Exercice 1 : *Cristal antiferromagnétique*

1. En faisant la substitution proposée, on obtient :

$$H_{\text{champ moyen}} = -\sum_{i\in(a)} \vec{\mu}_i \cdot \underbrace{\left(\vec{B}_0 - 4J\vec{\mu}_b\right)}_{\vec{B}_a^{eff}} - \sum_{j\in(b)} \vec{\mu}_j \cdot \underbrace{\left(\vec{B}_0 - 4J\vec{\mu}_a\right)}_{\vec{B}_b^{eff}} - \underbrace{\left(4NJ\vec{\mu}_a\cdot\vec{\mu}_b\right)}_{NH_0}$$

2.

a. Si on considère $\vec{B}_a^{eff}$ et $\vec{B}_b^{eff}$ comme des champs extérieurs constants, les deux sous-réseaux peuvent être considérés pour le calcul comme indépendants, leurs fonctions de partition se multiplient, et on peut appliquer directement le résultat du cours pour chaque sous réseau. Sans oublier le facteur constant, on trouve :

$$Z = Z_a Z_b \exp\beta H_0 = 2^N \left(\cosh\left(\frac{\mu B_a}{kT}\right)\right)^{N/2}\left(\cosh\left(\frac{\mu B_b}{kT}\right)\right)^{N/2} \exp\beta NH_0$$

$$F = -kT\ln Z = -NkT\left(\frac{1}{2}\ln\cosh\left(\frac{\mu B_a}{kT}\right) + \frac{1}{2}\ln\cosh\left(\frac{\mu B_b}{kT}\right) + \ln 2 + \beta H_0\right)$$

b. On peut calculer le moment magnétique de chaque sous-réseau par dérivation de F par rapport aux champs effectifs vus par chaque sous-réseau, d'où :

$$M_a = \frac{N\mu}{2}\tanh\frac{\mu B_a}{kT}\,;\, M_b = \frac{N\mu}{2}\tanh\frac{\mu B_b}{kT}\ .$$

Par définition de μ_a et μ_b : $M_a = \frac{N\mu_a}{2}$ et $M_b = \frac{N\mu_b}{2}$, on obtient donc le système d'équations d'autocohérence :

$$\begin{cases} \mu_a = \mu\tanh\dfrac{\mu\left(B_0 - 4J\mu_b\right)}{kT} \\ \mu_b = \mu\tanh\dfrac{\mu\left(B_0 - 4J\mu_a\right)}{kT} \end{cases}$$

3.

a. Si $B_0 = 0$, il est clair que $\mu_a = \mu_b = 0$ est une solution du système.

b. Posons $\mu_a = -\mu_b = \pm m \neq 0$, le système devient :

$$\begin{cases} m = \mu\tanh\dfrac{4\mu Jm}{kT} \\ m = \mu\tanh\dfrac{4\mu Jm}{kT} \end{cases} \Leftrightarrow \frac{m}{\mu} = \tanh\frac{4\mu^2 J\left(m/\mu\right)}{kT}$$

qui admet une solution si $\frac{4\mu^2 J}{kT} > 1$, soit $T < T_N = \frac{4\mu^2 J}{k}$.

c. Cette dernière solution est la solution d'équilibre car l'énergie libre correspondante est inférieure à l'énergie libre obtenue pour $\mu_a = \mu_b = 0$:

$$F_{(\mu_a=\mu_b=0)} = -NkT\left(\ln 2 + \beta H_0\right)$$

$$F_{(\mu_a=-\mu_b=m)} = -NkT\left(\underbrace{\frac{1}{2}\ln\underbrace{\cosh\left(\frac{\mu B_a}{kT}\right)}_{>1}}_{>0} + \underbrace{\frac{1}{2}\ln\underbrace{\cosh\left(\frac{\mu B_b}{kT}\right)}_{>1}}_{>0} + \ln 2 + \beta H_0\right)$$

4.

   a. pour $T < T_N$, $\mu_a = -\mu_b$, donc $M_{\text{tot}} = M_a + M_b = 0$.
   b. pour $T > T_N$, $\mu_a = \mu_b = 0$, donc on a encore : $M_{\text{tot}} = M_a + M_b = 0$.

5. L'énergie du système peut se calculer par $U = -\dfrac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$ ou en remplaçant $\sum_{i\in(a)} \vec{\mu}_i$ et $\sum_{j\in(\text{b})} \vec{\mu}_j$ par $N\vec{\mu}_a$ et $N\vec{\mu}_b$ dans l'hamiltonien :
   a. pour $T < T_N$, on obtient $U = -4NJm^2$.
   b. pour $T > T_N$, $U = 0$.
6. Avec les notations proposées, le système devient :

$$\begin{cases} \dfrac{\mu_a}{\mu} = \tanh\left(\dfrac{T_B}{T} - \dfrac{T_N}{T}\dfrac{\mu_b}{\mu}\right) \\ \dfrac{\mu_b}{\mu} = \tanh\left(\dfrac{T_B}{T} - \dfrac{T_N}{T}\dfrac{\mu_a}{\mu}\right) \end{cases}$$

   a. Pour $T = 0$, puisque $T_B \ll T_N$, on obtient $\mu_a = -\mu_b = \pm\mu$
   b. Si T tend vers T_N par valeurs inférieures, on peut supposer $|\mu_a|$ et $|\mu_b| \ll \mu$ et développer la fonction tanh :

$$\frac{\mu_a + \mu_b}{\mu} = 2\frac{T_B}{T_N} - \frac{T_N}{T_N}\frac{\mu_a + \mu_b}{\mu} \Rightarrow \frac{\mu_a + \mu_b}{\mu} = \frac{T_B}{T_N}$$

$$\Rightarrow M_{\text{tot}} = \frac{N}{2}\mu\frac{T_B}{T_N}$$

   c. Si $T > T_N$, et avec $T_B \ll T_N$, on peut encore supposer $|\mu_a|$ et $|\mu_b| \ll \mu$ et développer la fonction tanh :

$$\frac{\mu_a + \mu_b}{\mu} = 2\frac{T_B}{T} - \frac{T_N}{T}\frac{\mu_a + \mu_b}{\mu} \Rightarrow \frac{\mu_a + \mu_b}{\mu} = \frac{2T_B}{T + T_N}$$

$$\Rightarrow M_{\text{tot}} = N\mu\frac{T_B}{T + T_N}$$

Exercice 2 : *Modèle de chaines de protéine*

1. Il y a deux états possibles pour chaque maillon, et donc 2^N micro-états.
2. C'est le nombre de façons de choisir *n* maillons parmi *N* : $C_N^n = \dfrac{N!}{(N-n)!n!}$.
3. $L = (N-n)(l-a) + n(l+a) = N(l-a) + 2na$.
4. $E = mg(h - h_0)$, où h_0 est la position la plus basse de la masse (tous les maillons allongés). Soit : $E = f\left[N(l+a) - \left(N(l-a) + 2na\right)\right] = 2(N-n)af$.
5. $Z = \sum_{\text{miro-états i}} \exp(-E_i / kT) = \sum_{j=0}^{N} C_N^j \exp(2jaf / kT)\exp(-2Naf / kT)$,
   $Z = \left(1 + \exp(2af / kT)\right)^N \exp(-2Naf / kT)$.
6. $F = -kT\ln Z = -kTN\ln\left(1 + \exp(2af / kT)\right) + 2Naf$.

7. Comme $E_i = f\left(L_{\max} - L_i\right)$, on a :

$$\left(\frac{\partial F}{\partial f}\right)_T = -kT\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial f}\right)_T = -kT\,\frac{\displaystyle\sum_{\text{micro-états i}} \frac{\left(L_i - L_{\max}\right)}{kT}\exp\left(-E_i / kT\right)}{Z} = L_{\max} - L = N\left(l+a\right) - L\,.$$

8. D'après la question précédente : $L = N\left(l+a\right) + kTN\dfrac{\left(2a/kT\right)\exp\left(2af/kT\right)}{\left(1+\exp\left(2af/kT\right)\right)} - 2Na$,

$$L = N\left(l+a\right) - 2Na\left[1 - \frac{\exp\left(2af/kT\right)}{\left(1+\exp\left(2af/kT\right)\right)}\right] = N\left(l+a\right) - 2Na\left[1 - \frac{1}{\left(1+\exp\left(-2af/kT\right)\right)}\right].$$

9. Si $af \ll kT$, $L \simeq N\left(l+a\right) - 2Na\left[1 - \dfrac{1}{2-2af/kT}\right] = N\left(l+a\right) - Na\left[2 - \dfrac{1}{1-af/kT}\right]$,

$$L \simeq N\left(l+a\right) - Na(1 - af/kT) = Nl + Na^2 f / kT\,,$$

$$\left(\frac{\partial L}{\partial f}\right)_T \underset{af\to 0}{\simeq} \frac{Na^2}{kT}\,.$$

10. $L \searrow$ quand $T \nearrow$, car $\dfrac{\partial L}{\partial T} = 2Na\left[\dfrac{-1}{\left(1+\exp\left(-2af/kT\right)\right)^2}\right] \times \exp\left(-2af/kT\right) \times \dfrac{2af}{kT^2} < 0$.

11. $L \to N\left(l+a\right)$ si $T \to 0$; $L \to Nl$ si $T \to \infty$.

12. $U = -\dfrac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = 2Naf\left(\dfrac{1}{1+\exp\left(2af/kT\right)}\right)$.

$$S = \frac{U-F}{T} = \frac{2Naf}{T}\left(-\frac{\exp\left(2af/kT\right)}{1+\exp\left(2af/kT\right)}\right) + kN\ln\left(1+\exp\left(2af/kT\right)\right).$$

13. Pour une transformation adiabatique réversible, l'entropie est constante. L et S ne dépendent que du rapport f/T, donc L ne varie pas non plus, et T diminue pour que f/T soit constant.

<u>Exercice 3</u> : *Dynamique d'un système de spins*

1. $$\frac{dP_+}{dt} = \frac{P_{+-}}{dt}P_- - \frac{P_{-+}}{dt}P_+ = \frac{\left(1+f(m_t)\right)}{2}P_- - \frac{\left(1-f(m_t)\right)}{2}P_+\,.$$

$$\frac{dP_-}{dt} = \frac{P_{-+}}{dt}P_+ - \frac{P_{+-}}{dt}P_- = \frac{\left(1-f(m_t)\right)}{2}P_+ - \frac{\left(1+f(m_t)\right)}{2}P_-\,.$$

On a bien : $\dfrac{dP_+}{dt} + \dfrac{dP_-}{dt} = 0.$

2. $m_t = P_+ - P_- \Rightarrow \dfrac{dm_t}{dt} = \left(1+f(m_t)\right)P_- - \left(1-f(m_t)\right)P_+ = f(m_t) - m_t$.

3. À l'équilibre, $\dfrac{dm_t}{dt} = 0$, donc la fonction $f(m_t) = \tanh\left(m_t \dfrac{T_C}{T}\right)$ convient.

4. Au-dessus de la température critique, $m_{\text{éq}} = 0$. Si $\left|m_t\right| \ll 1$, on a :

$$\frac{dm_t}{dt} \simeq m_t\frac{T_C - T}{T} \Rightarrow m_t = m_0\exp\left(-t/\tau\right) \text{ avec } \tau = \frac{T}{T-T_C}\,.$$

Près du point critique, $\tau \to \infty$.

5. On pose $m_t = m_{éq} + \delta m$ avec $|\delta m| \ll 1$. Il vient :

$$\frac{d\delta m}{dt} \simeq \tanh\left(\left[m_{éq} + \delta m\right]\frac{T_C}{T}\right) - m_{éq} - \delta m \,,$$

$$\frac{d\delta m}{dt} \simeq \tanh\left(m_{éq}\frac{T_C}{T}\right) + \left(1 - \tanh^2\left(m_{éq}\frac{T_C}{T}\right)\right)\delta m \frac{T_C}{T} - m_{éq} - \delta m \,.$$

$$\frac{d\delta m}{dt} \simeq -\delta m\left(1 - \left(1 - m_{éq}{}^2\right)\frac{T_C}{T}\right) \Rightarrow \delta m = \delta m(0)\exp(-t/\tau) \text{ avec } \tau = \left(1 - \left(1 - m_{éq}{}^2\right)\frac{T_C}{T}\right)^{-1}.$$

Pour $T_C - T \ll T_C$, $m_{éq}$ est proche de 0 et donc :

$$m_{éq} = \tanh\left(m_{éq}\frac{T_C}{T}\right) \simeq m_{éq}\frac{T_C}{T} - \frac{1}{3}\left(m_{éq}\frac{T_C}{T}\right)^3 \Rightarrow m_{éq} \simeq \sqrt{\frac{3(T_C - T)}{T_C}} \,.$$

Finalement :

$$\tau \simeq \left(1 - \left(1 - 3\frac{T_C - T}{T_C}\right)\frac{T_C}{T}\right)^{-1} \simeq \frac{T}{2(T_C - T)} \,.$$