

Petite Classe n° 1
Mardi 24 Janvier 2017

Solide paramagnétique - ensemble microcanonique

L'aimantation d'un échantillon est définie comme le rapport du moment magnétique M au volume Ω . La susceptibilité magnétique χ dans la limite des champs faibles est définie par

$$\chi = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{1}{\Omega} \frac{M}{B}$$

On peut alors distinguer deux cas, selon que χ est positif (*paramagnétisme*) ou négatif (*diamagnétisme*), c'est-à-dire selon que le champ et le moment magnétique sont des vecteurs de même sens ou de sens opposés. Expérimentalement, on vérifie sur un grand nombre de matériaux paramagnétiques la loi empirique de Curie. Selon cette loi, la susceptibilité est proportionnelle B/T où T est la température absolue.

1 Modèle utilisé

On modélise le solide par un système de N moments magnétiques $\hat{\mu}_i$ ($N \gg 1$) qui proviennent de N spins $\frac{1}{2}$ localisés sur les différents sites d'un échantillon cristallin. On suppose que les spins n'interagissent pas et qu'ils constituent un système isolé dont l'énergie est fixée de façon externe (on va donc se placer dans les hypothèses de l'ensemble microcanonique). On rappelle que le moment magnétique associé au spin vaut

$$\hat{\mu}_i = -\mu_B \hat{\sigma}_i, \quad \mu_B = \frac{|q|\hbar}{2m_{el}} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$$

(avec ces notations $\sigma_i^z = \pm 1$).

1. Quel est l'hamiltonien du système en présence d'un champ magnétique extérieur (homogène et constant) B orienté selon l'axe z ?
2. Quel est la dimension de l'espace de Hilbert du système? Quels sont les états propres de l'Hamiltonien (les "microétats")? Quelles sont les valeurs maximale E_{\max} et minimale E_{\min} de l'énergie du système des moments magnétiques interagissant avec B ?
3. Soient N_+ et N_- les nombres de spins qui pointent vers le haut (+) ou vers le bas (-). Quelle est l'énergie $E(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ d'une configuration donnée $(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$? Exprimer la dégénérescence d'une valeur donnée de l'énergie (soit le nombre de microétats accessibles pour une énergie donnée).

2 Spins sans champ magnétique

En l'absence de champ magnétique, toutes les configurations des spins $(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ non interagissants sont équiprobables.

1. Quelle est la probabilité $p(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ de trouver une configuration fixée $(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ de spins ?
2. Quelle est la probabilité $p(N_+)$ de trouver une configuration contenant N_+ spins positifs (et $N_- = N - N_+$ spins négatifs) ?

3. Calculer la valeur moyenne $\langle N_+ \rangle$ et l'écart type ΔN_+ de la variable aléatoire N_+ . Quel est le rapport de ΔN_+ et N pour un grand système ? Quelle sont l'énergie moyenne et l'aimantation de ce solide ainsi que les écarts types associés ?

3 Entropie en présence d'un champ magnétique

L'application d'un champ B restreint les états accessibles et fixe l'énergie du système à la valeur $E = \mu_B B (N_+ - N_-)$. Pour calculer l'entropie, on part du postulat microcanonique. On rappelle la *formule de Stirling*: $\ln N! \simeq N \ln N - N$ pour $N \gg 1$.

1. Exprimer l'entropie en fonction de N et de la variable $\varepsilon = \frac{E}{N\mu_B B}$ (l'énergie moyenne par spin en unités de $\mu_B B$). Tracer $S(\varepsilon)$. Commentez.
2. On affaiblit la contrainte sur l'énergie de la manière suivante : on demande que l'énergie soit située dans l'intervalle $[E, E + \delta E]$ avec $\mu_B B \ll \delta E \ll N\mu_B B$. Comment varie l'entropie du système ?

4 Loi de Curie

La température est définie comme:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{N,B}$$

1. Calculer la température de ce système de spins.
2. Inverser la formule précédente afin d'obtenir l'aimantation en fonction de T .
3. Vérifier que dans la limite des champs faibles, on retrouve la loi de Curie: susceptibilité proportionnelle à B/T .

5 Températures de spins négatives

1. Tracer $T(\varepsilon)$. Les températures peuvent-elles être négatives ?
2. Montrer que l'existence de températures négatives vient du fait que l'énergie est bornée supérieurement. Un système possédant de l'énergie cinétique peut-il avoir une température négative ?
3. Exprimer le rapport des populations N_+/N_- en fonction de B et T . Comment faire pour préparer un état à température négative ?