

## Lecture 9: Systèmes en interaction en dimension finie

*Professeur: Florent Krzakala*

*Scribes: Nil Fajas, Alexis Escarmelle, Ferran Rocamora i Martorell, Louis Ernest, Ghita Mikou, Grégoire André, Pauline Leblanc, Eliot Gindrat, Luiza Galyo, Faber Felix, Alix Pelletier*

### 9.1 Les limites du Champ Moyen

En reprenant le modèle d'Ising, on a,

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} JS_i S_j \quad (9.1)$$

$\langle i,j \rangle$  signifie qu'on somme sur les  $i, j$  voisins d'un réseau.

En dimension  $d = 1$ , le réseau est une ligne composée de spins. Cela peut également être représenté par une chaîne, ce qui permet d'avoir des conditions périodiques aux limites et de simplifier les calculs.

En dimension  $d = 2$ , c'est un réseau en deux dimension que l'on peut également représenter par un tore pour simplifier les calculs.

En dimension  $d = 3$ , c'est un réseau cubique qui devient plus dur à représenter en reliant les bords.

Pour les dimensions  $d$  supérieures, le réseau est un hyper-cube de dimension  $d$ .

- R Les conditions aux bords périodiques permettent de représenter les réseaux différemment et de simplifier les calculs en ne tenant pas compte des conditions aux limites. C'est très utile si les comportements aux bords ne nous intéressent pas.

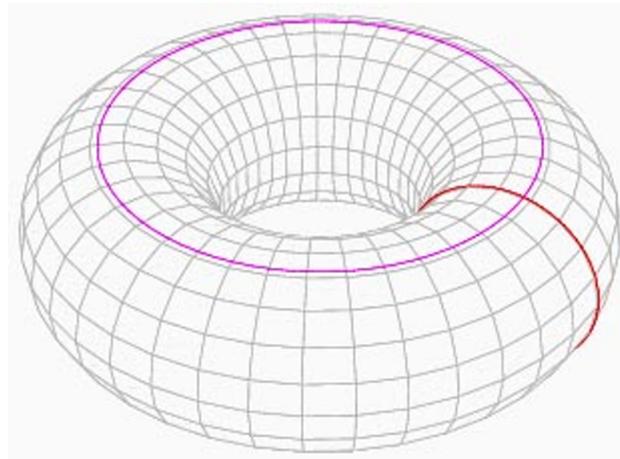


Figure 9.1: Représentation torique d'un réseau  $d = 2$  [1]

En utilisant l'approximation champ moyen, on obtient une équation proche de la théorie de Curie-Weiss pour la valeur moyenne de  $S_i$ ,

$$m = \tanh(\beta(2Jmd + h)) \quad (9.2)$$

Cette équation est utile, par exemple, pour représenter la magnétisation en fonction de la température et trouver la température critique. Avec  $\beta_c = \frac{1}{2Jd}$  et  $T_c = \frac{2Jd}{k_B}$ .

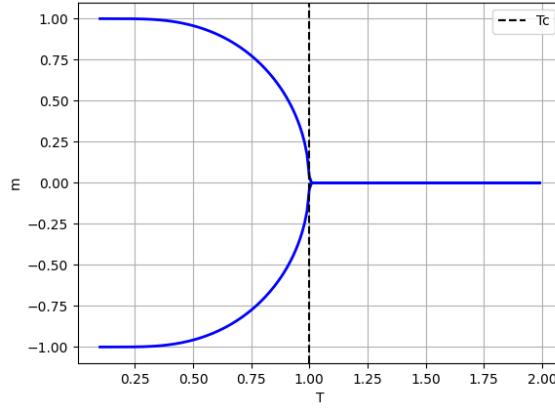


Figure 9.2: Magnétisation en fonction de la température [2]

### 9.1.1 Second ordre : Phénomènes critiques

En observant ce qu'il se passe proche du point critique, on remarque un problème de la théorie du champ moyen.

Prenons l'équation dans un champ nul ( $h = 0$ ), on a,

$$m = \tanh\left(\frac{\beta}{\beta_c}m\right) \quad (9.3)$$

Proche du point critique,  $m$  est petit. On peut donc développer la tangente hyperbolique avec  $\tanh x \approx x - \frac{x^3}{3}$ ,

$$m \approx \frac{\beta}{\beta_c}m - \left(\frac{\beta}{\beta_c}\right)^3 m^3 \quad (9.4)$$

En simplifiant, on obtient,

$$m^2 = \left(\frac{\beta}{\beta_c} - 1\right) \left(\frac{\beta_c}{\beta}\right)^3 \quad (9.5)$$

Le terme au cube est négligeable, ce sont des corrections de l'ordre  $T^3$ . Par contre, le premier terme est intéressant, c'est lui qui est responsable de la pente proche du point critique car il est proche de 0. Il nous permet de dire que,

$$m \propto \sqrt{\frac{\beta}{\beta_c} - 1} = \sqrt{\frac{T_c}{T} - 1} = \sqrt{\frac{T_c - T}{T}} \quad (9.6)$$

On a finalement que  $m \propto \sqrt{T_c - T}$ . Proche du point critique,  $m$  grandit avec une racine de la différence de température.

### 9.1.1.1 Exposants critiques

Pour connaître l'ordre d'évolution des phénomènes critique, on introduit les exposants critiques ( $\alpha, \beta, \gamma$  et  $\delta$ ).

**Definition 9.1** (*Exposant critique  $\beta$* )

*Il représente le comportement de  $m$  proche du point critique dans un champ nul ( $h = 0$ ).*

$$m \propto (T_c - T)^\beta \quad (9.7)$$

En champ moyen, on a  $\beta = 1/2$ .

**Definition 9.2** (*Exposant critique  $\gamma$* )

*Il représente le comportement de la susceptibilité  $\chi$  proche du point critique ( $T \gtrsim T_c$ ).*

$$\chi \propto (T - T_c)^{-\gamma} \quad (9.8)$$

*où la susceptibilité est définie comme,*

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0} \quad (9.9)$$

Il est possible de trouver  $\chi$  à partir de l'équation (9.2). On a,

$$m = \tanh \left( \frac{\beta}{\beta_c} m + \beta h \right) \quad (9.10)$$

On ne peut pas dériver  $m$  par rapport à  $h$  directement de cette équation car elle est auto-consistante. Il faut dériver par rapport à  $h$  chaque côté de l'équation et trouver l'égalité. On a,

$$\chi = \left( 1 - \tanh^2 \left( \frac{\beta}{\beta_c} m + \beta h \right) \right) \left( \frac{\beta}{\beta_c} \chi + \beta \right) \quad (9.11)$$

$$\chi = (1 - m^2) \left( \frac{\beta}{\beta_c} \chi + \beta \right) \quad (9.12)$$

On se place à  $T \geq T_c$  et  $h = 0$ , on a donc  $m \approx 0$ .

$$\chi = \frac{\beta}{\beta_c} \chi + \beta \quad (9.13)$$

$$\chi = \frac{\beta}{1 - \frac{\beta}{\beta_c}} = \frac{1}{T} \frac{1}{1 - \frac{T_c}{T}} = \frac{1}{T - T_c} \quad (9.14)$$

On obtient donc qu'en champ moyen,  $\chi \propto (T - T_c)^{-1}$  et l'exposant  $\gamma = -1$ , ce qui correspond à la 'Loi de Curie'. Proche du point critique, la susceptibilité diverge.

En se rappelant que,

$$\frac{\partial m}{\partial h} \propto \langle \frac{S^2}{N} \rangle - \langle \frac{S}{N} \rangle^2 = Var(m) \quad (9.15)$$

Ce qui voudrait dire que proche du point critique, la variance de la magnétisation est très grande, ce qui n'est pas cohérent. Proche du point critique, la théorie de champ moyen ne fonctionne donc pas car les fluctuations sont trop grandes.

### Definition 9.3 (Exposant critique $\delta$ )

*Il représente le comportement de  $m$  au point critique en fonction de  $h \approx 0$ .*

$$m \propto h^{\frac{1}{\delta}} \quad (9.16)$$

A partir de l'équation (9.2) et avec  $\beta = \beta_c$ , on a,

$$m = \tanh(m + \beta h) = m + \beta h - \frac{(m + \beta h)^3}{3} \quad (9.17)$$

En ne gardant que les termes d'ordre 1 en  $h$ , on a,

$$0 = \beta h - \frac{m^3}{3} \quad (9.18)$$

On trouve  $m \propto h^{1/3}$  et l'exposant  $\delta = 3$ .

### Definition 9.4 (Exposant critique $\alpha$ )

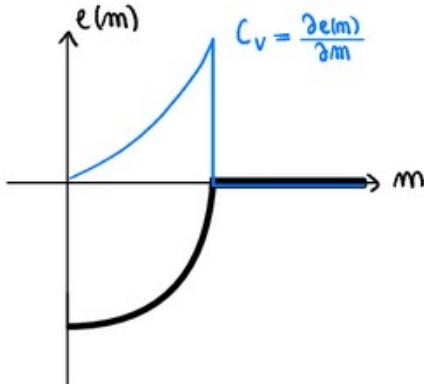
*Cet exposant critique est lié à la chaleur spécifique par la relation suivante:*

$$C_V \propto (T - T_c)^{-\alpha} \quad (9.19)$$

Par définition de la chaleur spécifique:

$$C_V = \frac{\partial e}{\partial t} \quad (9.20)$$

Or en champ moyen, pour  $h = 0$ , l'énergie est simplement donnée par:  $e = -\frac{1}{2}m^2$ . La Fig.9.3 présente cet énergie libre en fonction de la magnétisation ainsi que sa dérivée.

Figure 9.3: Energie et chaleur spécifique en fonction de la magnétisation  $m$ 

On constate que la dérivée de l'énergie, i.e. la chaleur spécifique, fait un saut. Ce qui nous permet de déterminer que  $\alpha = 0$  en champ moyen.

Nous avons calculé tous nos exposants critiques, mais quelles sont leur valeurs en réalité? Et pourquoi ces exposants sont-ils si intéressants? A priori, ces exposants semblent être spécifiques au modèle, plutôt simple, étudié, et sans lien avec le monde physique. Cependant, il a été constaté que tous les systèmes de type transition de phases du second ordre sont toujours caractérisés par les mêmes exposants. Et cela indépendamment du système, de sa composition et de la forme du réseau (hexagonal, carré, ...). De plus, ces exposants critiques ne dépendent que de deux choses: la dimension du problème et la symétrie du problème.

	$d=2$	$d=3$	$d=4$
$\alpha$	0	0.11009	0
$\beta$	$1/8$	0.326419	$1/2$
$\gamma$	$7/4$	1.237075	1
$\delta$	15	4.78984	3

Table 9.1: Exposants critiques pour le modèle d'Ising en différentes dimensions

En dimension  $d=1$ , contrairement à ce qu'il a été calculé en champ moyen ( $T_c = \frac{2J}{\beta_c}$ ), aucune transition de phase n'a lieu. En dimension  $d = 2$  et  $d = 3$ , d'après le Tab.9.1, on trouve bien des exposants. Pour le modèle en 2D, la solution analytique a été établie par Lars Onsager. Pour le modèle d'Ising en 3D, bien qu'on ne sache pas le résoudre, ni calculer la fonction de partition, plusieurs simulations peuvent être effectuées, permettant de mesurer ces exposants. On constate que les exposants du champ moyen ne sont pas du tout correct en 2D ni en 3D, mais qu'on les retrouve en dimension 4. En réalité, pour toute dimension  $d \geq 4$ , les exposants du champ moyen sont corrects. Cette dimension est appelée dimension critique supérieure.

Pour résumer, le problème fondamental de la théorie du champ moyen est qu'en s'intéressant aux phénomènes critiques, i.e proche du point critique, les exposants critiques sont faux. Ces exposants ne dépendent que de  $(n, d)$  et sont universels, i.e. ils ne dépendent pas du matériau. Ils ne sont donnés par le champ moyen qu'en dimension  $d \geq 4$ . On définit  $d$  comme la dimension du réseau et  $n$  comme la dimension du spin. Pour le modèle d'Ising,  $n = 1$  avec spin  $s = \pm 1$ ; pour  $s = \cos \theta$ , on est dans un plan et  $n = 2$ . Et  $n = 3$  avec le modèle d'Heisenberg.

La généralisation du modèle d'Ising, avec des spins de dimension  $n$ , est appelé le modèle  $O(n)$ .

### 9.1.2 Transitions de premier ordre

Il a précédemment été établi, en section **8.4**, que:

$$\mathcal{P}(\bar{S} = m) \asymp e^{-N\beta f(m)} \quad (9.21)$$

avec  $f(m)$  l'énergie libre. Pour rappel, la transition de premier ordre est décrite par un changement de minima, tel que:

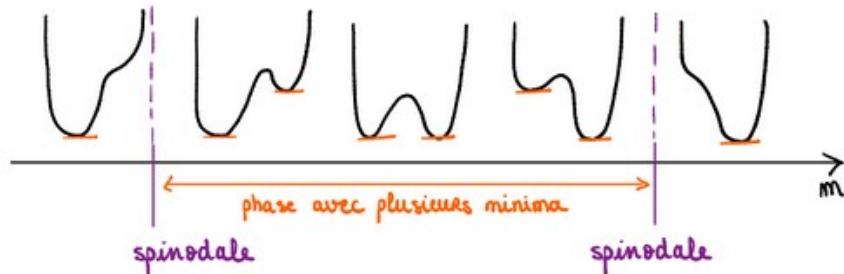


Figure 9.4: Transition de premier ordre et variation de l'énergie libre en fonction de la magnétisation

Nous avons des phénomènes dits "méta-stables" ou "stables" avec un temps  $\tau \propto e^{N\beta\Delta f}$  pour passer la barrière d'énergie (cf **8.4.1 Métastabilité**). En réalité, on observe  $\tau = e^{\text{fini}}$ , même si ce temps est grand, mais pas  $\tau = e^{N\cdot\text{fini}}$ . Les spinodales au sens strict n'existent pas en dimension finie: aucune barrière exponentielle en  $N$ , ne peut coincer le système dans un état métastable.

**Claim 1:** Les "barrières" d'énergie libre extensives n'existent pas en dimension finie.

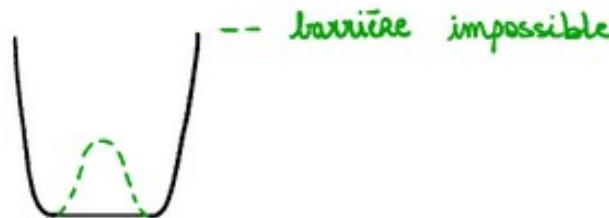
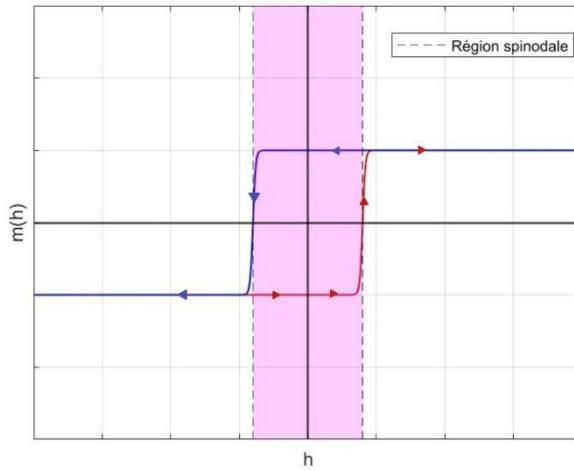
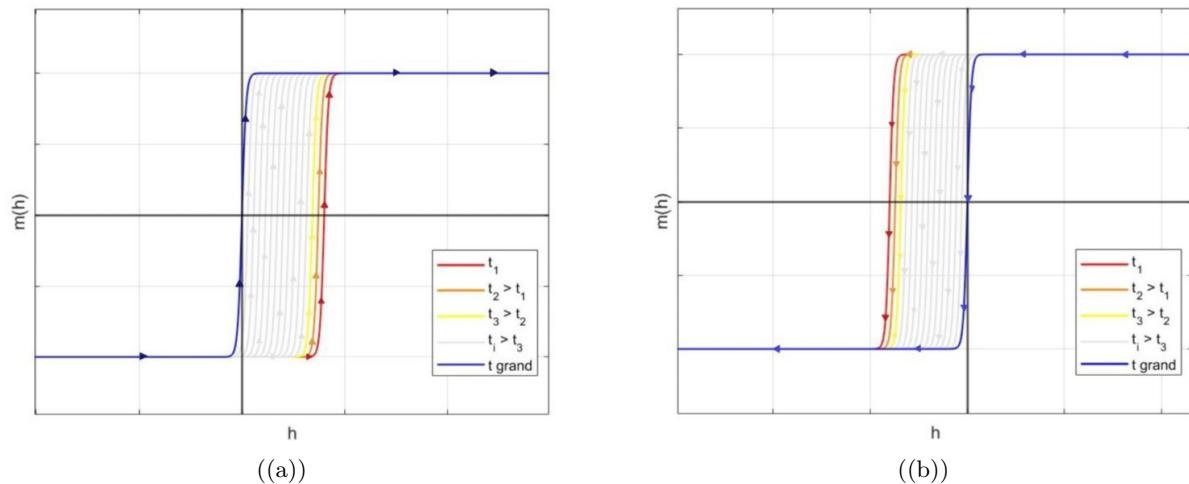


Figure 9.5: Energie libre en dimension finie

**Example 1** Reprenons le modèle d'Ising, pour  $T < T_c$ , on a vu que  $m(h)$  se comporte comme :

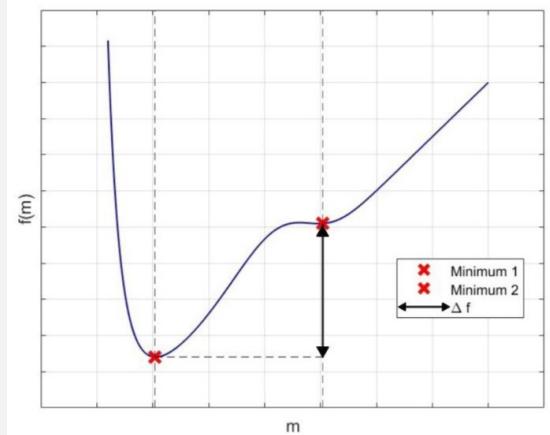
Figure 9.6: Magnétisation  $m$  en fonction du champ  $h$  selon le modèle d'Ising

La courbe bleue illustre le comportement du système lorsqu'un champ élevé  $h$  est initialement appliqué, puis diminué progressivement, tandis que la courbe rouge représente le comportement observé lorsqu'un petit champ  $h$  est appliqué et ensuite augmenté. Cependant, lors des manipulations expérimentales, on constate que plus la durée de la manipulation est longue, plus le saut de magnétisation se produit près de  $h = 0$ . Cela met en évidence une dépendance complète de la magnétisation  $m$  au temps  $t$ . Ces observations peuvent être représentées schématiquement comme suit:

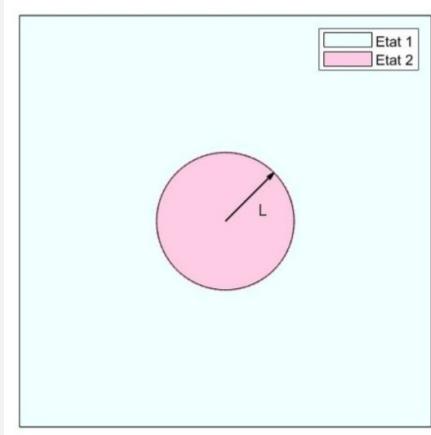
Figure 9.7: Illustration de la magnétisation  $m$  observée expérimentalement en fonction du champ  $h$  pour différents temps de manipulation  $t_i$  et pour (a) un champ croissant, (b) un champ décroissant

**Theorem 9.5 Théorie de la nucléation ("Correction au Champ Moyen")**

Considérons un système dont l'énergie libre  $f(m)$  possède deux minima locaux séparés par une barrière d'énergie libre. Définissons  $\Delta f$  comme la différence d'énergie libre par spin entre l'état 1 et l'état 2. Supposons que le système se trouve initialement dans l'état 1 et qu'une "goutte" (ou un noyau) de taille  $L$  dans l'état 2 apparaît au sein de ce système.



((a))



((b))

Figure 9.8: (a) Energie libre  $f$  en fonction de la magnétisation  $m$ , (b) "goutte" ou noyau d'état 2 apparu dans l'état 1.

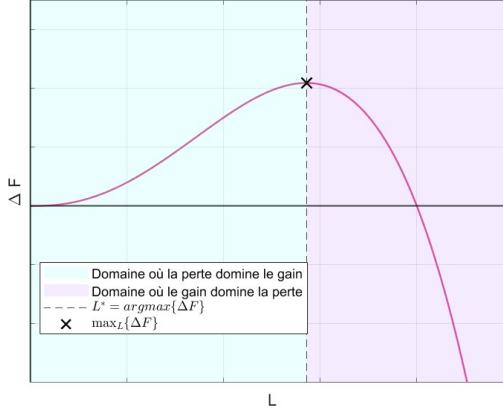
La différence d'énergie libre une fois qu'un tel noyau a apparu est donnée par :

$$\Delta F = \underbrace{-V_d L^d \delta F}_{\text{Gain}} + \underbrace{\gamma S_d L^{d-1}}_{\text{Perte}}, \quad (9.22)$$

où  $V_d$  est le volume de la goutte en dimension  $d$ , et  $S_d$  sa surface.

Il est important de souligner que le modèle de Curie-Weiss ne permet pas d'incorporer ce raisonnement car il ne prend pas en compte les notions telles que le volume et la surface. En effet, ce modèle repose sur l'hypothèse selon laquelle toutes les particules sont interconnectées, ce qui élimine la notion de bord. Ce point illustre l'une des limitations fondamentales de l'approximation du champ moyen: la géométrie du système n'est pas prise en compte.

Lorsque le rayon de la goutte,  $L$ , est grand, le terme de grain prédomine sur le terme de perte.. Plus précisément, la variation de l'énergie libre,  $\Delta F$ , suit le comportement suivant:

Figure 9.9: Différence d'énergie libre  $\Delta F$  en fonction du rayon de la goutte  $L$ 

Ainsi, pour passer de l'état 1 à l'état 2, il suffit qu'une sous-partie suffisamment grande du système se transforme en l'état 2 par fluctuation, ce qui permet à cette région de se développer et de finalement englober tout le système. En dimension finie, les transitions de premier ordre sont toujours initiées par un phénomène de nucléation.

Déterminons  $L^*$ , défini comme le rayon où  $\Delta F$  est maximal. Alors  $L^*$  annule la dérivée première :

$$\partial_L \Delta F(L_*) = 0 \Rightarrow -V_d d L_*^{d-1} \delta F + \gamma S_d (d-1) L_*^{d-2} = 0 \quad (9.23)$$

$$\iff V_d d L_*^{d-1} \delta F = \gamma S_d (d-1) L_*^{d-2} \iff V_d d L \delta F = \gamma S_d (d-1) \quad (9.24)$$

$$\iff L^* = \frac{\gamma S_d}{\delta F V_d} \frac{d-1}{d}. \quad (9.25)$$

La barrière d'énergie maximale à franchir est donnée par :

$$\max_L \{\Delta F\} = \Delta F(L^*) = -V_d \delta F \left( \frac{\gamma S_d}{\delta F V_d} \frac{d-1}{d} \right)^d + \gamma S_d \left( \frac{\gamma S_d}{\delta F V_d} \frac{d-1}{d} \right)^{d-1} \quad (9.26)$$

$$= -\frac{(\gamma S_d)^d}{(\delta F V_d)^{d-1}} \left( \frac{d-1}{d} \right)^d + \frac{(\gamma S_d)^d}{(\delta F V_d)^{d-1}} \left( \frac{d-1}{d} \right)^{d-1} \quad (9.27)$$

$$= \frac{\gamma^d}{\delta F^{d-1}} \frac{S_d^d}{V_d^{d-1}} \left( \frac{d-1}{d} \right)^{d-1} \left[ 1 - \frac{d-1}{d} \right] \quad (9.28)$$

$$= \frac{\gamma^d}{\delta F^{d-1}} \frac{S_d^d}{V_d^{d-1}} \frac{(d-1)^{d-1}}{d^d} \quad (9.29)$$

$$= \frac{\gamma^d}{\delta F^{d-1}} A_d. \quad (9.30)$$

Et donc la Loi d'Arrhenius devient :

$$\tau \propto \exp(\beta \Delta F(L^*)) = \exp\left(\beta \frac{\gamma^d}{\delta F^{d-1}} A_d\right). \quad (9.31)$$

On remarque qu'effectivement en grande dimension  $\tau$  peut être très grand, mais il n'a pas de dépendance en  $N$ . On peut donc en conclure qu'il n'y a pas de "saut" et donc qu'en dimension finie les "barrières" d'énergie libre extensives n'existent pas.

On en conclue qu'un système peut être métastable, mais pas stable. De plus, ce raisonnement permet de résoudre un autre problème associé à l'approximation du champ moyen, à savoir l'absence de transition de phase en une dimension. En effet, on observe que non seulement les barrières d'énergie ne sont pas extensives, mais qu'en une dimension, il ne peut exister de barrière séparant deux états de même énergie. Pour passer d'une phase à une autre, en suivant la loi d'Arrhenius, le temps caractéristique nécessaire est donné par:

$$\tau \propto e^{\beta A_1}, \quad (9.32)$$

où :

$$A_1 = \frac{S_1^1}{\delta F^{1-1}} \frac{(1-1)^{1-1}}{1^1} = S_1 \frac{0^0}{1} = S_1, \quad (9.33)$$

qui est indépendant de l'énergie libre. Par conséquent, en une dimension, une brisure d'ergodicité est impossible. Néanmoins, dans des dimensions  $d > 1$ , une brisure d'ergodicité peut se produire si  $\delta F = 0$ .

**Claim 2:** Le temps caractéristique  $\tau$  est toujours fini en une dimension.

Dans la réalité, les transitions de premier ordre sont toujours inhomogènes et se déclenchent lorsqu'un noyau suffisamment grand de la phase alternative émerge.

**Example 2** *Etudions quelques exemples du phénomène de nucléation*

### 1. Eau:

En refroidissant très rapidement de l'eau, on obtient un liquide surfondu, c'est-à-dire un système similaire à celui illustré en [Figure 8\(a\)](#). Dans ce cas, le système reste dans l'état 1, bien que le véritable minimum de l'énergie libre corresponde à l'état 2. Il est important de souligner que le système reste dans l'état 1 en raison de la présence d'une barrière d'énergie, même si celle-ci n'est pas extensive, comme le montre [Figure 9.10](#). Ces barrières étant très petites, il est relativement facile d'exciter le système de manière à ce qu'il se transforme en solide. Ce phénomène est illustré dans la [vidéo suivante \[3\]](#). Lorsqu'on frappe la bouteille, une petite quantité d'énergie est injectée localement dans le système, permettant ainsi de franchir cette barrière d'énergie à un endroit spécifique. Cela initie une nucléation, et une fois qu'un solide suffisamment grand s'est formé, il envahit le reste du liquide, transformant progressivement tout le système en solide.

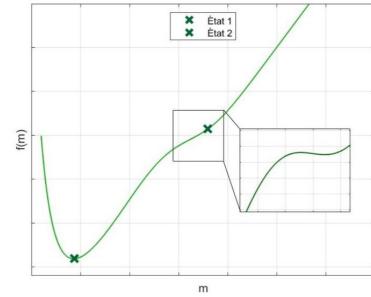


Figure 9.10: Énergie libre  $f$  en fonction de la magnétisation  $m$

2. **Chauferette:** La [vidéo suivante](#) présente un autre exemple de nucléation [4]. La chauferette est un système métastable, où le liquide se trouve dans une phase instable. En pinçant la plaquette de métal à l'intérieur, de l'énergie est injectée dans le système, ce qui permet de franchir la barrière d'énergie. Le noyau se développe alors, initiant une nucléation, et une fois qu'il atteint une taille suffisante, il envahit l'ensemble du système, provoquant la transition complète.
3. **The Ice Finger of Death:** La [vidéo suivante](#) illustre un phénomène naturel de nucléation [5]. En Arctique, l'eau est à des températures négatives et est gelée en surface. A certains endroits, le gel progresse et, localement, se propage, gelant tout ce qui se trouve sur son passage.

4. **Peste de l'étain:** Un dernier exemple historique intéressant est la Peste de l'étain. A température et pression ambiantes, l'étain existe sous une forme dite étain blanc. Cependant, lorsque la température descend en dessous de  $13.2^\circ\text{C}$ , cette forme devient instable et se transforme en étain gris. Cette transformation est connue sous le nom de peste de l'étain. Elle se produit relativement lentement à température modérée, mais devient beaucoup plus rapide à environ  $-40^\circ\text{C}$ , accompagnée d'une diminution de la masse volumique de l'étain et d'une fragilisation du métal, qui tend alors à se réduire en poudre [6]. Lors de la retraite de Russie de l'Empereur Napoléon Bonaparte, traversant la rivière Bérézina, les hivers russes pouvant atteindre des températures aussi basses que  $-40^\circ\text{C}$ , l'étain, largement utilisé dans les uniformes de l'armée française, se décomposait au contact du froid, ce qui entraînait la perte des uniformes de nombreux soldats[7].

## 9.2 Modèles d'Ising : Théorie de perturbation

- Historiquement, le modèle d'Ising était un modèle en une dimension, c'est à dire une chaîne de spins valant  $s = \pm 1$ . Ce modèle prédit qu'il n'y a pas de transitions de phase en une dimension, autrement dit que la température critique  $T_C = 0$  ( $\beta = 0$ ).
- Un autre modèle, également appelé modèle d'Ising, en deux dimensions cette fois, possède lui une solution exacte pour la température critique ( $k_B = J = 1$ ):  $T_C = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2})$  (déterminée par Lars Onsager). Cela a permis de montrer pour la première fois l'existence des transitions de phase en dimension finie.
- En 3D, il n'existe pas de solution exacte au modèle d'Ising. Les solutions sont donc trouvées avec des techniques d'approximations (comme la théorie des perturbations) ou en utilisant des simulations (par exemple avec Monte-Carlo).

Deux de ces théories de perturbation seront abordées dans ce chapitre : la série en basse température ( $\beta \rightarrow \infty, T \rightarrow 0$ ) qui va permettre de faire des corrections en puissances de  $T$ , et celle en haute température ( $\beta \rightarrow 0, T \rightarrow \infty$ ) qui consistera à faire des corrections en puissances de  $\beta$ .

### 9.2.1 Série en basse température ( $d = 2, s = \pm 1$ )

On considère un réseau de  $N$  spins en 2D, valant  $s = \pm 1$ , avec des conditions aux limites périodiques. On peut donc représenter le réseau par un tore comme sur la Fig.9.1 où les spins sont situés aux noeuds. L'Hamiltonien d'un tel système est donné par :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (9.34)$$

En basse température ( $T \approx 0$ ), le système doit forcément être dans un état d'énergie minimale, cela veut dire qu'il peut être dans deux configurations différentes : soit tous les spins valent  $s = 1$ , soit ils valent tous  $s = -1$ . L'énergie pour ces configurations (à température proche de zéro) vaut donc:

$$E(T = 0) = -J2N \quad (9.35)$$

Où le facteur 2 provient du nombre de liens total entre les spins, donné par la moitié du nombre de voisins pour ne pas compter deux fois chaque lien. On obtient une fonction de partition qui devrait être dominée par ces deux configurations, qu'on calcule en factorisant ces dernières :

$$Z(\beta) = 2e^{2\beta J N} \left[ 1 + \underbrace{N(e^{-2\beta J})^4}_1 + \underbrace{2N(e^{-2\beta J})^6}_2 + \underbrace{\left( \frac{N(N-5)}{2} + 7N \right) (e^{-2\beta J})^8}_3 + \mathcal{O}(e^{-2\beta J})^{10} \right] \quad (9.36)$$

Voyons comment chacun des termes est obtenu :

- Le terme **1** est obtenu en prenant une configuration où il n'y a que des spins  $s = 1$ , et en retournant l'un d'entre eux ( $s_{flip} = -1$ ). Comme on le voit sur la Fig.9.11(a), cela affecte les 4 liens autour du spin, leur énergie devient négative. On voit qu'il y a  $N$  configurations donnant le même résultat et le facteur de correction devient donc :  $N(e^{-2\beta J})^4$ .
- L'ordre suivant (terme **2**) est obtenu en retournant deux spins l'un à côté de l'autre. Il y a  $2N$  telles configurations équivalentes, et cela change le signe de l'énergie pour 6 liens différents, comme le montre la figure Fig.9.11(b). Le facteur à ajouter est donc :  $2N(e^{-2\beta J})^6$ .

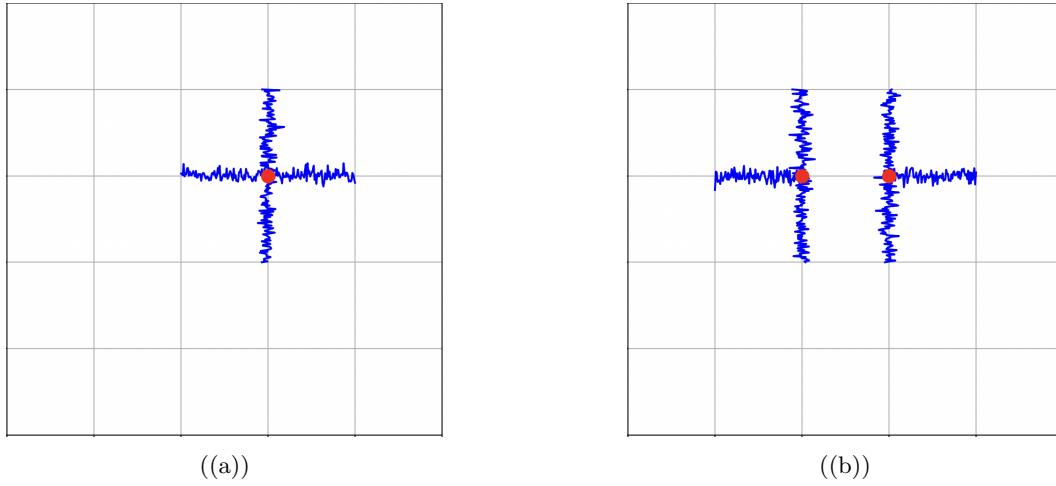
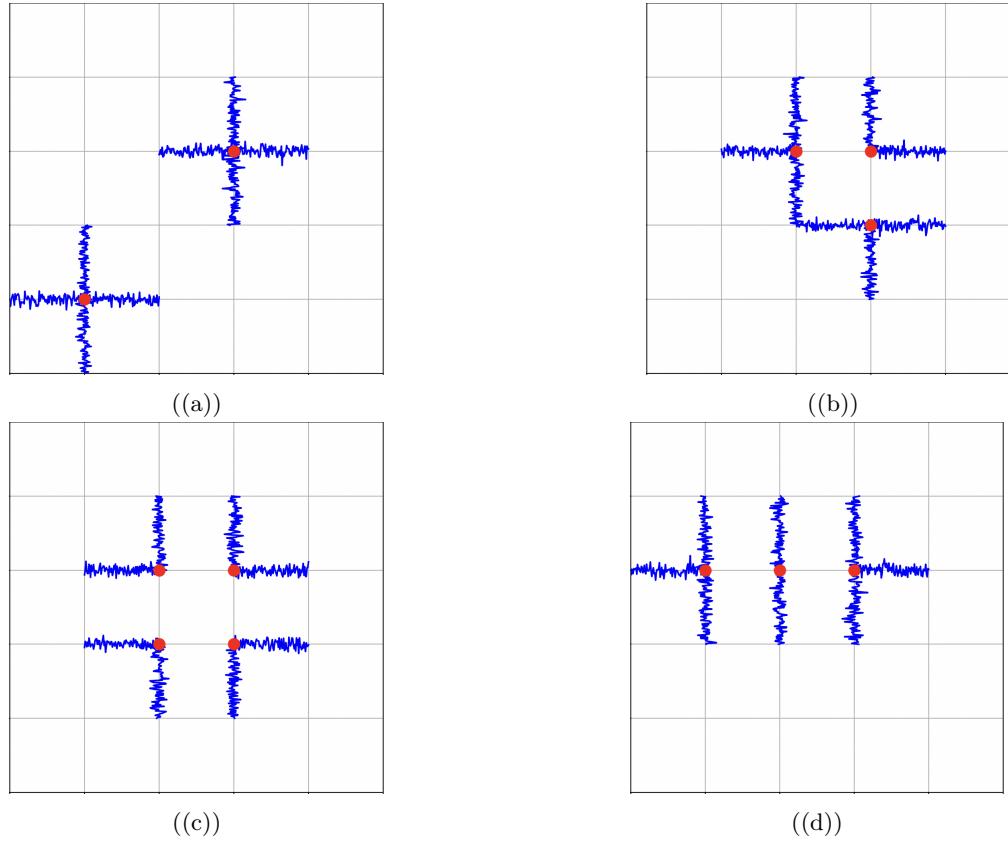


Figure 9.11: Réseaux de spins pour les termes 1(a) et 2(b)

- Pour avoir 8 liens d'énergie opposée (terme **3**), il y a quatre types de configurations pour les  $N$  spins: soit on retourne deux d'entre eux qui sont à plus de deux noeuds d'écart l'un de l'autre (Fig.9.12(a)), soit on en retourne trois qui forment un angle comme sur la Fig.9.11(b), puis on peut en retourner quatre qui forment un carré (Fig.9.12(c)), ou enfin on peut en retourner 3 qui forment une chaîne (Fig.9.12(d)). Le nombre de configurations équivalentes pour la première option est de  $\frac{N(N-5)}{2}$ , car pour placer le premier spin il y a  $N$  choix, mais ce placement restreint celui du second spin (excluant 5 positions), puis on divise par deux car on place une paire. Pour la seconde configuration, il y en a  $4N$ , pour la troisième  $N$ , et enfin pour la dernière il y en a  $2N$ , ce qui fait  $7N$  au total.

Figure 9.12: Réseaux de spins pour le terme **3**

Si nous prenons le logarithme de la fonction de partition, nous obtenons l'équation suivante.

$$\log(Z) = \underbrace{\log(2) + 2N\beta J}_{A} + \log[1 + \dots] \quad (9.37)$$

$$= A + N(e^{-2\beta J})^4 + 2N(e^{-2\beta J})^6 + \left(2N + \frac{N^2}{2}\right)(e^{-2\beta J})^8 - \frac{1}{2}N^2(e^{-2\beta J})^{10} + O(e^{-2\beta J})^{10} \quad (9.38)$$

On note que les termes  $\propto N^2$  se simplifient. Ce n'est pas une coïncidence, en effet, c'est là une conséquence du *Link-Cluster theorem*, qui, de façon informelle, peut se résumer au fait que, dans le développement de  $\log(Z)$ , seuls les diagrammes connectés comptent, impliquant l'extensivité de  $\log(Z)$ .

Number of flipped spins	Configuration	Count	Boltzmann weight
1	•	$N$	$x^4$
2	•• •• ••	$2N$ $N(N-5)/2$	$x^6$ $x^8$
3	••• ••• ••• ••• •••	$2N$ $4N$ $2N(N-8)$ $N(N^2-15N+62)/6$	$x^8$ $x^8$ $x^{10}$ $x^{12}$
4	•••• •••• •••• •••• •••• ••••	$N$ $8N$ $2N$ $4N$ $4N$	$x^8$ $x^{10}$ $x^{10}$ $x^{10}$ $x^{10}$
		⋮ (terms up to $x^{16}$ )	
5	••••• ••••• •••••	$8N$	$x^{10}$
		⋮ (terms up to $x^{20}$ )	
6	•••••• •••••• ••••••	$2N$	$x^{10}$
		⋮ (terms up to $x^{24}$ )	

Figure 9.13: Diagrammes représentant les contributions combinatoires à basses températures.(Wyart, Pacalot 2017)

### 9.2.2 Hautes Températures

Stricto sensu, le développement en hautes températures reviendrait à faire :

$$e^{\beta JS_i S_j} = 1 + \beta JS_i S_j + \frac{\beta J S_i S_j^2}{2} + \dots \quad (9.39)$$

Ce n'est pas ce qui nous intéresse ici. On cherche plutôt à développer en fonction de  $\tanh(\beta)$ . Dans ce but, on se rappelle que :

$$e^{\beta JS_i S_j} = \cosh(\beta J) + S_i S_j \sinh(\beta J) \quad (9.40)$$

On obtient donc, comme fonction de partition :

$$Z = \sum_{\{\vec{S}\}} \prod_{\langle i,j \rangle} \cosh(\beta J) + S_i S_j \sinh(\beta J) \quad (9.41)$$

$$= \cosh^{2N}(\beta J) \left[ \sum_{\{\vec{S}\}} \prod_{\langle i,j \rangle} 1 + S_i S_j \tanh(\beta J) \right] \quad (9.42)$$

$$= \cosh^{2N}(\beta J) \sum_{\{\vec{S}\}} \left[ 1 + \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \tanh(\beta J) + \sum_{\langle i,j \rangle, \langle k,l \rangle} S_i S_j S_k S_l \tanh^2(\beta J) + \dots \right] \quad (9.43)$$

Le calcul semble, de prime abord, complexe ; cependant, en appliquant la somme sur toutes les configurations, on obtient :

$$\begin{aligned} Z = & \cosh^{2N}(\beta J) \left[ 2^N + \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \sum_{\{\vec{S}\}} S_i S_j \right) \tanh(\beta J) \right. \\ & + \sum_{\langle i,j \rangle, \langle k,l \rangle} \left( \sum_{\{\vec{S}\}} S_i S_j S_k S_l \right) \tanh^2(\beta J) \\ & + \sum_{\langle i,j \rangle, \langle k,l \rangle, \langle m,n \rangle} \left( \sum_{\{\vec{S}\}} S_i S_j S_k S_l S_m S_n \right) \tanh^3(\beta J) \\ & \left. + \sum_{\langle i,j \rangle, \langle k,l \rangle, \langle m,n \rangle, \langle o,p \rangle} \left( \sum_{\{\vec{S}\}} S_i S_j S_k S_l S_m S_n S_o S_p \right) \tanh^4(\beta J) + \dots \right] \end{aligned} \quad (9.44)$$

Cependant, il apparaît que les sommes sur les configurations sont toutes nulles avant l'ordre 4, car, pour toutes les configurations possibles ayant une valeur multiplicative de spin  $-1$ , il en existe une autre ayant une valeur multiplicative de leurs spins de  $1$ . Cependant, à partir de l'ordre 4, cette configuration est possible  $S_i S_j S_k S_l S_m S_n S_o S_p$  et n'est pas compensée. Notre fonction de partition devient donc :

$$Z = \cosh^{2N}(\beta J) 2^N \left[ 1 + \sum_{\text{boucles}} \tanh^l(\beta J) \right] \quad (9.45)$$

Avec  $l$  = "taille de la boucle". On peut ensuite développer cette série en comptant le nombre de boucles possibles en fonction de leur taille, comme visible sur fig.9.14

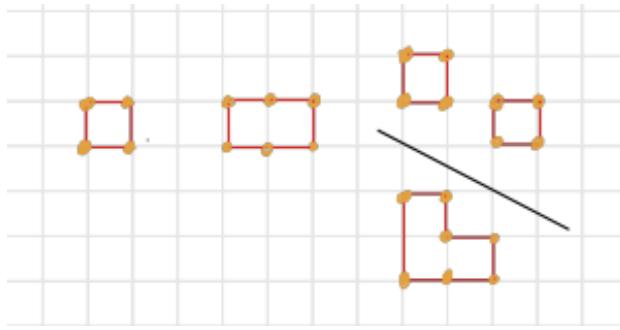


Figure 9.14: Boucles possible de taille 4, 6 et 8

Ainsi, on obtient :

$$Z = \cosh^{2N}(\beta J) 2^N \left[ 1 + N \tanh^4(\beta J) + 2N \tanh^6(\beta J) + \left( 7N + \frac{N(N-5)}{2} \right) \tanh^8(\beta J) + o(\tanh^{10}(\beta J)) \right] \quad (9.46)$$

À nouveau, on s'intéresse à  $\log(Z)$ , dont le développement en série de Taylor nous donne :

$$\log(Z) = N \left[ \log(2 \cosh^2(\beta J)) \right] + N \tanh^4(\beta J) + 2N \tanh^6(\beta J) + \left[ \left(7 - \frac{5}{2}\right)N + \frac{N^2}{2} \right] \tanh^8(\beta J) \quad (9.47)$$

$$- \frac{N^2}{2} \tanh^{10}(\beta J) + o(\tanh^{10}(\beta J)) \quad (9.48)$$

On constate qu'à nouveau les termes  $\propto N^2$  s'annulent, comme prédit par le théorème de *Link-Cluster*.

**Remarque :** Nous avons maintenant une bonne description du comportement de l'énergie libre  $f$  et de l'énergie  $e$  à haute et basse température, schématisé en Fig.9.15. Cependant, leurs comportements pour des températures intermédiaires ne sont pas forcément bien décrits par ces équations. Notamment, car en passant de basse à haute température, ou inversement, il peut y avoir un changement de phase.



Figure 9.15: Développement de basse et de haute température (basse température en jaune et haute température en rouge) de l'énergie (a) et de l'énergie libre (b).

### 9.2.3 Dualité Krammers-Wannier

En comparant les développements en série en haute (9.46) et en basse température (9.36), on remarque que les coefficients associés aux puissances de  $e^{-2\beta J}$  et  $\tanh(\beta J)$  (respectivement pour les séries en haute et en basse température) sont égaux, au moins jusqu'à l'ordre 8. Par exemple, dans la série en basse température, le coefficient associé à  $(e^{-2\beta J})^4$  est  $N$ , et dans la série en haute température, le coefficient associé à  $(\tanh(\beta J))^4$  est également  $N$ . Dans les développements présentés, nous vérifions cette égalité jusqu'au huitième ordre. Cependant, cette équivalence est vraie à tout ordre : les deux séries sont équivalentes à une constante et à une évaluation près.

On définit la série :

$$\mathcal{S}(y(\beta, J)) = 1 + Ny^4 + 2Ny^8 + (7N + N(N-5)/2)y^8 + \dots \quad (9.49)$$

et on peut donc écrire les deux fonctions de partition en fonction de cette série :

$$\mathcal{Z}_{\beta \gg 1}(\beta) = 2e^{NJ/\beta} \mathcal{S}(e^{-2\beta J}) \quad (9.50)$$

$$\mathcal{Z}_{\beta \ll 1}(\beta) = (\cosh \beta J)^{2N} 2^N \mathcal{S}(\tanh \beta J) \quad (9.51)$$

Cette équivalence est appelée la *dualité de Krammers-Wannier*. Elle est valide uniquement pour le modèle d'Ising à deux dimensions.

On rappelle qu'un coefficient d'ordre  $\alpha$  de la série en basse température correspond au nombre de configurations dans lesquelles  $\alpha$  liaisons sont affectées. Les coefficients de la série en haute température représentent le nombre de configurations permettant de former des boucles à  $\alpha$  arêtes. La dualité de Krammers-Wannier affirme que le comptage des configurations pour les hautes et basses températures est équivalent !

On peut représenter cela graphiquement :

- On trace un réseau carré (réseau 2) identique au réseau de spin initial (réseau 1) et on les superpose.
- On décale légèrement le réseau 2 de telle sorte que tous les liens du réseau 1 croisent les liens du réseau 2 (voir Fig. 9.16).
- On impose que les intersections entre chaque lien affecté du réseau 1 et le réseau 2 définissent les arêtes d'une boucle (voir Fig. 9.16).
- Le nombre de liaisons affectées est identique au nombre d'arêtes de la boucle : le comptage est donc équivalent !

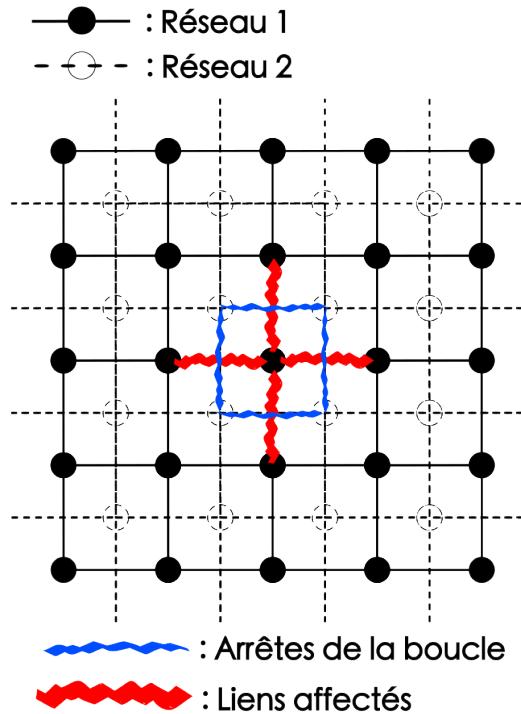


Figure 9.16: Représentation de la dualité Krammers-Wannier pour un réseau carré

Dans la théorie de Krammers-Wannier, d'autres dualités existent selon le réseau considéré. Dans notre cas, le réseau dual d'un réseau carré est également un réseau carré (et comme le comptage est réalisé deux fois sur des réseaux carrés, les coefficients obtenus sont identiques), on appelle cela un réseau auto-dual.

La plupart des réseaux ne sont pas auto-duals. Par exemple, le réseau dual d'un réseau triangulaire est un réseau hexagonal (voir Fig. 9.17).

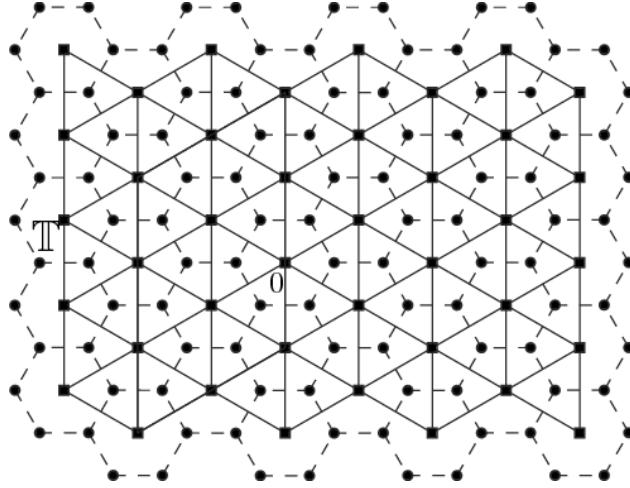


Figure 9.17: Réseau dual du réseau triangulaire [8]

Dans le modèle d'Ising en deux dimensions, il existe une transition de phase et donc une non-analyticité de l'énergie libre à une température critique  $T_c$ . En écrivant le logarithme des fonctions de partition sous la forme de série, on obtient

$$\log(\mathcal{Z}_{\beta \gg 1})(\beta) = \log(2N)J/\beta + \log(\mathcal{S}(e^{-2\beta J})) \quad (9.52)$$

$$\log(\mathcal{Z}_{\beta \ll 1})(\beta) = 2N \log(\cosh \beta J) + N \log(2) + \log(\mathcal{S}(\tanh \beta J)) \quad (9.53)$$

On voit alors que la non-analyticité de l'énergie libre dans les deux cas provient de la non-analyticité de la série  $\mathcal{S}$  ( $\cosh$  et  $1/\beta$  sont analytiques). Il existe donc un  $\beta_c$  tel que  $\mathcal{S}(e^{-2\beta_c J})$  et  $\mathcal{S}(\tanh \beta_c J)$  sont non analytiques simultanément (la température critique est la même pour les deux approximations). En prenant la série à l'infini (i.e. en sommant à l'infini), les deux évaluations de la série doivent être égales et la condition de non-analyticité devient

$$e^{-2\beta_c J} = \tanh \beta_c J \quad (9.54)$$

Cette expression est appelée *relation d'auto-dualité*.

En résolvant cette relation pour  $\beta_c$ , on obtient que

$$\beta_c = \frac{1}{2J} \log(1 + \sqrt{2}) \quad (9.55)$$

$$T_c = \frac{J}{k_B} \frac{2}{\log(1 + \sqrt{2})} \quad (9.56)$$

### 9.3 Matrice de transfert

On considère un réseau de  $N$  spins en une dimension avec des conditions aux bords périodiques (chaîne de spins). Le réseau de spin est soumis à un champ non nul  $h$ .

La fonction de partition en une dimension s'écrit :

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{\{\vec{S}\}} \exp \left( \beta J \sum_{<i,j>} S_i S_j + \beta h \sum_i S_i \right) \quad (9.57)$$

Et comme les conditions aux bords sont périodiques, la somme  $\sum_{<i,j>}$  sur tous les voisinages peut s'écrire explicitement et on a

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{S_1=\pm 1, \dots, S_N=\pm 1} \exp \left( \beta \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \beta h \sum_{i=1}^N S_i \right) \quad (9.58)$$

$$= \sum_{S_1=\pm 1, \dots, S_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left( \beta S_i S_{i+1} + \beta \frac{h}{2} (S_i + S_{i+1}) \right) \quad (9.59)$$

On définit ensuite la *matrice de transfert*  $T$  par

$$T_{\alpha\beta} = \exp \left( \beta J \alpha + \beta \frac{h}{2} (\alpha + \beta) \right) \quad (9.60)$$

$$\Rightarrow T = \begin{bmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{bmatrix} \quad (9.61)$$

où  $\alpha$  et  $\beta$  prennent les valeurs  $\pm 1$ . En utilisant cette matrice de transfert, on peut simplifier le calcul de  $\mathcal{Z}(\beta)$ , car l'argument de l'exponentielle dans la fonction de partition ne peut prendre que quatre valeurs possibles, qui correspondent aux éléments de la matrice de transfert  $T$ . La fonction de partition s'écrit alors comme suit :

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{S_1=\pm 1, \dots, S_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N T_{S_i, S_{i+1}}, \quad (9.62)$$

où l'on impose la condition périodique  $S_{N+1} = S_1$  (modulo  $N$ ).

Cela permet de réécrire la fonction de partition de manière compacte. Prenons le cas particulier où  $N = 3$ . Dans ce cas, on obtient :

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{S_1, S_2, S_3} T_{S_1, S_2} T_{S_2, S_3} T_{S_3, S_1}. \quad (9.63)$$

On remarque que cette expression peut être interprétée comme une trace de la matrice  $T^3$ , c'est-à-dire :

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{Tr}(T^3). \quad (9.64)$$

Justification de cette réécriture :

Pour démontrer cela, développons l'expression de  $\text{Tr}(T^3)$  :

$$\text{Tr}(T^3) = \text{Tr}(T \cdot T \cdot T). \quad (9.65)$$

Par définition de la trace, cela revient à sommer les éléments diagonaux du produit matriciel, donc :

$$\text{Tr}(T^3) = \sum_{\alpha} (T \cdot T \cdot T)_{\alpha,\alpha}. \quad (9.66)$$

Développons l'élément diagonal  $(T \cdot T \cdot T)_{\alpha,\alpha}$  :

$$(T \cdot T \cdot T)_{\alpha,\alpha} = \sum_{\beta,\gamma} T_{\alpha,\beta} T_{\beta,\gamma} T_{\gamma,\alpha}. \quad (9.67)$$

En sommant sur tous les indices  $\alpha, \beta, \gamma$ , on obtient :

$$\text{Tr}(T^3) = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} T_{\alpha,\beta} T_{\beta,\gamma} T_{\gamma,\alpha}. \quad (9.68)$$

C'est exactement la même expression que celle obtenue en écrivant directement  $\mathcal{Z}(\beta)$  comme une somme sur toutes les configurations  $S_1, S_2, S_3$ .

Ainsi, par récurrence, on a :

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{Tr}(T^N), \quad (9.69)$$

**Attention !** Cela n'est valable qu'en une dimension.

Il semblerait que nous ayons fait tout ceci pour calculer tout de même une quantité complexe, à savoir la puissance  $N$ -ième d'une matrice arbitraire. Cependant, ici, nous utilisons un résultat important de la trace :

$$\text{Tr}(A) = \text{Tr}(B^{-1}AB). \quad (9.70)$$

Cela signifie que, sous un changement de base approprié, nous pouvons calculer cette quantité de manière plus simple. En utilisant les outils d'algèbre linéaire, nous diagonaliserons  $T$ .

Tout se simplifie, car la puissance  $N$ -ième d'une matrice diagonale est simplement donnée par la puissance  $N$ -ième de ses valeurs propres.

Preuve formelle :

Soit  $B$  la matrice de changement de base qui rend  $T$  diagonale, et soit  $A$  la matrice diagonale correspondante.  $T$  est toujours diagonalisable car elle est symétrique (cf. Théorème spectral). On a alors :

$$\text{Tr}(T^N) = \text{Tr}((B^{-1}TB)^N). \quad (9.71)$$

En utilisant la propriété des puissances, on peut écrire :

$$(B^{-1}TB)^N = (B^{-1}TB) \cdot (B^{-1}TB) \cdots (B^{-1}TB) = B^{-1}A^N B. \quad (9.72)$$

Ainsi :

$$\text{Tr}(T^N) = \text{Tr}(B^{-1}A^N B). \quad (9.73)$$

Puisque la trace est invariante par changement de base, on a :

$$\text{Tr}(T^N) = \text{Tr}(A^N). \quad (9.74)$$

Or,  $A$  étant une matrice diagonale, elle s'écrit sous la forme :

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}. \quad (9.75)$$

La  $N$ -ième puissance de  $A$  est donnée par :

$$A^N = \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix}. \quad (9.76)$$

Ainsi, la trace de  $A^N$  est simplement la somme des éléments diagonaux de cette matrice :

$$\text{Tr}(A^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (9.77)$$

Cela nous permet d'écrire directement :

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{Tr}(T^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (9.78)$$

Lorsque  $N \rightarrow \infty$  (cas de la limite thermodynamique), seule la valeur propre la plus grande contribue de manière significative. En supposant sans perte de généralité que  $\lambda_1 > \lambda_2$ , on peut écrire :

$$\mathcal{Z}(\beta) = \lambda_1^N \left( 1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right). \quad (9.79)$$

Pour les quantités moyennes physiques, on utilise :

$$\frac{\log(\mathcal{Z})}{N} = \log(\lambda_1) + \frac{1}{N} \log \left( 1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right). \quad (9.80)$$

Lorsque  $N \rightarrow \infty$ , le second terme tend vers zéro, et il reste :

$$\frac{\log(\mathcal{Z})}{N} \rightarrow \log(\lambda_1). \quad (9.81)$$

Une question naturelle qui pourrait se poser maintenant est : comment déterminer cette valeur propre, que l'on sait être la plus grande entre les deux, sans avoir à calculer la seconde ? Il existe des méthodes numériques (par exemple, en Python) et analytiques qui permettent de le faire sans grande difficulté.

D'ailleurs, analytiquement, il est souvent beaucoup plus simple de calculer uniquement la plus grande valeur propre plutôt que toutes les valeurs propres.

Dans notre cas la matrice  $T$  est 2x2 donc simple, il suffit de donc de la diagonaliser pour obtenir ses deux valeurs propres.

Pour trouver les valeurs propres  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  de  $T$ , on résout l'équation caractéristique :

$$\det \begin{pmatrix} \exp(\beta(J+h)) - \lambda & \exp(-2\beta) \\ \exp(-2\beta) & \exp(\beta(J-h)) - \lambda \end{pmatrix} = 0. \quad (9.82)$$

Cela donne les valeurs propres :

$$\lambda_{\pm} = \exp(\beta J) \left[ \cosh(\beta h) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta h) - \exp(-4\beta J)} \right]. \quad (9.83)$$

Dans le cas particulier où le champ  $h = 0$ , ces expressions se simplifient :

$$\lambda_+ = \cosh(\beta J), \quad \lambda_- = \sinh(\beta J). \quad (9.84)$$

Ainsi, on trouve que :

$$\frac{1}{N} \log(\mathcal{Z}) = -\frac{F}{Nk_B T} \rightarrow \log(\lambda_+), \quad (9.85)$$

qui tend vers  $\log(\cosh(\beta J))$ . Cela est extrêmement régulier et il n'y a rien d'intéressant qui se produit, sauf à  $T = 0$ . Cependant, cette température est quasiment impossible à atteindre et sans intérêt pratique dans notre monde. Il n'y a donc pas de transition de phase pour aucun  $T$ .

On aurait pu prédire ce résultat en remarquant que le modèle d'Ising en 1D, notamment les interactions entre spins voisins ( $S_i S_{i+1}$ ), est dual à un modèle de spins indépendants. Cela explique l'absence de transition de phase.

Si l'on refait le même calcul qu'auparavant en considérant  $h \neq 0$ , on obtient :

$$\frac{F}{N}(\beta, h) = -J - k_B T \log \left[ \cosh \left( \beta h + \sqrt{\cosh^2(\beta h) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)} \right) \right]. \quad (9.86)$$

Cela implique que l'aimantation par site est donnée par :

$$m = \frac{M}{N} = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial \log(\mathcal{Z})}{\partial h}, \quad (9.87)$$

soit :

$$m = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\cosh^2(\beta h) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)}}. \quad (9.88)$$

Quand  $h \rightarrow 0^+$  ou  $h \rightarrow 0^-$ ,  $m$  tend des deux côtés vers 0. Il n'y a donc pas de transition de phase, car il n'existe aucune singularité intéressante pour tout  $\beta$  fini.

## 9.4 Argument de Peierls:

### L'argument de Peierls en dimension 1

L'argument de Peierls est une adaptation de l'argument de nucléation, mais appliqué spécifiquement à un système unidimensionnel ( $d = 1$ ). Il se base sur l'idée de considérer deux sous-systèmes ayant **la même énergie libre initiale**. Cet argument apporte une explication plus spécifique sur la raison pour laquelle il n'y a pas de transition de phase en dimension 1.

On suppose donc deux états macroscopiques ayant la même énergie libre  $F$  au départ. Cela implique que  $\delta f = 0$ , où  $\delta f$  est la différence d'énergie libre volumique entre les deux états.

Lorsqu'une transition locale (comme la formation d'une gouttelette de l'état 2 dans l'état 1) se produit, la variation d'énergie libre totale est donnée par :

$$\Delta F = Y \cdot \ell^{d-1}, \quad (9.89)$$

où :

- $\ell$  est la taille (ou longueur) de la gouttelette,
- $Y$  est la tension superficielle de l'interface entre les deux phases,
- $d$  est la dimension du système.

Pour  $d > 1$ , la variation d'énergie libre  $\Delta F$  croît avec  $\ell^{d-1}$ , car l'énergie d'interface dépend de la surface de la gouttelette. Cela signifie qu'une grande gouttelette ( $\ell \rightarrow \infty$ ) coûtera une énergie  $\Delta F$  très élevée. Cette croissance rapide rend les transitions entre phases rares.

Pour qu'une transition de phase se produise, il faut une gouttelette de très grande taille, ce qui rend le passage entre phases pratiquement impossible.

En conséquence, le temps moyen  $\tau$  pour passer d'une phase à l'autre est donné par :

$$\tau \propto \exp(\beta \ell^{d-1}), \quad (9.90)$$

où  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ . Lorsque  $d > 1$ ,  $\tau$  devient exponentiellement grand avec la taille  $\ell$ , rendant le système *piégé* dans une phase stable.

Pour  $d = 1$ , la variation d'énergie libre devient indépendante de la taille  $\ell$ , car :

$$\Delta F = Y \cdot \ell^0 = Y, \quad (9.91)$$

c'est-à-dire une **constante finie**.

Cette valeur constante signifie que la formation d'une gouttelette ne coûte pas plus d'énergie, quelle que soit sa taille.

Le temps moyen  $\tau$  pour passer d'une phase à l'autre devient alors :

$$\tau \propto \exp(\beta \text{ constante}), \quad (9.92)$$

Cela reste raisonnable (contrairement au cas  $d > 1$ ) et permet au système de fluctuer librement entre les deux états sans être *emprisonné* dans une phase particulière. Ainsi, le système peut osciller naturellement entre les deux états macroscopiques, ce qui empêche l'apparition d'une transition de phase clairement définie. Par conséquent, il n'y a pas de transition de phase en  $d = 1$ .

## 9.5 Développement du viriel / de Mayer / Diagramme pour les systèmes de particules

Nous avons vu comment effectuer des approximations pour des modèles de spins, mais il serait intéressant de se demander s'il est possible d'appliquer une approche similaire à des systèmes plus physiques et concrets, comme un système de particules. Par exemple, il serait pertinent de calculer des corrections au modèle du gaz parfait. C'est précisément ce que nous allons aborder dans cette section.

Tout d'abord, plaçons-nous dans un espace tridimensionnel ( $3D$ ) et considérons un système contenant  $N$  particules, confiné dans un volume  $V$  à une température  $T$ . Nous avons déjà calculé plusieurs fois la fonction de partition correspondante, donnée par :

$$Z(T, V, N) = \left( \frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{-\frac{3N}{2}} Z_Q(T, V, N), \quad (9.93)$$

où le premier terme représente l'intégrale sur les impulsions  $\mathbf{p}$ , et le second terme,  $Z_Q$ , est l'intégrale sur les positions.

Plus précisément,  $Z_Q$  s'écrit comme :

$$Z_Q = \frac{1}{N!} \int_V d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N e^{-\beta \sum_{(i,j)} v(\vec{x}_i, \vec{x}_j)}, \quad (9.94)$$

où la somme  $\sum_{(i,j)}$  parcourt tous les couples de particules  $(i, j)$ . En général, on suppose que le potentiel  $v(x_i, x_j)$  dépend uniquement de la distance entre les deux particules, soit :

$$v(x_i, x_j) = v(|x_i - x_j|) = v(d). \quad (9.95)$$

Quelques exemples de tels potentiels sont donnés en Fig.9.18.

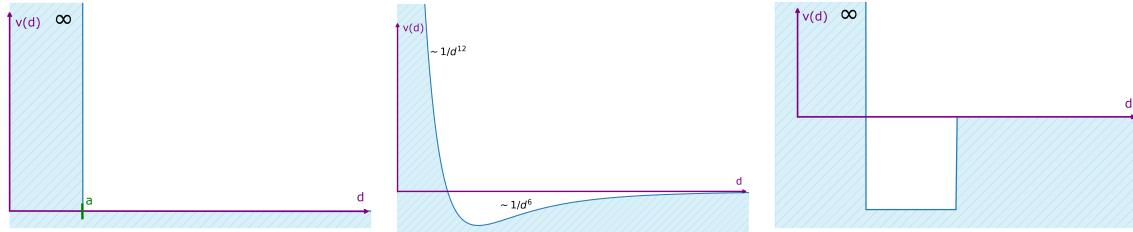


Figure 9.18: (a) Potentiel simplifié pour des sphères dures de rayon  $a/2$  (b) Potentiel de Lennard-Jones ("potentiel 12-6") (c) Potentiel simplifié avec attraction

Regardons intuitivement ce que représentent ces potentiels de Fig.9.18.

Le potentiel présenté en Fig.9.18(a) modélise le fait que les particules ne peuvent pas se chevaucher mais ne prend en compte aucune attraction entre les particules.

Le potentiel de Lennard-Jones(Fig.9.18(b)) montre un comportement répulsif quand les particules sont trop proches l'une de l'autre (zone en  $\sim 1/d^{12}$ ) et une attraction quand les particules ne sont pas trop proches l'une de l'autre (zone en  $\sim 1/d^6$ ). À grande distance le potentiel est simplement 0.

Cependant, un tel potentiel n'est pas toujours trivial à manipuler. Ainsi, on peut aussi le simplifier. Ceci est présenté en Fig.9.18(c) qui ne possède que trois différentes valeurs. Le potentiel vaut : infini quand les particules sont trop proches, une valeur négative (attraction) quand les particules sont proches l'une de l'autre et 0 quand les particules sont éloignées.

Revenons à l'intégrale  $Z_Q$ . En développant l'exponentielle de (9.94) on obtient :

$$Z_Q = \frac{1}{N!} \int_V d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N \prod_{i < j} e^{-\beta v_{ij}} = \frac{1}{N!} \int_V d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N \prod_{i < j} \left( 1 - \underbrace{\left( 1 - e^{-\beta v_{ij}} \right)}_{-f_{ij}} \right) \quad (9.96)$$

Où l'on a introduit la fonction  $f_{ij} = e^{-\beta v_{ij}} - 1$  (qui dépend toujours de  $x_i$  et  $x_j$ ; formellement on a  $f(x_i, x_j) = e^{-\beta v(x_i, x_j)} - 1$ ). Cette fonction satisfait  $0 \leq f_{ij} \leq 1$  et  $f_{ij} = 0$  pour  $\beta = 0$ .

On peut maintenant développer le produit dans l'intégrale de manière similaire à ce qui a été fait pour le modèle d'Ising (??) pour obtenir :

$$\prod_{i < j} (1 + f_{ij}) = 1 + \sum_{i < j} f_{ij} + \sum_{(i,j)(k,l)} f_{ij} f_{kl} + \dots \quad (9.97)$$

 C'est cela qui est appelé développement de Mayer.

En insérant le résultat précédent dans l'intégrale, il est maintenant possible de séparer l'intégrale par linéarité entre les différents termes du développement.

Pour le premier terme (qui est simplement 1), on obtient donc :

$$Z_Q^{(1)} = \frac{1}{N!} \int_V d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N \cdot 1 = \frac{V^N}{N!} \quad (9.98)$$

Ainsi, au premier ordre on obtient la fonction de partition d'un gaz parfait. En effet, la supposition pour le gaz parfait est que les particules n'interagissent pas entre elles. Dans le cas présent, cela signifie simplement que  $f_{ij} = 0, \forall i, j$ .

Au second ordre, on obtient :

$$Z_Q^{(2)} = \frac{1}{N!} \int_V d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N \cdot \left( 1 + \sum_{i < j} f_{ij} \right) = \frac{V^N}{N!} + \frac{N(N-1)}{2} V^{N-1} \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 f_{12} \quad (9.99)$$

$$= \frac{V^N}{N!} + \frac{N(N-1)}{2} V^{N-1} \int \textcircled{O} \textcircled{O} = \frac{V^N}{N!} + \frac{N(N-1)}{2} V^{N-1} \bullet \bullet \quad (9.100)$$

Dans le dernier passage, on a simplement utilisé le fait que les intégrales pour chacun des différents  $f_{ij}$  prend la même valeur. On a donc choisi de garder le cas  $i = 1, j = 2$ . Le nombre de fois que cette valeur apparaît dans la somme correspond aux nombres de façons de choisir 2 éléments parmi  $N$ , i.e.  $\binom{N}{2} = N(N-1)/2$ . On peut donc intégrer sur toutes les autres variables  $(\vec{x}_3, \dots, \vec{x}_N)$  et on obtient le coefficient  $V^{N-1}$ .

Les notations avec  $\textcircled{O} \textcircled{O}$  et  $\bullet \bullet$  servent à simplifier l'écriture de l'intégrale de  $f_{12}$  qui est ennuyeuse. Elles rappellent également qu'il ne s'agit pour l'instant que de l'interaction entre deux particules. Pour des ordres supérieurs ( $Z_Q^{(3)}, Z_Q^{(4)}$ , etc.) on trouvera des sommes du type  $\sum_{(i,j)(k,l)} f_{ij} f_{kl}$ . Pour les termes où,  $i \neq k$  et  $j \neq l$  on aura donc un terme en  $(\bullet \bullet)^2$ . Mais il y aura aussi les termes en  $f_{ij} f_{jk}$  qui correspondent donc cette fois à  $\textcircled{O} \textcircled{O} \textcircled{O}$  où il faut prendre en compte que la particule du milieu interagit avec deux particules et non pas une seule. Ainsi à chaque nouvelle ordre on ajoute le nombre d'interactions que peut avoir une seule particule avec les autres.

Il est évident que la complexité de ces intégrales augmente avec le nombre de particules. En effet, on peut calculer analytiquement l'intégrale de la série (9.97) jusqu'à 4 particules. Ensuite il faut résoudre les intégrales avec des méthodes numériques (de type Monte-Carlo par exemple).

On peut donc faire cela à tous les ordres et on obtient à la fin

$$\frac{pV}{Nk_B T} = 1 + \sum_{k=2}^{\infty} B_k \left( \frac{N}{V} \right)^{k-1} \quad (9.101)$$

que l'on appelle le développement du viriel qui est donc une correction au modèle du gaz parfait en terme de puissances de la densité ( $N/V$ ). Les coefficients  $B_k$  (ou  $B_k^{(T)}$  pour indiquer qu'ils dépendent dans la plupart des cas de la température) sont appelés les coefficients du viriel ou coefficients viriaux. Ces coefficients sont rapidement (quand on change d'ordre) très compliqués à calculer.

Dans le cas des sphères dures,  $B_2$  (i.e.  dans notre notation diagrammatique) est le seul coefficient qui est encore relativement facile à calculer.

**Example 3** Calculons donc  $B_2$  pour un gaz de sphères dures en 3D.

On rappelle tout d'abord que le potentiel (Fig.9.18(a)) est donné par

$$v(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < a \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Et donc la fonction  $f_{12}$  sera donnée par

$$f_{12}(r) = e^{-\beta v} - 1 = \begin{cases} -1 & \text{si } r < a \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (9.102)$$

On a donc finalement

$$B_2 = \bullet - \bullet = \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 f_{12} = -2\pi \int_0^\infty \left( e^{-\beta v(r)} - 1 \right) r^2 dr \quad (9.103)$$

$$= -2\pi \int_0^a (-1)r^2 dr = 2\pi \left[ \frac{1}{3}r^3 \right]_0^a = \frac{2}{3}\pi a^3 \quad (9.104)$$

ou dans la troisième égalité on est simplement passé en coordonnées sphériques et dans la quatrième on a utilisé que la fonction  $f_{12}$  est non nulle uniquement dans l'intervalle  $[0, a]$ . ■

Pour les coefficients supérieurs à 2, on peut trouver des tables qui recensent ces valeurs.

## References

- [1] Fraval, J. (2018) Modèle d'Ising.
- [2] Physique statistique, Lecture 8.
- [3] [Watch supercooled water freeze](#), ESRFsynchrotron, Youtube
- [4] [Reusable Hand Warmer \(Nucleation\)](#), Rick Makes, Youtube.
- [5] [Filming Antarctica's Unerwater Secret—Wild Stories—BBC Earth](#), BBC Earth, Youtube.
- [6] [Peste de l'étain](#), Wikipedia.
- [7] [Bataille de la Bérézina](#), Wikipedia.
- [8] Beffara, Vincent & Duminil-Copin, Hugo. (2010). The self-dual point of the two-dimensional random-cluster model is critical for  $q \geq 1$ . Probability Theory and Related Fields. 153. 10.1007/s00440-011-0353-8.