Université Paris-Sud Orsay M1 Master de Physique Travaux Dirigés

PHÉNOMÈNES COLLECTIFS COMPLEXES



texte disponible en ligne:

http://lptms.u-psud.fr/userpage/nicolas_pavloff/enseignement/

Année 2013-14

Phénomènes collectifs complexes

1	Rappels sur les transitions de phases, deux exemples	2
2	Champ moyen	6
3	Théorie de Landau des cristaux liquides	10
4	Théorie de Ginzburg–Landau	14
5	Divers exercices	18
6	Dimension critique inférieure	21
7	Lois d'échelle	23
8	Transition tri-critique	28
9	Percolation	31
10	Aspects dynamiques	34

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

Rappels sur les transitions de phases, deux exemples

1.1 Modèle d'Ising unidimensionnel par la matrice de transfert

On s'intéresse au modèle d'Ising unidimensionnel avec conditions aux limites périodiques, en présence d'un champ magnétique, régi par le hamiltonien

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \ \sigma_{N+1} \equiv \sigma_1$$

On posera $h \equiv H/k_{\rm B}T$ et $\beta \equiv J/k_{\rm B}T$. Ce qui suit est tiré de R.J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics* (Academic Press, 1982)

1. Montrer que l'on peut écrire la fonction de partition sous la forme $Z = \text{Tr}\mathsf{T}^N$ où T est une matrice 2×2 que l'on choisira symétrique.

2. Déterminer le spectre $\{\lambda_+, \lambda_-\}$ (avec $\lambda_+ > \lambda_-$) de T et montrer que

$$\mathsf{T} = P.D.P^{-1}$$

où

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0\\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

et $\cot 2\theta \equiv e^{2\beta} \sinh h, \ 0 \le \theta < \frac{\pi}{2}.$

3. Montrer que l'on peut écrire l'aimantation locale moyenne sous la forme

$$\langle \sigma_i \rangle = Z^{-1} \mathrm{Tr}(\mathsf{S}.\mathsf{T}^N)$$

où S est une matrice 2×2 que l'on précisera.

4. Exprimer à l'aide des matrices S et T la corrélation $\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle$ (r > 0) sous la forme d'une trace. En déduire la fonction de corrélation connexe

$$g(r) \equiv \langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_{i+r} \rangle$$

dans la limite thermodynamique en fonction de θ , λ_{-}/λ_{+} et r.

5. Définir puis exprimer la longueur de corrélation ξ en fonction de la variable $\tau \equiv e^{-2\beta}$. Montrer que l'aimantation se met sous la forme

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{h}{\sqrt{h^2 + \tau^2}}$$

lorsque $\tau \to 0$ et $h \to 0$. Identifier les valeurs des exposants critiques ν, δ, β à l'approche de $T \to 0$ et $h \to 0$ définis par

$$\xi \sim \tau^{-\nu}, \quad \langle \sigma_i \rangle \sim h^{1/\delta} \Phi_1(\tau.h^{-1/(\beta\delta)})$$

où Φ_1 est une fonction sans dimension que l'on précisera. Identifier par ailleurs l'exposant η défini par

$$g(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \Phi_2(r/\xi)$$

lorsque h = 0 (d = 1 désigne la dimension de l'espace ambiant). Identifier enfin l'exposant donnant la divergence de la capacité calorifique à volume constant $C_V \sim \tau^{-\alpha}$. Calculer $\alpha - 2 + \nu d$.

6. On se place en champ nul. Montrer que l'on peut obtenir la probabilité $P_N(m)$ que l'aimantation locale moyenne ait la valeur m pour un système à N sites, à l'aide de ce qui précède. Ne pas effectuer les calculs explicitement à ce stade. Déterminer $P_N(m)$ par la méthode la plus simple lorsque $N \gg 1$.

1.2 Transition liquide-gaz, fluides réels

On s'intéresse à un système de N particules classiques de masse m enfermées dans un volume V, l'ensemble étant en contact avec un thermostat à la température T ($\beta \equiv (k_{\rm B}T)^{-1}$). On dénotera par $n \equiv N/V$ la densité volumique de particules ($v \equiv n^{-1}$) et par λ la longueur d'onde thermique de De Broglie.

L'énergie potentielle d'interaction de deux particules séparées de \mathbf{r} est notée $V(\mathbf{r})$. Pour fixer les idées, on aura recours à l'une des trois formes suivantes, sensées décrire avec fidélité les interactions dans les fluides réels :

$$V_{1}(\mathbf{r}) = \begin{cases} +\infty & \text{si } r < \sigma \\ 0 & \text{si } r \ge \sigma \end{cases}$$
$$V_{2}(\mathbf{r}) = \begin{cases} +\infty & \text{si } r < \sigma \\ -\varepsilon & \text{si } \alpha \sigma \ge r \ge \sigma \\ 0 & \text{si } r \ge \alpha \sigma \end{cases}$$
$$V_{3}(\mathbf{r}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right]$$
(1.1)

Le paramètre α qui donne la largeur du puits du potentiel (2) est $\alpha > 1$. L'échelle d'énergie $\varepsilon > 0$ donne la profondeur du puits pour (2) et (3). La paramètre σ décrit le rayon de répulsion à courte distance. Le potentiel (1) décrit d'ailleurs un ensemble de sphères dures impénétrables de diamètre σ . Le potentiel (3) est le potentiel de Lennard-Jones.

1.2.1 Équation d'état et développement du viriel

L'objectif de cette partie est d'obtenir l'équation d'état sous la forme d'un développement en puissances de la densité :

$$\beta P = B_1 n + B_2 n^2 + B_3 n^3 + \dots \tag{1.2}$$

Dans cette partie, on se placera dans l'ensemble grand-canonique, où c'est le potentiel chimique μ (et non le nombre de particules) qui est fixé ; la notation n désigne ici le rapport $\langle N \rangle / V$. On posera $\zeta \equiv \lambda^{-3} e^{\beta \mu}$. Cette grandeur a les dimensions d'une densité volumique.

1/ Citer des exemples concrets de fluides correspondant aux potentiels (1) et (3). Quels sont les ordres de grandeurs typiques de σ et de ε ?

2/ Montrer qu'à partir d'un développement de la grande fonction de partition à l'ordre ζ^p on peut avoir accès à P et à n à l'ordre ζ^p .

3/ Établir que $B_1 = 1$ et que $B_2 = -\frac{1}{2} \int d^3 r f(\mathbf{r})$, avec $f(\mathbf{r}) \equiv e^{-\beta V(\mathbf{r})} - 1$ (fonction de Mayer). Calculer explicitement B_2 pour les potentiels (1) et (2). Tracer $T \mapsto B_2(T)$ dans ce dernier cas. Quel est le petit paramètre adimensionné du développement du viriel.

4/ Si l'on procède à une détente isenthalpique du gaz, celui-ci va-t-il se refroidir ou se réchauffer. Connaissez-vous une application?

5/ Dans l'étude des fluides réels, on prend souvent comme équation de départ l'équation d'état de van der Waals,

$$\beta P = \frac{n}{1 - nb} - \beta a n^2 \tag{1.3}$$

Donner le sens physique de a et b. Montrer que cette forme est compatible avec le développement du viriel, à condition d'identifier a et b avec les grandeurs caractériques du potentiel. Procéder à cette identification explicitement dans le cas du potentiel (2).

1.2.2 Fonction de corrélation de paire

On introduit l'observable densité locale $n(\mathbf{x}) \equiv \sum_{i=1}^{N} \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i)$. On définit la fonction de corrélation de paire définie par

$$g^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{n^2} \langle n(\mathbf{x}) n(\mathbf{y}) \rangle$$
(1.4)

1/ À quelle condition pourra-t-on écrire que

$$g^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \stackrel{?}{=} g(||\mathbf{x} - \mathbf{y}||) \tag{1.5}$$

2/ Calculer $\int d^3 r g(\mathbf{r})$. Que représente $4\pi r^2 g(r) dr$?

3/ Montrer que

$$\beta P = n - \frac{\beta n^2}{6} \int \mathrm{d}^3 r \; r \; \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} g(r) \tag{1.6}$$

Interpréter le signe de la correction à l'équation d'état des gaz parfaits.

4/ Tracer $r \mapsto g(r)$ pour un gaz parfait, puis pour un gaz tel que l'argon (pour l'argon, on effectuera le tracé pour deux températures distinctes).

5/ Montrer que, dans les mêmes conditions qu'au **I.3**, on peut développer g sous la forme

$$g(\mathbf{r}) = e^{-\beta V(\mathbf{r})} (1 + ng_1(\mathbf{r}) + n^2 g_2(\mathbf{r}) + ...)$$
(1.7)

Montrer que $g_1(\mathbf{r}) = \int d^3r' f(\mathbf{r}')f(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Calculer g_1 explicitement dans le cas (1), et tracer g à l'ordre n^1 dans ce cas.

6/ On pose $G(\mathbf{r}) \equiv g(\mathbf{r}) - 1$. Tracer qualitativement $q \mapsto S(q) \equiv n \int d^3 r \, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{r})$.

1.2.3 Diagramme des phases

1/ Tracer les courbes isothermes $v = n^{-1} \mapsto P(v)$ pour un gaz de van der Waals, pour plusieurs valeurs de la température. On rappelle que $P(v) = \frac{k_{\rm B}T}{v-b} - \frac{a}{v^2}$.

2/ Montrer que la compressibilité isotherme $\chi_T \equiv \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial P}\Big|_{T \text{ cste}}$ est une grandeur strictement positive. Au vu de ce résultat, certaines courbes de 1/ correspondant à une température inférieure à une certaine température critique T_c présentent une anomalie, laquelle? On y remédie habituellement en substituant à une partie de la courbe théorique un segment horizontal. Quel critère dicte la position de ce segment?

3/ On appelle P_c , v_c et T_c les coordonnées du point critique. Que vous inspirent le tableau et le graphe ci-dessous?

fluide	$T_c[K]$	$v_c \ \mathrm{cm}^3/\mathrm{mol}$	$P_{c}[10^{5} \text{ Pa}]$	$\beta_c P_c v_c$
He	5,2	$57,\!8$	2,26	0,30
Ne	44,4	41,7	26,9	0,31
H_2	33,1	65,0	12,8	0,31
N ₂	126,1	90,1	$33,\!5$	0,29
O_2	154,4	74,4	49,7	0,29
CH_4	191,1	98,8	45,8	0,29
CO_2	304,2	94,0	72,9	0,27
H ₂ O	647,4	56,3	218,3	0,23
NH ₃	405,5	72,3	111,3	0,24



Tracé de T/T_c en fonction de n/n_c pour différents gaz.

4/ Soit $\Omega(V,T,\mu) = F - \mu \langle N \rangle$ le grand potentiel, et $\omega(n = \langle N \rangle (V,T,\mu)/V,T,\mu)$ le grand potentiel par unité de volume. L'équation $\frac{\partial \omega}{\partial n} = 0$ détermine la relation entre μ et T le long de l'isochore critique n_c . Justifier de plus que l'on ait

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial n^2}(n_c, T_c, \mu_c) = 0, \quad \frac{\partial^3 w}{\partial n^3}(n_c, T_c, \mu_c) = 0 \tag{1.8}$$

Exprimer la pression critique en fonction de $\omega(n_c, T_c, \mu_c)$.

5/ On pose $\phi \equiv n - n_c$. Quelle sera la forme générale du développement de $\omega(n,T,\mu)$ en puissances de ϕ ?

6/ Montrer que χ_T diverge comme $|T - T_c|^{-\gamma}$, avec γ à déterminer, au voisinage du point critique (lorsque l'on se trouve sur l'isochore critique).

7/ Vérifier que $G(\mathbf{r})$ définie en 6/ s'exprime simplement en termes des fluctuations locales de densité $\langle n(\mathbf{0})n(\mathbf{r})\rangle - \langle n(\mathbf{0})\rangle\langle n(\mathbf{r})\rangle$. Relier $\int d^3r G(\mathbf{r})$ d'une part à $S(\mathbf{0})$, d'autre part à χ_T . On peut montrer que l'intensité de la lumière (de longueur d'onde λ_0) diffusée par le gaz dans la direction θ est proportionnelle à $S(q = 4\pi \sin(\theta/2)/\lambda_0)$. Une théorie approchée due à Ornstein et Zernike prédit

$$S(q) = n\chi_T \frac{k_{\rm B}T}{1 + Kq^2 n_c^2 \chi_T^2}$$
(1.9)

où K est une constante. Cela permet-il de rendre compte du phénomène d'opalescence critique?

8/ Montrer que la différence de densité dans la phase liquide et dans la phase gazeuse tend vers 0 comme $|T - T_c|^{\beta}$, avec β à déterminer.

Champ moyen

2.1 Le modèle d'Ising antiferromagnétique

Un cristal antiferromagnétique est constitué d'ions magnétiques répartis sur deux sous-réseaux a et b qui s'interpénètrent, tels que les ν plus proches voisins d'un ion du sous-réseau a soient situés sur les noeuds du sous-réseau 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 \vec{M}_a et \vec{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) S_i $(1 \le i \le N)$ ne peut prendre que les valeurs ± 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. Le hamiltonien des spins est donc de la forme

$$\mathcal{H} = +J \sum_{\langle i \in a, j \in b \rangle} S_i S_j - B \sum_{i \in a} S_i - B \sum_{j \in b} S_j$$
(2.1)

où $i \in a$ (resp. $j \in b$) indique que le somme sur les spins i appartenant au sous-réseau a (resp. 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 :

$$M_a \equiv \langle \sum_{i \in a} S_i \rangle, \quad M_b \equiv \langle \sum_{i \in b} S_i \rangle$$

et on posera $S_a = M_a/N_a$ et $S_b = M_b/N_b$.

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 dégénerescence de cet état?

3. Définir et effectuer l'approximation de champ moyen dans le hamiltonien \mathcal{H} de l'équation (2.1). Montrer que, dans le cadre de cette approximation, la forme champ moyen du hamiltonien est

$$\mathcal{H}_{cm} = \mathcal{H}_0 + \sum_{i \in a} h_i + \sum_{j \in b} h_j$$

où h_i et h_j sont des hamiltoniens à un spin que l'on précisera, ainsi que le termne constant \mathcal{H}_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, S_a et S_b .

5. Une méthode autocohérente pour déterminer les valeurs de S_a et S_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 S_a et S_b en utilisant comme hamiltonien \mathcal{H}_{cm} . Écrire les équations qui déterminent ces valeurs autocohérentes. Commenter la similarité des résultats produits par les deux méthodes.

6. On considère d'abord le cas du champ nul (B = 0). Écrire les équations d'autocohérence obtenues en 5, et montrer qu'elles impliquent $S_a = -S_b$ (on posera alors $S = S_a$). La propriété $S_a = -S_b$ reste-t-elle vraie hors l'approximation de champ moyen? En déduire l'équation unique qui détermine S, 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 $S \neq 0$ (phase antiferromagnétique) alors que pour $T \geq T_N$, seule S = 0 est solution. Donner l'expression de T_N . Montrer que pour $T < T_N$, la solution S = 0 n'est pas physique.

7. 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 S, en fonction de la température, à l'ordre le plus bas dans l'écart relatif $\varepsilon \equiv \frac{T_N - T}{T_N} > 0$. En déduire la valeur de l'exposant critique régissant le comportement de S au voisinage de T_N . Pour T fixée, voisine de T_N , développer l'énergie libre en puissance de S, jusqu'à l'ordre S^4 . Représenter schématiquement l'énergie libre en fonction de S, sur tout le domaine de variation de S, pour $T > T_N$ et pour $T < T_N$.

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

9. 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

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B}\Big|_{B=0}$$

Commenter le comportement de χ lorsque $T \to T_N^+$. 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 χ en fonction des susceptibilités partielles $\chi_a = \frac{\partial S_a}{\partial B}\Big|_{B=0}$ et $\chi_b = \frac{\partial S_b}{\partial B}\Big|_{B=0}$. Écrire les équations couplées qui déterminent χ_a et χ_b . Exprimer ces susceptibilités partielles en fonction du paramètre d'ordre en champ nul S. En déduire l'expression de χ en fonction de l'écart relatif ε à l'ordre le plus bas en ε . Calculer la limite de χ lorsque $T \to T_N^-$ ($\varepsilon \to 0^+$). Dessiner schématiquement la variation de χ avec T au voisinage de T_N . Comparer ce comportement à celui obtenu dans le cas ferromagnétique.

10. Finalement, on souhaite déterminer le comportement de la susceptibilité χ 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 χ à partir de l'expression champ moyen obtenue en 9. Dans l'autre limite, on utilisera un développement haute température : après avoir démontré que

$$\chi = \frac{1}{k_B T} \left\langle \left(\sum_{i \in a, b} S_i\right)^2 \right\rangle \Big|_{B=0}$$

on développera le numérateur et le dénominateur en puissances de T^{-1} , en se limitant au premier ordre. En déduire l'expression de χ 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.

2.2 Théorie de Maier-Saupe pour la phase nématique des cristaux liquides

Les cristaux liquides sont composés de longues molécules (comme des tiges). 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.

On ne s'intéresse ici qu'à la transition isotrope-nématique. À haute température, le cristal liquide se comporte comme un fluide isotrope. En baissant la température apparaît alors la phase nématique qui présente un ordre orientationnel à longue distance. 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 (on supprime les fluctuations des positions en préservant l'invariance par translation). Dans le cadre de ce modèle, le hamiltonien régissant les interactions entre molécules a pour expression

$$\mathcal{H} = -\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j)^2 \tag{2.2}$$

où \mathbf{u}_i est le vecteur unité caractérisant l'orientation de la molécule i (on notera u_i^{μ} , $\mu = 1,2,3$ ses composantes dans une base de l'espace à 3 dimensions), et la somme sur $\langle i,j \rangle$ porte sur les paires de plus proches voisins sur un réseau cubique tridimensionnel.

1. Justifier par des arguments qualitatifs la forme du hamiltonien. Quel est l'ordre de grandeur de ε ? Quel type d'expérience permettrait de distinguer les deux phases?

2. En chaque site *i* on définit le tenseur σ_i par

$$\sigma_i^{\mu\nu} \equiv \frac{3}{2} u_i^{\mu} u_i^{\nu} - \frac{1}{2} \delta^{\mu\nu}$$
 (2.3)

Montrer que le hamiltonien prend la forme

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \operatorname{Tr}(\sigma_i \sigma_j) + \text{cste}$$
(2.4)

On précisera l'expression de J en fonction de ε .

3. On pose $Q \equiv \langle \sigma_i \rangle$. Définir et 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 σ_i . Peut-on choisir Q comme paramètre d'ordre?

4. Montrer que Tr(Q) = 0. Justifier que Q doit avoir la forme matricielle suivante (dans une base où le directeur est selon la troisième direction):

$$Q = \begin{pmatrix} -\frac{q}{2} & 0 & 0\\ 0 & -\frac{q}{2} & 0\\ 0 & 0 & q \end{pmatrix}$$
(2.5)

5. Montrer que

$$\mathcal{H}_{cm} = \frac{9}{2}JNq^2 - 9Jq\sum_i P_2(\cos\theta_i) \tag{2.6}$$

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

6. 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 q comprend un terme cubique. En déduire l'ordre de la transition.

7. Tracer qualitativement q en fonction de T.

8. Par minimisation de l'énergie libre, montrer que q satisfait la condition d'autocohérence

$$q = \frac{\int_{-1}^{1} dx \ P_2(x) e^{\beta 9 J q P_2(x)}}{\int_{-1}^{1} dx \ e^{\beta 9 J q P_2(x)}}$$
(2.7)

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

9. Montrer que l'énergie interne du système est $E = -\frac{9}{2}Jq^2$. Tracer qualitativement la capacité calorifique en fonction de la température.

10. Résolution numérique. – Proposer un algorithme de résolution numérique de l'équation donnant q en fonction de T.

2.3 Ferro-électriques ferro-magnétiques

On se propose d'étudier dans le cadre de la théorie de Landau les propriétés d'un système qui présente une transition ferromagnétique du second ordre à une température T_m puis une transition ferroélectrique du second ordre à une température $T_e < T_m$. On a donc:

Pour $T_e < T_m < T$ le système est paramagnétique et paraélectrique. Pour $T_e < T < T_m$ le système est ferromagnétique et paraélectrique. Pour $T < T_e < T_m$ le système est ferromagnétique et ferroélectrique.

1/ On suppose que les orientations de l'aimantation M et de la polarisation P sont parallèles et que T_m et T_e sont proches. Montrer qu'au quatrième ordre en M et P l'énergie libre de Landau s'écrit :

$$F_L(T,M,P) = F_0(T) + \frac{1}{2} \left(a_1(T-\theta_1)M^2 + a_2(T-\theta_2)P^2 \right) + \frac{1}{4} (b_1M^4 + b_2P^4 + 2cM^2P^2) + \frac{1}{4} (b_1M^4 + b_2P^4 +$$

où les a_i , les b_i , les θ_i et c sont des constantes.

2/ Déterminer T_m et T_e et donner les expressions de M et P en fonction de T. Quelles relations doivent satisfaire $a_1, a_2, b_1, b_2, c, \theta_1$ et θ_2 pour que les diverses phases soient stables?

3/ Montrer que M est continue à T_e , mais que dM/dT ne l'est pas.

4/ Écrire les équations donnant $\partial M/\partial B$, $\partial P/\partial B$, $\partial P/\partial E$ et $\partial M/\partial E$ où H et E sont des champs externes magnétique et électrique. Déterminer le comportement de ces 4 quantités lorsque $T \to T_e^-$, à champ nul.

Théorie de Landau des cristaux liquides

Un cristal liquide est formé de molécules allongées que l'on peut se représenter comme des bâtonnets. L'orientation du bâtonnet α est repérée par un vecteur unitaire $\vec{\nu}^{(\alpha)}$. Le bâtonnet n'ayant pas de "tête" ou de "queue", on ne peut choisir indifféremment $\vec{\nu}^{(\alpha)}$ ou $-\vec{\nu}^{(\alpha)}$ pour repérer son orientation: il en résulte que la moyenne $\langle \vec{\nu}^{(\alpha)} \rangle$ prise sur un petit volume est nulle, même si les bâtonnets ont une orientation privilégiée dans l'espace (comme illustré sur la figure ci-contre). Pour définir un paramètre d'ordre orientationnel on utilise donc un tenseur Q quadratique en $\vec{\nu}^{(\alpha)}$:

$$Q_{i,j}(\vec{r}) = \left\langle \nu_i^{(\alpha)} \nu_j^{(\alpha)} - \frac{1}{3} \,\delta_{i,j} \right\rangle \,. \tag{3.1}$$

Dans cette expression la moyenne est à comprendre comme $\langle \cdots \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} (\cdots)$ où la somme porte sur les N molécules contenues dans un petit volume autour du point \vec{r} . La dépendance en \vec{r} ne sera prise en compte que dans la section 3.3.

Schéma de l'ordre orientationnel dans la phase nématique d'un cristal li-

quide.

Dans (3.1), $\nu_i^{(\alpha)}$ est la $i^{\text{ème}}$ composante $(i \in \{1,2,3\})$ du vecteur normé $\vec{\nu}^{(\alpha)}$ sur un trièdre $\{\vec{e_1},\vec{e_2},\vec{e_3}\}$ fixe dans le laboratoire.

3.1 Propriété du paramètre d'ordre Q

1/ Montrer que si l'orientation des vecteurs $\vec{\nu}^{(\alpha)}$ est distribuée de manière isotrope alors $Q_{ij} = 0$. Pour cela, plutôt que de moyenner sur plusieurs molécules comme dans (3.1), on pourra ne considérer qu'un seul vecteur $\vec{\nu}$ d'orientation aléatoire et isotrope et moyenner sur son orientation.

2/ Montrer que Tr(Q) = 0. On en déduit que l'on peut écrire les 3 valeurs propres de Q avec seulement 2 paramètres réels (notés S et η ci-dessous). Dans un système de coordonnées qui diagonalise Q on choisit d'écrire

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}S & 0 & 0\\ 0 & -\frac{1}{3}S + \eta & 0\\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}S - \eta \end{pmatrix}, \quad \text{avec} \quad S \ge \eta \ge 0.$$
(3.2)

Très souvent $\eta = 0$. Dans ce cas on dit que le cristal liquide est uniaxe (sinon il est biaxe).

(a) Pour comprendre à quoi cela correspond, considérer le cas schématique d'un seul bâtonnet dont le vecteur directeur $\vec{\nu}$ peut prendre 4 valeurs: $\vec{e_1}$ ou $-\vec{e_1}$ avec une probabilité p/2 et $\vec{e_2}$ ou $-\vec{e_2}$ avec une probabilité (1-p)/2. A priori $p \in [0,1]$ mais on se place dans la configuration où $\frac{1}{2} , de sorte que la direction <math>\vec{e_1}$ est toujours privilégiée par rapport à $\vec{e_2}$.



Montrer que dans ce cas Q est diagonal dans le référentiel $\{\vec{e_1}, \vec{e_2}, \vec{e_3}\}$ et donner les valeurs de S et de η . Discuter les notions d'uniaxialité et de biaxialité sur cet exemple.

(b) Dans le cas où η = 0, montrer que si l'on note n la direction privilégiée d'orientation des bâtonnets (n est le vecteur propre associé à la valeur propre la plus élevée de Q) on a l'expression valable dans tous les référentiels:

$$Q_{ij} = S(n_i n_j - \frac{1}{3}\delta_{i,j}) . (3.3)$$

Dans une phase isotrope S = 0, et dans une phase nématique $0 \le S \le 1$ mesure le degré d'alignement des molécules. Le vecteur \vec{n} est appelé le **directeur**.

3/ En présence d'un champ magnétique $\vec{H}(\vec{r})$ le cristal liquide développe un moment magnétique $\vec{M}(\vec{r})$ avec $M_i = \sum_{j=1}^3 \chi_{ij} H_j$, où χ_{ij} est le tenseur de susceptibilité magnétique qui se met sous la forme $\chi_{ij} = \chi_s \delta_{ij} + \chi_a Q_{ij}$, où χ_s et χ_a sont respectivement la composante isotrope et anisotrope de la susceptibilité magnétique. Montrer que dans le cas d'un cristal liquide uniaxe la contribution correspondante à l'énergie libre est

$$F_{\rm mag} \stackrel{\rm def}{=} -\frac{\mu_0}{2} \int d^3 r \, \vec{M} \cdot \vec{H} = -\frac{\mu_0}{2} \int d^3 r \left(\chi_{\rm s} H^2 + \chi_{\rm a} S \left[\left(\vec{n} \cdot \vec{H} \right)^2 - \frac{1}{3} H^2 \right] \right) \,. \tag{3.4}$$

3.2 Théorie de Landau de la transition nématique-isotrope

On veut construire une énergie libre de Landau $F_L(Q)$ pour un cristal 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: $Tr(Q^2)$, $Tr(Q^3)$... En l'absence de champ extérieur on écrit donc la densité d'énergie libre sous la forme:

$$\frac{F_L(Q,T)}{V} = f_L(Q,T) = \frac{3a}{4} \times (T - T^*) \operatorname{Tr}(Q^2) - \frac{3b}{2} \operatorname{Tr}(Q^3) + \frac{9c}{16} \left(\operatorname{Tr}(Q^2)\right)^2 + \cdots$$
(3.5)

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

1/ Exprimer f_L en fonction de S pour un cristal liquide uniaxe. Expliquer pourquoi il n'y a pas de terme Tr(Q) dans (3.5), ni de terme en $Tr(Q^4)$.

2/ Montrer que l'énergie libre (3.5) décrit une transition du premier ordre entre une phase isotrope et une phase nématique. Pour traiter cette question il est conseillé de s'aider de graphes décrivant le comportement de F_L en fonction de ${\cal S}$ pour plusieurs valeurs fixées de T. Discuter les résultats expérimentaux présentés figure ci-contre, correspondant à des mesures effectuées sur le 5CB qui est un composé organique dont la structure chimique est la suivante $C_5H_{11} \rightarrow ()$ -CNExprimer 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 $T^* < T < T_c$.



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

3/ 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 $f_L(S,T)$ obtenue en **B.1** un terme $-h \times S$, où l'on donnera l'expression de h en fonction de H, μ_0 et χ_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 Δn 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: $C_4H_9 - \sqrt{2} - N = CH - \sqrt{2} - O - CH_3$



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).

3.3 Déformation statique dans un cristal nématique

On se place dans une configuration nématique uniaxe où le paramètre S est homogène avec S = 1 et où le directeur \vec{n} peut dépendre de la position. En utilisant des raisonnements généraux on peut justifier l'écriture suivante de l'énergie libre:

$$F_{L}\left[\vec{n}(\vec{r}), \vec{H}(\vec{r})\right] = \int d^{3}r \left\{ \frac{1}{2} K \left[(\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^{2} + |\vec{\nabla} \wedge \vec{n}|^{2} \right] - \frac{\mu_{0}}{2} \chi_{a} (\vec{H} \cdot \vec{n})^{2} \right\} , \qquad (3.6)$$

où K est une constante positive.

1/ Justifier la forme du couplage magnétique dans (3.6). Pourquoi la contribution (3.5) n'apparaît-elle pas?

2/ 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 certains seuil $H_{\rm crit}$, les propriétés optiques du système changent brutalement. C'est cet effet, observé pour la première fois par Frédericksz 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_yL_z . On repère l'orientation du directeur \vec{n} par un angle $\theta(x)$: $\vec{n} = \cos \theta(x) \vec{e}_x + \sin \theta(x) \vec{e}_y$, avec $\theta(0) = \theta(L) = 0$. Le champ magnétique

est uniforme et vaut $\vec{H} = H \vec{e}_y$.



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

- (a) Écrire l'énergie libre par unité d'aire de paroi [c'est à dire $F_L/(L_yL_z)$] comme une fonctionnelle de $\theta(x)$.
- (b) Montrer que l'orientation $\theta(x)$ obéit à l'équation

$$\xi^2 \frac{\mathrm{d}^2 \theta}{\mathrm{d}x^2} + \sin \theta \cos \theta = 0 \;. \tag{3.7}$$

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

(c) On cherche une solution non triviale de (3.7) où la valeur maximale de $\theta(x)$ n'est pas nulle, mais reste faible, de sorte que $|\theta(x)| \ll 1$. Donner, en résolvant (3.7) 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 Frédericksz:

$$H_{\rm crit} = \frac{\pi}{L} \sqrt{\frac{K}{\mu_0 \,\chi_{\rm a}}} \,. \tag{3.8}$$

(d) Pour les courageux: résoudre cette question en cherchant une intégrale première de (3.7) et en vous inspirant du cours.

Théorie de Ginzburg–Landau

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 (c'est ce qu'on appelle en théorie des champs le "couplage minimal"). Cela permet de décrire très correctement les riches effets causés par l'interaction mutuelle d'un supraconducteur et d'un champ magnétique.

4.1 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

$$F = F_0(T) + \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \left(\vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar} \vec{A} \right) \phi \right|^2 + a|\phi|^2 + \frac{d}{2}|\phi|^4 + \frac{\vec{B}^2}{2\mu_0} \right\} .$$
(4.1)

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

$$\frac{1}{2m} \left(i\hbar \vec{\nabla} + q\vec{A} \right)^2 \phi + a\phi + d |\phi|^2 \phi = 0 , \qquad (4.2)$$

 et

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{B} = \mu_0 \vec{J}_s \quad \text{où} \quad \vec{J}_s(\vec{r}) = -\frac{q^2}{m} |\phi|^2 \vec{A} - \frac{\mathrm{i} \, q \, \hbar}{2 \, m} \left(\phi^* \vec{\nabla} \phi - \phi \vec{\nabla} \phi^* \right) \,. \tag{4.3}$$

Indication: il est utile d'utiliser une intégration par parties afin d'écrire $\int d^3r |(\vec{\nabla} - \frac{iq}{\hbar}\vec{A})\phi|^2 = \int d^3r \phi^* (i\vec{\nabla} + \frac{q}{\hbar}\vec{A})^2 \phi$. 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 $\vec{J_s} = \frac{q}{m}\rho[\hbar\vec{\nabla}\theta - q\vec{A}]$

2/ Vérifier que si on effectue un changement de jauge sur le potentiel vecteur $\vec{A} \to \vec{A'} = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi$ alors la nouvelle solution de (4.2) est $\phi'(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) \exp\{i\frac{q}{\hbar}\chi(\vec{r})\}$. Vérifier alors que l'expression (4.1) de F est invariante par changement de jauge (si l'on fait de manière concommitante les changements $\vec{A} \to \vec{A'}$ et $\phi \to \phi'$), et qu'il en va de même pour la densité de courant $\vec{J_s}$.

3/ En l'absence de tout champ magnétique, donner pour un système uniforme, l'expression de la densité de paires ρ_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

$$\phi(x) = \sqrt{\rho_0} \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\,\xi}\right) \,, \tag{4.4}$$

où ξ 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 ρ_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 λ_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 \mathscr{C} partant d'un point $\vec{r_1}$ et allant à $\vec{r_2}$ on a

$$\int_{\mathscr{C}} \vec{A} \cdot \mathrm{d}\vec{\ell} = \frac{\hbar}{q} \Big[\theta(\vec{r}_2) - \theta(\vec{r}_1) \Big]$$

(b) On considère un supraconducteur de forme torique 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 ϕ doit être monovalué, mais que cette contrainte peut être relaxée pour la phase θ dans un supraconducteur de forme non simplement connexe.

Montrer alors que le flux de \vec{B} à travers la surface délimitée par la courbe \mathscr{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.cm² (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).

4.2 Thermodynamique et magnétisme

1/ Rappels: magnétisme dans un milieu. L'induction magnétique \vec{B} est la valeur du champ microscopique \vec{b} moyennée sur un volume petit à l'échelle macroscopique: $\vec{B} = \langle \vec{b} \rangle$. La valeur moyennée de la densité de courant s'écrit $\langle \vec{j} \rangle = \vec{\nabla} \wedge \vec{M} + \vec{J}_{cond}$ où \vec{M} est la densité de moment magnétique et \vec{J}_{cond} la densité de "courant de conduction" (elle est nulle si aucun courant n'est injecté dans le système)¹. On définit le champ magnétique² par $\vec{H} = \frac{1}{\mu_0}\vec{B} - \vec{M}$, il vérifie $\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \vec{J}_{cond}$.

Remarque: à l'intérieur d'un supraconducteur, l'effet Meissner impose que $\vec{M} = -\vec{H}$ ($\vec{B} = 0$). La susceptibilité magnétique $\chi = dM/dH|_{H=0}$ vaut donc exactement -1. On parle de diamagnétisme parfait: le courant induit $\vec{J_s}$ produit un écrantage parfait. Par contre, dans l'état normal le système que nous considérons n'a pas de propriété magnétique particulière, et un champ magnétique statique pénètre parfaitement dans l'échantillon.

2/ On se place dans la configuration où aucun courant n'est injecté dans le supraconducteur. Le supercourant $\vec{J_s}$ est donc induit par le champ magnétique extérieur (il est donc de la forme $\vec{J_s} = \vec{\nabla} \wedge \vec{M}$). À l'extérieur du supraconducteur il y a des courants de conduction notés $\vec{J_{ext}}$ (et non plus $\vec{J_{cond}}$) qui créent le champ magnétique³. On a donc une distinction claire entre $\vec{J_s}$ (qui n'est non nul qu'à l'intérieur du supraconducteur) et $\vec{J_{ext}}$ (qui n'est non nul que hors du supraconducteur).

On soumet le matériau à un champ magnétique et on considère une situation où, à température fixée, $\vec{B}(\vec{r}) \rightarrow \vec{B}(\vec{r}) + \delta \vec{B}(\vec{r})$. L'opération est effectuée en un temps δt , elle est supposée quasi-statique et réversible. Montrer que le travail δW reçu par le système est

$$\delta W = -\delta t \int \vec{E} \cdot \vec{J}_{\text{ext}} d^3 r \quad , \quad \text{où} \quad \vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{\delta \vec{B}}{\delta t} \quad , \tag{4.5}$$

 \vec{E} étant le champ électrique généré par la variation de \vec{B} . Justifier que l'on peut identifier δW avec la variation d'énergie libre δF du système et que si dans (4.5) on élimine \vec{J}_{ext} au profit de \vec{H} , une intégration par parties permet d'écrire

$$\delta F = \int \mathrm{d}^3 r \, \vec{H} . \delta \vec{B} \,. \tag{4.6}$$

3/ On définit l'équivalent de l'enthalpie libre $G \stackrel{\text{def}}{=} F - \int d^3r \vec{B}.\vec{H}$. Montrer qu'à T et \vec{J}_{ext} fixés l'état d'équilibre du système correspond à un extrémum de G (indication: montrer que $\delta G + S\delta T = -\int \vec{A}.\delta \vec{J}_{\text{ext}} d^3r$). Les courageux pourront montrer que l'extrémisation de G par rapport aux variations de \vec{A} conduit – à \vec{J}_{ext} fixé – à une équation équivalente à Maxwell-Ampère (4.3). Cela justifie que par la suite on travaille toujours avec les équations (4.2) et (4.3).

4/ On place l'échantillon à $T < T_c$ dans une bobine où règne un champ magnétique \vec{H} . L'expérience montre que la supraconductivité est brisée si le champ est supérieur à un champ magnétique $H_c(T)$ qui se comporte approximativement comme $H_c(T) = H_c(0)(1 - T^2/T_c^2)$.

En comparant les enthalpies libres de Ginzburg-Landau pour un système supraconducteur et un système normal, donner la forme de $H_c(T)$ prédite par la théorie de Ginzburg-Landau. L'accord est il bon avec l'expérience pour $T \in [0,T_c]$? Et au voisinage de T_c ?

4.3 Interface entre les phases normales et supraconductrices

On considère une interface plane entre les phases normales et supraconductrices à l'intérieur de l'échantillon, le système baignant dans un champ magnétique H_c . L'interface est le plan yOz et l'axe x pointe vers la phase supraconductrice. La distribution de toutes les quantités ne dépend que de la coordonnée x. On choisit d'exprimer le potentiel vecteur dans la jauge de Coulomb ($\vec{\nabla}.\vec{A} = 0$), de sorte

^{1.} On pourra se rafraichir rapidement la mémoire sur les matériaux magnétiques en lisant les 4 premières pages du chapitre IV de "Electrodynamics of continuous media", Landau et Lifshitz Volume 8.

^{2.} Parfois appelé "excitation magnétique" dans la littérature française.

^{3.} Typiquement on met l'échantillon dans une bobine.

que $dA_x/dx = 0$, et qu'il est donc possible de prendre $A_x \equiv 0$. On choisit alors l'axe Oy de sorte que \hat{e}_y soit toujours colinéaire à \vec{A} : $\vec{A} = (0, A(x), 0)$ et alors $\vec{B} = (0, 0, dA/dx)$.

1/ En utilisant les relations entre \vec{H} , \vec{B} , \vec{M} et \vec{J}_s montrer que dans tout l'espace le champ magnétique garde la valeur constante $\vec{H} = (0,0,H_c)$.

2/ Justifier que l'on définisse la tension de surface comme

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \left(\vec{\nabla} - \frac{\mathrm{i}q}{\hbar} \vec{A} \right) \phi \right|^2 + a|\phi|^2 + \frac{d}{2}|\phi|^4 + \frac{B^2}{2\mu_0} - B(x)H_c - g_{nc} \right\} ,$$
(4.7)

où $g_{\rm nc}$ est la densité d'enthalpie libre dans la phase normale uniforme en présence d'un champ H_c ($g_{\rm nc}$ est exactement égale à la densité d'enthalpie libre $g_{\rm sc}$ dans la phase supraconductrice uniforme en présence d'un champ H_c).

3/ Montrer que ϕ est solution de l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}x^2} + \left(a + \frac{q^2A^2(x)}{2m} + b\,\phi^2(x)\right)\phi(x) = 0\,,\tag{4.8}$$

et que A(x) est solution de

$$\frac{\mathrm{d}^2 A}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\mu_0 q^2}{m} \,\phi^2(x) \,A(x) \,. \tag{4.9}$$

L'équation (4.8) ayant des coefficients réels on peut choisir ϕ réel, ce qu'on fera désormais. On utilisera également des variables adimensionnées: $X = x/\lambda_L$, $\varphi = \phi\sqrt{b/|a|}$, $\mathscr{B} = B/B_c$ (où $B_c = \mu_0 H_c$) et $\mathscr{A} = A/(B_c\lambda_L)$. On notera la dérivation par rapport à X par un prime (ainsi $\mathscr{B} = \mathscr{A}'$). On définit également le paramètre de Ginzburg-Landau:

$$\kappa = \lambda_L / \xi . \tag{4.10}$$

En utilisant (4.9) montrer que $(\mathscr{A}^2 \varphi^2 - \mathscr{A}'^2)' = 2\mathscr{A}^2 \varphi \varphi'$ et en déduire une intégrale première de l'équation (4.8) sous la forme

$$\frac{2}{\kappa^2} \varphi'^2 + (2 - \mathscr{A}^2)\varphi^2 - \varphi^4 + \mathscr{A}'^2 = 1.$$
(4.11)

Montrer que cela permet d'écrire la tension de surface sous la forme

$$\sigma = \frac{B_c^2 \lambda_L}{\mu_0} \int_{-\infty}^{\infty} dX \left\{ \frac{2}{\kappa^2} \varphi'^2 + \mathscr{A}'(\mathscr{A}' - 1) \right\} = \frac{B_c^2 \lambda_L}{2\mu_0} \int_{-\infty}^{\infty} dX \left\{ (\mathscr{A}' - 1)^2 - \varphi^4 \right\} .$$
(4.12)

4/ Dans cette partie on calcule σ dans deux situations limites.

 $\underline{\kappa \ll 1}$ C'est la situation typique pour les métaux purs. Dans ce cas justifier que l'on peut faire l'approximation $\mathscr{B}(X) = \Theta(-X)$ (où Θ est la fonction de Heaviside). Quelle est alors la solution de l'équation (4.11)? [indication: se souvenir de la question 4.1.3/]. Montrer que dans ce cas

$$\sigma = \frac{B_c^2}{2\mu_0} \xi \frac{4\sqrt{2}}{3} . \tag{4.13}$$

 $\kappa \gg 1$ Justifier que dans ce cas on peut écrire $\varphi(X) = \Theta(X)$ et qu'alors

$$\sigma = -\frac{3}{2} \frac{B_c^2}{2\mu_0} \lambda_L .$$
 (4.14)

On peut montrer que σ s'annule exactement lorsque $\kappa = 1/\sqrt{2}$. On appelle les supraconducteurs dont $\kappa < 1/\sqrt{2}$ des supraconducteurs de type I, les autres étant de type II ($\kappa > 1/\sqrt{2}$). Discuter de l'influence du signe de la tension de surface sur la propension du champ magnétique à pénétrer dans le supraconducteur.

Divers exercices

5.1 Théorie de Landau scalaire

On se donne un système dont la fonctionnelle d'énergie libre de Landau s'écrit

$$F_{\rm L}[\phi] = F_0(T) + \int \mathrm{d}^d r \left[\frac{g}{2} (\nabla \phi(\mathbf{r}))^2 + \frac{a(T)}{2} \phi^2(\mathbf{r}) + \frac{b(T)}{3} \phi^3(\mathbf{r}) + \frac{c(T)}{4} \phi^4(\mathbf{r}) \right].$$

L'intégrale porte sur \mathbb{R}^d tout entier mais on pourra se limiter \tilde{A} une intégration sur un domaine de \mathbb{R}^d dont le volume V est très grand. Le champ $\varphi(\mathbf{r})$ qui minimise globalement la fonctionnelle $F_{\rm L}[\phi]$ est le paramètre d'ordre de la théorie. Les coefficients a(T), b(T) et s(T) dépendent de la température T du système. Leurs développements en puissances de $T - T_c$ sont respectivement $a(T) = a_0(T - T_c) + O((T - T_c)^2)$, $b(T) = b_0 + O((T - T_c)^2)$ et $b(T) = b_0 + O((T - T_c)^2)$, où a_0 , b_0 et c_0 sont trois réels positifs, et T_c , la température critique du système lorsque a(T) = 0.

1/ On suppose que l'argument de la fonctionnelle $F_{\rm L}[\phi]$ est homogène. On a le droit (et on se placera désormais dans ce cas de figure) mais pourquoi? Réécrire alors l'énergie libre $F_{\rm L}(\phi)$ en fonction de la densité d'énergie $f_{\rm L}(\phi) = \frac{a(T)}{2}\phi^2 + \frac{b(T)}{3}\phi^3 + \frac{c(T)}{4}\phi^4$.

2/ Trouver les valeurs de ϕ qui extrémisent $f_{\rm L}(\phi)$. On distinguera le cas $T < \tilde{T}_{\rm c}$ du cas $T > \tilde{T}_{\rm c}$, où $\tilde{T}_{\rm c} = T_{\rm c} + \frac{b_0^2}{4a_0c_0}$. Tracer qualitativement $f_{\rm L}(\phi)$ en fonction de ϕ lorsque $T > \tilde{T}_{\rm c}$, $T = \tilde{T}_{\rm c}$ puis $T < \tilde{T}_{\rm c}$. Représenter alors le paramètre d'ordre $\varphi(T)$ en fonction de la température T. Une transition de phase s'opère à $T = \tilde{T}_{\rm c}$. De quelle nature est-elle? Pourquoi?

3/ Reprendre la démarche de la question précédente en supposant que B(T) = 0. Déterminer l'exposant critique β défini par $\varphi(T) \propto (T_c - T)^{\beta}$ lorsque $T \to T_c^-$.

5.2 Théorie de Landau vectorielle — Modes de Goldstone

Donnons-nous un système dont la fonctionnelle d'énergie libre de Landau s'écrit

$$F_{\rm L}[\underline{m},\underline{h}] = F_0(T) + \int d^d r \left[\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^n (\nabla m_\mu(\mathbf{r}))^2 + \frac{A(T)}{2} \sum_{\mu=1}^n m_\mu^2(\mathbf{r}) + \frac{C(T)}{4} \sum_{\mu=1}^n \sum_{\nu=1}^n m_\mu^2(\mathbf{r}) m_\nu^2(\mathbf{r}) - \sum_{\mu=1}^n h_\mu(\mathbf{r}) m_\mu(\mathbf{r}) \right].$$

L'intégrale porte sur \mathbb{R}^d tout entier mais on pourra se limiter à une intégration sur un volume de \mathbb{R}^d dont la capacité V est très grande. Le champ $\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{r})$ qui minimise globalement la fonctionnelle

 $F_{\mathrm{L}}[\underline{m},\underline{h}]$ est le paramètre d'ordre de la théorie. Les vecteurs de \mathbb{R}^d seront notés en gras [position $\mathbf{r} = (x_1, \ldots, x_d)$, variable réciproque $\mathbf{k} = (k_1, \ldots, k_d)$] tandis que ceux de \mathbb{R}^n seront soulignés [aimantation $\underline{m}(\mathbf{r}) = (m_1(\mathbf{r}), \ldots, m_n(\mathbf{r}))$, aimantation spontanée $\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{r}) = (\mathcal{M}_1(\mathbf{r}), \ldots, \mathcal{M}_n(\mathbf{r}))$, source extérieure $\underline{h}(\mathbf{r}) = (h_1(\mathbf{r}), \ldots, h_n(\mathbf{r}))$]. Les développements en puissances de $T - T_c$ des coefficients A(T) et C(T) sont respectivement $A(T) = A_0(T - T_c) + O((T - T_c)^2)$ et $C(T) = C_0 + O((T - T_c)^2)$, où A_0 et C_0 sont deux constantes positives, et T_c , la température critique du système.

1/ On se place à champ extérieur nul: $\underline{h} = \underline{0}$. Si le paramètre d'ordre est homogène, montrer qu'il est nul lorsque $T > T_c$ et qu'il s'écrit $\underline{\mathcal{M}}_0 = \pm \|\underline{\mathcal{M}}_0\|\underline{\hat{u}}$ quand $T < T_c$, où $\underline{\hat{u}}$ est un vecteur unitaire de \mathbb{R}^n .

2/ La fonction de corrélation des fluctuations du paramètre d'ordre $\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{r})$ est

$$G_{\mu,\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \stackrel{\text{\tiny def.}}{=} \langle m_{\mu}(\mathbf{r})m_{\nu}(\mathbf{r}')\rangle - \langle m_{\mu}(\mathbf{r})\rangle \langle m_{\nu}(\mathbf{r}')\rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\delta \mathcal{M}_{\mu}(\mathbf{r})}{\delta h_{\nu}(\mathbf{r}')},$$

où β désigne la température inverse. Montrer que la hessienne

$$H_{\mu,\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \stackrel{\text{\tiny def.}}{=} \beta \frac{\delta^2 F_{\mathrm{L}}[\underline{m},\underline{h}]}{\delta m_{\mu}(\mathbf{r}) \delta m_{\nu}(\mathbf{r}')} \bigg|_{\underline{m}=\underline{\mathcal{M}}}$$

de la fonctionnelle $F_{\rm L}[\underline{m},\underline{h}]$ est la matrice inverse de $G_{\mu,\nu}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$:

$$\sum_{\lambda=1}^{n} \int \mathrm{d}^{d} r'' \, H_{\mu,\lambda}(\mathbf{r},\mathbf{r}'') G_{\lambda,\nu}(\mathbf{r}'',\mathbf{r}') = \delta_{\mu,\nu} \delta^{(d)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

3/ Calculer la transformée de Fourier $\frac{1}{\beta}G_{\mu,\nu}^{-1}(\mathbf{k}) \stackrel{\text{déf.}}{=} \int d^d r \frac{1}{\beta}G_{\mu,\nu}^{-1}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} de \frac{1}{\beta}G_{\mu,\nu}^{-1}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') dans le cas simple de la question 1/. En déduire <math>\beta G_{\mu,\nu}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Lorsque $T < T_c$, on fera l'effort d'écrire le corrélateur $G_{\mu,\nu}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ comme la somme d'une composante longitudinale $G_{\mu,\nu}^{\mathrm{L}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ et d'une composante transverse $G_{\mu,\nu}^{\mathrm{T}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Pour ce faire, on introduira les projecteurs longitudinal $P_{\mu,\nu}^{\mathrm{L}}$ et transverse $P_{\mu,\nu}^{\mathrm{T}}$ définis par

$$P_{\mu,\nu}^{\rm L} = \hat{u}_{\mu}\hat{u}_{\nu}$$
 et $P_{\mu,\nu}^{\rm T} = \delta_{\mu,\nu} - \hat{u}_{\mu}\hat{u}_{\nu}$.

On rappelle qu'en qualité de projecteurs orthogonaux, P^{L} et P^{T} jouissent des propriétés suivantes : $(P^{L})^{2} = P^{L}, (P^{T})^{2} = P^{T}$ et $P^{L}P^{T} = P^{T}P^{L} = 0$.

4/ Interpréter les résultats obtenus. En particulier, identifier les longueurs de corrélation qui émergent du calcul et les exposants critiques qui leur sont associés.

5.3 Modèles de spins unidimensionnels

1/ Trouver une expression exacte pour la fonction de corrélation g(r,K) où $K = \beta J$, du modèle d'Ising unidimensionnel dont le hamiltonien est

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

Trouver la longueur de corrélation $\xi(T)$.

2/ Mêmes questions pour le modèle XY unidimensionnel dont le hamiltonien est

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i} \vec{S}_{i} \cdot \vec{S}_{i+1} \; .$$

3/ Dans les deux cas étudiés dans cet exercice, on peut définir le couplage effectif $K(\ell)$ à l'échelle $r = \exp(\ell)$ par

$$g(e^{\ell}, K(0)) = g(1, K(\ell))$$
.

Trouver $K(\ell)$ exactement pour le modèle d'Ising, et dans l'approximation des ondes de spin pour le modèle XY. Donner dans les deux cas l'expression de $dK^{-1}/d\ell$ dans la limite des basses températures.

5.4 Modèle d'Ising sur réseau triangulaire

On cherche à illustrer la procédure du groupe de renormalisation pour un cas étudié par Niemeijer et van Leeuwen, celui du modèle d'Ising à deux dimension sur un réseau triangulaire.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

La première étape consiste à définir des variables de bloc par décimation. Sur la figure ci-contre, on forme les blocs les plus simples, constitués de 3 sites.



1/ Quel est le facteur d'échelle correspondant? En déduire la maille du réseau obtenue après décimation.

2/ Comment définiriez-vous les variables de bloc?

3/ Écrire le hamiltonien sous la forme $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$, \mathcal{H}_0 décrivant les blocs indépendants, et \mathcal{H}_1 comprenant les intéractions entre les blocs.

4/ Mettre en œuvre la deuxième étape du groupe de renormalisation (intégrations ur les fluctuations de spin à l'intérieur des blocs).

5/ En déduire le point critique. Calculer l'exposant critique ν .

Dimension critique inférieure

6.1 Modèle d'Ising unidimensionnel

On se donne une chaîne de N spins d'Ising avec conditions aux limites périodiques ($\sigma_{N+k} = \sigma_k, \forall k \in [\![1,N]\!]$), interactions ferromagnétiques entre spins plus proches voisins et interactions avec un champ magnétique extérieur uniforme. Le hamiltonien du système s'écrit

$$H[\{\sigma_i\}] = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu B \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \qquad (6.1)$$

où J > 0 est la constante de couplage ferromagnétique entre spins plus proches voisins et μB une énergie proportionnelle au champ magnétique extérieur B ($\mu > 0$).

1/ Montrer que la fonction de partition $Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H[\{\sigma_i\}]}$ s'écrit comme la trace de N mêmes matrices T, où

$$T = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix} \qquad (K \stackrel{\text{def}}{=} \beta J \text{ et } h \stackrel{\text{def}}{=} \beta \mu B).$$
(6.2)

2/ Calculer l'énergie libre par site $f = -\frac{1}{N\beta} \ln Z$ à la limite thermodynamique, c'est-à-dire lorsque $N \to \infty$.

3/ Montrer que l'aimantation par site $m = -\beta \frac{\partial f}{\partial h}$ s'évalue dans la limite thermodynamique comme

$$m = \frac{\sinh h}{\sqrt{\sinh^2 h + \mathrm{e}^{-4K}}} \,. \tag{6.3}$$

Tracer m en fonction de μB à différentes températures β^{-1} et en déduire que le modèle d'Ising unidimensionnel ne possède pas de transition de phase à température non nulle.

6.2 Dimension critique inférieure du modèle d'Ising

1/ La conclusion fondamentale de la première partie était en réalité qualitativement prévisible. Pourquoi? On résonnera par l'absurde en supposant qu'il existe une température critique T_c en dessous de laquelle le système est totalement ordonné ($\sigma_i = 1, \forall i \in [\![1,N]\!]$ ou $\sigma_i = -1, \forall i \in [\![1,N]\!]$). On s'imaginera alors renverser une région de M spins consécutifs et on examinera dans la foulée l'énergie que cela coûte en comparaison du gain entropique dû aux N choix existant quant à la localisation du début (ou de la fin) de la région renversée.

2/ Étendre le raisonnement au modèle d'Ising bidimensionnel et montrer qu'il existe alors un ordre à longue portée aux basses températures. On fera l'approximation d'un nombre thermodynamique M de spins renversés. Ceci étant, on se doute bien qu'il existe toujours une transition de phase lorsque la dimension de l'espace est ≥ 2 .

3/ Donner la dimension critique inférieure d_c du modèle d'Ising d-dimensionnel, c'est-à-dire la dimension de l'espace en dessous de laquelle et à partir de laquelle les mécanismes entropiques excluent une brisure spontanée de symétrie. Cette valeur est en réalité valable pour tous les systèmes à symétrie discrète ($\mathbb{Z}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \{-1,1\}$ est la symétrie discrète du modèle d'Ising unidimensionnel; cela veut dire que le hamiltonien d'Ising unidimensionnel est invariant sous l'action du groupe discret \mathbb{Z}_2).

6.3 Théorème de Mermin–Wagner

Considérons un réseau hypercubique *d*-dimensionnel Λ de maille *a* portant des spins $\vec{S}(\vec{r}) = S_1(r)\vec{e}_1 + S_2(r)\vec{e}_2$ à deux états vectoriels \vec{e}_1 et \vec{e}_2 $(|\vec{e}_1| = |\vec{e}_2| = 1$ et $\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = 0$), $\vec{r} \in \Lambda$ désignant la position du site auquel $\vec{S}(\vec{r})$ est attaché. La fonctionnelle d'énergie possède la symétrie continue O(2) et elle s'écrit

$$H[\{\vec{S}(\vec{r})\}] = -J \sum_{\vec{r}} \sum_{\mu=1}^{d} \vec{S}(\vec{r}) \cdot \vec{S}(\vec{r} + \vec{u}_{\mu}), \qquad (6.4)$$

où J est une constante de couplage > 0 et $\{\vec{u}_{\mu}\}_{\mu=1,\dots,d}$ une base de Λ $(|\vec{u}_{\mu}| = a$ et $\vec{u}_{\mu} \cdot \vec{u}_{\nu} = 0)$. On suppose en outre que le système possède une température critique T_c en dessous de laquelle l'aimantation est uniforme et selon \vec{e}_1 : lorsque $T < T_c$, $\vec{S}(\vec{r}) = S\vec{e}_1$. On se place d'ailleurs dans le régime où $T < T_c$ et on étudie les fluctuations du spin autour de la configuration caractérisant l'ordre, $alias \{S\vec{e}_1\}$.

1/ En dessous de T_c , $\vec{S}(\vec{r})$ ne peut différer que très peu de $S\vec{e}_1$. Dès lors, on ne peut qu'avoir

$$\vec{S}(\vec{r}) \simeq S \cos[\theta(\vec{r})] \vec{e}_1 + S_2(\vec{r}) \vec{e}_2 \quad \text{avec} \quad |\theta(\vec{r})| \stackrel{\text{def}}{=} |\angle(\vec{e}_1, \vec{S}(\vec{r}))| \ll 1 \quad \text{et} \quad |S_2(\vec{r})| \ll S.$$
(6.5)

Développer l'action $\beta H[\{\vec{S}(\vec{r})\}]$ autour de la configuration $\{S\vec{e}_1\}$ et montrer que l'action quadratique s'écrit

$$\mathscr{S}[\theta] = \frac{\beta g S^2}{2} \int \mathrm{d}^d r \, \left| \vec{\nabla} \theta(\vec{r}) \right|^2,\tag{6.6}$$

si tant est que nous effectuions en aval des calculs la limite continue $a \rightarrow 0$. g > 0 est une nouvelle constante de couplage que l'on explicitera en fonction de a et de L, la taille typique du système.

2/ Puisque l'on est proche de l'état ordonné, un développement en puissances de $\theta(\vec{r})$ donne $\langle S_1(\vec{r}) \rangle \simeq \langle S \cos \theta(\vec{r}) \rangle = S - \frac{S}{2} \langle \theta^2(\vec{r}) \rangle + \cdots$, où $\langle \cdots \rangle$ désigne la moyenne sur les fluctuations du spin $\vec{S}(\vec{r})$ autour de $S\vec{e_1}$. Montrer que

$$\langle \theta^2(\vec{r}) \rangle = (\beta g S^2)^{-1} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int \frac{\mathrm{d}^d q}{q^2}.$$
(6.7)

Pour ce faire, on écrira que $\langle \theta(\vec{r})\theta(\vec{r}')\rangle = G(\vec{r}-\vec{r}')$, où G est la fonction de Green associée à l'équation d'Euler-Lagrange qui découle de la minimisation de l'action \mathscr{S} . Ici, on relie $f(\vec{r})$ à sa transformée de Fourier $f(\vec{q})$ par la relation

$$f(\vec{r}) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int d^d q \, f(\vec{q}) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}} \,. \tag{6.8}$$

3/ Évaluer

$$\langle S_1(\vec{r}) \rangle \simeq S \left[1 - (2\beta g S^2)^{-1} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \int \frac{\mathrm{d}^d q}{q^2} \right]$$
(6.9)

lorsque d = 1 et d = 2, puis lorsque $d \ge 3$, et dire dans quels cas $\langle S_1(\vec{r}) \rangle$ diverge. On se souviendra que

$$\int \mathrm{d}^d q = \int \mathrm{d}^{d-1} \Omega \int_0^\infty q^{d-1} \mathrm{d} q \;. \tag{6.10}$$

Quelle est la dimension critique inférieure d_c ? Nous avons là le théorème de Mermin-Wagner : les systèmes à symétrie continue ne possèdent pas de transition de phase lorsque leur dimensionnalité est inférieure ou égale au d_c que vous venez de trouver.

TD 7 Lois d'échelle

7.1Modèle sphérique

On s'intéresse à un ensemble de $N = L^d$ spins $S(\mathbf{x})$ localisés aux noeuds \mathbf{x} d'un réseau hypercubique de dimension d avec conditions aux limites périodiques. On autorise aux spins $S(\mathbf{x})$ de prendre toutes les valeurs possibles entre $-\infty$ et $+\infty$, avec cependant la contrainte globale $\sum_{\mathbf{x}} S(\mathbf{x})^2 = N$, qui donne son nom au modèle. Le hamiltonien de l'ensemble est

$$\mathcal{H}(\{S(\mathbf{x})\}) = -J\sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} S(\mathbf{x})S(\mathbf{y}) - B\sum_{\mathbf{x}} S(\mathbf{x})$$

On peut trouver exactement les propriétés critiques d'un tel système, et celles-ci différent notablement des prédictions du champ moyen. C'est là tout l'intérêt du modèle sphérique : être soluble et permettre de retracer l'origine des lois d'échelles modifiées par l'effet des fluctuations critiques. Mais avant d'arriver aux exposants critiques, il y a quelques étapes mathématiques.

1. Quelle est la pertinence du modèle sphérique pour décrire les systèmes magnétiques réels. Quelles caractéristiques communes avec le modèle d'Ising présente-t-il?

2. Soit u_1, \dots, u_n n variables réelles et $A = (A_{ij})$ une matrice symétrique inversible $n \times n$. Montrer que

$$F(v_1,...,v_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} du_1...du_n \ e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j} u_i A_{ij} u_j + \sum_{\ell} u_1 v_1}$$

= $(2\pi)^{n/2} (\det A)^{-1/2} e^{+\frac{1}{2} v_i (A^{-1})_{ij} v_j}$ (7.1)

3. On pose $K = \frac{J}{k_B T}$ et $h = \frac{B}{k_B T}$. Montrer que la fonction de partition s'écrit sous la forme

$$Z = \operatorname{cste} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}s \; (\det V)^{-1/2} \mathrm{e}^{(a+is)N + \frac{h^2}{4} \sum_{i,j} (V^{-1})_{i,j}}$$

avec V une matrice cyclique dont les valeurs propres sont $\lambda(\mathbf{q}) = a + is - K \sum_{\mu} \cos q_{\mu}$, et chaque composante q_{μ} peut prendre les valeurs $0, 2\pi/L, ..., 2\pi(L-1)/L$. Le nombre a est que conque, mais intervient dans l'expression de la matrice V.

4. Montrer que dans la limite thermodynamique,

$$\ln \det V = N(\ln K + g(z)), \ z = (a + is - Kd)/K$$

avec

$$g(z) = \int_0^{2\pi} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \ln(z + d - \sum_{\mu} \cos q_{\mu})$$

0

5. La matrice V étant cyclique, le vecteur (1,...,1) est le vecteur propre associé à la valeur propre minimale. En déduire que

$$Z \propto \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \mathrm{d}z \; \mathrm{e}^{N\phi(z)}$$

avec $\phi(z) = Kz + Kd - \frac{1}{2}g(z) + \frac{h^2}{4Kz}$ et $c = \frac{a - Kd}{K} > 0$.

6. Dans la limite thermodynamique, on peut évaluer l'intégrale par la méthode du col. On s'intéresse à $\phi(z)$ pour z réel > 0. Pourquoi $\phi(z)$ possède-t-elle nécessairement un minimum en un point z_0 ? Pourquoi est-il unique?

7. Pourquoi peut-on remplacer c par z_0 dans l'intégrale de la question 5. Montrer que l'énergie libre par site f a pour expression

$$-\frac{f}{k_B T} = \frac{1}{2}\ln(\pi/K) + \phi(z_0)$$

où z_0 est solution d'une équation que l'on précisera.

8. Montrer que l'aimantation moyenne m est solution de

$$2J(1-m^2) = k_B T g'(\frac{B}{2Jm})$$

et que l'énergie interne par site u s'exprime comme

$$u = \frac{1}{2}k_BT - Jd - \frac{1}{2}B(m + m^{-1})$$

Il est possible d'exprimer la fonction g'(z) à l'aide de fonctions spéciales connues; on trouve que

$$g'(z) = \int_0^{+\infty} e^{-t(z+d)} (J_0(it))^d$$

où $J_0(it) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dq e^{t \cos q}$ est la fonction de Bessel usuelle d'ordre 0. On montre aussi que $J_0(it) = \frac{e^t}{\sqrt{2\pi t}} (1 + \mathcal{O}(t^{-1}) \text{ pour } t \gg 1$. Vous pouvez vous entraîner à établir ces propriétés, qui ne sont que des mathématiques.

9. Montrer que pour 2 < d < 4,

$$g''(z) \simeq -(2\pi)^{-d/2} \Gamma(2-d/2) z^{d/2-2}$$

Montrer qu'il existe un point critique lorsque 2 < d < 4. Exprimer la température critique à l'aide de g'(0).

10. Montrer que les exposants critiques de l'aimantation et de la chaleur spécifique prennent les valeurs $\beta = \frac{1}{2}$ et $\alpha = -\frac{4-d}{2-d}$ respectivement. En déduire l'exposant ν donnant la divergence de la longueur de corrélation.

11. Trouver ensuite l'exposant γ donnant la divergence de la sucseptibilité. En déduire la valeur de la dimension anormale η .

7.2 Du modèle d'Ising à une théorie de Landau

1. Établir que la fonction de partition d'un modèle d'Ising défini sur un réseau hypercubique de dimension d (dont les sites sont repérés par un vecteur \vec{n} de \mathbb{Z}^d) s'exprime comme une intégrale multiple

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{\vec{n}} \mathrm{d}\phi(\vec{n}) \, \exp(-S[\phi])$$

avec

$$S[\{\phi(\vec{n})\}] = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n},\vec{m}} \phi_{\vec{n}} (2d)^2 (2d + \delta_{\vec{n},\vec{m}} \Delta_{\vec{n}})^{-1}_{\vec{n},\vec{m}} \phi(\vec{m}) - \sum_{\vec{n}} \ln(2\mathrm{ch}(2d\sqrt{K}\phi(\vec{n})) + \mathrm{cster})) + \mathrm{cster})$$

On utilisera l'identité (7.1) de l'exercice précédent.

2. Développer $S[\phi]$ à l'ordre 4 en les variables ϕ . Pouvait-on prévoir la forme du développement?

3. En (ré-)introduisant le pas du réseau a et en cherchant la limite $a \to 0$, construire explicitement la limite continue de la théorie (poser $\mathbf{x} = a\vec{n}, \varphi(\mathbf{x}) = a^{y_1}\phi(\vec{n}), y_1$ à trouver, *etc*; définir champ de spins et couplages). Quelles dimensions d jouent un rôle particulier dans la limite continue? Écrire alors $S[\varphi]$. Dans l'intégrale multiple figurant dans la fonction de partition, de quelle configuration des $\varphi(\mathbf{x})$ provient la contribution principale?

7.3Mouvement brownien et polymères

L'objectif de cet exercice est de modéliser la physique de certaines chaînes polymères. Pour simplifier la formulation mathématique, nous nous placerons sur un réseau hypercubique de pas $a \ge d$ dimensions. On appelle \mathbf{e}_{μ} les *d* vecteurs de base du réseau (de norme unité).

7.3.1Chaîne libre.

Commençons par la modélisation d'un polymère sans interaction entre ses maillons ou monomères (ce qui est irréaliste): on considère N maillons de taille a. Les N maillons peuvent librement se recouvrir et leurs orientations relatives sont totalement aléatoires (figure (a)). L'extrémité du premier maillon est choisie comme origine **0** des coordonnées. On appelle $\mathbf{r}(0) = \mathbf{0}, ..., \mathbf{r}(N)$ les positions des extrémités des maillons et on désigne par $\mathbf{r} = {\mathbf{r}(0),...,\mathbf{r}(N)}$ la donnée d'une configuration de la marche.

1. Combine y a-t-il de configurations $\Omega_N^{(0)} = \sum_r 1$ de polymères? r(N)r(0) r(0) r(N)

Sur la figure (a) on a modélisé un polymère sans tenir compte des interactions par une chaîne totalement aléatoire. Sur la figure (b), le polymère réel est approximé par une chaîne autoévitante.

2. Montrer que la probabilité $G(\mathbf{x}, N)$ que l'extrémité $\mathbf{r}(N)$ se trouve en \mathbf{x} vérifie l'équation suivante :

$$G(\mathbf{x}, N+1) - G(\mathbf{x}, N) = \frac{1}{2d} \sum_{\mu=1}^{d} \left(G(\mathbf{x} + a\mathbf{e}_{\mu}, N) + G(\mathbf{x} - a\mathbf{e}_{\mu}, N) - 2G(\mathbf{x}, N) \right)$$

Que vaut $\sum_{\mathbf{x}} G(\mathbf{x}, N)$? Avez-vous déjà recontré des équations similaires?

3. On pose $\mathbf{v}(n) = \mathbf{r}(n+1) - \mathbf{r}(n)$, n = 0, ..., N - 1. Montrer, en remarquant que

$$\mathbf{r}(N) = \sum_{n=0}^{N-1} \mathbf{v}(n)$$



que $G(\mathbf{x}, N)$ se comporte comme une gaussienne dont on donnera la moyenne et la variance $(N \gg 1)$.

4. On définit le rayon de gyration du polymère par $R^2 = \langle \mathbf{r}^2(N) \rangle$, où les crochets désignent une moyenne sur toutes les $\Omega_N^{(0)}$ configurations possibles du polymère. Montrer que $R^2 \propto N^{2\nu}$ où l'on déterminera l'exposant ν . À votre avis, ν dépend-il de la forme du réseau choisi, du pas du réseau, de la dimension de l'espace ambiant?

5. Pour d = 1, déterminer G(x, N) exactement, ainsi que \mathbb{R}^2 .

7.3.2 Données expérimentales.

1. Énumérer les insuffisances de la modélisation de la partie 7.3.1.

2. Les courbes ci-contre représentent la mesure expérimentale d'une quantité faisant intervenir la transformée de Fourier de la fonction $G(\mathbf{r}, N)$ (par rapport à \mathbf{r}): Montrer que la mesure n'est pas compatible avec la modélisation précédente et déduire de la courbe la valeur de l'exposant ν ainsi mesuré. On fera l'hypothèse d'échelle selon laquelle la fonction G se met nécessairement sous la forme $G(\mathbf{r}, N) \sim N^{-\alpha} \mathcal{G}(r^{\nu}N)$ où \mathcal{G} est une fonction (inconnue) sans dimension tendant vers une constante lorsque son argument tend vers 0 et α est un exposant inconnu.

3. Dans certaines conditions expérimentales très particulières, on mesure les courbes ci-contre. Commenter.

4. Quel type d'onde est diffusée pour obtenir ces courbes expérimentales a?

^atirées de B. Farnoux, F. Boué, J.-P. Cotton, M. Daoud, G. Jannink, M. Nierlich and P.-G. de Gennes, *J. de Physique* **39**, 77 (1978).



7.3.3 Chaîne auto-évitante.

On modélise un polymère réel en imposant que les maillons occupent aléatoirement les liens du réseau qui ne sont pas déjà occupés par un lien du polymère (figure (b)).

1. On se place en dimension d quelconque. Justifier que le nombre de configurations accessibles s'écrit

$$\Omega_N = \lim_{\beta \to +\infty} \sum_{\mathbf{r}} e^{-\frac{1}{2}\beta \sum_{n,m=0}^N \delta_{\mathbf{r}(n),\mathbf{r}(m)}}$$

2. Montrer qu'en dimension spatiale d, $\Omega_N < 2d(2d-1)^{N-1}$.

3. Approximation de Flory. On effectue un raisonnement phénoménologique. On note R le rayon de gyration de la marche auto-évitante, qui est *a priori* inconnu. On cherche la relation entre R et N. On souhaite estimer l'"énergie libre" F (déduite de Ω_N) de manière grossière.

(a) Justifier tout d'abord que l'énergie de répulsion entre maillons se comporte approximativement comme

$$F_1 \simeq \text{Const.} R^d \left(\frac{N}{R^d}\right)^2$$

Est-elle sous- ou surestimée? Quelle est la nature de l'approximation?

(b) On constate que les grandes valeurs de R sont favorisées par F_1 , mais on souhaite limiter de trop grandes élongations, ce que l'on fait en introduisant un terme les pénalisant :

$$F_2 \simeq \text{Const.} \frac{R^2}{N}$$

Pour quelle raison souhaite-t-on pénaliser les trop grandes chaînes (quel est le sens physique de F_2)?

- (c) Déterminer le rayon de gyration R typique en fonction de N. Identifier l'exposant ν défini à la question 7.3.14.
- (b) Comparer aux résultats expérimentaux.

4. L'approximation ci-dessus est essentiellement correcte dans des dimensions spatiales d supérieures à une certaine dimension critique d_c . Trouver un argument qualitatif établissant que $d_c = 4$.

Transition tri-critique

8.1 Modèle de Blume-Emery-Griffiths

On veut décrire l'influence de l'adjonction d'impuretés d'³He sur la transition de phase superfluide de l'⁴He. L'expérience montre que si la concentration x en ³He 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 ⁴He et superfluide, l'autre est riche en ³He et non-superfluide.



Figure 1: Diagramme de phase T - x du système ³He + ⁴He [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'³He sur le site *i*, alors que la valeur $S_i = \pm 1$ correspond à la présence d'un atome d'⁴He. L'hamiltonien B.E.G. est

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_{i=1}^N S_i^2 - \Delta N , \qquad (8.1)$$

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 xen ³He est la valeur moyenne: $x = 1 - \langle S_i^2 \rangle$. Le paramètre Δ contrôle la concentration en ³He: $x \to 1$ si $\Delta \to +\infty$ et $x \to 0$ si $\Delta \to -\infty$. 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 (8.1) 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 σ_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 ϕ du paramètre d'ordre (en notant $\beta = (k_B T)^{-1}$ où k_B est la constante de Bolztmann):

$$\frac{F_{L}(T,\Delta,\phi)}{N} = -\Delta + \frac{1}{2}qJ\phi^{2} - k_{B}T\ln\left[1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh(\beta qJ\phi)\right] .$$
(8.2)

2/ Donner l'expression de la fraction x d'³He en fonction de la température, de ϕ 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

$$x = \frac{\lambda - 1}{\lambda}$$
, où $\lambda \stackrel{\text{def}}{=} 1 + \frac{e^{\beta \Delta}}{2}$. (8.3)

3/ Un développement limité de (8.2) au voisinage de $\phi = 0$ donne

$$\frac{F_L(T,\Delta,\phi)}{N} = a(T,\Delta) + b(T,\Delta)\phi^2 + c(T,\Delta)\phi^4 + d(T,\Delta)\phi^6 + \dots$$
(8.4)

avec

$$b(T,\Delta) = \frac{qJ}{2} \left(1 - \frac{qJ}{\lambda k_B T} \right) \quad \text{et} \quad c(T,\Delta) = \frac{qJ}{8\lambda^2} \left(\frac{qJ}{k_B T} \right)^3 \left(1 - \frac{\lambda}{3} \right) \,. \tag{8.5}$$

Déterminer rapidement l'allure de $\phi(T)$ en utilisant le développement (8.4) tronqué à l'ordre ϕ^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 $\Delta \to -\infty$? Discuter la limite $\Delta \to +\infty$. Monter que $T_c(x)/T_c(0) = 1 - x$.

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

8.2 Points tri-critiques. Discussion générale

Une discussion plus précise du modèle B.G.E. nous pousse à étudier une théorie de Landau du type (8.4) 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 (8.4) pour les valeurs de ϕ qu'on va typiquement considérer¹.

On trace dans le plan (Δ,T) les deux courbes $b(T,\Delta) = 0$ et $c(T,\Delta) = 0$ (cf. figure ci-contre). À haute température, bet 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 (Δ_t, T_t) est appelé "point tri-critique". Figure 2: Point tri-critique dans le plan (Δ, T) .



1/ Tracer rapidement le comportement de $F_L(T,\Delta,\phi)$ en fonction de ϕ 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

$$F_L(T_1, \Delta, \phi_1) = F_L(T_1, \Delta, 0) \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial F_L}{\partial \phi} \right|_{T_1, \Delta, \phi_1} = 0 .$$
(8.6)

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

- (a) En déduire la relation de définition de T_1 et l'expression de ϕ_1 en fonction de $c(T_1, \Delta)$ et d.
- (b) 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 (8.8) en fin d'énoncé.
- (c) En vous inspirant de la figure 2, tracer sur un diagramme (Δ,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 prépondérent dans (8.4) lorsque $\phi \to \pm \infty$.

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 ϕ 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'³He, 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 ϕ 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:

$$x_1 - x_0 = \frac{c}{2d} \frac{\partial b}{\partial \Delta} - \frac{b}{d} \frac{\partial c}{\partial \Delta} , \qquad (8.7)$$

où toutes les fonctions sont évaluées en (T_1, Δ) .

- (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 (8.4)? Comparer avec le résultat expérimental.

3/ Montrer que dans la phase ordonnée le paramètre d'ordre vaut $\phi^2 = \frac{1}{3d} \left[-c + \sqrt{c^2 - 3bd}\right]$ (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,Δ) , ϕ s'annule typiquement comme $(T_t-T)^{1/4}$: l'exposant β vaut $\frac{1}{4}$ dans notre théorie de champ moyen².
- (b) En fait, la valeur de β 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 (Δ,T) . Tracer les lignes de transition du 1^{er} et du 2^d 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 β .
- (c) Déterminer la valeur de l'exposant critique δ en considérant la réponse à un champ extérieur au point tri-critique.
- (d) Montrer que l'exposant ν 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 ξ 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'un température de transition T_0 où ξ et ϕ 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 β et ν . 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

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_0 = -\frac{(\partial f/\partial x)_0}{(\partial f/\partial y)_0}, \qquad (8.8)$$

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 β est un exposant critique, $\beta \neq 1/k_B T$!

Percolation

9.1 Champ moyen pour la percolation de site

On considère le modèle de percolation de site sur un réseau de coordinance z. On note p la probabilité pour qu'un site soit occupé. On introduit un site fantôme auquel chaque site occupé peut être artificiellement connecté. La probabilité pour qu'un site occupé soit effectivement considéré comme faisant partie des plus proches voisins du fantôme est q. On intoduit un champ extérieur effectif h par $q \stackrel{\text{def}}{=} 1 - \exp\{-h\}$.

1/ Soit P_i la probabilité pour que le site i appartienne à l'amas percolant. Dans la limite thermodynamique où l'on peut négliger les effets de bord, cette probabilité ne dépend pas de i et on la note P. Montrer, en explicitant les hypothèses simplificatrices associées, que dans l'approximation de champ moyen on a

$$1 - P = 1 - p + p \left(1 - P\right)^{z} e^{-h} .$$
(9.1)

2/ On se place tout d'abord en "champ nul", c'est à dire h = 0 (on débranche le fantôme).

- (a) Proposer une résolution graphique de l'équation (9.1) afin de déterminer la dépendance de P en fonction de p. En déduire la valeur du seuil de percolation p_c prédite par le champ moyen. Comparer avec le résultat numérique pour le réseau carré à deux dimensions: $p_c = 0.592746...$ Montrer que $P(p) \leq p$. Tracer l'allure de la courbe P(p).
- (b) On se place dans le cas où $p \to p_c^+$. Résoudre l'équation (9.1) de manière approchée. Montrer que dans cette limite on obtient $P \propto (p p_c)^{\beta}$. Quelle est la valeur de l'exposant β prédite par la théorie de champ moyen? Aviez-vous tracé le bon comportement de P(p) pour $p \to p_c^+$ à la question précédente?
- **3**/ On se place maintenant en "champ non nul" $(h \neq 0)$.
 - (a) On se place tout d'abord dans la limite $p \to 0$. Déterminer la dépendance de P en fonction de p et h en supposant que P est petit (P est d'ordre p).
 - (b) Tracer rapidement l'allure de P(p) pour $h \neq 0$.
 - (c) Calculer $\partial P/\partial h|_{h=0}$ pour $p \in [0,1]$. En déduire la valeur de l'exposant γ prédite par la théorie de champ moyen.
 - (d) On se place à $p = p_c$. Montrer qu'en champ faible on a $z(z 1)P^2 = 2h + O(h)$. En déduire la valeur de l'exposant δ prédite par la théorie de champ moyen. Vérifier l'identité de Widom.

9.2 Percolation sur l'arbre de Bethe

On considère un arbre de Bethe (ou arbre de Cayley). Le taux de branchement est b, excepté au centre où il vaut b + 1. b est relié au nombre de plus proches voisins ν d'un site par la relation triviale

 $b = \nu - 1$. On note en outre le nombre d'itérations ℓ . C'est un entier ≥ 1 . cf. FIGURE 9.2.



Figure 9.2: Arbre de Bethe où b = 3 (c'est-à-dire $\nu = 4$) et $\ell = 3$.

1/ Si $n_{\ell}(\nu)$ désigne le nombre de sites apparaissant à la $\ell^{\text{ième}}$ itération, montrer que

$$n_1(\nu) = 1$$
 et $n_\ell(\nu) = \nu(\nu - 1)^{\ell - 2}$ lorsque $\ell \ge 2$. (9.2)

2/ En déduire que le nombre total de sites présents à la $\ell^{i eme}$ génération sur l'arbre de Bethe est

$$N_{\ell}(\nu) = \frac{\nu(\nu-1)^{\ell-1} - 2}{\nu - 2} .$$
(9.3)

Quand $\ell \to \infty$, $\frac{n_{\ell}(\nu)}{N_{\ell}(\nu)} \to \frac{\nu-2}{\nu-1} < \infty$. Vous avez vu en cours que la finitude de cette limite implique que l'arbre de Bethe correspond à un modèle où la dimension du système est infinie et donc plus grande que la dimension critique supérieure. L'arbre de Bethe offre de surcroît une structure adéquate à celui qui souhaite étudier un système — par exemple percolant — dans le cadre d'une théorie de champ moyen.

3/ Par définition du taux de branchement, on ajoute à chaque itération $b = \nu - 1$ nouveaux liens à tout site de la génération précédente. Si p désigne la probabilité qu'un lien soit passant (ou qu'un site soit occupé), le nombre moyen de liens actifs nouvellement attachés à un site de la précédente génération (ou le nombre moyen de sites nouvellement créés qui ont la possibilité d'être occupés) est nécessairement $pb = p(\nu - 1)$. Montrer que la probabilité critique de percolation est

$$p_{\rm c} = \frac{1}{b} = \frac{1}{\nu - 1}.\tag{9.4}$$

Lorsque $p > p_c$, l'arbre de Bethe est percolant (par exemple *conducteur*, pour se fixer les idées). Il ne l'est pas lorsque $p < p_c$ (il est alors *isolant* si l'on reprend l'analogie arbre de Bethe \equiv réseau électrique).

4/ En reprenant le raisonnement des questions 1. et 2., en supposant que le site central est toujours occupé et en se basant sur l'évidence que s'il y a un phénomène de percolation, un site ne peut être occupé que si le site qui le précède est également occupé, montrer que le nombre moyen de sites occupés sur un arbre de Bethe comportant un grand nombre de générations s'écrit sous le seuil de percolation

$$N(p_{\rm c} - p) = \frac{p_{\rm c}(p+1)}{p_{\rm c} - p}.$$
(9.5)

Ce nombre correspond à la taille moyenne X des amas occupés, qui diverge en p_c selon la loi de puissance

$$X \underset{p \to p_{\rm c}}{\propto} |p - p_{\rm c}|^{-\gamma}. \tag{9.6}$$

Trouver γ .

5/ Notons P (resp. Q) la probabilité qu'un site du réseau appartienne à un chemin actif traversant l'arbre tout entier (resp. la probabilité qu'un site du réseau ne soit pas connecté aux extrémités de l'arbre par un chemin actif qui en émane).

1. Un site ne peut être connecté à un chemin passant traversant tout le réseau pour deux raisons. Lesquelles? En déduire que

$$P = p(1 - Q^{\nu}). \tag{9.7}$$

2. Pour deux raisons particulières, un site peut ne pas être connecté aux bords du réseau par un chemin passant qui s'en échappe. Lesquelles? Montrer qu'il en résulte

$$Q^{\nu-1} - \frac{Q}{p} + \frac{1-p}{p} = 0.$$
(9.8)

3. Résoudre les équations (9.7) et (9.8) dans le cas tout particulier où $\nu = 3$ (et donc où $p_c = \frac{1}{2}$). Les solutions correspondantes sont

$$(P_1,Q_1) = (0,1)$$
 et $(P_2,Q_2) = \left(p + \frac{(p-1)^3}{p^2}, \frac{1-p}{p}\right).$ (9.9)

Il est par définition évident que la solution (P_1,Q_1) est caractéristique du régime « isolant » $(p < p_c)$ et que la solution (P_2,Q_2) ne doit être considérée que si l'arbre de Bethe est percolant $(p > p_c)$.

4. Calculer l'exposant critique β gouvernant la loi de puissance

$$P \underset{p \to p_c^+}{\propto} (p - p_c)^{\beta} \stackrel{(\nu=3)}{=} \left(p - \frac{1}{2} \right)^{\beta}.$$
(9.10)

9.3 Renormalisation pour la percolation de site

On étudie la percolation de site sur un réseau bi-dimensionnel triangulaire par la technique de renormalisation dans l'espace réel.

Un ensemble de trois sites voisins au sommet d'un triangle est remplacé par un "super-site" qui est occupé si et seulement si deux (ou plus) des trois sites initiaux le sont. On aboutit alors à un "super-réseau" qui est représenté sur la figure ci-contre.

Le réseau initial est dessiné en traits pleins et le superréseau en pointillés. Chaque super-site regroupe les trois sites placés dans la région grisée autour de lui. La possible occupation (ou au contraire la vacance) des sites n'est pas représentée sur la figure. Si le réseau initial a un pas unité, le super-réseau aura un pas $b = \sqrt{3}$.



1/ Soit p' la probabilité d'occupation d'un super-site, et p celle d'un site initial. Écrire p' comme une fonction p' = f(p). Tracer cette fonction et en déduire la valeur prédite pour la probabilité critique p_c par notre procédure de renormalisation. Comparer à la valeur exacte.

2/ On veut déterminer la valeur de l'exposant critique ν qui décrit la divergence de la longueur de corrélation ξ au voisinage de la transition. On écrit pour le réseau initial $\xi = |p - p_c|^{-\nu}$ et pour le super-réseau la même formule donne $\xi = b |p' - p_c|^{-\nu}$.

Déterminer la valeur de ν qui découle de cette approche. Comparer avec le résultat exact $\nu = 4/3$.

Aspects dynamiques

10.1 Effondrement d'un précipité

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

$$F_{L}[\phi] = F_{0}(T) + \int_{\mathbb{R}^{d}} \mathrm{d}^{d}r \left\{ g |\vec{\nabla}\phi|^{2} + f_{L}(\phi(\vec{r})) \right\} \quad \text{avec} \quad f_{L}(\phi) = a(T - T_{C})\phi^{2} + d\phi^{4} \; .$$

On se place à $T < T_c$, en l'absence de champ magnétique, et on appelle ϕ_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 ϕ_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 Γ 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 $\varphi(r,t)$.
 - (b) On impose en outre que φ(r,t) soit de la forme φ(r,t) = ψ(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'epaisseur e de l'interface, ce que l'on admettra désormais. On a donc une configuration du type illustré cicontre.

Montrer que ψ est solution de



$$2g\Gamma\frac{\mathrm{d}^{2}\psi}{\mathrm{d}r^{2}} + \left[2g\Gamma\frac{d-1}{r} + \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t}\right]\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r} - \Gamma\frac{\partial f_{L}}{\partial\psi} = 0, \qquad (10.1)$$

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'interface¹, montrer que l'on obtient l'équation d'évolution

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} + 2g\Gamma\frac{d-1}{R} = 0.$$
(10.2)

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

^{1.} C'est à dire par exemple en faisant $\int_{R-e/2}^{R+e/2} \mathrm{d}r...$

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 $F_{\rm vis} = -\eta \, dR/dt$ où $\eta = \sigma/(2g\Gamma)$ est le coefficient de viscosité et σ la tension de surface.

- (a) Déterminer l'expression de la force de tension superficielle par unité de surface F_{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 résorbtion de la boule tend vers une constante. Dans ce cas l'accélératation devient nulle et les deux forces F_{vis} et F_{tens} s'équilibrent. Montrer que cela conduit à l'équation (10.2).

3/ On discute à présent une configuration légrement 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_{vis} , F_{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.

10.2 Fronts : existence, stabilité, relaxation

On se place en une dimension et l'on part de l'équation d'évolution du paramètre d'ordre

$$\partial_t \phi = \partial_x^2 \phi - f'(\phi)$$

où l'on a éliminé les constantes en les absorbant dans une redéfinition du champ et des couplages. Notre but est d'étudier la propagation d'un front entre un état stable et un état métastable. Si f possède deux minimas locaux, on se ramène par translation au cas où ces minima sont $\phi = 0$ et $\phi = \phi_s \neq 0$.

1. Montrer que les solutions de $f'(\phi) = 0$ sont linéairement stables (inutile d'invoquer la forme explicite de f).

2. On imagine qu'en $x = -\infty$, $\phi = \phi_s$ et qu'en $x = +\infty$, $\phi = 0$. L'interface (mal définie) entre les deux états va évoluer au cours du temps. À quelle condition sur $\Delta V = f(0) - f(\phi_s)$ existe-t-il une solution se propageant à vitesse constante v vers la droite?

3. On cherche une telle solution en posant $\xi_v = x - vt$ et $\phi_v(\xi_v) = \phi(x,t)$. Réécrire l'équation d'évolution en terme de ϕ_v et de ses dérivées. Résoudre cette équation pour v = 0 et $f(\phi) = \frac{r}{2}\phi^2 + \frac{g}{4!}\phi^4$ (r < 0).

4. Que pouvez-vous dire des solutions de l'équation de la question 3 lorsque v est très grande. Montrer qu'il existe une vitesse v_0 telle qu'une solution satisfaisant les conditions aux limites de 2 soit unique.

5. Que se passe-t-il pour $v < v_0$ pour le profil de densité? Montrer qualitativement qu'il existe une suite de vitesses $v_0 > v_1 > v_2$... associées à des solutions stables.

6. On se donne une solution $\phi_{v_i}(\xi_v)$; pour en étudier les propriétés de stabilité linéaire, on pose

$$\phi_{v_i}(\xi_v, t) = \phi_{v_i}(\xi_v) + \eta(\xi_v, t), \quad \eta(\xi_v, t) = A e^{-Et - v\xi_v/2} \psi_E(\xi_v)$$

Montrer que ψ_E est solution d'une équation de Schödinger pour une particule de masse $m = \hbar^2$ soumise à un potentiel $U(\xi_v)$ que l'on précisera en fonction de v et f.

7. Interpréter les parties continue et discrète du spectre du hamiltonien quantique équivalent.