

Mock Exam: Le modèle de Potts

December 20, 2024

Exercice 1 Le modèle de Potts

Le modèle de Potts est une généralisation du modèle d'Ising, utilisé pour décrire des systèmes physiques dans lesquels chaque site (ou spin) peut prendre q états possibles au lieu de seulement deux. Il est particulièrement utile pour étudier des transitions de phase dans des systèmes présentant une symétrie discrète d'ordre q . L'hamiltonien du modèle de Potts dans sa version complètement connectée est donné par :

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N \delta(\sigma_i, \sigma_j) - \sum_i \sum_{\tau=1}^q h_\tau \delta(\sigma_i, \tau) \quad (1)$$

où $\sigma_i \in \{1, 2, \dots, q\}$ représente l'état du spin i , $\delta(\sigma_i, \sigma_j)$ est le delta de Kronecker¹, et $J > 0$ est le paramètre d'interaction. Les h_τ sont des champs magnétiques externes dans la direction $\tau = 1, \dots, q$. On travaillera dans le formalisme *canonique* à température $\beta = 1/k_b T$.

Q1. Montrez que:

- a) La fraction de spins dans l'état τ , notée ρ_τ , est donnée par la dérivée de $\ln Z$ par rapport au champ magnétique:

$$\rho_\tau = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial (\beta h_\tau)} \quad (2)$$

- b) L'énergie moyenne $\langle \mathcal{H} \rangle$ est donnée par:

$$\langle \mathcal{H} \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (3)$$

- c) Pour $q = 2$, montrez que l'hamiltonien se réduit à celui du modèle d'Ising à une constante près. Quelle est la relation entre la magnétisation du modèle d'Ising et les fractions ρ_τ du modèle de Potts?

¹On rappelle que le delta de Kronecker est défini comme

$$\delta(\sigma_i, \sigma_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sigma_i = \sigma_j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Q2. Dans l'approximation de champ moyen, chaque spin i perçoit un hamiltonien effectif:

$$\mathcal{H}_i = -J \sum_{\tau=1}^q \delta(\sigma_i, \tau) \rho_\tau - \sum_{\tau=1}^q h_\tau \delta(\sigma_i, \tau) \quad (4)$$

a) Montrez que les fractions ρ_τ satisfont l'équation auto-cohérente:

$$\rho_k = \frac{e^{\beta J \rho_k + \beta h_k}}{\sum_{\tau=1}^q e^{\beta J \rho_\tau + \beta h_\tau}} \quad (5)$$

b) Pour $q = 2$ et $h_\tau = 0$, montrez que la magnétisation $m = \rho_1 - \rho_2$ satisfait l'équation classique du modèle d'Ising:

$$m = \tanh\left(\frac{\beta J}{2} m\right) \quad (6)$$

Q3. On rappelle l'inégalité fondamentale de la méthode variationnelle: pour toute distribution $Q(\{\sigma\})$,

$$\ln Z \geq -\beta \langle \mathcal{H} \rangle_Q + S(Q) \quad (7)$$

où $S(Q)$ est l'entropie de la distribution Q et $\langle \cdot \rangle_Q$ dénote la moyenne sur Q .

a) En utilisant une distribution d'essai factorisée $Q(\{\sigma\}) = \prod_i q(\sigma_i)$ avec $q(\sigma_i = \tau) = \rho_\tau$, montrez que:

$$\frac{1}{N} \ln Z \geq \beta \frac{J}{2} \sum_{\tau=1}^q \rho_\tau^2 + \beta \sum_{\tau=1}^q h_\tau \rho_\tau - \sum_{\tau=1}^q \rho_\tau \ln \rho_\tau \quad (8)$$

b) En maximisant cette borne inférieure par rapport aux ρ_τ , retrouvez l'équation auto-cohérente de la question précédente.

Q4. En l'absence de champs magnétiques externes ($h_\tau = 0$), étudions la transition de phase.

a) Pourquoi est-il naturel de chercher une solution de la forme:

$$\rho_1 = \frac{1}{q} + \delta, \quad \rho_{\tau>1} = \frac{1}{q} - \frac{\delta}{q-1} \quad (9)$$

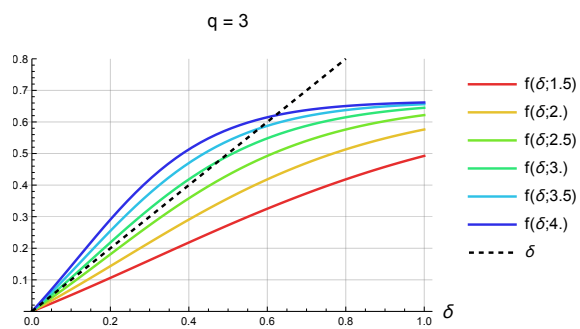
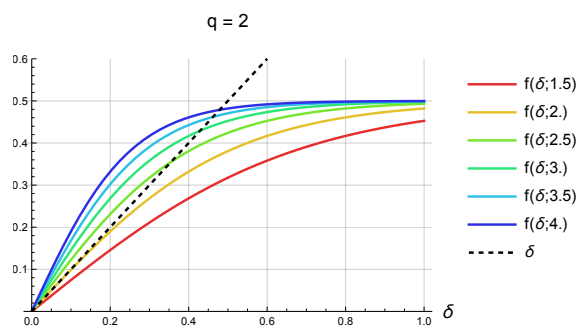
b) En linéarisant l'équation auto-cohérente autour de $\delta = 0$, montrez qu'une solution non-triviale apparaît pour:

$$\beta_c J = q \quad (10)$$

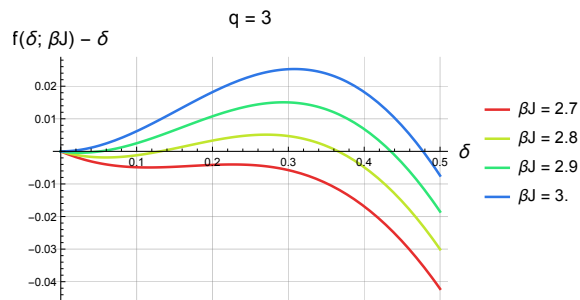
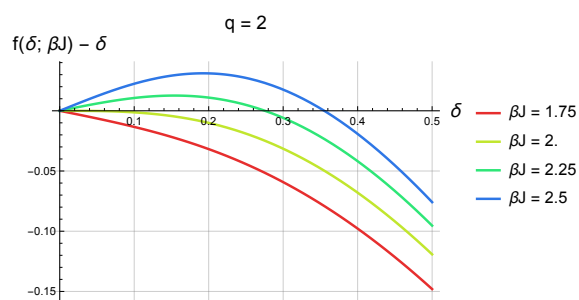
Q5. Pour finir, nous allons vérifier numériquement que notre calcul donne le bon résultat. Pour cela nous allons regarder numériquement les solutions de l'équation:

$$\delta = f(\delta; \beta J) := \frac{1}{1 + (q-1)e^{-\beta J \delta \frac{q}{q-1}}} - \frac{1}{q}$$

pour $q = 3$. Nous observons ce graphe:



et on peut aussi ploter la différence entre f



- Observez le graphe de $f(\delta; \beta J)$ pour $q = 2$. Est-ce que notre calcul pour la transition de phase donne la bonne valeur de T_c ?
- A $q = 3$, est-ce que notre calcul pour la transition de phase donne la bonne valeur de T_c ? Que se passe-t-il ici?

Solution of Exercise 1

Q1. a) Pour démontrer cette relation, partons de la fonction de partition dans l'ensemble canonique

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left(\frac{\beta J}{2N} \sum_{i,j=1}^N \delta(\sigma_i, \sigma_j) + \beta \sum_i \sum_{\tau=1}^q h_\tau \delta(\sigma_i, \tau) \right) \quad (11)$$

pour commencer on peut voir le dérivée que nous intéresse

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta h_\tau} = \sum_{\{\sigma\}} \delta(\sigma_i, \tau) \frac{1}{Z} e^{\frac{\beta J}{2N} \sum_{i,j=1}^N \delta(\sigma_i, \sigma_j) + \beta \sum_i \sum_{\tau=1}^q h_\tau \delta(\sigma_i, \tau)}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \sum_{\{\sigma\}} \mathcal{H} \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (13)$$

La fraction de spins dans l'état τ est définie comme la moyenne thermique de l'opérateur $\frac{1}{N} \sum_i \delta(\sigma_i, \tau)$ sur tous les sites. Parce que l'opérateur compte le nombre de site qui sont alignés avec τ . Donc on a que pour linéarité de la valeur d'expectation

$$\rho_\tau = \frac{1}{N} \sum_i \langle \delta(\sigma_i, \tau) \rangle \quad (14)$$

En utilisant la définition de la moyenne thermique

$$\rho_\tau = \frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \delta(\sigma_i, \tau) e^{-\beta \mathcal{H}} = \frac{1}{NZ} \frac{\partial}{\partial (\beta h_\tau)} \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial (\beta h_\tau)} \quad (15)$$

ou on reconnaît la dérivée déjà calculée.

b) Pour l'énergie moyenne, nous pouvons procéder avec le même raisonnement. Nous utilisons la définition

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \mathcal{H} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (16)$$

En notant que

$$\frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta \mathcal{H}} = -\mathcal{H} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (17)$$

nous pouvons écrire

$$\langle \mathcal{H} \rangle = -\frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta \mathcal{H}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} Z = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (18)$$

- c) Pour $q = 2$, chaque spin peut prendre deux valeurs $\sigma_i \in \{1, 2\}$. Définissons $s_i = 2\delta(\sigma_i, 1) - 1$ qui prend les valeurs ± 1 comme dans le modèle d'Ising. Alors

$$\delta(\sigma_i, \sigma_j) = \frac{1}{2}(1 + s_i s_j), \quad \delta(\sigma_i, 1) = \frac{1}{2}(1 + s_i), \quad \delta(\sigma_i, 2) = \frac{1}{2}(1 - s_i) \quad (19)$$

En substituant dans l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{2}(1 + s_i s_j) - \sum_i \left(h_1 \frac{1 + s_i}{2} + h_2 \frac{1 - s_i}{2} \right) \quad (20)$$

$$= -\frac{J}{4N} \sum_{i,j=1}^N s_i s_j - \frac{h_1 - h_2}{2} \sum_i s_i - \underbrace{\left(\frac{JN}{4} + \frac{h_1 + h_2}{2} N \right)}_{\text{const. en } s} \quad (21)$$

qui est bien la forme de l'hamiltonien d'Ising avec un couplage $J/2$ et un champ magnétique $(h_1 - h_2)/2$. La magnétisation du modèle d'Ising est reliée aux fractions ρ_τ par

$$m = \langle s_i \rangle = 2\rho_1 - 1 = 1 - 2\rho_2 \quad (22)$$

- Q2.** a) Dans l'approximation de champ moyen, chaque spin est soumis au hamiltonien effectif

$$\mathcal{H}_i = -J \sum_{\tau=1}^q \delta(\sigma_i, \tau) \rho_\tau - \sum_{\tau=1}^q h_\tau \delta(\sigma_i, \tau) \quad (23)$$

La probabilité d'avoir $\sigma_i = k$ est donnée par le facteur de Boltzmann

$$P(\sigma_i = k) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}_i |_{\sigma_i=k}}}{\sum_{\tau=1}^q e^{-\beta \mathcal{H}_i |_{\sigma_i=\tau}}} \quad (24)$$

En substituant l'expression du hamiltonien effectif

$$P(\sigma_i = k) = \frac{e^{\beta J \rho_k + \beta h_k}}{\sum_{\tau=1}^q e^{\beta J \rho_\tau + \beta h_\tau}} \quad (25)$$

Par définition, ρ_k est la moyenne de $\delta(\sigma_i, k)$ sur tous les sites. Dans l'approximation de champ moyen, cette moyenne est égale à la probabilité que chaque spin soit dans l'état k , donc

$$\rho_k = P(\sigma_i = k) = \frac{e^{\beta J \rho_k + \beta h_k}}{\sum_{\tau=1}^q e^{\beta J \rho_\tau + \beta h_\tau}} \quad (26)$$

Cette équation est l'équation auto-cohérente recherchée.

- b) Pour $q = 2$ et $h_\tau = 0$, nous avons deux équations couplées

$$\rho_1 = \frac{e^{\beta J \rho_1}}{e^{\beta J \rho_1} + e^{\beta J \rho_2}} \quad (27)$$

$$\rho_2 = \frac{e^{\beta J \rho_2}}{e^{\beta J \rho_1} + e^{\beta J \rho_2}} \quad (28)$$

avec la contrainte $\rho_1 + \rho_2 = 1$. Définissons $m = \rho_1 - \rho_2$. Alors

$$\rho_1 = \frac{1+m}{2} \quad (29)$$

$$\rho_2 = \frac{1-m}{2} \quad (30)$$

En substituant dans l'équation pour ρ_1

$$\frac{1+m}{2} = \frac{e^{\beta J(1+m)/2}}{e^{\beta J(1+m)/2} + e^{\beta J(1-m)/2}} = \frac{1}{1 + e^{-\beta Jm}} = \frac{1}{2}(1 + \tanh(\beta Jm/2)) \quad (31)$$

Donc

$$m = \tanh(\beta Jm) \quad (32)$$

qui est bien l'équation classique du modèle d'Ising en champ moyen.

Q3. a) Utilisons la distribution d'essai factorisée

$$Q(\{\sigma\}) = \prod_i q(\sigma_i) \quad \text{avec} \quad q(\sigma_i = \tau) = \rho_\tau \quad (33)$$

Calculons d'abord la moyenne de l'hamiltonien sur cette distribution

$$\langle \mathcal{H} \rangle_Q = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N \langle \delta(\sigma_i, \sigma_j) \rangle_Q - \sum_i \sum_{\tau=1}^q h_\tau \langle \delta(\sigma_i, \tau) \rangle_Q \quad (34)$$

$$= -\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\tau=1}^q \rho_\tau \rho_\tau - \sum_i \sum_{\tau=1}^q h_\tau \rho_\tau = -\frac{JN}{2} \sum_{\tau=1}^q \rho_\tau^2 - N \sum_{\tau=1}^q h_\tau \rho_\tau \quad (35)$$

L'entropie de la distribution Q est donne de la définition d'entropie d'une distribution

$$S(Q) = - \sum_{\{\sigma\}} Q(\{\sigma\}) \ln Q(\{\sigma\}) = -N \sum_{\tau=1}^q \rho_\tau \ln \rho_\tau \quad (36)$$

En substituant dans l'inégalité variationnelle on obtiens directement le résultat cherche

$$\frac{1}{N} \ln Z \geq \beta \frac{J}{2} \sum_{\tau=1}^q \rho_\tau^2 + \beta \sum_{\tau=1}^q h_\tau \rho_\tau - \sum_{\tau=1}^q \rho_\tau \ln \rho_\tau \quad (37)$$

b) Pour maximiser la borne inférieure, nous devons dériver par rapport à ρ_k en tenant compte de la contrainte $\sum_{\tau=1}^q \rho_\tau = 1$ via un multiplicateur de Lagrange λ

$$\frac{\partial}{\partial \rho_k} \left[\beta \frac{J}{2} \sum_{\tau=1}^q \rho_\tau^2 + \beta \sum_{\tau=1}^q h_\tau \rho_\tau - \sum_{\tau=1}^q \rho_\tau \ln \rho_\tau - \lambda \left(\sum_{\tau=1}^q \rho_\tau - 1 \right) \right] = 0 \quad (38)$$

Cette équation donne

$$\beta J \rho_k + \beta h_k - \ln \rho_k - 1 - \lambda = 0 \quad (39)$$

Donc

$$\rho_k = e^{\beta J \rho_k + \beta h_k - 1 - \lambda} \quad (40)$$

La constante de normalisation λ est déterminée par la condition $\sum_{\tau=1}^q \rho_\tau = 1$

$$e^{1+\lambda} = \sum_{\tau=1}^q e^{\beta J \rho_\tau + \beta h_\tau} \quad (41)$$

En substituant, on retrouve l'équation auto-cohérente de la question précédente

$$\rho_k = \frac{e^{\beta J \rho_k + \beta h_k}}{\sum_{\tau=1}^q e^{\beta J \rho_\tau + \beta h_\tau}} \quad (42)$$

Cette cohérence entre les approches variationnelle et de champ moyen n'est pas surprenante : l'approximation de champ moyen peut être vue comme la meilleure approximation factorisée au sens variationnel.

- Q4.** a) Sans champ magnétique externe, l'hamiltonien est symétrique sous les permutations des q états. À haute température ($\beta J \ll 1$), cette symétrie est respectée et tous les états sont également peuplés

$$\rho_\tau = \frac{1}{q} \quad \forall \tau \quad (43)$$

À basse température, cette symétrie peut être spontanément brisée avec un état devenant plus peuplé que les autres. Pour des raisons de symétrie, les $q - 1$ états non favorisés doivent avoir la même population. En notant δ l'écart à l'équirépartition pour l'état favorisé (que nous choisissons arbitrairement comme étant l'état 1), la conservation de la probabilité totale impose

$$\sum_{\tau=1}^q \rho_\tau = \left(\frac{1}{q} + \delta \right) + (q-1) \left(\frac{1}{q} - \frac{\delta}{q-1} \right) = 1 \quad (44)$$

- b) En substituant cette forme dans l'équation auto-cohérente pour ρ_1 sans champ magnétique

$$\frac{1}{q} + \delta = \frac{e^{\beta J (\frac{1}{q} + \delta)}}{e^{\beta J (\frac{1}{q} + \delta)} + (q-1) e^{\beta J (\frac{1}{q} - \frac{\delta}{q-1})}} = \frac{1}{1 + (q-1) e^{-\beta J \delta \frac{q}{q-1}}} \quad (45)$$

Pour δ petit, développons au premier ordre non trivial

$$e^{-\beta J \delta \frac{q}{q-1}} \approx 1 - \frac{\beta J \delta q}{q-1} \quad (46)$$

En substituant et développant au premier ordre en δ

$$\frac{1}{q} + \delta \approx \frac{1}{q} + \frac{\beta J \delta}{q} \quad (47)$$

Donc on trouve que

$$\beta_c J = q \quad (48)$$

- Q5.** a) Les graphes montrent deux comportements qualitativement différents:
- Pour $q = 2$ (Ising). À haute température il n'y a qu'une solution $\delta = 0$. À T_c (courbe rouge), la pente de $f(\delta)$ à $\delta = 0$ devient exactement 1. En dessous de T_c , deux nouvelles solutions symétriques $\pm\delta$ apparaissent continûment, s'éloignant progressivement de 0. C'est caractéristique d'une transition du second ordre : le paramètre d'ordre δ croît continûment à partir de zéro à T_c .
- Pour $q = 3$. À haute température, il n'y a qu'une solution $\delta = 0$ comme pour $q = 2$. À une température critique T_c , trois nouvelles solutions apparaissent discontinûment. La solution centrale devient instable (pente > 1). Les solutions extérieures sont stables et correspondent à un saut discontinu du paramètre d'ordre. C'est caractéristique d'une transition du premier ordre : δ fait un saut fini à la température critique T_c . Notez que cette température T_c est plus HAUTE que celle calculée précédemment (ou, si vous préférez, β_c est plus petit)! Cette transition de premier ordre arrive AVANT qu'une transition continue, de second ordre, se produise.
- Par conséquent, pour $q \geq 3$, notre estimation antérieure de T_c (qui supposait une transition continue) n'est plus correcte. Ainsi, dans le modèle de Potts en champ moyen, la transition discontinue intervient à une température supérieure à celle initialement prévue, modifiant sensiblement le scénario de la transition.