Physique Statistique (PHY434)
Maxime Dahan
Année 2016-2017

Devoir à la maison
A rendre le mardi 16 mai 2017

1 Le modèle d'Ising à une dimension

On considère dans tout ce problème un système dont le microétat est caractérisé par un ensemble de N spins, décrits par des variables $\{s_i\}_{i=1\cdots N}$ valant -1 ou $+1$. Ce système est placé en contact avec un thermostat à la température T.

L'énergie d'un microétat vaut

$$E = -B\sum_{i=1}^{N} s_i - J\sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - J s_N s_1$$

où J et B sont deux paramètres réels et positifs.

1. Ce hamiltonien a été proposé, à l'origine, pour modéliser le ferromagnétisme. A quoi correspondent physiquement les deux paramètres J et B, et quel est l'effet des termes correspondants ? En quoi cette modélisation est-elle simplifiée ?
2. Décrire, sans calcul, l'état du système suivant que chacun des paramètres J et B est très petit ou très grand devant $k_B T$ (quatre cas).
3. Rappeler la définition de la fonction de partition canonique $Z(\beta, B, J)$. Expliquer comment on obtient la magnétisation moyenne $M = \langle \sum_{i=1}^{N} s_i \rangle$ à partir de $Z(\beta, B, J)$.
4. Calculer Z et M pour $J = 0$.
5. Nous allons maintenant faire le calcul dans le cas général. Ecrire la fonction de partition sous la forme
$$Z(\beta, B, J) = \sum_{\{s_i\}} \left[\prod_{i=1}^{N-1} \Lambda(s_i, s_{i+1})\right] \Lambda(s_N, s_1)$$
où $\Lambda(s, s')$ est une fonction de s et de s' qu'on explicitera (Remarque : il existe plusieurs choix possibles. On pourra par exemple chercher une expression symétrique par rapport aux variables s et s').
6. Puisque $s = \pm 1$ et $s' = \pm 1$, on peut écrire $\Lambda(s, s')$ sous forme d'une matrice 2×2 dont les lignes sont repérées par l'indice s et les colonnes par l'indice s'. Ecrire cette matrice Λ et montrer que
$$Z(\beta, B, J) = \mathrm{tr}\, \Lambda^N.$$
7. Déterminer les valeurs propres λ_+ et λ_- de la matrice Λ, avec $\lambda_+ \geq \lambda_-$. En déduire l'expression de $Z(\beta, B, J)$.
8. Déterminer l'énergie libre et la magnétisation moyenne dans la limite $N \to \infty$. Vérifier qu'on retrouve le résultat de la question 4 pour $J = 0$.
9. Comment se compare le résultat pour M avec celui prédit par une théorie de champ moyen vue en amphi ? En particulier, y-a t il une transition para-ferro ?

10. On cherche maintenant à calculer la fonction de correlation $\langle s_n s_m \rangle$ (on suppose $m > n$). Montrer que $\langle s_n s_m \rangle$ peut s'écrire :

$$\langle s_n s_m \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{tr} \left(\Lambda^{n-1} \tau \Lambda^{m-n} \tau \Lambda^{N-m+1} \right)$$

avec τ la matrice donnée par :

$$\tau = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

11. On introduit les vecteurs propres de $|+\rangle$ et $|-\rangle$ de Λ associés aux valeurs propres λ_+ et λ_-. Montrer que dans la limite N grand,

$$\langle s_n s_m \rangle = \langle 1|\tau 1|\rangle^2 + \frac{\lambda_-^{m-n}}{\lambda_+^{m-n}} \langle 1|\tau|2\rangle^2$$

12. Montrer que lorsque $B = 0$, $\langle 1|\tau 1|\rangle = 0$ et $\langle 1|\tau 1|\rangle = 1$. En déduire que :

$$\langle s_n s_m \rangle = e^{-r/\xi}$$

avec $r = (m-n)a$ (a le pas du réseau) et la longueur de correlation $\xi = -a/\log(\tanh \beta J)$.

2 Equilibre chimique et fluctuations

On considère un ensemble de N particules indépendantes (N fixé) pouvant exister dans 2 états, notés A et B. On note $p_{n_A,n_B}(t)$ la probabilité qu'il y ait, à l'instant t, n_A particules A et n_B particules B ($n_A + n_B = N$). On note $\langle X \rangle(t)$ la moyenne d'une variable aléatoire X à la date t. On suppose qu'une particule peut changer d'état spontanément avec une probabilité par unité de temps k_1 :

$$\mathrm{A} \underset{k_1}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \mathrm{B}.$$

1. Dans le cas particulier où $N = 1$, exprimer $p_{0,1}(t)$, la probabilité que l'unique particule soit dans l'état B, en fonction de celle qu'elle soit dans l'état A, $p_{1,0}(t)$. Écrire l'équation maîtresse à laquelle satisfait $p_{1,0}(t)$.
2. Écrire l'équation maîtresse à laquelle satisfait $p_{n_A,n_B}(t)$ dans le cas général ($N \neq 1$). Préciser au besoin une convention sur $p_{-1,N+1}$ ou $p_{N+1,-1}$.
3. Montrer que l'on peut exprimer directement $p_{n_A,n_B}(t)$ en fonction de $p_{1,0}(t)$. Quelle hypothèse faut-il faire sur les conditions initiales ?
4. Vérifier, en reportant cette forme dans l'équation maîtresse écrite plus haut, qu'elle est bien solution.
5. On appelle $N_A(t)$ (resp. $N_B(t)$) la variable aléatoire «nombre de particules A (resp. B) à l'instant t». Donner la loi de $N_A(t)$, puis sa moyenne et sa variance.
6. Résoudre l'équation maîtresse pour $p_{1,0}(t) = p(t)$ pour la condition initiale $p(0) = 0$. En déduire l'expression de la moyenne puis de l'écart-type de N_A en fonction de t. En tracer l'allure.