Thermodynamique – TD n$^{\text{o}}$ 6 : Transitions de phase

Benjamin Langlois, Swann Piatecki et Guilhem Semerjian

Mars 2012

1 Le modèle de Curie-Weiss

On considère un système de N spins d'Ising, $\sigma_1, \dots, \sigma_N = \pm 1$, interagissant selon l'Hamiltonien

$$H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \ . \tag{1}$$

Ce modèle est dit de champ moyen car chaque degré de liberté interagit avec tous les autres, il n'y a donc pas de structure géométrique sous-jacente.

1. Pourquoi a-t'on divisé la constante de couplage J par le facteur $1/N$?
2. On suppose le système à l'équilibre avec un thermostat à la température T. Mettre la fonction de partition sous la forme :
$$Z = \sum_m \mathcal{N}_m^N e^{-\beta N[-\frac{J}{2}m^2 - hm]} \ . \tag{2}$$
On explicitera les valeurs que prend m dans la somme ainsi que l'expression de $\mathcal{N}_m^N$.
3. On définit l'énergie libre par spin dans la limite thermodynamique selon
$$f(\beta, h) = \lim_{N \to \infty} -\frac{1}{\beta N} \ln Z \ . \tag{3}$$
Montrer, en utilisant l'approximation de Stirling $\ln(X!) \sim X \ln X$, que l'on peut exprimer $f(\beta, h)$ sous la forme
$$f(\beta, h) = \inf_m \widehat{f}(m; \beta, h) \ , \tag{4}$$
où l'on explicitera la valeur de $\widehat{f}(m; \beta, h)$.
4. Tracer l'allure de $\widehat{f}(m; \beta, h = 0)$ en fonction de m, pour différentes températures. Quelle est la valeur de T_{c} où leur comportement change qualitativement ?
5. Quel est l'effet d'un champ $h > 0$ sur ces courbes ?
6. On définit $m_*(\beta, h)$ comme le point où le minimum est atteint dans l'équation (4). Donner l'équation implicite vérifiée par cette quantité.
7. Tracer l'allure de $m_*(\beta, h)$ en fonction de h pour deux températures, supérieure et inférieure à T_{c}.
8. On définit l'aimantation spontanée $m_{\text{sp}}(\beta) = \lim_{h \to 0^+} m_*(\beta, h)$. Tracer son allure en fonction de la température. Calculer l'exposant β qui régit le comportement de m_{sp} au voisinage de T_{c}, i.e. tel que $m_{\text{sp}}(T) \propto (T_{\text{c}} - T)^\beta$, où $\propto$ désigne un équivalent à une constante multiplicative près.
9. Tracer l'allure de l'énergie moyenne par spin, $\frac{\langle H \rangle}{N}$, en fonction de la température, pour $h = 0$. En déduire le comportement de la chaleur spécifique, $C(T) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}T} \frac{\langle H \rangle}{N}$. Quel exposant peut-on associer à son comportement critique ?

2 Le gaz de van der Waals et ses exposants critiques

L'équation d'état de van der Waals pour un gaz de N molécules s'écrit

$$\left(P + a\,\frac{N^2}{V^2}\right)(V - Nb) = NkT\ , \tag{5}$$

où a et b sont deux constantes positives.

1. Quelle est l'origine physique des différences entre cette équation d'état et celle des gaz parfaits ?
2. Tracer l'allure des courbes isothermes $P(V)$ pour différentes températures. On notera T_c la température minimale pour laquelle $P(V)$ est monotone.
3. Déterminer T_c ainsi que P_c et V_c, les coordonnées du point d'inflexion horizontal dans l'isotherme à T_c.
4. Rappeler le principe de la construction de Maxwell utilisée pour corriger le caractère non-physique des isothermes de basse température. Donner l'allure des isothermes corrigés.
5. On définit les grandeurs adimensionnées $\widehat{P} = \frac{P}{P_\mathrm{c}}$, $\widehat{V} = \frac{V}{V_\mathrm{c}}$ et $\widehat{T} = \frac{T}{T_\mathrm{c}}$. Montrer que l'équation d'état s'écrit alors

$$\left(\widehat{P} + \frac{3}{\widehat{V}^2}\right)\frac{3\,\widehat{V} - 1}{8} = \widehat{T}\ . \tag{6}$$

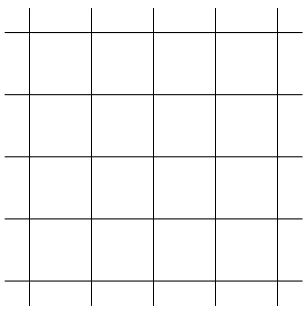
On s'intéresse maintenant aux exposants critiques qui caractérisent le comportement du fluide au voisinage de $(P_\mathrm{c}, V_\mathrm{c}, T_\mathrm{c})$.

6. L'exposant δ est défini par $|P - P_\mathrm{c}| \propto |\rho - \rho_\mathrm{c}|^\delta$ quand $T = T_\mathrm{c}$, où ρ est la masse volumique. Déterminer δ.
7. La compressiblité isotherme est $\chi_T = -\frac{1}{V}\left.\frac{\partial V}{\partial P}\right|_T$. On note $\widetilde{\chi}(T)$ sa valeur en V_c sur une isotherme à $T > T_\mathrm{c}$. Calculer l'exposant γ défini par $\widetilde{\chi}(T) \propto (T - T_\mathrm{c})^{-\gamma}$.
8. Déterminer l'exposant β défini, pour T légèrement inférieur à T_c, par $\rho_\mathrm{l}(T) - \rho_\mathrm{v}(T) \propto (T_\mathrm{c} - T)^\beta$, où ρ_l et ρ_v sont les masses volumiques du liquide et de la vapeur. Pour cela on posera $\widehat{T} = 1 - \epsilon$ et $\widehat{V} = 1 + \delta$, et l'on développera l'équation d'état sous la forme

$$\widehat{P} = 1 - 4\epsilon - \frac{3}{2}\delta^3 + 6\epsilon\delta + O(\delta^4, \epsilon\delta^2)\ . \tag{7}$$

3 La température critique du modèle d'Ising bidimensionnel

On s'intéresse au modèle d'Ising sur un réseau carré à deux dimensions, schématisé sur la figure ci-dessous.



Les degrés de liberté sont $N = L^2$ spins d'Ising $\sigma_i = \pm 1$ placés sur les sommets d'une portion de taille L du réseau. L'énergie d'une configuration est définie par

$$H(\sigma_1, \ldots, \sigma_N) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j\ , \tag{8}$$

où la somme porte sur les liens du réseau, et l'on supposera des conditions aux limites périodiques dans les deux directions. Les interactions sont ferromagnétiques, $J > 0$. L'objectif de l'exercice est de déterminer la température critique $T_{\rm c}$ du modèle.

1. Combien de termes comporte la somme dans l'équation (8) ?
2. Montrer que l'on peut écrire $e^{\beta J \sigma_i \sigma_j} = c(1 + t\sigma_i\sigma_j)$, où l'on précisera les valeurs des constantes c et t.
3. En déduire l'écriture suivante de la fonction de partition à la température inverse β :

$$Z_N(\beta) = c^{2N} \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_N} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + t\sigma_i\sigma_j) \ . \tag{9}$$

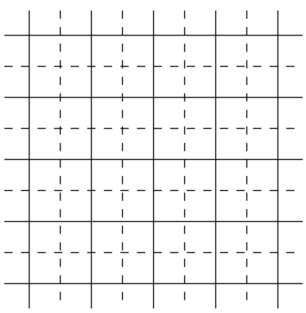
   Combien de termes comporte le développement du produit dans cette équation ?
4. On associe à chacun de ces termes un diagramme, c'est-à-dire un sous-ensemble des liens du réseau, correspondant aux facteurs dans lesquels on a retenu $t\sigma_i\sigma_j$ dans le développement. Caractériser les diagrammes qui contribuent dans l'équation (9). On pourra proposer un raisonnement graphique.
5. **Développement de haute température**. On ordonne ce développement en puissances de t, en définissant des coefficents $a_{N,n}$ selon

$$Z_N(\beta) = (2c^2)^N \sum_{n=0}^{\infty} a_{N,n} t^n \ . \tag{10}$$

   Justifier le nom de développement de haute température donné à cette série. On notera dans la suite $A_N(x) = \sum_n a_{N,n} x^n$.
6. Calculer les valeurs de $a_{N,n}$ pour $n = 0, 1, \dots, 6$, et donner une définition, sans calcul, du coefficient $a_{N,n}$ pour n quelconque.
7. **Développement de basse température**. Quel est l'ordre de grandeur de la température qui discrimine les "hautes" des "basses" températures ?
8. Quelles sont les configurations qui minimisent l'Hamiltonien (8) ? Donner leur nombre et leur énergie E_0.
9. Quelle est l'énergie $E_1 > E_0$ des premiers niveaux excités ? Décrire les configurations correspondantes, et donner leur nombre.
10. Même question pour le niveau suivant, d'énergie $E_2 > E_1$.
11. En déduire le développement de basse température suivant,

$$Z_N(\beta) = 2e^{2N\beta J} \left(b_{N,0} + b_{N,4} \left(e^{-2\beta J}\right)^4 + b_{N,6} \left(e^{-2\beta J}\right)^6 + o\left(\left(e^{-2\beta J}\right)^6\right)\right) \ , \tag{11}$$

   où l'on précisera les valeurs des coefficients $b_{N,n}$. Les comparer aux coefficients $a_{N,n}$ du développement de haute température.
12. Montrer que le développement de basse température peut s'écrire $Z_N(\beta) = 2e^{2N\beta J} A_N(e^{-2\beta J})$, où $A_N(x)$ est la fonction définie à la question 5. Pour cela on pourra considérer les diagrammes du réseau dual, schématisé en pointillés sur la figure suivante.



13. **Température de transition**.
    On note $f(\beta) = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \log Z_N(\beta)$ l'énergie libre par spin dans la limite thermodynamique. Déduire des développements de haute et basse température deux expressions de $f(\beta)$; on notera $g(x) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \log A_N(x)$.
14. On admet que le modèle présente une unique température critique, et que donc $f(\beta)$ est singulière en un unique point β_c. Montrer que

$$\beta_c J = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \ . \tag{12}$$