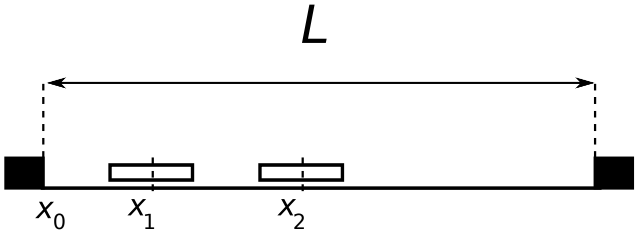
Examen — 2e session

Aucun document ni calculatrice ne sont autorisés
Durée de l'épreuve : 2h
Le sujet comprend 3 pages au total

1 Fluide classique de bâtonnets durs (gaz de Tonks)

On considère un modèle de fluide classique à une dimension, composé de N batônnets de longueur ℓ et de masse m, confinés dans un espace de taille L à la température T. On appelle ρ la densité de bâtonnets. Les bâtonnets interagissent par un potentiel à deux corps $V(x)$. On se limite par la suite à une interaction de cœur dur. On note x_i la position du i-ème bâtonnet (voir figure ci-dessous). Dans toute la suite du problème, on se place dans l'ensemble canonique.



(a) Explicitez le potentiel $V(x)$.

(b) Justifiez très soigneusement l'expression suivante pour la fonction de partition canonique :

$$Z(T,L,N) = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{N/2} I_N(L),$$

avec l'intégrale

$$I_N(L) = \int_{\ell/2}^{L-(N-1)\ell-\ell/2} dx_1 \ldots \int_{x_{i-1}+\ell}^{L-(N-i)\ell-\ell/2} dx_i \ldots \int_{x_{N-1}+\ell}^{L-\ell/2} dx_N. \qquad (1.1)$$

On rappelle que $\int_{-\infty}^{+\infty} du \exp(-u^2) = \pi^{1/2}$.

(c) Effectuez le changement de variable

$$y_i = x_i + (N-i)\,\ell + \frac{\ell}{2} \qquad (i = 1, \ldots, N)$$

dans l'intégrale (1.1). Calculez l'intégrale $I_N(L)$. En déduire la fonction de partition du gaz de bâtonnets.

(d) Déterminez à partir des résultats précédents l'équation d'état du système. Existe-t-il une transition de phase dans ce modèle ?

(e) On rappelle le développement du viriel

$$\beta P = \sum_{i=1}^{\infty} B_n(T)\rho^n,$$

où $\beta = 1/k_B T$, où P est la pression du système, et où

$$B_2(T) = \frac{1}{2}\int dx \left[1 - e^{-\beta V(x)}\right].$$

Calculez le second coefficient du viriel $B_2(T)$ de deux manières différentes et vérifiez la cohérence de vos résultats.

(f) Définissez et calculez le cœfficient de compressibilité isotherme κ_T du fluide. Commentez votre résultat.

2 Chaîne unidimensionelle de spins d'Ising

On considère une chaîne de N spins $s_i = \pm 1$ ($i = 0, 1, \ldots, N-1$) à la température T avec une interaction ferromagnétique $J > 0$ entre les premiers voisins dans un champ extérieur h. Le hamiltonien correspondant s'écrit

$$H = -J \sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i. \tag{2.1}$$

Les conditions aux limites sont périodiques, c'est-à-dire que l'on identifie $s_N = s_0$.

2.1 Approximation de champ moyen

On cherche dans un premier temps une solution au modèle d'Ising à 1D dans l'approximation de champ moyen. Dans la suite, on appelle $m = \langle s_i \rangle$ l'aimantation.

(a) Rappelez ce qu'est l'approximation de champ moyen dans le cadre du modèle d'Ising. Que vaut la fonction de corrélation spin-spin C_{ij} dans cette approximation ?

(b) Montrez que dans l'approximation de champ moyen, le hamiltonien (2.1) prend la forme

$$H = -(2Jm + h) \sum_{i=0}^{N-1} s_i + JNm^2.$$

(c) En déduire la fonction de partition canonique Z, ainsi que l'énergie libre F.

(d) Montrez que l'aimantation m obéit à une équation d'auto-cohérence que l'on explicitera.

(e) On se place à champ magnétique extérieur nul ($h = 0$). Montrez qu'il existe une transition de phase (paramagnétique-ferromagnétique) pour une température critique T_c que l'on exprimera en fonction des différents paramètres du problème.

2.2 Résolution exacte du modèle par la matrice de transfert

On cherche maintenant à résoudre le problème de façon exacte, ceci par la méthode de la matrice de transfert.

(a) Montrez que la fonction de partition canonique exacte du système associée au hamiltonien (2.1) a pour expression

$$Z = \sum_{s_0=\pm 1} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} \mathcal{T}_{s_0 s_1} \mathcal{T}_{s_1 s_2} \ldots \mathcal{T}_{s_{N-1} s_0},$$

où la matrice de transfert $\mathcal{T}$ (de dimension 2×2) est définie par ses éléments de matrice

$$\mathcal{T}_{s_i s_{i+1}} = \exp\left(\beta J s_i s_{i+1} + \frac{\beta h}{2}[s_i + s_{i+1}]\right)$$

avec $\beta = 1/k_B T$, et où les lignes sont labélisées par $s_i = +1$ et -1, et les colonnes par $s_{i+1} = +1$ et -1. En particulier, montrez que

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}.$$

(b) En vous servant du produit matriciel, en déduire que

$$Z = \sum_{s_0=\pm 1} \left(\mathcal{T}^N\right)_{s_0 s_0} = \mathrm{Tr}\left\{\mathcal{T}^N\right\} = \lambda_0^N + \lambda_1^N,$$

où λ_0 et λ_1 sont les valeurs propres de $\mathcal{T}$ ($|\lambda_0| > |\lambda_1|$ par convention). Justifiez du fait qu'à la limite thermodynamique ($N \to \infty$), $Z = \lambda_0^N$.

(c) Déterminez, à la limite thermodynamique, l'énergie libre du système.

(d) En déduire l'aimantation m du système.

(e) Représentez m en fonction de βh pour différentes valeurs de βJ. En particulier, analysez les cas $\beta J \to 0$ et $\beta J \to \infty$. Interprétez qualitativement ces résultats.

(f) Le système présente-t'il une transition de phase ? Comparez votre réponse à la prédiction de l'approximation de champ moyen.

2.3 Fonction de corrélation

La fonction de corrélation entre deux spins séparés par $R-1$ sites sur le réseau est définie par

$$\Gamma_R = \langle s_0 s_R \rangle - \langle s_0 \rangle \langle s_R \rangle, \tag{2.2}$$

et la longueur de corrélation ξ par

$$\xi^{-1} = \lim_{R\to\infty} \left\{ -\frac{\ln |\Gamma_R|}{R} \right\}. \tag{2.3}$$

(a) On cherche à exprimer Γ_R à l'aide de la matrice de transfert $\mathcal{T}$ et de la matrice $\mathcal{S}$ représentant l'opérateur de spin. On écrit $\mathcal{T}$ et $\mathcal{S}$ dans leur représentation diagonale :

$$\mathcal{T} = \sum_{i=0,1} \lambda_i |u_i\rangle\langle u_i|,$$
$$\mathcal{S}_i = \sum_{s_i=\pm 1} s_i |s_i\rangle\langle s_i|.$$

Les vecteurs $|s_i = +1\rangle = (1,0)$ et $|s_i = -1\rangle = (0,1)$ représentent deux états possibles d'un spin. À l'aide de $\mathcal{T}$ et $\mathcal{S}$, démontrez que, dans la limite thermodynamique, on a

$$\Gamma_R = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right)^R \langle u_0|\mathcal{S}_0|u_1\rangle\langle u_1|\mathcal{S}_R|u_0\rangle.$$

(b) Calculez explicitement la fonction de corrélation (2.2). On admettra que les vecteurs propres de la matrice de transfert ont pour expression $|u_0\rangle = (\alpha_+, \alpha_-)$ et $|u_1\rangle = (\alpha_-, -\alpha_+)$, avec

$$\alpha_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{\mathrm{e}^{\beta J} \sinh(\beta H)}{\sqrt{\mathrm{e}^{2\beta J} \sinh^2(\beta H) + \mathrm{e}^{-2\beta J}}} \right)^{1/2}.$$

En particulier, étudiez le cas à champ nul. Représentez dans ce cas la fonction de corrélation en fonction de R.

(c) Calculer la longueur de corrélation (2.3). Commentez les cas basse et haute températures.