

Final exam : Physics of complex systems

Vendredi 16 Mars 2018 – 3h

Notes de cours autorisées. Lisez bien l'énoncé, il y a beaucoup de questions indépendantes. Le sujet est long, le barème sera sur plus de 20 points.

Lois d'échelle et relations entre exposants critiques thermodynamiques

On redémontre ici quelques relations utiles. On considère un système magnétique homogène, de type Ising dont les variables sont $\sigma_i = \pm 1$ et présentant une transition de phase vers un état ferromagnétique à la température T_c. L'aimantation $m = \langle \hat{m} \rangle$ avec $\hat{m} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \sigma_i$ est le paramètre d'ordre. Elle se couple au champ magnétique h de sorte que les énergies des microétats $\ell = \{\sigma_i\}$ s'écrivent $E_\ell = E_\ell^0 - Nh\hat{m}$, avec E_ℓ^0 indépendante de h. On note Z la fonction de partition et $f = -\frac{1}{N\beta}\ln Z$ l'énergie libre par spin, avec $\beta = 1/k_BT$ la température inverse associée à la température T. On introduit la chaleur spécifique à champ nul $c_h = \frac{1}{N}\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}\Big|_{h=0}$ et la susceptibilité à champ nul $\chi = \frac{\partial m}{\partial h}\big|_{h=0}$.

1. Montrez, avec les outils usuels de la physique statistique, que

$$m = -\frac{\partial f}{\partial h}, \quad \chi = -\left.\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}\right|_{h=0}, \quad c_h = -T\left.\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right|_{h=0}. \tag{1}$$

2. Les fluctuations du paramètre d'ordre sont définies par $\sigma_m^2 = \langle \hat{m}^2 \rangle - \langle \hat{m} \rangle^2$
   a) Exprimez σ_m^2 en fonction de N, β et χ.
   b) Interprétez physiquement cette relation. À quoi correspond-elle ?
   c) Qu'arrive-t-il aux fluctuations au voisinage du point critique ?

Nous supposons que f possède une partie singulière (on oubliera la partie régulière dans ce qui suit en confondant f avec sa partie singulière) qui est une fonction homogène selon la forme suivante (pour tout $\lambda \geq 0$) :

$$f\left(\lambda t, \lambda^\Delta h\right) = \lambda^{2-\alpha} f(t,h) \tag{2}$$

avec $t = (T - T_c)/T_c$ la température réduite et α, Δ deux exposants réels.

3. À quoi correspond l'exposant α ?
4. Montrez que l'on doit avoir

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

   avec $\mathcal{F}_\pm$ deux fonctions d'échelle.

5. Rappelez la définition de l'exposant critique β. À partir de (3), exprimez β en fonction de α et Δ.
6. Rappelez la définition de l'exposant critique γ, et exprimez-le en fonction de α et Δ.
7. Rappelez la définition de l'exposant critique δ, et exprimez-le en fonction de β et Δ.
8. Déduire des précédents résultats les deux relations suivantes :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad \text{(Rushbrooke)}\,, \qquad \beta\delta = \beta + \gamma \quad \text{(Widom)} \tag{4}$$

9. La figure 1 ci-dessous reproduit des mesures de courbes d'aimantation totale $M(H)$ (essentiellement correspondant aux notations $m(h)$ utilisées jusqu'ici) observées sur le composé URhAl qui est de type Ising.
   a) Expliquez comment est extrait l'exposant δ de la figure 1(a).
   b) On étudie la figure 1(b) :
      i. Pourquoi les courbes ont-elles cette allure ? Justifiez par le calcul.
      ii. Quelle hypothèse cherche-t-on à tester dans ces courbes ?
      iii. On parle de "collapse" (écrasement) des données pour ce type de courbe. Pouvez-vous expliquer l'origine de ce terme sachant que β et γ sont pris comme paramètres d'ajustement ?
   c) Les exposants critiques trouvés expérimentalement satisfont-ils à l'égalité de Widom ?
   d) Estimez la valeur de l'exposant α déduite de ces données.
   e) Ces exposants sont-ils ceux prédits par le champ moyen ?

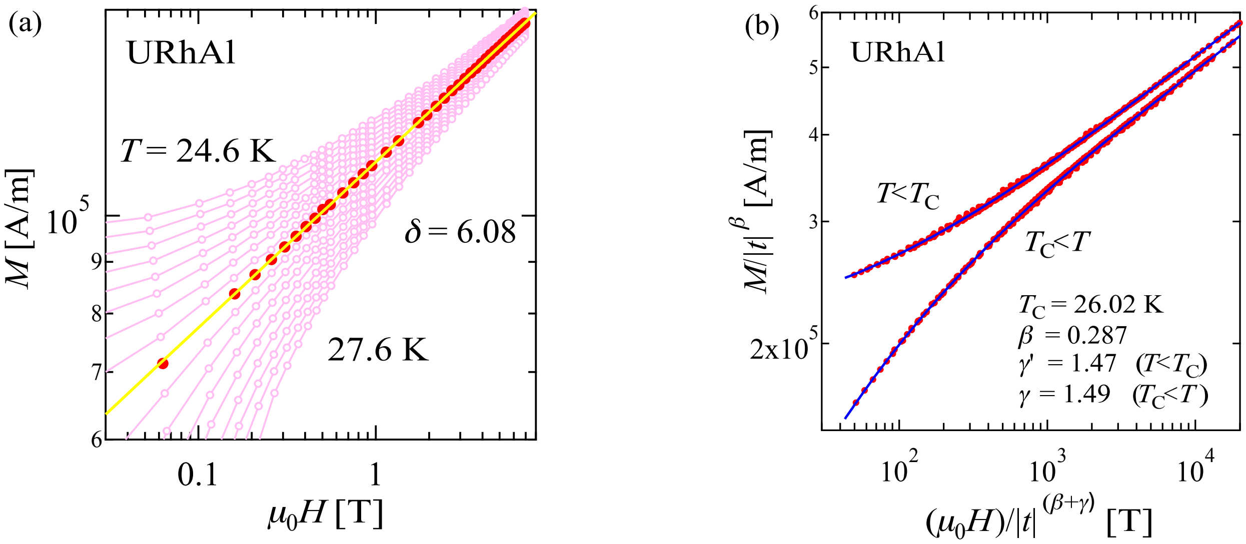

FIGURE 1 – **(a)** à gauche : courbes d'aimantation totale $M(H)$ pour différentes températures T. La température critique est estimée à $T_C = 26$ K. **(b)** à droite : autre représentation des données pour des températures réduites prises dans l'intervalle $|t| < 0.07$. Données tirées de l'article N. Tateiwa *et al.*, Phys. Rev. B **97**, 064423 (2018).

Paroi de domaines ferroélectrique

Soliton de la théorie ϕ^4

Un modèle simple de matériau ferroélectrique unidimensionnel correspond à des atomes, décrit classiquement, qui sont localisés aux sites i d'un réseau cristallin de pas ℓ, et dont la dynamique est gouvernée par l'Hamiltonien suivant :

$$H = \sum_i \frac{m}{2}\left(\frac{\partial \phi_i}{\partial t}\right)^2 + \frac{K}{2}(\phi_{i+1}-\phi_i)^2 + V_0\left(1-\frac{\phi_i^2}{\phi_0^2}\right)^2 , \tag{5}$$

dans lequel les variables ϕ_i décrivent l'éloignement des atomes à leur position moyenne définie par le réseau cristallin régulier. Le premier terme est l'énergie cinétique, avec m la masse des atomes. Le second est le couplage harmonique entre voisins, modélisé par des ressorts de constante de raideur K. Le dernier terme décrit le potentiel local créé par l'environnement ionique, d'amplitude $V_0 > 0$, et qui favorise deux positions d'équilibre $\pm\phi_0$. Lorsque l'atome est dans un des états $\pm\phi_0$, il se crée localement un moment dipolaire électrique, ou polarisation locale. On obtient un état ferroélectrique lorsque ceux-ci sont tous alignés, et on peut former des domaines correspondant aux deux états possibles.

1. a) Représentez le potentiel ionique vu par un atome en fonction de la position ϕ. Quelle analogie pouvez-vous faire avec la théorie de Landau ?
   b) Dessinez une chaîne de 5 atomes pris dans un des deux minima locaux, et tracez les vecteurs polarisation correspondant, que l'on prendra parallèles à l'axe des ϕ et de même signe que ϕ_i.

Dans la limite continue, on introduit un champ $\phi(x,t)$ qui décrit les positions de sorte que l'action du modèle prend la forme

$$\mathcal{S}[\phi] = \rho \int dt \int dx \left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^2 - \frac{c^2}{2}\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 - \frac{\omega_0^2\phi_0^2}{4}\left(1-\frac{\phi^2}{\phi_0^2}\right)^2\right] \tag{6}$$

avec $\rho = m/\ell$ la densité linéique de masse, $c = \sqrt{\frac{K\ell}{\rho}}$ et $\omega_0 = \sqrt{\frac{4V_0}{m\phi_0^2}}$.

2. En appliquant le principe de moindre action $\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta \phi} = 0$, montrez que l'équation qui gouverne la dynamique du champ ϕ est donnée par

   $$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c^2\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \omega_0^2\phi\left(1-\frac{\phi^2}{\phi_0^2}\right) = 0 . \tag{7}$$

   Interprétez les deux premiers termes. Quelle spécificité mathématique introduit le dernier terme ?
3. **Solutions de faibles amplitudes : les phonons**
   a) Linéarisez l'équation autour d'un ordre $+\phi_0$ en prenant $\phi(x,t) = \phi_0 + \varphi(x,t)$, avec $|\varphi(x,t)| \ll \phi_0$.
   b) Déterminez la relation de dispersion $\omega(k)$ des solutions ondulatoires. Représentez-là graphiquement. Interprétez physiquement c.
   c) Voyez-vous une analogie avec une particule relativiste ?
4. **Solutions parois de domaines : les solitons**
   On considère une situation où à l'extrémité gauche $\phi(-\infty,t) = -\phi_0$, tandis qu'à droite $\phi(+\infty,t) = +\phi_0$. On cherche une solution "soliton" de profil constant se déplaçant à une vitesse v pour la paroi qui interpole entre les deux domaines, soit $\phi(x,t) = \phi_s(x - vt)$ (la solution de $+\phi_0$ à $-\phi_0$ est appelée antisoliton).

a) Posez $z = x - vt$ et déterminez l'équation différentielle satisfaite par $\phi_s(z)$.

b) Montrez qu'il est possible d'obtenir une intégrale première de cette équation et utilisez les conditions aux limites pour déterminer la constante d'intégration.

c) Quelle est la condition sur v pour que la solution soit acceptable ?

d) En intégrant l'équation, montrez que la solution est de la forme

$$\phi_s(z) = \phi_0 \tanh(z/\xi)\,, \tag{8}$$

où l'on exprimera la largeur typique ξ en fonction de ω_0, v et c. Voyez-vous un effet "relativiste" sur la longueur ξ ? *On donne* $\int^y \frac{dx}{1-x^2} = \mathrm{argtanh}(y)$.

e) Donnez l'expression de l'Hamiltonien $H[\phi]$ dans la limite continue.

f) Déduisez-en que l'énergie de la paroi prend la forme "relativiste" suivante :

$$E = H[\phi_s] = \frac{Mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \tag{9}$$

et donnez l'expression de la masse effective M en fonction des données du problème. *On donne l'intégrale (pas forcément utile !) :* $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{\cosh^4 u} = \frac{4}{3}$.

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)

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + u(\phi) = 0\,, \tag{10}$$

dans laquelle $u(\phi)$ est une fonction dont la primitive (le potentiel) est notée $U(\phi)$. À l'équation (10) 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

$$\varepsilon(x,t) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 + U(\phi)\,, \quad A(x,t) = -\frac{\partial \phi}{\partial t}\frac{\partial \phi}{\partial x}\,. \tag{11}$$

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

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \varepsilon(x,t)\,, \tag{12}$$

ne dépend pas du temps.

7. Montrez que

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 + U(\phi) \geq \pm \frac{\partial \phi}{\partial x}\sqrt{2\,U(\phi)}\,. \tag{13}$$

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

$$E \geq E_{\mathrm{B}} = \left| \int_{\phi_-}^{\phi_+} \mathrm{d}\phi \, \sqrt{2\,U(\phi)} \right| = \int_{\min\{\phi_-,\phi_+\}}^{\max\{\phi_-,\phi_+\}} \mathrm{d}\phi \, \sqrt{2\,U(\phi)} \, , \tag{14}$$

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 :
   $$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x} = \pm\sqrt{2\,U(\phi)} \, . \tag{15}$$
   b) Une solution de (15) 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 (15) 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 (10) et (15) 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 (10) et (15) 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.