Modèle d'Ising

June 16, 2014

On considère une chaine constituée de N aimants dans un champ magnétique $B\overrightarrow{u_z}$. Chacun de ces aimants peut pointer dans la direction $+z$ ($\sigma_i = +1$) ou dans la direction $-z$ ($\sigma_i = -1$). L'énergie d'une configuration $\{\sigma_i\}$ est donnée par

$$E_{\{\sigma_i\}} = -\mu_B B \sum_i \sigma_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

Quelle est l'aimantation moyenne ?

1 Analyse

N particules discernables => On peut calculer la fonction de partition de une particule z_1 et en déduire $z_N = z_1^N$ (pas de $N!$ puisqu'elles sont discernables)

$\frac{1}{\mu_B}\frac{\partial E}{\partial B} = -\sum_i \sigma_i \Rightarrow$ la valeur moyenne $M = \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle$ vaut $M = -\frac{1}{\mu_B \beta}\frac{\partial \log Z}{\partial B}$ (on peut le redémontrer à partir de l'expression de Z)

2 Sans interactions

ie $J = 0 \to E_{\{\sigma_i\}} = -\mu_B B \sum_i \sigma_i$

Remarque Calcul immédiat

Calcul de la fonction de partition $Z = \left[2\cosh\left(\beta\mu_B B\right)\right]^N$

- Option 1 : à la main

  Par définition,

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left(-\beta E_{\{\sigma_i\}}\right) \\
&= \sum_{\sigma_1 \in \{-1,+1\}} \dots \sum_{\sigma_N \in \{-1,+1\}} \exp\left(-\beta\left(E_{\sigma_1} + \dots + E_{\sigma_N}\right)\right) \\
&= \left(\sum_{\sigma_1 \in \{-1,+1\}} \exp\left(-\beta E_{\sigma_1}\right)\right) \dots \left(\sum_{\sigma_N \in \{-1,+1\}} \exp\left(-\beta E_{\sigma_N}\right)\right) \\
&= \left(e^{\beta\mu_B B} + e^{-\beta\mu_B B}\right) \dots \left(e^{\beta\mu_B B} + e^{-\beta\mu_B B}\right) \\
&= \left[2\cosh\left(\beta\mu_B B\right)\right]^N
\end{aligned}$$

- Option 2 : utiliser la discernabilité des particules

  Les particules sont distingables donc $Z = z_0^N$ où z_0 est la fonction de partition pour *une* particule. Une particule a deux configuration d'énergie $E_+ = \mu_B B$ et $E_- = \mu_B B$. On a donc $z_0 = e^{-\beta\mu_B B} + e^{\beta\mu_B B} = 2\cosh\left(\beta\mu_B B\right)$ et finalement

$$Z = \left[2\cosh\left(\beta\mu_B B\right)\right]^N$$

Calculer l'aimantation d'une particule $m = \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$

- Option 1 : calcul de la probabilité à la main

  Pour une configuration $\{\sigma_i\}$, l'aimantation de la particule q vaut $m_{q,\{\sigma_i\}} = \sigma_q$. Une telle configuration a une probabilité d'occurence $p(\{\sigma_i\}) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\beta E_{\{\sigma_i\}}\right)$. L'aimantation moyenne vaut donc

$$
\begin{aligned}
m_q &= \sum_{\{\sigma_i\}} m_{q,\{\sigma_i\}} p(\{\sigma_i\}) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1\in\{-1,+1\}} \dots \sum_{\sigma_N\in\{-1,+1\}} \sigma_q \exp\left(-\beta\left(E_{\sigma_1}+\dots+E_{\sigma_N}\right)\right) \\
&\quad +\dots \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_N\in\{-1,+1\}}\left(e^{-\beta E_{\sigma_N}}\right)\dots\sum_{\sigma_q\in\{-1,+1\}}\left(\sigma_q e^{-\beta E_{\sigma_1}}\right)\dots\sum_{\sigma_N\in\{-1,+1\}}\left(e^{-\beta E_{\sigma_N}}\right) \\
&= \frac{1}{Z}\left(e^{\beta\mu_B B}+e^{-\beta\mu_B B}\right)\dots\left(e^{\beta\mu_B B}-e^{-\beta\mu_B B}\right)\dots\left(e^{\beta\mu_B B}-e^{-\beta\mu_B B}\right) \\
&= \frac{2\sinh(\beta\mu_B B)}{\left[2\cosh(\beta\mu_B B)\right]^N}\left[2\cosh(\beta\mu_B B)\right]^{N-1} = \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)
\end{aligned}
$$

Calculer l'aimantation de la chaine $M = N\tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$

- Option 1 : calcul de la probabilité à la main

  Pour une configuration $\{\sigma_i\}$, l'aimantation vaut $M_{\{\sigma_i\}} = \sum_i \sigma_i$. Une telle configuration a une probabilité d'occurence $p(\{\sigma_i\}) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\beta E_{\{\sigma_i\}}\right)$. L'aimantation moyenne vaut donc

$$
\begin{aligned}
M &= \sum_{\{\sigma_i\}} M_{\{\sigma_i\}} p(\{\sigma_i\}) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1\in\{-1,+1\}} \dots \sum_{\sigma_N\in\{-1,+1\}} (\sigma_1+\dots+\sigma_N)\exp\left(-\beta\left(E_{\sigma_1}+\dots+E_{\sigma_N}\right)\right) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1\in\{-1,+1\}} \dots \sum_{\sigma_N\in\{-1,+1\}} \sigma_1\exp\left(-\beta\left(E_{\sigma_1}+\dots+E_{\sigma_N}\right)\right) \\
&\quad +\dots \\
&\quad +\frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1\in\{-1,+1\}} \dots \sum_{\sigma_N\in\{-1,+1\}} \sigma_N\exp\left(-\beta\left(E_{\sigma_1}+\dots+E_{\sigma_N}\right)\right) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1\in\{-1,+1\}}\left(\sigma_1 e^{-\beta E_{\sigma_1}}\right)\dots\sum_{\sigma_N\in\{-1,+1\}}\left(e^{-\beta E_{\sigma_N}}\right) \\
&\quad +\dots \\
&\quad +\frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1\in\{-1,+1\}}\left(e^{-\beta E_{\sigma_1}}\right)\dots\sum_{\sigma_N\in\{-1,+1\}}\sigma_N\exp\left(-\beta\left(E_{\sigma_1}+\dots+E_{\sigma_N}\right)\right) \\
&= \frac{N}{Z}\left(e^{\beta\mu_B B}-e^{-\beta\mu_B B}\right)\left(e^{\beta\mu_B B}+e^{-\beta\mu_B B}\right)\dots\left(e^{\beta\mu_B B}-e^{-\beta\mu_B B}\right) \\
&= \frac{2N\sinh(\beta\mu_B B)}{\left[2\cosh(\beta\mu_B B)\right]^N}\left[2\cosh(\beta\mu_B B)\right]^{N-1} = N\tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)
\end{aligned}
$$

- Option 2 : calcul avec le potentiel thermo canonique

  $\langle M\rangle = -\frac{\partial F}{\partial(\mu_B B)}$

- Option 3 : à partir de l'aimantation d'une particule m

Commentaires

3 Avec interactions

Approximation de champ moyen

on pose $m_i = \langle \sigma_i \rangle$ et $\sigma_i = m + \delta\sigma_i$.

HYPOTHESE on néglige les termes en $\delta\sigma_j\delta\sigma_i$

On a alors

$$\begin{aligned}
\sigma_i\sigma_j &= m^2 + m\delta\sigma_i + m\delta\sigma_j + \delta\sigma_j\delta\sigma_i \\
&= m^2 + m\left((\sigma_i - m) + (\sigma_j - m)\right) + \delta\sigma_j\delta\sigma_i \\
&= -m^2 + m\sigma_i + m\sigma_j
\end{aligned}$$

Energie d'une configuration $E = \frac{NJv}{2}m^2 - B_{\text{eff}}\sum_i \sigma_i$

$$\begin{aligned}
\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j &= \sum_{\langle i,j\rangle}\left(-m^2 + m\sigma_i + m\sigma_j\right) \\
\sum_{\langle i,j\rangle} m^2 &= \frac{1}{2}\sum_i \sum_{j\in v(i)} m^2 \\
&= \frac{1}{2}Nvm^2 \text{ où v est le nombre de voisins} \\
\sum_{\langle i,j\rangle} m\sigma_i &= \sum_{\langle i,j\rangle} m\sigma_j \\
&= \frac{1}{2}\sum_i \sum_{j\in v(i)} m\sigma_i \\
&= \frac{vm}{2}\sum_i \sigma_i
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_{\{\sigma_i\}} &= -\mu_B B\sum_i \sigma_i - J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j \\
&\simeq -\mu_B B\sum_i \sigma_i - J\left(-\frac{1}{2}Nvm^2 + mv\sum_i \sigma_i\right) \\
&= \frac{NJv}{2}m^2 - \left(\mu_B B + Jmv\right)\sum_i \sigma_i \\
&= \frac{NJv}{2}m^2 - B_{\text{eff}}\sum_i \sigma_i
\end{aligned}$$

Calcul de la fonction de partition $Z = e^{-\beta\frac{NJv}{2}m^2}\left[2\cosh\left(\mu_B B + Jmv\right)\right]^N$

- Option 1 : à la main

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left(-\beta E_{\{\sigma_i\}}\right) \\
&= \sum_{\sigma_1 \in \{-1,+1\}} \ldots \sum_{\sigma_N \in \{-1,+1\}} \exp\left(-\beta\left(\frac{NJv}{2}m^2 - (\mu_B B + Jmv)\sum_i \sigma_i\right)\right) \\
&= e^{-\beta\frac{NJv}{2}m^2}\left(e^{\beta\mu_B B_{\text{eff}}} + e^{-\beta\mu_B B_{\text{eff}}}\right)\ldots\left(e^{\beta\mu_B B_{\text{eff}}} + e^{-\beta\mu_B B_{\text{eff}}}\right) \\
&= \left(e^{\beta\mu_B B_{\text{eff}}} + e^{-\beta\mu_B B_{\text{eff}}}\right)\ldots\left(e^{\beta\mu_B B_{\text{eff}}} + e^{-\beta\mu_B B_{\text{eff}}}\right) \\
&= e^{-\beta\frac{NJv}{2}m^2}\left[2\cosh\left(\beta\mu_B B_{\text{eff}}\right)\right]^N
\end{aligned}$$

- Option 2 : astuce

  On peut réécrire l'énergie d'une configuration comme la somme de contribution individuelles : $E = -\sum_i \left(\mu_B B_{\text{eff}}\sigma_i - \frac{Jv}{2}m^2\right)$.

  La fonction de partition à une particule s'écrit alors $z_0 = \exp\left(\beta\mu_B B_{\text{eff}}\sigma_i + \beta\frac{Jv}{2}m^2\right) + \exp\left(-\mu_B B_{\text{eff}}\sigma_i + \beta\frac{Jv}{2}m^2\right) = e^{-\beta\frac{Jv}{2}m^2}\left[2\cosh\left(\beta\mu_B B_{\text{eff}}\right)\right]$

  Les particules étant discernables, la fonction de partition à N partitcules s'écrit $Z = z_0^N$

Calcul de l'aimantation moyenne d'une particule

- Option 1 : à la main

  Pour une configuration $\{\sigma_i\}$, l'aimantation de la particule q vaut $m_{q,\{\sigma_i\}} = \sigma_q$. Une telle configuration a une probabilité d'occurence $p\left(\{\sigma_i\}\right) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\beta E_{\{\sigma_i\}}\right)$. L'aimantation moyenne vaut donc

$$\begin{aligned}
m &= \sum_{\{\sigma_i\}} m_{q,\{\sigma_i\}} p\left(\{\sigma_i\}\right) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1 \in \{-1,+1\}} \ldots \sum_{\sigma_N} \sigma_q \exp\left(-\beta E_{\{\sigma_i\}}\right) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1 \in \{-1,+1\}} \ldots \sum_{\sigma_N} \sigma_q e^{-\beta\frac{NJv}{2}m^2} e^{\beta B_{\text{eff}}\sum_i \sigma_i} \\
&= \frac{e^{-\beta\frac{NJv}{2}m^2}}{Z}\sum_{\sigma_1 \in \{-1,+1\}} \ldots \sum_{\sigma_N} \sigma_q e^{\beta B_{\text{eff}}\sum_i \sigma_i} \\
&= \frac{e^{-\beta\frac{NJv}{2}m^2}}{Z}\sum_{\sigma_1 \in \{-1,+1\}} \left(e^{-\beta E_{\sigma_1}}\right)\ldots\sum_{\sigma_q}\left(\sigma_q e^{-\beta E_{\sigma_1}}\right)\ldots\sum_{\sigma_N}\left(\sigma_N e^{-\beta E_{\sigma_N}}\right) \\
&= \frac{e^{-\beta\frac{NJv}{2}m^2}}{Z}\left(e^{\beta\mu_B B_{\text{eff}}} - e^{-\beta\mu_B B_{\text{eff}}}\right)\ldots\left(e^{\beta\mu_B B_{\text{eff}}} + e^{-\beta\mu_B B_{\text{eff}}}\right)\ldots\left(e^{\beta\mu_B B_{\text{eff}}} - e^{-\beta\mu_B B_{\text{eff}}}\right) \\
&= \frac{2\sinh\left(\beta\mu_B B_{\text{eff}}\right)}{\left[2\cosh\left(\beta\mu_B B_{\text{eff}}\right)\right]^N}\left[2\cosh\left(\beta\mu_B B_{\text{eff}}\right)\right]^{N-1} = \tanh\left(\frac{\mu_B B_{\text{eff}}}{k_B T}\right) \\
&= \tanh\left(\frac{1}{k_B T}\left(\mu_B B + Jmv\right)\right)
\end{aligned}$$

Commentaires

L'équation obtenue est auto cohérente

$$\begin{aligned}
m &= \tanh\left(\frac{1}{k_B T}\left(\mu_B B + Jmv\right)\right) \\
&= \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T} + \frac{T_C}{T}m\right)
\end{aligned}$$

Température de Curie

En l'absence de champ extérieur, m doit vérifier l'équation $m = \tanh\left(\frac{Jv}{k_B T} m\right)$

Cette équation a une solution évidente $m = 0$. Peut elle avoir d'autres solutions ? Oui, si la pente à l'origine du membre de droite est supérieure à 1 [1]. On a donc

$$\begin{array}{rccc} & m & \neq & 0 \\ \Rightarrow & \partial_m \tanh\left(\frac{Jv}{k_B T} m\right)_{m=0} & > & 1 \\ \Rightarrow & \frac{\mu_B Jv}{k_B T} \frac{1}{\cosh\left(\frac{Jv}{k_B T} m\right)_{m=0}} & > & 1 \\ \Rightarrow & T & < & T_c \end{array}$$

Cas limites

- Pour $T \ll T_C$
  $m \simeq \pm 1$ et on peut réécrire[2] $\tanh\left(\pm \frac{T_C}{T} + \frac{\mu_B B}{k_B T}\right) \simeq \mp 1 \pm 2 \exp\left(-2\left(\frac{\mu_B B}{k_B T} + \frac{T_C}{T}\right)\right)$, où on a remplacé m par ± 1. On a alors l'expression

$$m \underset{T \ll T_C}{\simeq} \begin{cases} 1 - 2\exp\left(-\frac{2}{T}\left(T_C + \frac{\mu_B B}{k_B}\right)\right) \\ -1 + 2\exp\left(-\frac{2}{T}\left(T_C + \frac{\mu_B B}{k_B}\right)\right) \end{cases}$$

- Pour $T_C - T \ll T_C$ et $B = 0$
  $m \simeq 0$ et on peut réécrire $\tanh\left(\frac{T_C}{T} m\right) \simeq \frac{T_C}{T} m - \frac{1}{3}\left(\frac{T_C}{T} m\right)^3$. On a alors l'expression

$$m \underset{T \sim T_C}{\simeq} \sqrt{\frac{3(T_C - T)}{T_C}}$$

- Pour $T > T_C$ et $B \simeq 0$
  $m \simeq 0$ et on peut réécriretanh $\left(\frac{\mu_B B}{k_B T} + \frac{T_C}{T} m\right) \simeq \frac{\mu_B B}{k_B T} + \frac{T_C}{T} m$. On a alors l'expression

$$m \underset{B \sim 0}{\simeq} \frac{\mu_B B}{k_B} \frac{1}{T - T_C}$$

[1] *Idée de la démo : si $\tanh \alpha x$ est au dessous de x dès que $x > 0$, les deux courbes ne se recroiseront jamais.*
Démo formelle : on pose $f(m) = m - \tanh(\alpha m)$. On a $f(0) = 0$ et $\lim_\infty f = \infty$. Le thoérème de valeurs intermédiaire implique que si $f'(0) < 0$, $\exists m_0,\ f(m_0) = 0$

[2] Pour $x \gg 1$, $\tanh x = \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}} \simeq \left(1 - e^{-2x}\right)^2 \simeq 1 - 2e^{-2x}$
Pour $x \ll -1$, $\tanh x = -\frac{1 - e^{2x}}{1 + e^{2x}} \simeq -\left(1 - e^{2x}\right)^2 \simeq -1 + 2e^{-2x}$