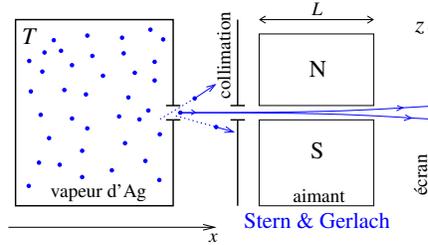


CORRECTION DE L'EXAMEN FINAL DE PHYSIQUE STATISTIQUE DU 11 MAI 2023

## Problème 1 : Taches de l'expérience de Stern & Gerlach

Schéma de l'expérience de Stern & Gerlach (1922) :



1/ • Les microétats du gaz sont caractérisés par l'ensemble des  $N$  positions et  $N$  impulsions des atomes :

$(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$  = point de l'espace des phases (en oubliant l'état de spin des atomes d'argent).

• La distribution canonique donne la densité de probabilité d'occupation des microétats :

$\rho^c(\vec{r}_1, \dots, \vec{p}_1, \dots) \propto e^{-\beta H}$ . On considère un gaz parfait, i.e. des atomes sans interaction,  $H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \vec{p}_i^2$ .

La structure de la distribution  $\rho^c(\dots) \propto \prod_i e^{-\beta \frac{1}{2m} \vec{p}_i^2}$  montre que les impulsions sont indépendantes ; on obtient immédiatement la loi marginale pour une des  $N$  vitesses (la distribution de Maxwell)  $f(\vec{v}_1) \propto e^{-\beta \frac{1}{2m} \vec{p}_1^2}$  (tous les atomes sont équivalents).

• Après normalisation

$$f(\vec{v}) = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m\vec{v}^2}{2k_B T} \right\} \quad (1)$$

(cela requiert le calcul d'une intégrale gaussienne triple, séparable,  $\int d^3\vec{v} e^{-A\vec{v}^2} = (\pi/A)^{3/2}$ ).

2/ **Distribution de  $v_x$  à l'entrée de l'appareil de Stern et Gerlach.**

a) Soit  $\mathcal{A}$  l'aire du trou. On a vu (TD sur la théorie cinétique) que le nombre d'atomes avec une vitesse  $\vec{v}$  sortant par le trou pendant  $\delta t$  est proportionnel à  $n\mathcal{A}v_x \delta t f(\vec{v})$ . C'est aussi proportionnel à la distribution des vitesses à la sortie de l'enceinte  $p_{\text{out}}(\vec{v}) \propto v_x f(\vec{v})$ .

b) La collimation sélectionne les atomes ayant une vitesse  $\approx v_x \vec{u}_x$ . La probabilité pour que la vitesse soit  $v_x \vec{u}_x$  et dans un angle solide  $d\Omega$  est  $p_{\text{coll}}(v_x) dv_x \propto p_{\text{out}}(v_x \vec{u}_x) v_x^2 dv_x d\Omega$ , d'où

$$p_{\text{coll}}(v_x) \propto v_x^3 f(v_x \vec{u}_x) \quad \Rightarrow \quad p_{\text{coll}}(v_x) = A v_x^3 e^{-\frac{mv_x^2}{2k_B T}}. \quad (2)$$

Normalisation :

$$1 = A \int_0^\infty dv_x v_x^3 e^{-\frac{mv_x^2}{2k_B T}} = 2A \left( \frac{k_B T}{m} \right)^2 \underbrace{\int_0^\infty \frac{mv_x}{k_B T} \frac{mv_x^2}{2k_B T} e^{-\frac{mv_x^2}{2k_B T}}}_{= \int_0^\infty dt t e^{-t} = \Gamma(2) = 1}$$

Finalement

$$p_{\text{coll}}(v_x) = \frac{1}{2} \left( \frac{m}{k_B T} \right)^2 v_x^3 e^{-\frac{mv_x^2}{2k_B T}} \quad \text{pour } v_x > 0 \quad (3)$$

### 3/ Profil de densité selon $Oz$ .

a) On considère les atomes de spin  $S_z = +\hbar/2$  détectés sur l'écran en  $z = +C/v_x^2$ . La densité de probabilité de  $z$  est obtenue en écrivant l'égalité des probabilités  $w(z) dz = p_{\text{coll}}(v_x) dv_x$  d'où

$$w(z) = \frac{dv_x}{dz} p_{\text{coll}}(v_x = \sqrt{C/z}) = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{C}}{z^{3/2}} p_{\text{coll}}(\sqrt{C/z}) \quad (4)$$

Finalement on obtient

$$\boxed{w(z) = \frac{b^2}{z^3} e^{-b/z} \quad \text{pour } z > 0} \quad \text{avec } b \stackrel{\text{def}}{=} \frac{mC}{2k_B T}. \quad (5)$$

Puisque  $[C] = L^3/T^2$  et  $[k_B T] = ML^2/T^2$  on a  $[b] = L$ .

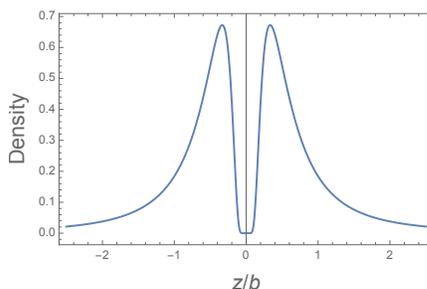
Normalisation :  $\int_0^\infty dz w(z) = \int_0^\infty \frac{bdz}{z^2} \frac{b}{z} e^{-b/z} = \int_0^\infty dt t e^{-t} = \Gamma(2) = 1$ . Ok.

b) La valeur typique (max de  $w$ ) est donnée par  $\frac{d}{dz} w(z) = 0$  i.e.  $-\frac{3}{z} + \frac{b}{z^2} = 0$ , d'où  $z_{\text{typ}} = b/3$ .

La valeur moyenne est  $\langle z \rangle = b \int_0^\infty \frac{bdz}{z^2} e^{-b/z} = b \int_0^\infty dt e^{-t} = b \Gamma(1) = b$ .

(remarquons que  $\langle z^2 \rangle = \infty$ ).

c) Le profil de densité pour les deux taches est donc  $n_{\text{écran}}(z) \propto \frac{1}{2} [w(z) + w(-z)] = \frac{b^2}{2|z|^3} e^{-b/|z|}$ .



Comment aurait-on pu compléter l'analyse (cf. Fig. 1)? On aurait pu étudier le mouvement dans la direction  $Oy$  pour essayer de déduire la forme de la tache dans le plan  $yOz$  de l'écran.

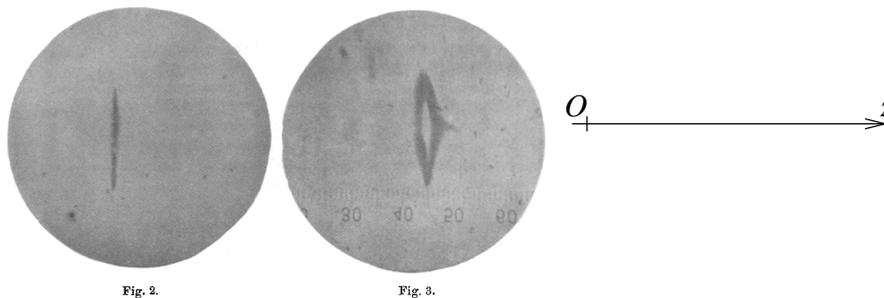


FIGURE 1 : Taches à  $\partial_z B_z = 0$  et  $\partial_z B_z \neq 0$ . Tirée de : W. Gerlach and O. Stern, « *Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld* », Zeitschrift für Physik **9**(1), 349 (1922).

## Problème 2 : Adsorption d'hydrogène sur une surface

On considère un gaz d'hydrogène (molécules  $H_2$ ) dans une enceinte *fermée* à température  $T$  fixée.

### A. Préliminaires (questions de cours)

- 1/ Fonction de partition canonique du gaz parfait monoatomique classique (fait 50 fois en cours et TD!) :  $Z = \frac{1}{N!} z_{\text{atome}}^N$  où  $z_{\text{atome}} = \frac{1}{h^3} \int_V d^3\vec{r} \int d^3\vec{p} e^{-\beta \frac{1}{2m} \vec{p}^2} = V/\lambda_T^3$  avec  $\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$ .  
On utilise Stirling  $N! \sim N^N e^{-N}$ , d'où  $Z_g \sim e^N [V/(N\lambda_T^3)]^N$ .
- 2/ Pour un gaz moléculaire  $z_{\text{atome}} \rightarrow z_{\text{molecule}} = z_{\text{atome}} \zeta(T)$  où  $\zeta(T)$  tient compte des degrés de liberté internes à la molécule (rotation, vibration, etc).  
De manière générale, la fonction de partition compte les états en leur attribuant des poids exponentiels : si  $T \nearrow$ , on comptera davantage d'états et donc  $\zeta(T)$  est une fonction *croissante* de  $T$  (c'est évident sur la définition générale  $Z = \sum_{\ell} e^{-\beta E_{\ell}}$ ).
- 3/ • Pression canonique :  $p \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\partial F}{\partial V}$ . On utilise  $F_g = -k_B T \ln Z_g = -N k_B T \ln V + (\dots)$ , d'où  $p = n k_B T$  où  $n = N/V$ .  
• Potentiel chimique :  $\mu \stackrel{\text{def}}{=} +\frac{\partial F}{\partial N}$ . Avec la forme  $Z_g \sim e^N (z/N)^N$ , i.e.  $F_g = -N k_B T [1 + \ln(z/N)]$  on obtient  $\mu = k_B T \ln(N/z)$ . Pour le gaz diatomique,  $\mu = k_B T \ln(n\lambda_T^3/\zeta(T))$ .
- Rappel** : Si on les a oubliées, on peut retrouver les définitions en utilisant le lien avec la thermodynamique : on part de l'identité fondamentale de la *thermodynamique*  $dE = T dS - p dV + \mu dN$  puis on effectue la transformation de Legendre  $F = E - TS$  afin de fabriquer une fonction de  $(T, V, N)$ , d'où  $dF = -S dT - p dV + \mu dN$ . De cette dernière équation on tire les deux définitions.
- 4/ L'ensemble grand canonique correspond à la distribution des occupations des microétats pour un système en contact avec un thermostat/réservoir de particules. La température  $T$  et le potentiel chimique  $\mu$  sont fixés (donc l'énergie et le nombre de particules fluctuent).  
La définition de la fonction de partition grand canonique est  $\Xi \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\ell} e^{-\beta(E_{\ell} - \mu N_{\ell})}$ , où la somme porte sur les microétats  $\forall$  le nombre de particules.
- 5/ La distribution grand canonique est  $P_{\ell}^g = \frac{1}{\Xi} e^{-\beta(E_{\ell} - \mu N_{\ell})}$ .  
Le nombre moyen de particules est  $\bar{N}^g = \sum_{\ell} P_{\ell}^g N_{\ell} = \frac{1}{\Xi} \sum_{\ell} N_{\ell} e^{-\beta(E_{\ell} - \mu N_{\ell})} = \frac{1}{\Xi} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\ell} e^{-\beta(E_{\ell} - \mu N_{\ell})}$ .  
Finalement on retrouve  $\bar{N}^g = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi$  (notons aussi que  $\bar{N}^g = -\frac{\partial J}{\partial \mu}$  où  $J$  est le grand potentiel).

## B. Adsorption des molécules. – ( reprend l'exo 2 du TD8)

- 1/ Pour un piège, il y a deux microétats :  
(i) piège vide,  $N_{\ell} = 0$  et  $E_{\ell} = 0$ ; (ii) piège occupé par une molécule  $N_{\ell} = 1$  et  $E_{\ell} = -\varepsilon_0$ .  
D'où  $\xi_{\text{piège}} = 1 + e^{\beta(\varepsilon_0 + \mu)}$ .  
Les  $N_P$  pièges sont indépendants, donc  $\Xi = \xi_{\text{piège}}^{N_P}$  (dém. en TD).
- 2/ Le nombre moyen de molécules adsorbées à la surface est  $\bar{N}_a^g = N_P \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \xi_{\text{piège}}$  :  
 $\bar{N}_a^g = N_P / (1 + e^{-\beta(\varepsilon_0 + \mu)})$ . La probabilité d'adsorption  $\theta = \bar{N}_a^g / N_P$  est

$$\theta = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_0 + \mu)}} \quad (6)$$

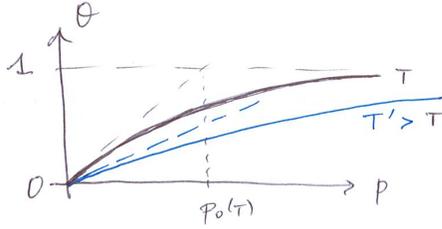
- 3/ Si  $\mu$  est le potentiel chimique du gaz, on a vu plus haut que  $e^{\beta\mu} = n\lambda_T^3/\zeta(T) = \frac{p\lambda_T^3}{k_B T \zeta(T)}$ . On a donc

$$\theta(T, p) = \frac{1}{1 + \frac{k_B T \zeta(T)}{p \lambda_T^3} e^{-\beta\varepsilon_0}} \quad (7)$$

i.e.

$$\theta(T, p) = \frac{p}{p + p_0(T)} \quad \text{avec } p_0(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{k_B T \zeta(T)}{\lambda_T^3} e^{-\varepsilon_0/k_B T} \propto T^{5/2} \zeta(T) e^{-\varepsilon_0/k_B T} \quad (8)$$

qui est une fonction *croissante* de  $T$  (produit de fonctions croissantes). Traçons deux isothermes :



- À  $p$  fixée : si  $T \nearrow$  alors  $\theta \searrow$ , l'agitation thermique favorise la désorption des molécules.
- À  $T$  fixée : si  $p \nearrow$  alors  $\theta \nearrow$ , il y a plus de chocs sur les parois et donc davantage d'occasions d'accrochage.

**C. Dissociation des molécules adsorbées.**— Lorsque les molécules  $H_2$  du gaz sont adsorbées sur une surface de platine ou de tungstène, elles se dissocient : les  $N_P$  pièges accrochent alors des *atomes* d'hydrogène.

- 1/ Le nombre total d'atomes H, accrochés à la surface, ou dans les molécules du gaz, est conservé :  $2N_g + N_a = N_H$  (constante).
- 2/ (la discussion reprend celle du chapitre du cours sur les relâchements de contraintes). Si le gaz et la surface sont séparés, la fonction de partition est  $Z_g(T, N_g)Z_a(T, N_a)$  ( $N_g$  et  $N_a$  fixés). S'ils échangent des molécules,  $N_a$  fluctue, donc :

$$Z = \sum_{N_a} Z_g(T, N_g)Z_a(T, N_a) \quad \text{avec } N_g = \frac{N_H - N_a}{2} \quad (9)$$

La somme est dominée par la valeur qui maximise  $Z_g(T, N_g)Z_a(T, N_a) = e^{-\beta[F_g(T, N_g) + F_a(T, N_a)]}$ , i.e. qui *minimise* "l'énergie libre réduite"  $\tilde{F}(N_a) = F_g(T, N_g) + F_a(T, N_a)$  :

$$\frac{\partial}{\partial N_a} [F_g(T, N_g) + F_a(T, N_a)] = 0 \quad \Rightarrow \quad -\frac{1}{2} \frac{\partial F_g}{\partial N_g} + \frac{\partial F_a}{\partial N_a} = 0$$

où l'on a utilisé  $2dN_g + dN_a = 0$ . La valeur optimale de  $N_a$  est donc fixée par la "condition d'équilibre"

$$\mu_g = 2\mu_a. \quad (10)$$

Rappelons que la "condition d'équilibre" est l'équation qui détermine la valeur la plus probable de la variable interne (variable macroscopique fluctuante).

- 3/ La probabilité d'occupation des pièges (par des atomes) fait intervenir le potentiel chimique  $\mu_a$  des atomes de surface

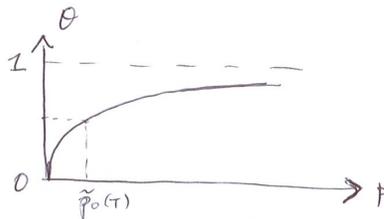
$$\theta = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_0 + \mu_a)}} \quad (11)$$

On utilise (10), d'où  $e^{\beta\mu_a} = e^{\beta\mu_g/2} = \sqrt{p \lambda_T^3 / k_B T \zeta(T)}$ , d'où la forme

$$\theta(T, p) = \frac{\sqrt{p}}{\sqrt{p} + \sqrt{\tilde{p}_0(T)}} \quad (12)$$

$$\text{où } \tilde{p}_0(T) = \frac{k_B T \zeta(T)}{\lambda_T^3} e^{-2\varepsilon_0/k_B T} = p_0(T) e^{-\beta\varepsilon_0}$$

- 4/ À basse pression, l'adsorption est favorisée par l'effet de la dissociation ( $\theta$  s'annule moins vite avec  $p$ ). La saturation à  $\theta \rightarrow 1$  est plus lente à haute pression sous l'effet de la dissociation.



### Problème 3 : Chaîne de spins d'Ising et de spins vectoriels

**A. Spins d'Ising.**— On considère une chaîne d'Ising

$$H_N = -J \sum_{n=1}^{N-1} \sigma_n \sigma_{n+1} \quad (13)$$

1/ Les microétats de la chaîne sont les  $2^N$  états des  $N$  spins,  $\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$ , où  $\sigma_n = \pm 1$ .

La fonction de partition est

$$Z_N = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} e^{-\beta H_N} \quad (14)$$

Si  $N = 1$  il n'y a pas d'interaction, d'où  $Z_1 = 2$ .

La structure 1D avec des interactions entre plus proches voisins permet de sommer sur les spins un par un :

$$Z_N = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1}} \sum_{\sigma_N} e^{\beta J \sigma_N \sigma_{N-1} - \beta H_{N-1}} = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1}} 2 \operatorname{ch}(\beta J \sigma_{N-1}) e^{-\beta H_{N-1}}$$

La présence du  $\sigma_{N-1}$  dans  $\operatorname{ch}$  ne joue aucun rôle car la fonction est *paire*, d'où  $Z_N = 2 \operatorname{ch}(\beta J) Z_{N-1}$ .  
Finalement

$$Z_N = 2^N \operatorname{ch}(\beta J)^{N-1} \quad (15)$$

2/ L'énergie moyenne est  $\overline{E}^c = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N$  :

$$\overline{E}^c = -(N-1)J \operatorname{th}(\beta J). \quad (16)$$

Dans la limite de haute température ( $k_B T \gg J$ ), on obtient  $\overline{E}^c \simeq -(N-1)J^2/k_B T \rightarrow 0$ .

Les spins voisins sont soit alignés  $\uparrow\uparrow$  ou  $\downarrow\downarrow$  (énergie  $-J$ ) soit antialignés  $\uparrow\downarrow$  ou  $\downarrow\uparrow$  (énergie  $+J$ ). Dans la limite  $k_B T \gg J$ , les fluctuations thermiques dominent l'interaction et la transition  $\uparrow \leftrightarrow \downarrow$  est saturée ; l'énergie est en moyenne nulle (moyenne de  $\pm J$  par lien). La saturation de l'énergie pour  $T \rightarrow \infty$  est propre aux systèmes dont l'espace des phases est fini (il existe un état d'énergie maximale) : de tels systèmes ne peuvent pas recevoir plus d'énergie que  $E_{\max} - E_{\min}$ . Les états deviennent équiprobables pour  $T \rightarrow \infty$  et l'énergie moyenne sature.

3/ On utilise  $\operatorname{th} x \simeq 1 - 2e^{-2x}$  pour  $x \rightarrow +\infty$  :

$$\boxed{\overline{E}^c \simeq -(N-1)J + (N-1)2Je^{-2\beta J} \quad \text{pour } T \ll J/k_B} \quad (17)$$

On identifie l'énergie fondamentale  $E_0 = -(N-1)J$ , énergie dégénérée des états  $\uparrow\uparrow \dots \uparrow$  et  $\downarrow\downarrow \dots \downarrow$ .

L'excitation  $\delta E \simeq (N-1)2Je^{-2\beta J}$  fait apparaître :

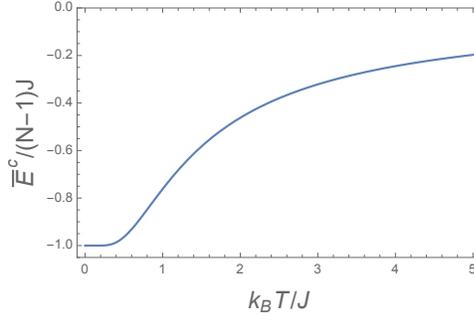
(i) l'énergie d'excitation minimale (le gap)  $\Delta = 2J$ , correspondant à une interface entre deux domaines homogènes  $\uparrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow \dots \downarrow$ , dont l'énergie est  $E_0 + \Delta$ .

(ii) La probabilité d'une telle excitation est  $\sim e^{-\beta \Delta} \ll 1$ .

(iii) On peut créer  $N-1$  telles excitations (dégénérescence du premier niveau excité).

On a expliqué les trois facteurs de  $\delta E$ .

4/ Connaissant les deux comportements limites, on trace facilement la fonction



**B. Spins vectoriels.**— On considère maintenant une chaîne de spins vectoriels en interaction

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{n=1}^{N-1} \vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1} \quad (18)$$

où  $\vec{\sigma}_n$  est un vecteur unitaire à trois composantes,  $\|\vec{\sigma}_n\| = 1$ .

1/ Intégration sur un spin :  $\int d^2\vec{\sigma} e^{\vec{\sigma} \cdot \vec{B}} = \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi e^{\|\vec{B}\| \cos\theta} = 4\pi \frac{\text{sh}\|\vec{B}\|}{\|\vec{B}\|}$ .

2/ Les microétats sont maintenant spécifiés par la donnée des directions des  $N$  spins ( $\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2 \dots, \vec{\sigma}_N$ ). Pour sommer sur les microétats, on doit intégrer sur les  $N$  directions. La fonction de partition est

$$\mathcal{Z}_N = \int d^2\vec{\sigma}_1 \dots d^2\vec{\sigma}_N e^{-\beta \mathcal{H}_N} . \quad (19)$$

On peut utiliser le même truc que pour la chaîne d'Ising et intégrer sur le spin  $\vec{\sigma}_N$  :

$$\mathcal{Z}_N = \int d^2\vec{\sigma}_1 \dots d^2\vec{\sigma}_{N-1} 4\pi \frac{\text{sh}(\beta J \|\vec{\sigma}_N\|)}{\beta J \|\vec{\sigma}_N\|} e^{-\beta \mathcal{H}_{N-1}} = 4\pi \frac{\text{sh}(\beta J)}{\beta J} \mathcal{Z}_{N-1} .$$

Comme  $\mathcal{Z}_1 = 4\pi$  on déduit

$$\mathcal{Z}_N = (4\pi)^N \left( \frac{\text{sh}(\beta J)}{\beta J} \right)^{N-1} . \quad (20)$$

3/ Une dérivation donne l'énergie moyenne

$$\overline{E}^c = -(N-1) J \mathcal{L}(\beta J) \quad \text{où } \mathcal{L}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \coth x - 1/x \quad (21)$$

est la fonction de Langevin.

4/ En utilisant  $\coth x - 1/x \simeq x/3$  pour  $x \rightarrow 0$  on obtient le comportement de haute température

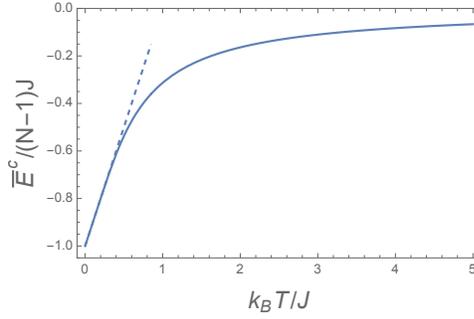
$$\overline{E}^c \simeq -(N-1) \frac{J^2}{3k_B T} \quad (22)$$

qui est similaire à celui de la chaîne d'Ising (même raison).

5/ L'énergie minimale  $E_0 = -(N-1)J$  est la même que pour la chaîne d'Ising et correspond aux états où les spins sont tous alignés. En revanche, le comportement de basse température est **très différent** : le premier terme correctif caractérisant l'excitation thermique vient du terme  $1/x$  de la fonction de Langevin, d'où

$$\boxed{\overline{E}^c \simeq -(N-1)J + (N-1) k_B T \quad \text{pour } T \ll J/k_B} \quad (23)$$

6/ En raccordant les deux comportements limites on obtient la courbe.



### C. Comparaison.

1/ Le comportement de basse  $T$  de l'énergie des spins d'Ising correspond à  $C_{\text{Ising}}(T) \sim e^{-2J/k_B T}$ , ce qui caractérise la présence d'un *gap*  $\Delta = 2J$  dans le spectre : seules des fluctuations *atypiques* (très peu probables)  $k_B T \sim J$  permettent d'exciter le système (entre  $E_0$  et  $E_0 + 2J$ , il n'y a pas d'état permettant au système de recevoir une énergie inférieure à  $2J$ ).

En revanche, pour le modèle vectoriel, la capacité calorifique tend vers une limite *finie*  $C_{\text{vect}}(T) \simeq (N-1)k_B$  pour  $T \rightarrow 0$ . Il n'y a *pas d'énergie minimale d'excitation*, une petite rotation d'un spin  $\vec{\sigma}_n$  permet de créer une excitation arbitrairement petite.

**Remarque :** cette discussion ne doit pas complètement nouvelle. La comparaison des modèles de Langevin et de Brillouin du paramagnétisme (TD5) a dû donner lieu à la même discussion.

2/ (BONUS) Le calcul des capacités calorifiques ne pose pas de difficulté. Pour alléger, considérons les capacités par spin  $c(T) = \lim_{N \rightarrow \infty} C(T)/N$

• Spins d'Ising :

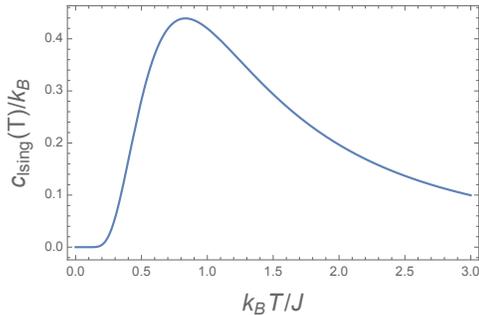
$$c_{\text{Ising}}(T) = k_B \left( \frac{J/k_B T}{\text{ch}(J/k_B T)} \right)^2 \simeq k_B \times \begin{cases} \left( \frac{J}{k_B T} \right)^2 & \text{pour } k_B T \gg J \\ \left( \frac{J}{2k_B T} \right)^2 e^{-2J/k_B T} & \text{pour } k_B T \ll J \end{cases} \quad (24)$$

• Spins vectoriels :

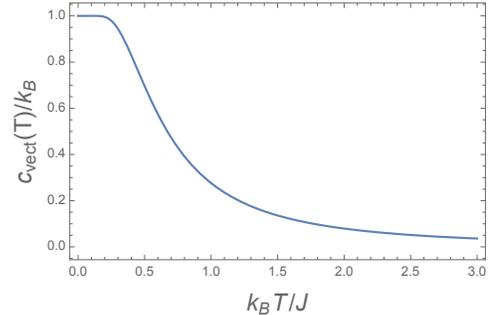
$$c_{\text{vect}}(T) = k_B \left[ 1 - \left( \frac{J/k_B T}{\text{sh}(J/k_B T)} \right)^2 \right] \simeq k_B \times \begin{cases} \frac{1}{3} \left( \frac{J}{k_B T} \right)^2 & \text{pour } k_B T \gg J \\ 1 - \left( \frac{J}{2k_B T} \right)^2 e^{-2J/k_B T} & \text{pour } k_B T \ll J \end{cases} \quad (25)$$

Dans le premier cas on a utilisé  $1 - \left( \frac{x}{\text{sh} x} \right)^2 \simeq 1 - \left( 1 + \frac{1}{6}x^2 \right)^{-2} \simeq \frac{1}{3}x^2$  pour  $x \rightarrow 0$ .

La différence entre les deux modèles est plus spectaculaire sur les capacités calorifique :



Spins d'Ising



Spins vectoriels.

## Modes magnons

Je donne une interprétation physique du comportement de basse énergie pour le modèle vectoriel, qui permet de mieux comprendre la physique. Je vais considérer des conditions aux limites périodiques dans cette note :  $\mathcal{H}_N = -J \sum_{n=1}^N \vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1}$  avec  $\vec{\sigma}_{N+1} = \vec{\sigma}_1$ . À  $T = 0$ , tous les spins sont alignés, par exemple  $\sigma_n = \vec{u}_z \forall n$ , la chaîne est dans un "état FERRO" d'énergie  $E_0 = -NJ$ . Pour la suite, en utilisant  $\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1} = 1 - \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_n - \vec{\sigma}_{n+1})^2$  il sera plus pratique de partir de la forme

$$\mathcal{H}_N = E_0 + \frac{J}{2} \sum_{n=1}^N (\vec{\sigma}_{n+1} - \vec{\sigma}_n)^2. \quad (26)$$

De faibles fluctuations thermiques ( $k_B T \ll J$ ) occasionnent de petites modulations des spins autour de la direction  $\vec{u}_z$  :

$$\vec{\sigma}_n = \vec{u}_z \sqrt{1 - \vec{s}_n^2} + \vec{s}_n \simeq \vec{u}_z + \vec{s}_n \quad \text{pour } \|\vec{s}_n\| \ll 1, \quad (27)$$

où

$$\vec{s}_n = s_n^x \vec{u}_x + s_n^y \vec{u}_y \quad (28)$$

est perpendiculaire à la direction moyenne  $\vec{u}_z$ . Dans la limite des petites déviations, on peut considérer que  $s_n^x$  et  $s_n^y$  ne sont pas contraints par la normalisation  $\|\vec{\sigma}_n\| = 1$  et il est légitime de les considérer comme deux "champs" indépendants. On peut alors introduire des modes de Fourier

$$s_n^x = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q \in \text{ZdB}} \tilde{s}_q^x e^{iqn} \quad \text{et} \quad s_n^y = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q \in \text{ZdB}} \tilde{s}_q^y e^{iqn} \quad (29)$$

avec  $q \in [-\pi, +\pi]$  (la "zone de Brillouin"  $\equiv$  ZdB). Pour un nombre  $N$  fini de spins, les  $q$  sont quantifiés et prennent  $N$  valeurs discrètes (le nombre de variables, i.e. de degrés de liberté, est conservé) : les conditions aux limites périodiques  $\vec{\sigma}_{N+1} = \vec{\sigma}_1$  sont respectées si  $e^{iqN} = 1$  i.e.  $q = 2\pi m/N$  pour  $m \in \mathbb{Z}$  (avec  $|q| < \pi$ , cela donne  $N$  valeurs de  $q$  possibles). L'hamiltonien

$$\mathcal{H}_N \simeq E_0 + \frac{J}{2} \sum_{n=1}^N (\vec{s}_{n+1} - \vec{s}_n)^2 \quad (30)$$

peut s'écrire en termes des composantes de Fourier <sup>1</sup>

$$\mathcal{H}_N \simeq E_0 + \sum_{q \in \text{ZdB}} \frac{\omega_q^2}{2} \left( |\tilde{s}_q^x|^2 + |\tilde{s}_q^y|^2 \right) \quad \text{où } \omega_q = 2\sqrt{J} |\sin(q/2)|. \quad (31)$$

On a réécrit l'hamiltonien comme une somme de termes quadratiques, i.e. on a identifié des variables associées aux "degrés de liberté indépendants". Ces nouvelles variables jouent le même rôle que les "coordonnées normales" du chapitre sur les oscillateurs : physiquement elles sont associées aux "modes magnons", des oscillations collectives de l'aimantation. Cette dernière forme de l'hamiltonien  $\mathcal{H}_N$ , avec  $2N$  termes quadratiques ( $N$  valeurs de  $q$  pour les deux composantes  $x$  et  $y$ ), permet d'appliquer le théorème d'équipartition, d'où

$$\overline{E^c} \simeq E_0 + 2N \times \frac{k_B T}{2} = E_0 + N k_B T. \quad (32)$$

On a bien retrouvé le résultat du calcul direct (et exact) précédent, Eq. (23). Le comportement linéaire de l'énergie à basse température s'interprète bien comme l'effet des petites fluctuations des spins autour d'une direction fixée (celle de l'état fondamental). Cette discussion met bien en lumière que le spectre des excitations (spectre des modes magnons) est *non gappé* : il existe des fréquences  $\omega_q$  aussi petites que l'on veut, i.e. des modes de basse énergie pouvant être excités thermiquement à température arbitrairement petite.

<sup>1</sup>On avait fait un exercice similaire pour étudier la chaîne de ressorts en cours. Il suffit d'injecter (29) dans l'hamiltonien (30) puis d'utiliser  $\sum_n e^{iqn} = N \delta_{q,0}$ .

## Pour aller encore plus loin : spins vectoriels 2D

Pour être parfaitement convaincu par l'argument, on peut considérer le cas de spins vectoriels 2D, i.e.  $\vec{\sigma}_n = \sigma_n^x \vec{u}_x + \sigma_n^y \vec{u}_y$ .

Le calcul exact de la fonction de partition est similaire, mais utilise cette fois l'intégrale  $\int d^1\vec{\sigma} e^{\vec{\sigma}\cdot\vec{B}} = \int_0^{2\pi} d\theta e^{|\vec{B}|\cos\theta} = 2\pi I_0(|\vec{B}|)$  où  $I_0(z)$  est la fonction de Bessel modifiée (vous comprenez pourquoi nous n'avons pas considéré des spins 2D!). Avec la même méthode de récurrence, on obtient

$$\mathcal{Z}_N = (2\pi)^N (I_0(\beta J))^{N-1} \quad (33)$$

Il suffit de connaître le comportement asymptotique  $I_0(z) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi z}} e^z$  pour  $z \rightarrow \infty$  pour obtenir le comportement de basse température de l'énergie moyenne :  $\mathcal{Z}_N \sim (\beta J)^{-(N-1)/2} e^{(N-1)\beta J}$  d'où

$$\overline{E}^c \simeq -(N-1)J + \frac{1}{2}(N-1)k_B T \quad \text{pour } T \ll J/k_B \quad (34)$$

Le cas des spins 2D présente un facteur 1/2 supplémentaire par rapport au cas des spins 3D.

D'autre part l'analyse des modes magnons part du développement

$$\vec{\sigma}_n = s_n \vec{u}_x + \vec{u}_y \sqrt{1 - s_n^2} \simeq s_n \vec{u}_x + \vec{u}_y \quad (35)$$

d'où

$$\mathcal{H}_N \simeq E_0 + \frac{J}{2} \sum_{n=1}^N (s_{n+1} - s_n)^2 = E_0 + \sum_{q \in \text{ZdB}} \frac{\omega_q^2}{2} |\tilde{s}_q|^2 \quad (36)$$

Il n'y a plus qu'un mode magnon par vecteur d'onde  $q$ , i.e.  $N$  termes quadratiques. Pour les spins avec conditions aux limites périodiques, on a donc bien  $\overline{E}^c \simeq -NJ + \frac{1}{2}N k_B T$  en accord avec (34).

**Remarque :** On a maintenant tout pour comprendre que pour la chaîne de spins à  $D \geq 2$  composantes on aura  $\overline{E}^c \simeq E_0 + \frac{D-1}{2} N k_B T$  (chaîne fermée).

**Remarque :** le lien entre spins vectoriels et oscillateurs n'est pas fortuit. Il est assez utilisé en magnétisme quantique et repose sur l'analogie entre le bas du spectre du moment cinétique  $\vec{S}$  (pour grand  $S$ ) avec l'oscillateur harmonique. Les opérateurs  $S_{\pm}$  jouent alors le même rôle que les opérateurs de création et annihilation. Le mapping précis est appelé la *transformation de Holstein-Primakoff*. C'est une idée assez fructueuse pour étudier la physique de basse énergie de la phase ferromagnétique.