TD 3
Modèle d'Ising

1 Transition paramagnétique-ferromagnétique

On considère un système constitué de $N(\gg 1)$ atomes fixés aux noeuds d'un réseau cristallin de volume V, en équilibre avec un thermostat à la température T, soumis à un champ extérieur appliqué $\mathbf{B}_0$. À chaque atome i est associé un moment magnétique $\boldsymbol{\mu}_i = g\mu_\mathrm{B}\mathbf{S}_i$, où g est le facteur de Landé, μ_B le magnéton de Bohr, et $\mathbf{S}_i$ le spin associé à l'atome i. Dans ce qui suit, on supposera que S_i ne peut prendre que les valeurs $\pm 1/2$ dans la direction du champ magnétique appliqué.

1.1 Paramagnétisme

On néglige pour l'instant les interactions entre les moments magnétiques. Le système peut être décrit par le hamiltonien qui couple simplement les moments magnétiques avec le champ appliqué $\mathbf{B}_0$:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{B}_0 = -g\mu_\mathrm{B} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{B}_0.$$

(a) Dans quel état se trouve le système à température nulle (on donnera une réponse courte sans faire de calcul) ? Quelle est l'effet d'une augmentation de la température sur cet état ?

(b) Calculer la fonction de partition Z et l'énergie libre F du système.

(c) Montrez que l'aimantation moyenne totale M du système se met sous la forme

$$M = \frac{N}{V}\frac{g\mu_\mathrm{B}}{2}\tanh\left(\frac{g\mu_\mathrm{B}B_0}{2k_\mathrm{B}T}\right).$$

Représentez M en fonction du champ magnétique appliqué ? Le système présente-t-il une transition de phase ?

(d) On définit la susceptibilité magnétique par

$$\chi = \lim_{B_0 \to 0} \frac{\partial M}{\partial B_0}. \tag{1.1}$$

Montrez que χ suit la loi de Curie

$$\chi = \frac{\mathcal{C}}{T}. \tag{1.2}$$

On exprimera $\mathcal{C}$ en fonction des données du problème. Notez que pour les faibles champs magnétiques, on a donc $M = \chi B_0$.

1.2 Ferromagnétisme

On considère maintenant une interaction ferromagnétique de proches voisins entre les moments magnétiques. Le hamiltonien du système devient

$$\mathcal{H} = -g\mu_\mathrm{B} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{B}_0 - J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \tag{1.3}$$

où $\langle i, j\rangle$ représente une sommation sur les proches voisins i et j et où J est la constante de couplage (quel est son signe ?).

(a) Dans une approximation de champ moyen, on néglige les corrélations entre les fluctuations des spins par rapport a leur valeur moyenne $\langle \mathbf{S}_i \rangle$. On suppose que chaque atome est entouré par p voisins dans le réseau cristallin. Montrez que le champ effectif B_{eff} que voit un site i se met sous la forme $B_{\text{eff}} = B_0 + \lambda M$, où M est l'aimantation totale du système. On exprimera λ en fonction des données du problème. Montrez que le hamiltonien (1.3) prend, dans l'approximation de champ moyen, la forme

$$\mathcal{H} = -g\mu_{\text{B}} B_{\text{eff}} \sum_{i=1}^{N} S_i + J \frac{Np}{2} \left(\frac{VM}{Ng\mu_{\text{B}}} \right)^2 .$$

(b) Déterminez la fonction de partition canonique ainsi que l'énergie libre dans l'approximation de champ moyen.

(c) Utilisez les résultats de la partie 1.1 pour donner la condition d'autocohérence qui détermine la valeur de M :

$$M = \frac{N}{V} \frac{g\mu_{\text{B}}}{2} \tanh \left(\frac{\beta g \mu_{\text{B}}}{2} (B_0 + \lambda M) \right). \tag{1.4}$$

Retrouvez ce résultat en minimisant par rapport à M l'énergie libre déterminée à la question 1.2(b).

1.2.1 Propriétés du système en champ nul

On se place à champ magnétique extérieur nul ($B_0 = 0$).

(a) Combien de solutions possède l'équation transcendante (1.4) ? (On pourra s'aider d'une discussion graphique.) Le système présente-t-il une transition de phase ? Si oui, donnez l'expression de la température critique T_{c}.

(b) Calculez l'aimantation dans la limite des très basses températures ($T \ll T_{\text{c}}$), ainsi qu'au voisinage de T_{c} (i.e., pour $0 < 1 - T/T_{\text{c}} \ll 1$).

(c) Calculez l'énergie moyenne du système. En déduire la capacité calorifique C correspondante, et son comportement en fonction de la température. Que se passe-t-il pour $T = T_{\text{c}}$?

1.2.2 Propriétés du système à champ magnétique fini

On se place maintenant à champ magnétique extérieur non-nul ($B_0 \neq 0$).

(a) Résoudre graphiquement l'équation d'auto-cohérence (1.4), tout d'abord pour $T > T_{\text{c}}$, puis pour $T < T_{\text{c}}$. On se placera à champ magnétique fini, mais faible (devant quoi ?).

(b) En déduire la susceptibilité magnétique du système [cf. Eq. (1.1)]. Comparez au cas paramagnétique et à la loi de Curie (1.2).

1.2.3 Exposants critiques en champ moyen

Au voisinage de la température critique, déduisez des questions précédentes les exposants critiques en champ moyen α, β, et γ, définis par

$$\begin{aligned} M(T, B_0 = 0) &\sim (T_{\text{c}} - T)^{\beta}, \\ C(T, B_0 = 0) &\sim (T - T_{\text{c}})^{\alpha}, \\ \chi &\sim (T - T_{\text{c}})^{-\gamma}. \end{aligned}$$

Vous comparerez ces résultats à ceux du TD 4.

2 Modèle d'Ising à 1D : solution exacte par la matrice de transfert

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 entre les premiers voisins dans un champ extérieur H. Le hamiltonien correspondant s'écrit

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

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

2.1 Propriétés thermodynamiques du système

(a) Montrez que la fonction de partition canonique du système 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 $\beta = 1/k_\mathrm{B}T$, 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

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

(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 ($|\lambda_0| > |\lambda_1|$ par convention) sont les valeurs propres de $\mathcal{T}$. 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. Que peut-on dire de la limite des basses températures ?

(d) En déduire l'aimantation moyenne $M = \langle s_i \rangle$ du système. Représentez votre résultat en fonction du champ appliqué. Que peut-on dire du cas sans interaction ($J = 0$) et du cas $J/k_\mathrm{B}T \gg 1$ (interactions fortes). Interprétez qualitativement ces résultats. Le système présente-t'il une transition de phase ?

2.2 Fonction de corrélation

La fonction de corrélation entre deux spins séparés par $R-1$ spins est définie par

$$\Gamma_R = \langle s_0 s_R \rangle - \langle s_0 \rangle \langle s_R \rangle, \tag{2.1}$$

et la longueur de corrélation ξ par

$$\xi^{-1} = \lim_{R\to\infty} \left\{-\frac{\ln|\Gamma_R|}{R}\right\}. \tag{2.2}$$

(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 (2.1). 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 (2.2). Commentez les cas basse et haute températures.