

# Hamiltonien d'Heisenberg sur réseau

$$H = -J \vec{S}_1 \vec{S}_2 \quad J = E_S - E_T$$

molécule diatomique

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad \text{modèle d'Heisenberg}$$

réseau: somme de liaisons

$$H = -\frac{J_1}{2} \sum_{i, \delta_1} \vec{S}_i \vec{S}_{i+\delta_1} - \frac{J_2}{2} \sum_{i, \delta_2} \vec{S}_i \vec{S}_{i+\delta_2} \dots$$

champ magnétique

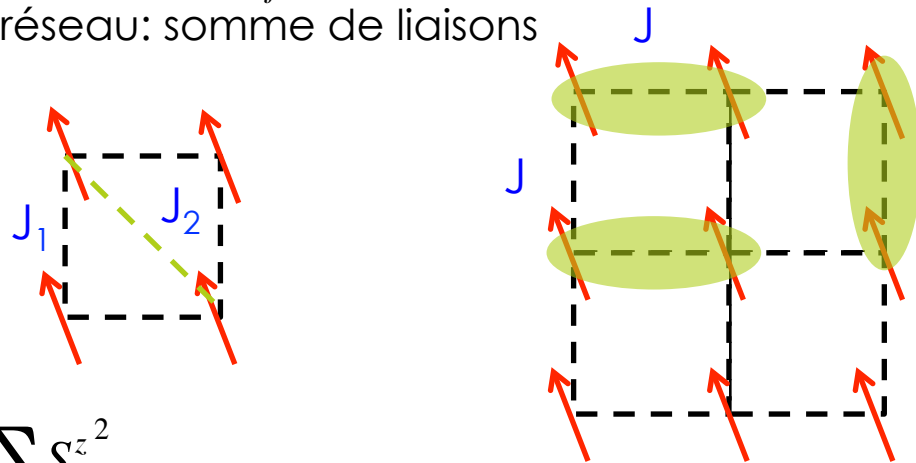
$$\text{si } L=0 \text{ (ions 3d)} \quad H = -\frac{J}{2} \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \vec{S}_j + g\mu_B B \sum_i S_i^z$$

$$\text{si } L \neq 0 \text{ (ions 4f)} \quad H = -\frac{J}{2} (g_J - 1) \sum_{i \neq j} \vec{J}_i \vec{J}_j + g_J \mu_B B \sum_i J_i^z$$

facteur de de Gennes

$$\langle jm_j | (J_z + S_z) | jm_j \rangle = g_J m_j$$

$$\langle jm_j | S_z | jm_j \rangle = -\langle jm_j | J_z | jm_j \rangle + g_J m_j = (g_J - 1) m_j$$



$J$  décroît très rapidement  
i et j 1<sup>er</sup> (voire 2<sup>ème</sup>) voisins

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \vec{S}_j$$

# Hamiltonien d'Heisenberg sur réseau

anisotropie  $H = -\frac{J}{2} \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \vec{S}_j + K \sum_i S_i^z{}^2$  →

- couplage spin-orbite + champ cristallin
- interaction dipolaire
- anisotropie de forme: champ démagnétisant

2 cas limites:

modèle XY  $H = -\frac{J}{2} \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \vec{S}_j$  anisotropie planaire:  
vecteurs dans plan (x,y)

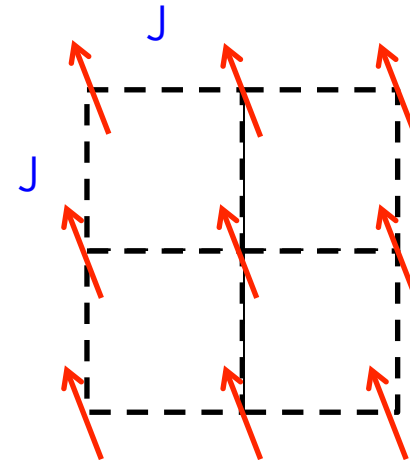
modèle d'Ising  $H = -\frac{J}{2} \sum_{i \neq j} S_i S_j$  anisotropie axiale: scalaires

solutions exactes rares (énergie propres):

- Ising: 1D et 2D (Onsager)
- Heisenberg: 1D Bethe

état fondamental Heisenberg:

- ferro: OK 3D (1D et 2D pas d'ordre à T≠0)
- Antiferro: uniquement 1D (Bethe)



# Ferromagnétisme: champ moyen

but: transformer problème à N sites en problème à 1 site

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad \boxed{J > 0}$$

ferromagnétisme

$\langle \vec{S}_i \rangle$  moyenne de  $S_i$  sur N sites

fluctuations autour de la moyenne

découplage champ moyen:  $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \left[ \left( \vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle \right) + \langle \vec{S}_i \rangle \right] \cdot \left[ \left( \vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle \right) + \langle \vec{S}_j \rangle \right]$

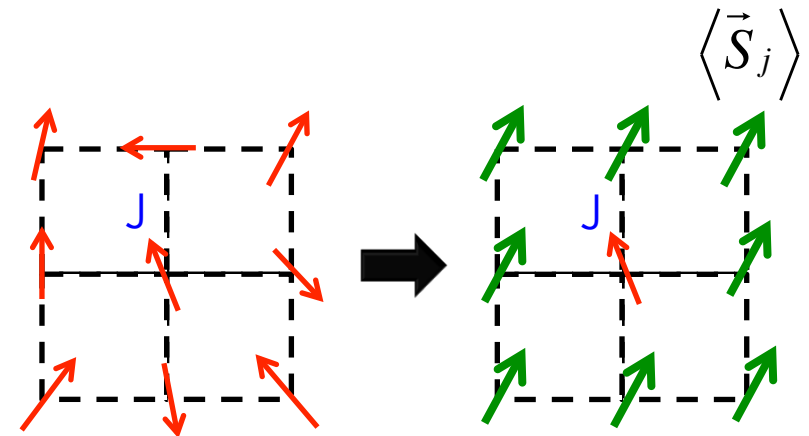
$$= \underbrace{\left( \vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle \right) \cdot \left( \vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle \right)}_{\text{second ordre: approximation de champ moyen}} + \left( \vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle \right) \cdot \langle \vec{S}_j \rangle + \left( \vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle \right) \cdot \langle \vec{S}_i \rangle + \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle$$

second ordre: approximation de champ moyen

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_j \rangle + \vec{S}_j \cdot \langle \vec{S}_i \rangle - \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle$$

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{J}{2} \sum_{i \neq j} \left[ \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_j \rangle + \vec{S}_j \cdot \langle \vec{S}_i \rangle - \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle \right]$$

$$\boxed{H = -J \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_j \rangle - \frac{1}{2} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle}$$

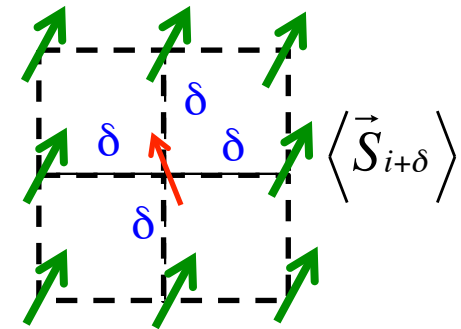


interaction spin-champ moyen

# Ferromagnétisme: champ moyen

$$H_{CM} = -J \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_j \rangle + g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B} + \frac{1}{2} J \sum_{i \neq j} \langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_j \rangle$$

$$H_{CM} = -J \sum_{i, \delta} \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_{i+\delta} \rangle + g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B} + \frac{1}{2} J \sum_{i, \delta} \langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_{i+\delta} \rangle$$



$\delta$ : premiers voisins  
dépend du réseau et dimensionnalité

champ moyen ou effectif  $\vec{B}_m = -J \sum_{\delta} \langle \vec{S}_{i+\delta} \rangle \times \frac{1}{g\mu_B}$

$$H_{CM} = g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}_m + g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B} + \frac{1}{2} J \sum_{i, \delta} \langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_{i+\delta} \rangle = g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot (\vec{B} + \vec{B}_m) + \underbrace{\frac{1}{2} J \sum_{i, \delta} \langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_{i+\delta} \rangle}_{\text{constante: 0 si para, } M^2 \text{ si ferro}}$$

$$H_{CM} = g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot (\vec{B} + \vec{B}_m) + E_M$$

➔ le problème se réduit à une assemblée de spin soumis à champ  $B+B_m$   
 $B_m$  dépend de  $S_i$ : problème auto-cohérent

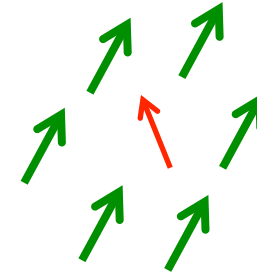
# Aimantation spontanée (B=0)

aimantation  $\vec{M} = -g\mu_B \langle \vec{S}_i \rangle$

aimantation à saturation  $M_s = \mu_B g S$

$$\vec{B}_m = -J \sum_{\delta} \langle \vec{S}_{i+\delta} \rangle \times \frac{1}{g\mu_B} = \frac{zJ}{(g\mu_B)^2} \vec{M} = \gamma \vec{M}$$

$$\gamma = \frac{zJ}{(g\mu_B)^2}$$

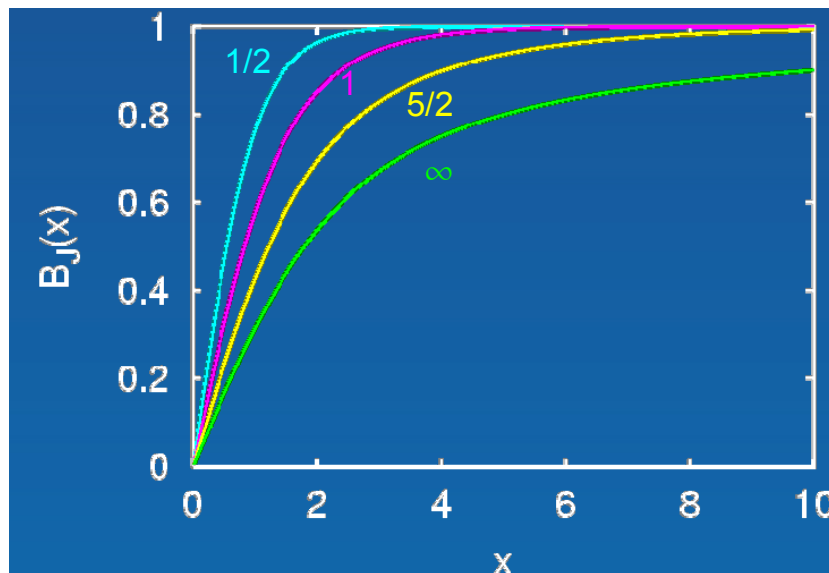


z: nombre de premiers voisins

→ cubique simple: z=6  
carré: z=4  
chaîne: z=2

a champ nul:

$$\frac{M(T)}{M_s} = B_J(x)$$



→  $x = \beta\mu_B g B_m = \beta\mu_B g \gamma M$

$$M = \frac{x}{\beta\mu_B g \gamma}$$

$$\frac{M(T)}{M_s} = \frac{k_B T}{(\mu_B g)^2 \gamma S} x$$

# Aimantation spontanée (B=0)

problème auto-cohérent avec 2 relations:

$$(1) \quad \frac{M(T)}{M_S} = B_S(x)$$

$$(2) \quad x = \beta \mu_B g \gamma M \iff \frac{M(T)}{M_S} = \frac{k_B T}{(\mu_B g)^2 \gamma S} x$$

(1) graphiquement:

(2) analytiquement près de  $T_c$ : M petit

$$\frac{M(T)}{M_S} \approx \frac{(S+1)x}{3}$$

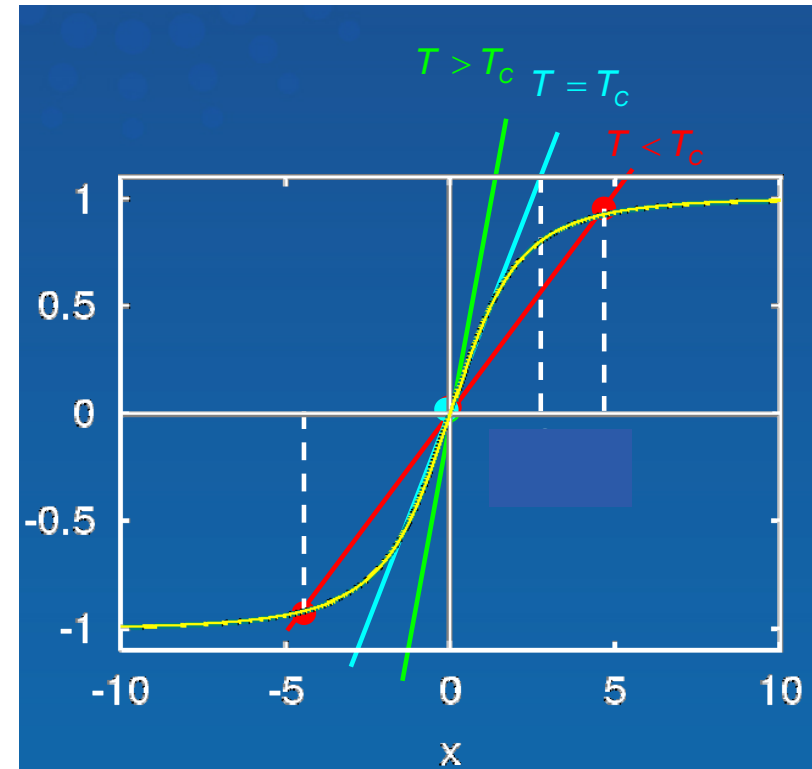
à  $T_c$  les pentes à l'origine sont identiques

$$\frac{S+1}{3} = \frac{k_B T_c}{(\mu_B g)^2 \gamma S}$$

$$k_B T_c = \frac{(\mu_B g)^2 \gamma S(S+1)}{3} = \frac{zJS(S+1)}{3}$$

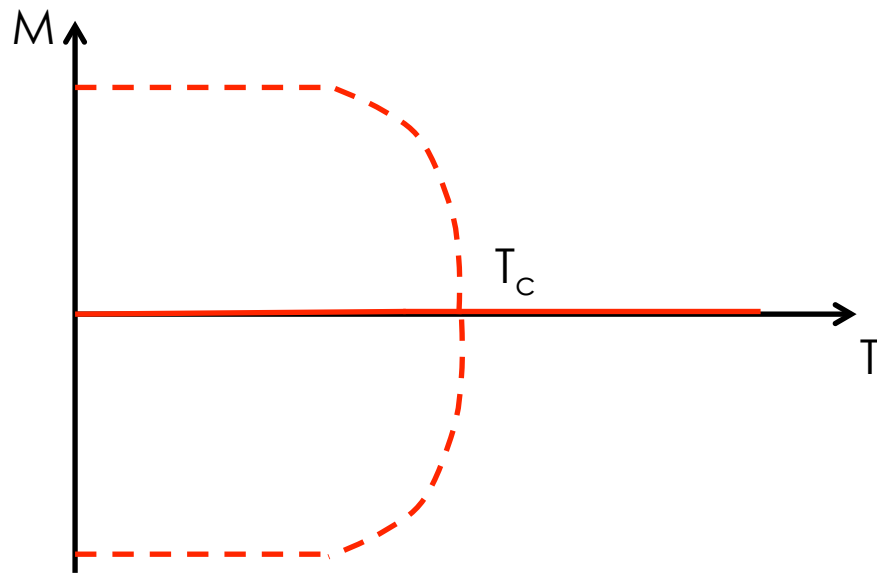
$$k_B T_c \approx J$$

$$k_B T_c \approx \gamma M_S^2$$



$$\gamma = \frac{zJ}{(g\mu_B)^2}$$

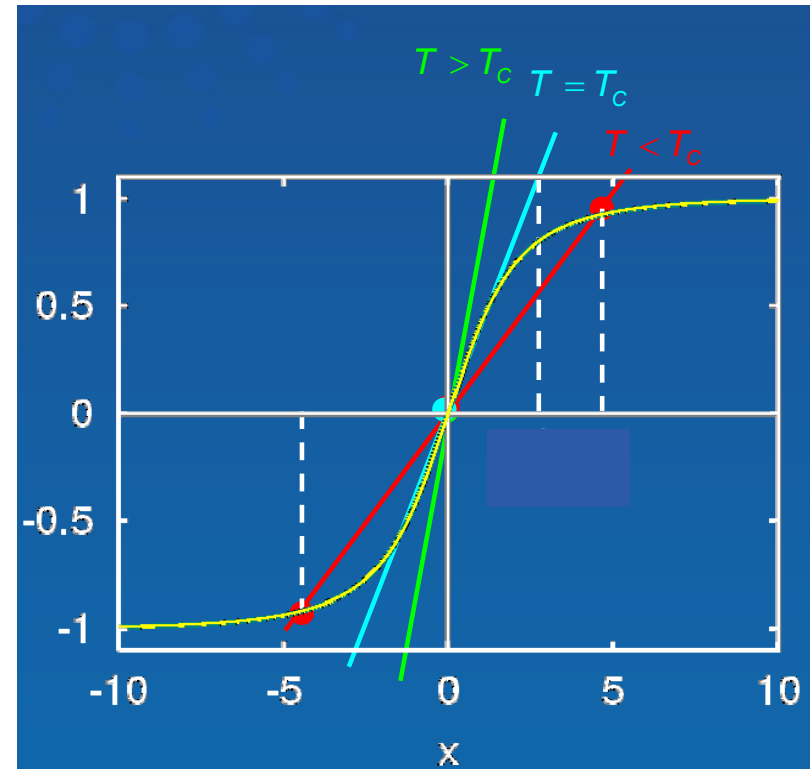
# Transition de phase



$T > T_c$ : 1 solution (0)  
 $T < T_c$ : 3 solutions ( $\pm M(T)$ , 0)

stables

instable



# Aimantation sous $T_c$

$$\begin{matrix} S=1/2 \\ g=2 \end{matrix}$$

$$x = \beta \mu_B g \gamma M = 2 \beta \mu_B \gamma M$$

$$k_B T_c = \frac{(\mu_B g)^2 \gamma S(S+1)}{3} = \mu_B^2 \gamma$$

$$M_S = \mu_B g S = \mu_B$$

$$x = 2 \beta \mu_B \gamma M = \frac{2 T_c M}{T M_S}$$

près de  $T_c$   $\frac{M}{M_S} \rightarrow 0$

$$x \rightarrow 0$$

$$\frac{M}{M_S} = B_{1/2}(x) = \tanh\left(\frac{x}{2}\right) \approx \frac{x}{2} - \frac{1}{3} \left(\frac{x}{2}\right)^3$$

$$\frac{M}{M_S} \approx \left(\frac{T_c}{T} \frac{M}{M_S}\right) - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 \left(\frac{M}{M_S}\right)^3$$

si  $T < T_c$  et  $M \neq 0$ :

$$1 \approx \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3} \left(\frac{M}{M_S}\right)^2$$

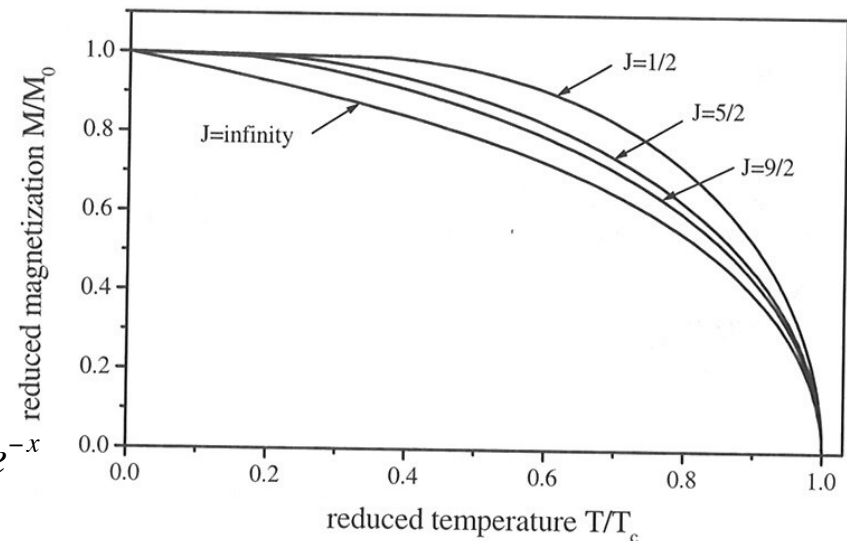
$$\frac{M}{M_S} \approx \sqrt{3 \left(\frac{T_c}{T} - 1\right)}$$

continue à la transition  
2ème ordre

basse température

$$\frac{T}{T_c} \rightarrow 0 \Rightarrow x \rightarrow +\infty$$

$$\frac{M}{M_S} = \frac{e^{\frac{x}{2}} - e^{-\frac{x}{2}}}{e^{\frac{x}{2}} + e^{-\frac{x}{2}}} = \frac{1 - e^{-x}}{1 + e^{-x}} \approx 1 - e^{-x} - e^{-x}(1 - e^{-x}) \approx 1 - 2e^{-x}$$





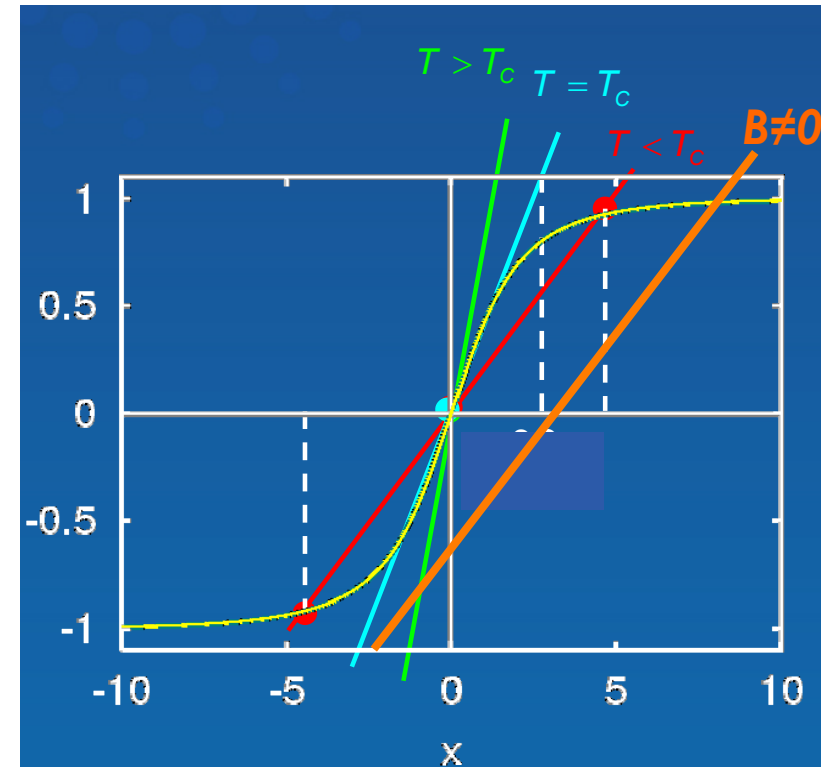
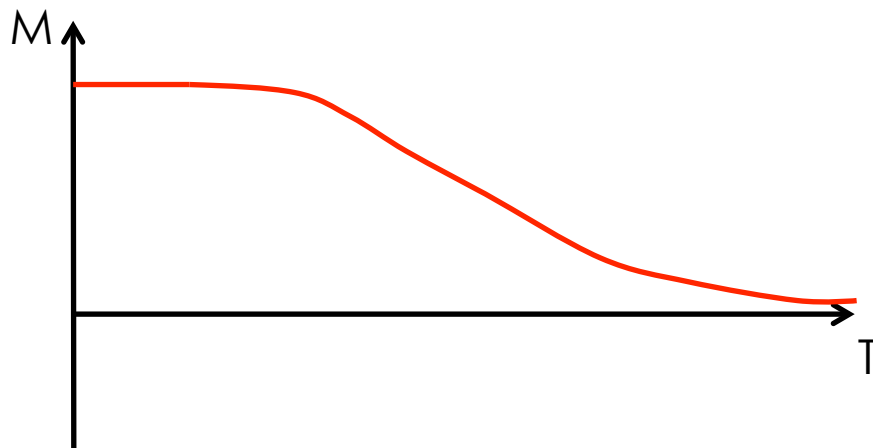
# Effet du champ magnétique

2 relations:

$$(1) \frac{M(T)}{M_s} = B_s(x)$$

$$(2) x = \beta \mu_B g (\gamma M + B) \iff \frac{M(T)}{M_s} = \frac{k_B T}{(\mu_B g)^2 \gamma S} x - \frac{B}{\mu_B g \gamma S}$$

offset:  $\frac{M}{M_s} = 0 \iff x_0 = \frac{B \mu_B g}{k_B T}$



état ferromagnétique à toute température

# Transition de phase

on peut montrer également la présence d'une transition de phase via l'énergie libre F

$$\begin{array}{l} S=1/2 \\ g=2 \end{array}$$

$$H_{CM}^i = 2\mu_B \vec{S}_i \cdot \vec{B}_m + \frac{1}{2} J \sum_{\delta} \langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_{i+\delta} \rangle$$

$$M = -2\mu_B \langle S_i \rangle \quad M_S = \mu_B$$

$$\vec{B}_m = \gamma \vec{M}$$

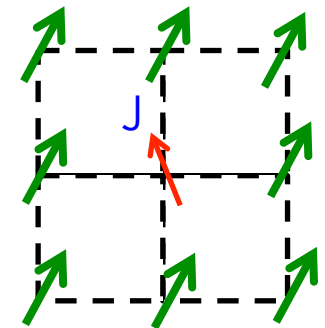
$$U_i = \pm \mu_B \gamma M + zJ \frac{M^2}{8\mu_B^2} \quad \text{avec} \quad k_B T_c = \frac{zJ}{4} \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{k_B T_c}{M_S^2}$$

$$U_i = \pm \frac{k_B T_c M}{M_S} + \frac{1}{2} k_B T_c \left( \frac{M}{M_S} \right)^2 = \pm \frac{k_B T_c M}{M_S} + E_0$$

fonction de partition du site i  $Z_i = \sum_{+-} e^{-\beta U_i} = 2 \cosh \left( \frac{T_c M}{T M_S} \right) e^{-\beta E_0}$

pour N sites indépendants  $Z = Z_i^N = 2^N \cosh \left( \frac{T_c M}{T M_S} \right)^N e^{-N\beta E_0}$

$$F = -k_B T \ln Z = -Nk_B T \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{T_c M}{T M_S} \right) \right] + \frac{1}{2} Nk_B T_c \left( \frac{M}{M_S} \right)^2$$



$$S_i^z = \pm \frac{1}{2}$$

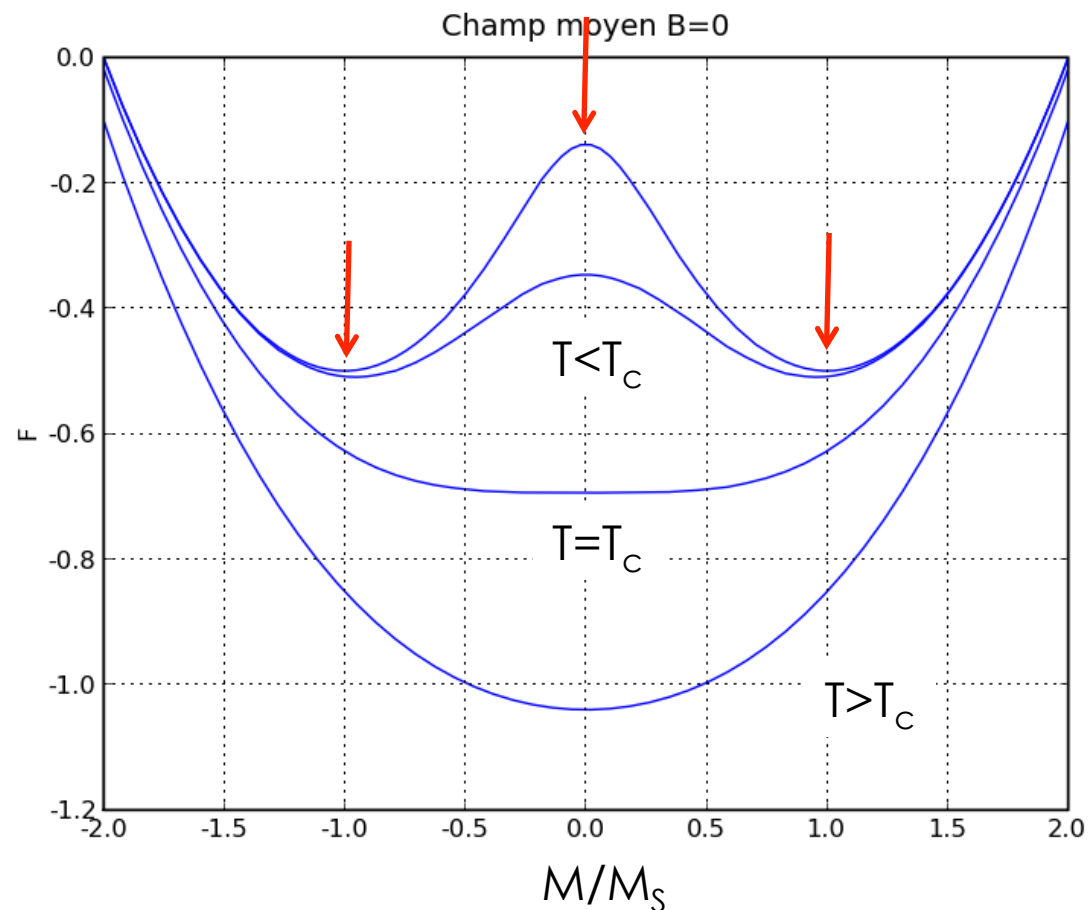
# Transition de phase

$$F = -k_B T \ln Z = -Nk_B T \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{T_c M}{T M_c} \right) \right] + \frac{1}{2} Nk_B T_c \left( \frac{M}{M_c} \right)^2$$

note:  $\frac{\partial F}{\partial M} = 0$

$$\longleftrightarrow \frac{M}{M_s} = \tanh \left( \frac{T_c M}{T M_s} \right)$$

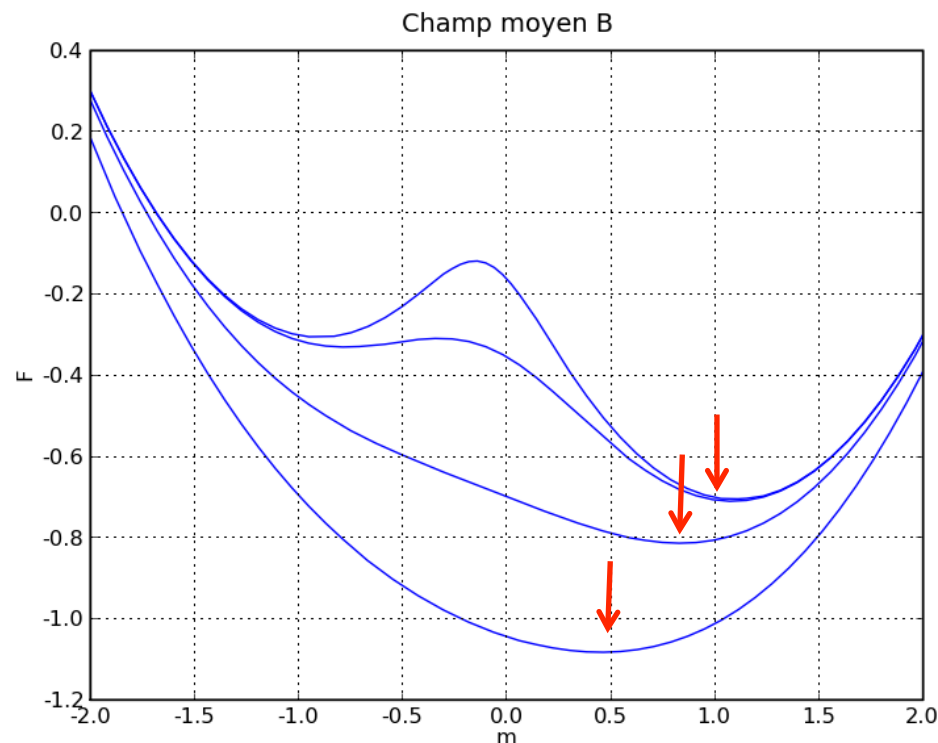
continu à la transition: 2<sup>nd</sup> ordre



# Transition de phase sous champ

$$H_{CM} = 2\mu_B \vec{S}_i \cdot (\vec{B}_m + \vec{B}) + \frac{1}{2} J \sum_{\delta} \langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_{i+\delta} \rangle$$

$$F = -k_B T \ln Z = -Nk_B T \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{T_c M}{T M_S} + \frac{\mu_B B}{k_B T} \right) \right] + \frac{1}{2} Nk_B T_c \left( \frac{M}{M_S} \right)^2$$



$M/M_S \neq 0$  à toute température

# Théorie phénoménologique de Landau

$$F = -k_B T \ln Z = -Nk_B T \ln \left[ 2 \cosh \left( \frac{T_c M}{T M_s} \right) \right] + \frac{1}{2} Nk_B T_c \left( \frac{M}{M_s} \right)^2$$

près de  $T_c$ :  $\frac{M}{M_s} \rightarrow 0$

$$F \approx -Nk_B T \ln 2 - Nk_B T \ln \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{T_c M}{T M_s} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} Nk_B T_c \left( \frac{M}{M_s} \right)^2$$

$$\cosh(x) = 1 + \frac{x^2}{2} + o(x^4)$$

$$\ln(1+x^2) \approx x^2 + o(x^4)$$

$$F \approx -Nk_B T \ln 2 - \frac{1}{2} Nk_B T \left( \frac{T_c M}{T M_s} \right)^2 + \frac{1}{2} Nk_B T_c \left( \frac{M}{M_s} \right)^2$$

$$\Rightarrow F \approx -Nk_B T \ln 2 + \frac{1}{2} Nk_B T_c \left( \frac{M}{M_s} \right)^2 \left( 1 - \frac{T_c}{T} \right) + o \left( \frac{M}{M_s} \right)^4 \quad \text{paramètre d'ordre: } m = \frac{M}{M_s}$$

développement de Landau: 
$$F(m) = -F_0 + am^2 \left( 1 - \frac{T_c}{T} \right) + bm^4$$

transition du second ordre: m est continu à la transition

# Landau: transition du 2<sup>nd</sup> ordre

développement de Landau près de  $T_c$ :

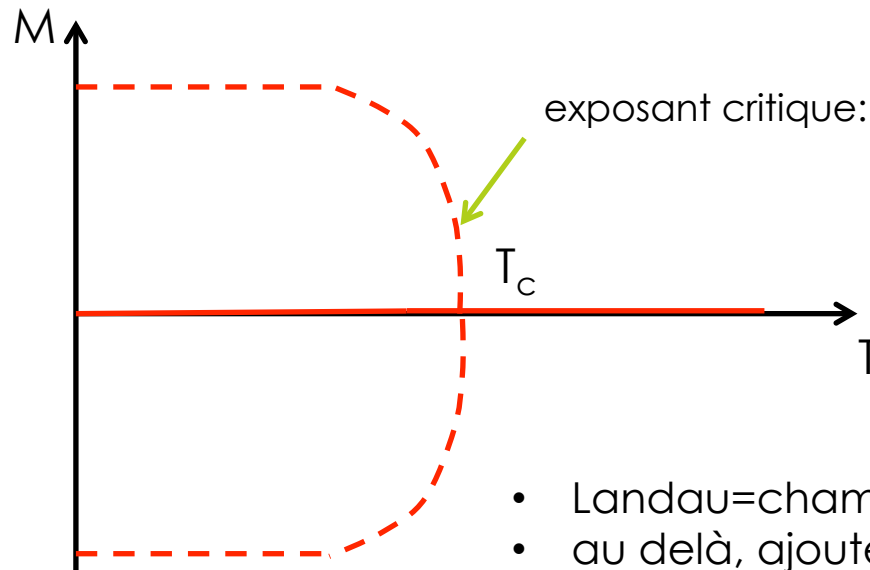
$$F(m) = -F_0 + am^2\left(1 - \frac{T_c}{T}\right) + bm^4$$

$m$ : paramètre d'ordre de la transition

minimisation de  $F$ :  $\frac{\partial F}{\partial m} = 0 \iff 2m\left(1 - \frac{T_c}{T}\right) + 4bm^3 = 0 \iff$

$$\left\{ \begin{array}{l} m = 0 \\ m = \pm \sqrt{\frac{2a}{b} \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right)} \end{array} \right.$$

si  $T > T_c$ :  $m = 0$



exposant critique:  $\frac{1}{2}$  typique champ moyen

- Landau=champ moyen
- au delà, ajouter des dérivées spatiales de  $m$ : fluctuations
- exposants critiques différents

# Susceptibilité: Curie-Weiss

$$\frac{M(T)}{M_S} = B_S(x) \quad \text{susceptibilité magnétique} \quad \chi = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B}$$

$$x = \beta \mu_B g (\gamma M + B) \quad \text{au-dessus de } T_c, \text{ champ faible} \quad \begin{matrix} \beta B \rightarrow 0 \\ \frac{M}{M_S} \rightarrow 0 \end{matrix} \quad \Rightarrow \quad x \rightarrow 0$$

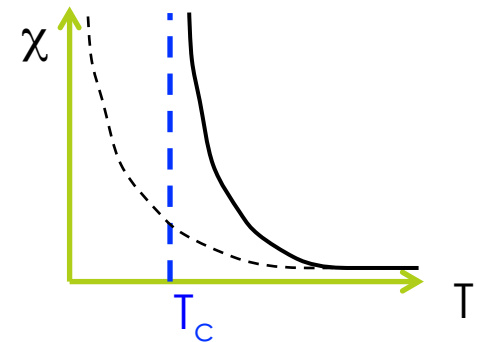
$$\frac{M}{M_S} = B_S(x) \approx \frac{(S+1)x}{3} = \frac{(S+1)\beta \mu_B g (B + \gamma M)}{3} \quad \text{avec: } \boxed{k_B T_c = \frac{(\mu_B g)^2 \gamma S(S+1)}{3}} \quad \Rightarrow \quad \frac{T_c}{M_S} = \frac{\mu_B g \gamma (S+1)}{3k_B}$$

$$M_S = \mu_B g S$$

$$\frac{M}{M_S} \approx \frac{T_c}{T M_S} \left( M + \frac{B}{\gamma} \right) \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{M}{M_S} \left( 1 - \frac{T_c}{T} \right) \approx \frac{T_c}{T} \frac{B}{\gamma M_S} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{M}{M_S} \approx \frac{B}{\gamma M_S} \left( \frac{T_c}{T - T_c} \right)$$

$$\chi = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\mu_0}{\gamma} \frac{T_c}{T - T_c} \quad \text{loi de Curie-Weiss} \quad \boxed{\chi = \frac{C}{T - T_c}}$$

$$C = \frac{\mu_0 T_c}{\gamma} = \frac{\mu_0 (\mu_B g)^2 S(S+1)}{3k_B}$$



divergence de la susceptibilité à  $T_c$

# discontinuité de la chaleur spécifique

les dérivées des fonctions thermodynamiques sont discontinues  
ex: chaleur spécifique magnétique

à champ nul:  $C = \frac{dU}{dT} = \frac{1}{N} \frac{d\langle H_{CM} \rangle}{dT}$

$$\frac{H_{CM}}{N} = \underbrace{\frac{g\mu_B}{N} \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}_m}_{-\gamma M^2} + \underbrace{\frac{1}{2N} J \sum_{i,\delta} \langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_{i+\delta} \rangle}_{\frac{1}{2} \frac{J_z M^2}{(g\mu_B)^2} = \frac{1}{2} \gamma M^2}$$

$$U = -\frac{1}{2} \gamma M^2 \quad \Rightarrow \quad C_m = -\gamma M \frac{dM}{dT}$$

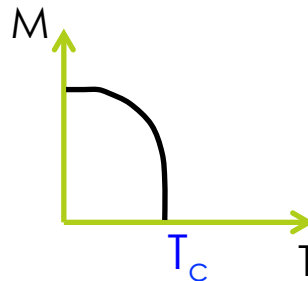
$$\vec{B}_m = \gamma \vec{M}$$

$$\gamma = \frac{zJ}{(g\mu_B)^2}$$

$$\vec{M} = -\frac{g\mu_B}{N} \sum_i \vec{S}_i$$

(1)  $T > T_c$ :  $M=0$  donc  $C_m=0$

(2)  $T=0$ :  $dM/dT=0$  donc  $C_m=0$



(3)  $T \approx T_c$  ( $T < T_c$ )

$$M \approx M_s \sqrt{3 \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right)}$$

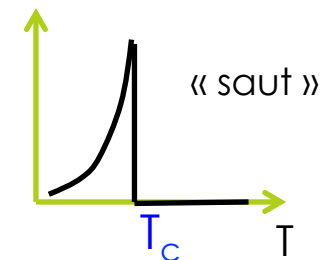
$$\begin{matrix} S=1/2 \\ g=2 \end{matrix}$$

$$C_m(T \approx T_c) \approx -\gamma M_s^2 \sqrt{3 \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right)} \times \frac{1}{2 \sqrt{3 \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right)}} \times 3 \left( -\frac{T_c}{T^2} \right) = \frac{3}{2} \gamma M_s^2 \frac{T_c}{T^2}$$

avec:  $\gamma = \frac{3k_B S T_c}{(S+1) M_s^2}$

discontinuité à  $T_c$

$$C_m(T_c) = \frac{9k_B}{2} \frac{S}{S+1} = \frac{3k_B}{2}$$





# Limites du champ moyen

**Table 5.2** Exact and approximate Curie temperatures for the Ising model (in units of  $zJ/k_B$ ).

lattice	$d$	$z$	mean-field	exact
linear chain	1	2	1	0.000
square	2	4	1	0.567
simple cubic	3	6	1	0.752
bcc	3	8	1	0.794
fcc	3	12	1	0.816

- plus la coordination  $z$  augmente, plus le champ moyen est bon
- plus  $z$  est grand, plus les fluctuations spatiales sont coûteuses

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \left[ \left( \vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle \right) + \langle \vec{S}_i \rangle \right] \cdot \left[ \left( \vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle \right) + \langle \vec{S}_j \rangle \right]$$

cas extrême: 1D



# Limites du champ moyen

$$M(T) \sim (T_c - T)^\beta, \quad \chi(T) \sim (T - T_c)^{-\gamma}$$

	D=1	D=2	D=3	Mean field
Heisenberg	No ordering		$\beta = 0.36$ $\gamma = 1.39$	$\beta = 1/2$ $\gamma = 1$
X-Y			$\gamma = \infty$ Kosterlitz- Thouless $\beta = 0.35$ $\gamma = 1.32$	
Ising	$T_c = 0$ $\chi \sim \exp(-2J/T)$	$\beta = 1/8$ $\gamma = 7/4$	$\beta = 0.32$ $\gamma = 1.24$	