

Physique statistique – TD 4

Ensemble canonique (suite)

CPES – L3

1 Assemblée de spins indépendants et loi de Curie

On considère une assemblée de N spins indépendants et discernables, décrivant par exemple les différents atomes d'un solide. Ce système est étudié à température T fixée.

Chaque spin i prend une valeur $\sigma_i \in \{-1, +1\}$ indépendamment des autres spins. En présence d'un champ magnétique h , le spin apporte une contribution à l'énergie donnée par $-\mu h \sigma_i$ où μ a la dimension d'un moment magnétique.

1. Pourquoi peut-on considérer que les atomes d'un solide sont discernables?
2. Écrire la probabilité d'observer un spin $\sigma = \pm 1$ sous un champ magnétique h , à la température T .
3. Calculer la fonction de partition z associée à une seule particule, et l'énergie libre f associée.
4. L'aimantation d'un spin est définie par $m = \langle \mu \sigma \rangle$. Trouver une expression de celle-ci à partir de la fonction de partition. La calculer.
5. Montrer explicitement que la fonction de partition Z associée au système, et l'énergie libre F sont données par $Z = z^N$ et $F = Nf$. Que peut-on alors dire de l'aimantation moyenne du système $M = \sum_{i=1}^N m_i = \mu \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle$?
6. Rappeler comment s'exprime l'entropie en fonction de F et $\langle E \rangle$. La calculer et vérifier qu'elle est bien extensive. [Optionnel] Montrer que l'on retrouve l'entropie de Shannon :
 $S_{\text{Shannon}} = -k_B \sum_{\mathcal{C}} P(\mathcal{C}) \ln P(\mathcal{C})$.
7. La susceptibilité magnétique du système est définie par $\chi = \frac{\partial M}{\partial h}$. La calculer et montrer que $\chi(h=0) \propto T^{-1}$. Ce résultat est connu sous le nom de loi de Curie (d'après Pierre Curie).
8. [Optionnel] Montrer que la variance de l'aimantation est proportionnelle à la susceptibilité. C'est un théorème de fluctuations-dissipations.

$$\left\langle \sum_i \sigma_i^2 \right\rangle - M^2 = k_B T \chi \quad (1)$$

2 Simulation numérique et algorithme de Monte-Carlo (*Markov Chain Monte Carlo*)

On s'intéresse au système de spins de la partie 1. Nous avons vu que de part sa simplicité on peut résoudre le problème exactement. Mais dans des cas plus compliqués, on est parfois obligé d'utiliser des simulations numériques. Nous présentons, sur cet exemple simple, une méthode classique de simulation.

A priori, le système de spins n'a pas de dynamique évidente. Nous allons définir une dynamique fictive qui va nous permettre d'échantillonner la loi de probabilité et de calculer les observables ($\langle E \rangle$, $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$, M , etc.) comme des moyennes temporelles. Si on note $\{\sigma_i(t)\}$ l'état du

système à l'instant $t = 0, 1, 2, \dots$, l'énergie à t est donnée par $E(t) = -\mu h \sum_i \sigma_i(t)$. On espère obtenir l'énergie moyenne statistique $\langle E \rangle$ comme la moyenne temporelle de cette quantité :

$$\langle E \rangle = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T E(t) \quad (2)$$

(pour T suffisamment grand). De même pour les fluctuations d'énergie, l'aimantation, etc.

1. Définir une dynamique revient à définir des probabilités de transition (pour un pas de temps) : $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ est la probabilité d'aller de la configuration \mathcal{C} à la configuration \mathcal{C}' . Supposons qu'à la date t , on ait une probabilité $\pi_t(\mathcal{C})$ d'être dans la configuration \mathcal{C} (pour chaque \mathcal{C}). Calculer $\pi_{t+1}(\mathcal{C})$ en fonction de $\pi_t(\mathcal{C}')$ et $W(\mathcal{C}_1 \rightarrow \mathcal{C}_2)$. Écrire le résultat sous la forme :

$$\pi_{t+1}(\mathcal{C}) - \pi_t(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} Q(\mathcal{C}, \mathcal{C}') \quad (3)$$

(On considèra les arrivées à la configuration \mathcal{C} , et les départs de cette configuration.)

2. On considère maintenant la loi de probabilité à l'équilibre : $\pi_t(\mathcal{C}) = \pi^{\text{eq}}(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\mathcal{C})}$. La condition de bilan global impose :

$$\sum_{\mathcal{C}'} Q(\mathcal{C}, \mathcal{C}') = 0 \quad \forall \mathcal{C} \quad (4)$$

Nous imposerons une condition plus restrictive nommée *bilan détaillé (detailed balance)* :

$$Q(\mathcal{C}, \mathcal{C}') = 0 \quad \forall \mathcal{C}, \mathcal{C}' \quad (5)$$

Montrer que cela s'écrit :

$$\pi^{\text{eq}}(\mathcal{C}) W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = \pi^{\text{eq}}(\mathcal{C}') W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \quad \forall \mathcal{C}, \mathcal{C}' \quad (6)$$

3. Pour des raisons de simplicité, on n'autorise pas toutes les transitions. Dans notre cas, nous n'autoriserons que les transitions où un spin σ_0 (n'importe lequel) peut être inversé en $-\sigma_0$. Montrer que pour \mathcal{C} et \mathcal{C}' qui vérifient cette condition, on peut faire le *choix* suivant pour les probabilités de transition :

$$W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = \begin{cases} \kappa & \text{si } E(\mathcal{C}') < E(\mathcal{C}) \\ \kappa e^{-\beta(E(\mathcal{C}') - E(\mathcal{C}))} & \text{sinon} \end{cases} \quad (7)$$

(κ est une constante de normalisation) On appelle ce choix *algorithme de Metropolis*.

4. Expliquer pourquoi la procédure suivante fait ce que l'on souhaite :

À chaque pas de temps :

Choisir un spin au hasard.

Si on gagne de l'énergie à renverser le spin: le faire.

Sinon:

Tirer un nombre u au hasard entre 0 et 1.

Si $u < \exp(-2 \cdot \beta \cdot \mu \cdot h)$: renverser le spin.

Sinon: ne toucher à rien.

5. On admet que l'évolution temporelle du processus modélise bien la loi π^{eq} . Expliquer d'où vient l'équation (??).

Plusieurs subtilités de la méthode ne sont pas abordées ici :

- Il faut faire attention à ce que toutes les configurations possibles aient une chance d'être visitées par notre processus (*ergodicité*).
- Il faudrait montrer que, pour toute condition initiale, le processus que l'on a décrit converge bien (à temps suffisamment long) vers la loi à l'équilibre.
- Les configurations successives sont fortement corrélées. Il n'est pas trivial de savoir combien de temps il faut attendre avant d'avoir de bons résultats.