ENS Lyon
Magistère de Sciences Physiques
1999-2000

Examen de Mécanique Statistique
PCWH

Mécanique Statistique
Mardi 22 mai 2001

1 Questions courtes

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

1.1

I) La chaleur spécifique, C, d'un oscillateur hamonique classique d'hamiltonien:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\kappa x^2}{2} \tag{1}$$

est:

a) k_B, **b)** 0, **c)** $2k_B$, **d)** $k_B \exp(-T/T_0)$.

II) Pour un oscillateur anharmonique classique de la forme:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\kappa x^4}{4} \tag{2}$$

C devient

a) inchangé par rapport a l'oscillateur harmonique, **b)** 0, **c)** $(3/4)k_B$, **d)** $(5/4)k_B$.

1.2

I) Un système isolé (énergie constante) possède $N = 2$ particules sans interaction réparties sur $N_o = 4$ états quantiques dégénérés. Calculer le nombre de microetats, Ω pour

a) des fermions, **b)** des bosons.

II) Dans la limite classique ($N_o >> N >> 1$) on peut négliger la double occupation des niveaux quantiques quelles que soient les particules. Utiliser les résultats précéndents pour en déduire que

$$\Omega = \frac{N_o!}{(N_o - N)!N!} \tag{3}$$

III) Montrer que l'entropie est extensive dans cette limite ($\log N! \approx N \log N - N$).

1.3

Calculer l'énergie moyenne par lien pour l'état fondamental de trois spins de type Ising, sur un triangle, avec interaction antiferromagnétique entre plus proches voisins.

$$H = J \sum_{<i,j>} \sigma_i \sigma_j, \quad J > 0 \tag{4}$$

1.4

La longueur de corrélation ξ décrivant les flucutations de densité dans un échantillon de SF_6 diverge près du point critique selon la relation

$$\frac{\xi}{a} \approx 2 \left(\frac{T - T_C}{T_C} \right)^{-\nu}, \quad T_C \approx 318^o K,\ \nu = 0.64. \tag{5}$$

"a" correspond à une longueur microscopique (que vous devrez estimer). Donner un ordre de grandeur de la précision du controle de la température nécessaire pour observer l'opalescence critique en équilibre.

A votre avis ce phénomène, est-il observable à l'équilibre en laboratoire d'enseignement?

2 L'approximation de champ moyen pour le modèle d'Ising antiferromagnétique.

Un cristal antiferromagnétique non-frustré est constitué d'ions magnétiques répartis selon deux sous-réseaux a et b imbriqués, tels que les z plus proches voisins d'un ion du sous-réseau a appartiennent au sous-réseau b, et vice-versa. Le terme de couplage J entre les moments magnétiques d'ions plus proches voisins est positif, ceci favorise donc l'alignement antiparallèle des spins des ions appartenant à des sous-réseaux différents.

En absence de champ magnétique extérieur ($h = 0$), un tel cristal possède toujours une aimantation globale nulle, mais on observe des phenomènes critiques (singularité dans la chaleur specifique, par exemple) à une température critique T_N, appelée température de Néel. À T_N il apparaît une aimantation spontanée pour chacun des sous-réseaux, mais selon des sens opposés (ordre antiferromagnetique).

On étudie ici l'antiferromagétisme dans le cadre d'un modèle d'Ising avec couplage réduit aux proches voisins, et sur un réseau "hypercubique" (un réseau linéaire, carré, cubique $\cdots$). Les variables de spin peuvent prendre les valeurs $\sigma_i = \pm 1$ suivant l'axe $\vec{z}$. L'hamiltonien est donc de la forme:

$$H = J \sum_{<i,j>} \sigma_i \sigma_j - h(\sum_{i \in a} \sigma_i + \sum_{j \in b} \sigma_j), \tag{6}$$

avec $J > 0$. La notation $< i, j >$ signifie la sommation sur les voisins plus proches une fois.

On definit les paramètres d'ordre de l'aimantation sur les sous-réseaux a et b:

$$m_a = \left\langle \frac{2}{N} \sum_{i \in a} \sigma_i \right\rangle, \quad m_b = \left\langle \frac{2}{N} \sum_{j \in b} \sigma_j \right\rangle, \tag{7}$$

où chaque sous-réseau contient $N/2$ spins.

a) Quelle est la valeur de l'énergie E du cristal dans l'état "fondamental" (à $T = 0$) en champ extérieur nul ? Quel est le degré de dégénérescence de cet état ?

b) Avec une approximation de type champ moyen, réduire l'hamiltonien à un hamiltonien effectif de la forme:

$$H_{MF} = H_o + \sum_{i \in a} h^a_{eff} \sigma_i + \sum_{j \in b} h^b_{eff} \sigma_j. \tag{8}$$

Spécifier la forme de H_o, h^a_{eff} et h^b_{eff}.

c) Dans le cadre de cette approximation, exprimer la fonction de partition Z et l'énergie libre de Gibbs G du sytème en fonction de T, h, m_a, m_b.

En déduire que, á l'equilibre, m_a et m_b satisfont les relations d'autoconsistance:

$$\begin{cases} m_a = -\tanh\left[\beta(Jzm_b - h)\right] \\ m_b = -\tanh\left[\beta(Jzm_a - h)\right]. \end{cases} \tag{9}$$

d) Dans le cas $h = 0$, établir une équation unique pour $s = \frac{1}{2}(m_a - m_b)$ avec $m_a = -m_b$. Illustrer la résolution graphique de cette équation et identifier T_N. Montrer que, pour $T < T_N$, la solution $s = 0$ n'est pas physique.

Montrer que, pour $T < T_N$, $s \sim \left(\frac{T_N - T}{T_N}\right)^\beta$ avec l'exposant critique $\beta = 1/2$.

e) On definit l'aimantation totale $M = Nm = \frac{N}{2}(m_a + m_b)$. Montrer que, contrairement au cas ferromagnétique, la susceptibilité magnétique par spin, $\chi = \frac{\partial m}{\partial h}$, dans la limite $h \to 0,\ T \to T_N^+$ n'est pas singulière. Tracer $(k_B\chi)^{-1}$ en fonction de T pour $T > T_N$, dans la limite $h \to 0$.

Expliquer qualitativelment (et brièvement !) l'origine d'une telle différence entre les cas ferromagnétique et antiferromagnétique.

f) La susceptibilité des systèmes antiferromagnétiques, expérimentalement, suit toujours cette loi à haute température, même si le problème réel peut être bien plus complexe que le modèle étudié ici (c'est-à-dire même si les spins sont quantiques et frustrés). On peut donc extrapoler cette loi empirique pour en déduire une valeur approximative de J.

Extraire, de la figure 1, les données pour un tel système $Gd_2Ti_2O_7$. Estimer T_N(champ moyen) puis donner un ordre de grandeur de J en unité de température.

g) Pour obtenir une susceptibilité qui diverge, il faut imposer (théoriquement) un champ conjugé au paramètre d'ordre $s = \frac{1}{2}(m_a - m_b)$ associe a la transition de phase. On impose donc un champ "staggered" $h_s = h$ pour un site a et $h_s = -h$ pour un site b.

Montrer que $\chi_s = \frac{\partial s}{\partial h}$ se comporte comme $\chi_s \sim (T - T_N)^{-\gamma}$ dans la limite $h \to 0,\ T \to T_N^+$. Calculer γ.