IPHY 2A - DS de Magnétisme - Session 1

Tous documents autorisés - Caculatrice autorisée - durée 2h

1 Questions de cours sur les règles de Hund

Faire un tableau donnant les valeurs de L, S, J, leur moment à saturation en unités de μ_B et leur moment effectif en unités de μ_B pour les ions 4f (l=3)supposés isolés :

- 1. Ce^{3+} de configuration $4f^1$,
- 2. Sm^{3+} de configuration $4f^5$.
- 3. Tm^{3+} de configuration $4f^{12}$.

2 Exercice: champ cristallin

Lorsqu'un ion ou un atome est dans un solide, il faut tenir compte de l'intéraction électrostatique de sa distribution électronique de charges avec les charges environnantes dans le cristal.

On rappelle que le potentiel électrostatique généré par 2 cations q > 0 placées en $z = \pm c$ où $c \in \mathbb{R}^+$ s'écrit au voisinage de l'origine O:

$$4\pi\epsilon_0\Phi(x,y,z) = \frac{2q}{c} + \frac{2q}{c}\left(\frac{r}{c}\right)^2 P_2(\cos\theta) + \vartheta\left(\frac{r}{c}\right)^4 \tag{1}$$

On place en O, un ion magnétique dont la configuration électronique est p^1 .

4. Montrer que l'énergie potentielle de l'électron est de la forme :

$$V(x,y,z) = -e\Phi(x,y,z) = C(x^2 + y^2 - 2z^2) + C^{te}.$$
 (2)

Définir la constante C.

5. Quelles sont les symétries laissant invariant le potentiel V(x, y, z)? Argumenter à chaque fois.

On suppose que l'ion p^1 est entouré de cations dans un cristal orthorhombique de paramètres de maille a, b et c.

6. En se limitant aux 6 premiers voisins, montrer que le potentiel au voisinage de O, est de la forme :

$$V(x,y,z) = Ax^2 + By^2 - (A+B)z^2$$
 avec $A \neq B$ tous deux positifs (3)

Définir les constantes A et B.

- 7. Quelles sont les symétries laissant invariant le potentiel V(x, y, z)?
- 8. Rappeler la définition de l'hamiltonien de champ cristallin \hat{H}_{cf} .

Comme $[\hat{H}_{cf}, \hat{L}_z] \neq 0$, les états propres de $\hat{H}_0 + \hat{H}_{cf}$ ne sont plus les orbitales atomiques mais des orbitales hybrides. Elles sont de la forme : $U_x = x f(r)$, $U_y = y f(r)$ et $U_z = z f(r)$ où $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

On rappelle aussi que les états U_x et U_y sont des combinaisons linéaires des 2 orbitales atomiques $\phi_{n,l=1,1}(r,\theta,\phi)$ et $\phi_{n,l=1,-1}(r,\theta,\phi)$. L'orbitale hybride U_z s'identifiant à $\phi_{n,l=1,0}(r,\theta,\phi)$.

- 9. Montrer que chaque orbitale hybride vérifie $\hat{L}^2U_{\alpha} = l(l+1)\hbar^2U_{\alpha}$ avec $\alpha \in \{x,y,z\}$.
- 10. Montrer en particulier que $\langle U_x|\hat{H}_{cf}|U_y\rangle = 0$. On admettra qu'il en est de même pour les autres termes non-diagonaux.
 - Indication : faire l'intégration en coordonnées cartésiennes et utiliser les symétries.
- 11. Calculer les termes diagonaux de \hat{H}_{cf} dans la base U_{α} . On notera $I_1 = \int f^2(r) x^4 d^3r$ et $I_2 = \int f^2(r) x^2 y^2 d^3r = \frac{I_1}{3}$.
- 12. Représenter de manière schématique, les niveaux d'énergies en distinguant les cas 0 < A < B et 0 < B < A.
- 13. Montrer finalement que la mesure du moment orbital selon Oz, $\langle U_{\alpha}|\hat{L}_z|U_{\alpha} \rangle = 0$, s'annule. Vous ferez attention à la qualité de vos argumentations mathématiques. Indication: utiliser les coordonnées cartésiennes et les symétries. On rappelle que $\partial_x f(r) = \frac{x}{r} \partial_r f(r)$ et $\partial_y f(r) = \frac{y}{r} \partial_r f(r)$. On notera $g(r) = \frac{1}{2} \partial_r (f^2(r))$.
- 14. Que peut-on conclure de cette étude?

3 Cylindre Magique

Un cylindre de Halbach (Fig. 1) est idéalement une couronne composée d'aimants permanents dans laquelle l'orientation de l'aimantation tourne, de manière continue, deux fois plus vite que l'angle polaire. Le cylindre est supposé infiniment haut pour que l'on puisse en première approximation, faire des calculs du potentiel magnétique et du champ magnétique en 2D.

Dans tout l'exercice, on suppose que l'aimantation locale dans la couronne garde un module constant, seule son orientation change selon :

$$\mathbf{M}(\theta) = M_s \left(\cos\theta \,\mathbf{e}_r + \sin\theta \,\mathbf{e}_\theta\right) \tag{4}$$

en tout point $r > R_1$ et $r \le R_2$.

15. Dans l'approche coulombienne où on définit des charges magnétiques fictives de volume $\rho_m = -\text{div}\mathbf{M}$ et de surface $\sigma_m = \mathbf{M} \cdot \mathbf{n}$, montrer que le potentiel magnétique est solution de :

$$-\Delta\Phi = \rho_m \tag{5}$$

JC Toussaint

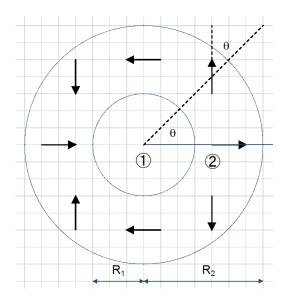


FIGURE 1 – Cylindre de Halbach : la région 1 est vide et la région 2 est aimantée.

- 16. Donner l'expression mathématique de la densité $\sigma_m(r,\theta)$. Localisez-la. Quelle est son unité dans le système MKSA?
- 17. Donner l'expression mathématique de la densité $\rho_m(r,\theta)$. Localisez-la. On rappelle l'expression de la divergence en coordonnées polaires : $\operatorname{div} \mathbf{M}(r,\theta) = 1/r \partial_r(r M_r) + 1/r \partial_\theta(M_\theta)$. Quelle est son unité dans le système MKSA?

On note $\Phi_1(r,\theta)$ le potentiel dans la cavité centrale en tout point où $r < R_1$ et $\Phi_2(r,\theta)$ dans la couronne aimantée en tout point $r > R_1$ et $r \le R_2$ quel que soit θ . La forme générale des solutions en tenant compte des symétries et de la distribution d'aimantation s'écrit :

$$\begin{cases}
\Phi_1(r,\theta) = a_1 r \cos \theta + (b_1/r) \cos \theta \\
\Phi_2(r,\theta) = a_2 r \cos \theta + (b_2/r) \cos \theta + M_s \ln(r/R_2) r \cos \theta
\end{cases}$$
(6)

On admettra que $\Phi_2(R_2, \theta) = 0$ et que le potentiel est identiquement nul pour $r > R_2$.

- 18. Que vaut obligatoirement b_1 ? Argumenter.
- 19. Rappeler les relations de continuité aux interfaces aimant-air. On rappelle l'expression du gradient en coordonnées polaires $\nabla \phi(r,\theta) = \partial_r \phi \mathbf{e}_r + 1/r \partial_\theta \phi \mathbf{e}_\theta$
- 20. Les appliquer pour déterminer les expressions des constantes a_1 , a_2 et b_2 .
- 21. Détermier les expressions du champ magnétique \mathbf{H} et de l'induction magnétique \mathbf{B} en tout point (r, θ) de la cavité et de la couronne. Commentaire.
- 22. Calculer le potentiel magnétique et les composantes du champ magnétique le long de l'axe Ox. Représenter leurs allures.
- 23. Comment est orienté **H** par rapport à l'aimantation **M** sur l'axe Ox dans la partie aimantée.

JC Toussaint