



## Soutien : Modèle de Potts

mars 2015

On considère une variante du modèle d'Ising, dite de Potts, dans laquelle les  $N$  degrés de liberté (qu'on appellera spins)  $\sigma_1, \dots, \sigma_N$  peuvent prendre chacun  $q$  valeurs,  $\sigma_i \in \{1, \dots, q\}$ , où  $q$  est un entier  $\geq 2$  arbitraire. Les spins interagissent selon l'hamiltonien suivant,

$$H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = - \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} - \sum_{i=1}^N h_{\sigma_i}, \quad (1)$$

où  $J_{i,j}$  est la constante de couplage entre les spins  $i$  et  $j$ ,  $\delta$  le symbole de Kronecker et  $h_1, \dots, h_q$  peuvent être vus comme des champs magnétiques couplés aux  $q$  valeurs possibles des spins. Un tel modèle permet d'étudier dans un cadre théorique unifié un certain nombre de phénomènes en physique de la matière condensée, tout en décrivant assez fidèlement certains systèmes expérimentaux (adsorption de Krypton sur des surfaces de graphite). Dans tout l'exercice, le système est en équilibre avec un thermostat à la température  $T$ .

- 1) On suppose dans cette question seulement que  $q = 2$ . Montrer qu'alors le modèle de Potts est équivalent, à une constante près, au modèle d'Ising défini avec des variables  $\sigma_i^{(I)} = \pm 1$  et un hamiltonien

$$H(\sigma_1^{(I)}, \dots, \sigma_N^{(I)}) = - \sum_{i,j=1}^N J_{i,j}^{(I)} \sigma_i^{(I)} \sigma_j^{(I)} - h^{(I)} \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(I)}. \quad (2)$$

On précisera la valeur des constantes  $J_{i,j}^{(I)}$  et  $h^{(I)}$  du modèle d'Ising en fonction de celles du modèle de Potts.

- 2) Une réalisation possible du modèle de Potts tient dans la physisorption d'atomes de Krypton sur un plan de graphite. Dans ces plans, les atomes de carbone sont organisés en une structure hexagonale, et le Krypton s'adsorbe préférentiellement au centre des hexagones. Ces sites d'adsorption sont représentés par les cercles sur la figure 1-a). Pour des raisons stériques, un atome de Krypton adsorbé rend énergétiquement défavorable l'adsorption d'un autre atome sur les sites plus proches voisins. Considérons un taux de remplissage 1/3 (un site sur trois en moyenne occupé), pour lequel un état fondamental possible est représenté sur la figure 1-b). Quelle est la dégénérescence de l'état fondamental ?

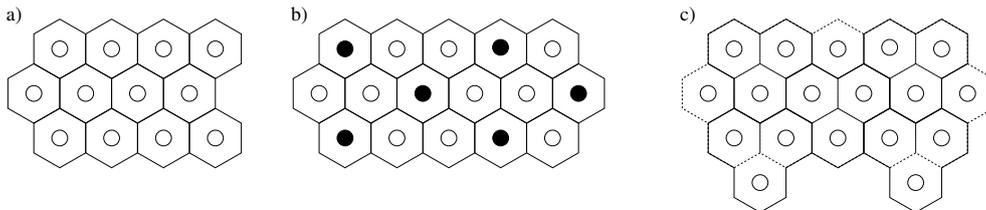


FIGURE 1 – a) Schéma d'une surface de graphite, sur laquelle les sites d'adsorption pour les atomes de Krypton sont représentés par les cercles. b) Un état fondamental possible à taux de remplissage 1/3 (les sites occupés par le Krypton correspondent aux disques noirs). c) Groupement des sites en triplets, pour définir un site du modèle de Potts résultant, sur lequel vit un spin à  $q$  états.

- 3) On admet qu'un tel système peut être décrit par un modèle de Potts. Dans ce cadre proposer alors une définition du spin de Potts pour ce système. Combien de valeurs peut-il prendre ? La figure 2 représente une configuration des Kr sur le plan de graphite, dans laquelle tous les états fondamentaux possibles coexistent, et occupent des domaines bien définis. Indiquer sur la figure les frontières de ces domaines. Quel est le type de paroi le plus énergivore ?
- 4) On reprend une valeur générique pour  $q$ , et l'on considère désormais le modèle de Potts avec  $J_{i,j} = \frac{J}{N}$  pour toutes les valeurs de  $(i, j)$ , avec  $J > 0$ . Pourquoi une telle approche peut-elle être qualifiée de "champ moyen" ? Montrer que la fonction de partition associée à l'hamiltonien de l'équation (1) peut alors se mettre sous la forme

$$Z = \sum_{x_1, \dots, x_q} \mathcal{N}_{x_1, \dots, x_q}^N e^{-N\beta e(x_1, \dots, x_q)}, \quad \text{avec } e(x_1, \dots, x_q) = -J \sum_{\sigma=1}^q x_\sigma^2 - \sum_{\sigma=1}^q h_\sigma x_\sigma, \quad (3)$$

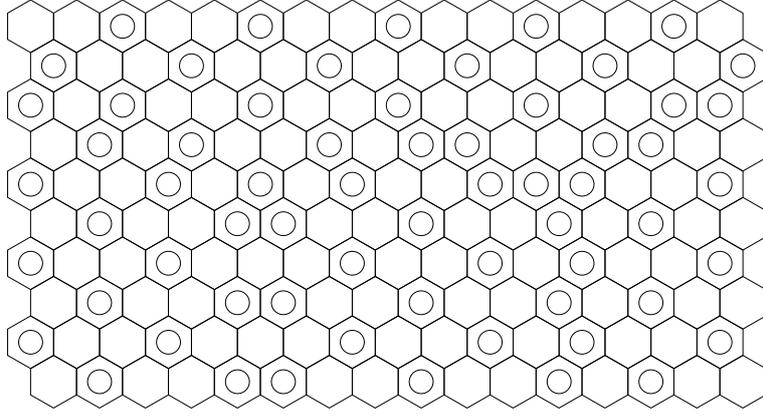


FIGURE 2 – Une configuration instantanée où des atomes de Krypton sont adsorbés sur une couche de graphite, avec remplissage 1/3 ; il s’agit de reconnaître les différents états fondamentaux qui coexistent, et les parois de domaines correspondantes...

où l’on précisera les valeurs possibles des  $x_1, \dots, x_q$  et leur domaine de sommation, ainsi que la valeur du facteur  $\mathcal{N}_{x_1, \dots, x_q}^N$ .

- 5) On rappelle la formule de Stirling,  $\ln(X!) \sim X \ln X - X$  quand  $X \rightarrow \infty$ . En déduire que l’énergie libre par spin du modèle s’écrit, dans la limite thermodynamique, comme

$$f(T) = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = \inf_{x_1, \dots, x_q} \hat{f}(x_1, \dots, x_q, T), \quad \text{avec} \quad (4)$$

$$\hat{f}(x_1, \dots, x_q, T) = e(x_1, \dots, x_q) - Ts(x_1, \dots, x_q) \quad \text{et} \quad s(x_1, \dots, x_q) = -k_B \sum_{\sigma=1}^q x_\sigma \ln x_\sigma. \quad (5)$$

Préciser le domaine sur lequel se fait la minimisation, et commenter l’expression de  $s(x_1, \dots, x_q)$ .

- 6) On note  $(x_1^*, \dots, x_q^*)$  le point où le minimum de  $\hat{f}$  est atteint. Quelle est la valeur de  $(x_1^*, \dots, x_q^*)$  pour des températures très élevées ? Comment qualifier la phase correspondante du système ?
- 7) On suppose dans toute la suite que les champs sont nuls,  $h_1 = \dots = h_q = 0$ , et on rappelle que  $J > 0$ . Quelles sont les valeurs possibles de  $(x_1^*, \dots, x_q^*)$  à température nulle ? Comment qualifier les phases correspondantes ? Quelle est la dégénérescence de l’état fondamental ?

On veut étudier maintenant la transition entre les régimes de haute et de basse température. On suppose que la brisure spontanée de symétrie qui se produit à basse température se fait dans la direction de  $\sigma = 1$  et ne distingue pas les  $q-1$  autres valeurs possibles, autrement dit on pose  $x_1 = x$ , et l’on suppose  $x_2 = \dots = x_q$ .

- 8) Exprimer cette valeur commune  $x_2 = \dots = x_q$  en fonction de  $x$ . En déduire qu’avec cette paramétrisation  $f(T) = \inf_x \hat{f}(x, T)$ , avec  $\hat{f}(x, T) = e(x) - Ts(x)$ , où l’on explicitera les fonctions  $e(x)$  et  $s(x)$ .

A partir de maintenant  $q$  est un paramètre réel arbitraire  $\geq 2$ , pas nécessairement entier (il existe en effet une définition microscopique alternative à (1) qui a un sens pour toutes les valeurs de  $q$ ).

- 9) Tracer séparément l’allure des fonctions  $e(x)$  et  $s(x)$  pour un  $q > 2$  arbitraire, en indiquant leur comportement aux bords de leur ensemble de définition et au voisinage de leurs extrema dont on donnera les positions.
- 10) Quelle est la valeur de  $x$  qui minimise  $\hat{f}(x, T)$  à haute température ? On la notera  $x_0$  dans la suite. En dessous de quelle température, notée  $T_c^{(2)}$ ,  $x_0$  n’est-il plus un minimum local de  $\hat{f}(x, T)$  ? On pourra montrer que

$$\left. \frac{\partial^2 \hat{f}}{\partial x^2} \right|_T = -2J \frac{q}{q-1} + k_B T \frac{1}{x(1-x)}. \quad (6)$$

- 11) Développer  $\hat{f}(x, T_c^{(2)})$  jusqu’au troisième ordre au voisinage de  $x = x_0$ . En déduire que si  $q > 2$ , il existe une température  $T_c^{(1)} > T_c^{(2)}$  telle que  $x_0$  n’est plus le minimum global de  $\hat{f}$  pour toutes les températures  $T < T_c^{(1)}$ .

- 12) Tracer l’allure des courbes  $\hat{f}(x, T)$  en fonction de  $x$  pour différentes températures.

- 13) Dans le cas  $q > 2$ , écrire les conditions qui fixent la valeur de  $T_c^{(1)}$ , ainsi que la position du minimum global  $x^{(1)}$  de  $\hat{f}$  à la température  $T_c^{(1)-}$ , i.e. infinitésimalement inférieure à  $T_c^{(1)}$ . Montrer que ces conditions sont vérifiées par

$$x^{(1)} = 1 - \frac{1}{q}, \quad k_B T_c^{(1)} = J \frac{q-2}{(q-1) \ln(q-1)}. \quad (7)$$

- 14) Tracer l'allure de la position  $x^*(T)$  du minimum global de  $\hat{f}$  en fonction de  $T$ , en distinguant les cas  $q = 2$  et  $q > 2$ . Proposer un paramètre d'ordre pour la transition. Dans chacun de ces cas préciser l'ordre de la transition, et lorsque c'est possible l'exposant critique  $\beta$  associé au comportement critique de  $x^*(T)$ .
- 15) Expliquer qualitativement ce qu'il se passerait si l'on considérait la solution exacte (et non pas champ-moyen) pour un modèle de Potts sur un certain réseau, à la température  $T_c^{(1)}$ , en imposant une fraction de spins  $\sigma_i = 1$  comprise entre  $x_0$  et  $x^{(1)}$ . On se placera dans l'hypothèse où la phénoménologie "champ-moyen" pour  $q > 2$  est valable.

1 On peut associer par exemple les états  $\sigma^{(I)} = +1$  à  $\sigma = 1$  et  $\sigma^{(I)} = -1$  à  $\sigma = 2$ . En utilisant les identités

$$\delta_{\sigma_i^{(I)}, \sigma_j^{(I)}} = \frac{1 + \sigma_i^{(I)} \sigma_j^{(I)}}{2}, \quad \delta_{\sigma_i^{(I)}, +1} = \frac{1 + \sigma_i^{(I)}}{2}, \quad \delta_{\sigma_i^{(I)}, -1} = \frac{1 - \sigma_i^{(I)}}{2} \quad (8)$$

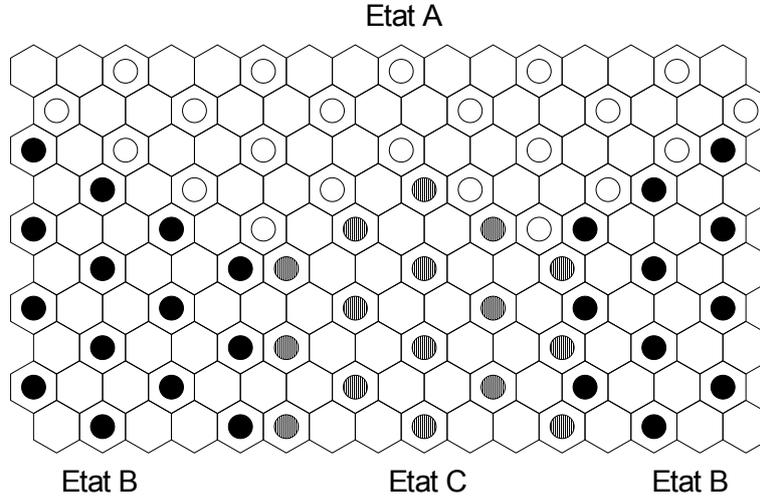
il vient

$$H = - \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} \frac{1 + \sigma_i^{(I)} \sigma_j^{(I)}}{2} - h_1 \sum_{i=1}^N \frac{1 + \sigma_i^{(I)}}{2} - h_2 \sum_{i=1}^N \frac{1 - \sigma_i^{(I)}}{2} \quad (9)$$

$$= - \sum_{i,j=1}^N \frac{J_{i,j}}{2} \sigma_i^{(I)} \sigma_j^{(I)} - \frac{h_1 - h_2}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^{(I)} - \left[ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{i,j} + N \frac{h_1 + h_2}{2} \right]. \quad (10)$$

On identifie donc  $J_{i,j}^{(I)} = J_{i,j}/2$  et  $h^{(I)} = (h_1 - h_2)/2$ , le crochet ci-dessus étant une constante indépendante des spins.

3 On a ici  $q = 3$ , la valeur du spin encodant la position de l'atome adsorbé sur les trois sites possibles. Pour la configuration de l'énoncé, les domaines sont représentés ci-dessous. Le coût énergétique est le plus important pour les parois AB, AC et CB de la moitié droite de la figure, ainsi qu'aux coins où des domaines de trois types différents se rencontrent.



4 Le modèle est ici « de champ moyen » car tous les degrés de liberté interagissent avec tous les autres, il n'y a plus de notion d'espace sous-jacent et de distance entre sites. Pour une configuration  $\mathcal{C} = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$  donnée, définissons  $x_\sigma(\mathcal{C}) = (\sum_{i=1}^N \delta_{\sigma_i, \sigma})/N$  la fraction de spins dans l'état  $\sigma$ . Par définition,  $\sum_\sigma x_\sigma = 1$ . L'énergie d'une configuration s'exprime alors précisément comme  $H(\mathcal{C}) = Ne(x_1(\mathcal{C}), \dots, x_q(\mathcal{C}))$ , avec la fonction  $e(x_1, \dots, x_q)$  définie dans l'énoncé. Par ailleurs, le nombre de configurations où  $N_1 = Nx_1$  spins sont dans l'état 1,  $N_2 = Nx_2$  dans l'état 2, ...,  $N_q = Nx_q$  dans l'état  $q$  est le facteur multinomial

$$\mathcal{N}_{x_1, \dots, x_q}^N = \binom{N}{N_1, N_2, \dots, N_q} = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_q!} = \frac{N!}{(Nx_1)! (Nx_2)! \dots (Nx_q)!}. \quad (11)$$

Dans la somme de l'énoncé les valeurs de  $x_\sigma$  sont donc de la forme  $N_\sigma/N$  avec  $N_\sigma$  un entier  $\in [0, N]$ , et obéissent à la condition  $x_1 + \dots + x_q = 1$ .

5 De la formule de Stirling, on obtient

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{N}_{x_1, \dots, x_q}^N = - \sum_{\sigma=1}^q x_\sigma \ln x_\sigma, \quad (12)$$

où l'on reconnaît l'expression de l'entropie de Shannon pour une variable aléatoire pouvant prendre  $q$  valeurs avec les probabilités  $x_1, \dots, x_q$ . On peut donc écrire à l'ordre exponentiel dominant

$$Z \sim \sum_{x_1, \dots, x_q} \exp \left[ -N \beta \hat{f}(x_1, \dots, x_q, T) \right], \quad (13)$$

et évaluer cette somme par la méthode du col quand  $N \rightarrow \infty$ . Dans la minimisation, les variables  $x_\sigma$  sont des réels entre 0 et 1, soumis à la condition  $x_1 + \dots + x_q = 1$ .

**6** Pour des températures très élevées, l'énergie libre  $\hat{f}$  est dominée par la contribution de l'entropie ; le minimum de  $\hat{f}$  correspond donc au maximum de l'entropie de Shannon, i.e. le point symétrique  $(x_1^*, \dots, x_q^*) = (1/q, \dots, 1/q)$ . On est alors dans la phase paramagnétique.

**7** A température nulle, la minimisation de l'énergie libre coïncide avec celle de l'énergie. A champ nul, il faut donc maximiser  $x_1^2 + \dots + x_q^2$  sous la contrainte  $x_1 + \dots + x_q = 1$ . Il y a  $q$  solutions équivalentes à ce problème d'optimisation,  $(x_1^*, \dots, x_q^*) = (1, 0, \dots, 0)$  ou  $(0, 1, \dots, 0), \dots$ , ou  $(0, \dots, 0, 1)$ , qui décrivent des phases ferromagnétiques du système. Cela peut se voir en écrivant l'identité

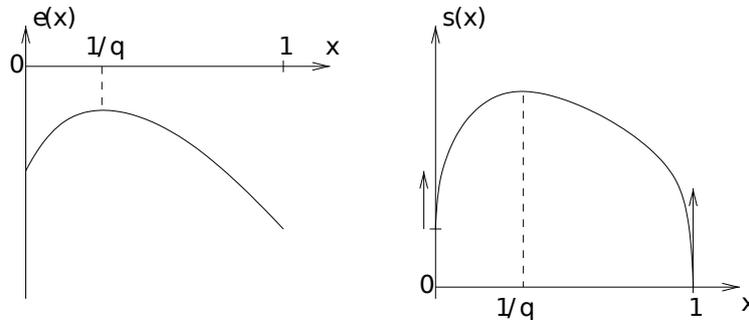
$$1 = \left( \sum_{\sigma=1}^q x_{\sigma} \right)^2 = \sum_{\sigma=1}^q x_{\sigma}^2 + \sum_{\sigma \neq \sigma'} x_{\sigma} x_{\sigma'} \quad (14)$$

Le fondamental est dégénéré  $q$  fois, ce sont les configurations microscopiques avec  $\sigma_1 = \sigma_2 = \dots = \sigma_N$ .

**8** On a  $x_2 = \dots = x_q = \frac{1-x}{q-1}$ . On trouve donc

$$e(x) = -J \frac{q}{q-1} \left( x - \frac{1}{q} \right)^2 - \frac{J}{q}, \quad \frac{s(x)}{k_B} = -x \ln(x) - (1-x) \ln(1-x) + (1-x) \ln(q-1). \quad (15)$$

**9** La fonction  $e(x)$  a un maximum en  $x = 1/q$ , et des pentes finies en 0 et 1 ; la fonction  $s(x)$  a un maximum en  $x = 1/q$ , et des tangentes verticales en 0 et 1 :



**10** Le maximum de  $s(x)$  est atteint en  $x_0 = 1/q$ . Ce point est aussi un extremum de  $e(x)$ , on aura donc  $\hat{f}'(x_0) = 0$  à toute température. Pour déterminer la nature de ce point, on calcule la dérivée seconde :

$$\hat{f}''(x) = -2J \frac{q}{q-1} + k_B T \frac{1}{x(1-x)}, \quad \text{d'où} \quad \hat{f}''(x_0) = \frac{q}{q-1} (-2J + k_B T q). \quad (16)$$

Donc  $x_0$  est un minimum (resp. maximum) local de  $\hat{f}$  pour  $T > T_c^{(2)}$  (resp.  $T < T_c^{(2)}$ ), avec  $k_B T_c^{(2)} = \frac{2J}{q}$ .

**11** A  $T = T_c^{(2)}$  on a  $\hat{f}'''(x_0) = -2J \left( \frac{q}{q-1} \right)^2 (q-2) < 0$  puisque  $q > 2$ . Donc  $\hat{f}$  passe en-dessous de sa valeur en  $x_0$  pour  $x > x_0$ . Comme  $\hat{f}$  a une pente  $+\infty$  en  $x = 1$ , il y a forcément un minimum local pour une valeur  $x^* > x_0$ , avec  $\hat{f}(x^*) < \hat{f}(x_0)$ . Comme  $\hat{f}(x, T)$  est monotone en  $T$ , il y a une température  $T_c^{(1)} > T_c^{(2)}$  en-dessous de laquelle  $x_0$  n'est plus le minimum global.

**12** Quand  $q > 2$ , l'allure de  $\hat{f}(x, T)$  pour différentes températures est donnée Fig. 3

**13** Les conditions fixant  $T_c^{(1)}$  et  $x^{(1)}$  sont  $\begin{cases} \hat{f}(x^{(1)}, T_c^{(1)}) = \hat{f}(x_0, T_c^{(1)}) \\ \left. \frac{\partial \hat{f}}{\partial x} \right|_{(x^{(1)}, T_c^{(1)})} = 0 \end{cases}$ , comme on peut le constater sur

la figure ci-dessous à  $T_d$ . En insérant les formes proposées par l'énoncé, on détermine  $\alpha = 1$ .

**14** Pour  $q = 2$  (resp.  $q > 2$ ) la fonction  $x^*(T)$  est continue (resp. discontinue) : On peut définir  $x^*(T) - 1/q$  comme paramètre d'ordre, puisqu'il est nul dans la phase paramagnétique à haute température. Pour  $q = 2$  la transition est du deuxième ordre,  $\beta = 1/2$  puisque  $x^*(T = T_c^{(2)} - \varepsilon) - (1/2) \sim \varepsilon^{1/2}$ . Pour  $q > 2$  la transition est du premier ordre, le paramètre d'ordre est discontinu à la transition, on ne peut donc pas définir d'exposant critique..

**15** On aurait une séparation de phase et l'apparition de domaines où une des  $q$  valeurs des spins est prédominante, séparés par des interfaces qui auront une tension de surface.

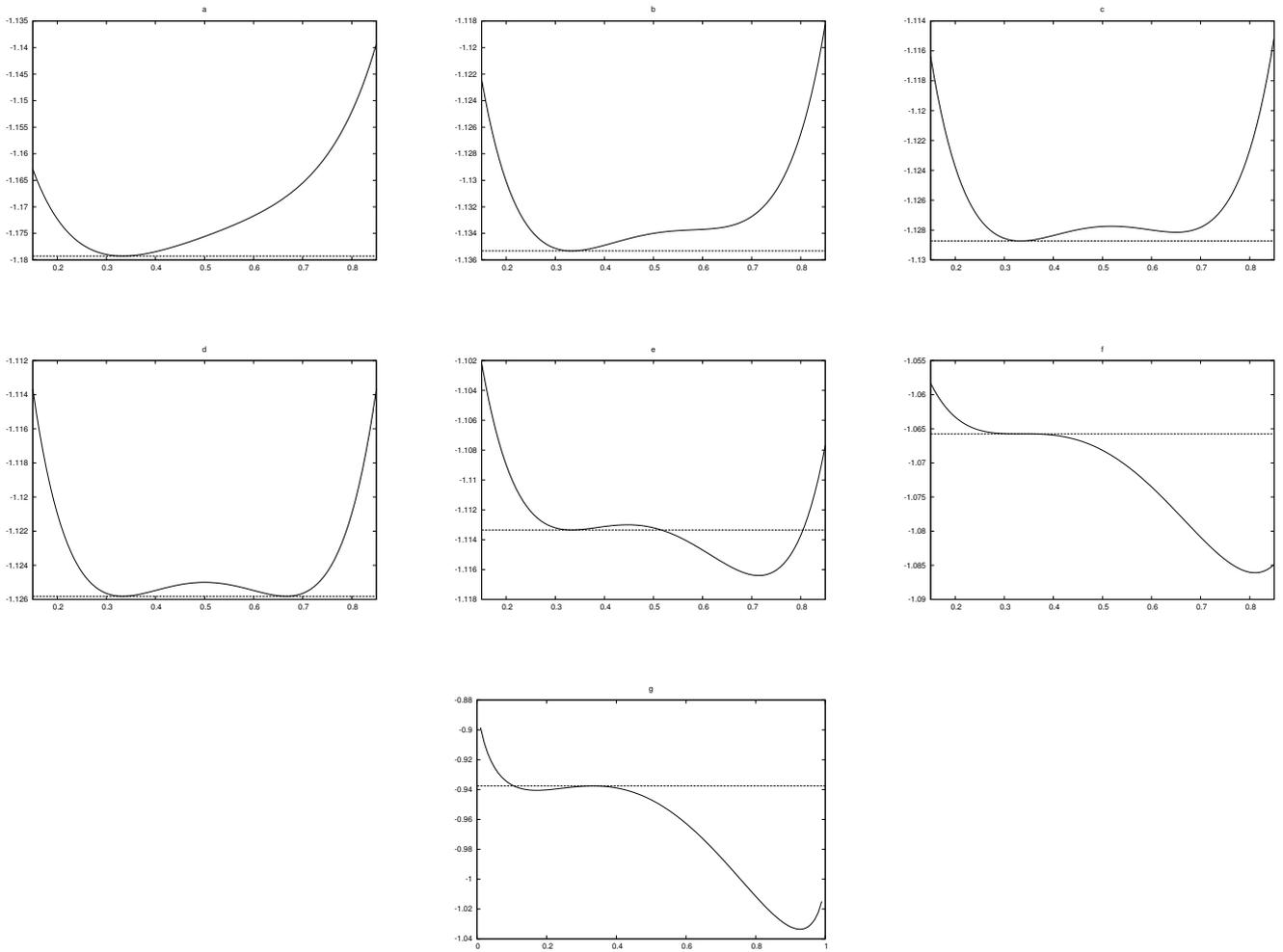
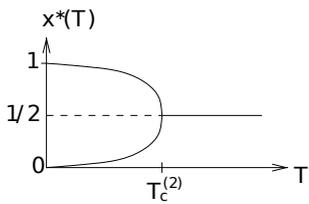
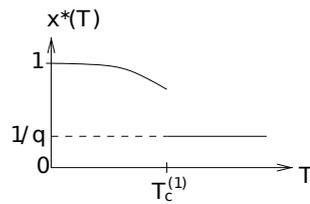


FIGURE 3 – Séquence des profils  $\hat{f}(x, T)$  en fonction de  $x$ , pour  $T_a > T_b > \dots > T_g$ , et  $T_d = T_c^{(1)}$ ,  $T_f = T_c^{(2)}$ . Le trait pointillé horizontal correspond à la valeur de  $\hat{f}(x_0, T)$ . On a ici  $q = 3$ , soit  $x_0 = 1/3$ .



$q = 2$



$q > 2$