Université de Strasbourg
Master Physique, M1–S1

PHYSIQUE STATISTIQUE
Année 2013–2014

Examen — 1^{re} session

Aucun document n'est autorisé
Durée de l'épreuve : 2h
Le sujet comprend 3 pages au total

1 Magnétisme itinérant

On considère un gaz d'électrons libres (spin 1/2, masse m) confinés dans une boîte tridimensionnel de volume $V = L^3$ à la température T. On rappelle que les électrons étant des fermions, ils obéissent à la statistique de Fermi-Dirac. En considérant des conditions aux bords périodiques, les niveaux d'énergie électroniques sont donnés par

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m},$$

où le vecteur d'onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ est quantifié selon $k_i = 2\pi n_i / L$ avec n_i un entier relatif ($i = x, y, z$), et où $\hbar$ est la constante de Planck réduite. On se place dans la suite du problème à la limite thermodynamique, et l'on notera $\mu(T)$ le potentiel chimique à la température T et $E_\mathrm{F} = \mu(T = 0)$ l'énergie de Fermi.

1/ Montrer que la densité d'état a pour expression

$$\rho(E) = KV\sqrt{E}, \tag{1.1}$$

où K est une constante que l'on déterminera.

2/ Donner (sans démonstration) l'expression du nombre moyen d'occupation $f(E)$ d'un état d'énergie E. Quelle est l'expression de $f(E)$ à température nulle ? Représenter $f(E)$ pour (i) $T \neq 0$ et (ii) pour $T = 0$.

On se place dans la suite du problème à température nulle ($T = 0$).

3/ Donner l'expression du nombre moyen de particule N. En déduire l'expression de l'énergie de Fermi E_F en fonction de la densité électronique.

Le gaz d'électrons est maintenant soumis à un champ magnétique statique et uniforme $\mathbf{B}$.

4/ Justifier brièvement du fait que les densités d'états des spins up ($\uparrow$) et down ($\downarrow$) s'écrivent

$$\rho_\uparrow(E) = \frac{1}{2}\rho(E - \mu_\mathrm{B} B), \tag{1.2a}$$

$$\rho_\downarrow(E) = \frac{1}{2}\rho(E + \mu_\mathrm{B} B), \tag{1.2b}$$

où ρ est la densité d'états (1.1) en l'absence de champ magnétique, et où μ_B est le magnéton de Bohr. On rappelle que le moment magnétique $\boldsymbol{\mu}$ de l'électron est relié à son spin $\mathbf{s} = \pm\hbar/2$ par la relation $\boldsymbol{\mu} = -g_\mathrm{e}\mu_\mathrm{B}\mathbf{s}/\hbar$ avec $g_\mathrm{e} = 2$ le facteur gyromagnétique de l'électron.

5/ En déduire une expression de l'aimantation volumique moyenne M en fonction des paramètres du problème. On supposera que l'on se trouve à champ magnétique faible et l'on fera donc une expansion au premier ordre en champ des densités d'états par état de spin (1.2).

6/ Calculer la susceptibilité magnétique du système $\chi = (\partial M / \partial B)_{B=0}$ [on pourra exprimer le résultat en fonction de la densité d'état au niveau de Fermi, $\rho(E_\mathrm{F})$] ? Le système est-il diamagnétique, paramagnétique, ou ferromagnétique ?

2 Modèle de Ising et approximation de Bethe-Peierls

On considère un modèle de Ising en dimension d, constitué de $N \gg 1$ spins de Ising $s_i = \pm 1$ à la température T, disposés aux noeuds d'un réseau hypercubique. On notera $\beta = 1/k_B T$, avec k_B la constante de Boltzmann. On appelle h le champ magnétique extérieur (en unité d'énergie) et on ne considère que des interactions entre plus proches voisins. Le hamiltonien du système s'écrit alors

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^{N} s_i,$$

où $\langle i, j \rangle$ représente une somme sur les plus proches voisins i et j, et où $J > 0$.

2.1 Approximation de champ moyen

1/ À quoi correspondent les différents termes de cet hamiltonien ? On notera z le nombre de premier voisin d'un site. Exprimer z en fonction de la dimension de l'espace d.

2/ On commence par négliger les interactions entre spins. Calculer la fonction de partition et l'énergie libre du système. En déduire l'aimantation moyenne $m = \langle s \rangle$ par site. Représentez m en fonction du champ.

3/ On prend maintenant en compte les interactions entre spins. Montrer que le champ effectif vu par un spin dans l'approximation de champ moyen s'écrit $h_{\text{eff}} = h + h_m$, où $h_m = zJm$ est appelé champ moléculaire. Justifier brièvement cette dénomination. Montrer que l'aimantation moyenne $m = \langle s \rangle$ par site est solution d'une équation d'autocohérence que l'on explicitera.

4/ On se place à champ magnétique extérieur nul ($h = 0$). Montrer qu'il existe une transition de phase (paramagnétique-ferromagnétique) pour une température critique T_c que l'on exprimera en fonction des différents paramètres. Que prévoit l'approximation de champ moyen pour le cas $d = 1$? Pour le cas $d = 2$?

5/ Au voisinage de la température critique, trouver les valeurs des exposants critiques β et γ dans l'approximation de champ moyen. On rappelle que l'aimantation par site m et la susceptibilité magnétique χ se comporte près du point critique comme

$$m \sim (T_c - T)^{\beta}, \qquad \chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_{h=0} \sim (T - T_c)^{-\gamma}.$$

2.2 Approximation de Bethe-Peierls

Pour améliorer les résultats de l'approximation de champ moyen, Bethe et Peierls ont proposé en 1935 une approche un peu plus sophistiquée. On considère un sous-système $\mathcal{C}$ du réseau de spins, constitué d'un spin que l'on notera s_0 et de sa couronne de proches voisins notés s_i avec $i = 1, \ldots, z$. On note n_+ le nombre de spin de cette couronne qui sont dans l'état $s_i = +1$ et n_- le nombre de ceux dans l'état $s_i = -1$.

On décrit le hamiltonien du système de la façon suivante :

- Les interactions entre le spin s_0 et ses proches voisins sont décrites de manières exactes.
- Les interactions entre les spins s_i ($i = 1, \ldots, z$) et le reste du système sont décrites comme en champ moyen par un champ moléculaire h_m que l'on ne connait pas.

1/ Donner une relation simple entre n_+, n_- et z.

2/ Montrer que l'énergie $\mathcal{H}_\mathcal{C}$ du sous-système $\mathcal{C}$ peut se mettre sous la forme $-\beta\mathcal{H}_\mathcal{C}\,(n_+, n_-, s_0) = (H + H_m + Ks_0)\,(n_+ - n_-) + Hs_0$, où l'on a défini les grandeurs sans dimension $K = \beta J, H = \beta h$ et $H_m = \beta h_m$.

3/ On définit la probabilité jointe $P(s_0 = s, n_+ = n)$ pour avoir à la fois $s_0 = s$ et $n_+ = n$. Montrer que l'on a

$$P(s_0 = s, n_+ = n) = \frac{z!}{n!(z-n)!}\frac{1}{Z_{\mathcal{C}}}\,\mathrm{e}^{(H+H_m+Ks)(2n-z)+Hs}, \tag{2.1}$$

où $Z_{\mathcal{C}}$ est la fonction de partition de $\mathcal{C}$ que l'on ne cherchera pas à calculer.

4/ Montrer que l'on a $\langle s_0 \rangle = \sum_{n=0}^{z}\left[P(s_0 = +1, n_+ = n) - P(s_0 = -1, n_+ = n)\right]$.

5/ On cherche maintenant à exprimer l'aimantation moyenne sur un site en fonction des probabilités jointes $P(s_0 = s, n_+ = n)$. On définit pour cela la grandeur $\mathcal{S}$ comme $\mathcal{S} = \sum_{i=1}^{z} s_i$.

(i) Montrer que la valeur moyenne de $\mathcal{S}$ s'écrit $\langle \mathcal{S} \rangle = z\langle s_0 \rangle$. On le justifiera soigneusement.

(ii) Exprimer $\mathcal{S}$ en fonction de n_+ et z. En déduire une expression de $\langle \mathcal{S} \rangle$ en fonction des $P(s_0 = s, n_+ = n)$ (on ne cherchera pas à calculer la somme discrète apparaissant dans le résultat).

(iii) Déduire des deux relations précédentes l'équation

$$z\sum_{n=0}^{z} P(s_0 = 1, n_+ = n) = \sum_{n=0}^{z} n\left[P(s_0 = +1, n_+ = n) + P(s_0 = -1, n_+ = n)\right]. \tag{2.2}$$

6/ En utilisant l'équation (2.2) et l'expression des probabilités jointes (2.1), montrer que le champ moléculaire H_m doit satisfaire la relation

$$\frac{H_m}{z-1} = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{\cosh(H_m + H + K)}{\cosh(H_m + H - K)}\right). \tag{2.3}$$

7/ On suppose maintenant que le champ magnétique extérieur est nul ($H = 0$). Discuter graphiquement les solutions de l'équation auto-cohérente sur le champ moléculaire h_m. Montrer en particulier qu'il existe une transition de phase pour une température critique T_c donnée par

$$\frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}}{J} = \frac{2}{\ln\left(\frac{d}{d-1}\right)}. \tag{2.4}$$

8/ On rappelle que la résolution exacte du modèle d'Ising en dimension $d = 2$ donne $k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}/J = 2/\ln(1+\sqrt{2})$. Les méthodes numériques permettent de calculer des valeurs précises de $k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}/J$ données dans le tableau 1. Compléter ce tableau et discuter les résultats obtenus.

TAB. 1 – Valeurs de $k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}/J$ en fonction de d pour un réseau hypercubique.

d	Valeur exacte	Champ moyen	Bethe-Peierls
1			
2			
3	4.54545		
4	20/3		

9/ Discutez brièvement l'approximation de champ moyen (nature, validité...).

2.3 Formulaire mathématique

- $\tanh x \simeq x - x^3/3$ pour $x \ll 1$
- $\tanh^{-1} x = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1+x}{1-x}\right)$
- $\sum_{n=0}^{N}\frac{N!}{n!(N-n)!}\,x^n\,y^{N-n} = (x+y)^N$ (formule du binôme)
- $\sum_{n=0}^{N}\frac{N!}{n!(N-n)!}\,n\,x^n\,y^{N-n} = Nx\,(x+y)^{N-1}$