

Calcul de l'aimantation d'un réseau unidimensionnel de N atomes par la méthode des matrices de Transfert

Nous considérons un réseau unidimensionnel constitué d'une chaîne linéaire (fermée) de N atomes régulièrement espacés. Chaque atome interagit avec ses deux voisins. On associe à chaque atome une variable S_i ayant deux valeurs possibles : +1 et -1.

Ce système peut être décrit par l'hamiltonien d'Ising

$$H = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - h \sum_{i=1}^N S_i$$

où le site (N+1) et le site (1) coïncident. Le « champ » h ainsi que le paramètre d'interaction J sont exprimés en Joules.

1. Sachant que chaque variable S_i ne peut prendre que deux valeurs, +1 et -1, quel est le nombre total d'états du système ?
2. Donner l'expression de la fonction de partition du système.
3. On pose

$$T_{S_i S_j} = \exp \left[\beta \left(\frac{h}{2} (S_i + S_j) + J S_i S_j \right) \right]$$

Ecrire la fonction de partition en faisant intervenir des produits des éléments $T_{S_i S_j}$

Les éléments $T_{S_i S_j}$ peuvent être considérés comme les éléments d'une matrice 2x2, la même pour tous les couples de sites

$$T = \begin{pmatrix} T_{+1,+1} & T_{+1,-1} \\ T_{-1,+1} & T_{-1,-1} \end{pmatrix}$$

T est appelée matrice de transfert.

4. Calculer

$$\sum_{S_j = \pm 1} T_{S_i S_j} T_{S_j S_k}$$

5. A l'aide du résultat précédent exprimer la fonction de partition comme la somme des éléments de la matrice T^N .
6. En tenant compte de la propriété d'invariance de la trace par changement de base, montrer que Z s'exprime simplement en fonction des valeurs propres λ_+ et λ_- de la matrice T
7. Montrer que les valeurs propres de la matrice T sont données par :

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh(A) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(A) + e^{-2\beta J}}$$

Explicitez A et B.

8. Sachant que $F = -kT \ln Z$, calculer l'aimantation m du système $m = -\frac{\partial F}{\partial h}$

Exprimer ce résultat sous la forme :

$$m = \frac{1}{\sqrt{X}} \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+^N + \lambda_-^N}$$

Donner l'expression de X

CORRIGE

1. Le nombre total d'états du système est : 2^N

$$2. \quad Z = \sum_{S_1=\pm 1, S_2=\pm 1, \dots, S_N=\pm 1} e^{\beta J (S_1 S_2 + S_2 S_3 + \dots + S_N S_1) + \beta h (S_1 + S_2 + \dots + S_N)}$$

$$3. \quad Z = \sum_{S_1=\pm 1, S_2=\pm 1, \dots, S_N=\pm 1} e^{\beta J (S_1 S_2 + S_2 S_3 + \dots + S_N S_1) + \beta h (S_1 + S_2 + \dots + S_N)}$$

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1, \dots, S_N=\pm 1} e^{\beta J S_1 S_2 + \beta h \frac{S_1 + S_2}{2}} e^{\beta J S_2 S_3 + \beta h \frac{S_2 + S_3}{2}} e^{\beta J S_3 S_4 + \beta h \frac{S_3 + S_4}{2}} \dots e^{\beta J S_N S_1 + \beta h \frac{S_N + S_1}{2}}$$

en tenant compte de $T_{S_i S_j} = \exp \left[\beta \left(\frac{h}{2} (S_i + S_j) + J S_i S_j \right) \right]$

Z s'écrit :

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1, \dots, S_N=\pm 1} T_{S_1 S_2} T_{S_2 S_3} \dots T_{S_N S_1}$$

4.

$$\sum_{S_j=\pm 1} T_{S_i S_j} T_{S_j S_k} = (T^2)_{S_i S_k}$$

5.

Z s'écrit : $Z = \sum_{S_1=\pm 1} (T^N)_{S_1 S_1}$

6.

Soit λ_+ et λ_- les valeurs propres de la matrice T .

$$Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N$$

7. Pour trouver les valeurs propres :

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(J+h))} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h))} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Et on obtient :

$$\lambda = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}$$

Donc A=βh et B=2βJ

8.

$$F = -kT \ln Z = -kT \ln(\lambda_+^N + \lambda_-^N)$$

$$M = \frac{-\partial F}{\partial T} = \frac{kTN}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \left[\lambda_+^{N-1} \frac{\partial \lambda_+}{\partial h} + \lambda_-^{N-1} \frac{\partial \lambda_-}{\partial h} \right] \quad [8.1]$$

Et nous avons aussi :

$$\frac{\partial \lambda_+}{\beta \partial h} = \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h) \lambda_+}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \quad [8.2]$$

$$\frac{\partial \lambda_-}{\beta \partial h} = \frac{-e^{\beta J} \sinh(\beta h) \lambda_-}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \quad [8.3]$$

[8.2] et [8.3] dans [8.1]

$$M = \frac{Ne^{\beta J} \sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+^N + \lambda_-^N}$$