Aspects rigoureux de la mécanique statistique à l'équilibre

Jérémie Bouttier et Guilhem Semerjian

Examen du 4 juin 2015

Le sujet est formé de deux problèmes indépendants. Vous rédigerez leurs solutions sur deux copies séparées. Chacun des problèmes sera noté sur 10 points.

Les notes de cours et de TD sont autorisées, à l'exclusion de tout autre document.

1 Le modèle de Potts en champ moyen

On considère un modèle de Potts, avec N degrés de liberté (spins) $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ qui peuvent prendre chacun q valeurs, $\sigma_i \in \{1, \dots, q\}$, où q est pour l'instant un entier ≥ 2 arbitraire. Les spins interagissent selon l'Hamiltonien suivant,

$$H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -\frac{J}{N} \sum_{i,j=1}^{N} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - \sum_{i=1}^{N} h_{\sigma_i} \ , \tag{1}$$

où $J > 0$ est une constante de couplage, δ le symbole de Kronecker et $h_1, \dots, h_q$ peuvent être vus comme des champs magnétiques couplés aux q valeurs possibles des spins. Le modèle est de champ moyen car la première somme porte sur tous les couples de spin (i, j) (chaque spin interagit avec tous les autres). Dans tout l'exercice on se place dans l'ensemble canonique et le système est en équilibre avec un thermostat à la température $T = \frac{1}{\beta}$ (on prend la constante de Boltzmann k_B égale à 1), et on note $\langle \cdot \rangle$ les moyennes avec la distribution de Gibbs-Boltzmann correspondante.

1. Montrer que la fonction de partition associée au Hamiltonien de l'équation (1) peut se mettre sous la forme
$$Z = \sum_{x_1, \dots, x_q} \mathcal{N}^N_{x_1, \dots, x_q} \, e^{-N\beta e(x_1, \dots, x_q)} \ , \quad \text{avec} \ \ e(x_1, \dots, x_q) = -J \sum_{\sigma=1}^{q} x_\sigma^2 - \sum_{\sigma=1}^{q} h_\sigma x_\sigma \ , \tag{2}$$
où l'on précisera les valeurs possibles des $x_1, \dots, x_q$ et leur domaine de sommation, ainsi que la valeur du facteur $\mathcal{N}^N_{x_1, \dots, x_q}$.
2. On rappelle la formule de Stirling, $\ln(X!) \sim X \ln X - X$ quand $X \to \infty$. En déduire que l'énergie libre par spin du modèle s'écrit, dans la limite thermodynamique, comme
$$f(T) = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \ln Z = \inf_{x_1, \dots, x_q} \widehat{f}(x_1, \dots, x_q, T), \quad \text{avec} \tag{3}$$
$$\widehat{f}(x_1, \dots, x_q, T) = e(x_1, \dots, x_q) - T\, s(x_1, \dots, x_q) \qquad \text{et} \qquad s(x_1, \dots, x_q) = -\sum_{\sigma=1}^{q} x_\sigma \ln x_\sigma \ . \tag{4}$$
Préciser le domaine sur lequel se fait la minimisation, et commenter l'expression de $s(x_1, \dots, x_q)$.
3. On note $(x_1^*, \dots, x_q^*)$ le point où le minimum de $\widehat{f}$ est atteint (on suppose ici pour simplifier que ce minimum est unique). Montrer que dans la limite thermodynamique $\lim_{N \to \infty} \langle \delta_{\sigma_i, \sigma} \rangle = x_\sigma^*$ pour tout i et tout σ. Interpréter le membre de gauche de cette égalité.
4. Quelle est la valeur de $(x_1^*, \dots, x_q^*)$ pour des températures très élevées ? Comment qualifier la phase correspondante du système ?

5. On suppose dans toute la suite que les champs sont nuls, $h_1 = \cdots = h_q = 0$, et on rappelle que $J > 0$. Quelles sont les valeurs possibles de $(x_1^*, \ldots, x_q^*)$ à température nulle ? Comment qualifier les phases correspondantes ? Quelle est la dégénérescence de l'état fondamental ?

   On veut étudier maintenant la transition entre les régimes de haute et de basse température. On suppose que la brisure spontanée de symétrie qui se produit à basse température se fait dans la direction de $\sigma = 1$ et ne distingue pas les $q-1$ autres valeurs possibles, autrement dit on pose $x_1 = x$, et l'on suppose $x_2 = \cdots = x_q$. C'est en effet ce qui se produit si l'on prend un champ infinitésimal h_1 pour briser la symétrie.

6. Exprimer cette valeur commune $x_2 = \cdots = x_q$ en fonction de x. En déduire qu'avec cette paramétrisation $f(T) = \inf_x \widehat{f}(x,T)$, avec $\widehat{f}(x,T) = e(x) - Ts(x)$, où l'on explicitera les fonctions $e(x)$ et $s(x)$.

7. A partir de maintenant q est un paramètre réel arbitraire ≥ 2, pas nécessairement entier. Rappeler brièvement la définition du modèle géométrique vu en cours qui donne un sens à toutes les valeurs réelles de q.

8. Tracer séparément l'allure des fonctions $e(x)$ et $s(x)$ pour un $q > 2$ arbitraire, en indiquant leur comportement aux bords de leur ensemble de définition et au voisinage de leurs extrema dont on donnera les positions.

9. Quelle est la valeur de x qui minimise $\widehat{f}(x,T)$ à haute température ? On la notera x_0 dans la suite. En dessous de quelle température, notée $T_\mathrm{c}^{(2)}$, x_0 n'est-il plus un minimum local de $\widehat{f}(x,T)$? On pourra montrer que

$$\left.\frac{\partial^2 \widehat{f}}{\partial x^2}\right|_T = -\gamma J \frac{q}{q-1} + T\frac{1}{x(1-x)} \ , \quad \text{où } \gamma \text{ est une constante que l'on précisera.} \tag{5}$$

10. Développer $\widehat{f}(x, T_\mathrm{c}^{(2)})$ jusqu'au troisième ordre au voisinage de $x = x_0$. En déduire que si $q > 2$, il existe une température $T_\mathrm{c}^{(1)} > T_\mathrm{c}^{(2)}$ telle que x_0 n'est plus le minimum global de $\widehat{f}$ pour toutes les températures $T < T_\mathrm{c}^{(1)}$.

11. Tracer l'allure des courbes $\widehat{f}(x,T)$ en fonction de x pour différentes températures.

12. Dans le cas $q > 2$, écrire les conditions qui fixent la valeur de $T_\mathrm{c}^{(1)}$, ainsi que la position du minimum global $x^{(1)}$ de $\widehat{f}$ à la température ${T_\mathrm{c}^{(1)}}^-$, i.e. infinitésimalement inférieure à $T_\mathrm{c}^{(1)}$. Montrer que ces conditions sont vérifiées par

$$x^{(1)} = 1 - \frac{\alpha}{q} \ , \qquad T_\mathrm{c}^{(1)} = J\frac{q-2}{(q-1)\ln(q-1)} \ , \quad \text{où l'on précisera la valeur de } \alpha. \tag{6}$$

13. Tracer l'allure de la position $x^*(T)$ du minimum global de $\widehat{f}$ en fonction de T, en distinguant les cas $q = 2$ et $q > 2$. Dans chacun de ces cas préciser l'ordre de la transition, et lorsque c'est possible l'exposant critique β_cm associé au comportement critique de $x^*(T)$.

2 Autour du modèle des arbres couvrants

Dans toute cette partie, G est un graphe simple connexe, V est son ensemble de sommets et E son ensemble d'arêtes.

Le modèle de Potts à $q \to 0$

1. On considère le modèle de Potts à q états sur G, en champ nul mais avec des couplages inhomogènes : son hamiltonien est
$$H(\sigma) = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}$$
où la somme porte sur toutes les arêtes $\langle i,j \rangle$ du graphe, $J_{\langle i,j \rangle}$ étant un couplage pouvant dépendre de l'arête considérée. Expliquer comment la fonction de partition $Z_G(q)$ peut se réécrire comme une somme sur tous les sous-graphes couvrants $H = (V, E')$ de G, et pourquoi cette définition permet d'étendre la définition du modèle à des valeurs non entières de q. On notera $c(H)$ le nombre de composantes connexes d'un sous-graphe H et on posera, pour toute arête e,
$$v_e = e^{\beta J_e} - 1.$$

2. On s'intéresse à la limite $q \to 0$ de ce modèle. On peut en fait considérer plusieurs limites :
   (a) $q \to 0$ en gardant les v_e fixés,
   (b) $q \to 0$ avec $v_e = q w_e$, les w_e étant fixés,
   (c) $q \to 0$ avec $v_e = q^\alpha y_e$, les y_e étant fixés et α étant un réel dans $(0, 1)$.

   Montrer que, à une puissance de q près qu'on précisera, la fonction de partition admet dans chaque cas une limite non triviale correspondant à une somme sur respectivement (a) les sous-graphes couvrants connexes, (b) les forêts couvrantes et (c) les arbres couvrants. (Indication : si $H = (V, E')$ est un sous-graphe couvrant de G, la quantité $\ell(H) = |E'| - |V| + c(H)$ est appelée *nombre cyclomatique* de H. Interpréter.)

Arbres couvrants et circuits électriques

On suppose à présent G pondéré, avec y_e le poids de l'arête e, et on considère le modèle des arbres couvrants : chaque arbre couvrant $T = (V, E')$ de G apparaît avec une probabilité proportionnelle à $\prod_{e \in E'} y_e$.

3. Rappeler la définition de la matrice laplacienne L et son lien avec le modèle des arbres couvrants.
4. Démontrer la généralisation suivante du *matrix-tree theorem* : pour toute partie $X \subset V$, on a l'égalité
$$\det L_X = \sum_{F=(V,E')} \prod_{e \in E'} y_e$$
où L_X est la matrice laplacienne dans laquelle on a enlevé les lignes et colonnes correspondant à des éléments de X, et où la somme porte sur toutes les forêts couvrantes $F = (V, E')$ de G dont chaque composante connexe contient un unique sommet de X.
5. En déduire une expression pour la probabilité qu'une arête e donnée appartienne à T dans le modèle des arbres couvrants.

On voit G comme un circuit électrique où les poids y_e sont interprétés comme des conductances. Plus précisément, à chaque sommet $x \in V$ on associe son potentiel électrique U_x, et dans chaque arête $e = \langle x, x' \rangle$ circule un courant $i_{xx'}$ de x vers x' de telle sorte qu'on a, d'une part, la loi d'Ohm
$$i_{xx'} = y_e (U_x - U_{x'})$$
et, d'autre part, la conservation du courant
$$\sum_{x'} i_{xx'} = 0$$
pour tout x non relié à un générateur externe.

6. Soient a et b deux sommets fixés : on branche entre a et b un générateur externe imposant une différence de potentiel $U_a - U_b$ donnée, et on mesure l'intensité I_a qu'il injecte en a. La *conductance effective* Y_{ab} du circuit G entre a et b est définie par
$$I_a = Y_{ab} (U_a - U_b).$$
Relier Y_{ab} à la probabilité calculée à la question 5.