

Physique Statistique - PHYS338

Examen Final - 31 janvier 2025

NOM Prenom : \_\_\_\_\_

Sciper : \_\_\_\_\_

Cet énoncé de 13 pages comporte 3 exercices indépendants. Ecrivez vos réponses dans les espaces blancs. Toute réponse appelle une justification, même succincte ; tout calcul appelle une explication ; la rédaction se fait à l'encre indélébile ; Deux pages blanches supplémentaires sont fournies à la fin de chaque exercice, ainsi que deux pages supplémentaires à la fin de la copie.

## I Le Cristal d'hydrogène dans le formalisme canonique

1. **Rappels** On commence par un rappel du formalisme canonique, pour un système avec  $N_{et}$  états possibles en contact avec un thermostat à température inverse  $\beta = (k_b T)^{-1}$ . On rappelle que dans ce cas, chaque (micro-)état  $e$ , avec une énergie  $E_e$  apparaît avec une probabilité  $P(e) = e^{-\beta E_e} / Z(\beta)$ .

a. Montrer que l'énergie moyenne, et sa variance, du système sont données par

$$\langle E \rangle = -\partial_\beta \log Z(\beta), \quad \text{Var}(E) = \partial_\beta^2 \log Z(\beta). \quad (1)$$

**Solution:**

On rappelle la définition de fonction de partition comme somme sur le micro état

$$Z(\beta) = \sum_e e^{-\beta E_e}$$

donc on peut prendre directement le dérivée et obtenir

$$\begin{aligned} -\partial_\beta \log Z(\beta) &= \frac{1}{Z(\beta)} \sum_e E_e e^{-\beta E_e} =: \langle E \rangle \\ \partial_\beta^2 \log Z(\beta) &= -\partial_\beta \left[ \frac{1}{Z(\beta)} \sum_e E_e e^{-\beta E_e} \right] \\ &= -\frac{(\sum_e E_e e^{-\beta E_e})^2}{Z(\beta)^2} + \frac{\sum_e E_e^2 e^{-\beta E_e}}{Z(\beta)} \\ &= \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 =: \text{Var}(E) \end{aligned}$$

On rappelle la connexion avec la fonction génératrice des cumulants.

- b. Montrer que la chaleur spécifique  $C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$  est reliée à la variance de l'énergie par une relation que l'on déterminera.

**Solution:**

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} = -\frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{k_b T} \right) \cdot \partial_\beta^2 \log Z(\beta) = \frac{\text{Var}(E)}{k_b T^2}$$

- c. Montrer que l'entropie (donnée par  $S = -k_b \sum_{i=1}^{N_e} P(e_i) \log P(e_i)$ ) est reliée à l'énergie libre  $F = -k_b T \log(Z)$  par la relation :

$$S = \frac{\langle E \rangle - F}{T}. \quad (2)$$

**Solution:**

$$\begin{aligned} S &= -k_b \sum_i \frac{e^{-\beta e_i}}{Z(\beta)} \log \left( \frac{e^{-\beta e_i}}{Z(\beta)} \right) = -\frac{k_b}{Z(\beta)} \sum_i e^{-\beta e_i} (-\beta e_i) + k_b \log Z(\beta) \cdot 1 \\ &= k_b \beta \left( \frac{1}{Z(\beta)} \sum_i e_i e^{-\beta e_i} \right) + k_b \log Z(\beta) = \frac{\langle E \rangle}{T} - \frac{F}{T} \end{aligned}$$

2. **Le cristal d'hydrogène** Nous passons maintenant à l'exercice proprement dit : Un cristal de dihydrogène est en contact avec un thermostat à la température  $T$ . Les  $N$  molécules étant placées aux nœuds d'un réseau cristallin on les considérera comme discernables. On néglige par ailleurs leur énergie cinétique et leur énergie d'interaction. Une molécule peut être dans quatre états électroniques : l'état parahydrogène, noté (1), d'énergie  $\epsilon_1 = 0$ , et trois états orthohydrogène, notés (2), (3) et (4), d'énergie  $\epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = \Delta > 0$ .

- a. Calculer la fonction de partition du système.

**Solution:**

Les  $N$  molécules sont discernables et indépendantes. Donc

$$Z = z^N$$

où  $z$  est la fonction de partition d'une molécule et c'est donnée par

$$z = \sum_{\text{état } i} e^{-\beta \epsilon_i} = 1 + 3e^{-\beta \Delta}$$

Enfin,

$$Z = (1 + 3e^{-\beta \Delta})^N.$$

- b. En déduire l'énergie moyenne, la chaleur spécifique et les valeurs moyennes  $\langle n_i \rangle$ , pour  $i = 1, 2, 3, 4$ , du nombre de molécules dans l'état ( $i$ ).

**Solution:**

Avec la formule calculée dans la première partie de l'exercice on a que

$$\langle E \rangle = N\Delta \frac{3e^{-\beta\Delta}}{1 + 3e^{-\beta\Delta}}.$$

À  $T = 0$ , on a bien  $E = 0$  (parahydrogène) et quand  $T \rightarrow \infty$  on a  $E = \frac{3}{4}N\Delta$  (les états sont équiprobables).

Le chaleur spécifique est donnée par

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 3Nk(\beta\Delta)^2 \frac{e^{\beta\Delta}}{(3 + e^{\beta\Delta})^2}.$$

Pour une molécule la probabilité d'être dans un état  $i$  est donnée par le facteur de Boltzmann :

$$p_i = \frac{1}{z} e^{-\beta\epsilon_i}$$

donc

$$\langle n_i \rangle = Np_i.$$

Pour le premier état

$$\langle n_1 \rangle = N/z = \frac{N}{1 + 3e^{-\beta\Delta}}$$

et pour les autres

$$\langle n_2 \rangle = \langle n_3 \rangle = \langle n_4 \rangle = \frac{Ne^{-\beta\Delta}}{z} = \frac{Ne^{-\beta\Delta}}{1 + 3e^{-\beta\Delta}}$$

- c. Exprimer l'entropie en fonction de la température. Tracer l'allure de la fonction  $S(T)$ . Quelle est la limite de  $S(T)$  quand  $kT \gg \Delta$  ?

**Solution:**

L'entropie est donnée par

$$S = \frac{1}{T}(E - F)$$

où  $F = -kT \log(Z)$ . Donc

$$S = kN \left( \frac{3\beta\Delta}{3 + e^{\beta\Delta}} + \log(1 + 3e^{-\beta\Delta}) \right).$$

Quand  $\beta\Delta \rightarrow 0$  (haute température),  $S \rightarrow kN \log(4)$  et il y a bien  $4^N$  microétats équiprobables.

3. **Formalisme micro-canonique** Nous allons maintenant considérer ce problème dans le formalisme micro-canonique.
- Monter que le nombre de configurations telles que  $N_1$  molécules sont dans l'état (1),

$N_2$  dans l'état (2) etc... est donné par

$$\mathcal{N}(N_1, N_2, N_3, N_4) = \frac{N!}{N_1!N_2!N_3!N_4!} \quad (3)$$

**Solution:**

formule multinomiale

- b. En utilisant la formule de Stirling ( $\log N! \approx N \log N - N$ ), en déduire que l'entropie microcanonique  $S_{mc} = k_b(\log \mathcal{N}(N_1, N_2, N_3, N_4))$  est donnée dans la limite des grands  $N$  par

$$\frac{S_{mc}}{N} \approx -k_b \sum_{i=1}^4 n_i \log n_i, \quad n_i = \frac{N_i}{N} \quad (4)$$

**Solution:**

On peut calculer directement par propriété du logarithme

$$\begin{aligned} \frac{S_{mc}}{k_b} &= \log(N!) - \log(N_1!) - \log(N_2!) - \log(N_3!) - \log(N_4!) \\ &\approx N \log N - N - \sum_{i=1}^4 N_i \log N_i + \sum_{i=1}^4 N_i \end{aligned}$$

on a que  $\sum_{i=1}^4 N_i = N$  et donc la simplification des termes linéaire :

$$\frac{S_{mc}}{k_b} \approx \sum_{i=1}^4 N_i \log N - \sum_{i=1}^4 N_i \log N_i = - \sum_{i=1}^4 N_i \log \left( \frac{N_i}{N} \right)$$

et donc le résultat voulu.

- c. Pourquoi est-ce naturel de considérer que pour des grands  $N$ , on aura  $n_2 = n_3 = n_4 = n$  et  $n_1 = 1 - 3n$  ?

**Solution:**

La relation  $n_2 = n_3 = n_4 = n$  découle du fait que pour  $N$  grand,  $n_i$  se concentre et les états ayant la même énergie auront le même nombre de molécules. Ensuite, puisque nous devons avoir  $\sum_i n_i = 1$ , il s'ensuit que  $n_1 = 1 - 3n$ .

- d. Finalement, en utilisant la formule fondamentale du formalisme micro-canonique  $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$ , avec  $E = 3Nn\Delta$ , montrer que l'énergie dans ce formalisme est reliée à la température par la même formule qu'à la question (2) précédente (dans le formalisme canonique).

**Solution:**

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial E} = \frac{1}{3N\Delta} k_b N (-3 \log n - 3 + 3 \log(1 - 3n) + 3)$$

En retour, nous avons

$$-\beta\Delta = \log\left(\frac{n}{1-3n}\right)$$

En prenant l'exponentielle, on obtient

$$e^{-\beta\Delta} = \frac{n}{1-3n}$$

et enfin

$$e^{-\beta\Delta} = n(1+3e^{-\beta\Delta})$$

## II Élasticité des polymères

Un polymère est une longue chaîne de molécules —appelées monomères— qui se développe dans les trois directions de l'espace. Cette macromolécule peut atteindre des dimensions macroscopiques quand le nombre  $N$  de monomères devient grand. On supposera pour simplifier que le premier monomère est fixé à l'origine d'un repère orthonormé. On définit alors le vecteur  $\vec{R}$  qui part du début de la chaîne (à l'origine) et finit à son autre extrémité. Sa longueur  $|\vec{R}| = R_g$  définit la taille caractéristique  $R_g$  du polymère (voir Fig. 1).

Nous allons étudier un modèle très simplifié de polymère appelé "chaîne idéale". Dans cette approximation **il n'y a aucune interaction entre monomères**. Comme le montre la Figure 1, les configurations dans lesquelles certains monomères se croisent sont également autorisées.. Nous allons également négliger l'énergie cinétique et nous concentrer uniquement sur les configurations des polymères. Le polymère se comporte alors essentiellement comme une marche aléatoire dans l'espace. Chaque monomère est vu comme un bâtonnet indéformable de longueur  $\ell$ . **Nous supposons que toutes les configurations sont équiprobables.**

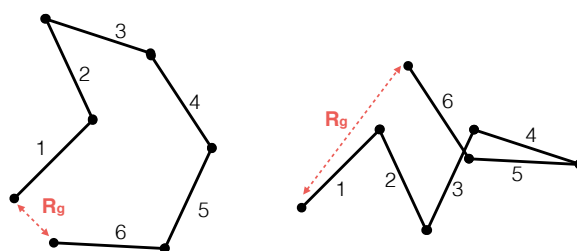


FIGURE 1 – Deux exemples de configurations valides pour notre modèle dans le cas d'un polymère composé de 6 monomères. On définit sa taille caractéristique  $R_g$  comme la distance entre le début et la fin de la chaîne.

1. Pourquoi, pour un système d'un seul monomère, la moyenne de la variable  $\vec{R}$  est elle nulle ; alors que l'esperance de  $|\vec{R}|^2 = \vec{R} \cdot \vec{R}$  vaut  $\ell^2$ . En déduire les moyennes et variances des variables  $R_x, R_y$  et  $R_z$  (c.a.d. les composantes du vecteur  $\vec{R}$ ).

**Solution:**

En raison de l'équiprobabilité des configurations, le système avec  $N = 1$  monomère est généré uniformément également dans l'orientation angulaire. Cela signifie que la valeur moyenne de  $\vec{R}$  dans chaque direction est nulle :

$$\langle \vec{R} \rangle = (\langle R_x \rangle, \langle R_y \rangle, \langle R_z \rangle) = (0, 0, 0).$$

Concernant la valeur attendue de  $|\vec{R}|^2$ , puisque pour  $N = 1$ , nous avons toujours  $|\vec{R}| = l$ , nous trouvons trivialement :

$$\mathbb{E}[|\vec{R}|^2] = \mathbb{E}[R_x^2] + \mathbb{E}[R_y^2] + \mathbb{E}[R_z^2] = l^2.$$

Enfin, par homogénéité spatiale, nous avons  $\mathbb{E}[R_x^2] = \mathbb{E}[R_y^2] = \mathbb{E}[R_z^2] = \frac{l^2}{3}$ .

2. Comment se comporte la variance de la somme de variables indépendantes ? En déduire les moyennes et variances de  $R_x, R_y$  et  $R_z$  pour un polymère de  $N$  monomères. En supposant que  $R_x, R_y, R_z$  sont indépendants, pourquoi la densité de probabilité de  $\vec{R} = (R_x, R_y, R_z)$ , quand  $N$  est suffisamment grand, s'écrit-elle :

$$P(\vec{R}, N) = \frac{e^{-\frac{3|\vec{R}|^2}{2N\ell^2}}}{\left(\frac{2\pi}{3}N\ell^2\right)^{3/2}} \quad (5)$$

### Solution:

En général, pour des variables indépendantes  $\{x_i\}$ ,  $\text{Var}[\sum_i x_i] = \sum_i \text{Var}[x_i]$ . Nous avons alors

$$\text{Var}[R_x] = \langle R_x^2 \rangle - \langle R_x \rangle^2 = \left\langle \sum_i (R_{x,i})^2 \right\rangle - 0 = N \langle R_{x,i}^2 \rangle = \frac{Nl^2}{3},$$

et la même expression est valable pour  $R_y$  et  $R_z$ .

D'après le théorème central limite,  $R_x, R_y$  et  $R_z$  convergent vers trois variables gaussiennes indépendantes avec une moyenne nulle et une variance  $\frac{Nl^2}{3}$ . Par conséquent, en utilisant l'indépendance, on peut également écrire :

$$P(\vec{R}, N) = P(R_x)P(R_y)P(R_z) = \frac{e^{-\frac{R_x^2}{2\text{Var}[R_x]}}}{\sqrt{2\pi\text{Var}[R_x]}} \frac{e^{-\frac{R_y^2}{2\text{Var}[R_y]}}}{\sqrt{2\pi\text{Var}[R_y]}} \frac{e^{-\frac{R_z^2}{2\text{Var}[R_z]}}}{\sqrt{2\pi\text{Var}[R_z]}}.$$

En substituant les valeurs des variances et en utilisant le fait que  $|\vec{R}|^2 = R_x^2 + R_y^2 + R_z^2$ , on retrouve le résultat.

3. En déduire la valeur moyenne de la taille caractéristique  $R_g$  en fonction de  $N$ . Notez que c'est une approximation due à la simplicité de notre modèle. Lorsque l'on simule un polymère en tenant compte des interactions (et en particulier du fait que les monomères doivent s'éviter et ne peuvent pas se traverser l'un et l'autre) on trouve  $R_g \propto N^{0.75}$  en dimension  $d = 2$  et  $R_g \propto N^{0.588}$  en  $d = 3$ . Qu'en pensez vous ?

**Solution:**

La valeur moyenne absolue peut être calculée en utilisant les coordonnées sphériques pour écrire :

$$\langle R_g \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{R}| P(\vec{R}) d\vec{R} = \frac{4\pi}{\left(\frac{2\pi}{3} N \ell^2\right)^{3/2}} \int_0^{+\infty} dR R^3 e^{-\frac{3R^2}{2N\ell^2}}.$$

Par intégration par parties, nous avons :

$$\langle R_g \rangle = \frac{4\pi}{\left(\frac{2\pi}{3} N \ell^2\right)^{3/2}} \left\{ \left[ R^2 \left( -\frac{N\ell^2}{3} \right) e^{-\frac{3R^2}{2N\ell^2}} \right]_0^{+\infty} + 2 \int_0^{+\infty} \frac{RN\ell^2}{3} e^{-\frac{3R^2}{2N\ell^2}} dR \right\},$$

où le premier terme est nul. Nous pouvons ensuite intégrer par parties à nouveau le second terme pour obtenir :

$$\langle R_g \rangle = -2 \frac{4\pi}{\left(\frac{2\pi}{3} N \ell^2\right)^{3/2}} \left[ \left( \frac{N\ell^2}{3} \right)^2 e^{-\frac{3R^2}{2N\ell^2}} \right]_0^{+\infty} = \frac{4\pi}{\left(\frac{2\pi}{3} N \ell^2\right)^{3/2}} 2 \left( \frac{N\ell^2}{3} \right)^2 = \sqrt{\frac{8N}{3\pi}} \ell.$$

Par conséquent, nous avons  $\langle R_g \rangle \sim N^{0.5}$ .

En réalité, l'exposant observée est plus faible. Cela est dû au fait que notre modèle est une simplification de la réalité, car nous permettons aux monomères de se croiser. Nous notons toutefois que l'exposant augmente avec  $d$ , et il est plausible qu'il atteigne une limite lorsque  $d \rightarrow \infty$ . En fait, il est connu que c'est le cas dès  $d = 4$ !

4. Pourquoi la densité de probabilité  $P(\vec{R})$  est-elle proportionnelle à  $\Omega(\vec{R}, N)$ , le nombre de chemins de  $N$  monomères avec une taille caractéristique  $\vec{R}$ ? En déduire que l'entropie microcanonique peut s'écrire, quand le système est suffisamment grand, comme

$$S_{\text{mc}}(\vec{R}, N) = f(N, \ell) - k_B \frac{3|\vec{R}|^2}{2N\ell^2} \quad (6)$$

où  $f(N, \ell)$  est une fonction indépendante de  $\vec{R}$  et que l'on n'explicitera pas.

**Solution:**

La probabilité  $P(\vec{R})$  n'est rien d'autre que le nombre de configurations qui atteignent la distance  $\vec{R}$ , divisé par le nombre total de configurations possibles. Par conséquent :

$$\mathbb{P}(\vec{R}, N) = \frac{e^{-\frac{3|\vec{R}|^2}{2N\ell^2}}}{\left(\frac{2\pi}{3} N \ell^2\right)^{3/2}} = \frac{\Sigma(\vec{R})}{Z_N}.$$

En écrivant l'entropie comme le logarithme du nombre de configurations, nous avons :

$$S = k_B \log (Z_N \mathbb{P}(\vec{R}, N)) = k_B \log Z_N - \frac{3k_B}{2} \log \left( \frac{2\pi}{3} N \ell^2 \right) - k_B \frac{3|\vec{R}|^2}{2N\ell^2},$$

ce qui donne la formule souhaitée.

5. Le polymère est maintenant attaché entre deux larges billes contrôlées par un expérimentateur (voir Fig. 2). C'est une situation classique, par exemple lors de l'étude de l'ADN. On

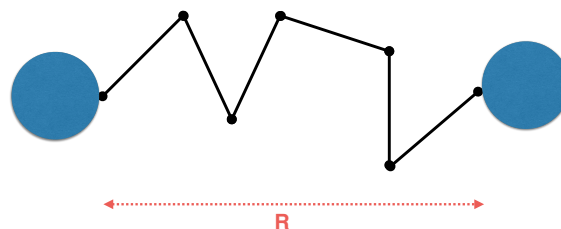


FIGURE 2 – Représentation picturale du polymère, fixé entre deux grosses billes.

définit alors la force  $F$  exercée par le polymère sur les billes séparées par une distance  $R$  par :

$$\frac{F}{T} = \left. \frac{\partial}{\partial R} S_{\text{mc}}(R, N) \right|_N \quad (7)$$

Montrer que cette définition est cohérente en terme de dimension physique. Calculer la force exercée sur les billes. Montrer que le polymère se comporte comme un ressort avec un coefficient de raideur effectif que l'on calculera.

**Solution:**

En prenant la dérivée, on obtient

$$F = k_b T \left( -\frac{3R}{N\ell^2} \right) = -k_{el} R$$

avec la constante d'élasticité  $k_{el} = \frac{3k_b T}{N\ell^2}$ . L'analyse dimensionnelle est cohérente :  $k_b T$  a la dimension d'une énergie, tandis que celle de  $-\frac{3R}{N\ell^2}$  est l'inverse d'une distance, et enfin la dimension d'une force est celle d'une énergie divisée par une longueur.

6. Comment varie le coefficient de raideur avec la température ? Si la température augmente, que doit faire l'expérimentateur pour maintenir la distance constante ?  
On suppose maintenant que l'on a un élastique fait de polymère. Si l'on fait pendre un poids sur un élastique polymérique et que l'on chauffe cet élastique, se contracte-t-il ou se dilate-t-il ?

**Solution:**

Le coefficient est linéaire avec la température. Si l'on chauffe, la force de traction élastique sera plus forte, donc l'expérimentateur devra tirer plus fort pour maintenir la distance constante.

Puisqu'un élastique polymère est constitué de... polymères, nous nous attendons à ce qu'il se comporte de la même manière. Ainsi, si l'on chauffe l'élastique, la force de traction sera plus forte et il devrait se contracter.

### III Le modèle de Blume–Capel

Le modèle de Blume–Capel décrit un matériau magnétique avec des sites vacants non magnétiques. Considérons un réseau de spins  $s_i$  pouvant prendre les valeurs  $-1$ ,  $0$  et  $+1$ . Nous notons  $N (\gg 1)$  le nombre de sites du réseau et  $z$  le nombre de voisins. Un spin  $0$  correspond à une *vacance* (impureté non magnétique ou site vide), et les spins  $+1$  ou  $-1$  correspondent aux deux orientations possibles des espèces magnétiques. On suppose que l'Hamiltonien du système en présence d'un champ magnétique homogène  $h$  est donné par

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \Delta \sum_{i=1}^N s_i^2 - h \sum_{i=1}^N s_i, \quad (8)$$

où  $J > 0$  est l'interaction d'échange et où  $\Delta$  est une constante pouvant être positive ou négative. Dans l'Hamiltonien ci-dessus,  $\langle i, j \rangle$  désigne une somme sur les paires de voisins proches.

#### 1. Discussion Generale

- a. Justifiez que  $-\Delta$  est l'énergie de création d'une vacance. Dans quel cas ( $\Delta > 0$  ou  $\Delta < 0$ ) est-il favorable de créer une vacance ?

**Solution:**

La création d'une vacance est le passage d'un site  $s_i$  de  $\pm 1$  à  $0$ . Le premier terme de l'hamiltonien est le terme d'interaction et le dernier est le terme de champ magnétique. Le terme qui nous intéresse est le deuxième. Pendant la création d'une vacance l'énergie diminue de  $\Delta$  et donc la création d'une vacance est  $-\Delta$ . Donc il est favorable quand  $\Delta > 0$ .

- b. À  $T = 0$  et  $h = 0$ , calculez l'énergie du système dans les trois états différents où  $\forall i \in [N]$  on a  $s_i = +1$ ,  $s_i = -1$  et  $s_i = 0$ . Quel état est sélectionné à  $T = 0$  ?

**Solution:**

On a que pour les trois cas considérée

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\{s_i = +1\}) &= -\frac{JzN}{2} + \Delta N \\ \mathcal{H}(\{s_i = 0\}) &= 0 \\ \mathcal{H}(\{s_i = -1\}) &= -\frac{JzN}{2} + \Delta N \end{aligned}$$

on voit que parmi ces 3 états, l'état avec la plus basse énergie dépend des valeurs de  $J$  et  $\Delta$ . Si  $\frac{Jz}{2} > \Delta$  alors on a que les états fondamentaux sont  $\pm 1$  sinon  $0$ .

- c. Quelle limite de  $\Delta$  correspond au modèle d'Ising à deux états habituel ?

**Solution:**

Le limite correspondante est le modèle sans vacances, c'est à dire  $\Delta \rightarrow -\infty$ .

2. **Approximation du champ moyen** On rappelle l'inégalité fondamentale de la méthode variationnelle : Pour toute distribution de probabilité  $Q(\{s\})$ ,

$$\ln Z \geq -\beta \langle \mathcal{H} \rangle_Q + S(Q) \quad (9)$$

où  $S(Q)$  est l'entropie de la distribution  $Q$ ,  $\langle \cdot \rangle_Q$  dénote la moyenne sur  $Q$  et  $\beta = \frac{1}{k_b T}$ .

- a. Pourquoi est-ce une bonne idée de chercher une approximation de l'énergie libre par variable sous la forme de l'extremisation suivante :

$$f \approx \underset{p_+, p_-, p_0, \lambda}{\text{extr}} \left[ \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle_Q + \frac{1}{\beta} (p_+ \log p_+ + p_- \log p_- + p_0 \log p_0) + \lambda (p_+ + p_- + p_0 - 1) \right]$$

$$Q(\{s\}) = \prod_i [p_+ \delta(s_i - 1) + p_- \delta(s_i + 1) + p_0 \delta(s_i)]$$

**Solution:**

Étant donné que l'on a une formule variationnelle, il faut chercher à la minimiser, d'où l'extremisation sur  $p_+, p_-, p_0$ . Additionnellement, il faut aussi respecter la normalisation des probabilités et  $\lambda$  joue le rôle d'un paramètre de Lagrange pour avoir  $p_+ + p_- + p_0 = 1$ .

- b. Démontrez que la valeur moyenne  $m = \langle s_i \rangle$ , c'est à dire la magnétisation, obéit à l'équation auto-cohérente (EAC)

$$m = \text{EAC}(m) := \frac{2 \sinh(\beta[h + zJm])}{\exp(\beta\Delta) + 2 \cosh(\beta[h + zJm])}. \quad (10)$$

*Conseil : Écrire la moyenne de l'Hamiltonien en fonction de la magnétisation moyenne ( $p_+ - p_-$ ) et la fraction de variables non nulles ( $1 - p_0$ ) avant d'effectuer les dérivations*

**Solution:**

La moyenne de l'Hamiltonien (divisée par  $N$ ) est donnée par

$$-\frac{Jz}{2}(p_+ - p_-)^2 + \Delta(1 - p_0) - h(p_+ - p_-)$$

L'extremisation donne alors

$$\begin{aligned} 1 &= p_+ + p_- + p_0 \\ -Jz(p_+ - p_-) - h + \lambda + k_b T(\log p_+ + 1) &= 0 \\ Jz(p_+ - p_-) + h + \lambda + k_b T(\log p_- + 1) &= 0 \\ -\Delta + \lambda + k_b T(\log p_0 + 1) &= 0 \end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned} p_+ &= e^{\beta(Jz(p_+ - p_-) + h)} e^{-\beta\lambda} \\ p_- &= e^{-\beta(Jz(p_+ - p_-) + h)} e^{-\beta\lambda} \\ p_0 &= e^{\beta\Delta} e^{-\beta\lambda} \end{aligned}$$

en utilisant  $m = p_+ - p_- = (p_+ - p_-)/(p_+ + p_- + p_0)$  (car  $(p_+ + p_- + p_0) = 1$ ) on obtient :

$$\begin{aligned} m &= \frac{e^{k_B T(Jz(p_+ - p_-) + h)} - e^{-k_B T(Jz(p_+ - p_-) + h)}}{e^{k_B T(Jz(p_+ - p_-) + h)} + e^{-k_B T(Jz(p_+ - p_-) + h)} + e^{-k_B T\Delta}} \\ &= \frac{2 \sinh(\beta[h + zJm])}{\exp(\beta\Delta) + 2 \cosh(\beta[h + zJm])} \end{aligned}$$

3. **Cas particulier** Nous considérons maintenant le cas d'un champ magnétique nul,  $h = 0$ .
- a. Montrez que  $m = 0$  est une solution de l'EAC.

**Solution:**

Pour montrer cela, on peut simplement utiliser que  $\sinh(0) = 0$ , le dénominateur est fini et donc on a que l'équation se simplifie en  $0 = 0$ , c'est à dire que  $m = 0$  est solution.

- b. Nous visons maintenant à discuter graphiquement les solutions de l'EAC. Nous définissons  $t = k_B T/zJ$  et  $\delta = \Delta/zJ$ . En cherchant des solutions à  $m$  petit, montrer qu'il existe une transition de phase de second ordre à une température réduite critique  $t_c$  définie par l'équation

$$t_c = \frac{2}{2 + \exp(\delta/t_c)}. \quad (11)$$

et calculer l'exposant critique de la magnétisation, i.e.  $m \propto (t - t_c)^\beta$ .

**Solution:**

On commence avec le développement de  $\sinh$  et  $\cosh$  autour de zéro :

$$\begin{aligned} \sinh(\beta Jmz) &= Jzm\beta + O(m^3) \\ \cosh(\beta Jmz) &= 1 + \frac{1}{2}J^2z^2\beta^2m^2 + O(m^4) \end{aligned}$$

et on peut simplifier l'EAC comme

$$m = \frac{2\beta Jmz}{e^{\beta\Delta} + 2} + \text{cst } m^3$$

maintenant si l'on substitue les nouvelles variables avec  $\Delta \rightarrow \delta zJ$  et  $\beta \rightarrow 1/(tzJ)$  on obtient

$$1 = \frac{2\beta Jz}{e^{\beta\Delta} + 2} + \text{cst } m^2 = \frac{2t}{2 + e^{\delta/t}} + \text{cst } m^2$$

et donc

$$m \propto \sqrt{1 - \frac{2t}{2 + e^{\delta/t}}} \quad (12)$$

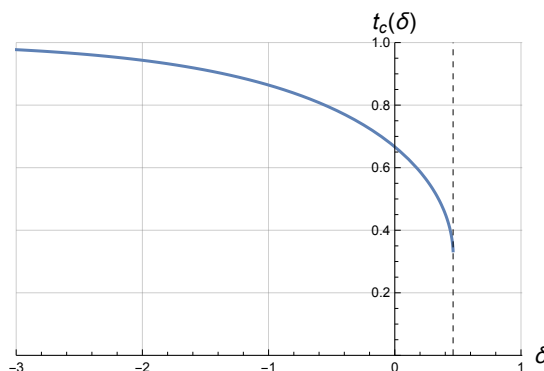
Une solution réelle, avec un comportement critique, apparaît donc pour  $\frac{2t}{2 + e^{\delta/t}} = 1$ , qui définit une transition de second ordre a la température  $t_c$  solution de

$$\frac{2}{2 + e^{\delta/t_c}} = t_c.$$

Pour calculer l'exposant critique on peut développer l'équation (12) avec  $t = t_c - \delta t$ , et l'on trouve bien  $t_c = 1/2$  dans ce cas là car :

$$m \propto \sqrt{\delta t}$$

- c. La figure suivante vous donne les valeurs de  $t_c$  qui vérifie l'équation (11) en fonction de  $\delta$ . Commentez.



La ligne verticale est située à  $\delta \simeq 0.462$ . Démontrez aussi que  $t_c(0) = \frac{2}{3}$  et que  $\lim_{\delta \rightarrow -\infty} t_c(\delta) = 1$ .

**Solution:**

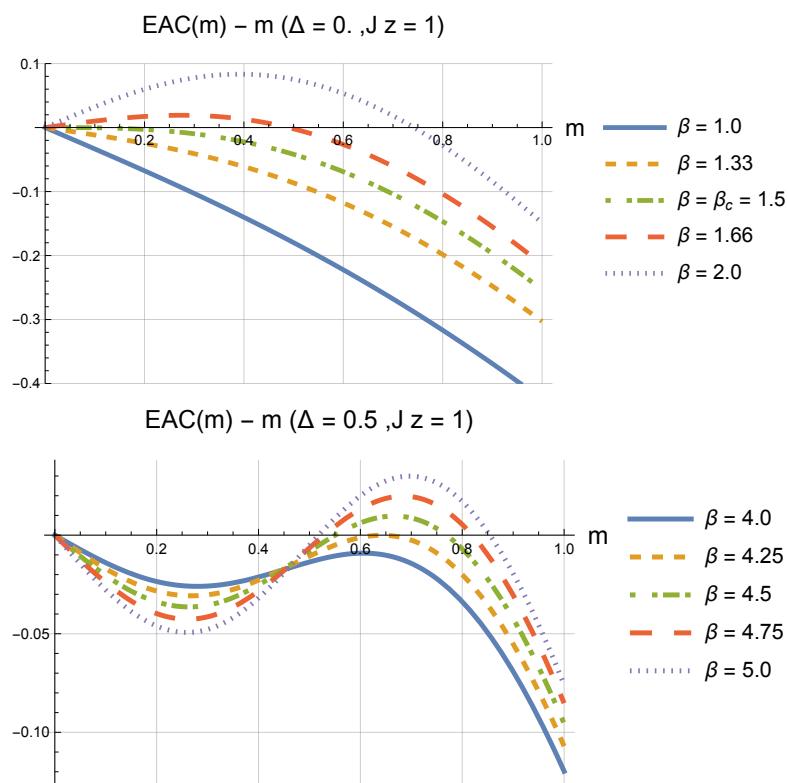
.... On a que de l'équation (11) on peut substituer  $\delta = 0$  et obtenir

$$t_c = \frac{2}{2 + \exp(0)} = \frac{2}{3}$$

et aussi dans la limite

$$t_c = \lim_{\delta \rightarrow -\infty} \frac{2}{2 + \exp(\delta/t_c)} = \frac{2}{2} = 1$$

- d. Vous trouverez également ci-dessous un graphique montrant  $EAC(m) - m$  pour différentes valeurs de  $\Delta$  (avec plusieurs valeurs de  $\beta$ )



Commentaire? Que se passe-t-il à  $\Delta = 0$ ? Et à  $\Delta = 0.5$ ?

**Solution:**

Pour le cas  $\Delta = 0$  on attend donc un transition de phase du second ordre avec  $t_c = 2/3$ , ce qui correspond bien a ce que l'on observe. Pour le cas  $\Delta = 0.5$  il n'y a pas de transition de phase du second ordre a température finie. Par contre, le plot de l'équation auto consistante montre bien l'apparition d'une transition de premier ordre, avec une valeur de  $m$  qui "saute" directement autour de 0.65 a  $\beta = 4.25$ . Ce type de transition ne peut être découverte par une analyse de stabilité locale (de fait la solution  $m = 0$  est toujours stable).