Introduction à la Physique Statistique LP357
2014-2015

TD 9 : Particules en interaction II

1 Le modèle d'Ising sur réseau carré à haute et à basse température

Soient N spins $\sigma_i = \pm 1$ placés aux nœuds d'un réseau carré de coordinence $q = 4$. Le Hamiltonien d'Ising (sans champ magnétique) s'écrit :

$$H = -J \sum_{<i,j>} \sigma_i \sigma_j \ ,$$

où $J > 0$.

▷ **1-1** Donner l'expression de la fonction de partition canonique $Z(\beta)$.

▷ **1-2** Dans la limite $N \gg 1$, quel est le nombre de paires de spins plus proches voisins ?

1.1 Développement à basse température

Puisque les énergies sont discrétisées, on note E_i l'énergie du i^{eme} niveau d'énergie et $g(E_i)$, le nombre de microétats à cette énergie pour $i = 0, 1, 2, \ldots$.

▷ **1-3** Écrire la fonction de partition en fonction des E_i et des $g(E_i)$ pour $i = 0, 1, 2, \ldots$. À basse température ($\beta J \gg 1$), seuls les microétats de basse énergie contribuent à la fonction de partition. Nous allons déterminer les premiers états excités explicitement.

▷ **1-4** Quelle est l'énergie E_0 du niveau fondamental et sa dégénérescence $g(E_0)$?

▷ **1-5** Quelle est l'énergie E_1 du premier niveau excité ? Que vaut $g(E_1)$?

▷ **1-6** Quelle est l'énergie E_2 du deuxième niveau excité ? Que vaut $g(E_2)$?

▷ **1-7** Quelle est l'énergie E_3 du troisième niveau excité ? Que vaut $g(E_3)$?

▷ **1-8** En déduire l'expression de la fonction de partition et de l'énergie moyenne comme des développements en puissances de $u = e^{-4\beta J} \ll 1$ à l'ordre 4 dans la limite des basses températures ($\beta J \gg 1$).

1.2 Développement à haute température (en supplément)

▷ **1-9** Que vaut la fonction de partition à la limite $T \to \infty$?

▷ **1-10** Montrer l'identité suivante pour tout $\sigma_i = \pm 1$:

$$e^{\beta J \sigma_i \sigma_j} = \cosh(\beta J)(1 + v\, \sigma_i \sigma_j) \ ,$$

avec $v = \tanh(\beta J)$. En déduire le développement de $Z(\beta)$ en puissance de v. En quoi s'agit-il d'un développement à haute température ?

▷ **1-11** Montrer que :

$$\sum_{\{\sigma\}} \sigma_i^{n_i} \sigma_j^{n_j} \ldots \sigma_n^{n_n} = 2^N,$$

si tous les n_k sont pairs et 0 sinon. La somme s'effectue sur tous les microétats du système. Pour calculer les premiers termes du développement, on utilise une représentation graphique dans laquelle un couple de spins $\sigma_i \sigma_j$ est représenté par un lien. Quels sont les graphes qui ont une contribution non nulle pour chaque terme v^k, où $k = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Dénombrer ces graphes et en déduire le développement de $Z(\beta)$ à l'ordre 6.

▷ **1-12** Calculer le développement de l'énergie libre à cet ordre.

▷ **1-13** En déduire le développement de l'énergie moyenne.

1.3 La solution exacte d'Onsager (en supplément)

En 1944, Lars Onsager a calculé la fonction de partition du modèle d'Ising sur réseau carré (à 2d) sans champ magnétique, mettant en évidence un point critique en $kT_c = \frac{2J}{\ln(1+\sqrt{2})} \simeq 2,27J$. L'énergie moyenne par spin s'écrit

$$\frac{\langle E \rangle}{N} = -2J \tanh(2\beta J) + \frac{K}{2\pi}\frac{dK}{d\beta}\int_0^\pi d\phi \frac{\sin^2\phi}{\Delta(1+\Delta)} \tag{1}$$

où

$$\Delta = \sqrt{1 - K^2 \sin^2\phi} \quad \text{et} \quad K = \frac{2\sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)}.$$

L'aimantation par spin est donnée par

$$m = \Big(1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4}\Big)^{\frac{1}{8}} \quad \text{pour} \quad T < T_c \quad \text{et} \quad m = 0 \quad \text{pour} \quad T > T_c.$$

Tracer sur un même graphique la solution exacte [1] donnée par l'équation (1) et les développements de l'énergie moyenne obtenus à basse température (question **1-8**) et à haute température (question **1-13**). Commenter.

2 Le modèle d'Ising en champ moyen

Le Hamiltonien du modèle d'Ising en présence d'un champ magnétique B est

$$H = -J \sum_{<i,j>} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \ , \tag{2}$$

où la variable de spin σ_i vaut ± 1 et $J > 0$. On notera q la coordinence du réseau (le nombre de plus proches voisins).

▷ **2-1** Dans un premier temps, le spin $i = 1$ peut varier ($\sigma_1 = \pm 1$) et les $N-1$ autres spins sont fixés dans une configuration $\mathcal{C}$. Donner l'expression du Hamiltonien $H_{\mathcal{C}}(\sigma_1)$ du spin 1 dans la configuration $\mathcal{C}$. En déduire que la valeur moyenne de σ_1, dans cette configuration des $N-1$ spins, est donnée par

$$\langle \sigma_1 \rangle_{\mathcal{C}} = \tanh\big(\beta(B + J \sum_{<j,1>)} \sigma_j)\big),$$

où $< j, 1 >$ représente les q sites plus proches voisins de 1.

▷ **2-2** Écrire le développement de Taylor d'une fonction $f(x)$ autour de la valeur moyenne $\langle x \rangle$ de la variable x et montrer que si les fluctuations autour de $\langle x \rangle$ sont faibles, on a $\langle f(x) \rangle \simeq f(\langle x \rangle)$.

▷ **2-3** Montrer qu'en prenant la moyenne sur toutes les configurations $\mathcal{C}$ des $N-1$ spins et en utilisant l'approximation de la question précédente, on retrouve l'équation autocohérente du champ moyen :

$$m = \tanh\big(\beta J q m + \beta B\big), \tag{3}$$

où $m = \langle \sigma_1 \rangle$. En quoi s'agit-il d'une approximation du champ moyen ?

▷ **2-4** Montrer graphiquement qu'en *champ nul* ($B = 0$), l'aimantation moyenne par spin m est nulle pour $T > T_c = \dfrac{Jq}{k}$.

▷ **2-5** Montrer que dans l'approximation du champ moyen, l'énergie moyenne du système, obtenue en prenant la moyenne du Hamiltonien (2), est donnée par

$$\langle E \rangle_{cm} = -N\big(\frac{q}{2} J m^2 + B m\big).$$

En champ nul, que vaut $\langle E \rangle_{cm}$ pour $T > T_c$? Dans le cas du réseau carré ($q = 4$), on peut montrer numériquement que cette énergie moyenne en champ moyen se comporte pour $T < T_c$ et $B = 0$ comme $\langle E \rangle_{cm} \simeq -2NJ\big(1 + 0,02T^2 - 0,021T^3\big)$. Tracer $\langle E \rangle_{cm}$ et l'énergie moyenne exacte donnée par l'équation (1). Pour quel domaine en température le champ moyen est-il une bonne approximation ?

1. Le fichier "Energie moyenne de Onsager", donnant les points de la courbe $\frac{\langle E \rangle}{N}(T)$, est sur le site web http ://www.lptl.jussieu.fr/users/sator/Page-3.html