit pas respectée. On peut également envisager que, même si la loi d'échelle reste valide, les exposants critiques soient fortement modifiés par la contrainte en volume. Pour faire cette étude, nous avons choisi un volume moyen tel que :

$$\langle \rho \rangle = \frac{A}{\langle V \rangle} = \frac{\rho_0}{2}$$

$\langle V \rangle$ est gardé constant et nous faisons varier la température. En effet, dans la référence [6], aucune loi d'échelle n'est mise en évidence si l'on fixe la température et que la densité varie. Nous suivons la démarche de cette référence en fixant le volume.

En outre, l'introduction d'un ensemble isobare nous permet de définir deux variables de travail : la pression et le volume. Nous montrerons par la suite que la pression constante ne permet pas d'observer une loi d'échelle.

5.4 Méthode de détermination des exposants critiques

Nous allons déterminer les exposants et la température critiques à partir des distributions en masse des fragments $n(A, T)$. Les propriétés de la loi d'échelle (équation 5.2) permettent de considérer deux points particuliers :

a. Le maximum de production des fragments de taille A est directement proportionnel à $A^{-\tau}$. En effet, pour une température $T = T_{max}(A)$, $n(A, T)$ est maximum et on peut écrire $n_{max}(A) = n(A, T_{max}) = A^{-\tau} f_{max}$ où $f_{max} = f(x_{max})$ est le maximum de la fonction d'échelle. Celui-ci est atteint pour une valeur $x_{max} = A^\sigma (T_{max} - T_C)$. Cette fonction a toujours un maximum car elle est positive et nulle à chaque extrémité de son domaine de définition.

b. Au point critique, la distribution en taille des fragments de taille A est proportionnelle à $A^{-\tau}$. En effet, à la température critique T_C , on a : $n(A, T_C) = A^{-\tau} f(0)$.

Notre méthode se décompose en trois étapes :

1. Le point a., *i.e.* la recherche des maxima de production $n_{max}(A) = n(A, T_{max}) = A^{-\tau} f_{max}$, conduit naturellement à calculer l'exposant τ , que nous notons τ_{max} ;
2. Le point b. nous permet de calculer la température critique T_C en cherchant à reproduire la distribution des fragments par une loi de puissance de coefficient τ_{max} ;
3. Enfin, connaissant T_{max} et T_C , l'exposant σ sera calculé en considérant la position du maximum de f , $x_{max} = A^\sigma (T_{max} - T_C)$

Nous allons illustrer précisément cette méthode, étape par étape, pour un système de 108 particules dans un réseau 12x12x12. Le volume moyen est fixé à 108.

5.4.1 Distributions en masse

Nous partons des distributions canoniques en masse, en conservant le volume moyen constant. Les températures imposées varient de 3 à 10 MeV, avec un pas de 0.5 MeV. Quelques distributions typiques sont représentées sur la figure (5.2). A basse température, un gros fragment est toujours présent $A_{big} \simeq 80$; à haute température, la distribution est exponentielle. Pour une température intermédiaire, que nous évaluerons *a posteriori*, la distribution ressemble à une loi en puissance.

Nous pouvons déjà observer les effets de taille finie. La plage de masses explorées dépend de la température considérée. Par exemple, pour une température de 8.5 MeV, les fragments ont tous une taille inférieure à 30. Ces effets de taille finie nous posent problème surtout à la température critique, car seul un intervalle donné en masse aura le

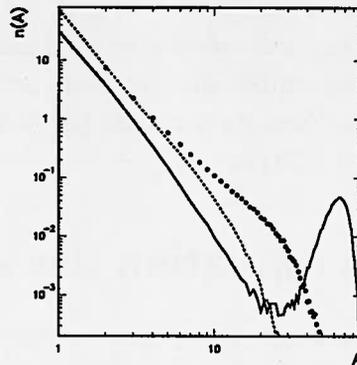


FIG. 5.2 – Distributions en masse canoniques pour un système de $A = 108$ particules dans un réseau $12 \times 12 \times 12$ en coordonnées logarithmiques pour une température sous-critique, $\beta^{-1} = 3.5 \text{ MeV}$ (ligne continue); sur-critique $\beta^{-1} = 8.5 \text{ MeV}$ (ligne tiretée); proche de la valeur critique ($\beta^{-1} = 6.1 \text{ MeV}$). Le volume moyen est maintenu constant à 108.

comportement attendu en loi de puissance (point b. du paragraphe précédent). Nous avons choisi de limiter notre étude aux masses [4:18]. Donner *a priori* une telle contrainte sur l'analyse ne peut être satisfaisant et demande à être étudié avec précision. En restreignant l'étude arbitrairement à un petit intervalle de masses, toutes les distributions en masse ressemblent à des lois de puissance de pentes différentes. D'un autre côté, le changement de pente dans la loi de puissance apparente indique clairement la taille à partir de laquelle les effets de taille finie biaisent les distributions ($A \simeq 20$ dans l'exemple de la figure (5.2)). Si l'on ne considère que les masses inférieures à cette taille limite, aucune différence notable par rapport aux résultats présentés ici n'apparaît en restreignant l'intervalle de masses considéré.

5.4.2 Détermination de τ

La première étape consiste à calculer les maxima de production des fragments de taille A et la température T_{max} qui leur correspond. Si nous avons à faire à un système critique les maxima $n_{max}(A)$ devraient suivre une loi en puissance de pente τ donné par $n_{max}(A) \propto A^{-\tau}$.

Maximum de production

Pour le système étudié, le taux de production des fragments de taille donnée est représenté en fonction de la température sur la figure (5.3) pour les masses de 9 à 12, en illustration. Afin de déterminer le maximum pour chaque A , nous sélectionnons les trois valeurs les plus élevées de $n(A, T) |_A$ et nous effectuons une régression parabolique sur les trois points, comme le montre la figure(5.4). Par exemple, la température T_{max} pour

$A = 9$ est estimée à $8.82 MeV$, ce qui est en accord avec la figure (5.3).

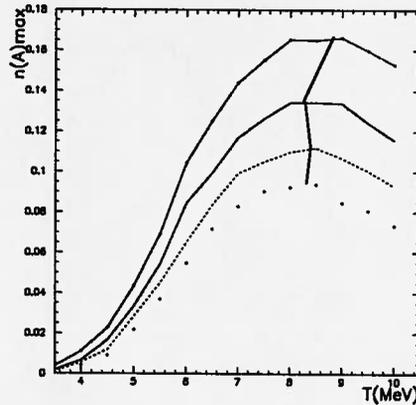


FIG. 5.3 – Maximum de production des fragments de $A = 9$ à $A = 12$ pour un volume moyen constant de 108. La ligne épaisse rejoint les maxima déduits du fit pour chaque A .

Calcul de τ_{max}

La figure (5.5) représente le maximum de production pour chaque A en coordonnées logarithmiques. Nous obtenons une droite. La distribution des maxima est bien une loi en puissance. Il semble que le système est critique. Nous effectuons une régression linéaire sur l'ensemble des points pour obtenir un exposant que nous notons τ_{max} . La valeur obtenue est 2.1.

5.4.3 Détermination de la température critique

Nous avons vu au paragraphe 5.2. que la température critique T_C est en principe celle pour laquelle la distribution en masse suit le mieux une loi en puissance d'exposant τ . Afin de déterminer cette température, nous calculons la pente $\tau(T)$ pour chaque distribution en masse canonique sur la plage en A que nous avons définie. L'intersection de $\tau(T)$ avec τ_{max} donne la température critique, comme le montre la figure (5.6). Or τ coupe en deux températures "critiques" $T_{C1} = 6.11 MeV$ et $T_{C2} = 8.82 MeV$. Elles sont notablement différentes, puisqu'elles ont plus de $2 MeV$ d'écart. Il a déjà été montré [14] que la deuxième température fournit une très mauvaise loi d'échelle. Nous le vérifierons au paragraphe 3.3.5. Nous pouvons vérifier que la qualité de la régression est satisfaisante. Nous avons également représenté la distribution en masses pour une température proche de T_C , sur la même gamme de masses. Les deux distributions aboutissent à la même pente, ce qui montre la cohérence de nos résultats.

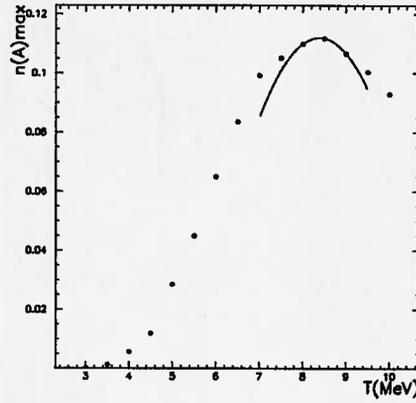


FIG. 5.4 – *Maximum de production des fragments de taille $A = 11$ en fonction de la température (symboles), pour un volume moyen constant de 108. La régression est représentée par la ligne.*

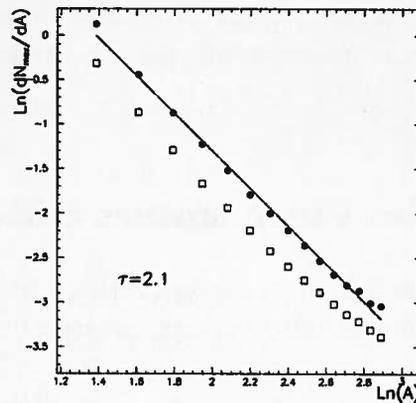


FIG. 5.5 – *Maximum de production des fragments de taille A en fonction de A en coordonnées logarithmiques (points) et la régression (ligne); distribution en masse pour une température proche de la température critique (carrés).*

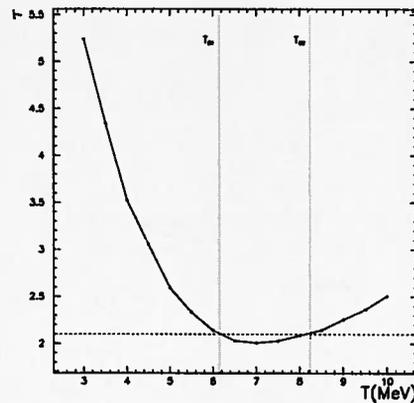


FIG. 5.6 – *Pente des distributions en masse $\tau(T)$ sur un intervalle de masses [4 : 18] (points et ligne); tiretés: τ_{max} ; pointillés: intersections $T_{C1} = 6.11 MeV$ et $T_{C2} = 8.27 MeV$.*

5.4.4 Détermination de σ

Enfin, la détermination de σ nécessite l'utilisation de T_{max} . En effet nous avons vu que pour un système critique la loi d'échelle fait intervenir une fonction universelle $f(x)$ où $x = A^\sigma(T - T_C)$; le maximum de cette fonction se trouve donc à une température qui respecte $x_{max} = A^\sigma(T_{max}(A) - T_C)$.

Nous représentons, pour chaque A , $T_{max}(A) - T_C$ en fonction de A . Si le système est critique, cette distance au point critique est une loi de puissance.

La pente de $(T_{max} - T_C)$ en fonction de A sur la figure (5.7) donne directement l'exposant σ . Celle-ci est calculée par une régression linéaire. La valeur obtenue est $\sigma = 0.6$, ce qui est très proche de celle du système infini.

Il est à noter que la qualité des points pour la régression en σ est bien moins bonne que pour τ . Ceci est dû au fait que les distributions en température pour chaque taille (figure (5.3)) sont relativement plates autour du maximum $n_{max}(A)$. En conséquence, l'erreur sur T_{max} est assez grande. Cette détermination devrait être améliorée en prenant une forme mieux adaptée que la parabole dont les paramètres seraient cherchés en utilisant plus de points. Une méthode recherchant l'annulation de la dérivée première de $n(A, T)$ pourrait aussi être envisagée. Les résultats de la régression sont donnés en ligne épaisse sur la figure (5.3).

5.4.5 Fonction d'échelle

La qualité de la fonction d'échelle constitue notre critère de validité du comportement critique (équation 5.2). L'existence d'une fonction d'échelle est vérifiée si chaque contribution de A et de T se superpose aux autres. Elle est reconstruite en représentant $n(A).A^\tau$ en fonction de $A^\sigma(T - T_C)$ sur la figure (5.8). Nous pouvons conclure que la qualité de la fonction d'échelle est remarquable compte tenu du fait que le système ne contient que

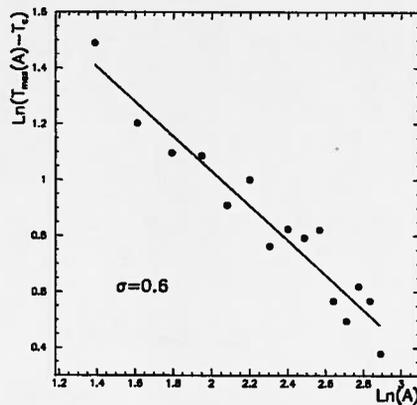


FIG. 5.7 – La grandeur $(T_{max} - T_C)$ en fonction de A en coordonnées logarithmiques (points) et régression linéaire (ligne).

108 particules et possède des surfaces diffuses. Sur la figure (5.9), l'analyse critique est présentée, mais la valeur de la température critique est fixée à T_{C2} ; c'est la température qui correspond au deuxième croisement de $\tau(T)$ et τ_{max} (figure (5.6)). La valeur de l'exposant σ est bien plus basse (0.3) et la fonction d'échelle est d'une qualité médiocre. En conclusion T_{C2} ne peut être considérée comme la température critique.

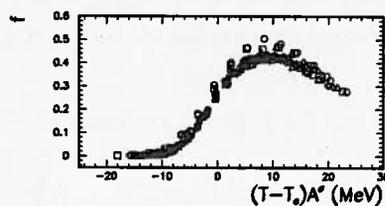


FIG. 5.8 – Fonction d'échelle reconstruite à partir de toutes les masses considérées; chaque symbole représente la contribution d'une taille de fragment et de température.

5.4.6 Méthode du χ^2

La valeur de $\tau = \tau_{max}$ déterminée à partir des maxima de production et la température critique T_C peuvent être comparées à celles provenant d'autres méthodes. La méthode du

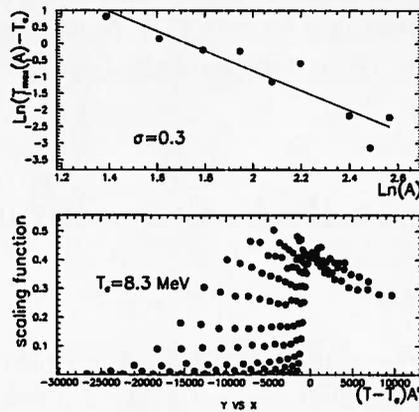


FIG. 5.9 – Analyse critique pour $A = 108$ à $\langle V \rangle = 2V_0$ pour un système diffus avec T_{C2} .

χ^2 exploite le fait que la distribution canonique en masses est une loi en puissance seulement au point critique : pour chaque température, la distribution en masse est interpolée au mieux par une loi en puissance minimisant la fonctionnelle :

$$\chi^2(T) = \sum_{A=1}^{A_{tot}} (\ln(n(A, T)) - b + \tau_{\chi^2} \ln A)^2$$

avec deux paramètres b et τ_1 . L'exposant critique τ est identifié à la valeur de τ_{χ^2} à la température $T_{C\chi^2}$ qui correspond au minimum de χ^2 . A_{tot} est le nombre total de particules dans le réseau.

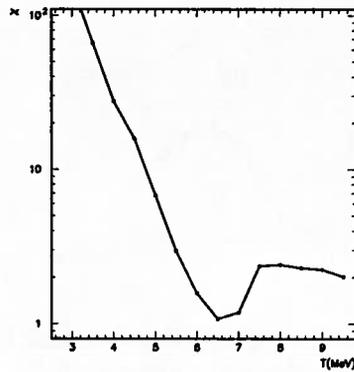


FIG. 5.10 – La racine de χ^2 est représentée en fonction de β^{-1} . Elle est minimale pour $\beta^{-1} = 6.5 \text{ MeV}$. Ceci correspond à $\tau = 2.0$.

χ^2 est représenté sur la figure (5.10) en fonction de la température. Il est minimal pour $T_{C\chi^2} = 6.5 \text{ MeV}$, ce qui donne $\tau_{\chi^2} = 2.0$. Compte-tenu des incertitudes liées aux effets

de taille finie, ces valeurs sont compatibles avec celles obtenues au paragraphes 1.3.2. et 1.3.3. On peut remarquer que dans la référence [14], la fonction d'échelle est très sensible à la valeur de T_C : malgré $T_{C\chi^2} \sim T_C$, la température $T_{C\chi^2}$ y fournit une fonction d'échelle de moins bonne qualité que T_C .

5.5 Influence de la taille et du volume

5.5.1 Taille de la source

L'étude menée nous a montré qu'un système dont le volume est connu en moyenne, et dont les surfaces sont importantes, peut respecter la loi d'échelle (5.2). On peut se poser la question de savoir jusqu'à quelles contraintes la loi d'échelle est observée en système fini. Pour cela, nous nous plaçons dans un cas "défavorable", où le système contient peu de particules ($A = 40$). Nous nous intéresserons ensuite à l'évolution des exposants critiques en fonction de la taille de la source. Pour chaque système, nous avons contraint le système en volume moyen tel que $\langle \rho \rangle = \rho_0/2$.

Pour le système 40 particules, l'analyse critique est représentée sur la figure (5.11). La qualité de la fonction d'échelle est remarquable. Toutefois il est important de noter que les régressions linéaires sur τ et σ sont effectuées sur une gamme en masses très restreinte. En effet, la petite taille de la source nous oblige à sélectionner des masses entre 7 et 14 (paragraphe 4.3.1.). En première conclusion, le comportement critique reste qualitativement observé et la loi d'échelle est valide, mais seulement sur une gamme restreinte de masses.

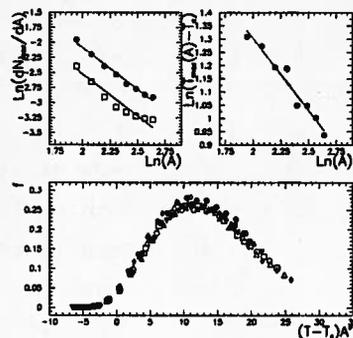


FIG. 5.11 – Analyse critique pour $A = 40$ particules à $\langle V \rangle = 2V_0$. Les symboles et les lignes ont la même signification que dans les figures (5.5), (5.7) et (5.8).

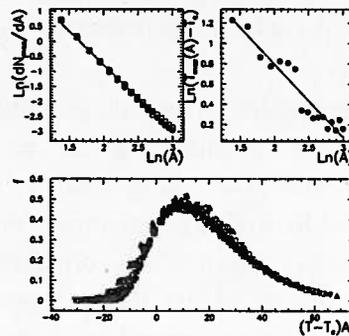
Pour un système de 216 particules, l'exposant τ est calculé sur une plage de masses entre 4 et 20, comme le montre la figure (5.12). Il est difficile d'obtenir une régression correcte sur σ . Ceci est dû à la détermination de T_{max} comme nous l'avons évoqué au paragraphe 1.3.4. La qualité de la fonction d'échelle est tout à fait comparable à celles obtenues précédemment. Pour mieux quantifier ceci, il serait intéressant de donner une

| Taille | τ | $T_C(\text{MeV})$ | σ |
|--------|---------------|-------------------|---------------|
| 40 | 1.7 ± 0.3 | 4.3 ± 0.4 | 0.6 ± 0.2 |
| 108 | 2.1 ± 0.1 | 6.1 ± 0.4 | 0.6 ± 0.2 |
| 216 | 2.2 ± 0.1 | 7.1 ± 0.4 | 0.7 ± 0.2 |

TAB. 5.1 – *Exposants critiques pour différentes tailles de sources à $\langle \rho \rangle = \rho_0/2$.*

estimation quantitative de la loi d'échelle. Ceci peut être fait dans l'esprit du test du χ^2 [22].

Nous avons étudié l'influence de la taille de la source, de $A = 40$ à $A = 216$. Le tableau (5.1) récapitule l'ensemble des résultats. Les barres d'erreurs sont évaluées en modifiant l'intervalle de masses considérées. Quelle que soit la taille de la source étudiée, les exposants critiques sont globalement les mêmes. La température critique décroît avec la taille. σ varie peu mais τ décroît avec la taille, il tombe même au-dessous de 2 pour $A = 40$, ce qui ne pose pas de problèmes pour un petit système, contrairement au système infini pour lequel les valeurs de τ inférieures ou égales à 2 sont interdites.

FIG. 5.12 – *Analyse critique pour $A = 216$ particules à $\langle V \rangle = 2V_0$. Les symboles et les lignes ont la même signification que dans les figures (5.5), (5.7) et (5.8).*

5.5.2 Volume

Nous avons jusqu'ici gardé la contrainte d'un volume moyen tel que $\langle \rho \rangle = \rho_0/2$. Nous allons d'abord déterminer l'influence de la définition du volume, puis de sa valeur numérique. Ceci permettra également de caractériser la robustesse de la loi d'échelle selon les différentes contraintes.

Influence des conditions aux bords

Pour un nombre de particules identique ($A = 108$), nous avons considéré trois types de volumes [38]:

1. un cube avec des conditions périodiques;

| Système | τ | $T_C(\text{MeV})$ | σ |
|---------|---------------|-------------------|---------------|
| 1 | 2.0 ± 0.1 | 6.5 ± 0.4 | 0.8 ± 0.2 |
| 2 | 2.0 ± 0.1 | 6.0 ± 0.4 | 0.7 ± 0.2 |
| 3 | 1.9 ± 0.1 | 6.2 ± 0.4 | 0.7 ± 0.2 |
| 4 | 2.1 ± 0.1 | 6.1 ± 0.4 | 0.6 ± 0.2 |

TAB. 5.2 – Résultats de l'analyse critique pour différents profils de densité pour $A = 108$.

2. le même cube, mais sans conditions périodiques ;
3. une sphère à bords francs ayant le même volume que 1. et 2.

Le choix de ces types de surface nous permet d'établir plusieurs comparaisons :

- Les systèmes 1. et 2. sont identiques, mais 2. possède des surfaces ;
- Les systèmes 2. et 3. ont le même volume, mais une géométrie différente ;
- Enfin, le système 3. pourra être comparé au système que nous avons largement étudié dans le paragraphe 1.3., que nous noterons 4. Leur géométrie est identique mais 4. a des bords diffus.

Afin que ces comparaisons soient cohérentes, nous avons choisi de nous placer à $\rho_0/2$. Ainsi les systèmes 1., 2. et 3. ont un volume de $2A = 216$, et 4. garde la propriété $\langle \rho \rangle = \rho_0/2$. L'analyse des fragments pour les systèmes 1., 2. et 3. a été effectuée selon la méthode présentée en 1.3. Le tableau (5.2) regroupe l'ensemble des résultats obtenus. La qualité et la valeur des exposants critiques est comparable quelle que soit la surface. Les différences observées pour la température critique peuvent être liées aux différents profils de densité du système. Ceci est en accord avec des calculs précédents [21] [14]. Cela démontre que le comportement critique est très robuste, peu sensible à la forme de la source et au profil de densité.

Influence de la densité

L'étude d'un cube avec des conditions aux bords a été faite pour différentes densités dans la référence [14]. Nous allons maintenant nous intéresser au système de $A = 108$ particules dont le volume est connu en moyenne. Nous imposons un volume moyen double de celui du système 4 : $\langle V \rangle = 216$, soit $\langle \rho \rangle = \rho_0/4$. Nous obtenons $\tau = 2.1 \pm 0.1$, $T_C = 5.4 \pm 0.4 \text{ MeV}$ et $\sigma = 0.8 \pm 0.2$. Quel que soit le volume moyen imposé, les exposants critiques changent peu. La température critique semble décroître lorsque le volume augmente. Une étude plus détaillée est nécessaire pour comprendre quantitativement la dépendance en volume des comportements critiques.

La figure (5.13) représente la température critique T_C en fonction de la densité ramenée en unités ρ/ρ_0 .

Cette figure nous indique clairement que la température critique dépend fortement de la densité considérée. Ceci correspond à ce que nous avons envisagé au paragraphe 4.4. Ainsi T_C n'est pas caractéristique du point critique thermodynamique, contrairement à

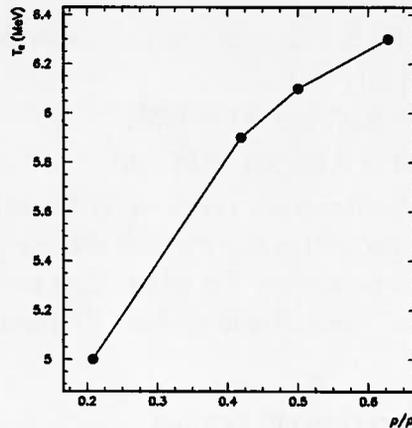


FIG. 5.13 – Température critique en fonction de la densité normalisée pour $A = 108$ dans l'ensemble canonique avec un volume moyen.

la situation à la limite thermodynamique : la corrélation entre fragments et thermodynamique n'est pas directe [23]. Ce comportement avait déjà été observé dans l'ensemble isochoire, où les phénomènes critiques survivent dans la zone de coexistence, à cause des effets de taille finie [6].

L'analyse thermodynamique nous a montré que la densité critique était d'environ 0.053 en unités de pas de réseau⁻³ (chapitre 3.3.3.). Ceci signifie que les calculs présentés sur la figure (5.13) sont à des densités surcritiques. L'observation de lois d'échelle à haute densité suggère des effets de géométrie (*i.e.* transition percolative [21]). Expérimentalement les lois de puissance dans les fragments s'accompagnent de la mesure de capacité calorifique négative : il est donc important d'étendre cette étude à la zone de coexistence. Des calculs préliminaires [39] montrent que la loi d'échelle reste conservée, malgré la très faible densité du système. La température critique serait de 4.10MeV pour $\rho/\rho_0 = 0.05$ et 3.90MeV pour $\rho/\rho_0 = 0.04$. Ceci tendrait à prouver qu'un comportement critique reste observé à l'intérieur de la zone de coexistence, dans un cadre microcanonique avec un volume moyen.

5.5.3 Conclusions

Les exposants critiques de la classe d'universalité liquide-gaz ($\tau = 2.2$ et $\sigma = 0.64$) ont été retrouvés, aux incertitudes près, dans les différents systèmes étudiés. Ces résultats sont comparables à ceux du modèle d'Ising [23]. Les surfaces, introduites en considérant un volume moyen, influencent peu les exposants critiques et ne détruisent pas la fonction d'échelle : l'observation de la loi d'échelle est un signal robuste. La dépendance de la température critique en fonction de la taille du système et du volume considéré a été mise en évidence.

Nous pouvons comparer les valeurs obtenues en τ et σ à celles des expériences de physique nucléaire :

- $\tau = 2.13 \pm 0.02$ et $\sigma = 0.67 \pm 0.1$ pour les collisions périphériques en $Au + Au$ à $35A.MeV$ par MULTICS [44];
- $\tau = 2.2 \pm 0.1$ et $\sigma = 0.64 \pm 0.05$ par EOS [45];
- $\tau = 2.00 \pm 0.01$ et $\sigma = 0.64 \pm 0.05$ par ISIS [46].

Ces valeurs sont tout à fait cohérentes avec celles de la transition liquide-gaz.

Tous les résultats théoriques présentés ont été calculés en gardant le volume constant. Or d'autres transformations sont possibles. En particulier nous pouvons fixer la pression ou le multiplicateur de Lagrange. Nous allons évaluer l'influence de ce choix.

5.6 Choix de la grandeur fixée

L'ensemble isobare introduit au chapitre (1) fait intervenir le volume moyen et la pression. Nous avons choisi dans ce paragraphe d'évaluer la fonction d'échelle pour une valeur de λ fixée. Le système contient 108 particules dans un réseau $12 \times 12 \times 12$. Nous avons gardé la même plage en température et le même intervalle de masses que dans l'analyse du paragraphe 4.3. L'analyse critique est représentée sur la figure (5.14). Elle conduit à $\tau = 2.1$, $\sigma = 0.5$ et $T_C = 7.0 MeV$.

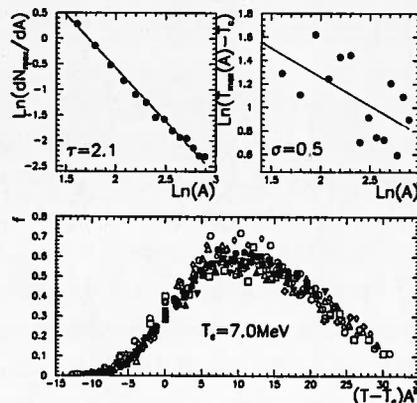


FIG. 5.14 - Analyse critique pour $A = 108$ particules dans un réseau $12 \times 12 \times 12$ à $\lambda = 0.1$.

Bien que la régression sur τ reste robuste, celle de σ est beaucoup moins précise. En outre, même si la loi d'échelle reste qualitativement observée, elle est détériorée: f se disperse de 22% autour de sa valeur maximum, contre 11% à $\langle V \rangle = 108$. La valeur de l'exposant critique τ est proche de ce que nous avons déjà observé, mais σ a une valeur inférieure. Ceci nous indique que le choix du volume constant reste approprié dans l'étude des comportements critiques. Toutefois l'existence d'une loi de puissance est une propriété très robuste, seule la fonction d'échelle et la recherche de σ sont sensibles à la transformation considérée lors de l'étude d'un comportement critique.

5.7 Choix de l'ensemble statistique: l'ensemble microcanonique

Les calculs précédents ont été menés dans l'ensemble canonique. Nous nous intéressons au choix de l'ensemble microcanonique, afin de faire le lien avec les calculs thermodynamiques du chapitre (3). Cette étude permettrait en outre de savoir si des comportements critiques restent observés dans l'ensemble microcanonique. Alors que la température est utilisée comme paramètre critique dans l'ensemble canonique, nous utilisons l'énergie E dans l'ensemble microcanonique. Ceci revient à écrire la loi d'échelle (équation 5.2) sous la forme :

$$n(A, E) = A^{-\tau} f(A^\sigma (E - E_C))$$

Cette étude complète est actuellement en cours [39]. Nous nous proposons ici d'étudier des distributions en masse microcanonique, en fixant la pression. L'étude à volume moyen fixée devrait être également développée, elle est également en cours [39].

5.7.1 Générer des partitions microcanoniques

Nous avons choisi la pression sous critique du chapitre (3), section 2.

Alors que la thermodynamique microcanonique peut être simplement déduite des distributions canoniques d'énergie (équation 3.3), il n'en est pas de même pour les fragments. Les distributions en masses microcanoniques ont été calculées de la façon suivante : nous faisons des itérations Metropolis canoniques afin de nous fournir la valeur de l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ pour les (β, P) considérés. Ceci nous permet de nous placer à une température pour laquelle $\langle E \rangle$ est proche de l'énergie microcanonique étudiée. itérations Metropolis canoniques, mais en ne conservant que les événements dont l'énergie est comprise entre $\langle E \rangle - \Delta E$ et $\langle E \rangle + \Delta E$. ΔE est la précision de nos tirages microcanoniques que nous avons fixé à 0.1 MeV. La méthode est représentée schématiquement sur la figure (5.15) pour les phases pures et la phase mixte. Pour cette dernière, nous recherchons les événements qui ne sont pas les plus probables. En conséquence, les distributions microcanoniques sont différentes de celles issues d'un calcul canonique.

5.7.2 Distributions en masses microcanoniques

Nous avons calculé les distributions en masses à trois énergies différentes : $E = 1.375A.MeV$ dans le quasi-liquide, $E = 2.475A.MeV$ dans la coexistence, et $E = 3.410A.MeV$ dans le quasi-gaz (figure (3.7)). Les distributions sont représentées sur la figure (5.16).

La distribution du plus gros fragment à $E = 2.475A.MeV$ nous indique que le quasi-liquide et le quasi-gaz coexistent à l'intérieur de la même partition. Dans le cadre canonique la coexistence s'interprète comme la présence, à la même température, de partitions de

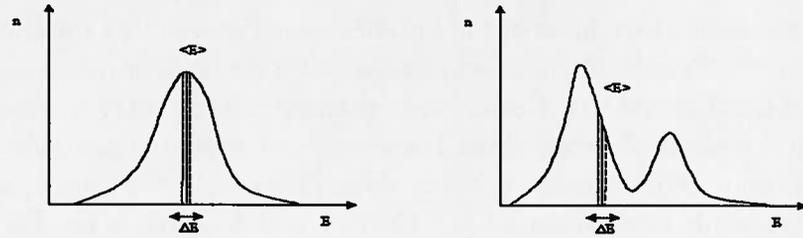


FIG. 5.15 – Tri microcanonique à partir des distributions d'énergie totale à un β donné autour de $\langle E \rangle$ à ΔE près dans le quasi-liquide ou le quasi-gaz (gauche) et la coexistence (droite).

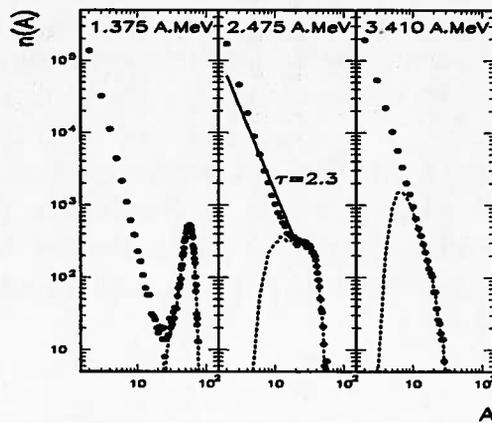


FIG. 5.16 – Distributions en masse microcanoniques pour l'ensemble des fragments (points) et pour le plus gros fragment (tiretés) évaluées à une énergie correspondant à la branche liquide de la courbe calorifique (gauche); à la branche gazeuse (droit); et à la zone de capacité calorifique négative (centre); ligne continue: loi de puissance d'exposant $\tau = 2.3$.

type liquide (contenant un fragment de taille très supérieure aux autres et comparable à la taille du système, analogue au fragment percolatif infini dans la limite d'un réseau de taille infinie) et de partitions de type gaz (où le fragment percolatif a disparu et tous les fragments sont comparables en taille). Dans l'ensemble microcanonique la situation est différente: le fait que la distribution du plus gros fragment, bien que large dans la zone de coexistence, s'annule pour $A \rightarrow 0$ démontre que dans chaque partition une portion quasi-liquide coexiste en contact avec une portion quasi-gaz. Ceci est en net contraste avec la thermodynamique standard et est confirmé par les expériences de physique nucléaire dans lesquelles une bimodalité dans la distribution en taille du plus gros fragment n'a jamais été observée. Ceci se comprend bien car, même si les données ne sont pas explicitement triées en énergie, le tri en paramètre d'impact sélectionne une distribution d'énergie déposée relativement étroite [?].

Nous avons tenté de mettre en évidence un comportement en puissance, d'exposant $\tau = 2.3$ pour la distribution en masse à $E = 2.475A.MeV$ sur la figure (5.16). La valeur $\tau = 2.3$ est en effet proche de ce que l'on attend dans la classe d'universalité liquide-gaz.

Cependant, une régression de meilleure qualité serait obtenue pour $\tau = 2.7$. Un comportement critique pourrait donc être observé, mais les exposants critiques pourraient être largement différents par rapport au cas canonique. Il est également envisageable que la valeur de τ tende vers 2.2 uniquement vers le point critique thermodynamique. Celui-ci a été évalué, dans l'ensemble isobare, au chapitre (3) section 3.1, à une énergie $2.80MeV$ et une température $4.2MeV$ à $\ln(\lambda) = -7.09$.

Enfin, la figure (5.16) montre que nous observons une loi en puissance dans la zone de coexistence (où la capacité calorifique du système devient négative). Ceci est cohérent avec la référence [14], et nous apprend que même dans l'ensemble microcanonique, une loi de puissance peut être observée.

5.8 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons mis en évidence des phénomènes critiques, à travers la loi d'échelle (équation 5.2) dans le modèle du gaz sur réseau. Les exposants critiques τ et σ sont ceux de la classe d'universalité liquide-gaz, quelles que soient les conditions aux bords et la taille du système. τ et σ nous permettent de déduire les exposants $\beta \sim 0.33$ et $\gamma \sim 1.33$. Nous avons pu également vérifier que la qualité de la loi d'échelle est excellente dans tous les cas envisagés. Nous avons extrait des signaux critiques sur toute une plage en densité, en faisant varier le volume moyen d'un système composé de $A = 108$ particules.

Chapitre 6

Effets coulombiens

Jusqu'à maintenant nous avons étudié la transition de phase avec une interaction de plus proches voisins, la principale motivation étant la courte portée de la force nucléaire. Une description réaliste de la transition de phase dans les noyaux finis nécessite aussi l'introduction de l'interaction coulombienne. D'un point de vue théorique, l'introduction d'une force non-saturante comme l'interaction coulombienne est d'un grand intérêt, car la limite thermodynamique d'un système soumis à une telle interaction n'existe pas (le système n'est pas lié). Par contre, comme l'ont montré D. Vautherin et al. [51], un système fini tel que le noyau n'est plus lié seulement au-delà d'une certaine température. L'inclusion de forces non-saturantes est un problème spécifique aux systèmes finis. Leur introduction dans le modèle d'Ising à trois dimensions a été menée notamment dans la référence [53].

Une problématique proche se retrouve en astrophysique où la gravitation a les mêmes propriétés non saturantes. Cependant, la gravitation est une force attractive. Contrairement à l'interaction coulombienne, cette seule interaction suffit à faire subir au système une transition de phase. Ce domaine a été largement étudié [32] [54] [55].

Dans ce chapitre, nous inclurons l'interaction coulombienne dans le modèle de gaz sur réseau et nous comparerons la thermodynamique d'un système de N particules chargées et non chargées. Considérer des particules identiques nous permet de nous affranchir des effets d'isospin. Nous donnerons donc une charge $e/2$ à toutes les particules. Nous nous intéresserons ensuite à l'influence de la taille du système sur la thermodynamique, puis nous définirons un ensemble statistique multicanonique afin de découpler les effets coulombiens des signaux de transition de phase nucléaire. Enfin, nous aborderons la problématique liée aux fragments et nous donnerons les éléments qui permettent de les traiter correctement dans le cadre d'une interaction à longue portée.

6.1 Implémentation dans le modèle du gaz sur réseau

Nous allons introduire ici un terme d'interaction à longue portée dans le modèle du gaz sur réseau, puis vérifier son implémentation dans le code.

6.1.1 Hamiltonien

L'hamiltonien total s'écrit avec le terme coulombien supplémentaire H_{coul} :

$$H = \sum_{i=1}^A \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \frac{\epsilon}{2} \sum_j n_j \right) n_i + H_{coul}$$

où H_{coul} est la somme à deux corps :

$$H_{coul} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i_p=1}^A \sum_{j_p \neq i_p}^A \frac{q^2}{r_{i_p j_p}} n_i n_j$$

qui porte sur les A particules chargées du système ; $r_{i_p j_p}$ est la distance entre les deux sites i et j du réseau. Le pas du réseau δ_L a été fixée pour qu'une occupation maximale $n_i = 1 \forall i$ corresponde à la densité normale de la matière nucléaire $\rho_0 = 0.17$ particules/cellule, soit $\frac{1}{\delta_L^3} = 0.17$. Pour ne pas mélanger les problèmes liés à l'isospin avec ceux provenant de la longue portée de la force coulombienne, nous faisons ces premiers calculs en ne différenciant pas neutrons et protons et nous leur donnons par conséquent une charge $q = e \frac{Z}{A}$.

6.1.2 Vérifications numériques

Nous avons choisi un système de $A = 20$ particules chargées que nous initialisons en configuration compacte et approximativement sphérique au centre d'un réseau $20 \times 20 \times 20$. Nous assimilons le système à une sphère uniformément chargée en volume, de rayon R :

$$R = \sqrt[3]{\frac{A4\pi}{3}} \simeq 3$$

Ceci nous permet de vérifier l'implémentation numérique de la partie coulombienne à travers le théorème de Gauss, en supposant qu'en moyenne la distribution de charges est sphérique, ce qui implique que le champ moyenné sur les événements est radial. En choisissant une surface sphérique de rayon r_0 , on a :

$$\int_{(S)} \vec{E}_{Gauss}(r_0) \cdot d\vec{S} = 4\pi r_0^2 E_{Gauss}(r_0) = \frac{Q(r_0)}{\epsilon_0}$$

soit

$$\int_{(S)} \vec{E}_{Gauss}(r_0) \cdot d\vec{S} = \frac{1}{\epsilon_0} \int_0^{r_0} \langle \rho(r) \rangle dr \quad (6.1)$$

Pour cela, nous calculons la densité moyenne $\langle \rho(r) \rangle$ sur les itérations Metropolis comme la valeur moyenne des occupations. Ceci nous permet d'accéder au champ $\vec{E}_{Gauss}(r)$ (équation 6.1) et au potentiel électrostatique $V_{Gauss}(r)$ tel que :

$$\vec{E}_{Gauss}(r) = -grad V_{Gauss}(r) \quad (6.2)$$

Nous comparons le potentiel électrostatique issu du théorème de Gauss (équation 6.1) à celui calculé directement sur le réseau, pour un ensemble d'événements Metropolis. Pour chaque événement le potentiel en r_j est donné par :

$$V(r_j) = \sum_{i \neq j}^A \frac{q}{|r_i - r_j|} \frac{n_i}{4\pi\epsilon_0} \quad (6.3)$$

En moyennant ce potentiel sur tous les événements et sur toutes les cellules situées à la même distance du centre du réseau, on obtient le potentiel moyen que l'on peut comparer directement à la prédiction du théorème de Gauss.

La comparaison entre les calculs issus des équations 6.1 et 6.3 est illustrée sur la figure (6.1). L'accord entre les potentiels est quasiment parfait : $V(r)$ est le même, qu'il soit calculé directement ou par intégration de Gauss. Nous pouvons vérifier que les deux calculs donnent le résultat analytique d'une sphère uniformément chargée à l'extérieur de la sphère. Les petites différences sont dues au réseau cartésien qui viole quelque peu la symétrie sphérique. Ceci teste la validité de notre implémentation du terme coulombien dans le code. Une fois l'hamiltonien défini et son implémentatin numérique contrôlé, le problème est simple : le potentiel coulombien ne modifie que l'énergie de configuration. Il peut être introduit directement dans l'algorithme Metropolis.

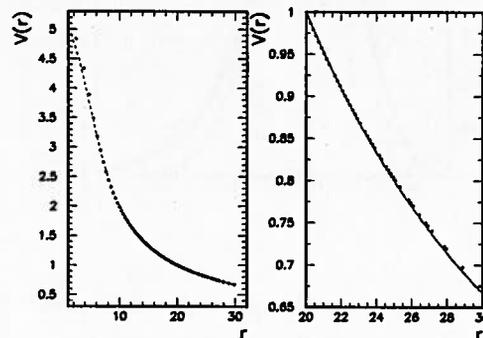


FIG. 6.1 - Gauche : $V(r)$ (points) et $V_{Gauss}(r)$ (ligne tiretée); droite : $V(r)$ (points) et $\frac{N}{r}$ (ligne continue) pour $r > 20$. Le système contient $A = 20$ particules.

6.2 Mesure de la taille du système

Nous étudions d'abord un système léger $A = 40$. Nous avons choisi ce système car il est suffisamment léger pour ne pas subir de phénomènes spécifiques à l'interaction coulombienne, comme la fission. La charge électrique des 40 particules est renormalisée

de telle sorte à produire une interaction entre les 40 particules équivalente à une charge $Z = 20$. Ainsi :

$$q = e \frac{Z}{A} = \frac{e}{2}$$

Nous allons dans un premier temps mesurer l'influence de l'interaction coulombienne sur les caractéristiques du système. Pour une énergie totale et un volume moyen fixés à l'intérieur de la zone liquide du diagramme de phase, la distribution en volume est représentée sur la figure (6.2). La principale influence de l'interaction coulombienne est d'élargir notablement la distribution. Outre l'exploration de volumes plus larges, comme attendu, l'interaction coulombienne fait apparaître des configurations à des volumes plus petits. Dans ce cadre microcanonique, ceci correspond à des partitions dans lesquelles l'énergie coulombienne est maximisée.

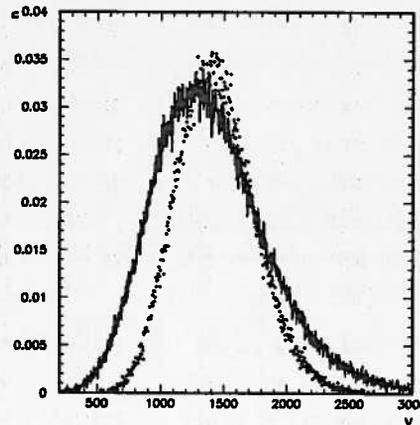


FIG. 6.2 - Distributions en volume dans le quasi-liquide pour $E = -1.5 \text{ MeV}$ et $\ln \lambda = -7.00$ sans (points) et avec (ligne continue) l'interaction coulombienne pour $A = 40$ particules.

6.3 Courbes caloriques

Nous allons maintenant étudier la thermodynamique dans un ensemble microcanonique avec un volume observé en moyenne, dont les variables pertinentes sont E et λ . Les courbes caloriques sont obtenues d'une façon analogue à celle présentée dans le chapitre (3); toutes les formules restent valides, à condition d'ajouter l'énergie coulombienne. Nous allons mettre en évidence les modifications induites par l'interaction coulombienne sur la courbe calorique.

6.3.1 Système de $A = 40$ particules

La figure (6.3) représente les courbes caloriques pour 40 particules identiques dans un calcul microcanonique pour plusieurs λ , dans le cas de particules chargées ou non. La comparaison des courbes avec et sans Coulomb aboutit à trois principales conclusions :

1. L'interaction coulombienne provoque un déplacement global des courbes caloriques vers les hautes énergies, d'environ 1MeV pour ce système dans lequel la charge est $A/2$; ceci est dû à la contribution répulsive du terme coulombien dans l'énergie. Cependant toutes les courbes caloriques tendent vers la même limite $T = \frac{2}{3}E$: dans le quasi-gaz, l'énergie coulombienne n'apporte qu'une faible correction au gaz parfait.
2. Pour un λ donné, la température de transition est plus basse et la largeur de la zone de transition est plus faible; par exemple, la température de transition à $\ln\lambda = -7.50$ passe de 2.15MeV à 1.88MeV . La largeur de la zone de transition en température, ΔT , diminue d'un facteur 4 (on passe de $\Delta T = 0.18\text{MeV}$ à 0.05MeV) et la largeur en énergie diminue d'un facteur 2 (de 5.2MeV à 2.7MeV).
3. Le multiplicateur de Lagrange critique λ_C est abaissé. Son logarithme vaut environ -6.00 , et la température critique est 2.40MeV alors que pour le système non chargé $\ln\lambda_C \simeq -5.50$. L'interaction coulombienne joue le rôle d'une pression vers l'extérieur, qui déplace l'ensemble de l'équation d'état vers les basses températures.

En conclusion, une inversion de pente est toujours observée lorsque l'on implémente l'interaction coulombienne : une interaction à portée infinie ne détruit pas la présence d'une transition de phase. Cependant elle en diminue notablement l'importance, en réduisant la zone de coexistence. Il faut aussi rappeler que le système étudié est faiblement chargé. Les effets seront d'autant plus grands que la charge est grande.

6.3.2 Contribution coulombienne à la courbe calorique

Nous allons évaluer directement la contribution de l'énergie coulombienne aux courbes caloriques. Pour cela, nous allons déterminer le comportement de l'énergie coulombienne E_{coul} par rapport à l'énergie d'interaction entre plus proche voisins, E_{pot} . Nous nous plaçons à (β, λ) sous-critique. Pour $\ln\lambda = -7.0$ et $1/\beta = 1.96\text{MeV}$, la distribution d'énergie totale du système est représentée sur la figure (6.4) et elle est bimodale. La même figure contient les distributions d'énergies coulombienne et potentielle à courte portée pour les mêmes (β, λ) . Pour E_{pot} , on distingue nettement deux "phases" : l'une quasi-liquide autour de $-5.0A.\text{MeV}$, l'autre quasi-gaz à environ $-1.0A.\text{MeV}$. La distribution en énergie coulombienne E_{coul} présente également une bimodalité : pour $E_{coul} = 0.5A.\text{MeV}$, le système est quasi-gazeux ; pour $E_{coul} = 0.9A.\text{MeV}$, c'est le quasi-liquide. Ainsi l'interaction coulombienne et l'interaction de plus proches voisins ont des effets inverses l'un de l'autre. Ici la distribution d'énergie totale garde une bimodalité car les deux effets ne s'annulent pas. La bimodalité est simplement réduite, le minimum des distributions d'énergies partielles étant remplacé par un épaulement. Ceci implique qu'à la limite où la bimodalité n'est plus observée en énergie totale, les énergies partielles d'interaction peuvent être bimodales. Ainsi la transition de phase peut être "cachée" par les effets coulombiens. Il est

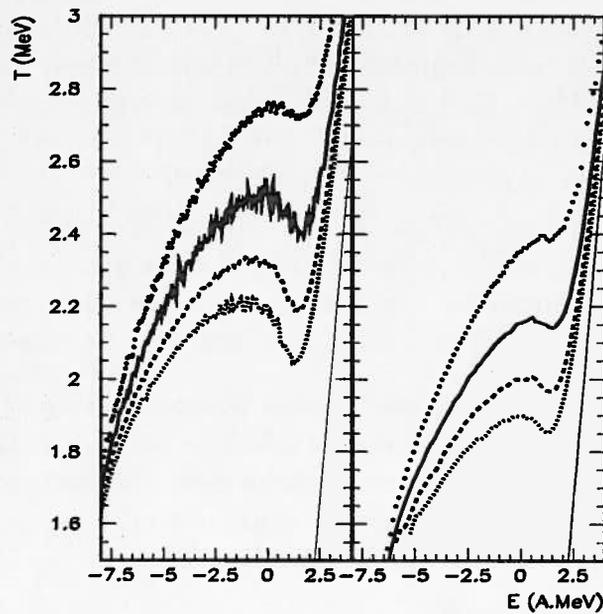


FIG. 6.3 - Courbes caloriques potentielles pour un système de $A = 40$ particules dans un réseau $20 \times 20 \times 20$. $\text{Ln}(\lambda) = -7.50$ (ligne pointillée); $\text{Ln}(\lambda) = -7.00$ (ligne tiretée); $\text{Ln}(\lambda) = -6.50$ (ligne continue); $\text{Ln}(\lambda) = -6.00$ (points). La partie gauche représente les calculs sans interaction coulombienne; ceux de droite, avec une interaction coulombienne de couplage $e^2 = 0.36 \text{ MeV} \cdot \text{fm}$. La droite $\frac{2}{3}E$ est représentée dans les deux cas.

donc intéressant d'observer l'occupation de l'espace de phase du système à travers deux variables : E_{pot} et E_{coul} . C'est ce que nous étudierons au chapitre (6.4).

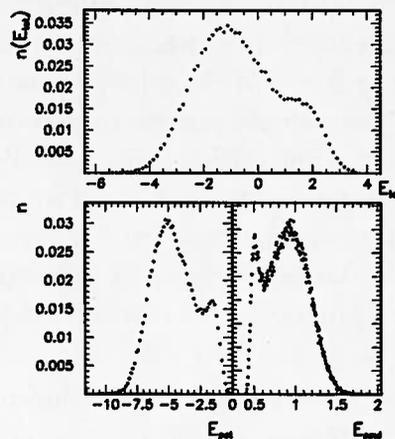


FIG. 6.4 – Distribution d'énergie totale pour $1/\beta = 1.96\text{MeV}$ et $\lambda = -7.00$ (haut) ; distribution d'énergie potentielle (gauche) et coulombienne (droite). Les énergies sont exprimées en $(A.\text{MeV})$. Les énergies cinétiques ne sont pas incluses.

6.3.3 Influence de la charge

Nous allons maintenant évaluer l'influence de la charge du système sur la thermodynamique. Ceci est d'autant plus intéressant que le paragraphe précédent n'abordait que le cas d'un système léger ($A = 40$), quand en physique nucléaire on étudie des systèmes avec $A \sim 200$). Le paragraphe (6.3.1) laisse penser que le λ critique diminue avec la charge. Il est également possible que pour des charges importantes, le système ne soit plus lié. Nous allons donc suivre le comportement de la zone de coexistence en fonction de la charge. Nous avons envisagé deux systèmes différents $A = 207$ et $A = 238$. La charge effective est calculée de telle sorte à reproduire approximativement le rapport $\frac{A}{Z}$ du noyau stable correspondant. Par exemple, pour $A = 238$, q est estimé à $e * \frac{92}{238}$.

Les calculs sont effectués dans un réseau $20 \times 20 \times 20$. L'utilisation d'un réseau de grande taille nous assure que le plus gros système $A = 238$, malgré la forte répulsion coulombienne entre les charges, ne soit pas sensible aux conditions aux bords. Nous avons imposé le même λ pour tous les systèmes considérés. Nous l'avons choisi le plus faible possible $\ln \lambda = -7.00$ de telle sorte à nous placer dans des conditions optimales de régime sous-critique.

Les courbes caloriques potentielles pour les systèmes de 40, 207 et 238 particules sont représentées sur la figure (6.5). Pour des masses $A < 238$, la température et l'énergie de transition augmentent avec la charge pour un λ donné. L'énergie nécessaire à la transition diminue avec la charge. L'amplitude de la décroissance de la température semble en revanche s'accroître.

Pour une charge importante $A = 238$ la transition n'est plus visible. Ce phénomène a été observé parallèlement dans d'autres modèles [22]: lorsque l'énergie coulombienne du système est importante, la transition de phase n'apparaît plus. Nous avons contrôlé que les fluctuations d'énergie cinétiques $\frac{\sigma_k^2}{T^2}$ ne dépassent jamais 1.5. Toutefois il faut noter qu'elles présentent un fort maximum qui reste inférieur à C_{kin} autour d'une énergie $E \sim 3 \text{ MeV}/A$. Ceci est caractéristique d'un système soumis à une pression surcritique, et dont l'énergie critique est proche de $E \sim 3 \text{ MeV}/A$ [30]. Cette dernière observation suggère que la transition de phase n'est pas complètement annulée par la force à longue portée, mais plutôt que la valeur de la pression critique diminue. Pour vérifier cette conjecture il faudrait évaluer la courbe calorique du système lourd à une pression plus faible et par conséquent dans un réseau de taille supérieure. Il est à noter que la qualité numérique des résultats diminue pour des grandes tailles initiales, et le temps de calcul pour un β donné devient important (de l'ordre de 5 jours). Un tel calcul n'est pas possible dans le cadre de nos moyens numériques actuels.

Finalement, l'absence d'anomalie dans la courbe calorique à $\ln\lambda = -7.00$ n'est pas un effet de condition aux bords du réseau, car on peut vérifier que les courbes caloriques tendent bien à haute énergie vers un comportement de gaz parfait. Si le réseau est trop petit au point de contraindre les partitions, l'énergie d'interaction modifie le comportement à haute température. D'autre part, nous avons vérifié que le volume moyen du système reste inférieur à celui du réseau.

Dans le cas de $A = 207$, la zone de transition est mal explorée car les tirages Metropolis sont concentrés soit dans le quasi-liquide, soit dans le quasi-gaz. Des calculs supplémentaires dans cette région sont en cours.

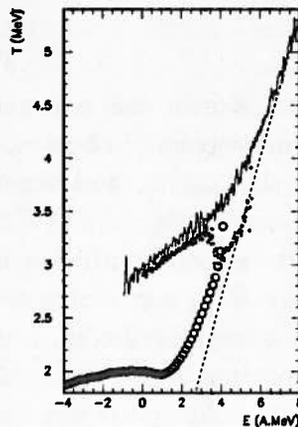


FIG. 6.5 - Courbes caloriques potentielles à $\ln\lambda = -7.00$ pour $A = 40$ (ronds), $A = 207$ (points), $A = 238$ (ligne); $\frac{2}{3}E$ (droite continue).

6.4 Distributions des événements

Nous avons vu au paragraphe précédent que l'interaction coulombienne réduit la zone de coexistence. Nous allons maintenant préciser son effet sur les diagrammes de phase en considérant la distribution des événements dans l'espace multidimensionnel des variables d'état énergie potentielle à courte portée E_{pot} et énergie coulombienne E_{coul} . Nous démontrerons que la seule observation de la courbe calorique (ce qui implique un classement uniquement en énergie) n'est pas suffisante pour comprendre entièrement le diagramme de phases. Enfin, nous introduirons un formalisme multicanonique qui nous permettra de caractériser la transition de phase en découplant la partie attractive des effets coulombiens.

6.4.1 Corrélations énergie potentielle-énergie coulombienne

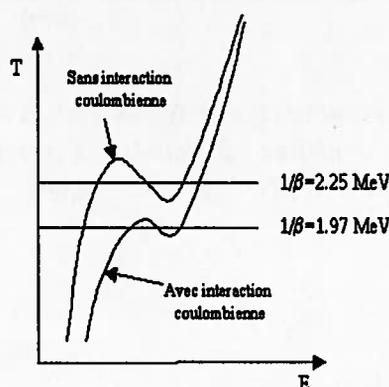


FIG. 6.6 - Représentation schématisée des courbes caloriques étudiées : si l'énergie coulombienne est incluse $1/\beta = 1.97 \text{ MeV}$; si l'énergie coulombienne n'est pas considérée $1/\beta = 2.25$. Dans les deux cas, $\ln \lambda = -7.00$.

Sur la figure (6.7), les événements canoniques associés à une masse $A = 40$, $\ln \lambda = -7.00$ et une température $\beta^{-1} = 1.97 \text{ MeV}$ égale à la température de transition lorsque le terme coulombien est inclus sont représentés dans le plan (E_{coul}, E_{pot}) . L'énergie totale E_{tot} y est représentée comme la première bissectrice du plan ($E_{coul} = E_{tot} - E_{pot}$). Celle-ci ne tient pas compte de l'énergie cinétique. Deux maxima apparaissent : l'un "quasi-liquide" associée à ces événements, à énergie d'interaction et énergie coulombienne importantes (respectivement -180 MeV et 35 MeV), l'autre "quasi-gaz" ($E_{pot} = -70 \text{ MeV}$, $E_{coul} = 20 \text{ MeV}$). Ces deux pôles sont séparés par un minimum de distribution de probabilité autour de $(-100 \text{ MeV}, 25 \text{ MeV})$. Lorsque les événements sont projetés sur l'axe de l'énergie

totale, la bimodalité est réduite. Les deux maxima sont fortement rapprochés car les variations d'énergie coulombienne réduisent celles de l'énergie d'attraction. L'énergie totale n'est pas la variable qui sépare le mieux les événements. Si par exemple les événements se répartissaient dans une direction perpendiculaire à celle de E_{tot} , aucun signal de transition de phase ne serait observable dans la courbe calorique bien que, dans la représentation bidimensionnelle, la bimodalité pourrait être apparente.

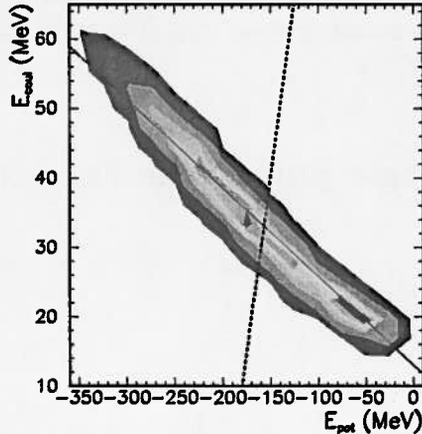


FIG. 6.7 – Distribution des événements pour le système $A = 40$ dans le plan (E_{coul}, E_{pot}) ; pointillés : énergie totale ; ligne continue : paramètre d'ordre. La température est fixée à la température de transition $1/\beta = 1.97 \text{ MeV}$ et $\lambda = -7.00$.

6.4.2 Paramètre d'ordre

La variable appropriée pour séparer au mieux les deux classes d'événements est la ligne continue sur la figure (6.7), *i.e.* une combinaison linéaire de E_{pot} et E_{coul} . C'est le paramètre d'ordre, défini en transformant E_{pot} et E_{coul} par une rotation d'angle α . Un point (E_{pot}, E_{coul}) peut être représenté par sa projection sur le paramètre d'ordre

$$po = \cos\alpha E_{pot} + \sin\alpha E_{coul} \quad (6.4)$$

et sa projection sur l'axe perpendiculaire $po^\perp = -\sin\alpha E_{pot} + \cos\alpha E_{coul}$.

Sur le haut de la figure (6.8), l'ensemble des événements est représenté dans le plan (po, po^\perp) ; la bimodalité est mise en évidence de façon très nette, ainsi que sur la projection sur le paramètre d'ordre.

Nous allons maintenant montrer qu'à partir des corrélations (E_{pot}, E_{coul}) , il est possible de reconstruire la façon dont la température de transition est modifiée par l'interaction coulombienne. La figure (6.7) suggère que la réduction de la température de transition due à l'interaction coulombienne montrée sur la figure (6.3) peut être interprétée comme

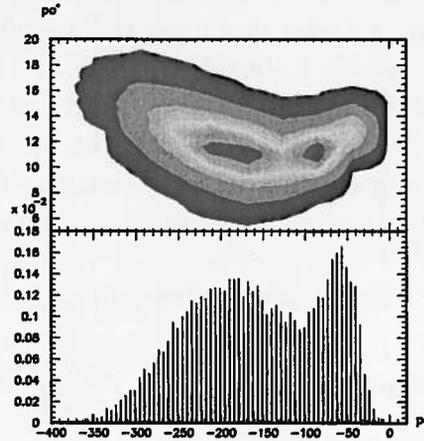


FIG. 6.8 – Haut : distribution des événements dans le plan (p_0, p_0') ; bas : projection de l'ensemble des événements sur le paramètre d'ordre.

une rotation des événements dans le plan des énergies partielles E_{pot} et E_{coul} qui conduit à une modification du paramètre d'ordre (figure (6.8)) plutôt qu'à une effective réduction de la zone de coexistence. Nous avons vu que tant que la charge du système n'est pas trop forte, les partitions explorent la même région de l'espace énergie coulombienne-énergie attractive ; seule la température doit être modifiée puisque l'énergie totale est changée par l'inclusion de l'interaction coulombienne. En prenant comme hypothèse que le long du paramètre d'ordre (équation 6.4) la distribution avec ou sans interaction coulombienne est inchangée et reste donc bimodale le long d'une ligne joignant deux extrema. Cela impose :

$$\frac{1}{Z_{\beta\lambda}^{pot}} W_{\lambda}(E_{pot}, E_{coul}) e^{-\beta E_{pot}} \propto \frac{1}{Z_{\beta\lambda}^{tot}} W_{\lambda}(E_{pot}, E_{coul}) e^{-\beta' E_{tot}}$$

lorsque :

$$E_{coul} = -\tan \alpha * E_{pot} + \text{constante} \quad (6.5)$$

On aboutit alors à la relation entre les deux températures de transition :

$$\beta = \beta'(1 - \tan \alpha) \quad (6.6)$$

Il faut noter que si $\tan \alpha > 1$, il n'y a plus de température canonique pour l'ensemble incluant l'énergie coulombienne qui permettrait d'élever la transition de phase. Cette équation peut être vérifiée pour le système de $A = 40$ particules, pour lequel la température de transition est $\frac{1}{\beta'} = 1.95 \text{ MeV}$ avec Coulomb à $\ln(\lambda) = -7.00$. En évaluant $\tan \alpha \simeq 0.133$, on retrouve $\frac{1}{\beta} = 2.25 \text{ MeV}$ sans Coulomb. Ceci signifie que la répartition des événements nous permet de retrouver la température de transition en s'affranchissant des effets coulombiens. En effet l'hypothèse de non modification de la bimodalité à la

température de transition revient à supposer que les partitions les plus probables de la phase dense ne sont pas fortement affectées lorsque l'énergie coulombienne est prise en compte et que seule la température est affectée.

Ceci est possible seulement si l'introduction de l'interaction coulombienne ne modifie pas sensiblement les distributions en E_{pot} et E_{coul} à la température de transition. Dans ce cas, la modification de la température de transition causée par les effets coulombiens (équation 6.6) peut être approximativement évaluée grâce à l'approximation de goutte liquide.

Nous utilisons la formule de Bethe-Weizsäcker [56] pour le liquide sur le réseau :

$$B(A, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} + C \quad (6.7)$$

B est le défaut de masse, $a_v = 16.5 MeV$ le terme de volume, $a_s \simeq 16.5 MeV$ le terme de surface et $a_c = 0.35 MeV$ le terme coulombien dans le cadre du modèle, à comparer aux valeurs de la physique nucléaire $a_v = 18.3 MeV$, $a_s = 17.8 MeV$, $a_c = 0.73 MeV$ [56]; C dénote des corrections d'ordre supérieur. En physique nucléaire, la nature fermionique des protons et neutrons et la dépendance en isospin de l'interaction nucléaire conduit à un terme d'asymétrie supplémentaire. Dans le calcul présenté, compte-tenu de l'indépendance en isospin des interactions supposée par simplicité, ce terme n'est pas présent. L'énergie potentielle E_{pot} contient les termes de volume et de surface; l'énergie coulombienne E_{coul} le terme coulombien. Nous comparons donc la contribution des termes coulombien B_{coul} par rapport à celle du volume et de la surface B_{pot} . En supposant que le gaz est sans interactions nous trouvons, pour $A = 40$, $B_c = 159.7 MeV$ et $B_v = 467.0 MeV$. Ceci nous donne :

$$\frac{B_{coul}}{B_{pot}} = \tan \alpha = 0.34$$

ce qui est une valeur relativement différente de ce que nous obtenons (0.133). Ce calcul est toutefois très approximatif et ne permet qu'une compréhension qualitative des phénomènes étudiés. Le rôle de l'interaction coulombienne est alors tel qu'il semble improbable qu'il puisse être simplement pris en compte par une renormalisation de la température car les partitions doivent être affectées. C'est ce que semblent indiquer nos résultats sur les courbes caloriques.

6.4.3 Ensemble multicanonique

Nous avons vu que projeter les événements selon l'énergie totale provoque une apparente réduction de la zone de coexistence, car E_{tot} ne correspond pas à la direction du paramètre d'ordre des distributions des événements dans le plan (E_{pot}, E_{coul}) . Cependant, puisque les distributions $P_\beta(E_{pot}, E_{coul})$ à la température de transition sont très similaires, il doit être possible de reconstruire la même thermodynamique, que les systèmes soient chargés ou non. Afin de pouvoir étudier les propriétés de la transition liquide gaz, nous devons introduire le paramètre d'ordre et sa variable conjuguée dans notre description statistique. Cela nous conduit à considérer E_{pot} et E_{coul} comme observables afin de remonter aux caractéristiques de la transition, malgré les effets coulombiens. Comme E_{pot} et E_{coul}

sont les variables qui discriminent les classes d'événements (paragraphe 6.4.2), nous les définissons comme deux grandeurs observées en moyenne sur une collection d'états. Ainsi deux multiplicateurs de Lagrange leur sont respectivement associés : β_P et β_C . Ceci définit un ensemble multicanonique, avec deux "températures" de telle sorte que la probabilité d'observer E_{pot} et E_{coul} est :

$$P_{\lambda\beta_{pot},\beta_{coul}}(E_{pot}, E_{coul}) = \frac{W_{\lambda}(E_{pot}, E_{coul})}{Z_{\lambda\beta_{pot}\beta_{coul}}} e^{-\beta_{pot}E_{pot}-\beta_{coul}E_{coul}}$$

Si $\beta_P = \beta_C$, l'ensemble décrit est l'ensemble canonique pour un système avec une interaction coulombienne ; si $\beta_{coul} = 0$, c'est l'ensemble canonique pour un système sans interaction coulombienne.

Nous nous intéressons dans un premier temps à $\beta_{coul} = 0$: ceci revient à ne pas considérer l'énergie coulombienne, et le poids Metropolis est le même que dans le cas où la charge est nulle. Les résultats de l'ensemble $\beta_{coul} = 0$ sont donc identiques à ceux trouvés sans Coulomb. En effet, la densité d'états en E_{pot} provient directement de la densité d'états en (E_{pot}, E_{coul}) par simple intégration :

$$W(E_{pot}) = \int W(E_{pot}, E_{coul}) dE_{coul}$$

ce qui revient à écrire :

$$P_{\beta}(E_{pot}) = \int P_{\beta_{pot},\beta_{coul}=0}(E_{pot}, E_{coul}) dE_{coul}$$

La figure (6.9) représente la distribution des événements dans le plan (E_{pot}, E_{coul}) pour $\beta^{-1} = 2.25 MeV$, qui est la température de transition définie sur la figure (6.6). Le minimum des distributions de probabilité est beaucoup plus marqué que sur la figure (6.7) dans laquelle l'énergie coulombienne était considérée. Les distributions dans le plan du paramètre d'ordre po et po^{\perp} pour un système neutre et un système chargé sont illustrées sur la figure (6.10). Les deux classes d'événements sont plus clairement séparées à $\beta_{coul} = 0$ qu'à $\beta_{coul} = \beta_{pot}$. Cependant, la même zone de l'espace de phase est exploré, même si elle est légèrement plus étalée avec l'interaction coulombienne. Ainsi les distributions se recouvrent, ce qui est une condition nécessaire à la reconstruction d'une distribution bidimensionnelle à partir de l'autre en repondérant les événements par le facteur :

$$e^{\beta' E_{pot} + \beta' E_{coul} - \beta E_{pot}}$$

en ayant choisi $1/\beta = 2.25 MeV$ et $1/\beta' = 1.97 MeV$ comme le montre la figure (6.11).

Les événements repondérés sont identiques à ceux observés sans l'énergie coulombienne. Ceci signifie qu'il est possible de retrouver les caractéristiques de la transition de phase, en s'affranchissant de l'interaction coulombienne, et ce par repondération des événements. La seule condition est que les événements des deux ensembles se recouvrent.

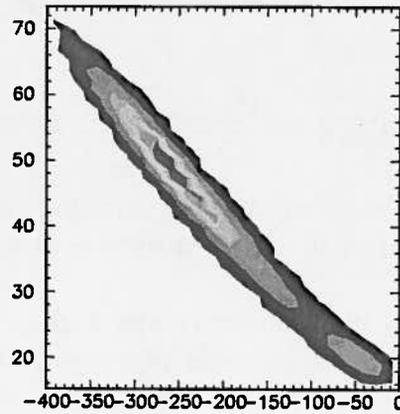


FIG. 6.9 – *Distribution des événements en (E_{pot}, E_{coul}) pour $1/\beta = 2.25\text{MeV}$ et $Ln\lambda = -7.00$ dans le cas où l'énergie coulombienne n'est pas considérée.*

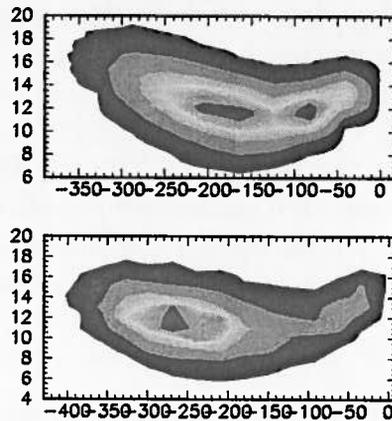


FIG. 6.10 – *Comparaison des distributions des événements dans (p_0, p_0^\perp) à la température de transition $1/\beta = 1.97\text{MeV}$ si l'énergie coulombienne est observée (haut) et si l'énergie coulombienne n'est pas considérée, à $1/\beta = 2.25$ (bas) et pour le même $\lambda = -7.00$.*

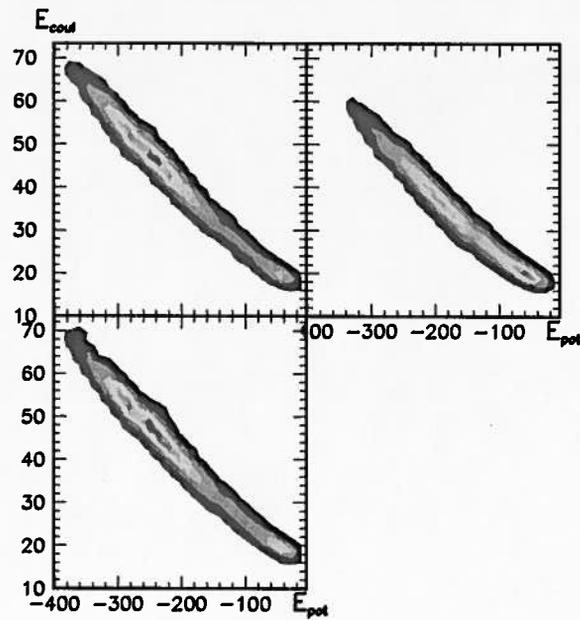


FIG. 6.11 – Haut : distribution des événements en $(E_{\text{coul}}, E_{\text{pot}})$ si l'énergie coulombienne n'est pas observée ($\beta^{-1} = 2.25 \text{ MeV}$) (gauche); si elle est observée ($\beta^{-1} = 1.97 \text{ MeV}$) (droite), et repondérée (bas gauche); $\lambda = -7.00$.

Chapitre 7

Perspectives

Nous abordons ici deux problématiques : la première concerne la définition des fragments dans le cadre d'une interaction à longue portée comme l'interaction coulombienne. Nous donnerons la méthode de constitution des fragments dans ce cadre. La seconde est dédiée aux aspects quantiques, que nous avons négligés dans les chapitres précédents. Nous exposerons le cadre nécessaire à la description thermodynamique d'un système quantique.

7.1 Fragments en présence d'une force à longue portée

Avec la même démarche que celle du chapitre (4), l'étude des fragments complète l'étude de la thermodynamique. Il est intéressant de savoir dans quelle mesure les distributions en masse sont modifiées par l'interaction coulombienne, et en particulier les comportements critiques. Les phénomènes spécifiques comme la fission peuvent amener à des comportements particuliers des distributions en masse. Nous aborderons dans ce paragraphe la définition des fragments dans le cadre d'une interaction à portée infinie.

7.1.1 Algorithme

Principe

L'algorithme de Coniglio-Klein tient compte de l'énergétique en sites plus proches voisins. Il est possible d'inclure l'énergie coulombienne directement dans l'algorithme, à condition que la contribution coulombienne des autres sites n'apporte qu'une faible correction [53]. En toute rigueur, les interactions à l'intérieur d'un fragment, et entre fragments, doivent être considérées. En effet, un fragment peut avoir une forme que l'interaction coulombienne casse. C'est le cas dans la fission où l'énergie coulombienne est maximisée. Nous devons donc rechercher les différentes cassures possibles à l'intérieur d'un fragment qui correspondent à un minimum d'énergie. Nous allons dans ce paragraphe montrer comment mettre en place l'algorithme qui permet de le faire.

Méthode

Une possible procédure a été proposée par C. Dorso et J. Randrup [57] dans le cadre de la dynamique moléculaire. Elle permet dans ce cadre de reconnaître les fragments de façon précoce à travers un tirage statistique Metropolis qui cherche le minimum d'énergie parmi toutes les fragmentations possibles.

Dans notre implémentation de la méthode, nous considérons séparément chaque fragment d'Ising. Ce fragment d'Ising sera séparé en plusieurs fragments plus petits en cherchant la partition qui correspond à la liaison maximum. Celle-ci est recherchée par un refroidissement progressif de la partition du fragment d'Ising. Dans un premier temps, tous les liens à l'intérieur du fragment sont brisés. Nous avons choisi cette initialisation car en diminuant la température θ , les particules tendent à se regrouper. La valeur de départ de θ est de l'ordre de grandeur de l'interaction entre plus proches voisins et elle décroît d'un facteur qui est un paramètre libre de la numérique. Si ce facteur est élevé ($\simeq 99\%$), le système peut explorer une large partie de l'espace de phase. Cependant, il est possible qu'il ne converge pas vers le minimum d'énergie. Nous avons choisi de diminuer rapidement θ , d'un facteur 85%. Nous avons contrôlé l'énergétique pour des systèmes simples connus. C'est ce que nous montrerons au paragraphe suivant. L'algorithme est représenté sur la figure (7.1).

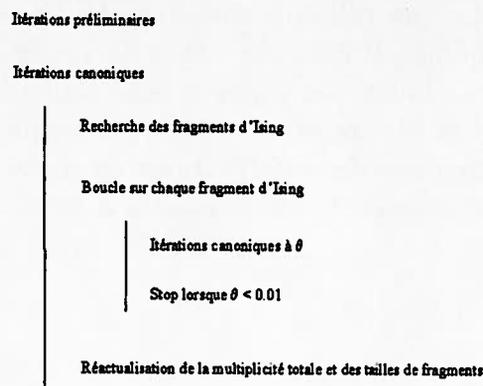


FIG. 7.1 – Architecture du programme de constitution des fragments selon l'algorithme de Dorso.

Constitution des fragments

Nous venons d'évoquer une méthode de refroidissement utilisé pour trouver la partition des fragments d'Ising qui minimise l'énergie (l'énergie de liaison). Décrivons cet algorithme

plus en détail. Plusieurs processus de formation et de décomposition sont envisageables :

1. l'échange d'une particule d'un fragment à un autre (probabilité 6/9) ;
2. l'évaporation d'une particule (probabilité 1/9) ;
3. la fission d'un fragment (probabilité 1/9) ;
4. la fusion de deux fragments (probabilité 1/9).

Le poids donné à chacun de ces processus est choisi de façon arbitraire. Par exemple, le poids donné à l'échange d'une particule d'un fragment à l'autre est évalué par rapport au nombre moyen de plus proches voisins dans le réseau : 6. En toute rigueur, le poids relatif d'une possibilité ne change pas le résultat final si l'ensemble de l'espace de phase est exploré car en fait nous ne cherchons que le minimum d'énergie. Le choix du poids influe seulement sur la rapidité de la convergence de l'algorithme.

D'un point de vue pratique, une particule i_1 est choisie au hasard. L'un des processus est choisi :

1. Si c'est l'échange d'une particule, un plus proche voisin est tiré au hasard. S'il appartient à un fragment voisin, la particule initiale est échangée entre les deux fragments ; s'il appartient au même fragment, rien n'est changé.
2. Si c'est l'évaporation, le(s) lien(s) entre la particule et le reste du fragment est (sont) brisé(s).
3. Si c'est la fusion, un site plus proche voisin est tiré au hasard. S'il est occupé par une particule appartenant à un autre fragment, les deux fragments auxquels appartiennent les particules fusionnent.
4. Si c'est la fission, une deuxième particule est tirée au hasard à l'intérieur du même fragment. Les distances relatives de toutes les particules i du fragment par rapport aux deux particules i_1 et i_2 sont calculées. Les deux fragments sont constitués en minimisant cette distance : si par exemple la distance $|r_i - r_{i_1}| < |r_i - r_{i_2}|$, la particule i est attribuée au même fragment de fission que la particule i_1 .

L'ensemble des processus est illustré sur la figure (7.2). Nous appellerons les fragments obtenus par cet algorithme les fragments de Dorso-Randrup.

A priori il est possible qu'un tel algorithme ne donne pas le même résultat que celui de Coniglio-Klein lorsque l'on supprime l'interaction coulombienne. Or cet aspect est important puisqu'il assure aux distributions en masse un comportement critique au point critique thermodynamique. Nous démontrerons que ces deux algorithmes sont en fait équivalents au paragraphe (7.2.).

Une fois le processus effectué, la dernière configuration est retenue avec une probabilité qui s'écrit en fonction de la différence d'énergie ΔE entre les configurations après et avant modification :

$$P = \exp\left(\frac{-\Delta E}{\theta}\right)$$

La méthode Metropolis utilisée est identique à celle présentée au chapitre (2). Cette énergie est simplement la somme des énergies de liaison des fragments, qui ne prend en compte

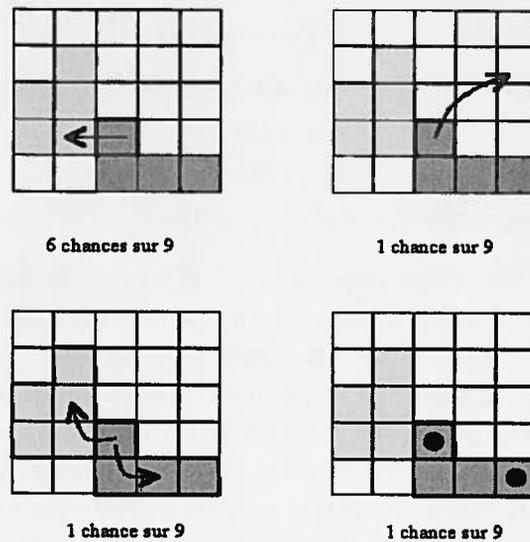


FIG. 7.2 – Méthode de constitution des fragments selon l'algorithme de Dorso-Randrup. Deux fragments sont représentés, l'un gris clair (1), l'autre gris foncé (2). La première particule choisie est entourée en noir et appartient initialement au fragment (2). Haut gauche : échange de la particule entre les deux fragments voisins ; haut droite : la particule est évaporée ; bas gauche : les deux fragments fusionnent ; bas droite : les deux particules servant à effectuer la fission du fragment (2) sont représentées en points noirs.

ni les interactions entre fragments ni leur mouvements relatifs. L'énergie considérée ici est la somme des énergies des plus proches voisins, coulombienne, et cinétique à l'intérieur de chaque fragment. Elle est calculée dans le centre de masse de chaque fragment.

Quatre variables caractéristiques de la méthode sont représentées sur la figure (7.3) pour chaque événement pour un fragment d'Ising de départ : θ , l'énergie totale, la variation d'énergie ΔE , et la multiplicité totale des fragments. Ici seuls les 25000 premiers événements sont représentés. Le système considéré est à deux dimensions et il est constitué de 22 particules placés en carré, avec une particule supplémentaire sur un bord. Les impulsions sont toutes nulles et la charge est nulle. Le minimum d'énergie peut être validé par un calcul analytique : il vaut $\epsilon * 28 \text{ liens} = -153 \text{ MeV}$. Cette valeur est bien retrouvée sur la figure (7.3) lorsque la température θ décroît. Le système reste dans cette configuration comme le montre le comportement de ΔE . Enfin, l'algorithme reconstruit un seul fragment à partir des monomères issus de la brisure initiale du fragment d'Ising, et la multiplicité tend vers 1.

Ces résultats montrent que nous contrôlons la numérique. Dans le cas présent, le système reste dans la configuration d'énergie minimale. Cependant, même si θ diminue, les tirages Metropolis peuvent en principe l'amener dans une configuration différente, qui est facilement choisie à la fin du processus de refroidissement, même si elle ne correspond pas à la dernière configuration acceptée. Afin de nous assurer que la configuration finale est correcte, nous gardons en mémoire toute nouvelle configuration d'énergie minimale.

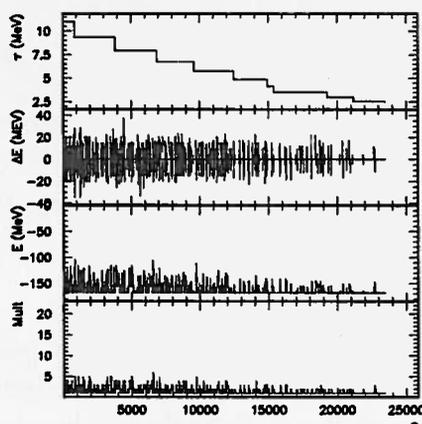


FIG. 7.3 – Evolution du paramètre θ en fonction des itérations Metropolis n ; variation d'énergie ; énergie d'interaction ; multiplicité.

7.1.2 Propriétés énergétiques des fragments

Lien avec les fragments de Coniglio-Klein

Nous nous proposons de faire le lien entre les fragments de Coniglio-Klein et les fragments de Dorso-Randrup. Dans l'algorithme de Coniglio-Klein, le critère de cassure du lien est local, en ce sens qu'il ne considère que deux particules voisines ; au contraire, la méthode de Dorso-Randrup consiste à déterminer le minimum global de l'énergie de liaison. Nous nous proposons de vérifier que, dans le cas où les forces sont à courte portée, ces deux approches sont équivalentes à l'équilibre. Ceci a pour conséquence que l'application de l'algorithme de Dorso-Randrup ne modifie pas les résultats du chapitre (4). En particulier, les fragments de Dorso-Randrup auront un comportement critique au point critique thermodynamique.

Nous considérerons, par simplicité, la probabilité d'évaporation à l'équilibre d'une particule liée avec un seul lien à un fragment. L'énergie du fragment avant brisure d'un lien sur un fragment de $A + 1$ particules vaut :

$$E_1 = \sum_{i=1}^{A+1} \frac{(p_i - p_{CM})^2}{2m} + E_{pot}(A) - \epsilon$$

Après brisure d'un lien, l'énergie du fragment est :

$$E_2 = \sum_{i=1}^A \frac{(p_i - p'_{CM})^2}{2m} + E_{pot}(A)$$

Nous allons évaluer ces deux quantités. Pour cela, nous remarquons que :

$$\sum_{i=1}^{A+1} \frac{(p_i - p_{CM})^2}{2m} = \frac{A+1}{2m} \left(1 + \frac{1}{A+1} \right) \langle p^2 \rangle$$

Ainsi il est immédiat que, si :

$$\langle E_2 \rangle - \langle E_1 \rangle = -\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \epsilon > 0$$

la cassure se produit, ce qui prouve l'équivalence, en moyenne, des deux algorithmes. Cette équivalence doit être testée aussi dans des configurations plus générales que celle considérée ci-dessus. Ceci ne peut se faire qu'à l'aide de simulations numériques.

Tests numériques

Nous considérons un système simple, constitué de deux particules. Nous allons vérifier que nous retrouvons la même impulsion de cassure avec l'algorithme de Coniglio-Klein et celui de Dorso-Randrup. En effet, si $q = 0$, considérons le critère de Coniglio-Klein :

$$\frac{\langle p_{rel}^2 \rangle}{2m} + \epsilon < 0$$

qui ne casse pas le lien. Comme $\epsilon = -5.5 MeV$, la cassure se produit pour $p_{rel} = 143.11 MeV$. La partie gauche de la figure (7.4) donne la multiplicité pour différentes valeurs de p_{rel} . Autour de $p_{rel} = 143 MeV$, le système casse.

D'autre part, si l'on tient compte de l'énergie coulombienne, le critère de Coniglio-Klein devient :

$$\frac{p_{rel}^2}{2m} + \epsilon + \frac{q^2}{\delta_L} < 0$$

et le terme coulombien est ici exact dans le cas de deux particules. L'impulsion limite est abaissée de $2.62 MeV$ si $q = e/2$. On peut le vérifier sur la partie droite de la figure (7.4) sur laquelle la multiplicité passe à 2 pour une impulsion relative autour de $140 MeV$.

Une dernière vérification a consisté à calculer le couplage coulombien e au-delà duquel le système n'est pas lié. Nous nous sommes placés pour cela à impulsions nulles. Par une analyse analogue à la précédente, le système casse si $e > 9$.

Cette série de tests nous permet de valider l'algorithme de Dorso-Randrup. Une dernière vérification nécessaire est l'accord entre les distributions en masse calculées avec des fragments de Dorso et de Coniglio pour $q = 0$ au point critique thermodynamique. Cette étude reste à être finalisée.

7.2 Introduction des effets quantiques

Le formalisme des fluctuations partielles d'énergie cinétique et le modèle du gaz sur réseau a été utilisé dans un cadre purement classique. Or, si l'on veut l'appliquer aux noyaux atomiques, les effets quantiques doivent être pris en considération.

Le problème majeur imposé par la mécanique quantique est qu'il devient impossible de dissocier énergie potentielle et énergie cinétique à cause du principe de Heisenberg

$$\Delta x \Delta p \simeq \hbar$$

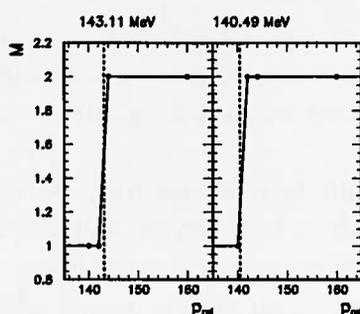


FIG. 7.4 – *Gauche* : multiplicité en fonction de l'impulsion pour l'algorithme de Coniglio-Klein et Dorso-Randrup donnent les mêmes résultats (points) si $e = 0$; droite : si $q = e/2$; l'impulsion limite est indiquée et signalée par la ligne tiretée verticale dans les deux cas.

De plus le principe de Pauli doit être respecté via l'antisymétrisation des fonctions d'onde des fermions. Les énergies cinétique et potentielle ne peuvent être découplées. On s'attend donc, *a priori*, que les expressions développées au chapitre (1.3.2.) ne soient plus valables pour un système quantique. Seules des simulations dans le cadre de modèles quantiques exacts pourraient indiquer si ces expressions constituent encore une approximation raisonnable, et donc justifier pleinement leur applicabilité aux données de physique nucléaire. Nous avons commencé à aborder la problématique à partir d'un réseau de von Neumann dans le formalisme de F.M.D. (Fermionic Molecular Dynamics)[67].

7.2.1 Représentation des fonctions d'onde sur la base des états cohérents

Nous allons définir les états dans le réseau de von Neumann. Nous nous plaçons sur la base surcomplète des états cohérents. Les états s'expriment en fonction de l'opérateur création a^+ et annihilation a . Ils sont générés à partir de l'état vide $|0\rangle$ par transformation unitaire et caractérisé par le nombre complexe z [68]

$$|z\rangle = e^{za^+ - z^*a}|0\rangle$$

On calcule facilement que :

$$\langle z_2|z_1\rangle = e^{-\frac{|z_2|^2}{2} + z_2^*z_1 - \frac{|z_1|^2}{2}}$$

L'intérêt du réseau de von Neumann est de discrétiser z [69] et

$$z = \alpha_{mn} = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda} \left(na_0 + i \frac{2\pi}{a_0} \lambda^2 m \right)$$

où λ est une normalisation, m et n des entiers. Nous pouvons en fait introduire une position r_n et une impulsion p_n . L'état cohérent est alors noté $|r_n p_n\rangle$. Cette forme nous permet d'associer un pas a_0 sur \vec{r} correspondant à un pas $\frac{1}{a_0}$ en \vec{p} et assure la conservation de la surface d'une cellule égale à π .

Tout état peut être décomposé sur la base des $|\alpha_{mn}\rangle$, qui ne sont pas orthogonaux mais complets [69]. Nous allons montrer la façon de calculer les éléments de matrice des opérateurs, en prenant l'exemple des recouvrements, qui seront très utilisés, notamment pour l'antisymétrisation. La représentation sur les états cohérents des fonctions d'onde est donnée par les relations

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \langle x | \vec{r}_n \vec{p}_n \rangle \\ &= \left(\frac{1}{\pi a_0} \right)^{3/4} e^{-\frac{(x-r_n)^2}{2a_0} + i \vec{p}_n x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_n(k) &= \langle k | \vec{r}_n \vec{p}_n \rangle \\ &= \left(\frac{a_0}{\pi} \right)^{3/4} e^{-a_0 \frac{(k-p_n)^2}{2} - i \vec{r}_n (k-p_n)} \end{aligned}$$

Nous considérons deux états $|r_n p_m\rangle$ et $|r'_n p'_m\rangle$. Leur recouvrement s'exprime simplement comme la distance relative dans l'espace de phase

$$\langle r_n p_m | r'_n p'_m \rangle = e^{\frac{(n-n')^2 - (m-m')^2}{a_0}}$$

Le réseau de von Neumann est caractérisé par la relation de fermeture sur les états $|r_i p_i\rangle$ pour une particule

$$\hat{1}^{(1)} = \frac{1}{2\pi} \sum_{n,m} |r_n p_n\rangle \langle r_m p_m|$$

qui caractérise la normalisation des fonctions de partition. Elle se généralise à N particules comme le produit tensoriel des opérateurs identité à une particule m , $\hat{1}_m^{(1)}$:

$$\hat{1}^{(N)} = \hat{1}_1^{(1)} \otimes \hat{1}_2^{(1)} \otimes \dots \otimes \hat{1}_N^{(1)}$$

Par souci de clarté, nous notons l'état à une particule $|q_i\rangle = |r_n \vec{p}_m\rangle$. Nous considérons l'état à N fermions $|q_1\rangle |q_2\rangle \dots |q_N\rangle$. L'opérateur antisymétrisation A sur cet état est défini par:

$$\hat{A} |q_1\rangle |q_2\rangle \dots |q_N\rangle = \frac{1}{N!} \sum_P \text{sgn}(P) |q_1\rangle |q_2\rangle \dots |q_N\rangle$$

La somme porte sur toutes les permutations possibles. Il est à noter que $\hat{A}^2 = \hat{A}$. La relation de fermeture devient, en tenant compte de l'antisymétrisation:

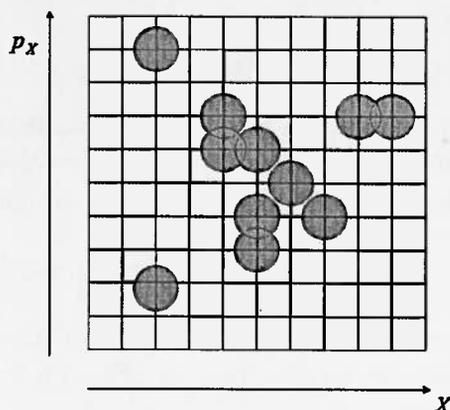


FIG. 7.5 – Schéma de modélisation d'un problème unidimensionnel, où les fonctions d'onde sont des gaussiennes en (x, p_x) réparties sur un réseau de von Neumann.

$$\hat{A}\hat{1}\hat{A} = \hat{A}|i_1j_1\rangle \otimes |i_2j_2\rangle \otimes \cdots |i_Nj_N\rangle \langle i_1j_1| \otimes \cdots \langle i_Nj_N| \hat{A}$$

où $\hat{A}|i_1j_1\rangle \otimes |i_2j_2\rangle \otimes \cdots |i_Nj_N\rangle$ est le déterminant de Slater du système; il sera noté $|Q\rangle$ dans la suite. Les états $|Q\rangle$ ne sont pas normalisés. En effet,

$$\langle Q|Q\rangle = \langle q_1 \cdots q_N | \hat{A} | q_1 \cdots q_N \rangle = \det \langle q_i | q_j \rangle$$

Les éléments de matrice de l'opérateur antisymétrisation sont donnés par les recouvrements des états. La relation de fermeture est alors

$$\hat{1} = \sum |Q\rangle \langle Q|$$

7.2.2 L'opérateur statistique

Il est maintenant nécessaire de reconstruire la thermodynamique dans le cadre de la mécanique quantique. Pour cela nous définissons l'opérateur statistique \hat{R} tel que :

$$\hat{R} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$$

\hat{H} est l'hamiltonien du système. Les grandeurs thermodynamiques, comme par exemple l'énergie moyenne $\langle E \rangle$, sont calculées à partir de \hat{R}

$$\langle E \rangle = \text{tr}(\hat{R}\hat{H}) = \sum \langle Q | \hat{R}\hat{H} | Q \rangle$$

La fonction de partition est donnée par :

$$Z = \text{tr}(\hat{R}) = \sum \langle Q | \hat{R} | Q \rangle$$

Ce calcul n'est cependant pas évident car l'expression de la valeur moyenne de l'opérateur statistique n'est pas connue. En effet,

$$\langle Q|\hat{R}|Q\rangle = \langle Q|e^{-\beta\hat{H}}|Q\rangle \neq e^{-\beta\langle Q|\hat{H}|Q\rangle}$$

Ainsi, dériver $\ln Z$ pour avoir accès à toutes les grandeurs thermodynamiques n'est pas simple : elles ne peuvent être faites directement sur les éléments de matrice de l'hamiltonien. Une solution consiste à considérer la valeur moyenne de toute observable \mathcal{O}

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \langle Q|\mathcal{O}e^{-\beta\hat{H}}|Q\rangle$$

comme le résultat d'une propagation avec un temps imaginaire en remplaçant $e^{i\hat{H}t}$ par $e^{-\beta\hat{H}}$. La résolution peut être envisagée par un principe variationnel.

7.2.3 Tri microcanonique

La thermodynamique que nous nous proposons de reconstruire est microcanonique ; ceci implique de savoir trier correctement les états selon leur énergie. Or, la largeur en énergie des états est importante, du fait que l'énergie est calculée sur la base des déterminants de Slater, qui n'est pas la base propre de l'hamiltonien. Si cette largeur est supérieure au pas de tri en énergie, l'état comptera pour plusieurs énergies. Ceci implique que le choix des états $|Q\rangle$ n'est pas *a priori* optimisé pour des études microcanoniques. Si l'on veut exploiter également cette approche, une solution possible bien qu'imparfaite consiste à contraindre la largeur $\hat{\sigma}_E^2$ des états, à travers la valeur moyenne de \hat{H}^2 . Le multiplicateur de Lagrange associé à \hat{H}^2 est λ_σ . La largeur des états est reliée à \hat{H}^2 par $\hat{\sigma}_E^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2$. La thermodynamique est définie dans l'ensemble gaussien (β, λ_σ) . Ainsi nous redéfinissons l'opérateur statistique :

$$\hat{R} = \frac{1}{Z_{\beta\lambda_\sigma}} \exp(-\beta\hat{H} - \lambda_\sigma\hat{H}^2)$$

L'entropie gaussienne s'écrit :

$$S = S(\bar{E}, \sigma_E^2) = \ln Z + \beta\bar{E} + \lambda_\sigma(\sigma_E^2 + \bar{E}^2)$$

d'où

$$dS = (\beta + 2\lambda_\sigma\bar{E})d\bar{E} + \lambda_\sigma d\sigma_E^2$$

Par exemple, l'énergie moyenne est définie comme :

$$\bar{E} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \Big|_{\lambda_\sigma}$$

et la température :

$$T = \left(\frac{\partial S}{\partial \bar{E}} \Big|_{\lambda_\sigma} \right)^{-1} = \frac{1}{\beta + 2\lambda_\sigma\bar{E}}$$

Pour $\lambda_\sigma = 0$, on retrouve le résultat connu dans l'ensemble canonique.

Une première vérification de la consistance de l'approche peut par exemple consister à simuler un gaz libre de fermions. La température du système devrait être proportionnelle

à la racine carrée de l'énergie. Pour cela, il est nécessaire de connaître la valeur moyenne de l'énergie cinétique à température finie. Cependant ces vérifications sont en cours, car l'écriture du code en entier est à ses débuts.

Chapitre 8

Conclusions

Dans cette thèse, nous avons abordé l'étude des transitions de phase des systèmes finis à l'aide de simulations numériques dans le cadre du modèle du gaz sur réseau. Malgré la taille finie du système, nous avons déterminé sa thermodynamique dans le cadre de la mécanique statistique.

Dans l'ensemble microcanonique, nous retrouvons bien un défaut de courbure dans l'entropie en fonction de l'énergie dans la zone de coexistence comme signal de transition de phase du premier ordre. Celle-ci est reliée à l'observation d'une capacité calorifique négative et de fluctuations d'énergie cinétique "anormalement" grandes. Nous avons travaillé particulièrement dans le cadre d'un système dont le volume est défini en moyenne. Ceci nous permet de traiter correctement les systèmes ouverts comme les sources de multifragmentation formées lors de collisions d'ions lourds. Dans le cadre de la mécanique statistique ceci correspond à la contrainte d'un multiplicateur de Lagrange associé à la pression. L'intérêt d'utiliser les fluctuations d'énergie cinétique comme observable de la transition de phase est de deux ordres :

1. C'est une variable dont la valeur ne dépend pas du chemin suivi. En effet, dans les transitions de phase de type liquide gaz, deux paramètres d'ordre, *i.e.* deux variables extensives pertinentes ont été reconnues pour les systèmes finis : l'énergie et le volume. Dans cet espace bidimensionnel d'observables, la courbe calorifique est seulement une projection sur l'axe des énergies et sa forme fonctionnelle dépend explicitement de l'espace des observables. Par contre les fluctuations d'énergie cinétique en tant que variable d'état donnent en chaque point, et indépendamment de la transformation, une information sur l'éventuelle courbure anormale de l'entropie.

2. C'est une observable accessible expérimentalement : à partir du tri des événements en énergie et en taille de source, les fluctuations d'énergie cinétiques peuvent être reconstruites.

Nous avons également généralisé la définition de transition de phase, en partant de la distribution des événements dans les variables d'état énergie et volume. Cette considération nous a amené à signer une transition de phase dans les possibles bimodalités des distributions de probabilité de différentes variables extensives. Nous avons vu que la signature d'une transition de phase à travers les défauts de courbure de la distribution de probabilité est également applicable à des systèmes non extensifs, dans le sens d'une statistique autre que la statistique de Gibbs. En appliquant ces concepts pour

la transition liquide gaz d'un système chargé, nous avons été capables d'extraire les signaux thermodynamiques en nous affranchissant des effets coulombiens. Nous avons pu observer que le principal effet de l'interaction coulombienne est de provoquer une rotation des distributions des événements dans le plan des variables énergie potentielle de proches voisins - énergie coulombienne. Ainsi l'apparente réduction de la zone de coexistence dans le plan température-énergie est partiellement explicable comme une rotation du paramètre d'ordre dans l'espace des observables, et les observables thermodynamiques mesurées peuvent (au moins en principe) être corrigées des effets coulombiens par repondération des distributions d'événements. Un tel phénomène peut être formalisé dans un ensemble multicanonique.

L'étude des fragments complète l'approche thermodynamique. Nous avons mis en évidence des comportements spécifiques au point critique sur une large gamme en densités. Ces signaux sont très nets aux densités surcritiques. Les résultats préliminaires à densités sous critiques laissent penser que les phénomènes critiques peuvent être observés dans la zone de coexistence. Nous corroborons les résultats théoriques précédents. En outre, nous les avons étendu pour un système ouvert. L'observation d'une fonction d'échelle est un signal possible de l'existence d'une transition de phase, même s'il ne permet pas d'en déterminer l'ordre. Elle doit s'accompagner d'une étude thermodynamique. D'un point de vue théorique, il est à noter qu'il est très important de compléter l'étude de la fonction d'échelle dans un cadre microcanonique afin de comparer directement les observables "géométriques" et thermodynamiques dans les mêmes conditions.

Il serait aussi intéressant de quantifier l'influence de l'interaction coulombienne sur les fragments, et de mesurer les exposants critiques ainsi que la température critique en fonction de la taille et de la densité pour les systèmes chargés. Une autre perspective consiste à prendre en compte les effets quantiques. A partir du modèle présenté dans le dernier chapitre, la mise en place des simulations numériques devrait permettre de comparer des systèmes classique et quantique. Le dernier point concerne l'isospin. Nous avons considéré dans l'ensemble de cette thèse des particules identiques. La possible introduction de deux charges conservées ouvre un champ que nous n'avons pas exploré dans le cadre des considérations de cette thèse.

Bibliographie

- [1] K. Huang, *Statistical mechanics* John Wiley & Sons, Inc. New-York London (1963).
- [2] D. Stauffer, A. Aharony, *Introduction to percolation theory* éd. Taylor&Francis (1992).
- [3] J.C. Tolédano, P. Tolédano, *The Landau theory of phase transitions - Application to structural, incommensurate, magnetic and liquid crystal systems* World Scientific (1987).
- [4] R. Balian, *Du microscopique au macroscopique. Cours de physique statistique de l'Ecole Polytechnique* éd. Ellipses (1982).
- [5] D.H.E. Gross, *Straight way to thermo-statistics, phase transitions, second law of thermodynamics, but without thermodynamic limit* cond-mat/0105313
- [6] F. Gulminelli, Ph. Chomaz, *Critical behavior in the coexistence region of finite systems*, Phys. Rev. Lett. 82, nb 7, p.1402 (1999).
- [7] M. Le Bellac, *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, Interditions/Editions du CNRS (1988).
- [8] R.W. Minich et al. Phys. Lett. B118, p.458 (1982).
- [9] M. d'Agostino et al. *Negative heat capacity in the critical region of nuclear fragmentation: an experimental evidence of the liquid-gas phase transition* Phys.Lett. B473 p.219-225 (2000); M. Belkacem *Searching for the Nuclear Liquid-Gas Phase Transition in Au + Au Collisions at 35 MeV/nucleon* Phys.Rev. C54 p.2435-2444 (1996).
- [10] J.B. Elliott et al. *Nuclear multifragmentation, percolation and the Fischer Drop Model; common features of reducibility and thermal scaling* Phys. Rev. Lett. 85 p.1194-1197 (2000).
- [11] M. Schmidt et al., *Negative heat capacity for a Cluster of 147 sodium atoms* Phys. Rev. Lett. 86, nb 7, p.1191 (2001).
- [12] B. Farizon, *Multifragmentation of hydrogen clusters in high energy cluster-atom and cluster-cluster collisions*, Proceedings of the XXXVIII International winter meeting on nuclear Physics (2000).
- [13] J.M. Carmona, J. Richert, A. Tarancon, *A model for nuclear matter fragmentation: phase diagram and cluster distributions* Nucl.Phys. A643 p.115-134 (1998); J.M. Carmona, J. Richert, P. Wagner, *Order parameter fluctuations and thermodynamic phase transitions in finite spin systems and fragmenting nuclei* nucl-th/0105030.
- [14] F. Gulminelli, Ph. Chomaz, *Phase transition and fragment production in the lattice gas model* Int. J. of Modern Phys. E, vol.8, 6 p.527 (1999).
- [15] M. E. Fisher, *Physics*, vol 3-5 p.255 (1967).

- [16] J.P. Bondorf, A.S. Botvina, I.N. Mishtustin, *Isotopic and microcanonical temperatures in nuclear multifragmentation* Phys.Rev. C62 041602 (2000); A.S. Botvina, I.N. Mishtustin, *Statistical evolution of isotope composition of nuclear fragments* Phys.Rev. C63 061601 (2001).
- [17] Y.M. Zheng, J. Richert, P. Wagner, *Universal property of multifragmentation in nucleus-nucleus collisions* J.Phys. G22, nb 4, p. 505-510 (1996).
- [18] X. Campi, H. Krivine, *Critical behavior, fluctuations and finite size scaling in nuclear multifragmentation* Nucl. Phys. A545, p.161 (1992).
- [19] J.M. Carmona, N. Michel, J. Richert, P. Wagner, *Finite size effects and the order of a phase transition in fragmenting nuclear systems* Phys. Rev. C61 (2000).
- [20] J. Richert, J.M. Carmona, A. Taracón, *A model for nuclear matter fragmentation and cluster distributions* Nucl. Phys. A643, p. 115-134 (1998).
- [21] X. Campi, H. Krivine, *Clustering in supercritical nuclear matter: a lattice-gas approach* Nucl. Phys. A620, p. 46-54 (1997).
- [22] A. R. Raduta, A. H. Raduta, F. Gulminelli, Ph. Chomaz, accepté à Phys. Rev. C.
- [23] B. Ellatari, J. Richert, P. Wagner, *About the determination of critical exponents related to possible phase transitions in nuclear fragmentation* J. Phys. G24 p. 601-609 (1998).
- [24] J. Richert, J.M. Carmona, P. Wagner, *Microscopic systems with and without Coulomb interaction, fragmentation and phase transitions in finite nuclei* en cours de publication à Eur. Phys. J. A.
- [25] R. Botet, M. Ploszajczak *Fluctuations in the fragmentation process* Acta Physica Polonica B vol25, nb 3-4, p.353 (1994).
- [26] P. Borrmann, O. Mülken, J. Harting *Classification of phase transitions in small systems*, Phys. Rev. Lett. 84, nb 16, p.3511 (2000).
- [27] L. Casetti, M. Pettini, E.G.D. Cohen, *Geometric approach to hamiltonian dynamics and statistical mechanics*, Phys. Rev. E, vol 61, nb 5, p.5171 (2000).
- [28] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet, *Physique statistique* Hermann (1989).
- [29] D.H.E. Gross, Zhang Xiao-Ze, *Thermodynamics of nuclei and nuclear fragmentation* Nucl. Phys. A495 p.231c (1989).
- [30] Ph. Chomaz, F. Gulminelli, *Energy correlations as thermodynamical signals for phase transitions in finite systems* Nucl Phys. A (1999).
- [31] Ph. Chomaz, Bologne 2001.
- [32] R. M. Lynden-Bell, *Landau free energy, Landau entropy, phase transitions and limits of metastability in a analytical model with a variable number of degrees of freedom* Mol. Phys. vol86, nb 6, p.1353 (1995).
- [33] F. Gulminelli, Ph. Chomaz, in preparation.
- [34] E.M. Pearson, T. Halicioglu, W.A. Tiller, Phys. Rev. A (1985) 3030.
- [35] C.E. Shannon, *A mathematical theory of communication*, The Bell system technical journal, vol. 27, p.379-423, 523-656 (1948).
- [36] C.N. Yang, T.D. Lee, Phys. Rev. 87 (1952) 410; C.N. Yang and T. Lee, Phys. Rev. vol 97, p. 404 (1952).

- [37] N. Metropolis et al., *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087.
- [38] V. Duflot, Ph. Chomaz, F. Gulminelli, *Role of the surface in the critical behavior of finite systems*, *Phys. Lett.* B476, p.279 (2000).
- [39] Thèse de J. Marie, en préparation.
- [40] M. D'Agostino et al., *On the reliability of negative heat capacity measurements* soumis à *Nucl. Phys. A*.
- [41] L.G. Moretto, J.B. Elliott, L. Phair, G.J. Wozniak, *Negative heat capacities and first order phase transitions in nuclei and other mesoscopic systems* nucl-th/001037
- [42] R. Bougault for the INDRA collaboration, *Negative heat capacities in central Xe+Sn reactions* Proceedings of the XXXVIII International winter meeting on nuclear physics (1999).
- [43] M.-E. Fisher, *The theory of equilibrium critical phenomena* *Rep. Prog. Phys.* 30, p.615 (1967).
- [44] M. D'Agostino et al. *Thermodynamical features of multifragmentation in peripheral Au+Au collisions at 35 MeV* *Nucl. Phys.* A650 p.329 (1999).
- [45] J.B. Elliott, L.G. Moretto, L. Phair, G. J. Wozniak and the EOS Collaboration, *Nuclear multifragmentation, percolation and the Fisher Droplet Model: common features of reducibility and thermal scaling* *Phys. Rev. Lett.* 85, p. 1194-1197 (2000).
- [46] J.B. Elliott, L.G. Moretto, L. Phair, G. J. Wozniak and the ISIS Collaboration, *The liquid to vapor phase transition in excited nuclei* nucl-exp/0104013.
- [47] A. Coniglio, W. Klein, *J. Phys.* A13, p. 2775 (1980).
- [48] J. Pan, S. Das Gupta *Phys. Rev. C* 51 p. 1384 (1995).
- [49] X. Campi, H. Krivine, A. Puente, *On a definition of stable droplets in the lattice-gas model* *Physica A*262, no. 3-4, p. 328 (1999).
- [50] X. Campi, H. Krivine *Physica A*262, p. 328 (1999).
- [51] P. Bonche, S. Levit, D. Vautherin, *Properties of highly excited nuclei* *Nucl. Phys.* A427, p.278-296 (1984).
- [52] S.K. Samaddar, J. Richert, *Zeit. Phys.* A332 (1989), p.443.
- [53] J. Richert, P. Wagner, M. Henkel, J.M. Carmona, *Thermodynamics of a finite system of classical particles with short and long range interactions in nuclear fragmentation* *Nucl. Phys.* A639 p. 717-732 (1998).
- [54] Lj. Milanović, H.A. Posch, W. Thirring, *Statistical mechanics and computer simulation of systems with attractive positive power-law potentials* *Phys. Rev. E*, vol 57, nb 3, p.2763 (1998).
- [55] O. Shapiro, P.J. Kuntz, K. Möhring, P.A. Hervieux, D.H.E. Gross, M.E. Madjet, *Fragmentation phase transition in atomic clusters II: Coulomb explosion of metal clusters* 1997.
- [56] L. Valentin, *Le monde subatomique - énigmes et trouvailles*, Hermann (1995).
- [57] C. Dorso, J. Randrup, *Early recognition of clusters in molecular dynamics* *Phys. Lett.* B301, p. 328-333 (1993)
- [58] Ph. Chomaz, F. Gulminelli, V. Duflot, *Topology of event distributions as a generalized definition of phase transitions in finite systems*, en cours de publication à *Phys. Rev. E*.

- [59] C. Tsallis, *Nonextensive statistics: theoretical, experimental and computational evidences and connections* Brazilian Journal of Physics, vol 29, nb 1, p.1.
- [60] S. Abe, Y. Okamoto, *Non extensive statistical mechanics and its application* Lectures notes in physics, vol.560 (2001).
- [61] M. Pleimlig, A. Hüller, *Crossing the coexistence line at constant magnetization* cond-mat/001116 v2.
- [62] S. Grossmann, W. Rosenhauer, Z. Phys. vol 207, p. 138 (1967).
- [63] R. Balian, Phys. Rev. 132 p.958 (1963).
- [64] O. Mülken, P. Borrmann, *Classification of the nuclear multifragmentation phase transition* nucl-th/009020 v2.
- [65] K.C. Lee, *Zeros of the partition function for a continuum system at first order phase transition* Phys. Rev. E, vol 53, nb 6 (1996); J. Lee, K.C. Lee, *Exact zeros of the partition function for a continuum system with double gaussian peaks* cond-mat/001240 v2.
- [66] M. Cerruti-Sola, C. Clementi, M. Pettini *Hamiltonian dynamics and geometry of phase transitions in classical XY models* Phys. Rev. E, vol161, nb 5, p. 5171 (2000).
- [67] H. Feldmeier, J.Schnack, *Fermonic molecular dynamics* Progress in particle and nuclear physics, vol 39, p. 343-442 (1997); *Molecular dynamics for fermions*, GSI Preprint 2000-03, Februar.
- [68] J.R. Klauder, B.S. Skagerstam, *Coherent states, applications in physics and mathematical physics*, World Scientific, 1985.
- [69] Bargman et al. 1971, and Perelomev, 1971.
- [70] J. Schnack, *Kurzreichweitige Korrelationen in der Fermionischen Molekulardynamik*, Dissertation von Dipl.-Phys.

Les transitions de phase sont des phénomènes communs à tous les systèmes en interaction. Pour des systèmes infinis, elles sont bien décrites par la thermodynamique mais celle-ci ne peut plus être utilisée pour des petits systèmes comme le noyau de l'atome. Nous proposons dans cette thèse une approche de mécanique statistique, afin d'extraire les caractéristiques thermodynamiques des petits systèmes ouverts et soumis à des forces non saturantes. Nous nous concentrons en particulier sur la définition et la mise en évidence pour de tels systèmes d'une transition de phase de type liquide gaz. Nous définissons des observables théoriques et expérimentales qui permettent de signaler sans ambiguïté la présence et l'ordre de la transition. Une observable pertinente et accessible expérimentalement est la fluctuation d'énergie cinétique, pour une valeur fixée de l'énergie totale. Nous vérifions qu'à l'intérieur de la zone de coexistence, ces fluctuations deviennent anormalement grandes et s'accompagnent de comportements pseudo critiques pour la distribution en taille des fragments. Nous obtenons ces résultats dans le cadre du modèle du gaz sur réseau, avec un hamiltonien de plus proches voisins. Afin de compléter cette étude, nous analysons le comportement des observables lorsque les interactions sont à longue portée. Nous nous concentrons sur la problématique nucléaire en considérant l'effet des interactions coulombiennes. Enfin nous abordons en perspectives des points spécifiques à la physique nucléaire : le rôle de l'isospin et des effets quantiques.

Phase transitions are universal properties of interacting matter. They are well described if the considered system is infinite, by using standard thermodynamics. But in the case of small systems like atomic nuclei, this formalism cannot be applied anymore. Our aim is to propose a statistical mechanics approach in order to define the thermodynamical features of small open systems subject to non-saturating forces. We concentrate in particular on the definition and characterization for such systems of phase transitions belonging to the liquid gas universality class. Theoretical and experimental observables are defined to signal the occurrence and the order of this transition without any ambiguity. One of the most relevant and experimentally accessible observables consists in the study of kinetic energy fluctuations for a fixed value of the total deposited energy. In a first order phase transition such fluctuations become anomaly high and at the same time the size distribution appears to behave critically. All our results are obtained within numerical simulations of the lattice gas model with a nearest neighbors attractive interaction. Finally we check the influence of non-saturating forces, developing the specific example of the Coulomb interaction in the nucleus. Future improvements and perspectives at this work consist in the analysis of specific effects occurring in nuclei : isospin and quantum mechanics.

Mots clés : température de transition, gaz, liquides, physique nucléaire, thermodynamique statistique, mécanique statistique, transitions de phase, Ising modèle d', phénomènes critiques

Keywords : transition temperature, gas, liquids, nuclear physics statistical thermodynamics, statistical mechanics, phase transformations, Ising model, critical phenomena