b) Théorie du champ moyen.

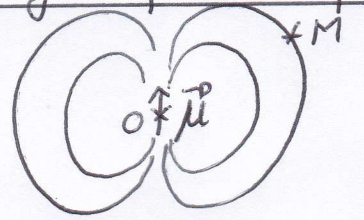
$$\mathcal{H} = \underbrace{-g\mu_B \vec{B}_0 . \sum_{i=1}^{N} \vec{S}_i}_{} - J \underbrace{\sum_{\substack{i,j \\ \text{voisins}}} \vec{S}_i . \vec{S}_j}_{}$$

$J > 0$ pour favoriser l'alignement des spins.

cte de couplage ↳ terme responsable du ferromagnétisme.

terme conduisant à paramagnétisme.

origine φ du couplage entre spins ?



$\vec{B}(r) = \frac{\mu_0}{4\pi r^5} \left[3\vec{r}(\vec{\mu}_1 . \vec{r}) - r^2 \vec{\mu}_1 \right]$ → varie en $1/r^3$

champ créé par le dipole $\vec{\mu}_1$ en M

interaction dipole-dipole $\mathcal{E} = -\vec{\mu}_2 \vec{B}(r) \sim \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi r^3}$

$\left.\begin{array}{l} \mu \sim \mu_B \quad (10^{-23} \, Am^2) \\ r \sim 2 Å \quad (\varphi \text{ condensée}) \end{array}\right\}$ $\mathcal{E} \sim 10^{-24} J$

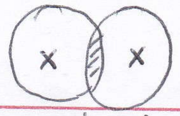
or $k_B T \sim 4.10^{-21} J$ à T ⇒ $\mathcal{E} << k_B T$

pas possible car $T_c \sim$ centaine de K

$\boxed{\text{Attention il ne s'agit pas d'un couplage dipole-dipole.}}$

↳ origine φ = interaction d'échange. (origine quantique)

répulsion colombienne + principe d'échange } électron fermion. principe d'exclusion de Pauli



↳ les 2 e⁻ ne peuvent avoir le même spin

→ interaction existant uniquement à très courte portée (+ proches voisins)

$$\vec{B}_0 = B\,\vec{e}_z$$

$$\mathcal{H} = -g\mu_B B \sum_{i=1}^{N} S_{iz} - J \sum_{\langle ij\rangle}^{N} S_{iz}.S_{jz}$$ → i,j paire de + proches voisins

$$\mathcal{H} = -g\mu_B B \sum_{i=1}^{N} S_{iz} - \frac{J}{2}\sum_{i=1}^{N} S_{iz} \sum_{j\in v(i)} S_{jz}$$

→ j ∈ aux + proches voisins de i
q + proches voisin

$$\boxed{\text{champ moyen} \quad s = \langle S_{iz}\rangle = \langle S_{jz}\rangle \quad \forall i,j \quad \text{pas de fluctuations}}$$

$$\mathcal{H} = -g\mu_B B \sum_{i=1}^{N} S_{iz} - \frac{J}{2}\sum_{i=1}^{N} S_{iz}\, s\, q\, s - \frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N} S_{jz}\, q s + \frac{NJ}{2} q s^2$$

car $S_{iz}.S_{jz} = S_{iz}\, s + S_{jz}\, s - s^2$

$$\mathcal{H} = \underbrace{-g\mu_B\left[B + \frac{Jqs}{g\mu_B}\right]\sum_{i=1}^{N} S_{iz}}_{\mathcal{H}_{para}} + \frac{NJqs^2}{2}$$

$$B_{eff} = B + \frac{Jqs}{g\mu_B}$$

en approximation champ moyen

$$Z_{ferro}^{CM} = \underbrace{\iint\dots\int}_{N\text{ spins}} e^{-\beta\mathcal{H}}\, dS_{1z}\dots dS_{Nz} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\underbrace{Z_{ferro}^{CM}}_{} = \left[z^{para}(B_{eff})\right]^N e^{-\frac{NJqs^2}{2k_BT}}$$

→ fonction de partition (canonique)

atomes discernables
⇒ $\boxed{\text{φ condensée. car sinon } J=0 \text{ pas de ferromagnétisme}}$

$$\underbrace{F_{ferro}^{CM}}_{} = -k_B T \ln Z_{ferro}$$

→ φ statistique

↓ energie libre.

z^{para} → fonction de partition par atome de la partie para de $\mathcal{H}$

si système à 2 niveaux on a vu

que $z^{para}(B_{eff}) = 2\,ch\left[\frac{g\mu_B B_{eff}}{2k_BT}\right]$

donc

$$F_{ferro} = -Nk_BT \ln z^{para}(B_{eff}) + \frac{NqJs^2}{2}$$

soit :

$$F_{ferro} = -Nk_BT\left\{\ln 2 + \ln\left[\frac{g\mu_B}{2k_BT}\overbrace{\left(B + \frac{Jqs}{g\mu_B}\right)}^{B_{eff}}\right]\right\} + \frac{NqJs^2}{2}$$

↓ fonction de s

A l'équilibre F est minimale $\Big\}$ $\Rightarrow \frac{\partial F}{\partial s} = 0$

ensemble canonique

$$\frac{\partial F}{\partial s} = -Nk_BT\frac{Jq}{2g\mu_B}\,th\left[\frac{g\mu_B}{2k_BT}\left(B + \frac{Jqs}{g\mu_B}\right)\right] + NqJs = 0$$

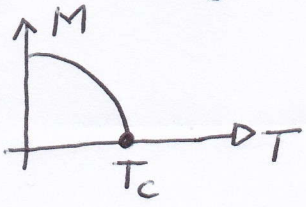
soit $$\boxed{s = \frac{1}{2}\,th\left[\frac{g\mu_B}{2k_BT}\left(B + \frac{Jqs}{g\mu_B}\right)\right]}$$ équation auto-consistante

OR $M = \frac{Ng\mu_B s}{V}$

$B_{eff} = B + \lambda M \Rightarrow \lambda = \frac{qJ}{(g\mu_B)^2}\frac{V}{N}$ on retrouve la théorie du champ moléculaire

$$\boxed{M = \frac{g\mu_B N}{2V}\,th\left[\frac{g\mu_B}{2k_BT}(B + \lambda M)\right]} \quad (1)$$

en champ nul $M \neq 0$ si $T < T_c$



en chp nul $B = 0$

L'approche thermodynamique permet d'aller + loin car on peut calculer les grandeurs thermodynamiques à partir de Z_{ferro}

$$Z_{ferro}^{CM} = \left\{ 2\,\mathrm{ch}\left[\frac{g\mu_B}{2k_BT}(B+\lambda M)\right] e^{-\frac{qJ}{2k_BT}\left(\frac{V}{N}\frac{M}{g\mu_B}\right)^2} \right\}^N$$

$$\boxed{F_{ferro}^{CM} = -k_BT \ln Z_{ferro}^{CM} = \frac{NJq}{2}\left(\frac{V}{N}\frac{M}{g\mu_B}\right)^2 - Nk_BT\ln\left\{2\,\mathrm{ch}\left[\frac{g\mu_B}{2k_BT}(B+\lambda M)\right]\right\}}$$

<u>en champ nul $B=0$</u>

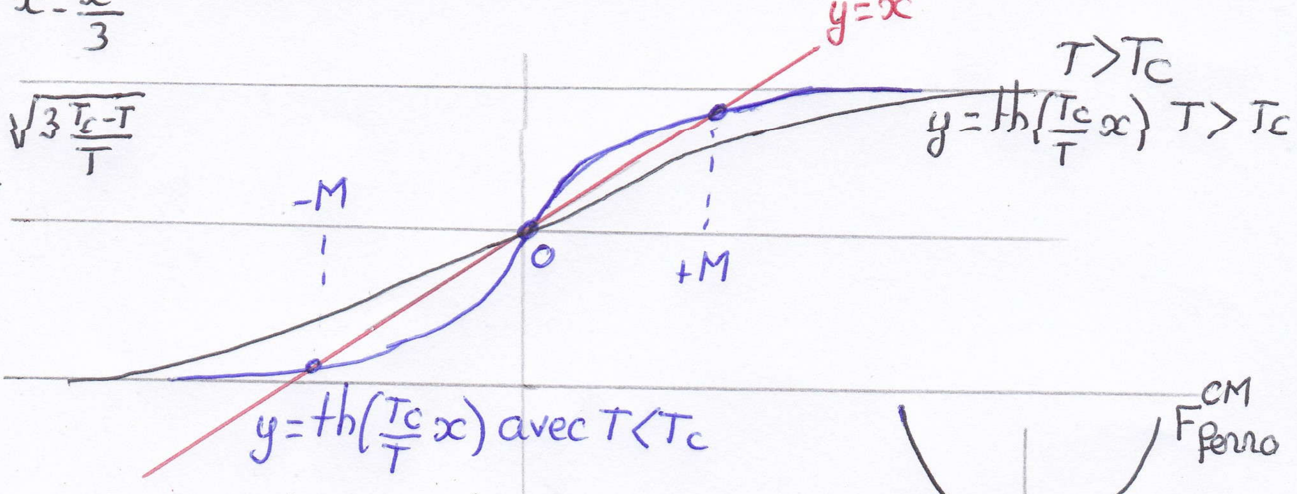
de (1) on retrouve $M = M_\infty \,\mathrm{th}\left(\frac{qJ}{4k_BT}\frac{M}{M_\infty}\right)$ avec $M_\infty = \frac{Ng\mu_B}{2V}$

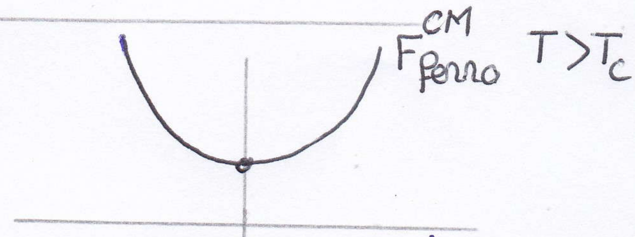
que l'on peut écrire sous la forme

$$\boxed{\frac{M}{M_\infty} = \mathrm{th}\left[\frac{M}{M_\infty}\frac{T_c}{T}\right] \quad \text{avec } T_c = \frac{qJ}{4k_B} \text{ température critique.}}$$

$\mathrm{th}\,x \underset{0}{\simeq} x - \frac{x^3}{3}$

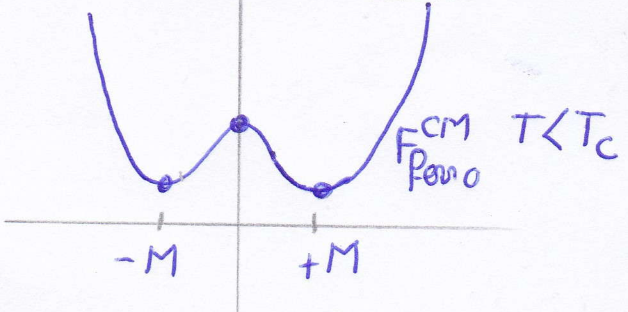
$\frac{M}{M_\infty} \underset{T\leq T_c}{\simeq} \sqrt{3\frac{T_c-T}{T}}$





$T>T_c$ 1 seule solution $M=0$

$T<T_c$ 3 solutions



en champ nul $B=0$

$$F^{CM}_{ferro}(M) = Nk_B\left[\frac{T_c}{2}\left(\frac{M}{M_\infty}\right)^2 - T\ln\left[2\,\mathrm{ch}\left(\frac{T_c}{T}\frac{M}{M_\infty}\right)\right]\right]$$

$$E^{CM}_{ferro} = -\frac{\partial \ln Z^{CM}_{ferro}}{\partial\beta} \xrightarrow{\text{rmq}*} = -\frac{NJq}{8}\left(\frac{M(T)}{M_\infty}\right)^2 \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

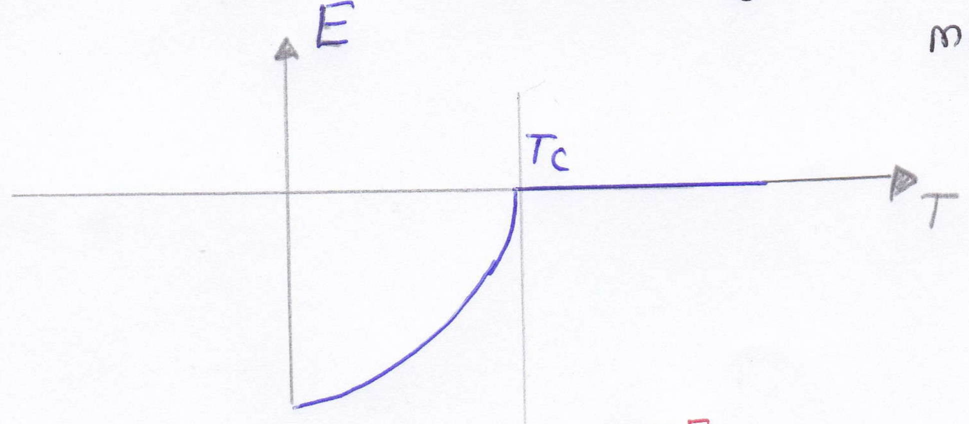
$$Z = \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i} \qquad P_i = \frac{1}{Z}e^{-\beta\varepsilon_i}$$

$$\langle E\rangle = \sum P_i\varepsilon_i = \frac{1}{Z}\Big[\underbrace{\sum \varepsilon_i e^{-\beta\varepsilon_i}}_{-\frac{\partial Z}{\partial\beta}}\Big] = -\frac{\partial Z/\partial\beta}{Z} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z$$

rappel de φ stat

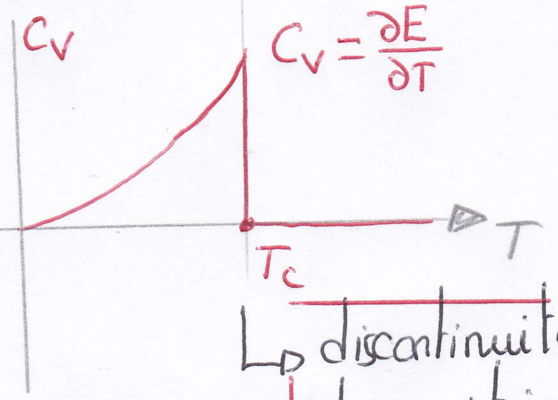
on a vu que $T>T_c$ $M(T)=0$

$T\lesssim T_c$ $M\simeq M_\infty\sqrt{3\left(1-\frac{T}{T_c}\right)}$ voir demonstration theorie champ moleculaire



rmq attention* $M(T)$ donc $\frac{\partial M}{\partial\beta}\times\frac{\partial\beta}{\partial T}$

mais $\underbrace{\frac{\partial \ln Z}{\partial M}}_{=0 \text{ à l'eq}} \times \frac{\partial M}{\partial\beta}$



↳ discontinuité

$\boxed{\text{transition du 2}^{nd}\text{ ordre}}$