ENS Lyon
Magistère de Sciences Physiques
1999-2000

Examen de Thermodynamique et Mécanique Statistique
PCWH

Thermodynamique et Mécanique Statistique
Mardi 23 mai 2000

1 Questions courtes

Pour cette série de questions répondre par une formule, un mot voire une petite phrase.

- Les électrons d'un échantillon de cuivre se comportent, en première approximation, comme un gaz parfait. À 10 K leur vitesse moyenne (RMS) vaut $\overline{v} \sim 10^6$ m/s, tandis que la théorie statistique de Maxwell-Boltzman prédit $\overline{v} \sim 10^4$ m/s. Expliquer cet écart.

- Les atomes d'hydrogène occupant les sites interstitiels d'un cristal de palladium peuvent occuper deux types de sites d'énergie respectives ϵ_1 et ϵ_2. On peut négliger les interactions $H - H$. La chaleur specifique de l'hydrogène tend vers zéro à basse température.
  Préciser la forme fonctionnelle (approximativement) de cette décroissance.

- Donner une température caractéristique associée à cette chute vers zéro.

- L'Hamiltonien d'un réseau paramagnétique "classique" en présence d'un champ magnétique$h$ s'exprime:
$$H = -\vec{h} \cdot \sum_{i=1,N} \vec{S_i}$$
  où $\vec{S_i}$ est un vecteur classique unitaire, $|\vec{S_i}| = 1$, pouvant prendre toute orientation dans l'espace.
  Qu'attend-on pour l'énergie interne à basse température $U =< E >$:
  a) Nk_BT, **b)** $\frac{1}{2}Nk_BT$, **c)** $Nk_BT\left(\frac{T}{T_D}\right)^3$, **d)** $Nk_BT \exp(T/T_o)$, **e)** Autre.

- Près d'un point critique, le paramètre d'ordre et la longeur de corrélation varient respectivement comme $m \sim (T - T_C)^\beta$ et $\xi \sim |T - T_C|^{-\nu}$, où T_C est la température critique. En simulation numérique du modèle d'Ising en dimension 2 on peut observer la divergence de ξ et l'apparition de structures fractales. Si, à $T = T_C$ on double la taille du système, soit $L_2 = 2L_1$ (le nombre de spins est donc à multiplier par 4), que vaut alors le rapport des moments magnétiques $M(L_2)/M(L_1)$ pour $\beta = 1/8$ et $\nu = 1$?

- On peut appliquer la méthode de renormalisation dans l'espace réel au modèle d'Ising, par la méthode des cumulants. Sur réseau triangulaire, on obtient une relation de récurrence pour la constante de couplage $K = J/k_B T$ telle que:

$$K' \sim 2K \left(\frac{\exp(3K) + \exp(-K)}{\exp(3K) + 3\exp(-K)} \right)^2 . \tag{1}$$

  où K' est la constante de couplage après renormalisation.
  Par analyse des comportements asymptotiques en déduire que le système possède (au moins) un point fixe de la renormalisation à température finie (On permet, peut-être deux équations ici).

- Un polymère est constitué de $N = 10^7$ monomères de taille a. La longeur de persistance ξ varie avec température de $10^4 a$ à 200 K jusqu'à $10a$ à $T = 350$ K. Estimer le rapport des rayons de gyration R_g du polymère au deux températures (les effets de volume exclu peuvent être négligés).

2 Thermodynamique de séparation et de transition de phase

Dans cette question nous considérons un système magnétique décrit par l'aimantation, ou paramètre d'ordre, $\vec{m} = \pm|\vec{m}|\vec{z}$ et un champ magnétique "réduit" $\vec{h} = \pm|\vec{h}|\vec{z}$, toujours parallèle à $\vec{m}$. Le module $m = |\vec{m}|$ est défini sur l'intervalle $0 < m < 1$ et on définit aussi le champ scalaire $h = |\vec{h}|$. Le moment magnétique est proportionnel à $\vec{m}$: $\vec{M} = N\mu_B\vec{m}$ et le champ magnétique s'écrit $\vec{H} = \vec{h}/\mu_B\mu_0$. Selon cette notation, le premier principe prend la forme:

$$dU = TdS + Nhdm. \tag{2}$$

a) Dans une première expérience (théorique!) on met le système en contact avec un réservoir à la température T et l'on impose une aimantation $\vec{m}$. Définir l'énergie libre F (de Helmholtz) pertinente, fonction des variables indépendantes T et m, ainsi que les conditions d'équilibre thermodynamique. En déduire les expressions des variables conjugées à T et m.

b) Pour $T \geq T_C$ (température de Curie) F_{eq} est donné par un développement "à la Landau":

$$\frac{F(m,T)}{N} = f_0(T) + \frac{a}{2}(T - T_c)m^2 + \frac{b}{4}m^4. \tag{3}$$

Déterminer les équations d'état de l'entropie $S(T, m)$ et du champ $h(T, m)$.

c) Pour $T < T_c$, montrer que (3) ne satisfait pas, globalement, la condition d'équilibre et que le système évolue vers un état où deux phases distinctes coexistent. À l'aide des diagrammes, décrire ce qui se passe pour $m = 0$ et $T < T_C$.

d) Expérimentalement on impose le champ, h. Définir l'énergie libre (de Gibbs) $G(T, h)$ correspondant à cette expérience. Ecrire, en utilisant (3), une expression pour l'equilibre. Trouver la valeur de m à l'équilibre pour $T > T_C,\ h = 0$ et $T < T_C,\ h = 0$. Montrer que $\partial^2 G/\partial T \partial h$ et $\partial^2 G/\partial h^2$ sont singulières à $T = T_C,\ h = 0$.

e) Montrer que $C_m(m = 0) = T(\partial S/\partial T)_m$ déduite de l'expression (3) est continue à T_C, mais que $C_h(h = 0) = T(\partial S/\partial T)_h$ est discontinue. S'il était possible d'imposer $m = 0$, quel comportement peut-on penser observer pour la chaleur spécifique à T_C ?

3 Champ Moyen pour le Modèle XY

Les spins de type XY sont des vecteurs classiques unitaires, $|\vec{S}_i| = 1$, confinés dans un plan bidimensionnel (plan XY).

a) En présence d'un champ magnétique $\vec{h}$, l'Hamiltonien d'un seul spin s'écrit:

$$H = -\vec{h} \cdot \vec{S} = h \cos(\theta), \tag{4}$$

où l'angle θ définit l'orientation du spin dans le plan. Montrer que la fonction de partition s'exprime $Z = cI_0(\beta h)$ où c est une constante et I_0 est une fonction de Bessel.

b) Pour un système ferromagnétique de type XY sur réseau (hyper)-cubique en dimension d, avec des interactions limitées aux plus proches voisins, l'Hamiltonien prend la forme

$$H = -J \sum_{<i,j>} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -J \sum_{<i,j>} \cos(\theta_i - \theta_j). \tag{5}$$

Le système devient ferromagnétique à basse température avec un point critique à $T = T_C, h = 0$. Tracer le diagrame de phase (h, T) pour $\vec{h}$ suivant l'axe $\pm\vec{z}$.

c) Décrire brièvement le principe de l'approximation de champ moyen pour un système ferromagnétique. Faire cette approximation pour former l'Hamiltonien:

$$H_{CM} = \frac{Jzm^2N}{2} - (Jz\vec{m} + \vec{h}) \cdot \sum_i \vec{S}_i, \tag{6}$$

où $\vec{m}$ est le paramètre d'ordre et z est le nombre de co-ordination du réseau. Exprimer Z et l'énergie libre $G(m)$ dans cette approximation ($\vec{m}$ et $\vec{h}$ sont parallèlles). Montrer qu'à l'équilibre:

$$m = \frac{I_1(Jzm + h)}{I_0(Jzm + h)} \tag{7}$$

d) Faire un développement limité de cette expression d'ordre $O(m)$ pour trouver la température de transition T_C. Comparer ce résultat au modèle d'Ising et commenter la difference. Développer à l'ordre $O(m^3)$ pour vérifier que, près de T_C, $m \sim \frac{(T_C - T)}{T_C}^{\beta}$. Calculez β. Est-ce la valeur que vous attendez ?

Formulaire

$$\begin{aligned} I_0 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp(x \cos(\theta)) d\theta \\ \frac{dI_0}{dx} &= I_1 \\ I_n(x) &= \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(\frac{1}{2}x)^{n+2r}}{r!(r+n)!}. \end{aligned} \tag{8}$$