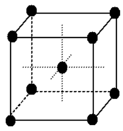
<u>Exercice 1</u> : *Cristal antiferromagnétique.*

On considère un cristal formé de N atomes sur un réseau cubique centré (ci-dessous une maille du réseau) en équilibre avec un thermostat à la température *T*.



Chaque site du réseau (sommet ou centre d'un cube) est occupé par un atome portant un moment magnétique $\vec{\mu}$ dont la projection sur l'axe Oz ne peut prendre que deux valeurs, $+\mu$ et $-\mu$. On suppose que l'interaction entre les moments magnétiques est limitée aux plus proches voisins : un atome appartenant au sous-réseau (*a*) formé par les sommets des cubes interagit seulement avec les 8 atomes voisins appartenant au sous-réseau (*b*) formé par les centres des cubes ; de même, les atomes du sous-réseau (*b*) n'interagissent qu'avec leurs 8 voisins du sous-réseau (*a*). On ne se préoccupera pas des effets de bord pour le comptage du nombre de voisins.

En présence d'un champ magnétique extérieur uniforme $\vec{B}_0$ parallèle à *Oz*, l'hamiltonien du système s'écrit :

$$H = -\vec{B}_0 \cdot \left(\sum_{i\in(a)} \vec{\mu}_i + \sum_{j\in(b)} \vec{\mu}_j \right) + J \sum_{\substack{i\in(a),\, j\in(b) \\ \text{plus} \\ \text{proches} \\ \text{voisins}}} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j \text{ , où } J \text{ est une constante \underline{positive}.}$$

Noter que, en mécanique quantique, les seules valeurs possibles de $\vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_0$ sont $\pm\mu_i B_0$, et relations similaires pour les autres produits scalaires à cause du spin 1/2 porté par les atomes.

On suppose que la valeur moyenne du moment magnétique est la même pour tous les atomes d'un sous réseau donné :

$$\left\langle \vec{\mu}_{i\in(a)} \right\rangle = \vec{\mu}_a \quad ; \quad \left\langle \vec{\mu}_{j\in(b)} \right\rangle = \vec{\mu}_b \text{ , où les } \langle \ \rangle \text{ désignent les valeurs moyennes.}$$

On fait l'approximation du champ moyen, c'est-à-dire que l'on remplace $\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j$ dans H par :

$$\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_b + \vec{\mu}_a \cdot \vec{\mu}_j - \vec{\mu}_a \cdot \vec{\mu}_b$$

où le troisième terme est nécessaire pour obtenir la bonne valeur moyenne du produit scalaire.

1. Montrer que, dans cette approximation, l'hamiltonien s'écrit :

   $$H_{\text{champ moyen}} = -\sum_{i\in(a)} \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_a^{eff} - \sum_{j\in(b)} \vec{\mu}_j \cdot \vec{B}_b^{eff} - NH_0 \text{ , où } H_0 \text{ est une constante.}$$

   Expliciter $\vec{B}_a^{eff}$, $\vec{B}_b^{eff}$ et H_0.

2. On considère $\vec{B}_a^{eff}$ et $\vec{B}_b^{eff}$ comme des champs extérieurs constants.
   a. Calculer la fonction de partition *Z* du système et son énergie libre *F*.
   b. On rappelle que le moment magnétique total d'un système plongé dans un champ magnétique *B* est lié à *F* par la relation : $M = -(\partial F / \partial B)_{T,V}$.

      En déduire un système d'équations d'autocohérence que doivent satisfaire μ_a et μ_b.

3. On prend tout d'abord $B_0 = 0$.
   a. Vérifier que le système précédent admet pour solution : $\mu_a = \mu_b = 0$.

b. Montrer que si la température *T* est inférieure à une température T_N (température de Néel) que l'on déterminera, le système admet une autre solution : $\mu_a = -\mu_b = \pm m \neq 0$ (on ne cherchera pas à calculer *m*).

c. Montrer que, dans ce cas, cette dernière solution est la solution d'équilibre.

4. Quel est le moment magnétique total du système (pour $B_0 = 0$) pour $T < T_N$? pour $T > T_N$?
5. Exprimer l'énergie du système en fonction de *m* (pour $B_0 = 0$) pour $T < T_N$ et pour $T > T_N$.
6. On prend à présent $B_0 \neq 0$. On pose $T_B = \dfrac{\mu B_0}{k}$ et on suppose $T_B \ll T_N$.
   a. Que valent μ_a et μ_b pour $T = 0$?
   b. On suppose que T tend vers T_N par valeurs inférieures. Calculer le moment magnétique total du système en fonction de N, μ, T, T_B et T_N.
   c. On suppose à présent $T > T_N$. Calculer le moment magnétique total du système en fonction de N, μ, T, T_B et T_N.

Exercice 2 : *Modèle de chaines de protéine*

Soit une chaine formée de *N* maillons pouvant prendre deux états :

- un état allongé de longueur $l + a$;
- un état court de longueur $l - a$.

On désigne par n le nombre de maillons allongés, ce nombre pouvant fluctuer.
L'énergie interne de la chaine ne dépend pas de l'état des maillons.
La chaine est fixée à une extrémité. On suspend à l'autre extrémité une masse m. Elle est alors soumise à la force $f = mg$.
Le système chaine + masse est en contact thermique avec un thermostat à la température T.

1. Quel est le nombre de micro-états du système ?
2. Quel est le nombre de micro-états du système pour lesquels il y a exactement n maillons allongés ?
3. Exprimer la longueur de la chaine L en fonction de n.
4. Quelle est l'énergie du système en fonction de n ? On prendra comme origine des énergies l'énergie du système quand tous les maillons sont allongés.
5. Calculer la fonction de partition *Z* du système.
6. Calculer l'énergie libre *F* du système.
7. Exprimer la longueur (moyenne) de la chaine en fonction de la dérivée de l'énergie libre par rapport à *f* et de *N*, *l* et *a*.
8. En déduire l'équation d'état du système, c'est-à-dire la relation entre *L*, *T* et *f*.
9. Comment varie *L* en fonction de f à température fixée si $af \ll kT$? On calculera $\left(\partial L / \partial f\right)_T$ pour $af \ll kT$.
10. Comment varie *L* quand la température augmente ?
11. Quelle est la longueur de la chaine à température nulle ? Quand la température tend vers l'infini ?
12. Calculer l'énergie interne *U*, puis l'entropie *S* du système.
13. On diminue la force *f* de façon adiabatique réversible. En remarquant que l'entropie ne dépend que du rapport f / T, en déduire le sens de variation de L et celui de *T*.

Exercice 3 : *Dynamique d'un système de spins*

On considère un système de N spins pouvant prendre deux valeurs, normalisées à $S_i = \pm 1$ pour simplifier les notations. La valeur des S_i dépend du temps. On définit l'aimantation moyenne m_t du système à l'instant t par :

$$m_t = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i(t).$$

La probabilité qu'un spin passe de l'état $+1$ à l'état -1 entre l'instant t et l'instant $t+dt$ est donnée par : $P_{-+} = \left(1 - f(m_t)\right)dt/2$ (attention à l'ordre des indices !) et celle de passer de l'état -1 à l'état $+1$ par : $P_{+-} = \left(1 + f(m_t)\right)dt/2$, où $f(m_t)$ est une fonction de l'aimantation du système à l'instant t. Le temps est ici donné sans unité, il est rapporté à un temps caractéristique de transition.
On note $P_+(t)$, respectivement $P_-(t)$, la probabilité qu'un spin soit dans l'état $+1$, respectivement -1.

1. Écrire les équations régissant l'évolution des probabilités $P_+(t)$ et $P_-(t)$. On vérifiera que cette équation respecte la condition de normalisation des probabilités à chaque instant.
   Indication : Noter que $P_+(t) = \left(\text{nombre de spins dans l'état } +1 \text{ à l'instant } t\right)/N$.
2. En déduire l'équation d'évolution de m_t.
3. On rappelle que dans l'approximation du champ moyen, l'aimantation d'équilibre $m_{\text{éq}}$ est donnée par la relation d'autocohérence :
   $$m_{\text{éq}} = \tanh\left(m_{\text{éq}}\frac{T_C}{T}\right),$$
   où T est la température du système et T_C la température critique de la transition ferromagnétique. Quel est le choix le plus simple pour la fonction $f(m_t)$ (non constante) qui assure que $m_{\text{éq}}$ soit solution de l'équation d'évolution trouvée à la question 2 ?
4. On suppose $T > T_C$. Que vaut $m_{\text{éq}}$? On suppose qu'à tout instant m reste très proche de $m_{\text{éq}}$ ($\left|m - m_{\text{éq}}\right| \ll 1$). En déduire m_t en fonction de l'aimantation initiale m_0. Quel est le temps de relaxation τ ? Que se passe-t-il près du point critique ?
5. On suppose $T < T_C$. Répondre aux même questions que précédemment en supposant que $T_C - T \ll T_C$. On posera $m_t = m_{\text{éq}} + \delta m$ et on supposera encore $\delta m \ll 1$. On donnera une valeur approchée de $m_{\text{éq}}$ et on exprimera alors τ en fonction de T et T_C.