1 (Rappel) Électromagnétisme classique

On s'intéresse d'abord à développer la théorie du magnétisme en physique classique. Cette théorie échoue à décrire correctement le magnétisme. En effet il faut la mécanique quantique pour le faire. Par contre le formalisme développé en quantique reste utile.

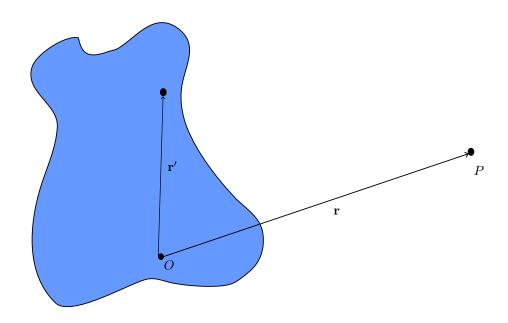


FIGURE 1 – densité de courrant

On a la loi suivant pour obenir le champ mangétique

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \int \mathbf{J}(\mathbf{r}') \times \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 r' \quad \text{(Biot-Savard)}$$

Qu'on peut réécrire comme

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \nabla \times \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r'$$

Puisque $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{c} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r'$$

Pas de monopoles magétiques :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \nabla \times \nabla \times \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' = \cdots$$

On developpe $\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{|\mathbf{r}|} + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{|\mathbf{r}|^3} + \cdots$$

Le premier terme non-nul est le terme dit dipolaire

$$A_{\text{dip}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \frac{1}{|\mathbf{r}|^3} \sum_{i,j} \hat{n}_i r_j \int r'_j J_i d^3 r' = \dots = -\frac{1}{c} \frac{1}{|\mathbf{r}|^3} \sum_i \hat{n}_i \frac{1}{2} \left[\mathbf{r} \times \int (\mathbf{r}' \times \mathbf{J}) \right]_i d^3 r'$$

On définit alors la densité de moment dipolaire comme

$$\mathcal{M}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2c}\mathbf{r} \times \mathbf{J}(\mathbf{r})$$

Ce qui permet de réécrire

$$\mathbf{A}_{\mathrm{dip}} = -\frac{1}{|\mathbf{r}|^3} \mathbf{r} \times \int \overrightarrow{\mathcal{M}} (\mathbf{r}') d^3 r' \equiv \frac{\mathbf{m} \times \mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3}$$

Le moment magnétique peut se réécrire de la forme

$$\mathbf{m} = \sum_{i} \gamma_{i} \mathcal{L}_{i}$$

avec \mathcal{L}_i le moment cinétique et $\gamma_i = \frac{q_i}{2M_ic}$ le facteur gyromagnétique

On poursuit sur le Magnétisme quantique

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \gamma \mathbf{L} \cdot \mathbf{H} + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2$$

Comment faire apparaitre le spin 1/2

L'équation de Shordinger n'est pas invariante de Lorentz

L'idée de Dirac, prendre un H linéaire en p mais dont le carré redonne $E=p^2c^2+m^2c^4$

On pose la forme

$$H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2$$

$$=c^2\sum_{ij}\alpha_i\alpha_jp_ip_j+\beta^2+\cdots$$

C'est impossible de trouver des matrices 2x2 qui fonctionne, on prends donc des matrices 4x4

$$\psi = \begin{pmatrix} \chi \\ \Phi \end{pmatrix}$$

On rajoute le champ mangétique dans l'équation par ${\bf P} \to {\bf P} - \frac{e}{c} {\bf A}$

Magnétisme quantique

$$Z = \operatorname{tr} e^{-\beta H} = \sum e^{-\beta E} = \sum \langle e \rangle$$
 ensemble canonique

On considère que les spins vivent sur un réseau.

On négligle l'intéraction avec les spins?? (Je sais pas ce que ça veut dire, spin-spin surement)

On considère que le champ magnétique externe est constant

Moment magnétique d'un atome à plusieurs e

$$\mathbf{M} = \gamma \sum_{i} (\mathbf{L}_{i} + g\mathbf{S}_{i}) \xrightarrow{\mathbf{W}-\mathbf{E} \text{ proj}} \gamma g_{J} \mathbf{J} \quad \text{dans} \quad \mathcal{E}_{J} = \{ |E_{0}, S, L, J, M \rangle \}$$

$$\|\mu_{\text{eff}}\|\mathbf{M}\|_{\mathcal{E}_{J}}\| = \sqrt{\langle |_{\mathcal{E}_{J}} \vec{M} \cdot \mathbf{M}|_{\mathcal{E}_{J}}} = \frac{\hbar |\gamma| \rho_{s}}{|\mu|_{B}} \sqrt{J(J+1)}$$

1 Règles de Hund*

- 1. Maximiser S
- 2. Maximiser L
- 3. Minimiser l'interaction spin-orbite $\rightarrow J$

$$\sum_{i} \lambda_{i} \mathbf{L}_{i} \mathbf{S}_{i} \xrightarrow{\mathbf{W}-\mathbf{E}} \lambda(L, S) \vec{L} \cdot \mathbf{S}$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \implies \mathbf{J}^{2} = (\mathbf{S} + \mathbf{L})^{2} = \cdots$$

$$\implies \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{J}^{2} - \mathbf{L}^{2} - \mathbf{S}^{2} \right)$$

théorie des perturbations dégénéré au premier ordre

$$\langle W_{\rm SO} \rangle_{\mathcal{E}_J} = \frac{\lambda(L,S)}{2} \langle \mathbf{J}^2 - \cdots \rangle$$

$$\Delta E_{\rm SO} = \hbar^2 \lambda(S,L) \frac{1}{2} \left[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1) \right]$$

En prennant J = L - S On minimise la répulsion si

Interaction d'échange (directe mais aussi superéchange)

Lorsque deux fonctions onde on on recouvrement non nul on doit les anti-symétriser

$$\psi_{\epsilon_1,\epsilon_2}(r_1,r_2) = A\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) |\epsilon_1\epsilon_2\rangle$$

- 1. $\psi_{\uparrow} \uparrow (r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_a(r_1) \psi_b(r_2) \psi_a(r_2) \psi_b(r_1) \right] |++\rangle$
- 2. idem pour --
- 3. $|-+\rangle |+-\rangle$
- 4. $|+-\rangle |-+\rangle$

Pour que les fonctions d'onde corresponde au valeurs prorpres de S^2 on prend des combinason linéaires de 3 et 4

2024-02-02

Rappels

$$\sum_{k} a_{k} |\psi_{k}\rangle \langle \psi_{k}| = D$$

$$\sum_{k} a_{k} = 1$$

$$S = -k_B \operatorname{tr} D \ln D$$

À l'équilibre S est maximale

Avec contrainte statistiques (valeur moyenne fixée) et certaines (valeur tout court fixé)

Multiplicateurs de Lagrange

$$\delta \left(S(D) - \sum_{i} \zeta_{i} \frac{\operatorname{tr}(DA_{i})}{\langle A_{i} \rangle} - \zeta_{0} \operatorname{tr} D \right)$$

$$\operatorname{tr}(\delta D \ln D) - \operatorname{tr} \delta D - \sum_{i} \underbrace{\frac{\zeta_{i}}{k_{B}}}_{\zeta_{i}} \operatorname{tr} \delta D A_{i} - \underbrace{\frac{\zeta_{0}}{k_{B}}}_{\zeta_{0}} \operatorname{tr} \delta D = 0$$

$$\operatorname{tr} \delta D \left[\ln D + \sum_{i} \zeta_{i} A_{i} + \zeta_{0} + \mathbb{1} \right] = 0$$

. . .

$$\operatorname{tr} D = \frac{\operatorname{tr} e^{-\sum_{i} \zeta_{i} A_{i}}}{Z} = 1$$

$$Z = \operatorname{tr} e^{-\sum_{i} \zeta_{i} A_{i}}$$

On arrive donc à dériver n'importe quel quantité à partir de la fonction de partition

$$\langle A \rangle = \operatorname{tr} DA = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \zeta_i}$$