

EXAMEN DU 3 NOVEMBRE 2011

1 Théorème de Noether

Soit \mathcal{M} une variété et $T\mathcal{M}$ son fibré tangent. On note $x = (x^i)$ les coordonnées locales sur \mathcal{M} et $(x, v) = (x^i, v^i)$ des coordonnées locales sur $T^*\mathcal{M}$. On se donne une densité lagrangienne $L : \mathbb{R} \times T\mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$. Pour tout chemin $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{M}$ et pour tous temps $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$ tels que $t_1 < t_2$, on note

$$\mathcal{F}_{t_1}^{t_2}[\gamma] := \int_{t_1}^{t_2} L(t, \gamma(t), \dot{\gamma}(t)) dt.$$

On considère un champ de vecteur tangent à \mathcal{M} et dépendant du temps $X = X^i(t, x) \frac{\partial}{\partial x^i}$ (donc défini sur $\mathbb{R} \times \mathcal{M}$) et une fonction $f : \mathbb{R} \times \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$. Pour tout chemin $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{M}$ et pour tout $s \in \mathbb{R}$, on définit γ_s par $\gamma_s(t) := e^{sX(t, \cdot)}(\gamma(t))$. On dit que X est une symétrie infinitésimale de L modulo df si, pour tout chemin $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{M}$ et pour tous $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$ tels que $t_1 < t_2$,

$$\frac{d}{ds} (\mathcal{F}_{t_1}^{t_2}[\gamma_s]) \Big|_{s=0} = f(t_2, \gamma(t_2)) - f(t_1, \gamma(t_1)).$$

1) Démontrer que X est une symétrie infinitésimale de L modulo df ssi $\forall (t, x, v) \in \mathbb{R} \times T^*\mathcal{M}$,

$$\frac{\partial L}{\partial x^i}(t, x, v) X^i(t, x) + \frac{\partial L}{\partial v^i}(t, x, v) \left(\frac{\partial X^i}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial X^i}{\partial x^j}(t, x) v^j \right) = \frac{\partial f}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial f}{\partial x^i}(t, x) v^i.$$

2) Démontrer que, si l'hypothèse précédente est vérifiée et si γ est point critique de \mathcal{L} , alors la quantité

$$Q(t) := \frac{\partial L}{\partial v^i}(t, \gamma(t), \dot{\gamma}(t)) X^i(t, \gamma(t)) - f(t, \gamma(t))$$

est conservée.

3) Appliquer le résultat précédent au cas suivant : $\mathcal{M} = \mathbb{R}^3$, $L(t, x, v) = \frac{1}{2} m |v|^2$, $X(t, x) := (t - t_0) V^i \frac{\partial}{\partial x^i}$, où $V = (V^1, V^2, V^3) \in \mathbb{R}^3$ et $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction à déterminer. Interpréter le sens de cette symétrie et de la quantité conservée.

2 Transformations canoniques

Soit \mathcal{M} une variété de dimension n et $T\mathcal{M}$ son fibré cotangent. On note $x = (x^i)$ des coordonnées locales sur \mathcal{M} et $(x, p) = (x^i, p^i)$ des coordonnées locales sur $T^*\mathcal{M}$. On munit $T^*\mathcal{M}$ de la forme symplectique $\omega := d\theta$, où $\theta := p_i dx^i$. On se donne une fonction régulière $H : T^*\mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ et on définit le champ de vecteur hamiltonien associé ξ_H par $\xi_H \lrcorner \omega + dH = 0$. On note $e^{s\xi_H}$ le flot de ξ_H (on pourra supposer qu'il est défini pour toute valeur de $s \in \mathbb{R}$). On se donne deux valeurs $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$ telles que $t_1 < t_2$ et on pose $\mathcal{C}_{t_1}^{t_2} := \{(\gamma, \pi) \in \mathcal{C}^2([t_1, t_2], T^*\mathcal{M})\}$ et on définit sur $\mathcal{C}_{t_1}^{t_2}$ la fonctionnelle

$$\mathcal{P}[\gamma, \pi] := \int_{t_1}^{t_2} (\pi_i(t) \dot{\gamma}^i(t) - H(\pi(t), \gamma(t))) dt.$$

1) Déterminer l'équation d'Euler-Lagrange de \mathcal{P} (pour des variations laissant $\gamma(t_1)$ et $\gamma(t_2)$ fixes et $\pi(t_1)$ et $\pi(t_2)$ libres).

2) On suppose que, pour tout $(x_1, x_2) \in \mathcal{M} \times \mathcal{M}$, $\exists! (\gamma_{(x_1, x_2)}, \pi_{(x_1, x_2)}) \in \mathcal{C}_{t_1}^{t_2}$ tel que $\gamma_{(x_1, x_2)}(t_1) = x_1$, $\gamma_{(x_1, x_2)}(t_2) = x_2$ et $(\gamma_{(x_1, x_2)}, \pi_{(x_1, x_2)})$ est solution des équations d'Euler-Lagrange de \mathcal{P} . On suppose que $(x_1, x_2) \mapsto (\gamma_{(x_1, x_2)}, \pi_{(x_1, x_2)})$ est \mathcal{C}^1 et on définit $W : \mathcal{M} \times \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ par

$$W(x_1, x_2) := \mathcal{P}[\gamma_{(x_1, x_2)}, \pi_{(x_1, x_2)}].$$

Calculer dW .

3) On pose $\Phi := e^{(t_2 - t_1)\xi_H} : T^*\mathcal{M} \longrightarrow T^*\mathcal{M}$ et on note $G := \{(x, p, \Phi(x, p)); (x, p) \in T^*\mathcal{M}\}$ son graphe. Montrer que l'application

$$\psi : \begin{array}{ccc} G & \longrightarrow & \mathcal{M} \times \mathcal{M} \\ (x_1, p_1, x_2, p_2) & \longmapsto & (x_1, x_2) \end{array}$$

est un difféomorphisme.

4) On considère les applications

$$\Pi_1 : \begin{array}{ccc} G & \longrightarrow & T^*\mathcal{M} \\ (x_1, p_1, x_2, p_2) & \longmapsto & (x_1, p_1) \end{array} \quad \text{et} \quad \Pi_2 : \begin{array}{ccc} G & \longrightarrow & T^*\mathcal{M} \\ (x_1, p_1, x_2, p_2) & \longmapsto & (x_2, p_2) \end{array}$$

Montrer que $\Pi_2^*\theta - \Pi_1^*\theta$ est une 1-forme exacte (indication : considérer $W \circ \psi$).

5) Dédurre de ce qui précède que $\Phi^*\omega = \omega$ (indication : utiliser le fait que Π_1 est un difféomorphisme).

3 Modèle d'Ising

Un matériau ferro-paramagnétique en dimension $D \in \mathbb{N}^*$ est modélisé par un réseau cristallin cubique périodique $\Gamma := \mathbb{Z}^D / (L\mathbb{Z})^D$ comportant $N = L^D$ noeuds. Chaque noeud possède un moment magnétique qui ne prend que deux valeurs (+1 ou -1) suivant une direction donnée (spin « classique »). L'état microscopique du matériau est ainsi décrit par une application $s : \Gamma \longrightarrow \{\pm 1\}$. On notera $\{\pm 1\}^\Gamma$ l'ensemble de ces applications. On numérote chaque noeud du réseau par un entier i , variant de 1 à N et on note $s_i \in \{\pm 1\}$ la valeur prise par le spin en ce site. On suppose que le matériau est soumis à un champ magnétique uniforme (dirigé dans la même direction que les spins) d'intensité constante $h \in \mathbb{R}$. Enfin deux spins situés sur deux sites adjacents interagissent entre eux et l'énergie d'interaction entre deux spins s_i et s_j adjacents est $-J s_i s_j$. Ainsi l'énergie totale associée à une configuration $s \in \{\pm 1\}^\Gamma$ est

$$H(s, h) := - \sum_{i=1}^N h s_i - \sum_{\langle ij \rangle} J s_i s_j,$$

où la deuxième sommation est faite sur l'ensemble des arêtes joignant deux noeuds du réseau Γ sans omission, ni répétition (on note $\langle ij \rangle$ l'arête joignant le site i au site j , si ces sites sont adjacents). On note aussi

$$M(s) := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i$$

la valeur moyenne de l'aimantation.

On modélise l'état d'équilibre thermodynamique de façon statistique par une mesure de probabilité de Boltzmann-Gibbs ν sur $\{\pm 1\}^\Gamma$ qui donne à chaque configuration s le poids

$$\nu(s) := \frac{1}{Z(\beta, h)} e^{-\beta H(s, h)} \quad \text{avec} \quad Z(\beta, h) := \sum_{s \in \{\pm 1\}^\Gamma} e^{-\beta H(s, h)}$$

($Z(\beta, h)$ est appelée la *fonction de partition*).

1) Montrer que, si $J = 0$,

$$Z(\beta, h) = 2^N (\cosh \beta h)^N.$$

2) Dans toute la suite, on supposera que $J \neq 0$ en général. Montrer que l'on peut calculer les valeurs moyennes $\langle H \rangle_\nu := \sum_{s \in \{\pm 1\}^\Gamma} H(s) \nu(s)$ et $\langle M \rangle_\nu := \sum_{s \in \{\pm 1\}^\Gamma} M(s) \nu(s)$ à partir de Z et de ses dérivées partielles.

A) Cas de la dimension 1 — On suppose dans les questions suivantes que $D = 1$. On numérote les sites dans l'ordre cyclique par i dans $\mathbb{Z}/N\mathbb{N}$, si bien que les arêtes entre deux sites adjacents sont numérotées par $\langle i, i+1 \rangle$, pour $i = 1, \dots, N$ (la dernière étant donc $\langle N, 1 \rangle$).

3) Montrer que

$$Z(\beta, h) = \sum_{s \in \{\pm 1\}^N} \prod_{i=1}^N e^{\frac{1}{2}\beta h (s_i + s_{i+1}) + \beta J s_i s_{i+1}}.$$

4) Pour tout $\sigma, \sigma' \in \{\pm 1\}$, on pose

$$a(\sigma, \sigma') := e^{\frac{1}{2}\beta h(\sigma + \sigma') + \beta J\sigma\sigma'},$$

et, pour $2 \leq n \leq N$,

$$a^{(n)}(\sigma, \sigma') := \sum_{(s_2, \dots, s_n) \in \{\pm 1\}^{n-1}} a(\sigma, s_2)a(s_2, s_3) \cdots a(s_n, \sigma').$$

Enfin on définit les matrices

$$A^{(n)} := \begin{pmatrix} a^{(n)}(1, 1) & a^{(n)}(1, -1) \\ a^{(n)}(-1, 1) & a^{(n)}(-1, -1) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad T := \begin{pmatrix} a(1, 1) & a(1, -1) \\ a(-1, 1) & a(-1, -1) \end{pmatrix}.$$

Exprimer $A^{(n)}$ en fonction de T et montrer que $Z(\beta, h) = a^{(N)}(1, 1) + a^{(N)}(-1, -1)$.

5) Dédire de la question précédente que $Z(\beta, h) = \lambda_1^N + \lambda_2^N$, où λ_1 et λ_2 sont les valeurs propres d'une matrice que l'on déterminera. Identifier λ_1 et λ_2 , sachant que $\lambda_1 > |\lambda_2|$.

6) On suppose que N est grand. Donner une valeur approchée de $\log Z(\beta, h)$.

7) Calculer $\langle M \rangle_\nu$ dans l'approximation précédente.

B) Approximation du champ moyen — Dans la suite, on ne suppose plus que $D = 1$ en général. Le calcul de $Z(\beta, h)$ étant impossible en général en dimension plus grande que un, nous allons tenter une estimation de cette quantité en faisant l'hypothèse dite de *champ moyen*¹. Cela consiste à supposer qu'autour de chaque site i du réseau, la moyenne sur les sites adjacents

$$\frac{1}{2D} \sum_{j, \text{ t.q. } \langle ij \rangle \text{ soit une arête}} s_j$$

est très proche d'une unique valeur m qui est *indéterminée a priori*. Cette hypothèse revient à remplacer l'hamiltonien précédent par

$$H_m(s, h) := - \sum_{i=1}^N h s_i - \sum_{i=1}^N J(2Dm) s_i.$$

On notera Z_m la fonction de partition pour la mesure de Boltzmann–Gibbs ν_m correspondante.

8) Montrer que l'on peut écrire $Z_m(\beta, h) = z_m(\beta, h)^N$, où $z_m(\beta, h)$ est une fonction que l'on calculera en fonction de β, h et m .

9) Calculer $\langle M \rangle_{\nu_m}$.

10) A présent nous imposons la condition $m = \langle M \rangle_{\nu_m}$. Justifier cela. En déduire une équation que doit satisfaire m .

11) On suppose maintenant que $h = 0$. Tracer le graphe de la fonction $m \mapsto \langle M \rangle_{\nu_m}$ (faire attention à la tangente au graphe en l'origine). En déduire le nombre de valeurs possibles de l'aimantation moyenne m en fonction de la température $1/\beta$.

12) Interpréter le résultat obtenu précédemment (indication : essayez de comprendre pourquoi un aimant garde un moment magnétique non nul, même lorsqu'il n'est pas soumis à un champ magnétique). Que se passe-t-il si l'on fait varier la température ?

C) Une dernière question — Les résultats obtenus par l'approximation du champ moyen sont confirmés expérimentalement et par des calculs théoriques plus poussés si $D \geq 2$, mais pas pour $D = 1$. Avez-vous une explication ?

Remarque — les parties A) et B) du problème 3 peuvent être abordées séparément. La partie A) comporte plus de calculs, la partie B) plus de raisonnements physiques.

1. Nous envisageons ici la version la plus simple de cette hypothèse, celle de Bragg–Williams.