

Examen — 2^e session

Aucun document ni calculatrice ne sont autorisés

Durée de l'épreuve : 2h

Le sujet comprend 4 pages au total

Ferromagnétisme et antiferromagnétisme

On considère un modèle d'Ising en dimension d , constitué de $N \gg 1$ spins d'Ising $s_i = \pm 1$ à la température T , disposés aux nœuds i d'un réseau hypercubique. On notera $\beta = 1/k_B T$, avec k_B la constante de Boltzmann. On appelle h le champ magnétique extérieur (en unité d'énergie) et on ne considère que des interactions entre plus proches voisins. Le hamiltonien du système s'écrit alors

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i, \quad (1)$$

où $\langle i,j \rangle$ représente une somme sur les plus proches voisins i et j .

1 Ferromagnétisme et approximation de champ moyen

Dans cette première partie du problème, la constante de couplage J est positive et on la notera $J = J_F$ avec $J_F > 0$.

1.1 Généralités

- 1/ À quoi correspondent les différents termes du hamiltonien (1)?
- 2/ Soit z le nombre de premiers voisins d'un site. Exprimer z en fonction de la dimension de l'espace d .

1.2 Modèle sans interaction

On commence par négliger les interactions entre spins.

- 1/ Calculer la fonction de partition canonique Z et l'énergie libre F du système.
- 2/ En déduire l'aimantation moyenne $m = \langle s_i \rangle$ par site. Représenter m en fonction du champ appliqué.

1.3 Approximation de champ moyen

On prend maintenant en compte les interactions entre spins.

- 1/ Justifier du fait que dans l'approximation de champ moyen, $s_i s_j \simeq (s_i + s_j)m - m^2$ pour $i \neq j$.
- 2/ En déduire que dans cette approximation, le hamiltonien (1) prend la forme

$$\mathcal{H} = -(zJ_F m + h) \sum_{i=1}^N s_i + \frac{1}{2} N z J_F m^2.$$

Interpréter physiquement le terme $zJ_F m + h$ dans l'expression ci-dessus.

- 3/ Calculer la fonction de partition canonique Z et l'énergie libre F du système en champ moyen.
- 4/ Montrer que l'aimantation moyenne m par site est solution d'une équation d'autocohérence que l'on explicitera.
- 5/ On se place à champ magnétique extérieur nul ($h = 0$). Montrer qu'il existe une transition de phase (paramagnétique-ferromagnétique) pour une température critique T_c que l'on exprimera en fonction des différents paramètres du problème. Que prévoit l'approximation pour le cas $d = 1$? Comparer à la solution exacte du modèle d'Ising à une dimension. Commenter.
- 6/ Au voisinage de la température critique, trouver les valeurs des exposants critiques β et γ dans l'approximation de champ moyen.¹ On rappelle que l'aimantation par site m et la susceptibilité magnétique χ se comporte près du point critique comme

$$m \sim (T_c - T)^\beta, \quad \chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{(h=0)} \sim (T - T_c)^{-\gamma}.$$

2 Antiferromagnétisme

Dans cette seconde partie du problème, la constante de couplage est négative, et on la notera $J = -J_{AF}$ avec $J_{AF} > 0$.

2.1 Généralités

- 1/ Quel est maintenant l'effet du premier terme du hamiltonien (1) sur l'orientation des spins?
- 2/ On se place à température nulle. Justifier que le système se sépare en deux sous-réseaux A et B , tels que les spins prennent la valeur $+1$ ou -1 suivant le sous-réseau auquel ils appartiennent. Ces états sont appelés états de Néel. Combien existe-t-il d'états de Néel?
- 3/ Donner les expressions de l'aimantation et de l'énergie moyennes des états de Néel?
- 4/ Toujours à température nulle, quel est qualitativement l'effet d'un champ magnétique h positif? En comparant l'énergie d'un état de Néel sous champ magnétique et celle d'un état ferromagnétique (où tous les spins sont orientés dans la même direction), en déduire la valeur critique h_c ($T = 0$) du champ qui permet de passer de la phase antiferromagnétique à la phase ferromagnétique.

2.2 Approximation de champ moyen

On appelle $m_A = \langle s_i \rangle$ ($i \in A$) l'aimantation moyenne des spins du sous-réseau A et $m_B = \langle s_i \rangle$ ($i \in B$) l'aimantation moyenne des spins du sous-réseau B .

- 1/ Justifier que $s_i s_j \simeq s_i m_B + s_j m_A - m_A m_B$ ($i \in A, j \in B$) dans l'approximation de champ moyen.
- 2/ En déduire que l'on peut mettre le hamiltonien (1) sous la forme

$$\mathcal{H} = (zJ_{AF}m_B - h) \sum_{i \in A} s_i + (zJ_{AF}m_A - h) \sum_{i \in B} s_i - \frac{1}{2}NzJ_{AF}m_A m_B.$$

- 3/ En déduire que m_A et m_B vérifient le système d'équations auto-cohérentes suivant :

$$\begin{aligned} m_A &= \tanh(\beta[h - \lambda m_B]), \\ m_B &= \tanh(\beta[h - \lambda m_A]), \end{aligned}$$

1. On donne $\tanh x = x - x^3/3 + \mathcal{O}(x^5)$.

où l'on donnera l'expression de la constante λ . Que néglige-t-on en écrivant ces deux équations ?

4/ On se place dans un premier temps à champ magnétique nul ($h = 0$).

- a/ En supposant que $m_A = -m_B$, montrer qu'il existe une transition de phase pour une température T_N (appelée température de Néel) dont on donnera l'expression, entre une phase où $m_A = -m_B = 0$ et une phase où $m_A(T) = -m_B(T) = m_0(T)$. Donner l'allure de $m_A(T)$ en fonction de la température.
- b/ Tracer l'allure de $m_+ = (m_A + m_B)/2$ et de $m_- = (m_A - m_B)/2$. Quelle grandeur est le paramètre d'ordre de la transition antiferromagnétique-paramagnétique ? Que trouve-t-on si l'on mesure l'aimantation moyenne de l'échantillon ?

5/ On cherche maintenant à caractériser l'effet du champ magnétique sur m_A et m_B en calculant la susceptibilité magnétique du cristal définie par $\chi = N \partial m_+ / \partial h$ ($h = 0$). Justifier cette définition.

- a/ On se place tout d'abord à $T > T_N$ et l'on suppose que le champ magnétique est faible (devant quoi ?). Linéariser les équations auto-cohérentes et montrer que

$$\chi(T) = \frac{2C}{T + T_N},$$

où C est une constante que l'on déterminera.

- b/ On se place maintenant à $T < T_N$. On suppose que le champ magnétique h est faible et on écrit les aimantations sur les sites A et B comme $m_A = m_0 + \Delta m_A$ et $m_B = -m_0 + \Delta m_B$, avec $\Delta m_A \ll m_0$ et $\Delta m_B \ll m_0$. En faisant un développement limité des équations auto-cohérentes, montrer que la susceptibilité se met sous la forme²

$$\chi(T) = \frac{N}{k_B} \frac{1}{T \cosh^2 \left(\frac{T_N}{T} m_0(T) \right) + T_N}.$$

Montrer que pour $T > T_N$ on retrouve le résultat précédent. Comment se comporte χ à basse température ? Donner l'allure de la courbe $\chi(T)$ et comparer-là à celle d'un ferromagnétique.

6/ On vient de voir que la mesure de la susceptibilité permet de mettre en évidence une phase antiferromagnétique. Les techniques de diffraction de neutrons, qui sont des particules possédant un spin et donc sensible à l'aimantation des atomes, permettent d'avoir une sonde sensible à l'aimantation locale.

La figure 1 de la page suivante montre les spectres de diffraction des neutrons de l'oxyde de manganèse (MnO), un cristal de structure cubique, qui est un matériau antiferromagnétique de température de Néel $T_N \simeq 120$ K. Commenter ces courbes.

2. On rappelle que $\tanh(a+x) \simeq \tanh a + x / \cosh^2 a$ pour $x \ll 1$.

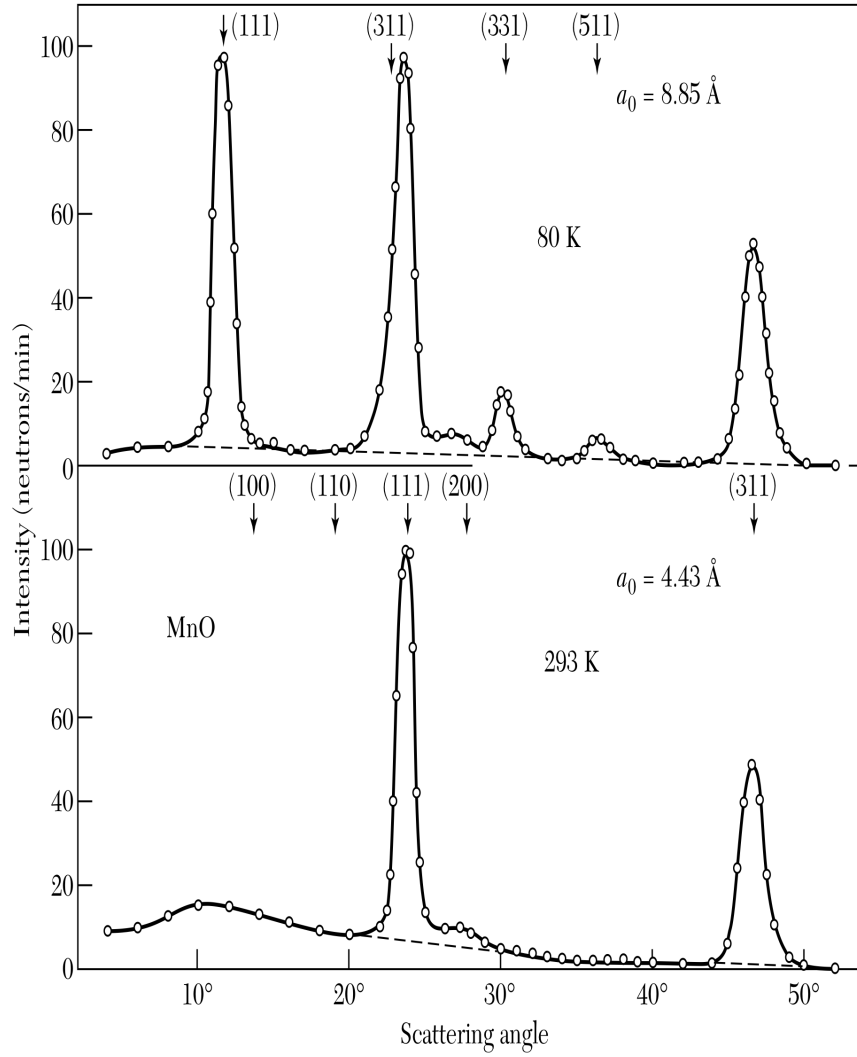


FIGURE 1 – Spectres de diffraction des neutrons de l’oxyde de manganèse (MnO), à $T = 80\text{ K}$ (figure du haut) et à $T = 293\text{ K}$ (figure du bas). Le paramètre de maille a_0 déduit des spectres est indiqué sur chaque figure.