

Transitions de phases.

allemand@lps.ens.fr

(1) Laboratoire de Physique Statistique,
Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75005 Paris,
France.

Généralités

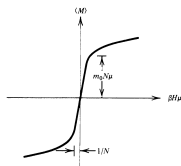
Généralités

- Changement des propriétés de symétries (solide/liquide, cristallographie, magnétisme), de densités (liquide/gaz)...
- Mêmes composants, mêmes interactions mais comportement collectif différent.

Paramètre d'ordre

- Nécessité d'avoir un paramètre qui caractérise la transition
- Sa valeur est pris égale à 0 à haute température.
- Transition liq/gaz on prend $\rho - \rho_{gaz}$
- Ferro/paramagnétique \vec{m} aimantation volumique moyenne.
- Ecart de concentrations.

- $\mathcal{Z} = \sum e^{-\beta E}$ est régulière en fonction de T , elle ne s'annule pas donc F devrait l'être aussi. C'est vrai si N est fini mais pas dans la limite thermodynamique.
- $\lim_{B \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \neq \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{B \rightarrow 0}$

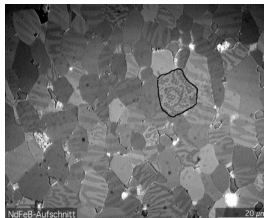
The average magnetization for $T < T_c$ and large but finite N .

Exposants critiques

- Il y a des divergences caractérisées par des exposants dits critiques.
- $C_v \propto |T - T_c|^{-\alpha}$
- Param d'ordre $m \propto |T - T_c|^\beta$
- Susceptibilité $\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}$
- Longueur de corrélation $\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$
- Fonction de corrélation $G(r) \propto |r|^{-D+2-\eta}$
- $m \propto B^{\frac{1}{\delta}}$
- 6 exposants dont seuls 2 sont indépendants
- Ils ne dépendent pas des détails du modèles (valeur de T_c : classes d'universalité).
- Dépendent valeurs de la dimension de l'espace, des symétries....

Caractéristiques

- $T_c \sim 10^3 \text{ K}$ pour le fer, $T_c \sim 400 \text{ K}$ pour NdFeB .
- Moment dipolaire moléculaire magnéton de Bohr : $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \sim 10^{-23} \text{ SI}$
- $E_I = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{4\pi r^3} \sim 10^{-23} \text{ J} \ll k_B T$
- Interaction d'échange : antisymétrie des fonctions d'ondes : les spins des électrons s'orientent.
- Domaines magnétiques, parois de Bloch.



Hamiltonien

- Energie d'interaction entre spins : $E_I = -\frac{4}{\hbar^2} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j$

- Interaction avec un champ

externe : $E_B = -\vec{m}_i \cdot \vec{B} = -g\mu_B \frac{\vec{S}_i}{\hbar} \cdot \vec{B}$ avec g facteur de Landé et μ_B le magnéton de Bohr.

- Hamiltonien de

Heisenberg : $H_H = -\sum_{i,j} \left(\frac{4}{\hbar^2} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j + g\mu_B \frac{\vec{S}_i}{\hbar} \cdot \vec{B} \right)$

- $\sum_{i,j}$ s'entend comme la somme sur des voisins l'interaction étant à courte portée dans le cas du magnétisme.
- On se sait pas le résoudre.

Ising

- Etudiant de Lenz
- Spins 1/2 direction du champ : $S_{iB} = \frac{\hbar}{2}$ et $g \sim 2$.
- Hamiltonien de Ising : $H_I = - \sum_i \left(\sum_{j \in \nu(i)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \mu_B \sigma_i \cdot B \right)$
avec $\sigma_i = \pm 1$
- On se sait pas souvent le résoudre : Onsager (prix Nobel de Chimie).
- Analogie avec le gaz sur réseau en grand canonique

Cas $J_{i,j} = 0$

Ising

- σ_i indépendants
- $\mathcal{Z} = [2 \cosh(\beta\mu_B B)]^N$
- $F = -k_B T \ln \mathcal{Z}$.
- $m = \frac{\langle M \rangle}{N} = \mu_B \langle \sigma_i \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial B} = \mu_B \tanh(\beta\mu_B B)$
- $\chi = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial B} \propto \frac{\mu_B^2}{k_B T}$

Champ moyen

- Hypothèse : chaque dipôle est soumis à l'interaction avec la **moyenne** m de ses voisins, $J_{i,j} = J$

- On écrit donc : $\sigma_i = \frac{m}{\mu_B} + \delta\sigma_i$, on en tire :

$$\sigma_i \sigma_j = \left(\frac{m}{\mu_B} + \delta\sigma_i \right) \left(\frac{m}{\mu_B} + \delta\sigma_j \right) =$$

$$\left(\frac{m}{\mu_B} \right)^2 + \frac{m}{\mu_B} (\delta\sigma_i + \delta\sigma_j) + \delta\sigma_i \cdot \delta\sigma_j \quad \text{En notant que}$$

$$\frac{m}{\mu_B} (\delta\sigma_i + \delta\sigma_j) = 2 \frac{m}{\mu_B} \delta\sigma_i = 2 \frac{m}{\mu_B} (\sigma_i - m) \quad \text{on en tire :}$$

- $\sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \in v(i)} J \left(-\frac{m^2}{\mu_B^2} + 2 \frac{m}{\mu_B} \sigma_i \right).$

Champ moyen

- $H_{cm} = \frac{1}{2} NJd \frac{m^2}{\mu_B^2} - \sum_i \left(\mu_B B + dJ \frac{m}{\mu_B} \right) \sigma_i$ où d est le nombre de voisins de i qui est lié au réseau et à la dimension de l'espace. On fait apparaître un champ effectif $B_{eff} = B + \frac{dJm}{\mu_B}$ qui dépend de l'aimantation.
- On en tire : $\mathcal{Z}_{cm} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H_{cm}} = e^{-\beta \frac{1}{2} NJd \frac{m^2}{\mu_B^2}} 2 \cosh \left(\beta \left(\mu_B B + dJB \frac{m}{\mu_B} \right) \right)^N$

On en tire

$$f_{cm} = -\frac{k_B T}{N} \ln \mathcal{Z}_{cm} = \frac{1}{2} J d \frac{m^2}{\mu_B} - \frac{1}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\beta \left(\mu_B B + J d \frac{m}{\mu_B} \right) \right) \right]$$

m s'obtient par

$$m = -\frac{\partial f_{cm}}{\partial B} = \mu_B \tanh \left[\beta \left(\mu_B B + J d \frac{m}{\mu_B} \right) \right] = \langle \mu_B \sigma_i \rangle$$

On vérifie de plus que la solution de cette équation est celle qui minimise f_{cm} . Une résolution graphique simple montre que l'on peut avoir $m \neq 0$ même si $B = 0$.

$$T_c = \frac{Jd}{k_B}$$

On a donc une brisure de symétrie

Pour $T < T_c$ mais voisin de T_c en utilisant

$$\tanh x \sim x - \frac{x^3}{3} : m = \mu_B \left(\beta J d \frac{m}{\mu_B} - \frac{\left(\beta J d \frac{m}{\mu_B} \right)^3}{3} \right) \text{ donc}$$

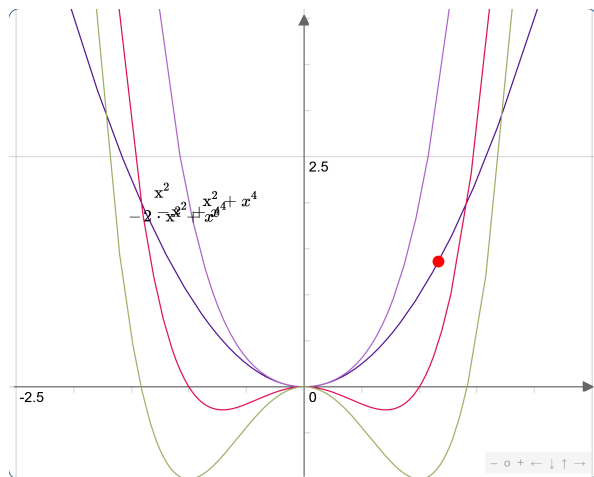
$m \propto |T - T_c|^{\frac{1}{2}}$ donc dans ce cadre $\beta = \frac{1}{2}$ comme exposant critique.

Champ moyen suite de la suite

- On a donc $f_{cm} = -\frac{k_B T}{N} \ln \mathcal{Z}_{cm} =$
 $\frac{1}{2} J d \frac{m^2}{\mu_B^2} - \frac{1}{\beta} \ln \left[2 \cosh \left(\beta \left(\mu_B B + J d \frac{m}{\mu_B} \right) \right) \right]$
- Avec le D.L. $\ln(\cosh x) \sim \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{12}$ on en tire à l'ordre 4 :

$$f_{cm} = -k_B T \ln 2 + m B \frac{T_c}{T} + \frac{k_B T_c m^2}{2 \mu_B^2} \left(\frac{T - T_c}{T} \right) + \frac{k_B T_c}{12} \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 \frac{m^4}{\mu_B^4}$$

- Suivant le signe de $T - T_c$ le terme d'ordre deux au voisinage de T_c donne lieu à deux minima d'énergie libre autour de 0.



$$\chi = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial B} \text{ avec } m = \mu_B \tanh \left[\beta \left(\mu_B B + Jd \frac{m}{\mu_B} \right) \right].$$

En développant la tangente autour de 0.

$$\frac{m}{\mu_B} \simeq \beta \mu_B B + \frac{T_c}{T} \frac{m}{\mu_B}$$

$$\text{On en tire } \frac{m}{\mu_B} \left(\frac{T - T_c}{T} \right) = \frac{\mu_B B}{k_B T} \text{ et donc } \chi \propto \frac{1}{|T - T_c|} \text{ soit}$$

$\gamma = 1$. C'est la loi de Curie-Weiss.

A 2D résultats exacts : $\beta = \frac{1}{8}$ et $\gamma = \frac{7}{4}$.

Fonction de corrélation :

$$c_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$$

- $c_{ij} = 0$ si i et j sont non corrélés. c_{ij} compte les spins corrélés.
- $\chi = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial B} = \frac{\partial \mu_B \langle \sigma_i \rangle}{\partial B} =$
 $\mu_B \frac{\partial}{\partial B} \left(\sum \{ \sigma_j \} \sigma_i \frac{e^{-\beta H_{cm}}}{Z_{cm}} \right) = \beta \mu_B \sum_j c_{ij}$
- Divergence de χ induit des corrélations à grandes distances.
- Cette remarque est utilisée pour un traitement des transitions de phases que vous verrez plus tard : le groupe de renormalisation. Vous pouvez regarder le livre de Chandler pour avoir une lecture pas trop technique là dessus.