

Systemes modèles

Références

[1] N. Goldenfeld, *Lectures on phase transitions and the renormalization group*, chapter 3

1 Un fluide simple

On appelle fluide simple un ensemble classique de N particules de masse m , sans structure interne, qui interagissent par un potentiel à deux corps $u(r_{ij})$ qui ne dépend que de la distance $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ entre les particules i et j . Le potentiel d'interaction comporte un cœur dur répulsif et une attraction à courte portée.

▷ **1-1** Écrire le Hamiltonien de ce système et en déduire l'expression de la fonction de partition $Q_N(T, V)$ dans l'ensemble canonique à la température T dans un volume V .

▷ **1-2** En intégrant sur les impulsions des particules, exprimer Q_N en fonction de l'intégrale de configuration

$$Z_N(T, V) = \int_V \prod_{i < j} e^{-\beta u(r_{ij})} d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N.$$

▷ **1-3** Calculer en fonction de Z_N et de ses dérivées, l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ et la pression moyenne $\langle P \rangle$ du système.

▷ **1-4** Que deviennent les expressions de Q_N , $\langle E \rangle$ et $\langle P \rangle$ dans le cas du gaz parfait ?

▷ **1-5** Dans le cas d'un potentiel réaliste, le calcul exact de l'intégrale de configuration n'est pas possible. D'une façon générale, on peut écrire le potentiel à deux corps sous la forme

$$u(r_{ij}) = \epsilon f\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)$$

où f est une fonction. Les constantes ϵ et σ fixent respectivement les échelles d'énergie et de longueur. En déduire les unités réduites de la température, de la densité, de la pression et du temps, en fonction de ϵ , σ et m . Donner l'ordre de grandeur de ces quantités pour l'argon ($\epsilon \simeq 10$ meV, $\sigma \simeq 3$ Å, $m \simeq 710^{-23}$ kg).

2 Le modèle d'Ising

Les N sites d'un réseau sont occupés par un spin S_i qui vaut 1 ou -1 seulement. Le Hamiltonien du système en présence d'un champ magnétique B s'écrit

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i$$

où $\langle i, j \rangle$ désigne une somme sur les sites qui sont plus proches voisins et $J > 0$ est l'amplitude de l'interaction ferromagnétique. Dans la suite, on calculera exactement la fonction de partition dans des situations particulières, ou à l'aide d'approximations.

▷ **2-1** Pour commencer : quel est le nombre de configurations de spins du modèle d'Ising? Calculer l'énergie fondamentale du système en fonction de la coordinance du réseau q (*ie* le nombre de plus proche voisins d'un site). On supposera les conditions aux limites périodiques.

Systeme non interagissant

▷ **2-2** Calculer dans le cas $J = 0$, la fonction de partition Q_N , l'énergie $\langle E \rangle$ et l'aimantation $\langle M \rangle$ moyennes du système.

Cristal unidimensionnel

▷ **2-3** Les sites sont distribués sur une chaîne linéaire ouverte (conditions aux limites libres) et $B = 0$. Calculer Q_N et $\langle E \rangle$ (on introduira la variable $\eta_i = S_i S_{i+1}$).

Approximation de champ moyen

En général, l'approximation de *champ moyen* est la méthode la plus simple pour décrire un système en interaction : chaque spin est soumis à un champ effectif uniforme engendré par les autres spins. On se ramène donc à un problème de particules indépendantes (cf question 2-2). Posons $S_i = m + \epsilon_i$, où $m = \langle S_i \rangle$ est l'aimantation moyenne par site. L'idée est de négliger dans la somme $-J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$ les termes en $\epsilon_i \epsilon_j$ en supposant que les fluctuations sont faibles.

▷ **2-4** Réécrire $-J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$ en fonction de la coordinance du réseau en tenant compte de cette approximation. Expliquer pourquoi cette approximation est d'autant meilleure que la coordinance est élevée.

▷ **2-5** Montrer que l'on se ramène bien à un problème de particules indépendantes dans lequel chaque spin i est décrit par le Hamiltonien

$$h_i = -(Jqm + B)S_i + \frac{1}{2}Jqm^2.$$

▷ **2-6** En déduire Q_N et l'équation auto-cohérente suivante

$$m = \tanh \beta(B + Jmq).$$

Montrer graphiquement que cette équation implique une aimantation spontanée en champ nul, pour $T < T_c$, où T_c est la température critique que l'on déterminera en fonction de J et q .

Modèle complètement connecté

On considère à présent le Hamiltonien suivant

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i \neq j}^N S_i S_j$$

où la somme court sur tous les sites. Chaque spin interagit donc avec tous les autres.

▷ **2-7** Calculer l'énergie fondamentale de ce système

▷ **2-8** En déduire que ce système admet une limite thermodynamique. Dans quelle mesure les résultats dépendent-ils du réseau à la limite thermodynamique?