



UNIVERSITY OF STRASBOURG

Exam — Session 2

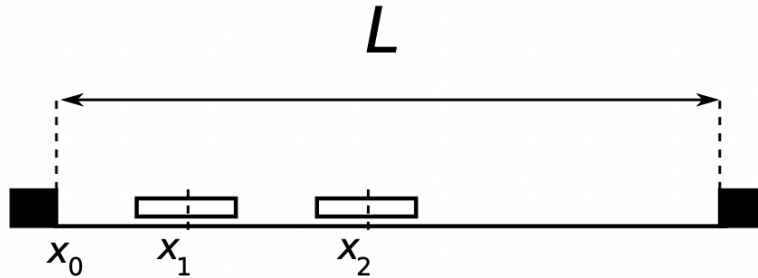
T. Charitat, J. Farago, G. Weick

Transcribed by
PIERRE GUICHARD

M1-S1 2018-2019

1 — Fluide classique de bâtonnets durs (gaz de Tonks)

On considère un modèle de fluide classique à une dimension, composé de N bâtonnets de longueur l et de masse m , confinés dans un espace de taille L à la température T . On appelle ρ la densité de bâtonnets. Les bâtonnets interagissent par un potentiel à deux corps $V(x)$. On se limite par la suite à une interaction de cœur dur. On note x_i la position du i -ème bâtonnet (voir figure ci-dessous). Dans toute la suite du problème, on se place dans l'ensemble canonique.



(a) Explicitez le potentiel $V(x)$.

Le potentiel de paire intermoléculaire :

$$\Phi_{12}(x_i, x_j) = \begin{cases} 0 & |x_i - x_j| > l \\ \infty & |x_i - x_j| < l \end{cases}$$

où x_k est la position du centre du k -ème bâtonnet. Alors,

$$V_0(x_i) = \begin{cases} 0 & l/2 < x_i < L - (N - i)l - l/2 \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

(b) Justifiez très soigneusement l'expression suivante pour la fonction de partition canonique :

$$Z(T, L, N) = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{N/2} I_N(L),$$

avec l'intégrale

$$I_N(L) = \int_{l/2}^{L-(N-1)l-l/2} dx_1 \cdots \int_{x_{i-1}+l}^{L-(N-i)l-l/2} dx_i \cdots \int_{x_{N-1}+l}^{L-l/2} dx_N. \quad (1.1)$$

On rappelle que $\int_{-\infty}^{+\infty} du \exp(-u^2) = \pi^{1/2}$.

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i)$$

$$\begin{aligned}
Z &= \frac{1}{h^N} \int_v dx_1 \cdots \int_v dx_N \cdots \int dp_1 \cdots \int dp_N e^{-\beta \mathcal{H}} \\
&= \frac{1}{h^N} \int_v dx_1 \cdots \int_v dx_N e^{-\beta \sum_i V(x_i)} \cdots \int dp_1 \cdots \int dp_N e^{-\beta \sum_i \frac{p_i^2}{2m}} \\
&= \frac{1}{h^N} \int_v dx_1 \cdots \int_v dx_N e^{-\beta \sum_i V(x_i)} \left(\int dp_1 e^{-\beta \frac{p_1^2}{2m}} \right)^N & P_1 = \sqrt{\beta/2m} p_1 \\
&= \frac{1}{h^N} \int_v dx_1 \cdots \int_v dx_N e^{-\beta \sum_i V(x_i)} \left(\frac{2m}{\beta} \right)^{N/2} \left(\int dP_1 e^{-P_1^2} \right)^N \\
&= \frac{1}{h^N} \int_v dx_1 \cdots \int_v dx_N e^{-\beta \sum_i V(x_i)} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{N/2} \\
&= \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{N/2} \int_v dx_1 \cdots \int_v dx_N e^{-\beta \sum_i V(x_i)} \\
&= \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{N/2} \int_{l/2}^{L-(N-1)l-l/2} dx_1 \cdots \int_{x_{i-1}+l}^{L-(N-i)l-l/2} dx_i \cdots \int_{x_{N-1}+l}^{L-l/2} dx_N
\end{aligned}$$

Il n'y pas le facteur $1/N!$ car ici les bâtonnets sont *discernables*.

(c) Effectuez le changement de variable

$$y_i = x_i + (N - i)l + \frac{l}{2} \quad (i = 1, \dots, N)$$

dans l'intégrale (1.1). Calculez l'intégrale $I_N(L)$. En déduire la fonction de partition du gaz de bâtonnets.

$$\begin{aligned}
y_i = x_i + (N - i)l + \frac{l}{2} &\implies dy_i = dx_i \\
I_N(L) &= \int_{l/2}^{L-(N-1)l-l/2} dx_1 \cdots \int_{x_{i-1}+l}^{L-(N-i)l-l/2} dx_i \cdots \int_{x_{N-1}+l}^{L-l/2} dx_N \\
&= \int_{Nl}^L dy_1 \cdots \int_{Nl}^L dy_i \cdots \int_{Nl}^L dy_N \\
&= \left(\int_{Nl}^L dy_1 \right)^N \\
&= (L - Nl)^N
\end{aligned}$$

Alors,

$$Z = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{N/2} (L - Nl)^N$$

- (d) Déterminez à partir des résultats précédents l'équation d'état du système. Existe-t-il une transition de phase dans ce modèle ?

On peut ainsi calculer l'énergie libre,

$$\begin{aligned}
 F &= -k_B T \ln Z \\
 &= -k_B T \ln \left\{ \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} (L - Nl)^2 \right)^{N/2} \right\} \\
 &= -\frac{N k_B T}{2} \ln \left\{ \frac{2\pi m k_B T}{h^2} (L - Nl)^2 \right\} \\
 &= -\frac{N k_B T}{2} \ln \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right) - N k_B T \ln(L - Nl)
 \end{aligned}$$

Et on connaît l'expression de la pression,

$$\begin{aligned}
 p &= - \left(\frac{\partial F}{\partial L} \right)_{N,T} \\
 &= \frac{N k_B T}{L - Nl} \\
 &= \frac{k_B T}{\rho - l}
 \end{aligned}$$

Il n'y a pas de transition de phase dans ce modèle : Un changement d'état se traduit par l'existence d'une pression constante sur un intervalle non nul de valeurs, ce qui n'est pas le cas ici.

- (e) On rappelle le développement du viriel

$$\beta P = \sum_{i=1}^{+\infty} B_i(T) \rho^i,$$

où $\beta = 1/k_B T$, où P est la pression du système, et où

$$B_2(T) = \frac{1}{2} \int dx [1 - e^{-\beta V(x)}]$$

Calculez le second coefficient du viriel $B_2(T)$ de deux manières différentes et vérifiez la cohérence de vos résultats.

$$\begin{aligned}
B_2(T) &= \frac{1}{2} \int dx [1 - e^{-\beta V(x)}] \\
&= \frac{1}{2} \left\{ \int_0^{x_{i-1}+l} dx_i + \int_{L-(N-i)l-l/2}^L dx_i \cdots \right\} \quad \text{on intègre sur le complémentaire} \\
&\equiv \frac{1}{2} \left\{ \int_0^L dx_i - \int_{x_{i-1}+l}^{L-(N-i)l-l/2} dx_i \cdots \right\} \\
&= \frac{1}{2} \{L^N - I_N(L)\} \\
&= \frac{1}{2} \{L^N - (L - Nl)^N\} \\
&= \frac{L^N}{2} \left\{ 1 - \left(\frac{L - Nl}{L} \right)^N \right\} \\
&= \frac{L^N}{2} \{1 - (1 - \rho l)^N\} \\
&= \frac{L^N}{2} \{1 - (1 - \eta)^N\}
\end{aligned}$$

où η correspond à la fraction du volume occupé par les bâtonnets.

- (f) Définissez et calculez le coefficient de compressibilité isotherme κ_T du fluide. Commentez votre résultat.

$$\kappa_T = -\frac{1}{L} \left(\frac{\partial L}{\partial p} \right)_T$$

$$p = \frac{Nk_B T}{L - Nl} \iff L = \frac{Nk_B T}{p} + Nl$$

$$\kappa_T = \frac{1}{L} \frac{Nk_B T}{p^2} \equiv \rho \frac{k_B T}{p^2}$$

La compressibilité varie linéairement en fonction de la densité. Plus la pression augmente, plus la compressibilité diminue, en $1/p^2$.

2 — Chaîne unidimensionnelle de spins d'Ising

On considère une chaîne de N spins $s_i = \pm 1$ ($i = 0, 1, \dots, N - 1$) à la température T avec une interaction ferromagnétique $J > 0$ entre les premiers voisins dans un champ extérieur h . Le hamiltonien correspondant s'écrit

$$H = -J \sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i. \quad (2.1)$$

Les conditions aux limites sont périodiques, c'est-à-dire que l'on identifie $s_N = s_0$.

2.1 — Approximation de champ moyen

On cherche dans un premier temps une solution au modèle d'Ising à 1D dans l'approximation de champ moyen. Dans la suite, on appelle $m = \langle s_i \rangle$ l'aimantation.

- (a) Rappelez ce qu'est l'approximation de champ moyen dans le cadre du modèle d'Ising. Que vaut la fonction de corrélation spin-spin C_{ij} dans cette approximation ?

L'approximation de champ moyen consiste à négliger les corrélations entre les spins, c'est-à-dire,

$$C_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle = \langle \delta s_i \delta s_j \rangle \approx 0$$

- (b) Montrez que dans l'approximation de champ moyen, le hamiltonien (2.1) prend la forme

$$H = -(2Jm + h) \sum_{i=0}^{N-1} s_i + JNm^2.$$

$$\begin{aligned}
H &= -J \sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i \\
&= -J \sum_{i=0}^{N-1} (m + \delta s_i)(m + \delta s_{i+1}) - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i \\
&= -J \sum_{i=0}^{N-1} \{m^2 + m(\delta s_i + \delta s_{i+1}) + \delta s_i \delta s_{i+1}\} - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i \\
&\approx -J \sum_{i=0}^{N-1} \{m^2 + 2m\delta s_i\} - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i \\
&= -J \sum_{i=0}^{N-1} \{m^2 + 2m(s_i - m)\} - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i \\
&= Jm^2 \sum_{i=0}^{N-1} (1) - 2Jm \sum_{i=0}^{N-1} s_i - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i \\
&= JNm^2 - (2Jm + h) \sum_{i=0}^{N-1} s_i
\end{aligned}$$

(c) En déduire la fonction de partition canonique Z , ainsi que l'énergie libre F .

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{s_0=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} e^{-\beta H} \\
&= \sum_{s_0=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} e^{-\beta \{JNm^2 - (2Jm+h) \sum_{i=0}^{N-1} s_i\}} \\
&= e^{-\beta JNm^2} \sum_{\{s_k\}} e^{\beta(2Jm+h) \sum_{i=0}^{N-1} s_i} \\
&= e^{-\beta JNm^2} \sum_{\{s_k\}} \prod_{i=0}^{N-1} e^{\beta(2Jm+h)s_i} \\
&= e^{-\beta JNm^2} \prod_{i=0}^{N-1} \sum_{s_i=\pm 1} e^{\beta(2Jm+h)s_i} \\
&= e^{-\beta JNm^2} \{e^{-\beta(2Jm+h)} + e^{+\beta(2Jm+h)}\}^N \\
&= \left\{ e^{-\beta Jm^2} 2 \cosh(\beta(2Jm + h)) \right\}^N
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F &= -k_B T \ln Z \\
&= -N k_B T \ln \left\{ e^{-\beta J m^2} 2 \cosh(\beta(2Jm + h)) \right\} \\
&= N J m^2 - N k_B T \ln(2 \cosh(\beta(2Jm + h)))
\end{aligned}$$

(d) Montrez que l'aimantation m obéit à une équation d'auto-cohérence que l'on explicitera.

$$\begin{aligned}
m &= -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \\
&= k_B T \frac{\partial}{\partial h} \{ \ln(2 \cosh(\beta(2Jm + h))) \} \\
&= k_B T \frac{\beta 2 \sinh(\beta(2Jm + h))}{2 \cosh(\beta(2Jm + h))} \\
&= \tanh(\beta(2Jm + h))
\end{aligned}$$

(e) On se place à champ magnétique extérieur nul ($h = 0$). Montrez qu'il existe une transition de phase (paramagnétique-ferromagnétique) pour une température critique T_c que l'on exprimera en fonction des différents paramètres du problème.

Pour $h = 0$, l'équation d'autocohérence devient

$$m = \tanh(2\beta J m)$$

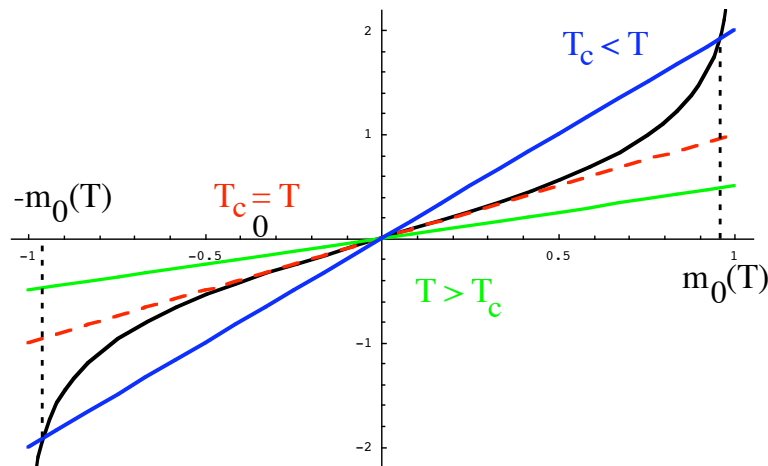
Ce qu'on peut réécrire,

$$\arctan(m) = 2\beta J m$$

Cette équation dépend de la température T du système. Il y a alors trois régimes. On peut définir la température critique T_c par

$$k_B T_c = 2J$$

Ainsi,



Alors, on voit que dans le cadre 1D, on obtient bien une transition de phase. Alors, que, Ising dans sa thèse a démontré que en 1D il n'y a pas de transition de phase. Cela peut se comprendre par le fait que, la méthode de champ moyen est valide à partir du moment où on a un nombre conséquent de voisin sur lequel faire la moyenne, dans le cas unidimensionnel, il n'y a pas assez de voisin, alors que en dimension 2 et 3 on commence à avoir une bonne approximation de la réalité par cette approximation.

2.2 — Résolution exacte du modèle par la matrice de transfert

On cherche maintenant à résoudre le problème de façon exacte, ceci par la méthode de la matrice de transfert.

- (a) Montrez que la fonction de partition canonique exacte du système associée au hamiltonien (2.1) a pour expression

$$Z = \sum_{s_0=\pm 1} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} \mathcal{T}_{s_0 s_1} \mathcal{T}_{s_1 s_2} \cdots \mathcal{T}_{s_{N-1} s_0}$$

où la matrice de transfert \mathcal{T} (de dimension 2×2) est définie par ses éléments de matrice

$$\mathcal{T}_{s_i s_{i+1}} = \exp\left(\beta J s_i s_{i+1} + \frac{\beta h}{2} [s_i + s_{i+1}]\right)$$

avec $\beta = 1/k_B T$, et où les lignes sont labélisées par $s_i = +1$ et -1 , et les colonnes par $s_{i+1} = +1$ et -1 . En particulier, montrez que

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{s_0=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} e^{\beta J \sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} + \beta h \sum_{i=0}^{N-1} s_i} \\
&= \sum_{s_0=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} e^{\beta J \{s_0 s_1 + s_1 s_2 + \cdots + s_{N-1} s_0\}} e^{\beta h \{s_0 + s_1 + \cdots + s_{N-1}\}} \\
&= \sum_{s_0=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} e^{\beta J s_0 s_1 + \frac{\beta h}{2}(s_0 + s_1)} \cdots e^{\beta J s_{N-1} s_0 + \frac{\beta h}{2}(s_{N-1} + s_0)} \\
&= \sum_{s_0=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} \mathcal{T}_{s_0 s_1} \cdots \mathcal{T}_{s_{N-1} s_0}
\end{aligned}$$

(b) En vous servant du produit matriciel, en déduire que

$$Z = \sum_{s_0=\pm 1} (\mathcal{T}^N)_{s_0 s_0} = \text{Tr} \{ \mathcal{T}^N \} = \lambda_0^N + \lambda_1^N$$

où λ_0 et λ_1 sont les valeurs propres de \mathcal{T} ($|\lambda_0| > |\lambda_1|$ par convention) Justifiez du fait qu'à la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$), $Z = \lambda_0^N$.

$$\sum_{s_{i+1}=\pm 1} \mathcal{T}_{s_i s_{i+1}} \mathcal{T}_{s_{i+1} s_{i+2}} = (\mathcal{T}^2)_{s_i s_{i+2}}$$

Ce qui est identique à une multiplication matriciel,

$$\sum_j A_{ij} B_{jk} = \sum_j \langle i | A | j \rangle \langle j | B | k \rangle = \langle i | AB | k \rangle = (AB)_{ik}$$

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{s_0=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} \mathcal{T}_{s_0 s_1} \cdots \mathcal{T}_{s_{N-1} s_0} \\
&= \sum_{s_0=\pm 1} (\mathcal{T}^N)_{s_0 s_0} \\
&= \text{Tr} \{ \mathcal{T}^N \} \\
&= \lambda_0^N + \lambda_1^N \\
&= \lambda_0^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^N \right]
\end{aligned}$$

Puisque $|\lambda_0| > |\lambda_1|$, à la limite thermodynamique,

$$Z \approx \lambda_0^N$$

(c) Déterminez, à la limite thermodynamique, l'énergie libre du système.

$$\begin{aligned} F &= -k_B T \ln Z \\ &\approx -N k_B T \ln(\lambda_0) \end{aligned}$$

Il faut du coup diagonaliser \mathcal{T} ,

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}$$

Pour trouver les valeurs propres, il faut faire $\det\{\mathcal{T} - \lambda \times \text{Id}\} = 0$,

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

C'est-à-dire,

$$\begin{aligned} 0 &= (e^{\beta(J+h)} - \lambda)(e^{\beta(J-h)} - \lambda) - e^{-2\beta J} \\ &= e^{2\beta J} - \lambda(e^{\beta(J-h)} + e^{\beta(J+h)}) + \lambda^2 - e^{-2\beta J} \\ &= 2 \sinh(2\beta J) - \lambda e^{\beta J} 2 \cosh(\beta h) + \lambda^2 \end{aligned}$$

On reconnaît un polynôme du second ordre en λ ,

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \frac{e^{\beta J} 2 \cosh(\beta h) \pm \sqrt{(e^{\beta J} 2 \cosh(\beta h))^2 - 8 \sinh(2\beta J)}}{2} \\ &= e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta h) - 2 \sinh(2\beta J)} \\ &= e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J} (1 + \sinh^2(\beta h)) - e^{2\beta J} + e^{-2\beta J}} \\ &= e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \end{aligned}$$

Alors,

$$\begin{cases} \lambda_0 = e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \\ \lambda_1 = e^{\beta J} \cosh(\beta h) - \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \end{cases}$$

Et ainsi,

$$F = -N k_B T \ln \left\{ e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \right\}$$

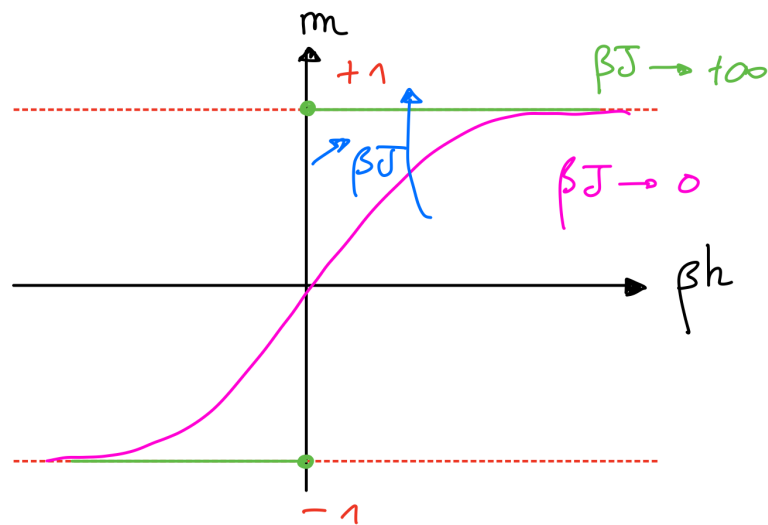
(d) En déduire l'aimantation m du système.

$$\begin{aligned}
m &= -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \\
&= k_B T \frac{\partial}{\partial h} \left\{ \ln \left[e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \right] \right\} \\
&= k_B T \frac{e^{\beta J} \beta \sinh(\beta h) + \frac{\beta}{2} 2 \sinh(\beta h) \cosh(\beta h) e^{2\beta J}}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \\
&= \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h) + \frac{\sinh(\beta h) \cosh(\beta h) e^{2\beta J}}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}}}{e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \\
&= e^{\beta J} \sinh(\beta h) \left\{ \frac{1 + \frac{\cosh(\beta h) e^{\beta J}}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}}}{e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \right\} \\
&= e^{\beta J} \sinh(\beta h) \left\{ \frac{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} + \cosh(\beta h) e^{\beta J}}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} (e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}})} \right\} \\
&= \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}}
\end{aligned}$$

(e) Représentez m en fonction de βh pour différentes valeurs de βJ . En particulier, analysez les cas $\beta J \rightarrow 0$ et $\beta J \rightarrow \infty$. Interprétez qualitativement ces résultats.

$$\begin{aligned}
\lim_{\beta J \rightarrow 0} m &= \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + 1}} \\
&= \tanh(\beta h)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \lim_{\beta J \rightarrow +\infty} m &= \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h)}} \\
 &= \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h)}{|e^{\beta J} \sinh(\beta h)|} \\
 &= \frac{\sinh(\beta h)}{|\sinh(\beta h)|}
 \end{aligned}$$



- (f) Le système présente-t'il une transition de phase ? Comparez votre réponse à la prédiction de l'approximation de champ moyen.

Il n'y a pas de transition de phase à l'aide de cette solution exact, là où, par l'approche de champ moyen on trouvait une transition de phase :

l'approximation de champ moyen est toujours une mauvaise approximation en 1D.

2.3 — Fonction de corrélation

La fonction de corrélation entre deux spins séparés par $R - 1$ sites sur le réseau est définie par

$$\Gamma_R = \langle s_0 s_R \rangle - \langle s_0 \rangle \langle s_R \rangle, \quad (2.2)$$

et la longueur de corrélation ξ par

$$\xi^{-1} = \lim_{R \rightarrow \infty} \left\{ -\frac{\ln |\Gamma_R|}{R} \right\} \quad (2.3)$$

- (a) On cherche à exprimer Γ_R à l'aide de la matrice de transfert \mathcal{T} et de la matrice \mathcal{S} représentant l'opérateur de spin. On écrit \mathcal{T} et \mathcal{S} dans leur représentation diagonale :

$$\mathcal{T} = \sum_{i=0,1} \lambda_i |u_i\rangle \langle u_i|,$$

$$\mathcal{S}_i = \sum_{s_i=\pm 1} s_i |s_i\rangle \langle s_i|.$$

Les vecteurs $|s_i = \pm 1\rangle = (1, 0)$ et $|s_i = -1\rangle = (0, 1)$ représentent deux états possibles d'un spin. À l'aide de \mathcal{T} et \mathcal{S} , démontrez que, dans la limite thermodynamique, on a

$$\Gamma_R = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^R \langle u_0 | \mathcal{S}_0 | u_1 \rangle \langle u_1 | \mathcal{S}_R | u_0 \rangle$$

$$\begin{aligned} \langle s_0 \rangle &= \sum_{s_0} \cdots \sum_{s_{N-1}} s_0 \mathcal{T}_{s_0 s_1} \cdots \mathcal{T}_{s_{N-1} s_0} \frac{1}{Z} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{s_0} s_0 \mathcal{T}_{s_0 s_0}^N \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{s_0} s_0 \langle s_0 | \sum_{n=0}^1 \lambda_n^N |u_n\rangle \langle u_n | s_0 \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{s_0} \langle u_n | s_0 \rangle s_0 \langle s_0 | \sum_{n=0}^1 \lambda_n^N |u_n\rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^1 \lambda_n^N \langle u_n | \sum_{s_0} s_0 |s_0\rangle \langle s_0 | u_n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^1 \lambda_n^N \langle u_n | \mathcal{S} | u_n \rangle \\ &= \frac{1}{\sum_{n=0}^1 \lambda_n^N} \sum_{n=0}^1 \lambda_n^N \langle u_n | \mathcal{S} | u_n \rangle \\ &= \frac{\lambda_0^N \left[\langle u_0 | \mathcal{S} | u_0 \rangle + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^N \langle u_1 | \mathcal{S} | u_1 \rangle \right]}{\lambda_0^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^N \right]} \\ &\approx \langle u_0 | \mathcal{S} | u_0 \rangle \end{aligned}$$

On voit ainsi que ce résultat est indépendant de i dans $\langle s_i \rangle$, c'est-à-dire que,

$$\langle s_0 \rangle = \langle s_R \rangle = \langle u_0 | \mathcal{S} | u_0 \rangle$$

$$\begin{aligned}
\langle s_0 s_R \rangle &= \sum_{s_0} \cdots \sum_{s_R} \cdots \sum_{s_{N-1}} \frac{1}{Z} s_0 \mathcal{T}_{s_0 s_1} \cdots \mathcal{T}_{s_{R-1} s_R} s_R \mathcal{T}_{s_R s_{R+1}} \cdots \mathcal{T}_{s_{N-1} s_0} \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{s_0} \sum_{s_R} s_0 \mathcal{T}_{s_0 s_R}^R s_R \mathcal{T}_{s_R s_0}^{N-R} \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{s_0, s_R} s_0 \langle s_0 | \sum_{n=0}^1 \lambda_n^R |u_n\rangle \langle u_n | s_R \rangle s_R \langle s_R | \sum_{m=0}^1 \lambda_m^{N-R} |u_m\rangle \langle u_m | s_0 \rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{s_0} s_0 \langle s_0 | \sum_{n=0}^1 \lambda_n^R |u_n\rangle \langle u_n | \mathcal{S} \sum_{m=0}^1 \lambda_m^{N-R} |u_m\rangle \langle u_m | s_0 \rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m=0}^1 \sum_{s_0} s_0 \langle s_0 | \lambda_n^R |u_n\rangle \langle u_n | \mathcal{S} \lambda_m^{N-R} |u_m\rangle \langle u_m | s_0 \rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m=0}^1 \langle u_m | s_0 \rangle \sum_{s_0} s_0 \langle s_0 | \lambda_n^R |u_n\rangle \langle u_n | \mathcal{S} \lambda_m^{N-R} |u_m\rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m=0}^1 \langle u_m | \sum_{s_0} |s_0\rangle s_0 \langle s_0 | \lambda_n^R |u_n\rangle \langle u_n | \mathcal{S} \lambda_m^{N-R} |u_m\rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m=0}^1 \langle u_m | \mathcal{S} \lambda_n^R |u_n\rangle \langle u_n | \mathcal{S} \lambda_m^{N-R} |u_m\rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m=0}^1 \lambda_n^R \lambda_m^{N-R} \langle u_m | \mathcal{S} |u_n\rangle \langle u_n | \mathcal{S} |u_m\rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_n \lambda_n^R \lambda_0^{N-R} \left[\langle u_0 | \mathcal{S} |u_n\rangle \langle u_n | \mathcal{S} |u_0\rangle + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^{N-R} \langle u_1 | \mathcal{S} |u_n\rangle \langle u_n | \mathcal{S} |u_1\rangle \right] \\
&\approx \sum_{n=0}^1 \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_0} \right)^R \langle u_0 | \mathcal{S} |u_n\rangle \langle u_n | \mathcal{S} |u_0\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_R &= \langle s_0 s_R \rangle - \langle s_0 \rangle \langle s_R \rangle \\
&= \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^R \langle u_0 | \mathcal{S} |u_1\rangle \langle u_1 | \mathcal{S} |u_0\rangle
\end{aligned}$$

- (b) Calculez explicitement la fonction de corrélation (2.2). On admettra que les vecteurs propres de la matrice de transfert ont pour expression $|u_0\rangle = (\alpha_+, \alpha_-)$ et $|u_1\rangle = (\alpha_-, \alpha_+)$, avec

$$\alpha_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta H)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta H) + e^{-2\beta J}}} \right)^{1/2}$$

En particulier, étudiez le cas à champ nul. Représentez dans ce cas la fonction de corrélation en fonction de R .

$$\langle u_0 | \mathcal{S} | u_1 \rangle = (\alpha_+ \quad \alpha_-) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_- \\ -\alpha_+ \end{pmatrix} = 2\alpha_+\alpha_- = \langle u_1 | \mathcal{S} | u_0 \rangle$$

Alors,

$$\Gamma_R = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^R (2\alpha_+\alpha_-)^2$$

(c) Calculer la longueur de corrélation (2.3). Commentez les cas basse et haute températures.

Pour $h = 0$,

$$\begin{aligned} \Gamma_R &= (\tanh(\beta J))^R \\ &= e^{\ln(\tanh(\beta J))^R} \\ &= e^{R \ln(\tanh(\beta J))} \\ &= e^{-R |\ln(\tanh(\beta J))|} \\ &= e^{-R/\xi} \end{aligned}$$

