Master Recherche Physique Théorique,
Physique Mathématique et Physique des Particules

Mécanique Statistique – 1ère Partie

Année 2008

Le modèle XY

Un spin 1/2 est décrit par l'espace de Hilbert $\mathbb{C}^2$ muni de la base orthonormée

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Les matrices de Pauli

$$\sigma^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

forment, avec la matrice unité I, une base de l'algèbre des observables de ce système. Elles représentent les composantes du spin selon les 3 directions de l'espace. On considère une chaîne de L spins 1/2. L'espace de Hilbert de la chaîne est $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{C}^2$. Pour $k \in \{1, 2, 3\}$ et $x \in \Lambda(L) = \{1, 2, ..., L\}$,

$$\sigma_x^{(k)} = I \otimes \cdots \otimes \sigma^{(k)} \otimes \cdots \otimes I,$$

est la composante du spin numéro x selon la direction k. L'hamiltonien de la chaîne est

$$\mathbb{H}_L = \frac{h}{2} \sum_{x=1}^{L} \sigma_x^{(3)} + \frac{\lambda}{2} \sum_{x=1}^{L-1} \left(\sigma_x^{(1)} \sigma_{x+1}^{(1)} + \sigma_x^{(2)} \sigma_{x+1}^{(2)} \right),$$

où $\lambda \in \mathbb{R}$ est la constante de couplage entre spins plus proches voisins et $h \in \mathbb{R}$ l'amplitude du champ magnétique.

Le but de ce problème est de calculer l'énergie libre de ce système dans la limite thermodynamique.

1. (La transformation de Jordan-Wigner) Pour $x \in \Lambda(L)$ on pose

$$b_x = \frac{1}{2}\, \sigma_1^{(3)} \sigma_2^{(3)} \cdots \sigma_{x-1}^{(3)} (\sigma_x^{(1)} - i \sigma_x^{(2)}).$$

Démontrer les relations

$$\begin{aligned} \sigma_x^{(1)} &= \sigma_1^{(3)} \cdots \sigma_{x-1}^{(3)} (b_x + b_x^*), \\ \sigma_x^{(2)} &= i \sigma_1^{(3)} \cdots \sigma_{x-1}^{(3)} (b_x - b_x^*), \\ \sigma_x^{(3)} &= 2 b_x^* b_x - 1. \end{aligned}$$

2. Montrer que b_x et b_x^* satisfont les relations d'anti-commutation canoniques

$$\{b_x, b_y\} = 0, \qquad \{b_x^*, b_y^*\} = 0, \qquad \{b_x^*, b_y\} = \delta_{xy}.$$

(On se souviendra des relations: $\sigma^{(j)} \sigma^{(k)} = \delta_{jk} + i \epsilon_{jkl}\, \sigma^{(l)}$).

3. Montrer qu'on peut écrire l'hamiltonien $\mathbb{H}_L$ en termes des opérateurs b_x et b_x^*

$$\mathbb{H}_L = \sum_{x=1}^{L} h\, b_x^* b_x - \sum_{x=1}^{L-1} \lambda (b_x^* b_{x+1} + b_{x+1}^* b_x) - \frac{L}{2} h.$$

4. Montrer que si $A=(A_{xy})$ est une matrice $L\times L$ autoadjointe, l'opérateur

$$\mathbb{A}=\sum_{x,y=1}^{L} A_{xy}\, b_x^* b_y, \tag{1}$$

est autoadjoint sur $\mathcal{H}$ et que son spectre est donné par

$$\mathrm{sp}(\mathbb{A})=\left\{\sum_{k=1}^{L} n_k\alpha_k \,|\, n_k\in\{0,1\}\right\},$$

où $\alpha_1,\ldots,\alpha_L$ sont les valeurs propres de A.

5. Montrer que le spectre de la matrice tridiagonale, $L\times L$,

$$H_L=\begin{pmatrix} h & -\lambda & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0\\ -\lambda & h & -\lambda & \cdots & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\lambda & h & \cdots & 0 & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & h & -\lambda & 0\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda & h & -\lambda\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\lambda & h \end{pmatrix},$$

est donné par

$$\mathrm{sp}(H_L)=\{h-2\lambda\cos k \,|\, k\in\Lambda^*(L)\},$$

où

$$\Lambda^*(L)=\left\{m\frac{\pi}{L+1} \,|\, m=1,2,\ldots,L\right\}.$$

Indication: écrire $(H_L\psi)_x=h\psi_x-\lambda\psi_{x-1}-\lambda\psi_{x+1}$ avec les conditions aux bords $\psi_0=\psi_{L+1}=0$ et faire l'Ansatz $\psi_x=\sin(kx)$.

6. Déterminer le spectre de $\mathbb{H}_L$. Indication: écrire $\mathbb{H}_L+Lh/2$ sous la forme (1).

7. Montrer que la fonction de partition canonique est donnée par

$$Z_L(h,\beta)=\mathrm{tr}(e^{-\beta\mathbb{H}_L})=e^{\beta hL/2}\prod_{k\in\Lambda^*(L)}(1+e^{-\beta(h-2\lambda\cos k)}).$$

8. Calculer l'énergie libre en limite thermodynamique

$$f(h,\beta)=-\lim_{L\to\infty}\frac{1}{\beta L}\log Z_L(h,\beta).$$

Master Recherche Physique Théorique,
Physique Mathématique et Physique des Particules

Mécanique Statistique – 1ère Partie

Année 2009-2010

Le gaz de Bose imparfait (approche du champ moyen)

On considère un gaz de Bosons (de spin 0) confiné dans une boîte cubique de côté L

$$\Lambda = \{x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \,|\, 0 \leqslant x_i \leqslant L, i = 1, 2, 3\}.$$

L'énergie cinétique d'un boson est donnée par l'opérateur autoadjoint $H_{\text{cin}} = -\Delta$ sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\Lambda, dx)$ avec conditions aux bords périodiques. Les fonctions propres normalisées de cet opérateur sont

$$\Psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{V}}\, e^{ik\cdot x}, \qquad (V = L^3, k \in \Lambda^* = \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}^3),$$

et $H_{\text{cin}}\Psi_k = \varepsilon(k)\Psi_k$ avec $\varepsilon(k) = |k|^2$.

1. **Seconde quantification**

Soit $\mathcal{F} = \Gamma_+(\mathcal{H})$ l'espace de Fock bosonique sur $\mathcal{H}$, $\hat{H}_{\text{cin}} = d\Gamma(H_{\text{cin}})$ la seconde quantification de l'énergie cinétique et $\hat{N} = d\Gamma(I)$ l'opérateur nombre de bosons.

Les opérateurs d'annihilation et de création d'états propres de l'énergie cinétique seront notés

$$a_k = a_+(\Psi_k), \qquad a_k^* = a_+^*(\Psi_k),$$

et les $|\{n_k\}\rangle$ dénotent les vecteurs de la base d'occupation correspondante

$$\hat{H}_{\text{cin}}|\{n_k\}\rangle = \sum_{p\in\Lambda^*} n_p\,\varepsilon(p), \qquad \hat{N}\,|\{n_k\}\rangle = \sum_{p\in\Lambda^*} n_p.$$

On introduit aussi les opérateurs nombre de bosons dans l'état Ψ_p,

$$\hat{n}_p = a_p^* a_p, \qquad \hat{n}_p|\{n_k\}\rangle = n_p|\{n_k\}\rangle.$$

2. **Potentiel de paire**

On suppose que les bosons interagissent par un potentiel de paire répulsif v, c'est-à-dire que l'opérateur d'énergie potentielle $\hat{V}$ est donné, dans le secteur à N particules, par l'expression

$$(\hat{V}\Phi)^{(N)}(x_1, \ldots, x_N) = \sum_{1\leqslant i<j\leqslant N} v(x_i - x_j)\Phi^{(N)}(x_1, \ldots, x_N),$$

où $v(-x) = v(x)$ est une fonction Λ-périodique

$$v(x) = \frac{1}{V}\sum_{k\in\Lambda^*} \hat{v}(k) e^{ik\cdot x}, \qquad \hat{v}(k) = \int_\Lambda v(x) e^{-ik\cdot x}\, d^3x.$$

Question 1. Montrer que

$$\hat{V} = \frac{1}{2V}\sum_{p,q,h\in\Lambda^*} \hat{v}(h)\, a_{p+h}^* a_{q-h}^* a_q a_p.$$

On supposera dans la suite que le potentiel v est normalisé par la condition $\hat{v}(0)=1$.

3. **Théorie de perturbation**

L'hamiltonien complet du gaz de bosons est $\hat{H}_\lambda = \hat{H}_{\text{cin}} + \frac{1}{2}\lambda\hat{V}$. Si les interactions sont faibles, il est pertinent de traiter le système au premier ordre de la théorie de perturbation en λ. A cet ordre, les valeurs propres de $\hat{H}_\lambda$ sont données par

$$E_\lambda(\{n_k\}) = \langle\{n_k\}|\hat{H}_\lambda|\{n_k\}\rangle = \sum_{p\in\Lambda^*} n_p\,\varepsilon(p) + \frac{\lambda}{4V}\sum_{p,q,h\in\Lambda^*}\hat{v}(h)\langle\{n_k\}|a^*_{p+h}a^*_{q-h}a_q a_p|\{n_k\}\rangle.$$

Question 2. Montrer que

$$E_\lambda(\{n_k\}) = \sum_{p\in\Lambda^*} n_p\,\varepsilon(p) - \frac{\lambda}{4V}\Bigg[\sum_{p\in\Lambda^*} n_p(n_p+1) - \sum_{p,q\in\Lambda^*}(1+\hat{v}(p-q))n_p n_q\Bigg].$$

4. **Hamiltonien effectif**

Dans la limite des faibles densités et des petites températures la longueur d'onde thermique et la distance moyenne entre particules sont grandes par rapport à la longueur de diffusion du potentiel v. Dans ce cas, seules les ondes s sont sérieusement diffusées par le potentiel v et on peut remplacer ce dernier par le potentiel effectif

$$v_{\text{eff}}(x) = \hat{v}(0)\,\delta(x),$$

ce qui équivaut à $\hat{v}_{\text{eff}}(k)=1$ (en fait le potentiel $\delta(x)$ n'a pas de sens en dimension 3 et on doit lui substituer un pseudo-potentiel, mais ce détail n'a pas de conséquences au premier ordre en λ). Montrer qu'en faisant cette approximation on peut, au premier ordre en λ, remplacer l'hamiltonien $\hat{H}_\lambda$ par l'hamiltonien effectif

$$\hat{H}_{\text{cin}} + \frac{\lambda}{2V}\Bigg(\hat{N}^2 - \frac{1}{2}\hat{N} - \frac{1}{2}\sum_{p\in\Lambda^*}\hat{n}_p^2\Bigg).$$

Cependant, pour simplifier la discussion, nous ne retiendrons que le premier terme d'ordre λ et poserons

$$\hat{H}_\lambda^{\text{eff}} = \hat{H}_{\text{cin}} + \frac{\lambda}{2V}\hat{N}^2.$$

5. **Fonction de partition grand canonique**

La fonction de partition grand canonique du modèle effectif est

$$\Xi_{\lambda,V}(\beta,\mu) = \operatorname{tr} e^{-\beta(\hat{H}_\lambda^{\text{eff}}-\mu\hat{N})},$$

où β est donné en terme de la température T par $\beta=1/k_B T$ et μ est le potentiel chimique.

Question 3. Montrer que la fonction de partition s'écrit comme

$$\Xi_{\lambda,V}(\beta,\mu) = \sum_{\{n_k\}} e^{-\beta\sum_{p\in\Lambda^*}(\varepsilon(p)-\mu)n_p - \frac{\beta\lambda}{2V}\left(\sum_{p\in\Lambda^*}n_p\right)^2}.$$

En déduire qu'on peut également l'exprimer comme

$$\Xi_{\lambda,V}(\beta,\mu)=e^{\beta\lambda\nu^2V/2}\sum_{\{n_k\}} e^{-\beta\sum_{p\in\Lambda^*}(\varepsilon(p)-\mu+\lambda\nu)n_p-V\beta\lambda\frac{1}{2}\left(\nu-V^{-1}\sum_{p\in\Lambda^*}n_p\right)^2},$$

où $\nu\in\mathbb{R}$ est un paramètre arbitraire.

Désignons par

$$\langle A\rangle_{\beta,\mu,V}=\frac{1}{\Xi_{0,V}(\beta,\mu)}\operatorname{tr}\left(Ae^{-\beta(\hat{H}_{\mathrm{cin}}-\mu\hat{N})}\right),$$

la moyenne grand canonique du gaz de Bose idéal. On se souviendra des expressions suivantes

$$\langle\hat{n}_p\rangle_{\beta,\mu,V}=\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(p)-\mu)}-1},\qquad \langle\hat{n}_p^2\rangle_{\beta,\mu,V}=\frac{e^{\beta(\varepsilon(p)-\mu)}+1}{(e^{\beta(\varepsilon(p)-\mu)}-1)^2}.$$

Question 4. Montrer qu'on peut écrire

$$\Xi_{\lambda,V}(\beta,\mu)=\Xi_{0,V}(\beta,\mu-\lambda\nu)e^{V\beta\lambda\nu^2/2}\langle e^{-\lambda VQ}\rangle_{\beta,\mu-\lambda\nu,V},$$

où

$$Q=\frac{\beta}{2}\left(\nu-\frac{1}{V}\sum_{p\in\Lambda^*}\hat{n}_p\right)^2.$$

6. **Choix du paramètre ν**

Question 5. Montrer que pour tous $\beta>0$ et $\mu\in\mathbb{R}$ l'équation

$$\nu=\frac{1}{V}\sum_{p\in\Lambda^*}\langle\hat{n}_p\rangle_{\beta,\mu-\lambda\nu,V},$$

a une unique solution $\nu=\nu_V(\beta,\mu)>\mu/\lambda$ (résolution graphique !). On pose $\mu_c(\beta)=\lambda\rho_c(\beta)=\lambda\rho_0(\beta,0)$. Montrer que si $\mu\leqslant\mu_c(\beta)$

$$\lim_{V\to\infty}\nu_V(\beta,\mu)=\nu(\beta,\mu),$$

où $\nu(\beta,\nu)$ est l'unique solution de l'équation

$$\nu=\rho_0(\beta,\mu-\lambda\nu).$$

Montrer que si $\mu>\mu_c(\beta)$ alors

$$\nu_V(\beta,\mu)=\frac{\mu}{\lambda}+\frac{1}{\beta V(\mu-\mu_c(\beta))}+O(V^{-2}),$$

et par conséquence

$$\nu(\beta,\mu)=\lim_{V\to\infty}\nu_V(\beta,\mu)=\frac{\mu}{\lambda}.$$

7. **Calcul de la pression**

On rapelle que la pression p est donnée, dans la limite thermodynamique, par

$$p_\lambda(\beta,\mu) = \lim_{V\to\infty} \frac{1}{\beta V} \log \Xi_{\lambda,V}(\beta,\mu),$$

et que la densité se calcule comme

$$\rho_\lambda(\beta,\mu) = \frac{\partial p_\lambda}{\partial \mu}(\beta,\mu).$$

Pour le gaz idéal, on a

$$p_0(\beta,\mu) = -\frac{1}{\beta}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{dp}{(2\pi)^3} \log\Big(1 - e^{-\beta(\varepsilon(p)-\mu)}\Big),$$

$$\rho_0(\beta,\mu) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{dp}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(p)-\mu)} - 1}.$$

pour $\beta > 0$ et $\mu \leqslant 0$.

Question 6. En admettant que

$$\lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \log \langle e^{-\lambda V Q}\rangle_{\beta,\mu-\lambda\nu_V(\beta,\mu),V} = 0,$$

montrer que la pression du gaz de Bose est donnée par

$$p_\lambda(\beta,\mu) = p_0(\beta,\mu-\lambda\nu(\beta,\mu)) + \frac{\lambda}{2}\nu(\beta,\mu)^2 = \begin{cases} p_0(\beta,\mu-\lambda\nu(\beta,\mu)) + \frac{\lambda}{2}\,\nu(\beta,\lambda)^2 & \text{si} \quad \mu < \mu_c(\beta), \\ p_0(\beta,0) + \frac{1}{2\lambda}\,\mu^2 & \text{si} \quad \mu \geqslant \mu_c(\beta), \end{cases}$$

et la densité par

$$\rho_\lambda(\beta,\mu) = \frac{\partial p_\lambda}{\partial \mu}(\beta,\mu) = \nu(\beta,\mu).$$

En déduire l'équation d'état

$$p_\lambda(T,\rho) = \begin{cases} p_0(T,\rho) + \frac{\lambda}{2}\rho^2 & \text{si} \quad \rho < \rho_c(T), \\ p_0(T,\rho_c(T)) + \frac{\lambda}{2}\rho^2 & \text{si} \quad \rho \geqslant \rho_c(T). \end{cases}$$