Exercice 1 : *Coefficient de viscosité de l'argon*

L'expression approchée de la viscosité η que nous avons obtenue en cours est :

$$\eta \approx \frac{1}{\sigma}\sqrt{\frac{mkT}{3}}$$

Afin d'estimer la section efficace σ, on peut considérer que l'argon solide correspond à l'empilement régulier des atomes. Une mole d'argon pèse 40 g, a une densité de 1.65 et occupe donc un volume d'environ $40/1.65 \approx 24\ \text{cm}^3$, ce qui permet d'estimer le diamètre d'un atome d'argon comme :

$$d_{Ar} \approx \left[\frac{M_{Ar}}{N_{Av}\rho_{Ar}}\right]^{1/3} \approx 0.34\ \text{nm}$$

où ρ_{Ar} est la masse volumique de l'argon, N_{Av} est le nombre d'Avogadro, et M_{Ar} est la masse molaire de l'argon. De ce fait, une estimation de la section efficace devient (attention, il faut bien prendre le diamètre et non le rayon dans la formule qui suit, car deux molécules se touchent si elles sont à une distance inférieure au diamètre de l'un d'entre elles) : $\sigma \approx \pi d_{Ar}^2 \approx 3.7\times10^{-19}\ \text{m}^2$.

En utilisant les valeurs numériques fournies, on trouve : $\eta \approx 2.5\times10^{-5}$ kg m^{-1} s^{-1}, ce qui est proche de la valeur expérimentale.

Exercice 2 : *Équation maîtresse pour le système uniforme*

L'équation maîtresse pour ce système s'écrit :

$$\frac{dP_i}{dt} = a\sum_{j\neq i} P_j - (N-1)aP_i = a\sum_j P_j - aNP_i = a - aNP_i \text{ car } \sum_j P_j = 1$$

D'où : $P_i(t) = 1/N + C_i \exp(-aNt)$ avec $C_i = P_i(0) - 1/N$.

Si $t \to \infty$, quelle que soit la distribution initiale de probabilité, toutes les P_i convergent vers $1/N$, soit la distribution micro canonique.

Exercice 3 : *Diffusion comme une marche au hasard*

1. $P(n,s) = \frac{1}{2}P(n+1,s-1) + \frac{1}{2}P(n-1,s-1)$

   Cette relation exprime simplement le fait que les deux sites qui peuvent apporter leur contribution en un pas de temps au site n sont les deux sites adjacents $n-1$ et $n+1$.
2. Remarque : Δ représente le libre parcours moyen ℓ, et τ le temps moyen entre deux chocs : on a $\tau = \ell / v_m \Rightarrow \Delta^2/\tau = \ell v_m$ est bien une quantité finie.

   $P(n,s) - P(n,s-1) = \tau \times \frac{\partial w}{\partial t}$: passage à la limite continue

$P(n+1,s-1)-P(n,s-1)=\Delta\times\dfrac{\partial w(x+dx,t)}{\partial x}$ avec $\mathrm{d}x=\Delta$: développement au premier ordre en dx.

3. La variation de la probabilité de se trouver à la position $n\Delta$ entre les instants s et $s+1$ peut donc s'écrire :

$$P(n,s)-P(n,s-1)=\frac{1}{2}P(n+1,s-1)+\frac{1}{2}P(n-1,s-1)-P(n,s-1)$$

On peut réécrire cette équation sous la forme équivalente :

$$\Delta\frac{\partial w}{\partial t}\tau=\frac{1}{2}\left[P(n+1,s-1)-P(n,s-1)\right]-\frac{1}{2}\left[P(n,s-1)-P(n-1,s-1)\right]$$

dont le deuxième membre peut se réécrire sous la forme de la différence :

$$\frac{\Delta^2}{2}\left[\frac{\partial w(x+dx,t)}{\partial x}-\frac{\partial w(x,t)}{\partial x}\right]$$

De même, cette différence peut elle-même s'exprimer sous la forme: $\dfrac{\Delta^3}{2}\dfrac{\partial^2 w(x,t)}{\partial x^2}$

D'où finalement l'équation demandée: $\dfrac{\partial w}{\partial t}\tau=\dfrac{\Delta^2}{2}\dfrac{\partial^2 w(x,t)}{\partial x^2}$

4. En raison de la symétrie du problème, on peut se douter avant tout calcul que la valeur moyenne de la position $\overline{x}(t)$ va rester constante au cours du temps.

Pour démontrer cette propriété, écrivons la définition de la valeur moyenne : $\overline{x}(t)=\int w(x,t)\,x\,dx$, et dérivons par rapport au temps cette expression :

$$\frac{\partial\overline{x}(t)}{\partial t}=\int\frac{\partial w(x,t)}{\partial t}\,x\,dx=\frac{\Delta^2}{2\tau}\int\frac{\partial^2 w(x,t)}{\partial x^2}\,x\,dx$$

On peut intégrer par parties en utilisant l'identité : $\int u'v=uv\big|_{-\infty}^{+\infty}-\int uv'$, où $u\equiv\dfrac{\partial w}{\partial x}$ et $v=x$:

$$\int\frac{\partial^2 w(x,t)}{\partial x^2}\,x\,dx=\left[x\frac{\partial w(x,t)}{\partial x}\right]_{-\infty}^{+\infty}-\int\frac{\partial w(x,t)}{\partial x}dx=\left[x\frac{\partial w(x,t)}{\partial x}\right]_{-\infty}^{+\infty}-\left[w(x,t)\right]_{-\infty}^{+\infty}=0$$

Donc $\overline{x}(t)=\text{constante}=\overline{x}(0)=0$

On peut de même calculer l'évolution de l'écart quadratique moyen $\Delta x(t)$ en utilisant la même technique: $\dfrac{\partial\left(x-\overline{x}\right)^2}{\partial t}=\displaystyle\int\frac{\partial w(x,t)}{\partial t}\left(x^2-\overline{x}^2\right)dx$

qui peut se réécrire: $\dfrac{\partial\left(x-\overline{x}\right)^2}{\partial t}=\dfrac{\Delta^2}{2\tau}\displaystyle\int\frac{\partial^2 w(x,t)}{\partial x^2}x^2dx-\overline{x}^2\int\frac{\partial w(x,t)}{\partial t}dx$

Le deuxième terme de cette expression est nul (variation de l'intégrale d'une distribution de probabilité).

Le premier terme peut s'intégrer par parties deux fois :

$$\frac{\Delta^2}{2\tau}\left[\left[x^2\frac{\partial w(x,t)}{\partial x}\right]_{-\infty}^{+\infty}-\int 2x\frac{\partial w(x,t)}{\partial x}dx\right]=\frac{\Delta^2}{2\tau}\left[\left[-2wx\right]_{-\infty}^{+\infty}+\int 2wdx\right]=\frac{\Delta^2}{\tau}$$

Soit finalement : $\overline{(x-\overline{x})^2}=\frac{\Delta^2}{\tau}t$

5. La dérivée première de $w(x,t)$ par rapport au temps s'écrit :

$$\frac{\partial w(x,t)}{\partial t}=\frac{x^2}{4Dt^2}w(x,t)-\frac{1}{2t}w(x,t)$$

De même : $\frac{\partial w(x,t)}{\partial x}=-\frac{x}{2Dt}w(x,t)$ et : $\frac{\partial^2 w(x,t)}{\partial x^2}=-\frac{1}{2Dt}w(x,t)+\frac{x^2}{4D^2t^2}w(x,t)$,

qui vérifient bien l'équation de diffusion : $\partial w/\partial t=D\times\partial^2 w/\partial x^2$

Exercice 4 : *Jacobien de l'évolution d'un volume élémentaire de l'espace des phases*

On peut écrire de façon générale le déterminant d'une matrice A sous la forme dite de Leibniz: $\det(A)=\epsilon^{i_1\ldots i_n}A^1_{i_1}\ldots A^n_{i_n}$, où on a utilisé la convention de sommation d'Einstein sur tous les indices apparaissant de façon double (dans A et dans ϵ).
On a par ailleurs les équations d'évolution de $\vec{r}$ et de $\vec{v}$: $\vec{r}'=\vec{r}+\vec{v}\ dt$ et $\vec{v}'=\vec{v}+\vec{F}/m\ dt$
Le Jacobien permettant de passer des anciennes aux nouvelles coordonnées peut s'écrire:

$$J=\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & dt & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & dt & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & dt \\ \frac{\partial F_x}{\partial x}\frac{\mathrm{d}t}{m} & \ldots & \ldots & 1 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & 0 & 1 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

On voit sur cette expression qu'en dehors du terme : $i_1=1, i_2=2, i_3=3, i_4=4, i_5=5, i_6=6,$ qui conduit à un terme égal à 1 dans le calcul du Jacobien, tout autre terme est soit nul, soit d'ordre 2 au moins en $\mathrm{d}t$. Par exemple, le terme contenant en première colonne $(\partial F_x \partial x)\mathrm{d}t$ doit, pour ne pas être nul en quatrième colonne avoir comme multiplicateur le terme $\mathrm{d}t$ et donc être du deuxième ordre au moins, ce raisonnement s'appliquant pour tous les termes non nuls de la sous-matrice 3×3 en bas à gauche de la matrice 6×6. D'où la propriété : $J=1+O(\mathrm{d}t^2)$.

Exercice 5 : *Modèle simple de conduction ionique*

1. La probabilité qu'un ion n'ait pas eu de collisions à $t+dt$ est la probabilité qu'il n'ait pas interagi à t et qu'il n'interagisse pas entre t et $t+dt$:
   $P(t+dt) = P(t)\times(1-dt/\tau) \Rightarrow P(t) = \exp\left(-t/\tau\right)$ et on a :
   $\tau = \int_0^\infty t\,P(t)\frac{dt}{\tau}$, car la probabilité que l'ion ait une collision entre t et $t+dt$ est la probabilité qu'il n'ait pas eu de collision à l'instant t multipliée par la probabilité d'avoir une collision entre t et $t+dt$.
2. $\overline{x} = \int_0^\infty x(t)P(t)\frac{dt}{\tau} = \int_0^\infty \frac{eE}{2m}t^2P(t)\frac{dt}{\tau} = \frac{eE}{m}\tau^2$
3. Le trajet est inférieur à $\overline{x}$ si le temps vérifie : $\frac{eE}{2m}t^2 \le \frac{eE}{m}\tau^2 \Rightarrow t \le \sqrt{2}\tau$, la fraction cherchée est la probabilité pour que l'ion ait subi un choc avant cet instant, soit $1-P(\sqrt{2}\tau) = 1-\exp\left(-\sqrt{2}\right) = 0.757$
4. L'intégrale représente la somme des contributions des ions répartis suivant le temps *t'* depuis la dernière collision, où on doit prendre en compte l'évolution de la position et de la vitesse due au champ électrique entre $t-t'$ et t pour obtenir la distribution à l'instant t :
   $\vec{r}_0 = \vec{r} - \vec{v}_0 t' - \frac{1}{2}\frac{eE}{m}t'^2\,\vec{u}_x\,;\, \vec{v}_0 = \vec{v} - \frac{eE}{m}t'\vec{u}_x$
5. $f(\vec{r},\vec{v},t) = \left[-f^{(0)}(\vec{r}_0,\vec{v}_0,t-t')\exp\left(-t'/\tau\right)\right]_0^\infty + \int_0^\infty \frac{df^{(0)}(\vec{r}_0,\vec{v}_0,t-t')}{dt'}\exp\left(-t'/\tau\right)dt'$

   D'où : $\Delta f = \int_0^\infty \frac{df^{(0)}(\vec{r}_0,\vec{v}_0,t-t')}{dt'}\exp\left(-t'/\tau\right)dt'$

   Or : $\frac{df^{(0)}(\vec{r}_0,\vec{v}_0,t-t')}{dt'} = f^{(0)}(\vec{r}_0,\vec{v}_0,t-t')\times\left(-\frac{mv_{0x}}{kT}\right)\times\left(-\frac{eE}{m}\right)$

   En assimilant v_{0x} à v_x et en prenant τ constant, il vient :

   $\Delta f = n\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2}\exp\left(-mv^2/2kT\right)\times\left(\frac{\tau eEv_x}{kT}\right)$
6. Dans le calcul de σ, la contribution de f^0 est nulle par symétrie, il vient :

$$\sigma = \frac{e\int d^3v\,\Delta f\,v_x}{E} = n\left(\frac{\tau e^2}{kT}\right)\int v_x^2\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2}\exp\left(-mv^2/2kT\right)d^3v = \frac{n\tau e^2}{m}$$

Le calcul de l'intégral peut être évité en se souvenant que pour la distribution de Maxwell-Boltzmann : $\left\langle \frac{1}{2}mv_x^2 \right\rangle = \frac{1}{2}kT$.