

Examen — 1^{re} session

Aucun document ni calculatrice ne sont autorisés

Durée de l'épreuve : 2h

Le sujet comprend 3 pages au total

Le barème est indicatif

1 Modèle d'Einstein pour la chaleur spécifique des solides (6 pts)

On considère un solide cristallin formé de $N \gg 1$ atomes à la température T . On cherche à décrire la contribution des vibrations du réseau à la capacité calorifique du solide. Pour ce faire, on considère le modèle d'Einstein où chaque atome de la structure cristalline est modélisé par un oscillateur harmonique quantique à trois dimensions. Dans ce modèle, tous les atomes vibrent à la même fréquence ω , indépendamment les uns des autres. Les états quantiques du système sont donc caractérisés par l'énergie

$$\varepsilon_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + \dots + n_N),$$

où $n_i = n_{i,x} + n_{i,y} + n_{i,z}$, avec $n_{i,x}, n_{i,y}, n_{i,z} = 0, 1, 2, \dots$ des entiers naturels ($i = 1, \dots, N$).

1/ Montrez que la fonction de partition canonique du système a pour expression

$$Z = \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)^{-3N},$$

où $\beta = 1/k_B T$, avec k_B la constante de Boltzmann.

2/ En déduire l'énergie libre F , l'entropie S et l'énergie moyenne E du système. En particulier, montrez que $E = 3N\hbar\omega\bar{n}$, où l'on exprimera \bar{n} en fonction des données du problème. Que représente \bar{n} ? Commentez.

3/ Calculez la capacité calorifique (à volume constant) C_V du système. Exprimez votre résultat en fonction de la température d'Einstein $T_E = \hbar\omega/k_B$.

4/ Donnez le graphe de C_V en fonction de T/T_E . Commentez en particulier les cas basse et haute températures.

2 Modèle d'Ising (14 pts)

On considère un modèle d'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 Généralités

- 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/ Donner la définition de la fonction de corrélation de spins C_{ij} . Que vaut-elle si les spins ne sont pas corrélés?
- 3/ On commence par négliger les interactions entre spins. Calculer la fonction de partition et l'énergie libre du système. En déduire l'aimantation moyenne $m = \langle s_i \rangle$ par site. Représentez m en fonction du champ.

2.2 Approximation de champ moyen

On prend maintenant en compte les interactions entre spins. On écrit le spin s_i sur le site i comme

$$s_i = m + \delta s_i,$$

où δs_i représente la fluctuation de l'aimantation par rapport à la valeur moyenne m . Dans toute la suite, on fait l'hypothèse que $\delta s_i \ll 1$.

- 1/ Calculer la fonction de corrélation dans le cadre de cette approximation.
- 2/ Toujours dans ce cadre, exprimer le hamiltonien du système. 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.
- 3/ Montrer que l'aimantation moyenne m par site est solution d'une équation d'autocoherence 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 pour le cas $d = 1$? Pour le cas $d = 2$?

2.3 Solution exacte en dimension $d = 1$

On considère désormais une chaîne linéaire en dimension $d = 1$ de $N \gg 1$ spins de Ising avec des conditions périodiques ($s_{N+1} = s_1$), sans champ magnétique extérieur. On ne considère que des interactions entre plus proches voisins. Le hamiltonien du système s'écrit alors

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

2.3.1 Fonction de partition et énergie libre

- 1/ Quel est le nombre total de paires de proches voisins dans la chaîne?
- 2/ Montrer que pour des spins d'Ising ($s_i = \pm 1$), on peut écrire

$$e^{\beta J s_i s_j} = \cosh(\beta J) [1 + \tanh(\beta J) s_i s_j].$$

- 3/ En déduire que la fonction de partition se met sous la forme

$$Z = \cosh^N(\beta J) \sum_{s_1} \dots \sum_{s_N} \prod_{i=1}^N [1 + \tanh(\beta J) s_i s_{i+1}]. \quad (2.1)$$

- 4/ On représente chaque terme du développement (2.1) par un diagramme. Écrire la fonction de partition comme une somme sur des graphes sur le réseau de spins. Quels sont les deux diagrammes qui contribuent de façon non nulle à la fonction de partition du système ? En déduire l'expression *exacte* de la fonction de partition du modèle d'Ising à une dimension sans champ magnétique extérieur.
- 5/ Que devient l'expression de Z dans la limite thermodynamique ($N \rightarrow +\infty$) ? Donner l'expression de l'énergie libre du système. Est-elle extensive ?
- 6/ En utilisant la même méthode diagrammatique, calculer l'aimantation moyenne $\langle s_i \rangle$ du site i ? Existe-t'il une transition de phase ? Comparez à l'approximation de champ moyen et commentez.

2.3.2 Longueur de corrélation

On cherche à calculer la fonction de corrélation à deux spins

$$\Gamma(r) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle, \quad (2.2)$$

où r est la distance entre les deux sites i et j sur l'anneau ($r = \min\{|i-j|, N-|i-j|\}$).

- 1/ Montrer que l'on peut utiliser une méthode analogue à celle utilisée pour le calcul de la fonction de partition pour déterminer la fonction de corrélation (2.2). Quels sont les deux seuls diagrammes qui contribuent à $\langle s_i s_j \rangle$?
- 2/ Evaluer les contributions de ces diagrammes et en déduire que

$$\Gamma(r) = \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right),$$

où l'on spécifiera l'expression de ξ .

- 3/ Donner l'allure de ξ en fonction de la température.