Final exam : Physics of complex systems

Correction

Lois d'échelle et relations entre exposants critiques thermodynamiques

1. $Z = \sum_\ell e^{-\beta(E_\ell^0 - Nh\hat{m})}$ et $m = \sum_\ell \hat{m} \frac{e^{-\beta(E_\ell^0 - Nh\hat{m})}}{Z} = \frac{1}{N\beta Z}\frac{\partial Z}{\partial h} = -\frac{\partial f}{\partial h}$, d'où $\chi = \frac{\partial m}{\partial h}\Big|_{h=0} = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}\Big|_{h=0}$. De plus, $c_h = \frac{1}{N}\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}\Big|_{h=0}$ et $\langle E\rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta} = \frac{\partial(N\beta f)}{\partial\beta} = N(f + \beta\frac{\partial f}{\partial\beta}) = N(f - T\frac{\partial f}{\partial T})$, d'où $c_h = \frac{\partial}{\partial T}\left(f - T\frac{\partial f}{\partial T}\right) = -T\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}$.
2. Les fluctuations du paramètre d'ordre sont définies par $\sigma_m^2 = \langle\hat{m}^2\rangle - \langle\hat{m}\rangle^2$
   a) De $\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial h^2} = \frac{\partial}{\partial h}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial h}\right) = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} - \frac{1}{Z^2}\left(\frac{\partial Z}{\partial h}\right)^2 = (\beta N)^2\sum_\ell \hat{m}^2\frac{e^{-\beta(E_\ell^0 - Nh\hat{m})}}{Z} - (\beta N m)^2 = (\beta N\sigma_m)^2 = -\beta N\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}$, on a $\sigma_m^2 = \frac{\chi}{\beta N}$.
   b) C'est une relation de type fluctuation-dissipation. Les corrélations du paramètres d'ordre sont $G_{ij} = \langle\sigma_i\sigma_j\rangle - \langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle$ et pour un système homogène, ce que l'on suppose, on les notera G_r avec $r = |r_i - r_j|$ la distance relative. Comme $\chi = \beta N\sigma_m^2 = \frac{\beta}{N}\sum_{i,j}(\langle\sigma_i\sigma_j\rangle - \langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle) = \beta\sum_r G_r$, cela exprime la susceptibilité globale comme une intégrale volumique sur les corrélations. Par ailleurs, on a montré en cours le théorème fluctuation-dissipation sous forme locale $\chi_r = \beta G_r$ avec χ_r la susceptibilité locale, ce qui revient à relier susceptibilités locale et globale par $\chi = \sum_r \chi_r$.
   c) Les fluctuations et la susceptibilité globale divergent au point critique (en raison du comportement algébrique sous-jacent des corrélations, cf TD sur la relation de Fisher).
3. Il faut penser à réécrire la relation sous la forme
$$f(t,h) = \lambda^{\alpha-2} f\left(\lambda t, \lambda^\Delta h\right) \tag{1}$$
   On voit le lien avec la chaleur spécifique en utilisant $c_h = -T\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}$ pour $h = 0$ appliquée à (1) : on obtient $c_h \sim \lambda^\alpha \frac{\partial^2 f}{\partial h^2}(\lambda t, \lambda^\Delta h)$ dans laquelle on fait $\lambda = 1/|t|$ et $h = 0$ de sorte que $c_h \sim |t|^{-\alpha}$: α est l'exposant de la chaleur spécifique, avec la notation habituelle.
4. Il suffit de poser $\lambda = 1/|t|$ dans (1) pour écrire $f(t,h) = |t|^{2-\alpha} f\left(\pm 1, |t|^{-\Delta} h\right)$ ou encore
$$f(t,h) = |t|^{2-\alpha}\mathcal{F}_\pm\left(\frac{h}{|t|^\Delta}\right) \tag{2}$$
   avec $\mathcal{F}_\pm$ deux fonctions d'échelle.
5. $m \sim |t|^\beta$ pour $h = 0$ et $t < 0$. Appliquons $m = -\frac{\partial f}{\partial h}$ sur (2) : $m \sim (-t)^{2-\alpha-\Delta}\frac{\partial\mathcal{F}_-}{\partial h}\left(\frac{h}{|t|^\Delta}\right)$ puis $h = 0$, qui donne $\boxed{\beta = 2 - \alpha - \Delta}$.
6. $\chi \sim |t|^{-\gamma}$ pour $h = 0$. Appliquons $\chi = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}$ sur (2) : $\chi \sim (-t)^{2-\alpha-2\Delta}\frac{\partial^2\mathcal{F}_-}{\partial h^2}(0)$, qui donne $\boxed{\gamma = \alpha - 2 + 2\Delta}$. On note alors que $\Delta = \beta + \gamma$.
7. $m \sim |h|^{1/\delta}$ pour $t = 0$ (isotherme critique). Comme nous avons vu que $m \sim |t|^{2-\alpha-\Delta}\frac{\partial\mathcal{F}_\pm}{\partial h}\left(\frac{h}{|t|^\Delta}\right)$, nous devons avoir par définition de δ que $\frac{\partial\mathcal{F}_\pm}{\partial h}\left(\frac{h}{|t|^\Delta}\right) \sim |h|^{1/\delta}$ de sorte que $m \sim |t|^{2-\alpha-\Delta}|t|^{-\Delta/\delta}h^{1/\delta}$. Pour que la limite $t \to 0$ donne une valeur finie, il faut que l'exposant de $|t|$ soit nul, soit $2 - \alpha - \Delta - \Delta/\delta = 0$ dont on tire la relation $\boxed{\delta = \Delta/\beta}$. Une autre manière de faire est de partir de (1) et de poser $t = 0$ et $\lambda = |h|^{-1/\Delta}$ ce qui donne $f(0,h) = |h|^{(2-\alpha)/\Delta} f(0,\pm 1)$ puis $m \sim |h|^{(2-\alpha)/\Delta - 1}$ soit $1/\delta = (2-\alpha)/\Delta - 1 = \beta/\Delta$.
8. La relation de Widom s'obtient en combinant $\delta = \Delta/\beta$ et $\Delta = \beta + \gamma$. La relation de Rushbrooke s'obtient de $\beta = 2 - \alpha - \Delta$ et $\Delta = \beta + \gamma$.
9. a) La figure 1(a) est en échelle log-log. Lorsque $t = 0$, $\ln M = \frac{1}{\delta}\ln H + \text{const}$ de sorte que l'on tire m'exposant de l'ajustement linéaire de la courbe (droite jaune). Cela permet en même temps d'estimer T_c.

b) i. De (2) et $m = -\frac{\partial f}{\partial h}$, on tire que (avec les notations de la figure M et H)

$$M(t,H) = |t|^{2-\alpha-\Delta} \frac{\partial \mathcal{F}_\pm}{\partial H} \left(\frac{H}{|t|^\Delta} \right) \tag{3}$$

ce qui, compte tenu de $\beta = 2 - \alpha - \Delta$ et $\Delta = \beta + \gamma$ donne

$$\frac{M}{|t|^\beta} = \mathcal{M}_\pm \left(\frac{H}{|t|^{\beta+\gamma}} \right) \tag{4}$$

Il existe donc deux courbes pour $t > 0$ et $t < 0$ qui correspondent aux deux fonctions $\mathcal{M}_\pm$ appelées fonctions d'échelle. Dans la limite $H \to 0$, $\mathcal{M}_+$ tend vers 0 tandis que $\mathcal{M}_-$ tend vers une constante. Dans la limite $t \to 0$, $\mathcal{M}_\pm$ deviennent parallèles et la pente en log-log donne une estimation de l'exposant de la susceptibilité au-dessus et au-dessous de la transition γ et γ' sur la figure, qui sont très proches. On note que les préfacteurs de la susceptibilité sont eux différents.

ii. On teste l'hypothèse d'invariance d'échelle, c'est-à-dire le fait que l'énergie libre soit une fonction homogène.

iii. Le principe est de partir des données de la figure 1(a) puis de tracer $\frac{M}{|t|^\beta}$ en fonction de $\frac{H}{|t|^{\beta+\gamma}}$ en ajustant β et γ de sorte que les différentes courbes se superposent les unes aux autres. Si cela est possible, c'est bien qu'une loi d'échelle du type (4) est satisfaite par les données et les valeurs de β et γ sont tirées du meilleur ajustement.

c) On obtient d'un côté $\beta\delta = 0.287 \times 6.08 \simeq 1.75$ et $\gamma + \beta = 0.287 + 1.48 \simeq 1.77$. Widom est donc satisfaite avec une bonne précision.

d) On utilise $\alpha = 2 - 2\beta - \gamma = 2 - 2 \times 0.287 - 1.48 \simeq -0.05$ est petit comme attendu (et ne correspond pas à une divergence).

e) Le champ moyen prédit pour un modèle d'Ising : $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$, $\alpha = 0$ et $\delta = 3$. Le comportement critique observé n'est pas celui d'un modèle champ moyen, les fluctuations au point critique entraînent des corrections importantes.

Paroi de domaines ferroélectrique

Soliton de la théorie ϕ^4

1. a) Le potentiel ionique présente deux minimas dégénérés $\pm\phi_0$ et une forme polynomiale identique à celle de la théorie de Landau du modèle d'Ising.

   b)

2. Pour calculer la dérivée fonctionnelle, on utilise $\frac{\delta}{\delta\phi} \int dt \int dx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\phi}{\partial t} \right)^2 = -\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}$, de même $\frac{\delta}{\delta\phi} \int dt \int dx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)^2 = -\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}$, et enfin $\frac{\delta}{\delta\phi} \int dt \int dx \left(1 - \frac{\phi^2}{\phi_0^2} \right)^2 = -\frac{4\phi}{\phi_0^2} \left(1 - \frac{\phi^2}{\phi_0^2} \right)$ Le principe de moindre action $\frac{\delta S}{\delta\phi} = 0$ donne alors

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} - \omega_0^2 \phi \left(1 - \frac{\phi^2}{\phi_0^2} \right) = 0 \, . \tag{5}$$

Les deux premiers termes correspondent à une équation de propagation (d'Alembert) pour des ondes à la vitesse c. Le dernier terme introduit de la non-linéarité.

3. **Solutions de faibles amplitudes : les phonons**

   a) Au premier ordre en φ, on a $(\phi_0 + \varphi) \left(1 - \frac{1}{\phi_0^2} (\phi_0^2 + 2\phi_0\varphi + \varphi^2) \right) \simeq -2\varphi$ qui conduit à

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + 2\omega_0^2 \varphi = 0 \, . \tag{6}$$

   b) Une solution en onde plane progressive $\varphi = Ae^{i(kx-\omega t)}$, ou par transformée de Fourier, conduit à la relation de dispersion $\omega(k) = \sqrt{2\omega_0^2 + c^2k^2}$. La vitesse c est la vitesse des ondes en absence du potentielle harmonique et c'est aussi la vitesse de phase $v_\varphi = \frac{\omega}{k}$ dans la limite de k grands.

   c) C'est une relation avec un "gap" ou une "masse" par analogie avec $E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ en relativité où l'on utiliserait la dualité onde-particule $E = \hbar\omega$ et $p = \hbar k$.

4. **Solutions parois de domaines : les solitons**

a) Le changement de variables ($z = x - vt, t' = t$) donne $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ et $\frac{\partial^2}{\partial t^2} = v^2\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2v\frac{\partial^2}{\partial z \partial t'} + \frac{\partial^2}{\partial t'^2}$. Comme $\phi_s(z)$ ne dépend pas explicitement de t', il vient $\frac{\partial^2 \phi_s}{\partial t^2} = v^2 \frac{\mathrm{d}^2\phi_s}{\mathrm{d}z^2}$, puis

$$(v^2 - c^2)\frac{\mathrm{d}^2\phi_s}{\mathrm{d}z^2} = \omega_0^2 \phi_s \left(1 - \frac{\phi_s^2}{\phi_0^2}\right) \ . \tag{7}$$

b) En multipliant par $\frac{\mathrm{d}\phi_s}{\mathrm{d}z}$, on peut intégrer entre $-\infty$ et z

$$\frac{(v^2 - c^2)}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_s}{\mathrm{d}z}\right)^2 = -\frac{\omega_0^2\phi_0^2}{4}\left(1 - \frac{\phi_s^2}{\phi_0^2}\right)^2 \ . \tag{8}$$

où l'on a utilisé les conditions aux limites $\phi_s(-\infty) = -\phi_0$ et $\phi_s'(-\infty) = 0$

c) Comme le membre de droite est négatif, il faut nécessairement que $v < c$.

d) La solution monotone croissante est obtenue en prenant la racine de la précédente équation, ce qui conduit à

$$\frac{\mathrm{d}\frac{\phi_s}{\phi_0}}{1 - \phi_s^2/\phi_0^2} = \frac{\mathrm{d}z}{\xi} \quad \text{avec} \quad \xi = \frac{\sqrt{2}c}{\omega_0}\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \tag{9}$$

Elle s'intègre immédiatement entre $-\infty$ et z pour donner

$$\phi_s(z) = \phi_0 \tanh(z/\xi) \, . \tag{10}$$

L'expression de ξ fait apparaître l'effet de contraction des longueur relativiste. Ce n'est qu'une analogie qui signifie ici que plus le soliton va vite, plus il est étroit.

e) Dans la limite continue, comme le Lagrangien ($\mathcal{S} = \int \mathrm{d}t\mathcal{L}[\phi, \partial_t\phi, \partial_x\phi]$) est de la forme "$\mathcal{L} = T - V$" avec T le terme cinétique et V le terme potentiel et l'Hamiltonien de la forme "$H = T + V$", il vient naturellement

$$H[\phi] = \rho \int dx \left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^2 + \frac{c^2}{2}\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 + \frac{\omega_0^2\phi_0^2}{4}\left(1 - \frac{\phi^2}{\phi_0^2}\right)^2\right] \tag{11}$$

f) L'énergie du soliton se calcule donc par

$$\begin{aligned} E = H[\phi_s] &= \rho \int dz \left[\frac{v^2 + c^2}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_s}{\mathrm{d}z}\right)^2 + \frac{\omega_0^2\phi_0^2}{4}\left(1 - \frac{\phi_s^2}{\phi_0^2}\right)^2\right] \\ &= \frac{\rho\omega_0^2\phi_0^2}{4}\underbrace{\left(\frac{v^2 + c^2}{c^2 - v^2} + 1\right)}_{2/(1 - v^2/c^2)}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dz \left(1 - \frac{\phi_s^2(z)}{\phi_0^2}\right)^2}_{\frac{4}{3}\xi} = \frac{Mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \end{aligned}$$

avec $M = \frac{2\sqrt{2}}{3}\rho\phi_0^2\frac{\omega_0}{c}$.

Borne de Bogomolny

L'objectif de cette section est de montrer que les solutions type solitons sont celles de plus basse énergie dans le cas d'un potentiel $U(\phi)$ assez général. On considère l'équation différentielle suivante (sous forme adimensionnée)

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + u(\phi) = 0 \ , \tag{12}$$

dans laquelle $u(\phi)$ est une fonction dont la primitive (le potentiel) est notée $U(\phi)$. À l'équation (12) on rajoute les conditions aux limites $\phi(x \to \pm\infty, t) = \phi_\pm$ et $\frac{\partial \phi}{\partial x}(x \to \pm\infty, t) = 0$. On suppose enfin que le potentiel est choisi de sorte que $U(\phi) \geq 0$ pour tout ϕ, et tel que son minimum $U_{\min} = 0$ est pris à zéro.

5. Montrez que la fonction $U(\phi)$ atteint un extremum pour $\phi = \phi_+$ ainsi que pour $\phi = \phi_-$.

6. On introduit les champs $\varepsilon(x,t)$ et $A(x,t)$ définis par

$$\varepsilon(x,t) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + U(\phi)\ , \quad A(x,t) = -\frac{\partial\phi}{\partial t}\frac{\partial\phi}{\partial x}\ . \tag{13}$$

   a) Vérifiez que $\varepsilon(x,t)$ et $A(x,t)$ satisfont à la loi de conservation $\dfrac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \dfrac{\partial A}{\partial x} = 0$.

   b) En déduire que l'énergie totale

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \varepsilon(x,t)\ , \tag{14}$$

   ne dépend pas du temps.

7. Montrez que

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + U(\phi) \geq \pm\frac{\partial\phi}{\partial x}\sqrt{2\,U(\phi)}\ . \tag{15}$$

   En déduire que l'énergie du système est minorée par l'expression

$$E \geq E_{\mathrm{B}} = \left|\int_{\phi_-}^{\phi_+} \mathrm{d}\phi\ \sqrt{2\,U(\phi)}\right| = \int_{\min\{\phi_-,\phi_+\}}^{\max\{\phi_-,\phi_+\}} \mathrm{d}\phi\ \sqrt{2\,U(\phi)}\ , \tag{16}$$

   E_{B} est appelée borne de Bogomolny.

8. On recherche une configuration pour laquelle la borne de Bogomolny est atteinte, c'est-à-dire telle que $E = E_{\mathrm{B}}$.

   a) Dans ce cas, montrez que ϕ est indépendante du temps et satisfait à l'une des deux équations différentielles du premier ordre suivantes :

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x} = \pm\sqrt{2\,U(\phi)}\ . \tag{17}$$

   b) Une solution de (17) avec le signe "+" signe est appelée un soliton, une solution avec le signe "$-$" est appelée antisoliton. Montrez que l'on peut passer de l'une à l'autre par une transformation simple.

9. Réécrire les équations (17) comme une équation de conservation effective correspondant à l'énergie mécanique d'une particule classique fictive de masse 1, de position ϕ et de temps x.

   a) À quel potentiel est soumise cette particule ?

   b) Quelle est son énergie mécanique totale ?

10. On considère le cas où $U(\phi)$ atteint son minimum $U_{\min} = 0$ en une seule valeur notée ϕ_0 (un seul minimum absolu). Pour quelle solution de (12) et (17) est atteinte la borne de Bogomolny ? *Pensez au résultat de la question 5.*

11. On considère maintenant le cas où $U(\phi)$ atteint son minimum $U_{\min} = 0$ pour deux valeurs ϕ_0 et ϕ_1 telles que $\phi_1 > \phi_0$.

    a) Faites un schéma qualitatif représentant le potentiel effectif.

    b) Montrez que pour un choix judicieux des conditions aux limites ϕ_+ et ϕ_-, on peut obtenir une solution non triviale de (12) et (17) qui atteint la borne de Bogomolny.

    c) Représenter qualitativement la solution $\phi(x)$ correspondante.

12. Commentez par rapport aux résultats de la question 4.f).

Fin.