

IPHY 2A - DS de Magnétisme - Session 1

Tous documents autorisés - Calculatrice autorisée - durée 2h

25 mars 2025

1 Questions de cours sur les règles de Hund

Donner les valeurs de L S et J pour les ions supposés isolés :

1. Co^{2+} de configuration $3d^7$,
2. Sm^{3+} de configuration $4f^5$.
3. Tm^{3+} de configuration $4f^{12}$.

2 Ordre magnétique

L'expression de l'interaction d'échange a été obtenue dans le cas d'orbitale s pour lesquelles les moments magnétiques sont dus uniquement aux spins électroniques. Elle se généralise à des moments quelconques. Pour un ensemble de moments μ_i en interaction aux noeuds d'un cristal cubique, soumis à une induction magnétique B_0 selon Oz, l'Hamiltonien d'Heisenberg s'écrit :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{\langle j,i \rangle} J_{ij} \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j - B_0 \cdot \sum_i \hat{\mu}_i - K_a \sum_i (e_z \cdot \hat{\mu}_i)^2 \quad (1)$$

où $\langle j,i \rangle$ restreint la somme sur j aux premiers voisins du site i . Le facteur $\frac{1}{2}$ sert à ne pas compter deux fois l'interaction d'échange. Notez que la constante d'échange J_{ij} a été redéfinie pour inclure les facteurs de proportionnalité entre moments cinétiques et moments magnétiques, de façon similaire pour la constante d'anisotropie K_a . On suppose que l'axe de facile aimantation coïncide avec la direction du champ B_0 . Pour simplifier l'écriture de l'Hamiltonien, on a délibérément omis l'interaction dipolaire entre moments qui reste négligeable pour des matériaux à forte anisotropie magnétocristalline.

A température nulle, lorsque J_{ij} et K_a sont positifs, le système se trouve dans l'état d'énergie minimum où tous les moments sont dirigés suivant B_0 . Cet **état ordonné ferromagnétique** persiste quand on annule le champ appliqué.

Toujours en champ nul, lorsqu'on applique une température au-delà d'une température critique T_c , l'activation thermique désoriente les moments dans tous les sens, aucun ordre

à grande distance n'est observable. On dit que le système se trouve dans une phase paramagnétique.

Lorsque la température passe en dessous de T_c , on voit apparaître des domaines magnétiques où un ensemble de moments côte-à-côte sont orientés selon $+e_z$ ou $-e_z$. On observe donc un ordre ferromagnétique.

L'ordre est mesuré par un paramètre d'ordre nul dans la phase paramagnétique et non nul dans la phase ferromagnétique. C'est une grandeur proportionnelle à l'aimantation moyenne par site $m = \frac{1}{N} \sum_i \mu_i^z$ selon Oz.

3 Ferromagnétisme dans l'approximation du champ moyen

Le calcul de la fonction de partition pour un système de moments en interaction est un problème difficile dès que $d > 1$. Les propriétés thermodynamiques peuvent être obtenues assez simplement dans l'approximation du champ moyen qui consiste à isoler un moment μ_i et à remplacer les moments interagissant avec μ_i par leur valeur moyenne m . Ce faisant, on néglige les fluctuations, importantes au voisinage de T_c .

Pour simplifier, on étudie le modèle d'Ising avec des spins $1/2$. Chaque moment possède deux états $\mu_i^z = \pm \mu_B$. En supposant que le champ extérieur est appliqué selon la direction de facile aimantation e_z , l'énergie d'une configuration magnétique s'écrit alors :

$$E(\{\mu\}) = -\frac{J}{2} \sum_i \sum_{\langle j,i \rangle} \mu_i^z \mu_j^z - B_0 \sum_i \mu_i^z \quad (2)$$

où $\langle j,i \rangle$ restreint la somme sur j aux **premiers** voisins du site i .

3.1 Champ effectif dans l'approximation du champ moyen

Pour définir un champ effectif agissant sur un moment, on calcule la variation de l'énergie due à une variation de moments :

$$\delta E = E(\{\mu + \delta\mu\}) - E(\{\mu\}) = -\frac{J}{2} \sum_i \sum_{\langle j,i \rangle} (\delta\mu_i^z \mu_j^z + \mu_i^z \delta\mu_j^z) - B_0 \sum_i \delta\mu_i^z \quad (3)$$

or $\sum_i \sum_{\langle j,i \rangle} \delta\mu_i^z \mu_j^z = \sum_i \sum_{\langle j,i \rangle} \mu_i^z \delta\mu_j^z$ pour un système périodisé.

L'expression précédente devient :

$$\delta E = - \sum_i \delta\mu_i^z \left(\sum_{\langle j,i \rangle} J \mu_j^z + B_0 \right) = - \sum_i \delta\mu_i^z B_i^{eff} = \sum_i \delta E_i \quad (4)$$

Le champ effectif s'écrit alors : $B_i^{eff} = \sum_{\langle j,i \rangle} J \mu_j^z + B_0$. L'approximation du champ moyen revient à remplacer dans l'expression précédente μ_j^z par m . En notant z le nombre de premiers voisins de l'atome i , le champ effectif moyen agissant sur tout atome i s'écrit :

$$B^{eff} = J z m + B_0 \quad (5)$$

1. Exercice : prendre un système unidimensionnel de 2 ou 3 sites sur lequel, on applique des conditions aux limites périodiques. Ecrire δE et retrouver l'expression de B^{eff} .

3.2 Energie d'un moment dans l'approximation du champ moyen

D'après (4), comme $\delta E_i = -\delta \mu_i B^{eff}$, on en déduit que $E_i = -\mu_i B^{eff} + C$ où C est une constante d'intégration.

Pour déterminer cette constante, l'énergie moyenne sur l'ensemble des configurations $\{\mu\}$, en négligeant toute corrélation i.e. $\langle \mu_i^z \mu_j^z \rangle \approx \langle \mu_i^z \rangle \langle \mu_j^z \rangle$, s'écrit :

$$\langle E(\{\mu\}) \rangle \approx -\frac{J}{2} \sum_i \sum_{\langle j,i \rangle} \langle \mu_i^z \rangle \langle \mu_j^z \rangle - B_0 \sum_i \langle \mu_i^z \rangle = \sum_i \left(-\frac{J}{2} z m^2 - m B_0 \right) = \sum_i \langle E_i \rangle = \sum_i \left(-m B^{eff} + C \right) \quad (6)$$

2. En réintroduisant la définition de B^{eff} dans (6), montrer que $C = \frac{1}{2} J z m^2$.
3. En déduire l'expression précise de E_i dans l'approximation du champ moyen :

$$E_i = -J z m \mu_i^z + \frac{1}{2} J z m^2 - \mu_i^z B_0 \quad (7)$$

3.3 Fonction de partition

La fonction de partition $Z(m)$ associé au site i est définie par :

$$Z(m) = \sum_{\mu_i^z = \pm \mu_B} \exp(-\beta E_i) \quad (8)$$

4. Donner l'expression de $Z(m)$.

3.4 Energie libre

L'énergie libre par site est donnée par la relation : $f(m) = -k_B T \ln(Z)$.

5. Donner l'expression de $f(m)$.
6. Montrer qu'elle présente un minimum pour la valeur m_0 correspondant à l'état d'équilibre. On a donc :

$$\partial_m f(m_0) = 0 = z J \left(m_0 - \mu_B \tanh \left(\beta (J z m_0 + B_0) \mu_B \right) \right) \quad (9)$$

vérifiant $\partial_m^2 f(m_0) > 0$.

On en déduit que l'aimantation spontanée moyenne est donnée par l'équation implicite suivante :

$$m_0 = \mu_B \tanh \left(\beta (J z m_0 + B_0) \mu_B \right) \quad (10)$$

7. Montrer que l'expression de m_0 peut être obtenue directement en écrivant la moyenne de μ_i^z .

3.5 Résolution graphique de l'équation implicite

En notant $x = \beta(zJm_0 + B_0)\mu_B$, l'équation (10) peut être réécrite en un système d'équations :

$$\begin{cases} m_0 = \mu_B \tanh(x) \\ m_0 = \frac{k_B T}{zJ\mu_B} x - \frac{B_0}{zJ} \end{cases} \quad (11)$$

Ces deux équations couplées peuvent être résolues graphiquement, donnant les valeurs des solutions m_0 .

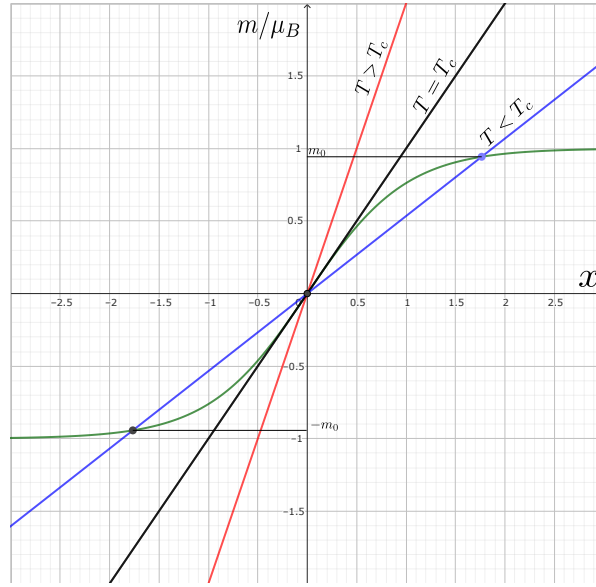


FIGURE 1 – Résolution graphique du système d'équations pour $B_0 = 0$.

En **champ nul**, au-dessous de la température critique T_c , le système d'équations possède 3 solutions $\{-m_0, 0, +m_0\}$.

8. Montrer d'abord que la solution $m_0 = 0$ conduit à un maximum de l'énergie libre et correspond donc à un état instable et que les 2 états m_0 et $-m_0$ correspondent à deux minima de l'énergie libre et sont stables.
9. En **champ nul**, il n'existe qu'une solution $m_0 = 0$ pour $T \geq T_c$. La température T_c est la température pour laquelle la pente initiale des deux courbes est la même. Montrer que $k_B T_c = zJ\mu_B^2$.
10. Montrer que l'on retrouve l'expression précédente en observant que $\partial_m^2 f(m_0) \equiv 0$ quand $T = T_c$.
11. Quand le système est soumis à une induction $B_0 > 0$, il n'existe qu'une solution stable non nulle du signe de B_0 , comment se transforme la figure 1 quand $B_0 > 0$?

3.6 Energie libre de Landau

Au voisinage de $T = T_c$ et en champ faible, m est petit par rapport à μ_B . On peut effectuer un développement limité de l'énergie libre $f(m)$ appelé développement de Landau.

Au 4^e ordre en m et à l'ordre le plus bas en B_0 , avec le D.L. $\ln \cosh(x) \approx \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{12} + \vartheta(x^6)$ et en approximant tout facteur multiplicatif de la forme $\frac{T_c}{T}$ par 1, on montre que

$$f(m) = f_0 + \frac{1}{2}k_B(T - T_c)\left(\frac{m}{\mu_B}\right)^2 + \frac{k_B T_c}{12}\left(\frac{m}{\mu_B}\right)^4 - mB_0 \quad (12)$$

12. On désire maintenant tracer $g(u) = \frac{f(m)-f_0}{k_B T_c}$ où $u = m/\mu_B$ en fonction de u , d'abord en champ nul puis pour un champ de 1T pour différentes températures au voisinage de T_c fixé à 200K, comprises $0.9T_c$ et $1.1T_c$. Reporter les graphes pour $T = 0.9T_c$ et $T = 1.1T_c$.
13. Tracer m_0 correspondant au minimum absolu en fonction de T/T_c , d'abord en champ nul, puis pour un champ de 1T.

3.7 Exposants critiques

Le but est d'examiner l'évolution de m_0 , en champ nul, au voisinage de T_c^- .

14. Reprendre l'expression de m_0 donnée par (10). Comme m_0 est petit par rapport à μ_B , on remplacera $\tanh(x)$ par son D.L. $x - \frac{x^3}{3} + \vartheta(x^5)$. Montrer que $m_0 \approx \sqrt{3}\mu_B \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^{1/2}$. L'aimantation spontanée s'annule en loi de puissance avec un exposant critique $\beta = \frac{1}{2}$.

On applique maintenant un petit champ tel que $\mu_B B_0 \ll k_B T_c$ et $m_0 \ll \mu_B$.

15. Montrer que l'on retrouve la loi de Curie-Weiss $\chi \propto |T - T_c|^{-1}$ au voisinage de T_c^\pm . Elle diverge donc pour $T = T_c$.