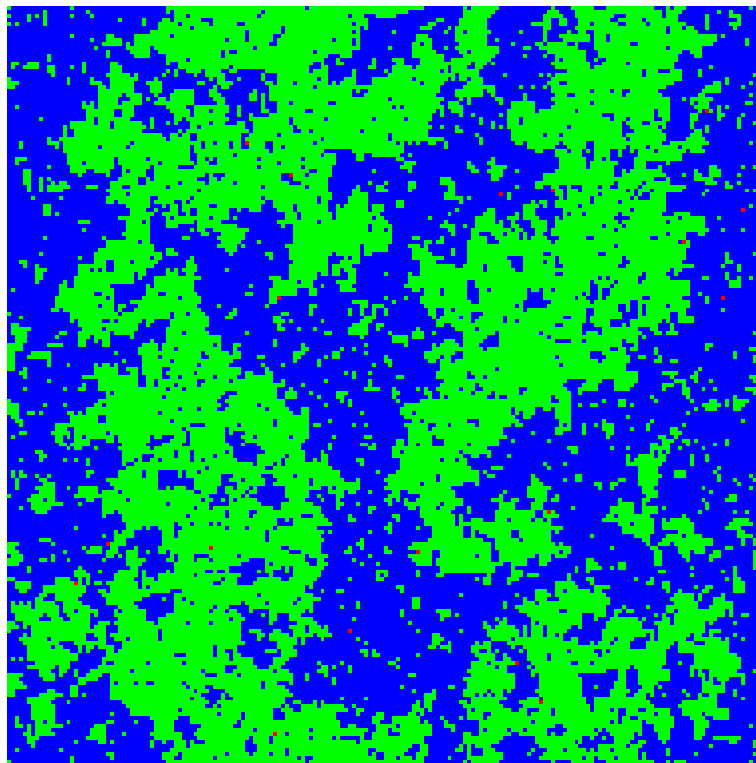


# TRANSITIONS DE PHASE

## Travaux Dirigés

Année 2021-22



texte disponible en ligne :

[http://lptms.u-psud.fr/wiki-cours/index.php/Transitions\\_de\\_phase](http://lptms.u-psud.fr/wiki-cours/index.php/Transitions_de_phase)

# Transitions de phase

1	Le modèle d'Ising	1
2	Modèle de van der Waals pour la transition liquide/gaz	4
3	Cristaux liquides	7
4	Théories de Ginzburg-Landau	11
5	Supraconductivité	16
6	Transition tri-critique	18
7	Fluctuations et lois d'échelle	21
8	Aspects dynamiques	24

Textes rédigés par Victor Alessandrini, Pierre Binétruy, Jean-Paul Ébran, Bernard Jancovici, Jean-Jacques Labarthe, Pierre-Élie Larré, Jean-Pierre Maillet, Olivier Martin, Thomas Noblet, Nicolas Pavloff, Guillaume Roux, Christophe Texier et Frédéric van Wijland.

# TD 1

## Le modèle d'Ising

### 1.1 Susceptibilité magnétique d'un ferromagnétique

On considère le modèle d'Ising

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

avec couplage ferromagnétique  $J > 0$ .

1/ Par un argument simple, retrouver rapidement l'équation auto-cohérente du traitement de champ moyen

$$m = \tanh[\beta(T_c m + B)] \quad (1.2)$$

Donner l'expression de  $T_c$ .

2/ On note  $m_*(T, B)$  la solution de cette équation. Rappeler les comportements limites de  $m_*(T, 0)$ .

3/ Montrer que

$$\frac{\partial m_*}{\partial B} = \frac{1 - m_*^2}{k_B(T - T_c(1 - m_*^2))}. \quad (1.3)$$

4/ Dédurre les comportements limites de la susceptibilité magnétique  $\chi(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial m_*}{\partial B} \Big|_{B=0}$  : pour  $T > T_c$ , pour  $T \sim T_c^-$  et pour  $T \ll T_c$ .

### 1.2 Le modèle d'Ising antiferromagnétique

Un cristal antiferromagnétique est constitué d'ions magnétiques répartis sur deux sous-réseaux imbriqués  $\mathcal{R}_a$  et  $\mathcal{R}_b$ , tels que les plus proches voisins d'un ion du sous-réseau  $\mathcal{R}_a$  soient situés sur les nœuds du sous-réseau  $\mathcal{R}_b$ , et vice-versa. L'énergie d'échange  $J > 0$  entre ions plus proches voisins est positive, ce qui favorise l'alignement *antiparallèle* des spins situés sur des sous-réseaux différents.

Un tel cristal aura toujours une aimantation globale nulle en l'absence de champ extérieur, mais en dessous d'une température critique, dite température de Néel  $T_N$ , on observe, en champ nul, l'apparition d'aimantations spontanées et opposées  $M_a$  et  $M_b$  sur les deux sous-réseaux.

Ici, on étudiera le phénomène dans le cadre d'un modèle d'Ising, avec couplage antiferromagnétique entre plus proches voisins. Chaque spin (scalaire)  $\sigma_i$ ,  $i \in \{1, \dots, N\}$ , ne peut prendre que les valeurs  $\pm 1$  correspondant aux deux projections possibles le long de l'axe de quantification matérialisé par la direction du champ  $\vec{B}$ . On désignera par  $N_a = N_b = N/2$  le nombre de spins sur chacun des deux sous réseaux  $\mathcal{R}_a$  et  $\mathcal{R}_b$ . Le hamiltonien des spins est donc de la forme

$$\mathcal{H} = +J \sum_{\langle i \in \mathcal{R}_a, j \in \mathcal{R}_b \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i \in \mathcal{R}_a} \sigma_i - B \sum_{j \in \mathcal{R}_b} \sigma_j \quad (1.4)$$

où  $i \in \mathcal{R}_a$  (resp.  $j \in \mathcal{R}_b$ ) indique que le somme sur les spins  $i$  appartenant au sous-réseau  $\mathcal{R}_a$  (resp.  $\mathcal{R}_b$ ). La somme sur  $\langle i, j \rangle$  porte sur les plus proches voisins  $i$  et  $j$ .

On désignera par  $M_a$  et  $M_b$  les moyennes thermiques des aimantations sur les deux sous-réseaux :

$$M_a \equiv \langle \sum_{i \in \mathcal{R}_a} \sigma_i \rangle, \quad M_b \equiv \langle \sum_{i \in \mathcal{R}_b} \sigma_i \rangle \quad (1.5)$$

et on posera  $m_a = M_a/N_a$  et  $m_b = M_b/N_b$ .

**1.** Quelle(s) expérience(s) permettraient de mettre en évidence l'ordre antiferromagnétique qui apparaît pour  $T \leq T_N$ ? Donner des exemples de corps antiferromagnétiques. Quelle est l'origine physique, dans ces substances, de la positivité de l'interaction d'échange? Existe-t-il des applications des antiferromagnétiques?

**2.** Quelles sont les valeurs de l'énergie  $E$  et de l'aimantation totale  $M = M_a + M_b$  du cristal dans l'état fondamental, c'est-à-dire à température nulle, en l'absence de champ extérieur ( $B = 0$ )? Quelle est la dégénérescence de cet état?

**3.** Définir et effectuer l'approximation de champ moyen dans le hamiltonien  $\mathcal{H}$  de l'équation (1.4). Montrer que, dans le cadre de cette approximation, la forme champ moyen du hamiltonien est

$$\mathcal{H}_{\text{cm}} = E_0 + \sum_{i \in \mathcal{R}_a} h_i + \sum_{j \in \mathcal{R}_b} h_j \quad (1.6)$$

où  $h_i$  et  $h_j$  sont des hamiltoniens à un spin que l'on précisera, ainsi que le terme constant  $E_0$ .

**4.** Calculer la fonction de partition canonique  $Z$ , puis l'énergie libre  $F$  dans l'approximation de champ moyen. On exprimera ces quantités en fonction des variables  $T$ ,  $B$ ,  $m_a$  et  $m_b$ .

**5.** Une méthode autocohérente pour déterminer les valeurs de  $m_a$  et  $m_b$  consiste à minimiser l'expression de l'énergie libre par rapport à ces variables à  $T$  et  $B$  fixés. Une autre méthode consiste à déterminer les moyennes thermiques  $m_a$  et  $m_b$  en utilisant comme hamiltonien  $\mathcal{H}_{\text{cm}}$ . écrire les équations qui déterminent ces valeurs autocohérentes. Commenter la similarité des résultats produits par les deux méthodes.

**6. Transitions.**— On considère d'abord le cas du champ nul ( $B = 0$ ). écrire les équations d'autocohérence obtenues en **5**, et montrer qu'elles impliquent  $m_a = -m_b$  (on posera alors  $m = m_a$ ). La propriété  $m_a = -m_b$  reste-t-elle vraie hors l'approximation de champ moyen? En déduire l'équation unique qui détermine  $m$ , quelle que soit la température. Esquisser schématiquement la solution graphique de cette équation. Montrer qu'en dessous d'une température critique, appelée température de Néel  $T_N$ , l'équation admet une solution non nulle  $m \neq 0$  (phase antiferromagnétique) alors que pour  $T \geq T_N$ , seule  $m = 0$  est solution. Donner l'expression de  $T_N$ . Montrer que pour  $T < T_N$ , la solution  $m = 0$  n'est pas physique.

**7. Voisinage de  $T_N$ .**— Toujours en champ nul, on s'intéresse au voisinage immédiat de la température de Néel. Déterminer le comportement du paramètre d'ordre, à savoir l'aimantation partielle par spin  $m$ , en fonction de la température, à l'ordre le plus bas dans l'écart relatif  $t \equiv \frac{T - T_N}{T_N}$ . En déduire la valeur de l'exposant critique régissant le comportement de  $m$  au voisinage de  $T_N$ . Pour  $T$  fixée, voisine de  $T_N$ , développer l'énergie libre en puissance de  $m$ , jusqu'à l'ordre  $m^4$ . Représenter schématiquement l'énergie libre en fonction de  $m$ , sur tout le domaine de variation de  $m$ , pour  $T > T_N$  et pour  $T < T_N$ .

**8. Énergie et capacité calorifique.**— Calculer l'énergie interne  $U$  du modèle en champ nul. En étudiant le voisinage du point critique, montrer que la capacité calorifique  $C_V$  possède une discontinuité en  $T = T_N$  que l'on précisera.

**9. Susceptibilité.**— On s'intéresse ensuite à l'aimantation  $M$  induite dans le système par un champ extérieur  $B$ . Donner l'expression générale de  $M$  dans le cadre de l'approximation de champ moyen. On se place d'abord dans la phase paramagnétique ( $T > T_N$ ). Calculer l'aimantation  $M$  en champ faible et en déduire la susceptibilité magnétique en champ nul

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial B} \right|_{B=0} \quad (1.7)$$

**a)** Commenter le comportement de  $\chi$  lorsque  $T \rightarrow T_N^+$ . Montrer que les aimantations partielles  $M_a$  et  $M_b$  sont égales en champ faible. On examinera ensuite la phase antiferromagnétique ( $T < T_N$ ). Exprimer la susceptibilité  $\chi$  en fonction des susceptibilités partielles  $\chi_a = \left. \frac{\partial m_a}{\partial B} \right|_{B=0}$  et  $\chi_b = \left. \frac{\partial m_b}{\partial B} \right|_{B=0}$ . Écrire les équations couplées qui déterminent  $\chi_a$  et  $\chi_b$ . Exprimer ces susceptibilités partielles en fonction du paramètre d'ordre en champ nul  $m$ . En déduire l'expression de  $\chi$  en fonction de l'écart relatif  $t$  à l'ordre le plus bas en  $t$ . Calculer la limite de  $\chi$  lorsque  $T \rightarrow T_N^-$  ( $t \rightarrow 0^-$ ). Dessiner schématiquement la variation de  $\chi$  avec  $T$  au voisinage de  $T_N$ . Comparer ce comportement à celui obtenu dans le cas ferromagnétique.

**b)** Finalement, on souhaite déterminer le comportement de la susceptibilité  $\chi$  dans la limite des très basses ( $T \ll T_N$ ) et des très hautes ( $T \gg T_N$ ) températures. Dans la première limite, on calculera  $\chi$  à partir de l'expression champ moyen obtenue en **9**. Dans l'autre limite, on utilisera un développement haute température : après avoir démontré que

$$\chi = \frac{1}{k_B T} \left\langle \left( \sum_i \sigma_i \right)^2 \right\rangle \Big|_{B=0} \quad (1.8)$$

on développera le numérateur et le dénominateur en puissances de  $T^{-1}$ , en se limitant au premier ordre. En déduire l'expression de  $\chi$  à l'ordre  $T^{-2}$ . Montrer que la susceptibilité est inférieure à celle prédite par la loi de Curie pour un cristal paramagnétique ( $J = 0$ ). Pourquoi? Comparer le résultat obtenu à la prédiction de la théorie de champ moyen.

## TD 2

# Modèle de van der Waals pour la transition liquide/gaz

### 2.1 Équation d'état

La phase fluide homogène d'un corps pur est caractérisée par son énergie libre  $F$ . Celle-ci peut être écrite sous la forme  $F(N, V, T) = Nf(v, T)$  où  $v = V/N$  est le volume par particule (l'inverse de la densité  $n = N/V$ ). On peut justifier (avec un modèle schématique ou avec des arguments physiques simples) la forme suivante de l'énergie libre par particules

$$f(v, T) = f_0(T) - \frac{a}{v} - k_B T \ln(v - b), \quad (2.1)$$

où  $a$  et  $b$  sont deux paramètres caractéristiques du corps pur considéré.

1/ Exprimer  $P$  en fonction de  $\partial f / \partial v$  et écrire l'équation d'état de van der Waals :  $P = P(v, T)$ .

2/ Une étude simple (qui n'est pas demandée) montre que dans le diagramme de Clapeyron ( $v, P$ ) les isothermes de van der Waals ont l'allure schématiquement représentée sur le graphe ci-contre.

On note  $T_c$  la température en dessous de laquelle les isothermes ne sont plus des courbes monotones dans le diagramme de Clapeyron. L'isotherme  $T_c$  a un point d'inflexion de coordonnées  $(v_c, P_c)$  avec

$$\left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_{T, N}(v_c, T_c) = 0, \quad \text{et} \quad \left( \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \right)_{T, N}(v_c, T_c) = 0. \quad (2.2)$$

On justifiera plus tard que ce point est le point critique de la transition liquide/gaz dans le fluide. Montrer que

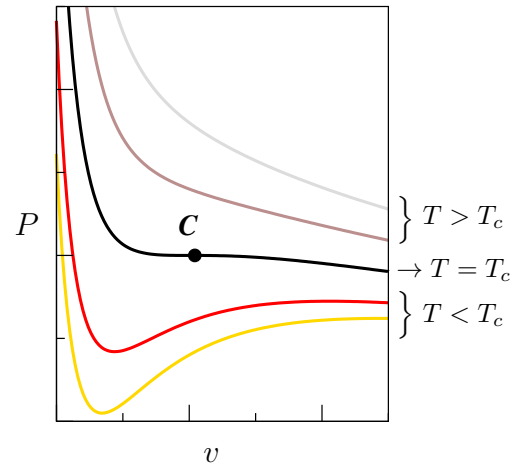
$$k_B T_c = \frac{8}{27} \frac{a}{b}, \quad v_c = 3b, \quad P_c = \frac{a}{27b^2}. \quad (2.3)$$

En déduire que l'équation d'état de van der Waals peut se mettre sous la forme adimensionnée universelle ( $\tilde{v} = v/v_c, \tilde{P} = P/P_c$  et  $\tilde{T} = T/T_c$ ) :

$$\left( \tilde{P} + \frac{3}{\tilde{v}^2} \right) (3\tilde{v} - 1) = 8\tilde{T}, \quad \text{soit} \quad \tilde{P} - 1 = \frac{8(\tilde{T} - 1)}{3\tilde{v} - 1} - \frac{3(\tilde{v} - 1)^3}{\tilde{v}^2(3\tilde{v} - 1)}. \quad (2.4)$$

Dans la suite on utilisera les variables adimensionnées réduites :

$$p = \tilde{P} - 1 = \frac{P - P_c}{P_c}, \quad \tau = \tilde{T} - 1 = \frac{T - T_c}{T_c} \quad \text{et} \quad \phi = \tilde{v} - 1 = \frac{v - v_c}{v_c}. \quad (2.5)$$



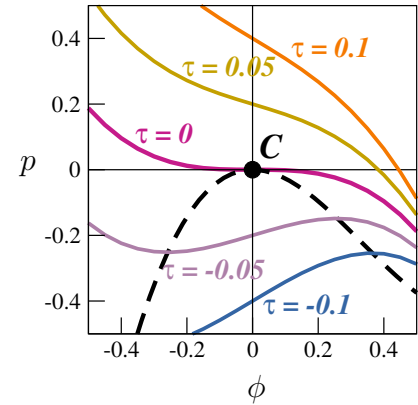
**3/** Montrer que l'équation d'état (2.4) admet, au voisinage du point critique, le développement suivant en  $\tau$  et  $\phi$  (on admettra qu'il est légitime de négliger les termes en  $\tau\phi^2$ ) :

$$p \simeq 4\tau - 6\tau\phi - \frac{3}{2}\phi^3. \quad (2.6)$$

Montrer que les isothermes ont, dans le plan  $(p, \phi)$ , le comportement représenté sur la figure ci-contre. On distinguera trois cas typiques :  $\tau > 0$ ,  $\tau = 0$  et  $\tau < 0$ . On donnera la valeur de la pression pour laquelle  $\phi = 0$ . On montrera que lorsque  $\tau < 0$ , aux points où l'isotherme a une tangente nulle on a

$$3(p - 4\tau)^2 + (4\tau)^3 = 0, \quad \text{et} \quad p = -3\phi^2 + \mathcal{O}(\phi^3). \quad (2.7)$$

Ces points sont marqués par une ligne pointillée sur la figure. Justifier qu'entre ces points le système est instable. *Indication* : On discutera du signe de la compressibilité isotherme  $\chi_T = -\frac{1}{V}(\partial V/\partial P)_{T,N}$ .



## 2.2 Théorie de Landau

C'est la densité qui distingue un gaz d'un liquide et qui servira donc de paramètre d'ordre pour caractériser la transition. Au lieu de la densité  $n$  on peut utiliser de manière équivalente le volume par particule  $v = 1/n$ , d'où la notation  $\phi = (v - v_c)/v_c$  de la section précédente :  $\phi$  est un paramètre d'ordre réduit.  $\phi = 0$  au point critique,  $\phi < 0$  correspond à la phase de faible volume par particule, c'est à dire de forte densité : le liquide.  $\phi > 0$  correspond à la phase gazeuse.

Il est plus adapté de travailler à pression constante, et d'étudier le comportement de l'enthalpie libre par particules (volume  $v \rightarrow \phi$ ) :

$$g(T, P) = \min_v g_L(T, P; \phi), \quad \text{où} \quad g_L(T, P; \phi) = f(\phi, T) + P\phi. \quad (2.8)$$

$g_L$  joue le rôle d'une énergie de Landau. On suppose que  $g_L$  admet au voisinage du point critique le développement de Taylor suivant :

$$g_L(T, P; \phi) = g_0(T, P) + g_1(T, P)\phi + g_2(T, P)\phi^2 + g_3(T, P)\phi^3 + g_4(T, P)\phi^4 + \dots \quad (2.9)$$

**1/** La minimisation de  $g_L(\phi)$  doit fixer la valeur du paramètre d'ordre, c'est à dire conduire à la forme approchée (2.6) de l'équation d'état valable au voisinage du point critique<sup>1</sup>. En déduire que les coefficients  $g_{i \geq 1}$  du développement (2.9) valent (à une constante multiplicative positive globale près<sup>2</sup>)

$$g_1 = p - 4\tau, \quad g_2 = 3\tau, \quad g_3 = 0, \quad g_4 = 3/8. \quad (2.10)$$

**2/** Pour se convaincre que le point  $C$  est bien le point critique d'une transition de phase, il faut étudier le comportement de  $g_L$  dans le plan  $(T, P)$  (ou  $(\tau, p)$  en unités réduites). Faire cette étude.

- On distinguera les domaines  $\tau < 0$  et  $\tau > 0$ .
- On montrera que la région de coexistence des deux phases est une demi-droite qui se termine en  $C$ .
- On justifiera que de chaque coté de cette droite l'une des deux phases est privilégiée alors que l'autre est métastable. On montrera également que lorsqu'on s'éloigne trop de cette droite la phase métastable disparaît. On pourra montrer que la limite où la phase métastable disparaît correspond, dans le plan  $(\tau, p)$ , à la première des équations (2.7).
- On discutera également la zone "super-critique"  $T > T_c$  (soit  $\tau > 0$ ).

**3/** Quel type de transition rencontre-t-on si on se déplace dans le plan  $(\tau, p)$  le long de la courbe  $p = 4\tau$  en faisant varier  $\tau$  dans  $\mathbb{R}$  (c.a.d.  $\tau \leq 0$  et  $\tau > 0$ ) ? En se plaçant sur cette courbe déterminer :

1. On pourra d'ailleurs s'amuser à vérifier que la minimisation formelle de (2.8) conduit à la relation  $P = -(\partial F/\partial V)_{T,N}$  qui pilote la forme de l'équation d'état, comme on l'a vu sur l'exemple de la question 2.1.1/.

2. Voyez-vous pourquoi cette constante doit être positive ?

- (a) la valeur de l'exposant critique  $\beta$  qui caractérise le comportement du paramètre d'ordre au voisinage de la transition ;
- (b) la valeur de l'exposant critique  $\gamma$  qui caractérise la divergence de la compressibilité  $\chi_T$  au voisinage de la transition.

### Formulaire

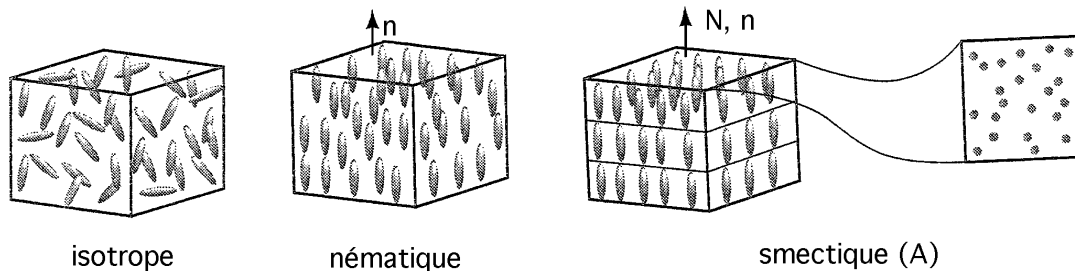
- $F = E - TS$ ,  $dF = -SdT - PdV + \mu dN$  et donc  $P = -(\partial F / \partial V)_{T,N}$ .
- L'équation  $X^3 + \beta X + \delta = 0$  admet (pour  $\beta$  et  $\delta$  réels) soit trois racines réelles, soit une racine réelle et deux complexes. Le premier cas est obtenu lorsque  $4\beta^3 + 27\delta^2 \leq 0$ .



# TD 3

## Cristaux liquides

Les cristaux liquides sont composés de longues molécules (comme des bâtonnets). On peut les rencontrer dans plusieurs états : une phase isotrope où les orientations et les positions des tiges sont aléatoires ; une phase nématique où les positions sont aléatoires, mais les tiges s'orientent toutes dans une direction privilégiée (caractérisée par un vecteur appelé directeur) ; des phases smectiques où les tiges s'orientent dans une direction privilégiée comme dans la phase nématique, mais les molécules s'empilent en couches parallèles (dans chaque couche, elles se répartissent aléatoirement).



Phases que l'on peut observer dans les cristaux liquides.

### 3.1 À la recherche d'un paramètre d'ordre

L'orientation d'un bâtonnet est repérée par un vecteur unitaire  $\vec{u}_i$ . Le bâtonnet étant symétrique par rapport à son centre, les vecteurs  $\vec{u}_i$  ou  $-\vec{u}_i$  sont physiquement équivalents. Dans la phase nématique, un ordre orientationnel s'établit (figure ci-contre) mais il n'y a pas d'ordre dans les positions des centres des bâtonnets. Cette orientation moyenne peut être caractérisée par un vecteur unitaire qu'on appelle *directeur* et que l'on note  $\vec{n}$ . On supposera ce vecteur parallèle à l'axe  $Oz$  et l'on pourra repérer un vecteur  $\vec{u}_i$  en coordonnées sphériques à l'aide des variables  $(\theta, \varphi)$ . Les différentes phases observables dans les cristaux liquides correspondent donc à des distributions angulaires particulières  $p(\theta, \varphi)$  des bâtonnets.



Schéma de l'ordre orientationnel dans la phase nématique d'un cristal liquide.

On rappelle qu'en coordonnées sphériques, l'élément d'angle solide vaut  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$  et qu'une moyenne angulaire d'une fonction  $f(\theta, \varphi)$  s'écrit

$$\langle f(\theta, \varphi) \rangle = \iint d\Omega p(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi) \tag{3.1}$$

de sorte que  $p(\theta, \varphi) = 1/4\pi$  correspond à une distribution uniforme sur la sphère. On supposera enfin que les bâtonnets sont symétriques autour de leur axe principal, ce qui porte la dénomination de cristal uniaxe.

1. Discuter les propriétés de symétrie et de périodicité de la fonction  $p(\theta, \varphi)$ . En déduire que  $\langle \vec{u}_i \rangle = \vec{0}$  ne peut constituer un paramètre d'ordre qui distingue les phases isotropes et nématiques.

Pour définir un paramètre d'ordre orientationnel on introduit donc un tenseur  $Q_i$  quadratique en  $\vec{u}_i$  et sa valeur moyenne :

$$Q_{i,\alpha\beta} = u_{i,\alpha}u_{i,\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \quad \text{et} \quad Q = \langle Q_i \rangle . \quad (3.2)$$

avec  $u_{i,\alpha}$  les composantes du vecteur  $\vec{u}_i$  dans un repère orthonormé, par exemple  $\alpha = x, y, z$ .

2. Montrer que  $\text{Tr} Q_i = \text{Tr} Q = 0$ .
3. Montrer que dans le repère associé au directeur  $\vec{n}$  selon  $\vec{e}_z$ , la matrice associée à  $Q$  prend la forme suivante

$$Q = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3}S & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3}S & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3}S \end{pmatrix}, \quad \text{avec} \quad S = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle \geq 0 . \quad (3.3)$$

4. Montrer que l'on peut écrire les composantes  $Q_{\alpha\beta}$  dans un repère orthonormé quelconque en fonction de celles du directeur selon

$$Q_{\alpha\beta} = S(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta}) . \quad (3.4)$$

5. Montrer que  $Q$  est le bon paramètre d'ordre orientationnel qui permet de discriminer la phase isotrope de la phase nématique. Il est finalement caractérisé par deux quantités : une amplitude  $S$  et le vecteur directeur  $\vec{n}$ .

## 3.2 Théorie microscopique de Maier-Saupe pour la transition nématique-isotrope

À haute température, le cristal liquide se comporte comme un fluide isotrope. En baissant la température, il se produit une transition vers la phase nématique à une température  $T_c$ . Dans cette phase, la symétrie de rotation est brisée (mais pas l'invariance par translation). Seules des rotations autour de l'axe directeur laissent invariante la phase nématique. Le modèle le plus simple pour un système nématique est un modèle sur réseau contenant  $N$  sites (on supprime les fluctuations des positions en préservant l'invariance par translation) dont l'Hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H} = -\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{u}_i \cdot \vec{u}_j)^2 \quad (3.5)$$

où la somme sur  $\langle i, j \rangle$  porte sur les plus proches voisins d'un réseau cubique tridimensionnel.

6. Justifier par des arguments qualitatifs la forme du hamiltonien. Quel est l'ordre de grandeur de  $\varepsilon$ ? Quel type d'expérience permettrait de distinguer les deux phases?
7. Montrer que le hamiltonien prend la forme

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}(Q_i Q_j) + \text{cste} . \quad (3.6)$$

On précisera l'expression de  $J$  en fonction de  $\varepsilon$ .

8. Effectuer l'approximation de champ moyen sur le hamiltonien  $\mathcal{H}$ . On obtient alors un hamiltonien de champ moyen  $\mathcal{H}_{cm}$  simplifié. Préciser l'expression de  $\mathcal{H}_{cm}$  en fonction de  $Q$  et des  $Q_i$ .
9. Montrer que

$$\mathcal{H}_{cm} = 2JNS^2 - 4JS \sum_i P_2(\cos \theta_i) \quad (3.7)$$

où  $P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$  et  $\theta_i$  est l'angle azimutal de la molécule  $i$ .

10. Trouver, sans évaluer les intégrales angulaires explicitement, une expression pour l'énergie libre du système et montrer qu'un développement limité de l'énergie libre en puissances de  $S$  comprend un terme cubique. La théorie de Landau de cette transition sera étudiée plus en détail dans la partie suivante mais peut-on doré et déjà donner l'ordre de la transition ? Tracer qualitativement l'allure de  $S(T)$ .
11. Par minimisation de l'énergie libre, montrer que  $S$  satisfait la condition d'auto-cohérence

$$S = \frac{\int_{-1}^1 dx P_2(x) e^{\beta 4JS P_2(x)}}{\int_{-1}^1 dx e^{\beta 4JS P_2(x)}} \quad (3.8)$$

Pourquoi est-il inutile de chercher une solution à cette équation *a priori* dans la limite où  $S \rightarrow 0$ .

12. Montrer que l'énergie interne du système est  $E = -2NJS^2$ . Tracer qualitativement la capacité calorifique en fonction de la température.

### 3.3 Théorie de Landau de la transition nématique-isotrope

On veut construire une énergie libre volumique de Landau  $f_L(Q, T)$  pour un cristal liquide uniaxe.  $f_L$  doit être invariante si on fait subir une rotation globale au système, c'est à dire si l'on change de manière globale l'orientation de tous les bâtonnets sans changer leurs orientations relatives. Les seuls invariants scalaires construits à partir de  $Q$  qui ont cette propriété sont les traces des puissances de  $Q$  :  $\text{Tr}(Q^2)$ ,  $\text{Tr}(Q^3)$  ... En l'absence de champ extérieur on écrit donc la densité d'énergie libre sous la forme :

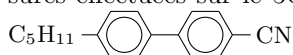
$$f_L(Q, T) = \frac{3a}{4}(T - T^*) \text{Tr}(Q^2) - \frac{3b}{2} \text{Tr}(Q^3) + \frac{9c}{16} (\text{Tr}(Q^2))^2 + \dots \quad (3.9)$$

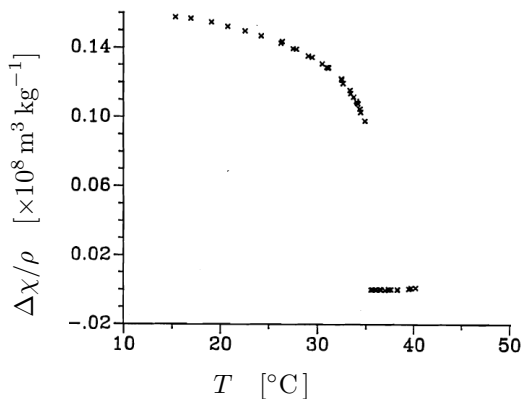
où  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont des constantes réelles positives.

13. Exprimer  $f_L$  en fonction de  $S$ . Expliquer pourquoi il n'y a pas de terme  $\text{Tr}(Q)$  dans (3.9), ni de terme en  $\text{Tr}(Q^4)$ .
14. Montrer que l'énergie libre (3.9) décrit une transition du premier ordre. Pour traiter cette question il est conseillé de s'aider de graphes décrivant le comportement de  $f_L(S)$  pour plusieurs températures  $T$ .
15. Exprimer la température  $T_c$  de la transition en fonction des paramètres du problème. On identifiera également une température  $T^{**}$  telle que pour  $T_c < T < T^{**}$  la phase nématique est métastable. Donner l'expression de  $T^{**}$  en fonction des paramètres du problème. Discuter de la stabilité de la phase isotrope pour  $T < T^*$  et  $T^* < T < T_c$ .

En présence d'un champ magnétique uniforme  $\vec{H}$ , le cristal liquide développe un moment magnétique  $\vec{M}$  avec  $M_\alpha = \chi_{\alpha\beta} H_\beta$ , où  $\chi_{\alpha\beta}$  est le tenseur de susceptibilité magnétique qui se met sous la forme  $\chi_{\alpha\beta} = \chi_s \delta_{\alpha\beta} + \chi_a Q_{\alpha\beta}$ , avec  $\chi_s$  et  $\chi_a$  les composantes isotrope et anisotrope de la susceptibilité magnétique.

16. Discuter les résultats expérimentaux présentés sur la figure ci-dessous, correspondant à des mesures effectuées sur le 5CB qui est un composé organique dont la structure chimique est la suivante





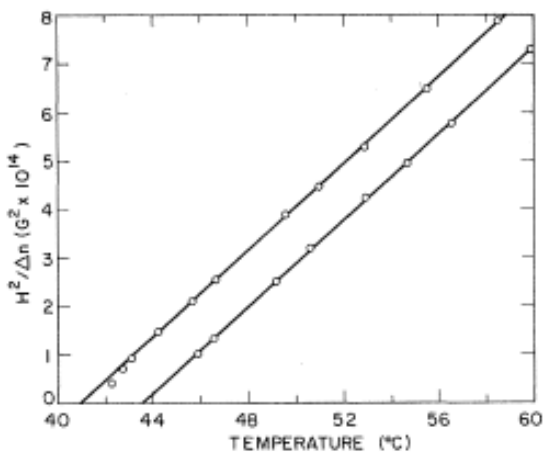
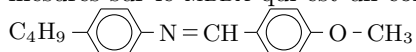
Anisotropie magnétique  $\Delta\chi/\rho$  du cristal liquide 5CB en fonction de la température.  $\rho$  est la masse volumique,  $\Delta\chi$  est la différence entre les deux valeurs propres du tenseur de susceptibilité magnétique  $\chi_{\alpha\beta}$ . Figure extraite de la thèse de B. J. Frisken (1989).

17. Montrer que la contribution de l'énergie magnétique à l'énergie libre volumique est

$$f_{\text{mag}} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\mu_0}{2} \vec{M} \cdot \vec{H} = -\frac{\mu_0}{2} \left( \chi_s H^2 + \chi_a S \left[ (\vec{n} \cdot \vec{H})^2 - \frac{1}{3} H^2 \right] \right). \quad (3.10)$$

18. On place l'échantillon en présence d'un champ magnétique  $\vec{H}$  parallèle au directeur  $\vec{n}$ .

- (a) Montrer que tout se passe comme si on ajoutait à l'expression de  $f_L(S, T)$  un terme  $-h \times S$ , où l'on donnera l'expression de  $h$  en fonction de  $H$ ,  $\mu_0$  et  $\chi_a$ .
- (b) Montrer alors que, pour  $T > T_c$ ,  $S$  est proportionnel à  $h$  en champ faible. Que vaut la constante de proportionnalité ?
- (c) L'anisotropie associée à l'ordre orientationnel se traduit par une bi-réfringence optique du cristal liquide. On montre que la différence  $\Delta n$  entre les deux indices de réfraction est proportionnelle à  $S$ . Discuter alors le comportement de la constante de Cotton-Mouton  $\Delta n/H^2$  en fonction de  $T$  (pour  $T \geq T_c$ ). Comparer aux résultats expérimentaux de la figure ci-dessous, obtenue avec des mesures sur le MBBA qui est un composé organique dont la structure chimique est la suivante :



Inverse de la constante de Cotton-Mouton tracé en fonction de la température, pour deux échantillons (dont les températures de transition sont légèrement différentes) du cristal liquide MBBA. Figure extraite de T. W. Stinson III and J. D. Litster, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 503 (1970).

# TD 4

## Théories de Ginzburg-Landau

### 4.1 Préliminaire : dérivation fonctionnelle

On considère un champ  $\phi(r)$  (ici  $r \in \mathbb{R}^d$  mais je ne mets pas de flèche).

On rappelle la relation fondamentale permettant de calculer des dérivées fonctionnelles :

$$\frac{\delta \phi(r')}{\delta \phi(r)} = \delta(r - r'). \quad (4.1)$$

1/ Calculer

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \phi(r)} \int d\rho \phi(\rho)^n, \quad \frac{\delta}{\delta \phi(r)} \left[ \int d\rho \phi(\rho) \right]^n, \quad \frac{\delta}{\delta \phi(r)} \left[ \int d\rho \phi(\rho)^n \right]^m, \quad \frac{\delta}{\delta \phi(r)} \int d\rho e^{\lambda \phi(\rho)} \\ \frac{\delta}{\delta \phi(r)} e^{\int d\rho h(\rho) \phi(\rho)}, \quad \frac{\delta}{\delta \phi(r)} \int d\rho (\nabla \phi)^2, \quad \frac{\delta}{\delta \phi(r)} \int d\rho (\Delta \phi)^2, \dots \end{aligned}$$

(vous êtes encouragés à en inventer d'autres...)

2/ On suppose que le champ  $\phi$  est associé à une “mesure”  $\mathcal{D}\phi P[\phi]$ . Cela pourrait être un poids probabiliste (par exemple pour étudier un processus stochastique), ou un poids statistique comme la distribution canonique  $P[\phi] \propto e^{-\beta E[\phi]}$  (physique statistique), ou le poids d’un champ quantique (théorie quantique des champs), etc. On introduit la “fonctionnelle génératrice” <sup>1</sup>

$$Z[h] \stackrel{\text{def}}{=} \left\langle e^{\int dr h(r) \phi(r)} \right\rangle = \int \mathcal{D}\phi P[\phi] e^{\int dr h(r) \phi(r)}. \quad (4.2)$$

Comment interpréter  $\left. \frac{\delta Z[h]}{\delta h(r)} \right|_{h=0}$ ,  $\left. \frac{\delta^2 Z[h]}{\delta h(r) \delta h(r')} \right|_{h=0}$  et  $\left. \frac{\delta^2 \ln Z[h]}{\delta h(r) \delta h(r')} \right|_{h=0}$  ?

3/ **Intégrale gaussienne.**— On considère la mesure gaussienne générale

$$P[\phi] \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int dr dr' \phi(r) A(r, r') \phi(r') \right\} \quad (4.3)$$

où  $A(r, r')$  est un “noyau” supposé connu.

a) En introduisant son inverse  $G = A^{-1}$  défini par  $\int dr'' A(r, r'') G(r'', r') = \delta(r - r')$ , calculer explicitement  $Z[h]$  (en utilisant que  $\int \mathcal{D}\phi P[\phi] = 1$ ). Dédurre  $\left. \frac{\delta^2 Z[h]}{\delta h(r) \delta h(r')} \right|_{h=0}$  dans ce cas.

b) On considère  $A(r, r') = \delta(r - r') [-\Delta_{r'} + m^2]$ . Justifier que  $P[\phi] \propto \exp -\frac{1}{2} \int dr [(\nabla \phi(r))^2 + m^2 \phi(r)^2]$ . Exprimer  $G(r, r')$  (utiliser une TF). Obtenir une expression explicite en  $d = 1$ .

1. Si cette écriture vous fait peur, on peut penser que le champ vit sur un réseau et écrire  $Z(\{h_r\}) = \int (\prod_r d\phi_r) P(\{\phi_r\}) e^{\sum_r h_r \phi_r}$  où les positions  $r$  sont les nœuds du réseau.

## 4.2 Déformation statique dans un cristal nématique

On reprend l'exemple des cristaux liquides uniaxes abordé au TD précédent. On se place dans la phase nématique avec un paramètre  $S = 1$  homogène mais où le directeur  $\vec{n}(\vec{r})$  dépend de la position  $\vec{r}$ . Ce vecteur directeur correspond à celui moyenné à l'intérieur d'un volume intermédiaire contenant un grand nombre de molécules mais de taille petite devant les échelles de variation typique de la direction moyenne (particule fluide). En utilisant des arguments généraux, on peut justifier l'écriture suivante de l'énergie libre :

$$F_L [\vec{n}(\vec{r}), \vec{H}(\vec{r})] = \int d^3r \left\{ \frac{1}{2} K [(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + |\vec{\nabla} \wedge \vec{n}|^2] - \frac{\mu_0}{2} \chi_a (\vec{H} \cdot \vec{n})^2 \right\}, \quad (4.4)$$

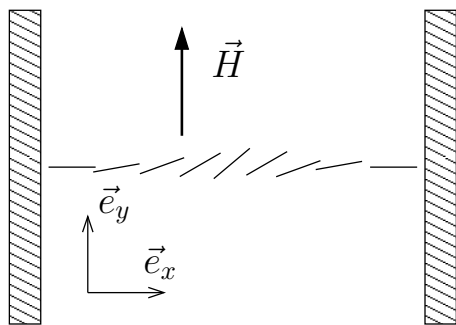
où  $K$  est une constante positive caractérisant le coût énergétique associé à la déformation du paramètre d'ordre (analogue à une déformation élastique).

1. À partir de (3.10), justifier la forme du couplage magnétique dans (4.4). Pourquoi la contribution (3.9) n'apparaît-elle pas ?

On considère un dispositif où le cristal liquide occupe l'espace entre deux parois de verre. L'interaction entre le nématique et le verre est telle que le directeur est contraint d'être perpendiculaire à la surface du verre sur chaque paroi. On applique un champ magnétique parallèle aux parois. Lorsque l'intensité du champ dépasse un certain seuil  $H_{\text{crit}}$ , les propriétés optiques du système changent brutalement. C'est cet effet, observé pour la première fois par Fréedericksz et ses collaborateurs (1927 et 1933), que l'on se propose de décrire. Le cristal liquide est placé entre deux parois parallèles au plan  $yOz$  et situées aux abscisses  $x = 0$  et  $x = L$  (cf. Figure ci-dessous). La surface latérale des parois est notée  $L_y L_z$ . On repère l'orientation du directeur  $\vec{n}$  par un angle  $\theta(x)$  :

$$\vec{n}(x) = \cos \theta(x) \vec{e}_x + \sin \theta(x) \vec{e}_y \quad (4.5)$$

avec  $\theta(0) = \theta(L) = 0$ . Le champ magnétique est uniforme et vaut  $\vec{H} = H \vec{e}_y$ .



Dispositif de Fréedericksz. L'orientation des bâtonnets est représentée schématiquement par les segments en traits pleins. Les parois en verre sont les rectangles hachurés.

2. écrire l'énergie libre par unité d'aire de paroi, c'est à dire  $F_L/(L_y L_z)$ , comme une fonctionnelle de  $\theta(x)$ .
3. Montrer que l'orientation  $\theta(x)$  obéit à l'équation

$$\xi^2 \frac{d^2 \theta}{dx^2} + \sin \theta \cos \theta = 0. \quad (4.6)$$

où  $\xi = \sqrt{K/(\mu_0 \chi_a H^2)}$  est la longueur magnétique. Voyez-vous une solution triviale de cette équation ? Commenter.

4. On cherche une solution non triviale de (4.6) où la valeur maximale de  $\theta(x)$  n'est pas nulle, mais reste faible, de sorte que  $|\theta(x)| \ll 1$ . Donner, en résolvant (4.6) de manière approchée, la forme correspondante de  $\theta(x)$ . Justifier que dans ce cas la solution la plus simple correspond à  $L/\xi = \pi$ . En déduire la valeur du champ critique de Fréedericksz :

$$H_{\text{crit}} = \frac{\pi}{L} \sqrt{\frac{K}{\mu_0 \chi_a}}. \quad (4.7)$$

5. Pour les courageux : résoudre cette question en cherchant une intégrale première de (4.6) et en vous inspirant du cours.

### 4.3 Température critique dans un film mince

On étudie la température critique dans un film de largeur  $L$  dans la direction  $x$  (et infini selon les deux autres directions). Le film occupe donc un volume  $V = [0, L] \times \mathbb{R}^2$ . Le système est décrit par une théorie de Landau où, avec les notations du cours

$$F_L[\phi] = F_0(T) + \int_V d^3r \left\{ g|\vec{\nabla}\phi|^2 + f_L(\phi(\vec{r})) \right\} \quad \text{avec} \quad f_L(\phi) = a(T - T_C)\phi^2 + d\phi^4.$$

On suppose qu'à l'équilibre le paramètre d'ordre  $\phi$  ne dépend que de  $x$  et vérifie la condition limite aux bords du film :  $\phi(0) = \phi(L) = 0$ .

1/ écrire l'équation différentielle vérifiée par  $\phi$ . Montrer que l'on peut en trouver une intégrale première formellement analogue à la conservation de l'énergie d'une particule classique fictive de "masse"  $2g$ , "position"  $\phi$ , "temps"  $x$  évoluant dans un "potentiel"  $-f_L(\phi)$ . On notera comme en cours  $E_{cl}$  l'énergie de la particule classique fictive mesurée à partir de  $f_L(0)$ .

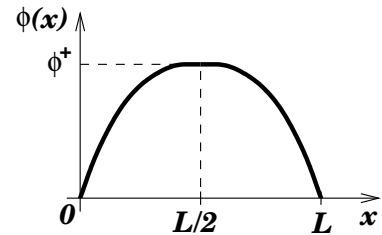
2/ Pour répondre à cette question il est indispensable de s'aider d'un (ou plusieurs) graphique(s).

(a) Montrer que si  $T > T_C$  la seule solution possible est  $\phi \equiv 0$ .

(b) On se restreindra désormais au cas  $T < T_C$ . Montrer que l'on n'a de solution que si

$$0 \leq E_{cl} < E_{cl}^{\max} = -\min \{f_L(\phi)\}. \quad (4.8)$$

(c) Justifier par un raisonnement physique (sans démonstration rigoureuse) qu'en dehors de la solution triviale  $\phi \equiv 0$ , la solution d'énergie minimale a certainement l'allure représentée ci-contre. Tracer sur un graphique "énergie"- "position" le comportement de la particule classique correspondante. Faire figurer sur ce graphique la valeur de  $E_{cl}$  et la valeur  $\phi^+$  correspondant au maximum du paramètre d'ordre tracé ci-contre.

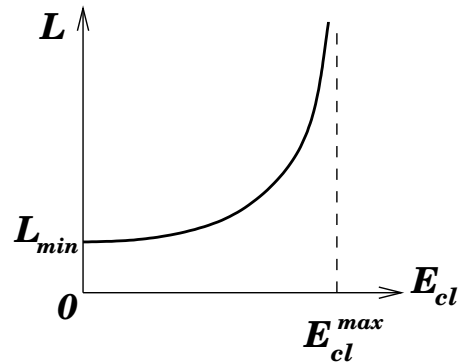


3/ Pour que la solution représentée ci-dessus soit acceptable, il faut que la valeur de  $E_{cl}$  permette un accord exact entre la moitié de la plus petite "période" d'oscillation de la particule fictive et l'épaisseur  $L$  du film.

Montrer alors que si l'on fixe la valeur de  $E_{cl}$ ,  $L$  doit être égal à

$$L(E_{cl}) = 2 \int_0^{\phi^+} \frac{g^{1/2} d\phi}{\sqrt{E_{cl} + f_L(\phi)}}, \quad (4.9)$$

et que cela correspond à la courbe représentée sur la figure ci-contre. On donnera l'expression de  $E_{cl}$  en fonction de  $\phi^+$ . Bien-sûr la valeur de  $E_{cl}$  n'est pas fixée *a priori*, mais elle est tout de même contrainte par la condition (4.8) et cela impose que  $L$  soit supérieur à une valeur minimale. On note  $L_{\min}$  la valeur la plus petite acceptable pour  $L$  (cf. figure).



4/ On va maintenant déterminer la valeur de  $L_{\min}$ . Sur le graphe ci-dessus on s'aperçoit que  $L_{\min}$  est atteinte pour  $E_{cl} \rightarrow 0$ , c'est à dire dans un régime où  $\phi(x)$  reste très proche de zéro. Dans ce régime on peut faire une approximation quadratique de  $f_L(\phi)$ .

(a) Montrer alors, soit en utilisant (4.9), soit en linéarisant l'équation à laquelle obéit  $\phi$  (obtenue à la question 1/) que l'on trouve

$$(L_{\min})^2 = \frac{\pi^2 g}{a(T_C - T)}.$$

(b) En déduire que la température de transition de phase dans le film est réduite par rapport à la température  $T_C$  de transition dans le volume d'un facteur dont on donnera l'expression.

5/ Donner l'expression analytique du profil  $\phi(x)$  au voisinage d'une des deux parois dans la limite où  $L \rightarrow \infty$ .

## 4.4 Théorie de Ginzburg-Landau des transitions de surface

On se place dans l'espace réel à trois dimensions. On considère un système semi-infini selon la direction  $x$ , avec  $x \in [0, \infty[$ , et très grand dans les deux autres directions (repérées par un vecteur bidimensionnel  $\vec{\rho}$ ). Le système est décrit par un paramètre d'ordre  $\phi(x, \vec{\rho})$  obéissant à une théorie régie par une fonctionnelle de Ginzburg-Landau avec un terme de surface :

$$F_L[\phi, h, h_1] = \int d^2\rho \int_0^\infty dx \left\{ g |\vec{\nabla}\phi|^2 + f_L(\phi(x, \vec{\rho}), h(x, \vec{\rho})) \right\} + \int d^2\rho \left\{ \frac{g}{\lambda} \phi^2(x=0, \vec{\rho}) - h_1(\vec{\rho})\phi(x=0, \vec{\rho}) \right\}. \quad (4.10)$$

Dans (4.10)  $h(x, \vec{\rho})$  et  $h_1(\vec{\rho})$  sont des champs extérieurs.  $h_1$  n'agit qu'en surface; attention : il n'a pas la même dimension que  $h$ .  $f_L$  est l'énergie libre par unité de volume :  $f_L(\phi, h) = a \times (T - T_c) \phi^2 + d \phi^4 - h \phi$  ( $a$  et  $d > 0$ ). On notera que dans (4.10) la contribution de surface à l'énergie libre est simplement décrite par un terme en  $\phi^2$ , avec un seul paramètre phénoménologique :  $\lambda$  (pas nécessairement positif)<sup>2</sup>. On appelle  $\lambda$  la longueur d'extrapolation.

On se place dans une configuration où  $h$  et  $h_1$  sont uniformes. Alors  $\phi$  ne dépend que de  $x$  et en notant  $S$  l'aire de l'échantillon dans le plan perpendiculaire à  $x$ , on a (en notant  $\phi' = d\phi/dx$ ) :

$$\mathcal{F}[\phi, h, h_1] \stackrel{\text{def}}{=} \frac{F_L}{S} = \int_0^\infty dx \left\{ g \phi'^2 + f_L(\phi(x), h) \right\} + \frac{g}{\lambda} \phi^2(0) - h_1 \phi(0). \quad (4.11)$$

Dans la suite on notera  $\phi_0$  et  $\xi_0$  la valeur du paramètre d'ordre et de la longueur de corrélation obtenues pour  $h = 0$  et en négligeant la contribution des termes de surface (leurs expressions en fonction de  $T$  et des paramètres de  $f_L$  figurent dans votre cours) :

$$\phi_0 = \begin{cases} 0 & \text{si } T > T_c, \\ \sqrt{\frac{a(T_c - T)}{2d}} & \text{si } T < T_c, \end{cases} \quad \xi_0 = \begin{cases} \sqrt{\frac{g}{a(T - T_c)}} & \text{si } T > T_c, \\ \sqrt{\frac{g}{2a(T_c - T)}} & \text{si } T < T_c. \end{cases}$$

1/ Discuter qualitativement l'effet du terme de surface suivant le signe et l'amplitude de  $\lambda$ . Calculer la variation  $\delta\mathcal{F}$  associée à une variation  $\delta\phi(x)$  du paramètre d'ordre. En traitant avec soin les termes résultant de l'intégration par parties, montrer que l'extrémisation de  $\mathcal{F}$  conduit à l'équation

$$-2g\phi'' + \frac{\partial f_L}{\partial \phi} = 0, \quad \text{avec les conditions au bord} \quad \begin{cases} \frac{1}{\lambda}\phi(0) - \phi'(0) = h_1/2g, \\ \phi'(+\infty) = 0. \end{cases} \quad (4.12)$$

En utilisant une intégrale première de (4.12) montrer que l'on obtient la relation suivante entre  $\phi_0 = \phi(\infty)$  et  $\phi_1 \stackrel{\text{def}}{=} \phi(0)$  :

$$f_L(\phi_0, h) - f_L(\phi_1, h) + g \left[ \frac{\phi_1}{\lambda} - \frac{h_1}{2g} \right]^2 = 0. \quad (4.13)$$

On appellera désormais  $\phi_1$  le "paramètre d'ordre de surface".

2/ On se place à  $T < T_c$ ,  $h = 0$ ,  $h_1 = 0$  et on considère le cas  $\lambda > 0$ . Montrer qu'on obtient alors les quatre solutions sous la forme

$$\phi_1 = \phi_0 \frac{\xi_0}{\lambda} \left\{ -\varepsilon \pm \sqrt{1 + (\lambda/\xi_0)^2} \right\}, \quad \text{avec } \varepsilon^2 = 1. \quad (4.14)$$

2. On fait apparaître artificiellement  $g$  dans le terme de surface pour simplifier les futures équations.



- (a) On se place dans le cas où  $\phi_0$  et  $\phi_1$  sont tous deux positifs. Justifier que, compte-tenu du signe de  $\lambda$  et de la condition au bord en  $x = 0$ , la solution physiquement acceptable est la suivante :

$$\phi_1 = \phi_0 \frac{\xi_0}{\lambda} \left\{ \sqrt{1 + (\lambda/\xi_0)^2} - 1 \right\}$$

Tracer rapidement l'allure correspondante de  $\phi(x)$  pour  $x > 0$ .

- (b) On va résoudre (4.12) dans le cas particulier simple où  $\lambda \gg \xi_0$ . Justifier que dans ce cas on peut écrire  $\phi(x) = \phi_0 + \varphi(x)$  avec  $|\varphi(x)| \ll \phi_0$ . Résoudre (4.12) dans le cadre de cette approximation. Exprimer  $\phi(x)$  en fonction des paramètres  $\phi_0$ ,  $\phi_1$  et  $\xi_0$ . Que se passe-t-il lorsque  $\lambda \rightarrow \infty$  ?
- (c) On se place dans la limite  $T \rightarrow T_c^-$ . Vers quelle valeur le rapport  $\lambda/\xi_0$  tend-il ? En déduire le comportement de  $\phi_1$  en fonction de la température lorsque  $T \rightarrow T_c^-$ .

**3/** On se place maintenant dans le cas  $\lambda < 0$ ,  $h = 0$  et  $h_1 = 0$ .

- (a) On se place à  $T < T_c$  et dans le cas où  $\phi_0$  et  $\phi_1$  sont tous deux positifs. Proposer alors la solution de (4.14) la plus appropriée. Tracer rapidement l'allure correspondante de  $\phi(x)$  pour  $x > 0$ . Comment  $\phi_1$  se comporte-t-il lorsque  $T \rightarrow T_c^-$  ?
- (b) On se place à  $T > T_c$  et on ne peut donc plus utiliser l'expression (4.14) pour calculer  $\phi_1$ . Quelles sont les valeurs possibles de  $\phi_1$  ? Montrer qu'il existe une température caractéristique  $T_1$  (que vous exprimerez en fonction de  $T_c$ ,  $g$ ,  $a$  et  $\lambda^2$ ) au dessous de laquelle le paramètre d'ordre de surface prend spontanément une valeur non nulle. Tracer l'allure de la courbe  $\phi(x)$  dans un cas où  $T_c < T < T_1$ . Tracer la dépendance de  $\phi_1$  en fonction de  $T$  pour  $T \in [T_c, \infty[$ . Justifier que l'on parle de transition de phase de surface. Comment  $\phi_1$  se comporte-t-il lorsque  $T \rightarrow T_1^-$  et  $T \rightarrow T_1^+$  ? Quel est l'ordre de cette transition ?
- (c) Pour confirmer l'analyse de la question 3.b, on se place dans le cas  $T > T_1$  avec maintenant  $h$  et  $h_1$  non nuls mais faibles (et toujours  $\lambda < 0$ ). Justifier que l'on peut alors linéariser l'équation (4.12). Chercher sa solution sous la forme  $\phi(x) = \mathcal{A} \exp(-x/\xi_0) + \mathcal{B}$ . Exprimer  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{B}$  en fonction de  $\lambda$ ,  $\xi_0$ ,  $g$ ,  $h$  et  $h_1$ . Montrer que

$$\phi_1 \rightarrow \frac{1}{|\lambda|a} \times \frac{h_1 + h|\lambda|}{T - T_1} \quad \text{lorsque } T \rightarrow T_1^+ . \quad (4.15)$$

Est-ce conforme avec l'analyse de la question précédente ?

**4/** Tracer dans le demi-plan  $(\lambda^{-1}, T)$  ( $\lambda^{-1} \in \mathbb{R}$  et  $T \in \mathbb{R}^+$ ) les lignes de transition de phase du système en champs nuls ( $h = 0$  et  $h_1 = 0$ ). Identifier le point multicritique où plusieurs lignes se rencontrent.

# TD 5

## Supraconductivité

En 1950 Ginzburg et Landau ont proposé une théorie phénoménologique de la supraconductivité inspirée de la théorie de Landau des transitions de phase du second ordre (1937). Il ont utilisé un paramètre d'ordre complexe  $\phi(\vec{r})$  dont le sens physique n'était pas clair à l'époque, et qu'on a interprété depuis comme décrivant un champ de paires d'électrons. Ils ont écrit l'énergie libre du système en présence d'un champ magnétique en imposant l'invariance de jauge pour un choix de "couplage minimal". Cela permet de décrire très correctement les riches effets causés par l'interaction mutuelle d'un supraconducteur et d'un champ magnétique.

### 5.1 Énergie libre de Ginzburg-Landau

On décrit la phase supraconductrice d'un métal par un paramètre d'ordre complexe  $\phi(\vec{r})$  qui joue le rôle d'une fonction d'onde effective. En présence d'une induction magnétique  $\vec{B}(\vec{r})$  l'énergie libre de Ginzburg-Landau est

$$F[\phi] = F_0(T) + \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \left( \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar} \vec{A} \right) \phi \right|^2 + a|\phi|^2 + \frac{d}{2}|\phi|^4 + \frac{\vec{B}^2}{2\mu_0} \right\}. \quad (5.1)$$

$m$  et  $q$  sont deux paramètres du modèle. La valeur de  $m$  est arbitraire, on verra que celle de  $q$  ne l'est pas.  $\vec{A}(\vec{r})$  est le potentiel vecteur, il est défini à un gradient près ( $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$ ).  $d$  est un paramètre positif constant, et  $a = \tilde{a} \times (T - T_c)$  où  $\tilde{a} > 0$  et  $T_c$  est la température de la transition supraconductrice.

**1/ Invariance de jauge :** une transformation de jauge correspond à changer de manière concomitante les deux champs :  $\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi$  et  $\phi \rightarrow \phi' = \phi \exp\{i\frac{q}{\hbar}\chi\}$ . Vérifier que l'expression (5.1) de  $F$  est invariante sous une telle transformation.

Indication : Il est utile d'introduire l'opérateur de « dérivée covariante »  $\vec{D} = \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar} \vec{A}$ .

**2/ En extrémisant  $F$  par rapport aux variations de  $\phi^*$  et de  $\vec{A}$ , montrer que les équations qui décrivent la configuration d'équilibre du paramètre d'ordre et du champ sont :**

$$\frac{1}{2m} \left( i\hbar \vec{\nabla} + q\vec{A} \right)^2 \phi + a\phi + d|\phi|^2\phi = 0, \quad (5.2)$$

et

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{B} = \mu_0 \vec{J}_s \quad \text{où} \quad \vec{J}_s(\vec{r}) = -\frac{q^2}{m} |\phi|^2 \vec{A} - \frac{iq\hbar}{2m} \left( \phi^* \vec{\nabla} \phi - \phi \vec{\nabla} \phi^* \right). \quad (5.3)$$

Indication : il est utile d'utiliser une intégration par parties afin d'écrire  $\int d^3r \left| \left( \vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar} \vec{A} \right) \phi \right|^2 = \int d^3r \phi^* \left( i\vec{\nabla} + \frac{q}{\hbar} \vec{A} \right)^2 \phi$ . Montrer que si l'on écrit  $\phi = \sqrt{\rho(\vec{r})} \exp\{i\theta(\vec{r})\}$  alors la densité de (super)-courant se met sous la forme  $\vec{J}_s = \frac{q}{m} \rho [\hbar \vec{\nabla} \theta - q\vec{A}]$

Discuter l'invariance de jauge des équations.

3/ En l'absence de tout champ magnétique, donner pour un système uniforme, l'expression de la densité de paires  $\rho_0$  en fonction de la température. Si on se place dans un cas non uniforme modèle où on impose que  $\phi(\vec{r})$  soit nul sur le demi-espace  $x \leq 0$ , vérifier que pour  $x > 0$  (et  $T < T_c$ ) on a

$$\phi(x) = \sqrt{\rho_0} \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right), \quad (5.4)$$

où  $\xi$  est appelée "longueur de cohérence" (on donnera son expression en fonction des paramètres du problème).

4/ Dans les deux dernières questions de cette section on décrit l'interaction du champ électromagnétique avec le supraconducteur de manière simplifiée : la densité de paires ( $\rho = \phi^*\phi$ ) n'est pas affectée par le champ électromagnétique et garde la valeur constante  $\rho_0$  que l'on vient de déterminer. On ne considère que des champs électromagnétiques faibles qui, s'ils n'affectent pas la densité de paires, peuvent toutefois induire des courants dans le supraconducteur, de sorte que l'on écrit le champ de paires sous la forme  $\phi(\vec{r}) = \sqrt{\rho_0} \exp\{i\theta(\vec{r})\}$ .

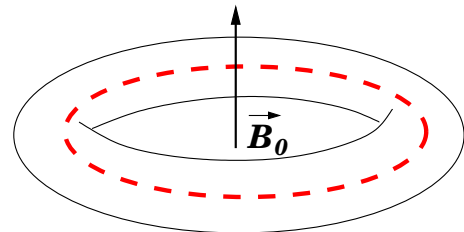
On se place dans une configuration où la moitié  $x > 0$  de l'espace est occupée par le milieu supraconducteur avec un champ de la forme  $\phi = \sqrt{\rho_0} \exp\{i\theta(\vec{r})\}$ , tandis que le vide règne dans la moitié  $x < 0$  ( $\phi = 0$ ).

- (a) Montrer, en utilisant l'équation de Maxwell-Ampère déterminée à la question 1/, que dans le supraconducteur le champ magnétique vérifie  $-\Delta\vec{B} + \frac{\vec{B}}{\lambda_L^2} = \vec{0}$ . On donnera l'expression de l'échelle de longueur caractéristique  $\lambda_L$  du problème (dite longueur de London).
- (b) Imposons un champ uniforme  $\vec{B}_0 = B_0\vec{e}_z$  dans le demi-espace  $x < 0$ . Déterminer alors le champ  $\vec{B}(x)$  dans le demi-espace  $x > 0$ .
- (c) Montrer l'effet Meissner qui s'énonce ainsi : " il ne peut exister de champ magnétique uniforme à l'intérieur d'un supraconducteur ".

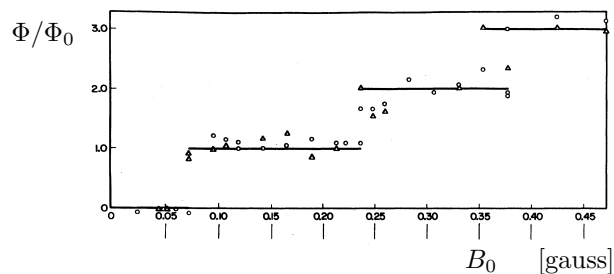
5/ On considère un échantillon supraconducteur placé dans un champ magnétique statique.

- (a) Dans le supraconducteur, loin de la surface, justifier que  $\vec{J}_s = 0$ , et montrer alors que le long de tout chemin  $\mathcal{C}$  partant d'un point  $\vec{r}_1$  et allant à  $\vec{r}_2$  on a  $\int_{\mathcal{C}} \vec{A} \cdot d\vec{\ell} = \frac{\hbar}{q} [\theta(\vec{r}_2) - \theta(\vec{r}_1)]$ .

- (b) On considère un supraconducteur de forme torique (d'épaisseur  $\gg \lambda_L$ ) et on applique la formule précédente le long de la courbe fermée marquée en pointillés sur la figure ci-contre. On remarquera que le champ  $\phi$  doit être monovalué, mais que cette contrainte peut être relaxée pour la phase  $\theta$  dans un supraconducteur de forme non simplement connexe. Montrer alors que le flux de  $\vec{B}$  à travers la surface délimitée par la courbe  $\mathcal{C}$  est quantifié en unités de  $\Phi_0 = h/q$ .



- (c) Les expériences de Doll et Näbauer et de Deaver et Fairbank ont montré en 1961 que le flux est quantifié avec un quantum valant  $\Phi_0 = 2,07 \times 10^{-7}$  gauss.cm<sup>2</sup> (cf. figure ci-contre). Quelle est la valeur correspondante de la charge  $q$  (on l'exprimera en unité de la charge élémentaire)? Discuter.



Flux traversant un cylindre supraconducteur creux (en étain) en fonction du champ magnétique appliqué. La figure est tirée de B. S. Deaver et W. M. Fairbank, *Phys. Rev. Lett.* **7**, 43 (1961).

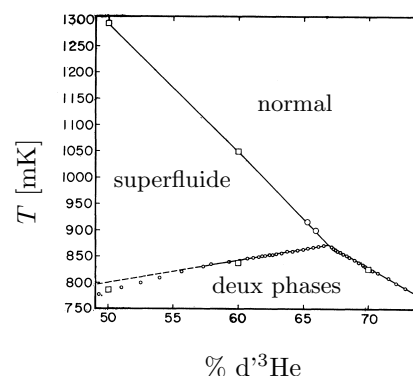
## TD 6

# Transition tri-critique

### 6.1 Modèle de Blume-Emery-Griffiths

On veut décrire l'influence de l'adjonction d'impuretés d' $^3\text{He}$  sur la transition de phase superfluide de l' $^4\text{He}$ . L'expérience montre que si la concentration  $x$  en  $^3\text{He}$  reste faible, la transition reste du second ordre et n'est pas affectée qualitativement (cependant la température de transition décroît). Lorsque  $x > 0.67$ , la transition devient discontinue et est accompagnée d'une séparation de phase : une des phases en coexistence est riche en  $^4\text{He}$  et superfluide, l'autre est riche en  $^3\text{He}$  et non-superfluide.

Figure 1 : Diagramme de phase  $T - x$  du système  $^3\text{He} + ^4\text{He}$  [d'après E.H. Graf et al., Phys. Rev. Lett. **19**, 417 (1967)].



Blume, Emery et Griffiths (B.E.G.) ont proposé de décrire très schématiquement la transition fluide normal/superfluide par une transition paramagnétique/ferromagnétique dans un système d'Ising. Dans le modèle B.E.G. le spin d'Ising vaut  $+1$ ,  $0$  ou  $-1$ , la valeur  $S_i = 0$  correspondant à la présence d'un atome d' $^3\text{He}$  sur le site  $i$ , alors que la valeur  $S_i = \pm 1$  correspond à la présence d'un atome d' $^4\text{He}$ . L'hamiltonien B.E.G. est

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_{i=1}^N S_i^2 - \Delta N, \quad (6.1)$$

avec  $J > 0$  et  $\sum_{\langle i,j \rangle}$  est la somme sur les plus proches voisins sur un réseau comprenant  $N$  sites ( $N \gg 1$ ) et dont la coordinance (c'est à dire le nombre de plus proches voisins) est notée  $q$ . La concentration  $x$  en  $^3\text{He}$  est la valeur moyenne :  $x = 1 - \langle S_i^2 \rangle$ . Le paramètre  $\Delta$  contrôle la concentration en  $^3\text{He}$  :  $x \rightarrow 1$  si  $\Delta \rightarrow +\infty$  et  $x \rightarrow 0$  si  $\Delta \rightarrow -\infty$ . Le paramètre d'ordre "superfluide" sera  $\phi = \langle S_i \rangle$ , c'est à dire que l'apparition de la superfluidité est décrite de manière effective par la magnétisation spontanée du système d'Ising.

1/ On veut traiter (6.1) à l'approximation du champ moyen. Pour cela il est nécessaire de re-écrire le terme d'interaction entre plus proches voisins. En notant  $S_i = \phi + \sigma_i$  (où  $\sigma_i$  représente la fluctuation du spin d'Ising autour de sa valeur moyenne) et en négligeant dans ce terme (et dans ce terme seulement) les termes d'ordre  $\mathcal{O}(\sigma^2)$  montrer que l'on peut écrire  $H$  comme une somme de  $N$  hamiltoniens indépendants. Donner l'expression de la fonction de partition canonique de chacun de ces hamiltoniens. Montrer qu'à la température  $T$  l'énergie libre du système s'écrit pour une valeur donnée  $\phi$  du paramètre d'ordre (en notant  $\beta = (k_B T)^{-1}$  où  $k_B$  est la constante de Boltzmann) :

$$\frac{F_L(T, \Delta, \phi)}{N} = -\Delta + \frac{1}{2} q J \phi^2 - k_B T \ln [1 + 2e^{-\beta \Delta} \cosh(\beta q J \phi)] . \quad (6.2)$$

2/ Donner l'expression de la fraction  $x$  d' $^3\text{He}$  en fonction de la température, de  $\phi$  et des paramètres du

problème. On pourra utiliser, après l'avoir démontrée, la relation  $x = -\frac{1}{N}\partial F_L/\partial\Delta$  (mais ce n'est pas la seule méthode ni peut-être la plus simple). Montrer que dans la phase non superfluide on a

$$x = \frac{\lambda - 1}{\lambda}, \quad \text{où } \lambda \stackrel{\text{def}}{=} 1 + \frac{e^{\beta\Delta}}{2}. \quad (6.3)$$

3/ Un développement limité de (6.2) au voisinage de  $\phi = 0$  donne

$$\frac{F_L(T, \Delta, \phi)}{N} = a(T, \Delta) + b(T, \Delta)\phi^2 + c(T, \Delta)\phi^4 + d(T, \Delta)\phi^6 + \dots \quad (6.4)$$

avec

$$b(T, \Delta) = \frac{qJ}{2} \left(1 - \frac{qJ}{\lambda k_B T}\right) \quad \text{et} \quad c(T, \Delta) = \frac{qJ}{8\lambda^2} \left(\frac{qJ}{k_B T}\right)^3 \left(1 - \frac{\lambda}{3}\right). \quad (6.5)$$

Déterminer rapidement l'allure de  $\phi(T)$  en utilisant le développement (6.4) tronqué à l'ordre  $\phi^4$ , en admettant que  $c > 0$ . Donner une relation permettant de calculer la température critique  $T_c$  du système. Que vaut  $T_c$  pour  $\Delta = 0$  et  $\Delta \rightarrow -\infty$ ? Discuter la limite  $\Delta \rightarrow +\infty$ . Montrer que  $T_c(x)/T_c(0) = 1 - x$ .

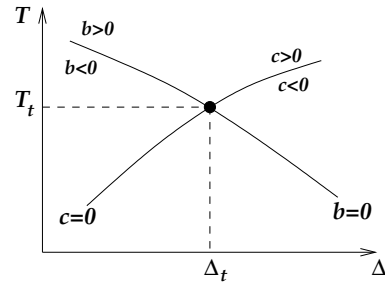
4/ Tracer l'allure des courbes  $b = 0$  et  $c = 0$  dans un plan  $(\frac{\Delta}{qJ}, \frac{k_B T}{qJ})$ . Montrer qu'elles se coupent en un point dont vous donnerez les coordonnées.

## 6.2 Points tri-critiques. Discussion générale

Une discussion plus précise du modèle B.E.G. nous pousse à étudier une théorie de Landau du type (6.4) en tenant compte du fait que  $c(T, \Delta)$  peut changer de signe. On considèrera dans cette section un modèle générique (pas obligatoirement le modèle B.E.G.) où, pour simplifier la discussion,  $a(T, \Delta) = 0$ , et où  $d(T, \Delta)$  est une constante positive (notée  $d$ ) assez faible pour que la contribution  $d\phi^6$  ne soit pas le terme dominant dans (6.4) pour les valeurs de  $\phi$  qu'on va typiquement considérer<sup>1</sup>.

On trace dans le plan  $(\Delta, T)$  les deux courbes  $b(T, \Delta) = 0$  et  $c(T, \Delta) = 0$  (cf. figure ci-contre). À haute température,  $b$  et  $c$  sont tous deux positifs. Lorsque  $\Delta < \Delta_t$ ,  $b$  change de signe à une température plus élevée que ne le fait  $c$ . Lorsque  $\Delta > \Delta_t$  c'est le contraire. Le point d'intersection  $(\Delta_t, T_t)$  est appelé "point tri-critique".

Figure 2 : Point tri-critique dans le plan  $(\Delta, T)$ .



1/ Tracer rapidement le comportement de  $F_L(T, \Delta, \phi)$  en fonction de  $\phi$  pour plusieurs valeurs de  $T$  lorsque  $\Delta < \Delta_t$  et lorsque  $\Delta > \Delta_t$ . En déduire que pour  $\Delta > \Delta_t$  la transition de second ordre disparaît parce que le système subit une transition de phase du premier ordre entre une phase  $\phi = 0$  et une phase  $\phi = \phi_1$  ( $\phi_1 \neq 0$ ) à une température  $T_1$  telle que

$$F_L(T_1, \Delta, \phi_1) = F_L(T_1, \Delta, 0) \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial F_L}{\partial \phi} \right|_{T_1, \Delta, \phi_1} = 0. \quad (6.6)$$

Indication : il suffit de représenter  $F_L(T_1, \Delta, \phi)$  en fonction de  $\phi$  pour comprendre ce qui se passe.

- En déduire la relation de définition de  $T_1$  et l'expression de  $\phi_1$  en fonction de  $c(T_1, \Delta)$  et  $d$ .
- Donner l'expression de la pente  $\partial T_c / \partial \Delta$  à gauche du point tri-critique et de la pente  $\partial T_1 / \partial \Delta$  à droite du point tri-critique en fonction des dérivées appropriées de  $b$  et  $c$ . On pourra utiliser la propriété (6.8) en fin d'énoncé.
- En vous inspirant de la figure 2, tracer sur un diagramme  $(\Delta, T)$  l'allure des lignes de transition du premier et du second ordre. Ces lignes se rencontrent-elles? Sont-elles tangentes en leur point d'intersection?

1. On ne doit pas cependant négliger le terme en  $d\phi^6$ , et bien-sûr il devient prépondérant dans (6.4) lorsque  $\phi \rightarrow \pm\infty$ .

2/ Soit  $F(T, \Delta)$  la fonction de partition canonique du système. Dans notre approximation de champ moyen  $F(T, \Delta) = F_L(T, \Delta, \phi)$  calculée en  $\phi$  tel que  $\partial F_L / \partial \phi = 0$ . Soit  $x$  un paramètre thermodynamique défini par  $x = -\frac{1}{N}(\partial F / \partial \Delta)_T$  (dans le modèle B.E.G.  $x$  est la concentration d' $^3\text{He}$ , mais ici on traite le cas général). On s'intéresse à la valeur de  $x$  dans les différentes phases en présence dans le cas de la transition du premier ordre.

- (a) Montrer que  $x = -\frac{1}{N}(\partial F_L / \partial \Delta)_{T, \phi}$  où la dérivée est calculée à  $T$  et  $\phi$  constants.  
 (b) Justifier que  $x$  prend des valeurs différentes dans les deux phases coexistant à la transition ( $\phi = 0$  et  $\phi = \phi_1$ ). Montrer que la différence  $x_1 - x_0$  du paramètre  $x$  entre les deux phases s'écrit :

$$x_1 - x_0 = \frac{c}{2d} \frac{\partial b}{\partial \Delta} - \frac{b}{d} \frac{\partial c}{\partial \Delta}, \quad (6.7)$$

où toutes les fonctions sont évaluées en  $(T_1, \Delta)$ .

- (d) Indiquer alors l'allure grossière du diagramme de phase du système dans le plan  $(T, x)$ .  
 (e) On revient ponctuellement au modèle B.E.G. Comparer votre réponse à la question (d) précédente avec la figure 1. Pour quelle valeur de  $x$  le point tri-critique est-il atteint dans le cas de la théorie (6.4)? Comparer avec le résultat expérimental.

3/ Montrer que dans la phase ordonnée le paramètre d'ordre vaut  $\phi^2 = \frac{1}{3d}[-c + \sqrt{c^2 - 3bd}]$  (on n'est pas ici obligatoirement près de la transition). On suppose qu'au voisinage des courbes  $b = 0$  et  $c = 0$ ,  $b$  et  $c$  s'annulent linéairement : par exemple  $b(T, \Delta) \propto T - T_c(\Delta)$ .

- (a) Justifier alors grossièrement que lorsqu'on s'approche du point tri-critique dans le plan  $(T, \Delta)$ ,  $\phi$  s'annule typiquement comme  $(T_t - T)^{1/4}$  : l'exposant  $\beta$  vaut  $\frac{1}{4}$  dans notre théorie de champ moyen<sup>2</sup>.  
 (b) En fait, la valeur de  $\beta$  dépend de la manière dont on s'approche du point tri-critique. Pour s'en convaincre, il est plus aisé de raisonner dans un diagramme  $(b, c)$  que dans un diagramme  $(\Delta, T)$ . Tracer les lignes de transition du 1<sup>er</sup> et du 2<sup>d</sup> ordre et la région ordonnée ( $\phi \neq 0$ ) dans ce diagramme. Trouver deux demi-droites situées dans la zone ordonnée et s'approchant du point tri-critique donnant lieu chacune à une valeur différente de  $\beta$ .  
 (c) Déterminer la valeur de l'exposant critique  $\delta$  en considérant la réponse à un champ extérieur au point tri-critique.  
 (d) Montrer que l'exposant  $\nu$  garde, au point tri-critique, la valeur qu'il a usuellement en champ moyen.

4/ Certains parmi les exposants critiques de champ moyen sont donc modifiés au point tri-critique. Il en découle une modification de la dimension critique supérieure, que nous allons calculer.

- (a) On se place dans la phase ordonnée, en dimension  $d$  et on note  $\xi$  la longueur de corrélation. Écrire le paramètre de Ginzburg en fonction d'une intégrale (sur un domaine à préciser) de la fonction de corrélation  $G(\vec{r})$  rapportée à  $\xi^d \phi^2$ .  
 (b) On se place au voisinage d'une température de transition  $T_0$  où  $\xi$  et  $\phi$  se comportent respectivement comme  $|T - T_0|^{-\nu}$  et  $|T - T_0|^\beta$ . Donner l'expression de la dimension critique supérieure  $d_{cs}$  en fonction de  $\beta$  et  $\nu$ . Que vaut  $d_{cs}$  au point tri-critique lorsque  $\beta = \frac{1}{4}$ ?

**Propriété utile :** On considère dans le plan  $(x, y)$  une courbe définie par l'équation implicite  $f(x, y) = 0$ . Soit  $(x_0, y_0)$  un point de cette courbe. Montrer que la pente de la tangente à la courbe en  $(x_0, y_0)$  s'exprime comme

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_0 = -\frac{(\partial f / \partial x)_0}{(\partial f / \partial y)_0}, \quad (6.8)$$

où l'indice 0 indique que les fonctions sont évaluées en  $(x_0, y_0)$ .

Indication : résoudre  $f(x, y) = 0$  à partir d'un développement limité au voisinage de  $(x_0, y_0)$ .

2. Attention aux notations : ici et dans tout ce qui suit  $\beta$  est un exposant critique,  $\beta \neq 1/k_B T$ !

# TD 7

## Fluctuations et lois d'échelle

### 7.1 Théorème de Mermin–Wagner

On s'intéresse ici aux fluctuations d'un paramètre d'ordre continu en fonction de la dimension. L'exemple étudié est celui d'un modèle de spins classiques  $\vec{S}(\vec{r})$ , de même norme  $S = \|\vec{S}(\vec{r})\|$ , coplanaires, et localisés sur un réseau cubique de dimension  $d$  et de pas  $a$ . Les interactions entre spins se traduisent par un Hamiltonien de la forme

$$H[\{\vec{S}(\vec{r})\}] = -J \sum_{\vec{r}} \sum_{\mu=1}^d \vec{S}(\vec{r}) \cdot \vec{S}(\vec{r} + a\vec{u}_\mu), \quad (7.1)$$

où  $J$  est une constante de couplage  $> 0$  et  $\{\vec{u}_\mu\}_{\mu=1,\dots,d}$  la base orthonormée associée au réseau cubique.

On suppose en outre que le système possède une température critique  $T_c$  en-dessous de laquelle l'aimantation est non-nulle et définit un axe de référence par rapport auquel on peut repérer l'orientation du spin  $\vec{S}(\vec{r})$  à l'aide d'un angle  $\theta(\vec{r})$ .

1/ En dessous de  $T_c$ , montrer que si l'on considère des fluctuations d'orientation se produisant sur des échelles de distance grandes par rapport au pas du réseau, l'Hamiltonien à la limite continue prend la forme

$$H[\theta] = \text{cste} + \frac{g}{2} \int d^d r |\vec{\nabla} \theta(\vec{r})|^2, \quad (7.2)$$

avec  $g$  une constante de couplage dont on donnera l'expression.

2/ Comme  $\langle \theta(\vec{r}) \rangle = 0$ , les fluctuations locales d'orientation sont caractérisées par  $\langle \theta^2(\vec{r}) \rangle$ . Après avoir trouvé l'expression de la fonction de corrélation  $G(\vec{r} - \vec{r}') = \langle \theta(\vec{r}) \theta(\vec{r}') \rangle$  sous forme d'une transformée de Fourier, montrer que l'on a

$$\langle \theta^2(\vec{r}) \rangle = (\beta g)^{-1} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2}. \quad (7.3)$$

On définira la transformée de Fourier inverse par la relation  $f(\vec{r}) = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} f(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$ .

3/ Par isotropie de l'intégrale précédente, on peut utiliser

$$\int d^d q = \int d^{d-1} \Omega \int q^{d-1} dq. \quad (7.4)$$

En se souvenant que le modèle original était sur réseau, quelles sont les bornes typiques  $q_{\min/\max}$  de l'intégrale ci-dessus en fonction de  $a$  et de la dimension  $L$  d'un côté du réseau. En évaluant le comportement de l'intégrale à la limite thermodynamique en fonction de la dimension  $d$ , montrer qu'il existe une dimension critique inférieure en-dessous de laquelle les fluctuations divergent et sous laquelle un ordre ne peut apparaître à température finie.

## 7.2 Loi d'échelle : identités de Widom et Rushbrooke

Si une quantité physique suit une loi de puissance au voisinage de la température critique, cela provient de l'invariance d'échelle. En effet, une fonction  $f$  est invariante d'échelle sur  $\mathbb{R}$  lorsqu'il existe une fonction  $g$  sur  $\mathbb{R}^+$  telle que :

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}^+, x \in \mathbb{R}, \quad f(\lambda x) = g(\lambda)f(x) \quad (7.5)$$

1. Montrer que toute fonction invariante d'échelle  $f$  est une loi de puissance d'exposant  $a = f'(1)/f(1)$  et peut être écrite sous la forme :

$$f(x) = f(\pm 1) |x|^a \quad (7.6)$$

où  $\pm 1$  is déterminé par le signe de  $x$ .

2. en déduire que  $f$  peut être définie par :

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}^+, x \in \mathbb{R}, \quad f(\lambda^{1/a}x) = \lambda f(x) \quad (7.7)$$

L'équation (7.7) permet de généraliser la définition des fonctions invariantes d'échelle aux cas de fonctions de deux variables. Toute fonction  $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  est invariante d'échelle s'il existe  $a$  et  $b$  dans  $\mathbb{R}$  telle que :

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}^+, (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad f(\lambda^{1/a}x, \lambda^{1/b}y) = \lambda f(x, y) \quad (7.8)$$

Dans ce qui suit, nous supposons que l'énergie libre par unité de volume est invariante d'échelle par rapport à la température réduite  $t = (T - T_c)/T_c$  et du champ externe  $h$ .

3. **Chaleur spécifique** :  $C = -T(\partial^2 F/\partial T^2)$ .

Montrer que l'exposant critique  $\alpha$  de la chaleur spécifique est relié à  $a$  selon :

$$\alpha = 2 - a \quad (7.9)$$

4. **Paramètre d'ordre** :  $\phi = -\partial f/\partial h$ .

Montrer que les exposants critiques  $\beta$  et  $\delta$  associés à  $\phi$  sont reliés à  $a$  et  $b$  par :

$$\frac{\beta}{a} = 1 - \frac{1}{b} \quad \text{et} \quad \frac{1}{\delta} = b - 1 \quad (7.10)$$

5. **Susceptibilité** :  $\chi = \partial \phi/\partial h$ .

Montrer que l'exposant critique  $\gamma$  associé à la susceptibilité est relié à  $a$  et  $b$  selon :

$$\frac{\gamma}{a} = \frac{2}{b} - 1 \quad (7.11)$$

6. En déduire les identités de Widom et Rushbrooke :

$$\beta\delta = \beta + \gamma \quad (7.12)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (7.13)$$



### 7.3 Lois d'échelle : identités de Fisher et Josephson

Les exposants critiques  $\nu$  et  $\eta$ , reliés aux fluctuations spatiales du paramètre d'ordre, sont définis à travers le comportement de la fonction de corrélations :

$$G(\mathbf{r}) \sim 1/|\mathbf{r}|^{d-2+\eta} \quad \text{pour } t = 0 \text{ (i.e. } T = T_c) \quad (7.14)$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad \text{pour } h = 0. \quad (7.15)$$

Considérons un système magnétique caractérisé par une aimantation locale  $m(\mathbf{r})$ . L'aimantation totale  $M$  est définie par :

$$M = \int_V d^d r m(\mathbf{r}) \quad (7.16)$$

1. En utilisant le théorème fluctuation-dissipation faisant intervenir la susceptibilité  $\chi$ , montrer que :

$$\chi = \beta \int_V d^d r G(\mathbf{r}) = \beta \hat{G}(\mathbf{0}) \quad (7.17)$$

où  $\hat{G}$  est la transformée de Fourier de  $G$ .

2. Au voisinage du point critique, nous avons  $G(\mathbf{r}) \sim \frac{e^{-|\mathbf{r}|/\xi}}{|\mathbf{r}|^{d-2+\eta}}$ . En déduire que :

$$\chi = \beta S_d \xi^{2-\eta} \int \frac{e^{-x}}{x^{\eta-1}} dx, \quad (7.18)$$

où  $S_d$  est la surface de la sphère unité en dimension  $d$ .

3. Obtenir l'identité de Fisher :

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (7.19)$$

4. (a) Justifier que l'énergie libre volumique varie comme  $\xi^{-d}$ , i.e.  $f \sim \xi^{-d}$ .  
 (b) Montrer que cela est équivalent à supposer que la longueur de corrélation  $\xi$  est invariante d'échelle.  
aide : montrer que  $\xi(t, h) = \lambda^{1/d} \xi(\lambda^{1/a} t, \lambda^{1/b} h)$  pour tout  $\lambda \in \mathbb{R}^+$ .  
 (c) En déduire la relation d'hyperscaling, ou identité de Josephson :

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (7.20)$$

# TD 8

## Aspects dynamiques

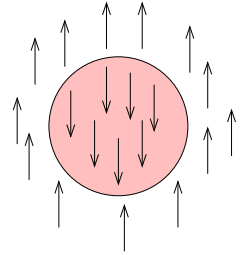
### 8.1 Effondrement d'un précipité

On considère un système d'Ising à deux ou trois dimensions décrit par la fonctionnelle de Landau

$$F_L[\phi] = F_0(T) + \int_{\mathbb{R}^d} d^d r \left\{ g |\vec{\nabla} \phi|^2 + f_L(\phi(\vec{r})) \right\} \quad \text{avec} \quad f_L(\phi) = a(T - T_c)\phi^2 + d\phi^4.$$

On se place à  $T < T_c$ , en l'absence de champ magnétique, et on appelle  $\phi_c$  la valeur d'équilibre du paramètre d'ordre.

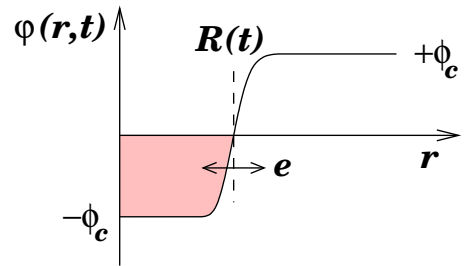
On considère une configuration où le paramètre d'ordre est initialement (à  $t = 0$ ) constant et uniforme (égal à  $\phi_c$ ) dans tout l'espace sauf dans une boule de rayon  $R(0)$  à l'intérieur de laquelle le paramètre d'ordre vaut  $-\phi_c$  (cf la figure ci-contre).



1/ Écrire l'équation d'évolution de  $\phi(\vec{r}, t)$ . On notera  $\Gamma$  le paramètre de Landau-Khalatnikov.

- (a) on cherche une solution de cette équation à symétrie sphérique :  $\phi(\vec{r}, t) = \varphi(r, t)$ , avec  $r = |\vec{r}|$ . Écrire l'équation vérifiée par  $\varphi(r, t)$ .

On impose en outre que  $\varphi(r, t)$  soit de la forme  $\varphi(r, t) = \psi(r - R(t))$ , où  $R(t)$  est le rayon de la boule à l'instant  $t$ . C'est à dire que la boule se contracte en gardant toujours le même profil. Ce n'est possible que dans la limite où  $R(t)$  est beaucoup plus grand que l'épaisseur  $e$  de l'interface, ce que l'on admettra désormais. On a donc une configuration du type illustré ci-contre.



- (b) Montrer que  $\psi$  est solution de

$$2g\Gamma \frac{d^2\psi}{dr^2} + \left[ 2g\Gamma \frac{d-1}{r} + \frac{dR}{dt} \right] \frac{d\psi}{dr} - \Gamma \frac{\partial f_L}{\partial \psi} = 0, \quad (8.1)$$

où  $d = 2$  ou  $3$  est la dimension de l'espace.

- (c) En multipliant l'équation précédente par  $d\psi/dr$  et en intégrant sur l'épaisseur  $e$  de l'interface, montrer que l'on obtient l'équation d'évolution

$$\frac{dR}{dt} + 2g\Gamma \frac{d-1}{R} = 0. \quad (8.2)$$

Donner la solution de cette équation. Quel est le temps que met la boule pour disparaître ?

**2/** On veut retrouver ce résultat par une approche macroscopique en dimension  $d = 3$ . On utilise l'analyse du cours où l'on avait vu qu'une paroi en mouvement était sujette à une force de viscosité par unité de surface qui s'écrit ici  $F_{\text{vis}} = -\eta dR/dt$  où  $\eta = \sigma/(2g\Gamma)$  est le coefficient de viscosité et  $\sigma$  la tension de surface.

- (a) Déterminer l'expression de la force de tension superficielle par unité de surface  $F_{\text{tens}}$  sachant que l'énergie potentielle associée à la tension de surface est  $E_{\text{tens}} = 4\pi R^2 \sigma$ .
- (b) Après un laps de temps assez bref, la vitesse de résorption de la boule tend vers une constante. Dans ce cas l'accélération devient nulle et les deux forces  $F_{\text{vis}}$  et  $F_{\text{tens}}$  s'équilibrent. Montrer que cela conduit à l'équation (8.2).

**3/** On discute à présent une configuration légèrement modifiée : on se place toujours en dimension  $d = 3$ , mais le précipité (c.a.d. la boule à l'intérieur de laquelle le paramètre d'ordre vaut  $-\phi_c$ ) évolue maintenant en présence d'un champ extérieur uniforme  $h(\vec{r}, t) = -h_0$  ( $h_0 > 0$ ) qui favorise les spins down.

En utilisant l'approche macroscopique de la question précédente écrire l'équilibre entre  $F_{\text{vis}}$ ,  $F_{\text{tens}}$  et  $F_h$ , force magnétique par unité de surface (dont on donnera l'expression). Montrer alors qu'il existe un rayon critique  $R_c$  au delà duquel la goutte ne s'effondre pas, mais croît.