Théorie Statistique des Champs

Examen du 28 mars 2008

Zéros de Lee et Yang

En 1952 T.D. Lee et C.N. Yang publient deux articles théoriques qui apportent un éclairage nouveau sur les transitions de phases en général et la transition ferromagnétique-paramagnétique en particulier. L'idée essentielle est d'étudier aux propriétés de la fonction de partition (ou, de manière similaire, de l'énergie libre) dans le plan *complexe* du champ magnétique h.

Pour comprendre cette approche, considérons un exemple très simple : un modèle d'Ising à $N = 2$ spins interagissant à travers un couplage $J > 0$ et soumis à un champ externe h. La fonction de partition, à température $T = \frac{1}{\beta}$, est

$$\begin{aligned} Z_2(T,h) &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \exp(\beta\, J\, S_1\, S_2 + \beta\, h\, S_1 + \beta\, h\, S_2) \\ &= \left(e^{2\beta h} + e^{-2\beta h}\right) e^{\beta J} + 2\, e^{-\beta J} \ . \end{aligned} \tag{1}$$

Physiquement h représente un champ magnétique et est donc à valeur réelle. D'un point de vue mathématique, rien n'empêche de considérer que h est un nombre complexe et de chercher les valeurs de h pour lesquelles la fonction de partition s'annule. On voit que $Z(h) \times \exp(-2\beta h)$ est un polynôme de degré 2 en $\exp(-2\beta h)$ et s'annule donc pour deux valeurs de h que nous notons h_+ et h_-. Un calcul élémentaire montre que ces deux zéros sont imaginaires purs,

$$h_\pm = \pm i\, \frac{T}{2}\, \theta \tag{2}$$

où $\theta \in [\frac{\pi}{2}; \pi]$ est l'angle tel que $\cos\theta = -\exp(-2\beta J)$.

Ce résultat est très général. Lee et Yang ont en effet montré que la fonction de partition d'un système de N spins d'Ising à couplages positifs ou nuls et en champ extérieur h s'annule pour N valeurs, éventuellement dégénérées, *imaginaires pures* de ce champ.

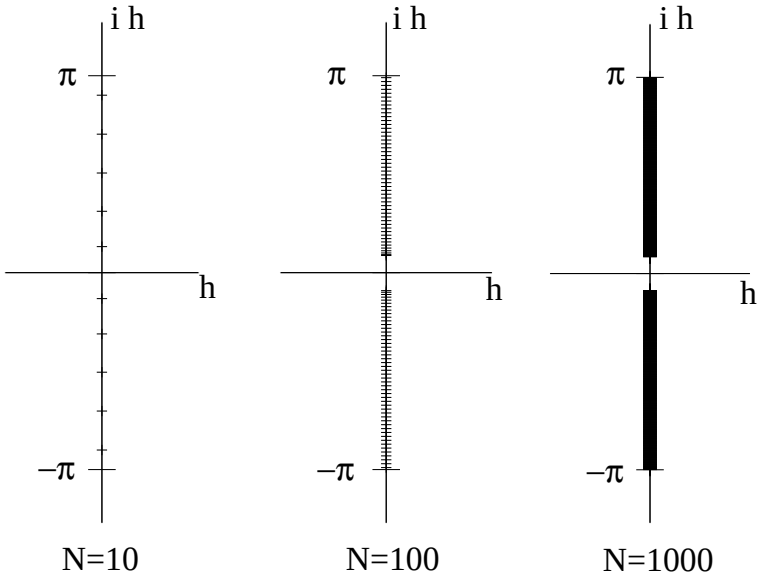

Figure 1: Zéros dans le plan complexe du champ h de la fonction de partition du modèle d'Ising à une dimension pour $N = 10$ (gauche), $N = 100$ (milieu) et $N = 1000$ (droite) spins. La température et le couplage valent respectivement $T = 2$ et $J = 2$; les conditions limites sont périodiques c'est-à-dire que les spins N et 1 sont voisins. Les champs qui annulent la fonction de partition sont à valeurs imaginaires pures et sont repérés par des petites barres perpendiculaires à l'axe imaginaire ih et d'ordonnées correspondantes.

La figure 1 montre où sont situés ces zéros imaginaires pour le modèle d'Ising à une dimension avec, respectivement, $N = 10$, $N = 100$ et $N = 1000$ spins. Dans la limite thermodynamique $N \to \infty$ les zéros sont en nombre infini. On appelle $\rho(H)$ la densité des parties imaginaires H des zéros : $N \times \rho(H)\, dH$ est, lorsque N est très grand, le nombre de zéros de la fonction de partition de parties imaginaires comprises entre H et $H + dH$.

Lee et Yang ont montré que :

- La densité $\rho(H)$ est une fonction paire de H. Son allure dépend de la température T. Pour T supérieure à la température T_c de la transition paramagnétique-ferromagnétique, $\rho(H)$ est nulle dans un intervalle $[-H_B; H_B]$, voir figure 2(gauche). Pour $T < T_c$ la densité de zéros est non nulle en $H = 0$, voir figure 2(droite).

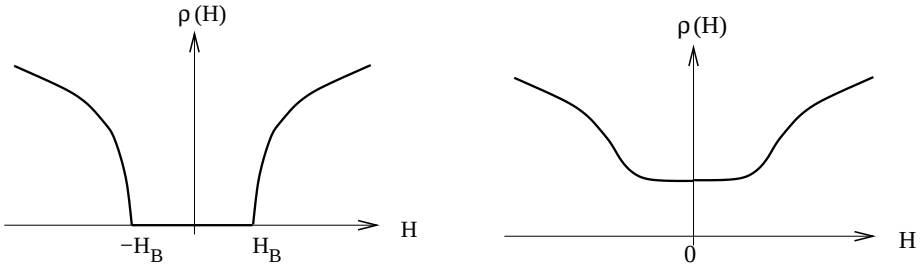

Figure 2: Allure de la densité des zéros, $\rho(H)$, en fonction de leur partie imaginaire H à température $T > T_c$ (gauche) et $T < T_c$ (droite). La manière dont $\rho(H)$ se comporte lorsque $H \to \pm H_B$ définit l'exposant σ, voir équation (4).

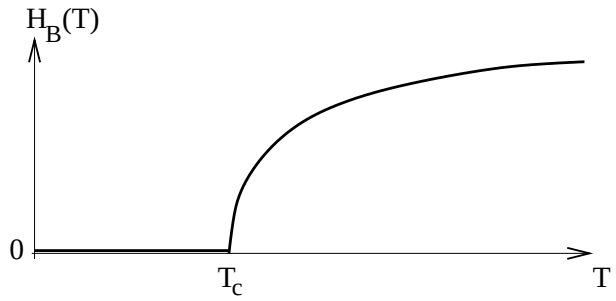

Figure 3: Allure du bord de la densité des zéros, H_B, en fonction de la température. La manière dont H_B s'annule à la température critique T_c définit l'exposant Ω, voir équation (3).

- H_B est strictement positif pour des températures supérieures à la température T_c, et nul en dessous, voir figure 3. La manière dont H_B s'annule lorsque $T \to T_c$ définit l'exposant critique Ω,

$$H_B(T) \simeq \text{constante} \times (T - T_c)^{\Omega} \qquad (T > T_c)\ . \qquad (3)$$

- Lorsque $T > T_c$ et H tend vers H_B par valeurs supérieures, la densité de zéros se comporte comme

$$\rho(H) \simeq \text{constante} \times (H - H_B)^{\sigma} \qquad (H > H_B)\ . \qquad (4)$$

  Cette relation définit l'exposant σ (qui dépend a priori de la température).

- Le modèle de spins se comporte, lorsque $T > T_c$ et $h = i\,H_B$, comme s'il était critique, ce qui étend la notion habituelle de

point critique en $T = T_c$ et $h = 0$. En particulier l'aimantation (qui est à valeur complexe) se comporte comme

$$m(T,h) - m(T, i\,H_B) \simeq \text{constante} \times (h - i\,H_B)^{1/\delta} \qquad (h \to i\,H_B) \tag{5}$$

où δ est un exposant universel (indépendant des détails du réseau). De même la longueur de corrélation diverge comme

$$\xi(T,h) \simeq \text{constante} \times (h - i\,H_B)^{-\nu} \qquad (h \to i\,H_B) \tag{6}$$

et la corrélation entre deux spins à distance r l'un de l'autre se comporte, au 'point critique', comme

$$G(r) \simeq \frac{\text{constante}}{r^{d-2+\eta}} \qquad (h = i\,H_B) \tag{7}$$

où d est la dimension de l'espace. Les exposants δ, ν et η dépendent a priori de la température.

Le but principal du présent sujet est d'étudier les valeurs de ces exposants en fonction de la dimension d de l'espace. Les sections 1, 2 et 3 sont indépendantes, sauf indication contraire. La section 4 fait appel aux résultats des sections précédentes. La section 5 ne doit être traitée que si toutes les autres questions l'ont été.

1 Relations entre exposants

1a. En utilisant le théorème fluctuation–dissipation qui relie susceptibilité et fonction de corrélation montrer que

$$1 - \frac{1}{\delta} = \nu(2 - \eta) \ . \tag{8}$$

1b. A l'aide des arguments de Ginzburg, montrer que, si la valeur moyenne de $\Delta M = (m(T,h) - m(T, i\,H_B)) \times \xi^d$ est du même ordre de grandeur que ses fluctuations, alors

$$\frac{1}{\delta} = \frac{\nu}{2}(d - 2 + \eta) \ . \tag{9}$$

Cette relation est-elle vraie en toute dimension d?

1c. Montrer que la fonction de partition à température $T = \frac{1}{\beta}$ peut s'écrire sous la forme

$$Z_N(T,h) = C(T) \times e^{N\beta h} \prod_{j=1}^{N} \left(e^{-2\beta\, h} - e^{-2\beta\, i\, H_j} \right) \tag{10}$$

où H_j est la partie imaginaire du j$^{\text{ième}}$ zéro et $C(T)$ une fonction de la température indépendante de h. En déduire que dans la limite thermodynamique, l'aimantation par spin vaut

$$m(T,h) = \int_{-\infty}^{\infty} dH \ \frac{\rho(H)}{\tanh[\beta\,(h - i\,H)]} \ . \tag{11}$$

puis que, lorsque le champ h est proche de la valeur $i\,H_B$,

$$m(T,h) - m(T, i\,H_B) \simeq \text{constante} \times (h - i\,H_B)^{\sigma} \tag{12}$$

où σ est l'exposant défini en (4) et à condition que $-1 < \sigma < 1$. *(On utilisera $\frac{1}{\tanh x} = \frac{1}{x} + O(x)$ pour $x \to 0$)*

1d. Déduire des questions précédentes les relations suivantes entre exposants:

$$\sigma = \frac{1}{\delta} = \frac{d - 2 + \eta}{d + 2 - \eta} \tag{13}$$

$$\nu = \frac{2}{d + 2 - \eta} \ . \tag{14}$$

2 Etude de la dimension $d = 1$

On considère d'abord le modèle d'Ising en dimension $d = 1$ ayant pour énergie

$$E = -J \sum_{i=1}^{N} S_i \, S_{i+1} - h \sum_{i=1}^{N} S_i \ . \tag{15}$$

Les conditions limites sont périodiques : $S_{N+1} = S_1$.

2a. Rappeler brièvement pourquoi on peut écrire la fonction de partition de ce modèle sous la forme

$$Z_N(T, h) = \lambda_+(T, h)^N + \lambda_-(T, h)^N \tag{16}$$

où

$$\lambda_\pm(T, h) = \frac{1}{2} \left[x(y + \frac{1}{y}) \pm \sqrt{x^2(y - \frac{1}{y})^2 + \frac{4}{x^2}} \right] \tag{17}$$

et $x = e^{\beta J}$, $y = e^{-\beta h}$.

2b. Montrer que les zéros de la fonction de partition sont les champs $h_j = i \, H_j$, $j = 1, 2, \ldots, N$ tels que les $y_j = e^{-\beta i H_j}$ sont les solutions de

$$(y_j - \frac{1}{y_j})^2 + \frac{4}{x^4} + (y_j + \frac{1}{y_j})^2 \tan(\phi_j/2)^2 = 0 \tag{18}$$

avec $\phi_j = \frac{\pi}{N}(2j - 1)$.

2c. En déduire que, dans la limite $N \to \infty$, la densité de zéros s'annule en H_B solution de

$$\sin(H_B/T) = \exp(-2J/T) \ . \tag{19}$$

Comparer ce résultat avec l'équation (3). Que concluez-vous?

2d. En utilisant (18) montrer que $H_j - H_B \simeq \text{constante} \times \phi_j^2$ lorsque j/N est petit, c'est-à-dire lorsque ϕ_j est petit. En déduire que

$$\sigma = -\frac{1}{2} \ , \tag{20}$$

indépendamment de la température.

2e. Montrer que

$$\nu = \frac{1}{2} \ . \tag{21}$$

3 Théorie de champ moyen

Dans cette section on désire calculer les exposants critiques définis dans l'introduction dans le cadre de la théorie de champ moyen. On considère un réseau de taille infinie en dimension d ayant pour matrice d'adjacence Δ : $\Delta_{ab} = 1$ si les sites a et b sont voisins sur le réseau, $\Delta_{ab} = 0$ sinon. On note

$$\tilde{\Delta}(k) = \sum_b e^{-i\,k\cdot(b-a)}\ \Delta_{ab} \tag{22}$$

la transformée de Fourier de la matrice d'adjacence (indépendante de a par invariance par translation). a, b, k sont ici des vecteurs à d composantes.

Chaque site a du réseau porte un spin $S_a = \pm 1$. L'énergie d'une configuration des spins est

$$E = -\frac{J}{2}\sum_{a,b}\Delta_{ab}\,S_a\,S_b - \sum_a h_a\,S_a \tag{23}$$

où $J > 0$ est le couplage et h_a un champ extérieur dépendant du site.

3a. Rappeler brièvement pourquoi en champ moyen les aimantations $m_a = \langle S_a\rangle$ à température $T = \frac{1}{\beta}$ sont solutions des équations

$$m_a = \tanh\left(\beta\,J\,\sum_b \Delta_{ab}\,m_b + \beta\,h_a\right)\ . \tag{24}$$

En déduire que lorsque tous les champs sont égaux, $h_a = h$, la susceptibilité vaut

$$\frac{\partial m(T,h)}{\partial h} = \frac{\beta(1-m(T,h)^2)}{1-\beta J(1-m(T,h)^2)\,\tilde{\Delta}(0)}\ . \tag{25}$$

Que vaut la température critique T_c en champ $h = 0$?

3b. En déduire que, pour $T > T_c$, le champ $i\,H_B$ auquel s'annule la densité de zéros et l'aimantation $m_B = m(T, iH_B)$ satisfont les deux équations couplées

$$m_B = \tanh\left(\frac{T_c}{T}\,m_B + \frac{i\,H_B}{T}\right), \tag{26}$$

$$1 - m_B^2 = \frac{T}{T_c}\ . \tag{27}$$

En déduire que $\Omega = \frac{3}{2}$. *(Indication : observer que, pour $\delta > 1$, $m(T,h)$ n'est pas dérivable par rapport au champ en $h = iH_B$)*

3c. Montrer que $\delta = 2$, puis que $\nu = \frac{1}{4}$, indépendamment de la température.

3d. Quelle est la dimension critique supérieure associée aux exposants décrivant les zéros de Lee et Yang? *(Indication : utiliser les identités (13,14) de la question 1d)*

4 Allure des exposants en fonction de d

4a. En 1978, M. Fisher chercha à calculer les valeurs des exposants σ et η à l'aide du groupe de renormalisation. Pour cela il considéra une théorie des champs dont le hamiltonien était

$$H[\{\varphi(x)\}] = \int dx\ [(\nabla_x \varphi)^2 + g\,\varphi(x)^3] \tag{28}$$

où $\varphi(x)$ était un champ scalaire et g un couplage imaginaire pur. Pourquoi ce choix était-il judicieux? Pourquoi les exposants critiques associés à la théorie sont-ils indépendants de la température?

4b. M. Fisher montra que, au premier ordre en $\epsilon = 6 - d$, les exposants valaient

$$\eta = -\frac{\epsilon}{9} \quad \text{et} \quad \sigma = \frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{12}\ . \tag{29}$$

En outre, des résultats exacts issus des théories conformes ont permis ultérieurement de montrer que, en dimension $d = 2$, $\sigma = -\frac{1}{6}$ et $\eta = \frac{1}{4}$. Tracer σ et η en fonction de d à partir de ces informations et des résultats obtenus dans les Sections 1, 2 et 3.

5 Question supplémentaire

5a. Montrer que, pour $T < T_c$, l'aimantation spontanée en champ nul, m_s, est reliée à la densité de zéros de partie imaginaire nulle, $\rho(0)$, par

$$m_s = T\,\pi\ \times\ \rho(0)\ . \tag{30}$$

(Indication : utiliser (11) et le fait que la densité $\rho(h)$ est une fonction paire de h).