Aspects rigoureux de la mécanique statistique à l'équilibre
TD n$^{\mathrm{o}}$ 1 : Modèles unidimensionnels et de champ moyen

Jérémie Bouttier et Guilhem Semerjian

Février 2013

1 Modèles unidimensionnels

1.1 La chaîne d'Ising

On considère une chaîne de N spins d'Ising $\sigma_i = \pm 1$, $i \in [0, N-1]$, avec conditions aux bords périodiques $\sigma_N = \sigma_0$, en équilibre avec un thermostat. La probabilité d'une configuration est donc $e^{-\beta H}/Z$, où Z est la fonction de partition qui normalise cette distribution. Les moyennes selon cette loi de probabilité seront notées $\langle \bullet \rangle$. On prendra comme Hamiltonien :

$$H = -J \sum_{i=0}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=0}^{N-1} \sigma_i \ , \tag{1}$$

où $J > 0$ correspond à un couplage ferromagnétique entre plus proches voisins, et h représente l'effet d'un champ magnétique extérieur.

1. Mettre la fonction de partition sous la forme :

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=0}^{N-1} T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \ , \tag{2}$$

   avec T symétrique. On notera $\mathbb{T}$ la matrice d'ordre 2 telle que $\mathbb{T}_{\sigma\sigma'} = T(\sigma, \sigma')$.
2. Exprimer Z en fonction de $\mathbb{T}$.
3. Trouver les valeurs propres $\lambda_\pm$ de $\mathbb{T}$ ($\lambda_+ > \lambda_-$).
4. Exprimer la densité d'énergie libre par spin $f = -\frac{1}{N\beta} \ln Z$ en fonction des $\lambda_\pm$, simplifier le résultat dans la limite thermodynamique $N \to \infty$.
5. On s'intéresse à l'aimantation moyenne par spin $m = \langle \sigma_i \rangle$. Exprimer m en fonction de $\mathbb{T}$ et de la matrice $\hat{\sigma}$:

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ . \tag{3}$$

6. Trouver une autre expression de m en fonction d'une dérivée de f, montrer que dans la limite thermodynamique :

$$m = \frac{\mathrm{sh}(\beta h)}{\sqrt{\mathrm{sh}^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \ . \tag{4}$$

   Tracer l'allure de cette courbe en fonction de h à différentes températures. Y a-t-il une transition de phase dans ce modèle ?

1.2 La chaîne d'Ising avec interactions à seconds voisins

On considère maintenant le modèle d'Ising unidimensionnel avec des interactions à premiers et seconds voisins :

$$H = -J_1 \sum_{i=0}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - J_2 \sum_{i=0}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+2} \ , \tag{5}$$

et on étend la condition aux limites périodiques à $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. On supposera N pair.

7. Mettre la fonction de partition sous la forme :

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=0}^{(N/2)-1} T((\sigma_{2i}, \sigma_{2i+1}), (\sigma_{2i+2}, \sigma_{2i+3})) \ . \tag{6}$$

8. Donner une matrice $\mathbb{T}$ d'ordre 4 telle que $Z = \mathrm{Tr}\, \mathbb{T}^{(N/2)}$.
9. *Facultatif :* Démontrer le théorème de Perron-Frobenius qui affirme qu'une matrice réelle M dont tous les éléments sont strictement positifs admet une valeur propre λ_0 non-dégénérée et strictement positive, et telle que le module de toutes les autres valeurs propres est strictement inférieur à λ_0.
10. *Facultatif :* Soit $P(\lambda, \beta)$ un polynôme d'ordre n en λ dont les coefficients sont des fonctions analytiques de β. Si λ_0 est une racine simple de $P(\cdot, \beta_0)$, montrer qu'il existe une fonction $\lambda(\beta)$, analytique dans un voisinage de β_0 avec $\lambda(\beta_0) = \lambda_0$, telle que $P(\lambda(\beta), \beta) = 0$.
11. En utilisant ces deux résultats, montrer qu'il n'y a pas de transition de phase dans ce modèle, et plus généralement dans tout modèle unidimensionnel à variables discrètes et à portée d'interaction finie.

2 Le modèle de Curie-Weiss

On considère un système de N spins d'Ising, $\underline{\sigma} = (\sigma_1, \dots, \sigma_N) \in \{-1, +1\}^N$, interagissant selon l'Hamiltonien

$$H(\underline{\sigma}) = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \ , \tag{7}$$

avec $J > 0$. Ce modèle est dit de champ moyen car chaque degré de liberté interagit avec tous les autres, il n'y a donc pas de structure géométrique sous-jacente.

1. Pourquoi a-t-on divisé la constante de couplage J par le facteur $1/N$?
2. On suppose le système à l'équilibre avec un thermostat à la température T. En remarquant que H ne dépend de $\underline{\sigma}$ que par l'intermédiaire de l'aimantation $\sum_i \sigma_i$, mettre la fonction de partition sous la forme :

$$Z = \sum_{m \in \mathcal{M}_N} \mathcal{N}_m^N e^{-\beta N[-\frac{J}{2}m^2 - hm]} \ . \tag{8}$$

On explicitera l'ensemble $\mathcal{M}_N$ dans lequel varie m, ainsi que l'expression de $\mathcal{N}_m^N$.

3. On définit l'énergie libre par spin dans la limite thermodynamique selon

$$f(\beta, h) = \lim_{N \to \infty} -\frac{1}{\beta N} \ln Z \ . \tag{9}$$

On rappelle que

$$\frac{1}{N} \ln \binom{N}{\alpha N} = -\alpha \ln \alpha - (1-\alpha) \ln(1-\alpha) + O\left(\frac{\ln N}{N}\right) \tag{10}$$

dans la limite $N \to \infty$. En déduire que

$$f(\beta, h) = \inf_{m \in [-1,1]} \widehat{f}(m; \beta, h) \ , \tag{11}$$

où l'on explicitera la fonction $\widehat{f}(m; \beta, h)$.

4. Tracer l'allure de $\widehat{f}(m; \beta, h = 0)$ en fonction de m, pour différentes températures. Quelle est la valeur de la température critique T_c où leur comportement change qualitativement ?
5. Quel est l'effet d'un champ $h > 0$ sur ces courbes ?
6. On définit $m_*(\beta, h)$ comme le point où le minimum est atteint dans l'équation (11). Donner l'équation implicite vérifiée par cette quantité.
7. Tracer l'allure de $m_*(\beta, h)$ en fonction de h pour deux températures, supérieure et inférieure à T_c.
8. On définit l'aimantation spontanée $m_\mathrm{sp}(\beta) = \lim_{h \to 0^+} m_*(\beta, h)$. Tracer son allure en fonction de la température. Calculer l'exposant β qui régit le comportement de m_sp au voisinage de T_c, i.e. tel que $m_\mathrm{sp}(T) \propto (T_\mathrm{c} - T)^\beta$, où $\propto$ désigne un équivalent à une constante multiplicative près.