



PHYSIQUE STATISTIQUE III

Transitions de phases

Professeur P. De Los Rios

Semestre d'automne 2008

Table des matières

Introduction	4
1 Gaz de Van der Waals	5
1.1 Système sans potentiel de VdW	5
1.2 Système avec potentiel de VdW	7
1.3 Classification des transitions de phases	9
2 Modèle de Ising	12
2.1 Description du modèle	12
2.2 Résolution en champ moyen	13
2.3 1ère discussion : $h=0$	15
2.4 2ème discussion : $h \neq 0$	16
3 Relation de Clausius-Clapeyron	17
3.1 diagramme de phase	17
3.2 Preuve de la relation de Clausius-Clapeyron	17
3.3 Discussion	18
4 Divergence des dérivées secondes et définition du facteur de corrélation	19
4.1 divergence de χ	20
5 Champ moyen et corrélations	21
6 Exposants critiques et classes d'universalité	25
6.1 Définitions	25
6.2 Gaz de VdW et Ising 3D	25
7 Exposants critiques du champ moyen	28
7.1 β et δ	28
7.2 Théorie de Landau-Ginzberg pour déterminer η et ν	29
7.2.1 énergie libre de Landau	29
7.2.2 Modèle de Landau-Ginzberg	30
7.2.3 calcul de η	33

7.2.4	calcul de ν	34
8	Conditions de validité des exposants du CM	36
9	Théorème de Lee-Yang	38
10	Hypothèse de scaling	39
10.1	Définition et application	39
10.2	Hypothèse forte	40
10.3	Hypothèse de scaling pour l'énergie libre	41
10.4	calcul des exposants	42
11	Groupe de renormalisation (RG)	44
11.1	Procédure du RG :	44
11.2	Exemple de coarse graining	45
11.3	Exemple de prolifération des interactions	46
11.4	Espace des \vec{J}	47
12	Modèle de Ising en d=1 (h=0)	49
13	Ising sur réseau hiérarchique	52
14	Trouver les exposants critiques	54
15	Preuve de l'hypothèse de scaling	56
	Bibliographie	58

Introduction

Pourquoi il y a-t-il des transitions de phases ?

Une transition de phase = lorsque le système considéré passe d'une phase à ? l'autre. Exemple :

1. liquide-gaz
2. transition magnétique (alignement des spins)

Chapitre 1

Gaz de Van der Waals

Une façon très simple de mettre en évidence une transition de phase est d'étudier un modèle connu sous le nom de gaz de Van der Waals.

On sait que les interactions entre particules dans un gaz sont attractives à longue distance, mais deviennent répulsives lorsque les particules sont trop proches. L'idée de Van der Waals est d'étudier N particules de gaz sphériques de rayon r_0 contenues dans un volume V fixe, à une température T donnée. Le potentiel d'interactions considéré entre les particules est simplifié selon la figure 1.

Aucune particule ne peut donc se trouver à une distance inférieure à $2r_0$ de toute autre particule. Il y a donc un volume exclu autour de chaque particule de $v_0 = \frac{2}{3}\pi(2r_0)^3$. Ainsi le volume à disposition d'une particule est $V - Nv_0$.

En étudiant la fonction de partition de ce système, Van der Waals a trouvé une relation entre la pression et le volume du système, et un moyen de déterminer les conditions de transitions de phases. Cependant, avant de se lancer dans ce calcul, il est bon d'en faire un plus simple : étudier le cas où il n'y a pas d'interactions et voir si l'on retrouve la relation des gaz parfaits.

1.1 Système sans potentiel de VdW

1) L'énergie du système

$$E(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\}) = \sum_{i=0}^N \frac{p_i^2}{2m} + \underbrace{\mathcal{V}(\{\vec{r}_i\})}_{=0 \text{ dans ce cas}} . \quad (1.1)$$

2) Définition de la fonction de partition $Z_N(T)$

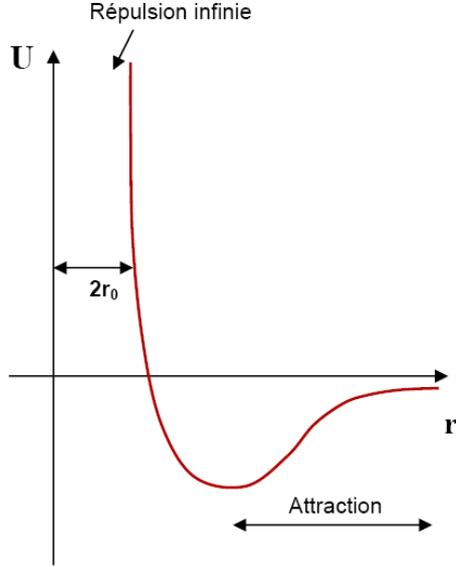


FIG. 1.1 – Potentiel de Van der Waals

$$Z_N(T) = \frac{1}{N!h^{3N}} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N e^{-\beta E(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\})} \quad (1.2)$$

$$= \frac{1}{N!h^{3N}} \int d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N \prod_{i=0}^N e^{-\beta \frac{p_i^2}{2m}} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N e^{-\beta \cdot \mathcal{V}} \quad (1.3)$$

Le facteur $N!$ dans le dénominateur vient du fait que les particules sont indiscernables, $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Effectuons premièrement l'intégrale sur les $\{\vec{p}_i\}$.

$$\int d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N \prod_{i=0}^N e^{-\beta \frac{p_i^2}{2m}} = \prod_{i=0}^N \int d\vec{p}_i e^{-\beta \frac{p_i^2}{2m}} \quad (1.4)$$

$$= \left[\int d\vec{p} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \right]^N \quad (1.5)$$

$$= \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dp_x e^{-\beta \frac{p_x^2}{2m}} \right]^{3N} \quad (1.6)$$

$$= (2\pi m k_B T)^{\frac{3N}{2}} \quad (1.7)$$

L'expression de $Z_N(T)$ devient donc :

$$Z_N(T) = \frac{1}{\lambda^{3N} N!} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N e^{-\beta \cdot \overbrace{\mathcal{V}}^{=0}} \quad (1.8)$$

$$= \frac{1}{\lambda^{3N} N!} V^N \quad (1.9)$$

$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$ est la longueur d'onde thermique de de Broglie.

3) Par définition l'énergie libre vaut :

$$F_N(T) = -k_B T \ln(Z_N(T)) \quad (1.10)$$

$$= -k_B T (N \ln(V) - \ln(N!) - 3N \ln(\lambda)) \quad (1.11)$$

Utilisation de la formule de Stirling :

$$N! \simeq N^{N+\frac{1}{2}} e^{-N} \sqrt{2\pi} \quad (1.12)$$

$$\implies \ln(N!) \simeq (N + \frac{1}{2}) \ln(N) - N + \frac{1}{2} \ln(2\pi) \quad (1.13)$$

$$\implies F_N(T) = -k_B T (N \ln(\frac{V}{N}) + \text{qqch (indép. de V)}) \quad (1.14)$$

4) A partir de cela, on trouve une expression pour la pression à partir de la définition $P = -\frac{\partial F}{\partial V}|_T$

$$\Rightarrow P = k_B T \frac{N}{V} \quad (1.15)$$

$$\text{ou } PV = N k_B T \quad (1.16)$$

1.2 Système avec potentiel de VdW

On reprend le même calcul, mais en ajoutant le potentiel d'interactions entre les particules de Van der Waals.

1) L'énergie est :

$$E(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{p}_i\}) = \sum_{i=0}^N \frac{p_i^2}{2m} + \mathcal{V}(\{\vec{r}_i\}). \quad (1.17)$$

2) La fonction de partition se calcule...

$$Z_N(T) = \frac{1}{\lambda^{3N} N!} \int d\vec{r} e^{-\beta \cdot \mathcal{V}(\{\vec{r}_i\})} \quad (1.18)$$

$$= \frac{1}{\lambda^{3N} N!} \int d\vec{r} e^{-\beta \cdot \sum_i \sum_{j \neq i} \mathcal{V}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)} \quad (1.19)$$

$$= \frac{1}{\lambda^{3N} N!} \int d\vec{r} e^{-\beta \cdot \sum_i \sum_{j \neq i} \int d\vec{r} \mathcal{V}(\vec{r}, \vec{r}_i) \delta(\vec{r} - \vec{r}_j)} \quad (1.20)$$

$\delta(\vec{r} - \vec{r}_j)$ est la fonction de densité de la particule j-ème placée en \vec{r}_j : $\rho(\vec{r}, \vec{r}_j)$. Maintenant, on fait l'approximation du champ moyen : $\rho(\vec{r}, \vec{r}_j) = \frac{1}{V}$. La particule peut être partout avec la même probabilité.

$$Z_N(T) = \frac{1}{\lambda^{3N} N!} \int d\vec{r} e^{-\beta \cdot \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{1}{V} \int d\vec{r} \mathcal{V}(\vec{r}, \vec{r}_i)} \quad (1.21)$$

$\int d\vec{r} \mathcal{V}(\vec{r}, \vec{r}_i)$ est un nombre fini par hypothèse on le nomme -a. Par conséquent,

$$\sum_i \sum_{j \neq i} -a = -N \sum_j a = -\frac{N(N-1)}{2} a \simeq -\frac{N^2 a}{2} = -N^2 a' \quad (1.22)$$

$$\text{o? } a' = \frac{a}{2} \quad (1.23)$$

$$\Rightarrow Z_N(T) = \frac{1}{\lambda^{3N} N!} \int d\vec{r} e^{\frac{a' N^2 \beta}{V}} \quad (1.24)$$

$$= \frac{1}{\lambda^{3N} N!} e^{\frac{a' N^2 \beta}{V}} (V - N v_0)^N \quad (1.25)$$

$$\text{o? } v_0 = \frac{2}{3} \pi (2r_0)^3 \quad (1.26)$$

3) L'énergie libre vaut alors :

$$F_N(T) = -k_B T \ln(Z_N(T)) \quad (1.27)$$

$$= -k_B T \ln\left(\frac{1}{\lambda^{3N} N!} e^{\frac{a' N^2}{V k_B T}} (V - N v_0)^N\right) \quad (1.28)$$

$$= -a' \frac{N^2}{V} - k_B T N \ln\left(\frac{V - v_0 N}{N}\right) + \text{const.} \quad (1.29)$$

4) Finalement, la pression vaut $P = -\frac{\partial F}{\partial V}|_T$

$$\Rightarrow \left(p + \frac{aN^2}{V^2}\right)(V - Nv_0) = k_B T N \quad (1.30)$$

Ceci est l'équation de Van der Waals. Pour l'obtenir il a donc fallu :

- Supposer un potentiel d'interaction comme celui représenté en figure 1
- Introduire une notion de volume interdit autour de chaque particule valant $\frac{2}{3}\pi(2r_0)^3$
- Supposer une distribution des particules selon le champ moyen $\rho(\vec{r}, \vec{r}_j) = \frac{1}{V}$
- Supposer $\int d\vec{r} \mathcal{V}(\vec{r}, \vec{r}_i) < \infty$

1.3 Classification des transitions de phases

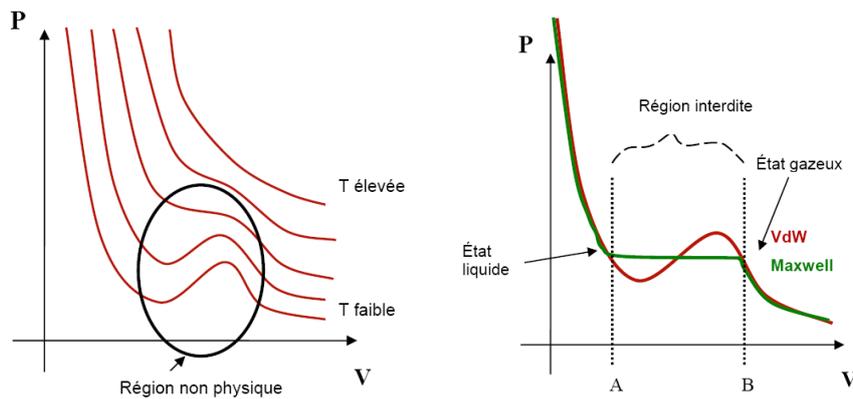


FIG. 1.2 – Courbes de Van der Waals

Cette formule donne des courbes telles que celles présentées dans la figure 2. Selon ces courbes, lorsque l'on baisse la température, on trouve des régions où $\frac{\partial P}{\partial V} > 0$, ce qui est physiquement impossible. L'interprétation de Maxwell est la suivante : Dans ces régions là, le système prend en réalité le chemin vert (figure 2) et non le rouge, car le travail $\int_A^B p dV$ est ainsi minimisé. Ce chemin vert s'interprète de la façon suivante : dans cette région, il y a un mélange (une coexistence) des deux phases (exemple : liquide-gaz). Si l'on regarde à présent le graphe de la densité $\rho = \frac{N}{V}$, qui est considérée comme le paramètre d'ordre de ce système, en fonction de p, on obtient la figure 3

On remarque que ρ diverge en un certain point, appelé point critique. Un point critique est, par définition, un point où il y a divergence des quantités thermodynamiques. Les transitions de phases peuvent être classifiées de la façon suivante (Classification d'Ehrenfest) :

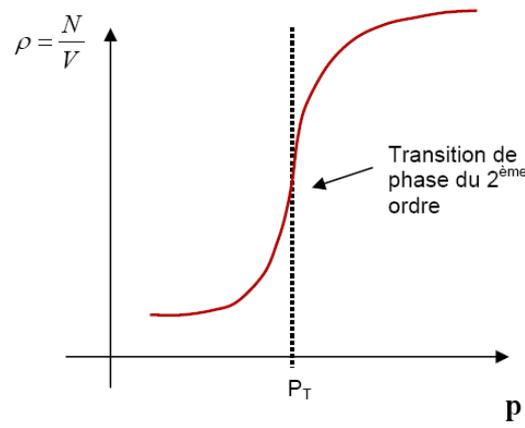
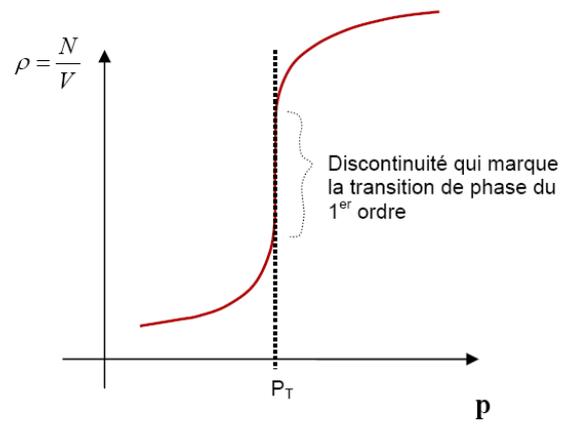


FIG. 1.3 – variation de la densité

Transition du 1er ordre : discontinuité des dérivées premières des potentiels thermodynamiques ;

Transition du 2ème ordre : dérivées premières continues ; dérivées secondes discontinues ou divergentes.

Ainsi, la figure 3 représente une transition de 1er ordre, alors que la figure 4 représente une transition de 2ème ordre. Le système passe d'une transition de 1er ordre à une transition de 2ème ordre lorsque $T = T_C$, la température critique.

Chapitre 2

Modèle de Ising

2.1 Description du modèle

Dans le chapitre précédent, les transitions de phases liquide-gaz ont été présentées. Mais il existe également des transitions de phases magnétiques. C'est-à-dire des systèmes où les spins s'alignent automatiquement lorsque la température devient inférieure à une certaine température critique. En effet, des graphes de l'aimantation tel le schéma de la figure 5 ont été observés.

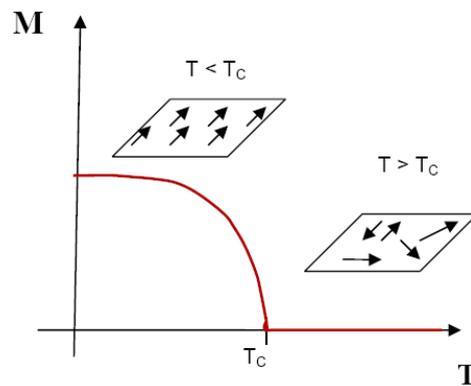


FIG. 2.1 – aimantation en fonction de T

Pour étudier de telles transitions, il est utile d'introduire le modèle de Ising. C'est une simplification du système dans laquelle :

1. On considère des dipôles magnétiques en interactions.
2. Ces dipôles sont placés sur les noeuds d'un réseau cristallin.
3. Les interactions entre dipôles sont à courte portée (proches voisins).

4. L'orientation des dipôles n'est que dans une direction (\uparrow ou \downarrow), et non dans \mathbb{R}^3 . On y associe alors la valeur $s_i = \pm 1$.
5. L'énergie d'interaction est différente si les spins sont parallèles ou antiparallèles.
6. L'aimantation externe est également prise en compte.

Ainsi, l'énergie du système en fonction du réseau de spins est définie par :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i =: -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \text{ nn } i} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (2.1)$$

où J est l'énergie d'interaction. Si $J > 0$, le matériau est dit ferro-magnétique, si $J < 0$, le matériau est antiferro-magnétique. h est lié à l'aimantation externe.

2.2 Résolution en champ moyen

La fonction de partition liée à ce modèle est, selon la définition,

$$Z = \sum_{\{\Gamma\}} e^{-\beta E[\Gamma]} \quad (2.2)$$

où Γ est une configuration possible du système. Si l'on considère N spins, alors $|\{\Gamma\}| = 2^N$.

Dans ce modèle, en $d=1$, il n'y a pas de transitions de phases lorsque l'on ne considère que les proches voisins. En $d=2$, il existe des transitions de phases.¹

Dans le modèle de VdW, le paramètre d'ordre était ρ et l'on étudiait $\rho(P)$. Pour Ising, le paramètre d'ordre est m , l'aimantation moyenne qui est, en fait, la moyenne thermodynamique des spins définie comme

$$m := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i \rangle = \langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\Gamma\}} s_i(\Gamma) e^{-\beta E[\Gamma]} \quad (2.4)$$

Et l'on étudie $m(T)$. Dans le cas VdW, pour simplifier le problème, on avait fait une approximation de champ moyen : $\langle \rho_i \rangle = \frac{1}{V}$. Pour Ising, on va procéder de la même façon, c'est-à-dire obtenir une solution "champ moyen"

¹Il existe une forme plus générale du modèle de Ising où le couplage entre spins dépend du site :

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i \quad (2.3)$$

Cette forme n'est pas étudiée dans le cadre de ce cours.

du problème, en substituant, dans le calcul de Z , l'aimantation moyenne $\langle s_i \rangle$ par un nombre fixe, m . Pour que cette démarche soit valable, il est nécessaire que les fluctuations par rapport à la valeur moyenne (les $\Delta s_i, \Delta s_j$) soient petites.

$$\Rightarrow s_i s_j = \overbrace{(s_i - \langle s_i \rangle)}^{\Delta s_i} \overbrace{(s_j - \langle s_j \rangle)}^{\Delta s_j} + s_i \langle s_j \rangle + s_j \langle s_i \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \quad (2.5)$$

$$= -m^2 + m(s_i + s_j) + \underbrace{\Delta s_i \Delta s_j}_{\text{négligé}} \quad (2.6)$$

$$= -m^2 + m(s_i + s_j) + \underbrace{\Delta s_i \Delta s_j}_{\text{négligé}} \quad (2.7)$$

Avec cette simplification, on peut calculer l'énergie :

$$\Rightarrow E_{CM} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [-m^2 + m(s_i + s_j)] - h \sum_i s_i \quad (2.8)$$

$$= -Jm^2 \sum_{\langle i,j \rangle} 1 - mJ \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i + s_j) - h \sum_i s_i \quad (2.9)$$

Or,

$$\sum_{\langle i,j \rangle} 1 = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \text{ nn } i} 1 = \frac{zN}{2} \quad (2.10)$$

$$\text{et } \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i + s_j) = z \sum_i s_i \quad (2.11)$$

où z est le nombre de proche voisin d'un site, c'est-à-dire le nombre de coordination du réseau.

$$\Rightarrow E_{CM} = -\frac{JzN}{2}m^2 - (mzJ + h) \sum_i s_i \quad (2.12)$$

Alors, la fonction de partition vaut :

$$Z_{CM} = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta E_{CM}} \quad (2.13)$$

$$= e^{-\beta \frac{zJN}{2} m^2} \sum_{\{s_i\}} e^{\beta(mzJ+h) \sum_i s_i} \quad (2.14)$$

$$= e^{-\beta \frac{zJN}{2} m^2} \underbrace{\sum_{s_1 \pm 1} \sum_{s_2 \pm 1} \dots \sum_{s_N \pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta(mzJ+h)s_i}}_{\text{N blocs indépendants et similaires}} \quad (2.15)$$

$$= e^{-\beta \frac{zJN}{2} m^2} \left[\sum_{s_i \pm 1} e^{\beta(mzJ+h)s_i} \right]^N \quad (2.16)$$

$$= e^{-\beta \frac{zJN}{2} m^2} [2 \cosh(\beta(mzJ+h))]^N \quad (2.17)$$

Cette dernière équation est l'expression du modèle de Ising, en champ moyen. Rappel : On cherche à obtenir une expression de m en fonction de T , car cela va donner l'équation de la courbe caractéristique de la transition de phase (voir figure?). Pour cela, on cherche une "self-consistency equation" pour m (qui dépend bien sûr de T). On l'obtient en utilisant la définition de l'aimantation moyenne :

$$m = \langle s_i \rangle_{CM} \quad (2.18)$$

$$\Rightarrow m = \frac{\sum_{\{s_i\}} s_i e^{-\beta E_{CM}}}{Z_{CM}(m)} \quad (2.19)$$

On connaît Z_{CM} , il reste donc à calculer :

$$\sum_{\{s_i\}} s_i e^{-\beta E_{CM}} \quad (2.20)$$

$$= e^{-\beta \frac{zJN}{2} m^2} [2 \cosh(\beta(mzJ+h))]^{N-1} \left[\sum_{s_i \pm 1} s_i e^{\beta(mzJ+h)s_i} \right] \quad (2.21)$$

$$= e^{-\beta \frac{zJN}{2} m^2} [2 \cosh(\beta(mzJ+h))]^{N-1} 2 \sinh(\beta(mzJ+h)) \quad (2.22)$$

$$\Rightarrow m = \tanh(\beta(mzJ+h)) \quad (2.23)$$

C'est l'équation de Weiss. Elle possède soit 2 solutions, soit 0. Cela dépend de la pente de la tangente à l'origine. Voir figure ?

2.3 1ère discussion : $h=0$

à faire

FIG. 2.2 – 6

2.4 2ème discussion : $h \neq 0$

à faire

Chapitre 3

Relation de Clausius-Clapeyron

Dans ce chapitre, on va montrer que lors d'une transition de phase du 2ème ordre, il n'y a pas de variation d'entropie, et donc que même lors de la transition, on est en présence d'une seule phase (pas de coexistence de phases). Pour montrer que l'entropie est continue, on utilise le fait que lors d'une transition de phase du 2ème ordre, au point critique, le volume est continu. Par exemple dans le cas de VdW, $V_{gaz} = V_{liquide}$. Enfin, on utilise le fait que le lien entre différence d'entropie et différence de volume est donné par la relation de Clausius-Clapeyron :

$$\left. \frac{dp}{dT} \right|_{coex} = \frac{\Delta S_{g-l}|_{T_c}}{\Delta V_{g-l}|_{T_c}} \quad (3.1)$$

3.1 diagramme de phase

FIG. 3.1 – diagramme p-T

3.2 Preuve de la relation de Clausius-Clapeyron

Jusqu'à présent, on a travaillé avec l'énergie libre de Helmholtz : $F(V,T)$. Pour ce problème, il est plus simple d'utiliser sa transformée de Legendre ¹, qui est l'énergie libre de Gibbs $G(p,T)$. Selon la relation de Gibbs-Guém, $G(p,T) = N\mu(p,T)$, où μ est le potentiel chimique. Rappel :

$$p = -\left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_T \text{ et } V = \left. \frac{\partial \mu}{\partial p} \right|_T \text{ et } S = -\left. \frac{\partial \mu}{\partial T} \right|_p \quad (3.2)$$

¹Cf. Cours de thermodynamique

Le point de coexistence de phases se trouve à l'équilibre thermique et à l'équilibre chimique. Par conséquent, on a que $T_g = T_l$ et $\mu_g = \mu_l$. C'est-à-dire que l'énergie libre de Gibbs des particules ne baissent pas lorsque celles-ci passent d'une phase à l'autre. A partir de l'équation de l'équilibre chimique, on peut déterminer la relation de Clausius-Clapeyron :

$$\mu_g(p(T), T) = \mu_l(p(T), T) \quad (3.3)$$

différentiation totale par rapport à T :

$$\frac{\partial \mu_g}{\partial T}|_{coex} + \frac{\partial \mu_g}{\partial p}|_{coex} \cdot \frac{\partial p}{\partial T}|_{coex} = \frac{\partial \mu_l}{\partial T}|_{coex} + \frac{\partial \mu_l}{\partial p}|_{coex} \cdot \frac{\partial p}{\partial T}|_{coex} \quad (3.4)$$

$$-S_{g_{coex}} + V_{g_{coex}} \cdot \frac{\partial p}{\partial T}|_{coex} = -S_{l_{coex}} + V_{l_{coex}} \cdot \frac{\partial p}{\partial T}|_{coex} \quad (3.5)$$

$$\Rightarrow \frac{dp}{dT}|_{coex} = \frac{\Delta S_{g-l}|_{T_c}}{\Delta V_{g-l}|_{T_c}} \# \quad (3.6)$$

3.3 Discussion

1. Pour des raisons physiques, $\frac{dP}{dT} > 0$.
2. Intuitivement, $V_g > V_l$, et donc lors d'une transition de phase à $T < T_c$ (C'est-à-dire une transition de phase du premier ordre), $S_g > S_l$. Ainsi, l'entropie augmente lorsque l'on passe de la phase liquide à la phase gazeuse, car le gaz est plus désordonné que le liquide.
3. Lorsque l'on se place au point critique, c'est-à-dire que l'on considère une transition du 2ème ordre, $V_g = V_l \Rightarrow \Delta V = 0$. Cependant, dans un diagramme de phase p-T, on ne peut pas avoir une courbe telle que $\frac{dP}{dT}|_{T_c} = \infty$. Cela impose $\Delta S_{g-l} = 0$. Ainsi, il n'y a pas de différence d'entropie, donc pas de coexistence de phases.

Chapitre 4

Divergence des dérivées secondes et définition du facteur de corrélation

On a vu que lors d'une transition de phase du 2ème ordre, il y a divergence de la seconde dérivée des quantités thermodynamiques. Par exemple, dans le cas de VdW, $V = \frac{\partial \mu}{\partial p}$, et la compressibilité isotherme est définie par : $\kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \propto \frac{\partial^2 \mu}{\partial p^2}$? C'est la compressibilité isotherme qui diverge. (voir figure)

FIG. 4.1 – P-V

Dans le cas du modèle de Ising, la quantité qui est discontinue est la susceptibilité magnétique χ , définie par :

$$\chi_T := \frac{dm}{dh} = \frac{d}{dh} \left(\frac{\partial f}{\partial h} \right) \quad (4.1)$$

$$= \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} \simeq |T - T_c|^{-1} \quad (4.2)$$

La dernière étape étant une approximation pour mettre en évidence le fait que χ diverge lorsque $T \rightarrow T_c$. L'exposant -1 est ce qu'on appelle un exposant critique. C'est ce nombre qui caractérise véritablement la transition de phase, et non T_c ¹.

¹cf. chapitre 6

FIG. 4.2 – χ -T

4.1 divergence de χ

Quel élément du modèle microscopique (donc du modèle de Ising) crée la divergence de χ ? On va montrer que χ est proportionnelle à la somme des corrélations du système. Et que le fait que χ diverge implique qu'au point critique, la longueur de corrélation est infinie. C'est-à-dire que tous les éléments du système sont corrélés les uns avec les autres, impossible de "diviser le système" davantage.

Rappel :

$$m = \langle s_i \rangle = \frac{1}{N\beta} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \text{ et la définition de } m = \sum_{\{s_i\}} s_0 \frac{e^{-\beta E(\{s_i\})}}{Z(h, \beta)} \quad (4.3)$$

$$\chi := \frac{\partial m}{\partial h} = \sum_{\{s_i\}} s_0 \left[\beta \sum_i s_i \frac{e^{-\beta E}}{Z} - \frac{e^{-\beta E}}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \right] \quad (4.4)$$

$$= \beta \sum_{\{s_i\}} \left(\sum_i s_0 s_i \right) \frac{e^{-\beta E}}{Z} - \underbrace{\left(\sum_{\{s_i\}} s_0 \frac{e^{-\beta E}}{Z} \right)}_m \underbrace{\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h}}_{N\beta m} \quad (4.5)$$

$$= \frac{N}{k_B T} \left(\frac{1}{N} \sum_i \underbrace{\langle s_0 s_i \rangle}_{*} - m^2 \right) \quad (4.6)$$

Pour évaluer le terme *, il est utile d'introduire la définition du facteur de corrélation :

$$C_{x,y} := \langle (x - \langle x \rangle)(y - \langle y \rangle) \rangle = \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle \quad (4.7)$$

Ainsi, le facteur de corrélation entre le spin du site 0 et le spin d'un site quelconque i vaut :

$$C_{0,i} = \langle (s_0 - \langle s_0 \rangle)(s_i - \langle s_i \rangle) \rangle = \langle s_0 s_i \rangle - \overbrace{\langle s_0 \rangle \langle s_i \rangle}^{m^2} = * \quad (4.8)$$

Donc

$$\chi = \frac{N}{k_B T} \left[\frac{1}{N} \sum_i \langle s_0 s_i \rangle - m^2 \right] = \frac{1}{k_B T} \sum_i C_{0,i} \quad (4.9)$$

$$\text{susceptibilité} = \text{somme des corrélations} \quad \# \quad (4.10)$$

A continuer

Chapitre 5

Champ moyen et corrélations

La susceptibilité magnétique χ peut être interprétée physiquement soit comme, $\chi = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$ la fluctuation de l'aimantation, soit comme $\chi = \sum_i \langle s_0 s_i \rangle$ l'intégrale des corrélations. Pour obtenir la solution champ moyen du modèle de Ising au chapitre 2, les fluctuations avaient été négligées. Le but de ce chapitre est de montrer que lorsqu'on considère l'énergie selon le modèle de Ising et que l'on néglige le fait que les spins sont corrélés, on retombe sur la solution champ moyen. Ainsi, c'est équivalent de négliger les fluctuations ou de négliger les corrélations. Pour faire ce calcul, on va :

1. Déterminer f à partir de :

$$(a) F = U - TS$$

$$(b) S = -k_B \sum_{\{s_i\}} P(\{s_i\}) \ln(P(\{s_i\}))$$

$$(c) U = \sum_{\{s_i\}} E(\{s_i\}) P(\{s_i\})$$

2. trouver le paramètre variationnel m qui minimise f . C'est-à-dire poser $\frac{\partial f}{\partial m} = 0$.

Rappel de mécanique statistique : Pour déterminer $P(\{s_i\})$, on cherche à minimiser $F \Rightarrow \frac{\partial F}{\partial P(\{s_i\})} = 0$ (état d'équilibre). Ou mieux :

$$\frac{\partial}{\partial P(\{s_i\})} [F - \lambda (\sum_{\{s_i\}} P(\{s_i\}) - 1)] = 0 \quad (5.1)$$

Cette seconde façon d'écrire permet d'introduire la contrainte $\sum_i P(\{s_i\}) = 1$.

$$F = U - TS \quad (5.2)$$

$$= \sum_{\{s_i\}} E(\{s_i\}) P(\{s_i\}) + k_B T \sum_{\{s_i\}} P(\{s_i\}) \ln(P(\{s_i\})) \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial(F - \lambda(\sum_{\{s_i\}} P(\{s_i\}) - 1))}{\partial P(\{s_i\})} = 0 \quad (5.4)$$

$$E(\{s_i\}) + k_B T \ln(P(\{s_i\})) + k_B T - \lambda = 0 \quad (5.5)$$

$$\Rightarrow \ln(P(\{s_i\})) = \frac{\lambda - k_B T}{k_B T} - \frac{E(\{s_i\})}{k_B T} \quad (5.6)$$

$$P(\{s_i\}) = \underbrace{e^{\frac{\lambda - k_B T}{k_B T}}}_{\text{juste un nombre}} \cdot e^{-\frac{E(\{s_i\})}{k_B T}} \quad (5.7)$$

$$= A(\lambda) e^{-\frac{E(\{s_i\})}{k_B T}} \quad (5.8)$$

Mais $A(\lambda)$ doit satisfaire la propriété que $\sum_{\{s_i\}} A(\lambda) e^{-\frac{E(\{s_i\})}{k_B T}} = 1$.

$$\Rightarrow A(\lambda) = \frac{1}{Z} = \frac{1}{\sum_{\{s_i\}} e^{-\beta E(\{s_i\})}} \quad (5.9)$$

On retrouve la distribution de Boltzmann à laquelle on est habitué. On peut à présent utiliser cela pour calculer F pour le modèle de Ising (on considère le cas $h=0$ pour simplifier).

$$E(\{s_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (5.10)$$

$$F = \sum_{s_1 \pm 1} \sum_{s_2 \pm 1} \dots \sum_{s_N \pm 1} [-J \sum_{\langle ij \rangle} P(s_1 \dots s_N) + k_B T P(s_1 \dots s_N) \ln(P(s_1 \dots s_N))] \quad (5.11)$$

Ici, on fait l'hypothèse que les variables sont non-corrélées :¹

$$P(s_1 s_2 \dots s_N) \simeq P(s_1) P(s_2) \dots P(s_N) \quad (5.13)$$

$$\Rightarrow U = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{s_1 \pm 1} \sum_{s_2 \pm 1} \dots \sum_{s_N \pm 1} s_i s_j P(s_1) P(s_2) \dots P(s_i) \dots P(s_j) \dots P(s_N) \quad (5.14)$$

¹Rappel mathématique : Si $P(s_1)$ et $P(s_2)$ sont indépendantes, alors

$$\sum_{s_1 \pm 1} \sum_{s_2 \pm 1} P(s_1) P(s_2) = \sum_{s_1 \pm 1} P(s_1) \sum_{s_2 \pm 1} P(s_2) \quad (5.12)$$

$$= -J \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{s_i \pm 1} \sum_{s_j \pm 1} s_i s_j P(s_i) P(s_j) \overbrace{\prod_{k=1(\neq i,j)}^N \sum_{s_k \pm 1} P(s_k)}^{=1} \quad (5.15)$$

$$= -J \sum_{\langle ij \rangle} \left[\sum_{s_i \pm 1} s_i P(s_i) \right] \left[\sum_{s_j \pm 1} s_j P(s_j) \right] \quad (5.16)$$

$$= -J \sum_{\langle ij \rangle} [P(+)-P(-)]^2 \quad (5.17)$$

$$= -J \frac{Nz}{2} [P(+)-P(-)]^2 \quad (5.18)$$

$$S = -k_B \sum_{s_1 \pm 1} \dots \sum_{s_N \pm 1} P(s_1) \dots P(s_N) \sum_i \ln(P(s_i)) \quad (5.19)$$

$$= -k_B \sum_i \sum_{s_1 \pm 1} \dots \sum_{s_N \pm 1} P(s_1) \dots P(s_N) \ln(P(s_i)) \quad (5.20)$$

$$= -k_B \sum_i \sum_{s_i \pm 1} P(s_i) \ln(P(s_i)) \quad (5.21)$$

$$= -k_B \sum_i [P(+)\ln(P(+)) - P(-)\ln(P(-))] \quad (5.22)$$

$$= -k_B N [P(+)\ln(P(+)) - P(-)\ln(P(-))] \quad (5.23)$$

dire qqch

$$\Rightarrow f = \frac{F}{N} = \frac{U - TS}{N} \quad (5.24)$$

$$= -J \frac{z}{2} (P(+)-P(-))^2 \quad (5.25)$$

$$+ k_B T (P(+)\ln(P(+)) + P(-)\ln(P(-))) \quad (5.26)$$

Mais ²

$$P(+)+P(-)=1 \text{ et } P(+)-P(-)=m \quad (5.27)$$

$$\Rightarrow P(+)=\frac{1+m}{2} \text{ et } P(-)=\frac{1-m}{2} \quad (5.28)$$

$$\Rightarrow f = -\frac{Jz}{2} m^2 + k_B T \left[\frac{1+m}{2} \ln\left(\frac{1+m}{2}\right) + \frac{1-m}{2} \ln\left(\frac{1-m}{2}\right) \right] \quad (5.29)$$

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0 \Rightarrow -Jzm + \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{1+m}{1-m}\right) = 0 \quad (5.30)$$

²m est le paramètre variationnel

$$\ln\left(\frac{1+m}{1-m}\right) = 2Jzm\beta \quad (5.31)$$

$$\frac{1+m}{1-m} = e^{2Jzm\beta} \quad (5.32)$$

$$\Rightarrow m = \tanh(Jzm\beta) \quad (5.33)$$

On retrouve la solution champ moyen que l'on avait obtenue en négligeant les fluctuations.

Chapitre 6

Exposants critiques et classes d'universalité

6.1 Définitions

Lorsque $T \rightarrow T_c$, $\xi(T) \rightarrow \infty$. Le système est infiniment corrélé, et les fluctuations sont très grandes (puisque'il y a changement de phases). L'approximation champ moyen n'est donc plus applicable. Pour caractériser la transition de phase, la température critique T_c n'est pas adaptée, car elle dépend du réseau considéré (carré, losange, triangle...), dépend si l'on considère les deuxièmes voisins,... Il faut donc trouver mieux pour caractériser la transition. On remarque que les grandeurs thermodynamiques ...un comportement selon des exposants. 6 exposants critiques. qui sont indépendants du système considéré.

Les mêmes valeurs des exposants critiques sont partagées par des groupes de systèmes appelés *classes d'universalité*. Une classe d'universalité est définie par :

1. La dimensionalité du système.
2. La structure microscopique des degrés de liberté (\equiv les symétries).

Si deux systèmes appartiennent à la même classe d'universalité, alors il existe un moyen de passer de l'un à l'autre. Par exemple, le modèle de Ising 3D et le modèle du gaz de Van der Waals ont les mêmes exposants critiques. Il est, par conséquent, possible de passer de l'énergie définie selon VdW à l'énergie de Ising 3D, comme le montre le développement réalisé dans la section suivante.

6.2 Gaz de VdW et Ising 3D

L'objectif de cette section est de déterminer l'énergie d'un système de gaz en 3D, avec des molécules agissant selon des potentiels de Van der Waals,

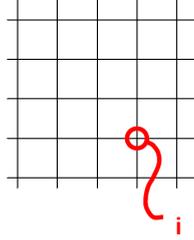


FIG. 6.1 – grille

puis de montrer comment, en redéfinissant des constantes, on peut mettre cette énergie sous forme de celle du modèle de Ising.

Premièrement, on considère que les molécules sont situées sur une grille 3D. Lorsque l'on regarde cette grille de très loin, les corrélations infinies restent, mais les détails disparaissent. Cela correspond à passer d'un système discret à un continu. Ainsi, le fait de placer les molécules sur un réseau n'est pas contradictoire avec le modèle du gaz de Van der Waals. Deuxièmement, on introduit la condition : une seule molécule par site. Cela correspond, dans le continu, à la répulsion infinie à courte portée. Finalement, l'attraction à courte portée est modélisée par le fait que les molécules n'interagissent que avec celles situées sur des sites proches voisins des leurs.

Chaque site prendra la valeur 1 ou 0 suivant s'il est occupé par une molécule de gaz ou non.

(6.1)

Comme énergie du système, on prend l'énergie de l'ensemble gran-canonique :

$$E = -\epsilon \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \mu \sum_{i=1}^N n_i \quad (6.2)$$

o? ϵ est l'énergie d'interaction entre les molécules des sites. N est le nombre de molécules. Puisque N est fixe, cette énergie correspond, en termes thermodynamiques, à l'énergie libre de Gibbs.

A partir de là, pour retrouver une énergie de la forme de celle du modèle de Ising, on définit de nouvelles variables :

$$n_i = \frac{s_i + 1}{2} \Leftrightarrow s_i = 2n_i - 1 \quad (6.3)$$

Ainsi, s_i vaut +1 si le site est occupé, et -1 sinon. On substitue ces nouvelles variables dans l'expression de l'énergie :

$$E = -\epsilon \sum_{\langle ij \rangle} \left(\frac{s_i + 1}{2}\right) \left(\frac{s_j + 1}{2}\right) + \mu \sum_{i=1}^N \left(\frac{s_i + 1}{2}\right) \quad (6.4)$$

$$= -\frac{\epsilon}{4} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - 2\frac{\epsilon}{4} \sum_{\langle ij \rangle} s_i + \frac{\mu}{2} \sum_i s_i + \text{cstes} \quad (6.5)$$

On néglige les constantes, car ce (6.6)

n'est qu'un déplacement de l'origine (6.7)

$$= -\frac{\epsilon}{4} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \frac{\epsilon z}{4} \sum_i s_i + \frac{\mu}{2} \sum_i s_i \quad (6.8)$$

$$= \underbrace{-\frac{\epsilon}{4} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j}_{=:J} - \underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon z}{2} - \mu\right) \sum_i s_i}_{=:h} \quad (6.9)$$

En définissant J et h à partir des valeurs caractéristiques de l'ancien système, on constate que la nouvelle expression de l'énergie a bien la forme de celle du modèle de Ising.

Chapitre 7

Exposants critiques du champ moyen

Les exposants β , δ , γ et α du modèle champ moyen peuvent être obtenus très facilement. Par contre, pour trouver η et ν , il est nécessaire de faire appel à la théorie de Landau-Ginzberg.

7.1 β et δ

Afin de déterminer β , on part de la solution champ moyen, et on introduit la température critique $T_c = \frac{Jz}{k_B}$:

$$m = \tanh(\beta J z m + \beta h) \quad (7.1)$$

$$= \tanh\left(\frac{T_c}{T} m + \beta h\right) \quad (7.2)$$

On développe la tangente hyperbolique en série, en posant pour simplifier que $h=0$, et en écartant la solution triviale $m=0$:

$$m \simeq \frac{T_c}{T} m - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^3 + \vartheta(m^5) \quad (7.3)$$

$$1 \simeq \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2 \quad (7.4)$$

$$\Rightarrow m^2 \simeq 3 \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \frac{T_c - T}{T} \quad (7.5)$$

$$m \simeq a(T_c - T)^{\underbrace{1/2}_{\beta}} \quad (7.6)$$

Pour déterminer δ , on part également de la solution champ moyen de Weiss, en se plaçant dans le cas où $T = T_c$ et en considérant m et h petits.

$$m = \tanh(m + \beta_c h) \quad (7.7)$$

$$m \simeq m + \beta_c h - \frac{1}{3}(m + \beta_c h)^3 \quad (7.8)$$

$$\beta_c h \simeq \frac{1}{3}(m + \beta_c h)^3 \quad (7.9)$$

$$3(\beta_c h)^{1/3} \simeq m + \beta_c h \quad (7.10)$$

$$\Rightarrow m \simeq \underbrace{3(\beta_c)^{1/3} h^{1/3}}_{\text{terme dominant pour h petit}} - \beta_c h \quad (7.11)$$

Puisque l'exposant δ est défini par $m \sim h^{1/\delta}$ à $T = T_c$, on a donc trouvé que $\delta = 3$.

Les calculs des exposants γ et α seront faits en séries d'exercices. Les réponses sont $\alpha = 0$ et $\gamma = 1$.

7.2 Théorie de Landau-Ginzberg pour déterminer η et ν

7.2.1 énergie libre de Landau

Une méthode générale pour étudier le comportement d'un système proche du point critique est de considérer l'énergie libre de Landau :¹

$$f = \frac{F}{N} \quad (7.12)$$

$$= -\frac{Jz}{2}m^2 + k_B T \left[\frac{1+m}{2} \ln\left(\frac{1+m}{2}\right) + \frac{1-m}{2} \ln\left(\frac{1-m}{2}\right) \right] \quad (7.13)$$

Lorsque $T \rightarrow T_c$, $m \rightarrow 0$, on peut donc développer le logarithme en série :

$$\ln(1 \pm m) \simeq \pm m - \frac{m^2}{2} \pm \frac{m^3}{3} - \frac{m^4}{4} \pm \dots \quad (7.14)$$

$$\begin{aligned} f &\simeq -\frac{Jzm^2}{2} + k_B T \left[-\ln(2) + \frac{1}{2} \ln(1 - m^2) + \frac{1}{2} m (\ln(1+m) - \ln(1-m)) \right] \\ &\simeq -\frac{Jzm^2}{2} + \frac{k_B T m}{2} \left[m - \frac{1}{2} m^2 + \frac{1}{3} m^3 - \frac{1}{4} m^4 + \dots \right] \end{aligned} \quad (7.16)$$

$$\Rightarrow f \simeq a(T - T_c)m^2 + bm^4 + \vartheta(m^6) \quad (7.17)$$

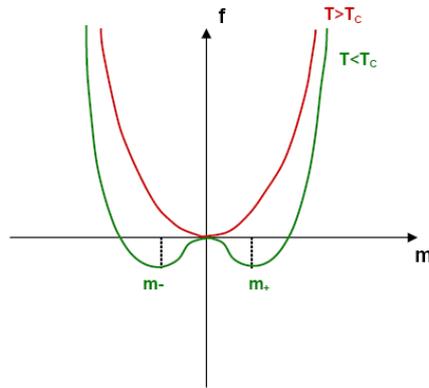


FIG. 7.1 – énergie libre de Landau

De manière générale, pour tout système, f peut s'écrire sous la forme :

$$f = \sum_n a_n m^{2n} \quad (7.18)$$

où a_1 doit changer de signe avec $(T - T_c)$, et le terme m^{2n} doit respecter les symétries du système.

7.2.2 Modèle de Landau-Ginzberg

Le modèle de Landau-Ginzberg est une extension de modèle champ moyen dans laquelle on prend en compte le fait que l'aimantation dépend de chaque case du système. Lorsque l'on met en lien les différentes cases, une différence (càd un gradient) de m va entraîner une interaction. La première étape est de montrer que cette énergie d'interaction entre les différentes cases vaut : $\tilde{J}[\nabla m(\vec{r})]^2$.

Rappel : L'énergie d'interaction dans le modèle de Ising valait $E_{\text{int}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$. On fait l'hypothèse champ moyen localisée, càd qu'on remplace $\langle s_i \rangle$ par m_i :

¹voir chapitre 5

$$E_{\text{int}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} m_i m_j \quad (7.19)$$

$$= \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (m_i - m_j)^2 - \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (m_i^2 + m_j^2) \quad (7.20)$$

$$= \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (m_i - m_j)^2 - \frac{Jz}{2} \sum_i m_i^2 \quad (7.21)$$

Alors, l'énergie libre du modèle Landau-Ginzberg vaut :

$$F_{LG} = \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (m_i - m_j)^2 - \frac{Jz}{2} \sum_i m_i^2 \quad (7.22)$$

$$+ k_B T \sum_i \left[\frac{1+m_i}{2} \ln \left(\frac{1+m_i}{2} \right) + \frac{1-m_i}{2} \ln \left(\frac{1-m_i}{2} \right) \right] \quad (7.23)$$

$$\simeq \underbrace{\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (m_i - m_j)^2}_* + \sum_i [a(T - T_c)m_i^2 + bm^4] \quad (7.24)$$

Le terme * est l'énergie d'interaction qui se calcule en passant dans le continu. l_0 est la longueur d'une case.

$$\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (m_i - m_j)^2 = \frac{J}{2} l_0^2 \sum_{\langle ij \rangle} \left(\frac{m_i - m_j}{l_0} \right)^2 \quad (7.25)$$

$$= \frac{J}{2} \frac{l_0^2}{2l_0^d} \sum_i l_0^d \sum_{j \text{ pr } i} \left(\frac{m_i - m_j}{l_0} \right)^2 \quad (7.26)$$

$$l_0 \rightarrow 0 \quad (7.27)$$

$$= \underbrace{\frac{J}{4l_0^{d-2}}}_{=: \tilde{J}} \int dV (\vec{\nabla} m)^2 \quad (7.28)$$

L'énergie libre du système vaut donc (après passage dans le continu) :

$$F_{LG} = \int d\vec{r} [\tilde{J} (\vec{\nabla} m(\vec{r}))^2 + a(T - T_c)m(\vec{r})^2 + b(m(\vec{r}))^4] \quad (7.29)$$

Ca serait trop difficile de prendre en compte le terme en m^4 , alors on le néglige. Pour calculer F_{LG} , on passe dans l'espace de Fourier². On remarque

²Rappel :

$$\tilde{m}(\vec{k}) = \int m(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d\vec{r} \quad (7.30)$$

$$m(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \tilde{m}(\vec{k}) e^{+i\vec{k}\vec{r}} d\vec{k} \quad (7.31)$$

que $\tilde{m}(-\vec{k}) = \tilde{m}^*(\vec{k})$ et que

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}} d\vec{r} = \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \quad (7.32)$$

On calcule la transformée de Fourier de F_{LG} terme par terme :

$$m^2(\vec{r}) = m(\vec{r})m(\vec{r}) \quad (7.33)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int_V d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 \tilde{m}(\vec{k}_1) \tilde{m}(\vec{k}_2) e^{+i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}} \quad (7.34)$$

$$\Rightarrow \int m^2(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_V d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 \tilde{m}(\vec{k}_1) \tilde{m}(\vec{k}_2) \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \quad (7.35)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\vec{k} \tilde{m}(\vec{k}) \tilde{m}(-\vec{k}) \quad (7.36)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\vec{k} |\tilde{m}(\vec{k})|^2 \quad (7.37)$$

A présent, on recherche la transformée de Fourier de $\int (\vec{\nabla} m)^2 d\vec{r}$. On sait que :

$$\mathcal{F}(\vec{\nabla} m(\vec{r})) = -i\vec{k} \tilde{m}(\vec{k}) \quad (7.38)$$

$$(\vec{\nabla} m)^2 = -\frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 \vec{k}_1 \vec{k}_2 \tilde{m}(\vec{k}_1) \tilde{m}(\vec{k}_2) e^{+i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}} \quad (7.39)$$

$$\Rightarrow \int (\vec{\nabla} m)^2 d\vec{r} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\vec{k} k^2 |\tilde{m}(\vec{k})|^2 \quad (7.40)$$

Et donc, finalement, l'énergie libre s'écrit, dans l'espace de Fourier :

$$F_{LG} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\vec{k} [\tilde{J}k^2 + a(T - T_c)] |\tilde{m}(\vec{k})|^2 \quad (7.41)$$

On appelle cela le modèle Gaussian. $\tilde{m}(\vec{k})$ est bien une configuration du système, car elle contient la même information que $m(\vec{r})$.

Afin de calculer η et ν , ce que l'on désire obtenir est la fonction de corrélation $g(\vec{r})$ du système. Pour cela, on définit le poids de Boltzmann de $\tilde{m}(\vec{k})$:

$$e^{-\beta F_{LG}[\tilde{m}]} = e^{-\beta \int d\vec{k} [\tilde{J}k^2 + a(T - T_c)] |\tilde{m}(\vec{k})|^2} \quad (7.42)$$

A partir de là, il est possible de montrer que :

$$\langle |\tilde{m}(\vec{k})|^2 \rangle = \mathcal{F}[g(\vec{r})] \quad (7.43)$$

Cette équation exprime le lien entre les gradients de l'aimantation et leur effet sur la fonction de corrélation. En effet, afin de déterminer $g(\vec{r})$, il faut calculer $\langle |\tilde{m}(\vec{k})|^2 \rangle$, puis prendre sa transformée de Fourier inverse. Pour trouver $\langle |\tilde{m}(\vec{k})|^2 \rangle$, on utilise le principe d'équipartition qui nous dit que³ :

$$[\tilde{J}k^2 + a(T - T_c)] \langle |\tilde{m}(\vec{k})|^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T \quad (7.44)$$

$$\Rightarrow \langle |\tilde{m}(\vec{k})|^2 \rangle = \frac{c}{k^2 + a'(T - T_c)} \quad (7.45)$$

o? $a' = \frac{a}{j}$ et $c = \frac{1}{2} \frac{k_B T}{j}$.

7.2.3 calcul de η

Il suffit à présent de calculer la transformée inverse de l'équation (7.45), pour déterminer $g(\vec{r})$ et trouver ainsi l'exposant η du modèle champ moyen. Pour cela, on considère le cas o? $T = T_c$, et on néglige les constantes :

$$g(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{k} \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (7.46)$$

$$= \frac{A}{(2\pi)^d} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \int_0^\infty dk \frac{k^{d-1}}{k^2} e^{ikr \cos(\theta)} \quad (7.47)$$

$$= \frac{A}{(2\pi)^d} \int_0^\infty dk k^{d-3} \int_0^\pi \frac{-ikr}{-ikr} \sin(\theta) e^{ikr \cos(\theta)} d\theta \quad (7.48)$$

$$= \frac{2A}{(2\pi)^d} \int_0^\infty dk \frac{k^{d-4}}{2ir} (-e^{ikr \cos(\theta)})|_0^\pi \quad (7.49)$$

$$= \frac{2A}{(2\pi)^d} \int_0^\infty dk k^{d-4} \underbrace{\frac{-e^{-ikr} + e^{ikr}}{2ir}}_{\sin(kr)} \quad (7.50)$$

On effectue à présent le changement de variable $y=kr$, $dk = \frac{dy}{r}$:

$$g(\vec{r}) = \frac{2A}{(2\pi)^d} \frac{1}{r} \int_0^\infty \frac{1}{r} dy y^{d-4} \frac{1}{r^{d-4}} \sin(y) \quad (7.51)$$

$$= \frac{2A}{(2\pi)^d} \frac{1}{r^{d-2}} \underbrace{\int_0^\infty dy y^{d-4} \sin(y)}_{\text{cste}} \quad (7.52)$$

³ Analogue à $\langle \frac{1}{2}kx^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$ pour l'oscillateur harmonique.

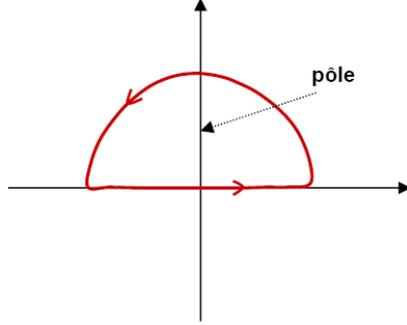


FIG. 7.2 – parcours d'intégration

En reprenant la définition de η ,

$$g(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} e^{-r/\xi} \quad (7.53)$$

on en déduit que pour le modèle champ moyen, $\eta = 0$. En fait, l'exposant η a été défini de telle sorte qu'il soit une mesure de la correction à l'approximation du champ moyen.

7.2.4 calcul de ν

Finalement, on peut déterminer l'exposant ν , qui est défini tel que (pour $T > T_c$) :

$$\xi \sim (T - T_c)^{-\nu} \quad (7.54)$$

Il s'agit donc de résoudre l'intégrale ci-dessous par le théorème des résidus.

$$g(\vec{r}) = \mathcal{F}^{-1}\left[\frac{c}{k^2 + a'(T - T_c)}\right] \quad (7.55)$$

$$= \frac{A}{(2\pi)^d} \int_{\mathcal{C}} d\vec{k} \left[\frac{c}{k^2 + a'(T - T_c)}\right] e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (7.56)$$

Le pôle est situé en :

$$k_0^2 = -a'(T - T_c) \quad (7.57)$$

$$\Rightarrow k_0 = i\sqrt{a'(T - T_c)}^{1/2} \quad (7.58)$$

C'est un pôle d'ordre 1. Par le théorème des résidus, l'intégrale selon le parcours d'intégration de la figure vaut donc :

$$g(\vec{r}) = \frac{A}{(2\pi)^d} 2\pi i \cdot \text{Rés}(f, k_0) \quad (7.59)$$

$$= \frac{A}{(2\pi)^d} 2\pi i \left(\frac{c}{k^2 + a'(T - T_c)} e^{ikr} (k - k_0) \Big|_{k=k_0} \right) \quad (7.60)$$

$$= \frac{A}{(2\pi)^d} 2\pi i \left(\frac{c}{(k - k_0)(k + k_0)} e^{ikr} (k - k_0) \Big|_{k=k_0} \right) \quad (7.61)$$

$$\propto e^{i(i\sqrt{a'}(T - T_c)^{1/2})r} \quad (7.62)$$

$$\propto e^{-\sqrt{a'}(T - T_c)^{1/2}r} \quad (7.63)$$

$$\propto e^{-\frac{r}{(a')^{-1/2}(T - T_c)^{-1/2}}} \quad (7.64)$$

Or, selon la définition de ξ ,

$$g(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} e^{-r/\xi} \quad (7.65)$$

$$\Rightarrow \xi = (a')^{-1/2} (T - T_c)^{-1/2} \quad (7.66)$$

$$\Rightarrow \nu = \frac{1}{2} \quad (7.67)$$

Chapitre 8

Conditions de validité des exposants du CM

L'approximation champ moyen, n'est valable que lorsque les fluctuations thermiques sont négligeables, c'est-à-dire que l'énergie libre du système est supérieure à l'énergie libre de fluctuations :

$$f > f_{\text{fluct.}} \quad (8.1)$$

Il est possible de déduire de cette inégalité une condition sur la dimension du système.¹

$$F_{\text{fluct.}} = k_B T \quad (8.2)$$

$$\Rightarrow f_{\text{fluct.}} = \frac{k_B T}{V} = \frac{k_B T}{\xi^d} \simeq (T - T_c)^{\nu d} \quad (8.3)$$

Il faut exprimer f en fonction de $(T - T_c)$. Pour cela, on utilise la chaleur spécifique :

$$C \propto \frac{\partial^2}{\partial T^2} f \quad (8.4)$$

Par définition de α , on sait que $C \propto (T - T_c)^{-\alpha}$.

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial T^2} f \simeq (T - T_c)^{-\alpha} \quad (8.5)$$

Par double intégration de cette égalité, on obtient que :

$$f \simeq (T - T_c)^{-\alpha+2} \quad (8.6)$$

L'inégalité 8.1 nous donne donc que l'approximation champ moyen n'est valable que lorsque :

¹Toutes les approximations sont valables uniquement lorsque T est proche de T_c .

$$(T - T_c)^{-\alpha+2} > (T - T_c)^{\nu d} \quad (8.7)$$

$$\Rightarrow -\alpha + 2 < \nu d \quad (8.8)$$

$$d > \frac{2 - \alpha}{\nu} \quad (8.9)$$

Dans le cas des exposants du CM :

$$d > \frac{2 - 0}{1/2} \Rightarrow d \geq 4 \quad (8.10)$$

d est appelée la "dimension critique supérieure". L'égalité est aussi vraie, mais est plus difficile à prouver.

Chapitre 9

Théorème de Lee-Yang

Le théorème de Lee-Yang stipule qu'une transition de phase ne peut avoir lieu que dans un système atteignant la limite thermodynamique, c'est-à-dire lorsque l'on considère $V \rightarrow \infty$.

Preuve : Une transition de phase correspond, mathématiquement, à une non-analyticité de F . Or,

$$F = -k_B T \ln(Z) \quad (9.1)$$

Il existe donc 3 causes possibles pour la non-analyticité de F :

- $Z = \infty$
- Z est non-analytique
- $Z = 0$

Mais

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H(\{s_i\})} \quad (9.2)$$

La fonction exponentielle est toujours analytique, et une somme finie de fonctions analytiques est analytique. Ainsi, la seule façon pour que F soit non-analytique et que Z soit infinie, c'est-à-dire une somme sur un nombre infini de termes. Il faut donc bien prendre la limite $V \rightarrow \infty$ pour qu'une transition de phase puisse avoir lieu.

Chapitre 10

Hypothèse de scaling

10.1 Définition et application

Dans les chapitres précédents, nous avons calculé les 6 exposants critiques du CM. Voici un exemple d'autre set d'exposants, celui du modèle de Ising 2D : $\beta = 1/8, \alpha = 0, \gamma = 7/4, \delta = 15$.

La question qui se pose est de savoir si ces 6 exposants sont indépendants ? On va montrer qu'en réalité, seulement 2 des 6 exposants le sont.

De plus, la thermodynamique donne 4 relations d'inégalités entre les exposants critiques. Par exemple, la relation de Rushbrooke :

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (10.1)$$

Or, l'expérience a vérifié que ces relations étaient toujours des égalités. La théorie qui permet d'expliquer ceci, et de démontrer la dépendances des exposants critiques est *l'hypothèse de scaling*. Cette hypothèse sera, par la suite, prouvée par la théorie du groupe de renormalisation (RG).

<i>macroscopique</i>		<i>microscopique</i>
thermodynamique	→	phys. stat.
hypothèse de scaling	→	groupe de renormalisation

Le RG est donc une vraie théorie de physique stat. qui explique, au niveau microscopique (c'est-à-dire H), ce qui permet de décrire un système à différentes échelles. Tout ce qui suit n'est valable qu'au voisinage du point critique.

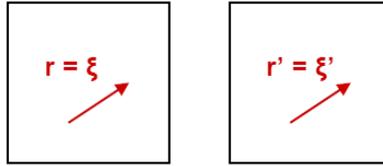


FIG. 10.1 – changement d'échelle

L'hypothèse de scaling dit qu'exactement au point critique ($T = T_c$, et la longueur de corrélation est infinie), on peut changer l'échelle à laquelle on regarde le système et, à des constantes multiplicatives près, les quantités ne changent pas. Il est donc possible de définir un algorithme pour modifier les paramètres du système (ex ΔT et h) en conséquence du changement d'échelle.

Mathématiquement, changer d'échelle revient à considérer une longueur $r' = \frac{r}{b}$ à la place de r . Comme illustration de cette hypothèse, il est possible de montrer que $g(r')$ est de la même forme fonctionnelle que $g(r)$:

$$g(r) = \frac{A}{r^{d-2+\eta}} \quad (10.2)$$

$$g(r') = \frac{A}{r'^{d-2+\eta}} = \frac{A}{\left(\frac{r}{b}\right)^{d-2+\eta}} \quad (10.3)$$

$$= b^{d-2+\eta} \frac{A}{r^{d-2+\eta}} \quad (10.4)$$

$$= \text{cste} \cdot g(r) \quad (10.5)$$

$g(r)$ est donc une fonction homogène à $T = T_c$.¹

10.2 Hypothèse forte

L'hypothèse de scaling "forte" dit que $g(r)$ est également homogène dans un voisinage de T_c . A partir de cette hypothèse de scaling "forte", on peut montrer que changer l'échelle spatiale est équivalent à considérer un système dont la température est différente du précédent (plus ou moins proche de T_c). En effet, soit $t = |T - T_c|$, alors

¹Rappel : une fonction homogène est $a(x)$ telle que

$$\frac{1}{b^\omega} a\left(\frac{x}{b}\right) = a(x) \quad (10.6)$$

$$g(r) \sim e^{-r/\xi(t)} \text{ o? } \xi(t) = at^{-\nu} \quad (10.7)$$

changement d'échelle :

$$g(r') \sim e^{-r'/\xi'(t)} = e^{-r/b\xi'(t)} \quad (10.8)$$

o? $\xi'(t)$ est tel que :

$$\xi(t) = b\xi'(t) = abt'^{-\nu} = a \underbrace{(b^{-1/\nu}t')^{-\nu}}_t \quad (10.9)$$

Donc

$$t = b^{-1/\nu}t' \Leftrightarrow t' = b^{1/\nu}t \quad (10.10)$$

Ainsi, lorsque l'observateur s'éloigne du système, $b > 1$, donc $\xi' < \xi$, et donc $t > t'$. On s'est éloigné de T_c . Par contre, lorsque l'observateur se rapproche du système, $b < 1$, donc $\xi' > \xi$, et donc $t < t'$. On s'est rapproché de T_c .

10.3 Hypothèse de scaling pour l'énergie libre

L'énergie libre est une fonction homogène (généralisée) par rapport à un changement d'échelle. Exemple dans le cas du modèle de Ising : $f=f(T,h)$. On peut faire un développement autour du point critique :

$$f(T, h) = f_{\text{rég.}}(T, h) + f_{\text{sing.}}(|T - T_c|, |h - h_c|) \quad (10.11)$$

$$= f_{\text{rég.}}(T, h) + f_{\text{sing.}}(t, h) \quad (10.12)$$

o? $t = |T - T_c|$, et $h_c = 0$ dans le cas de Ising. La partie régulière n'engendre pas la transition de phase. Par conséquent, tout ce qui caractérise la transition se trouve dans la partie singulière. Pour la suite, on ne considère donc que cette dernière ($f \equiv f_{\text{sing.}}$).

On considère le changement d'échelle $L' = \frac{L}{b}$. Les conditions sur la nouvelle énergie libre sont :

1. Après le changement d'échelle, on veut utiliser la même fonction f (à des constantes près).
2. L'énergie libre est extensive. Ceci implique un facteur multiplicatif : b^{-d} .

3. Cependant, l'énergie libre ne change pas lorsqu'on la mesure. On est donc forcé de définir de nouvelles variables $t'=t'(t,b,h)$ et $h'=h'(t,b,h)$ telles que :

$$f(t, h) = b^{-d} f(t', h') \quad (10.13)$$

4. Finalement, f est homogène, et $t' = b^{y_1} t$, $h' = b^{y_2} h$.

⇒ Par conséquent, la formulation de base de l'hypothèse de scaling pour f est :

$$f(t, h) = b^{-d} f(b^{y_1} t, b^{y_2} h) \quad (10.14)$$

10.4 calcul des exposants

L'idée, à présent, est d'exprimer les exposants critiques en fonction de y_1 et y_2 (nommés, pour des raisons évidentes, exposant thermique et exposant magnétique). Ceci est particulièrement utile, car lorsque les exposants critiques sont exprimés comme des fonctions de y_1 et y_2 , il est possible de prouver qu'ils satisfont les 4 égalités de la thermodynamique.

Premièrement, on cherche β , défini par $m \sim t^\beta$. Pour cela, on calcule l'aimantation :

$$m = \left. \frac{\partial f}{\partial h} \right|_{h=0} = b^{-d} \left. \frac{\partial}{\partial h} f(b^{y_1} t, b^{y_2} h) \right|_{h=0} \quad (10.15)$$

$$= b^{-d+y_2} \left. \frac{\partial}{\partial (hb^{y_2})} f(b^{y_1} t, b^{y_2} h) \right|_{h=0} \quad (10.16)$$

$$= b^{-d+y_2} \left. \frac{\partial}{\partial (hb^{y_2})} f(b^{y_1} t, 0) \right|_{h=0} \quad (10.17)$$

$$(10.18)$$

Comme le changement d'échelle (donc b) est arbitraire, on peut choisir $b = t^{-1/y_1}$.

$$\Rightarrow m = t^{\frac{d-y_2}{y_1}} \underbrace{\left. \frac{\partial f}{\partial h} \right|_{h=0}}_{\text{const.}}(1, 0) \quad (10.19)$$

$$\Rightarrow \beta = \frac{d - y_2}{y_1} \quad (10.20)$$

On peut déterminer δ de manière analogue :

$$m = b^{-d} \frac{\partial}{\partial h} f(b^{y_1} t, b^{y_2} h) \quad (10.21)$$

Au point critique, $t=0$.

$$m = b^{-d} \frac{\partial}{\partial h} f(0, b^{y_2} h) \quad (10.22)$$

$$= b^{-d+y_2} \frac{\partial}{\partial (hb^{y_2})} f(0, b^{y_2} h) \quad (10.23)$$

On choisit $b = h^{-1/y_2}$.

$$\Rightarrow m = h^{\frac{d-y_2}{y_2}} \frac{\partial}{\partial h} f(0, 1) \quad (10.24)$$

$$\Rightarrow \delta = \frac{y_2}{d - y_2} \quad (10.25)$$

Il est possible de déterminer, de la même manière, les autres exposants, et de montrer qu'ils vérifient exactement les 4 relations de la thermodynamiques. C'est-à-dire que les inégalités sont en réalité des égalités, comme l'avait montré l'expérience. Pour ce qui est du nombre d'exposants critiques indépendants, de manière générale, ce nombre est égal au nombre de paramètres du système (ici 2 : T et h).

Chapitre 11

Groupe de renormalisation (RG)

Les exposants critiques sont très importants, car ils permettent de caractériser les classes d'universalité. L'objectif de la théorie du groupe de renormalisation est de donner une façon opérative de calculer les exposants critiques, et de donner une règle simple qui relie les descriptions microscopiques du système (H) à différentes échelles (homogénéité de f).

11.1 Procédure du RG :

1. Changer l'échelle du système et définir les variables "microscopiques" de la nouvelle échelle (coarse graining).
2. Trouver le nouvel hamiltonien qui permet de préserver Z (c'est-à-dire $Z'=Z$, donc $F'=F$: même physique). Ce qui revient à déterminer les nouvelles interactions en fonction des anciennes. On peut devoir introduire des interactions qui n'étaient pas présentes auparavant (puisque plus on se rapproche du point critique, plus tout est corrélé). Il y a alors un problème de prolifération des interactions. Cette prolifération engendrerait un nombre infini d'équations à résoudre. Par conséquent, on travaille généralement avec des approximations.

Le RG est donc une suite d'opérations que l'on applique pour passer de H_n à H_{n+1} . "L'itération fondamentale du RG" est donc, par définition :

$$H_{n+1} = R(H_n) \quad (11.1)$$

3. Rechercher les points fixes de cette itération, c'est-à-dire H^* tel que $H^* = R(H^*)$ (invariance d'échelle). H^* est alors l'hamiltonien du point fixe de toute la classe d'universalité qui converge vers lui.

Les conditions physiques prédisent l'existence de 3 points fixes :

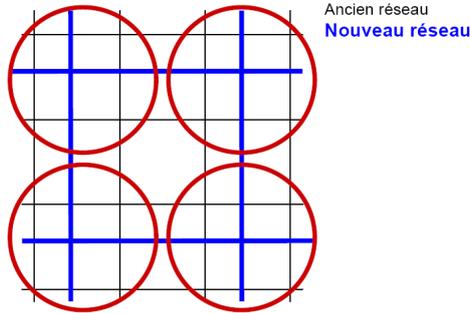


FIG. 11.1 – coarse graining

$T = \infty$ Ce point fixe est toujours stable. Il correspond au cas où, peut importe le nombre d'interactions, le système les néglige.

$T = T_c$ Ce point fixe est toujours instable. En ce point, il y a une parfaite invariance d'échelle, tout le monde est corrélé. Cela correspond à un hamiltonien qui prend en compte un nombre infini d'interactions.

$T = 0$ Ce point fixe est stable s'il existe un point de transition de phase, sinon instable. En ce point, le système est parfaitement ordonné. Des interactions supplémentaires ne feraient que l'ordonner encore plus.

11.2 Exemple de coarse graining

On considère le modèle de Ising 2D. On rappelle que :

$$\beta H(\{s_i\}) = -\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \beta h \sum_i s_i \quad (11.2)$$

$$\Rightarrow Z_N = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H(\{s_i\})} \quad (11.3)$$

$$\Rightarrow F_N = -k_B T \ln(Z_N) \quad (11.4)$$

On va effectuer le changement d'échelle qui consiste à regarder le système de plus loin. Ce qui correspond, sur la figure 11.1, à passer du réseau noir au réseau bleu. Selon ce nouveau réseau, le nombre de spins est 4x plus petit qu'avant. Dans chaque cercle rouge, il y a 4 spins ($s_{i1}, s_{i2}, s_{i3}, s_{i4}$). La valeur du nouveau spin pour le point au centre du cercle rouge est :

$$s'_i = g(s_{i1}, s_{i2}, s_{i3}, s_{i4}) \quad (11.5)$$

Pour chaque nouveau spin s'_i , on associe donc une valeur (± 1), qui dépend du quadruplet ($s_{i1}, s_{i2}, s_{i3}, s_{i4}$). Voici quelques exemples de fonctions g :

1. Règle de la majorité : $s'_i=1$ si $\sum_i s_i > 0$, -1 sinon
2. Choix arbitraire d'un spin du groupe
3. Spin central (s'il y en a un)

Puisque la physique du système est indépendante de l'échelle, il est nécessaire d'imposer que $F'_{N'} = F_N$, et donc :

$$Z'_{N'} = Z_N \quad (11.6)$$

$$\sum_{\{s'_j\}} e^{-\beta H'(\{s'_j\})} = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H(\{s_i\})} \quad (11.7)$$

Mais,

$$\sum_{s'_j \pm 1} \delta(s'_j, g_j(\{s_i\})) = 1 \quad (11.8)$$

$$\Rightarrow \sum_{\{s'_j\}} \prod_j \delta(s'_j, g_j(\{s_i\})) = 1 \quad (11.9)$$

Puisque ce terme vaut 1, on peut le rajouter dans la partie droite de l'équation 11.7 .

$$\Rightarrow \sum_{\{s'_j\}} e^{-\beta H'(\{s'_j\})} = \sum_{\{s'_j\}} \sum_{\{s_i\}} \prod_j \delta(s'_j, g_j(\{s_i\})) e^{-\beta H(\{s_i\})} \quad (11.10)$$

$$\Rightarrow H'(\{s'_j\}) = -k_B T \ln \left(\sum_{\{s_i\}} \prod_j \delta(s'_j, g_j(\{s_i\})) e^{-\beta H(\{s_i\})} \right) \quad (11.11)$$

On a donc défini le nouvel Hamiltonien H' en fonction de l'ancien, et du changement d'échelle. H' et H ne sont pas égaux, mais décrivent le même système à différentes échelles. Ils appartiennent à la même classe d'universalité.

De manière générale, une fois que l'on a trouvé la relation entre H' et H , on cherche le point critique de ce système, c'est-à-dire le point de l'itération caractérisé par une invariance d'échelle ; l'Hamiltonien ne change pas :

$$H'^*(\{s'_i\}) \equiv H^*(\{s_i\}) \quad (11.12)$$

11.3 Exemple de prolifération des interactions

Voici un nouvel exemple de changement d'échelle qui permet de mettre en évidence le phénomène de prolifération des interactions. On repart, une

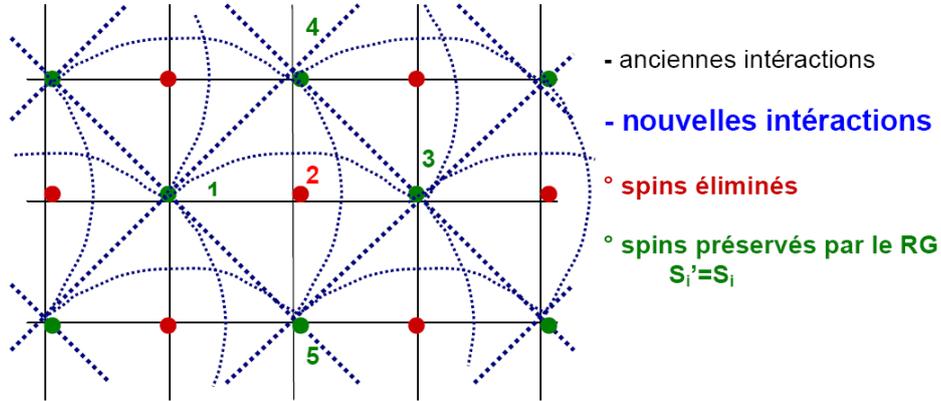


FIG. 11.2 – prolifération d'interactions

fois de plus, du modèle de Ising, et l'on effectue le changement de réseau présenté dans la figure 11.2.

$$H(s_1, s_2, s_3, s_4) \rightarrow H'(s_1, s_3, s_4, s_5) \quad (11.13)$$

$$e^{-\beta H'} = \sum_{s_2=\pm 1} e^{-\beta H} \quad (11.14)$$

$$= \sum_{s_2=\pm 1} e^{\beta J(s_1 s_2 + s_3 s_2 + s_4 s_2 + s_5 s_2)} \quad (11.15)$$

$$= 2 \cosh [(s_1 + s_3 + s_4 + s_5)\beta J] \quad (11.16)$$

$$= \dots \quad (11.17)$$

$$= e^{[\beta J(s_1 s_4 + s_1 s_3 + s_4 s_3) + \underbrace{g(\beta J)(s_1 s_3 + s_4 s_5)}_* + \underbrace{f(\beta J)(s_1 s_3 s_4 s_5)}_{**} + \dots]} \quad (11.18)$$

Ce terme est donc bien différent de ce qu'on aurait en regardant le nouveau système comme un "Ising tourné" :

$$e^{-\beta H'} = e^{\beta J(s_1 s_4 + s_1 s_5 + s_4 s_3 + s_3 s_5)} \quad (11.19)$$

En effet, il y a beaucoup plus d'interactions, car il faut y ajouter les interactions aux seconds voisins (*) et les interactions "plaquette" (**).

11.4 Espace des \vec{J}

L'itération fondamentale du RG est :

FIG. 11.3 – espace des J

$$H_{n+1} = R(H_n) \quad (11.20)$$

et a comme point fixe H^* . Pour bien définir R et H^* , il faut que le nombre d'interactions soit le même avant et après l'itération :

$$H^{(0)} = -J_0 \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \overbrace{J_1 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} s_i s_j}^{\text{seconds voisins}} + \overbrace{J_2 \sum_{\langle\langle\langle ij \rangle\rangle\rangle} s_i s_j + \dots}^{\text{plaquette}} \quad (11.21)$$

Evidemment, à $H^{(0)}$, seul le premier terme est non nul. Avec cette structure, à chaque $H^{(i)}$ est associé à un vecteur \vec{J}^i . Par exemple, le vecteur correspondant à $H^{(0)}$ est simplement :

$$\vec{J}^0 = [J_0, 0, 0, 0, 0, \dots]^T \quad (11.22)$$

La recherche du point fixe, correspond donc à effectuer l'itération

$$\vec{J}^{(n+1)} = R(\vec{J}^{(n)}) \quad (11.23)$$

jusqu'à obtenir le vecteur fixe \vec{J}^* . Chaque H (donc chaque système), va forcément évoluer vers un point fixe. On peut donc séparer l'espace des \vec{J} en bassins d'attractions des différents points fixes.

Chapitre 12

Modèle de Ising en d=1 (h=0)

On considère le changement d'échelle représenté dans la figure 12.1.

Nous allons expliciter l'itération R, et déterminer mathématiquement les points fixes. Dans ce cas, il n'y a pas de problème de prolifération des interactions puisque, par exemple, s_3 et s_4 ne peuvent pas agir au-delà de s_2 et s_5 . Ils n'affectent donc ni s_1 , ni s_6 .

$$H = -J \sum_i s_i s_{i+1} \quad (12.1)$$

$$e^{-\beta H} = e^{\overbrace{\beta J}^{:=K} \sum_i s_i s_{i+1}} \quad (12.2)$$

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{K \sum_i s_i s_{i+1}} \quad (12.3)$$

$$= \sum_{\substack{s_2=\pm 1 \\ s_5=\pm 1 \\ s_8=\pm 1}} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{\substack{s_3=\pm 1 \\ s_4=\pm 1}} \sum_{\substack{s_6=\pm 1 \\ s_7=\pm 1}} \dots e^{K \sum_i s_i s_{i+1}} \quad (12.4)$$

On considère un système infini, que l'on divise en blocs :

$$\Rightarrow Z = \sum_{\{s'_i\}} \dots \underbrace{\sum_{\substack{s_3=\pm 1 \\ s_4=\pm 1}} e^{K(s'_1 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s'_2)} \dots}_{1 \text{ bloc}} \dots \quad (12.5)$$

FIG. 12.1 – Ising 1D, facteur d'échelle 3

On va calculer la valeur d'un des blocs. Pour cela, il faut remarquer que les termes en $e^{Ks_i s_j}$ peuvent être exprimés par des expressions en cosinus hyperboliques :

$$e^{Ks_i s_j} = \frac{1}{2}e^K(1 + s_i s_j) + \frac{1}{2}e^{-K}(1 - s_i s_j) \quad (12.6)$$

$$= \cosh(K) + \sinh(K)s_i s_j \quad (12.7)$$

$$= \cosh(K)(1 + t s_i s_j) \text{ o? } t = \tanh(K) \quad (12.8)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \sum_{\substack{s_3=\pm 1 \\ s_4=\pm 1}} e^{K(s'_1 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s'_2)} &= \cosh^3(K) \sum_{\substack{s_3=\pm 1 \\ s_4=\pm 1}} (1 + t s'_1 s_3)(1 + t s_3 s_4)(1 + t s_4 s'_2) \\ &= \cosh^3(K) \sum_{\substack{s_3=\pm 1 \\ s_4=\pm 1}} [1 + t(s'_1 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s'_2) + t^2(\dots) + t^3(\dots)] \\ &= 2^2 \cosh^3(K) [1 + t^3 s'_1 s'_2] \end{aligned} \quad (12.9)$$

Mais, à partir de l'expression 12.8, on peut réécrire :

$$e^{Ks_i s_{i+1}} = \cosh(K)(1 + t s_i s_{i+1}) \quad (12.10)$$

$$\Rightarrow (1 + \underbrace{t^3}_{t'} s'_1 s'_2) = \frac{1}{\cosh(K')} e^{K' s'_1 s'_2} \quad (12.11)$$

Et donc finalement,

$$\Rightarrow Z = \underbrace{\left(\frac{2^2 \cosh^3(K)}{\cosh^3(K')} \right)}_{*}^N \sum_{\{s'_i\}} e^{K' \sum_i s'_i s'_{i+1}} \quad (12.12)$$

Le terme (*) est une constante qui contribue uniquement à la partir régulière de l'énergie libre f. Elle n'a donc aucun effet thermodynamique. Il faut encore déterminer K' en fonction de K. Plus généralement :

$$K^{(n+1)} = R(K^n) \quad (12.13)$$

La relation qui donne K' est :

$$t' = \tanh(K') = t^3 \quad (12.14)$$

$$\Rightarrow K^{(n+1)} = \operatorname{arctanh}[\tanh^3(K^n)] \quad (12.15)$$

FIG. 12.2 – Ising 1D, points fixes

À présent, la dernière étape consiste à trouver les points fixes de cette itération : K^* tels que $\tanh(K^*) = \tanh^3(K^*)$.

La figure 12.2 présente l'évolution des fonctions $\tanh(K)$ et $\tanh^3(K)$. Comme $\tanh(K)$ est inférieure à 1, on aura :

$$\tanh^3(K) < \tanh(K) \quad \forall K \quad (12.16)$$

Par conséquent, les seuls points fixes du modèle Ising en dimension 1 sont 0 (stable) et ∞ (instable). Pour interpréter cela, il est utile de se rappeler que $K = \frac{J}{k_B T}$. Ainsi les points fixes peuvent être vus sous deux angles différents :

1. *Lorsque T est fixé* : Le point $K^* = \infty$ (instable) correspond à $J = \infty$; le système est totalement ordonné. Et le point $K^* = 0$ (stable) correspond à $J = 0$; les spins sont découplés, le système est donc désordonné.
2. *Lorsque J est fixé* : Le point $K^* = \infty$ (instable) correspond à $T = 0$; le système est là aussi ordonné. Et le point $K^* = 0$ (stable) correspond à $T = \infty$; système désordonné.

Chapitre 13

Ising sur réseau hiérarchique

L'objectif de ce chapitre est de trouver les points fixes du modèle Ising 2D, afin de montrer qu'il existe un point fixe différent de 0 ou ∞ qui correspond à une transition de phase. Cependant, comme il serait trop difficile de réaliser l'étude du chapitre précédent dans le cas 2D, on choisit de travailler sur un modèle un peu plus facile, qui est le réseau hiérarchique. La construction de ce réseau est présentée dans la figure 13.1. L'idée pour réaliser un changement d'échelle dans ce modèle est de faire le chemin inverse de sa construction (remplacer l'interaction d'un carré par celle d'un simple "trait"). Ce système est plus simple que le modèle Ising 2D, car il n'y a pas de prolifération des interactions. Néanmoins, la physique est équivalente.

A partir du changement d'échelle présenté en figure 13.2, on peut imposer :

$$\sum_{s_3=\pm 1} \sum_{s_4=\pm 1} e^{K^n (s_1 s_3 + s_1 s_4 + s_2 s_3 + s_2 s_4)} = C e^{K^{(n+1)} \overbrace{s_1' s_2'}^{=s_1 s_2}} \quad (13.1)$$

En passant en cosinus hyperboliques (comme dans le cas Ising 1D), on arrive à :

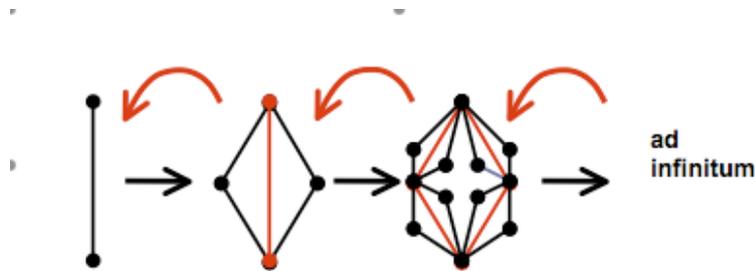


FIG. 13.1 – Construction du réseau hiérarchique

FIG. 13.2 – Indices pour le changement d'échelle

FIG. 13.3 – points fixes du réseau hiérarchique

$$\tanh(K^{(n+1)}) = \frac{2\tanh^2(K^n)}{1 + \tanh^4(K^n)} \quad (13.2)$$

Figure 13.3 présente la résolution graphique de cette équation. On voit que lorsque :

1. $K > K_c$, K tend vers $K^* = \infty$.
2. $K < K_c$, K tend vers $K^* = 0$
3. $K = K_c$, K_c est un point fixe.

Le point fixe $K_c = \frac{J}{k_B T_c}$ sépare une région à basse température d'une région à haute température. T_c est la température critique qui détermine la transition de phase.

Chapitre 14

Trouver les exposants critiques

Dans ce chapitre, on va montrer que l'on peut trouver une expression des exposants critiques à partir des équations du RG. Et plus important encore, on va montrer que les exposants ainsi déterminés ne dépendent pas du facteur d'échelle.

On part de l'itération du RG :

$$K_{n+1} = R(K_n) \quad (14.1)$$

On introduit une petite perturbation par rapport à l'équilibre :

$$K_n = K^* + \delta K_n \quad (14.2)$$

$$\Rightarrow R(K_n) = R(K^* + \delta K_n) = K^* + \delta K_{n+1} \quad (14.3)$$

$$= R(K^*) + \left. \frac{\partial R}{\partial K} \right|_{K^*} \delta K_n = K^* + \delta K_{n+1} \quad (14.4)$$

$$\Rightarrow \delta K_{n+1} = \lambda \delta K_n, \text{ o? } \lambda = \left. \frac{\partial R}{\partial K} \right|_{K^*} \quad (14.5)$$

On va déterminer ν . Rapel :

$$\xi(t) \sim (T - T_c)^{-\nu} \quad (14.6)$$

$$\xi(K_n) = b \xi(K_{n+1}) \quad (14.7)$$

$$\xi(K_n) = b \xi(K_{n+1}) \quad (14.8)$$

$$\xi(K^* + \delta K_n) = b \xi(K^* + \delta K_{n+1}) \quad (14.9)$$

$$= b \xi(K^* + \lambda \delta K_n) \quad (14.10)$$

$$\Rightarrow \xi(K^* + \delta K_0) = b^n \xi(K^* + \lambda^n \delta K_0) \quad (14.11)$$

δK_0 est un petit déplacement par rapport à T_c : $\delta K_0 = a t$ o? $t = \frac{|T-T_c|}{T_c}$.
A partir de tout cela, on peut récrire l'équation 14.6 :

$$t^{-\nu} \sim \xi(K^* + a t) = b^n \xi(K^* + a \lambda^n t) \sim b^n (\lambda^n t)^{-\nu} \quad (14.12)$$

Comme le RG ne change pas le thermodynamique du système, les extrémités de gauche et de droite de l'expression ci-dessus doivent être égales :

$$t^{-\nu} = b^n (\lambda^n t)^{-\nu} \quad (14.13)$$

$$1 = b^n (\lambda^{-\nu n}) \quad (14.14)$$

$$\Rightarrow b \lambda^{-\nu} = 1 \quad (14.15)$$

$$\ln(b) - \nu \ln(\lambda) = 0 \quad (14.16)$$

$$\nu = \frac{\ln(b)}{\ln(\lambda)} \quad (14.17)$$

Si l'on s'arrêtait là, on pourrait croire que ν dépend de b , mais en réalité ce n'est pas le cas, car λ dépend également de b . Pour trouver le lien entre λ et b , on choisit de faire deux changements d'échelle successifs b_1 et b_2 (Le changement d'échelle total serait $b_{12} = b_1 \cdot b_2$) :

$$\delta K_{n+1} = \lambda_{b_1} \delta K_n \quad (14.18)$$

$$\delta K_{n+2} = \lambda_{b_2} \delta K_{n+1} = \lambda_{b_2} \lambda_{b_1} \delta K_n \quad (14.19)$$

Comme la physique devrait être la même si l'on effectue un seul changement, on doit avoir :

$$\lambda_{b_1 b_2} = \lambda_{b_2} \cdot \lambda_{b_1} \quad (14.20)$$

La façon de résoudre cette équation pour un changement d'échelle quelconque est de poser : $\lambda_b = b^y$!

A présent, on insère l'expression de λ dans le calcul de ν :

$$\nu = \frac{\ln(b)}{\ln(\lambda)} = \frac{\ln(b)}{y \ln(b)} \quad (14.21)$$

$$= \frac{1}{y} \quad (14.22)$$

Ainsi, on a montré que ν ne dépend pas de b . Il est possible d'obtenir ainsi des expressions de tous les exposants et de montrer qu'ils sont tous indépendants du changement d'échelle. Néanmoins, il faut distinguer la théorie de la pratique, car en pratique, il y aura toujours une dépendance vu que l'on travaille avec des équations approximées.

Chapitre 15

Preuve de l'hypothèse de scaling

Ce dernier chapitre commence par un rappel des points principaux de la théorie du groupe de renormalisation, puis il y sera démontré qu'il est possible de retrouver l'hypothèse d'échelle (qui est une hypothèse thermodynamique), à l'aide de la théorie du RG (qui travaille au niveau microscopique).

Rappel :

1. Lorsque l'on fait un changement d'échelle b , on passe de Z_n à Z'_n . Puisque la physique est la même, on impose : $Z_n = Z'_n$. Ceci induit $F_n = F'_n$, même thermodynamique.
2. La base de la théorie du groupe de renormalisation est l'équation :

$$H_{n+1}(\{s_i^{n+1}\}, \{K_i^{n+1}\}) = R_{b_n}[H_n(\{s_i^n\}, \{K_i^n\})] \quad (15.1)$$

Où $\{s_i\}$ est l'ensemble des jeux de variables, et $\{K_i\}$ est l'ensemble des jeux d'interactions. Lorsqu'on écrit $\{K_i^{n+1}\}$, $i=1\dots M_{n+1}$. Puisqu'il y a généralement prolifération des interactions, $M_{n+1} > M_n$. Aux points fixes, M_n tend vers ∞ .

3. Il faut trouver les points fixes de l'itération : $H^*(\{s_i^*\}, \{K_i\})$. L'équation des points fixes devient :

$$K_{n+1}^{\vec{}} = \vec{R}_b(K_n^{\vec{}}) \Rightarrow K^{\vec{*}} \quad (15.2)$$

En théorie, il faudrait considérer un nombre infini d'interactions. Mais on fait généralement l'approximation ne n'en prendre en compte qu'un nombre fini.

4. Lorsque l'on connaît le point fixe, on peut définir δK_n , et l'équation 15.1 devient :

$$\vec{K}^{\vec{*}} + \delta K_{n+1}^{\vec{}} = \vec{R}_b[\vec{K}^{\vec{*}} + \delta \vec{K}_n] \quad (15.3)$$

$$= \vec{R}_b[\vec{K}^{\vec{*}}] + T \delta \vec{K}_n \quad (15.4)$$

O? T est le jacobien de \vec{R}_b calculé en \vec{K}^* :

$$T_{ij} = \frac{\partial(\vec{R}_b)_i}{\partial K_j} \Big|_{\vec{K}^*} \quad (15.5)$$

On va montrer qu'en faisant l'analyse spectrale (valeurs propres et vecteurs propres) de T_b , on arrive à prouver l'hypothèse d'échelle. Soit $\{\vec{\Phi}_{\alpha b}\}$ l'ensemble des vecteurs propres de T_b , et $\{\lambda_{\alpha b}\}$ l'ensemble de ses valeurs propres. Alors, par définition,

$$T_b \vec{\Phi}_{\alpha b} = \lambda_{\alpha b} \vec{\Phi}_{\alpha b} \quad (15.6)$$

Soit maintenant $\{\delta \mu_{\alpha}^{n+1}\}$, l'ensemble des coefficients de la décomposition de $\delta \vec{K}_{n+1}$ sur la nouvelle base $\{\vec{\Phi}_{\alpha b}\}$. Alors,

$$\delta \vec{K}_{n+1} = \sum_{\alpha} \delta \mu_{\alpha}^{n+1} \vec{\Phi}_{\alpha b} \quad (15.7)$$

$$\text{Mais c'est aussi égal à :} \quad (15.8)$$

$$= T_b \delta \vec{K}_n \quad (15.9)$$

$$= \sum_{\alpha} \delta \mu_{\alpha}^n T_b \vec{\Phi}_{\alpha b} \quad (15.10)$$

$$= \sum_{\alpha} \delta \mu_{\alpha}^n \lambda_{\alpha b} \vec{\Phi}_{\alpha b} \quad (15.11)$$

$$\Rightarrow \delta \mu_{\alpha}^{n+1} = \lambda_{\alpha b} \delta \mu_{\alpha}^n \quad (15.12)$$

$$\Rightarrow \delta \mu_{\alpha}^{n+1} = \lambda_{\alpha b}^n \delta \mu_{\alpha}^1 \quad (15.13)$$

Il y a trois cas de figure possible :

1. $|\lambda| < 1$, cas dit "non pertinent".
2. $|\lambda| = 1$, cas dit "marginal". Important, mais ne sera pas discuté ici.
3. $|\lambda| > 1$, cas "pertinent".

On reprend une dernière fois l'expression de l'énergie libre par degré de liberté :

$$f = \frac{F}{N} \underbrace{=}_{RG} \frac{F'}{b^d N'} = b^{-d} f' \quad (15.14)$$

O? $N' < N$. alors,

$$f(\vec{K}) = b^{-d} f(\vec{K}') \quad (15.15)$$

$$\Rightarrow f(\vec{K}^* + \delta \vec{K}) = b^{-d} f(\vec{K}^* + T \delta \vec{K}) \quad (15.16)$$

$$\Rightarrow f(\delta \mu_1, \dots, \delta \mu_M) = b^{-d} f(\lambda_1 \delta \mu_1, \dots, \lambda_M \delta \mu_M) \quad (15.17)$$

O ? M est le nombre de valeurs propres pertinentes. Enfin, comme $\lambda_b = b^y$, on a finalement :

$$f(\delta\mu_1, \dots, \delta\mu_M) = b^{-d} f(b^{y_1} \delta\mu_1, \dots, b^{y_M} \delta\mu_M) \quad (15.18)$$

On retrouve bien l'hypothèse d'échelle ! Il ne reste plus qu'à identifier les $\delta\mu_1, \delta\mu_2, \dots$ avec les paramètres du système. Par exemple dans le cas de Ising, ils correspondent à t, h, \dots