Examen de physique quantique et statistique, 13 Novembre 2015

PHELMA PNS 2A

Modèle d'Ising et transition ferromagnétique

On note en gras ($\mathbf{A}$) les quantités vectorielles et avec un "chapeau" ($\hat{A}$ ou $\hat{\mathbf{A}}$) les opérateurs quantiques. Cette même quantité, sans chapeau, en désigne la valeur quantique moyenne. Une barre ($\bar{A}$) désigne une valeur moyenne statistique sur tout l'échantillon.

N'oubliez pas d'**interpréter** chaque résultat, surtout quand cela est demandé explicitement.

On a

$$\tanh'(x) = 1/(\cosh^2(x))$$

et pour $|x| \ll 1$:

$$\cosh(x) \approx 1 + x^2/2,$$
$$\tanh(x) \approx x - x^3/6.$$

On considère un réseau atomique tri-dimensionnel qui porte sur chaque site i (parmi $N \gg 1$) un moment magnétique $\mathbf{M}_i$, associé à l'observable quantique $\hat{\mathbf{M}}_i = g_s \mu_B \hat{\mathbf{S}}_i/\hbar$. Ici $\hat{\mathbf{S}}_i$ est l'opérateur de spin 1/2 du site i, μ_B le magnéton de Bohr et $g_s = 2$. Deux moments i, j du réseau sont couplés par un terme d'interaction $\hat{H}_{ij} = -\alpha_{ij}\, \hat{\mathbf{M}}_i \cdot \hat{\mathbf{M}}_j$. L'approximation de Heisenberg consiste à supposer que α_{ij} est nul sauf si i et j sont *premiers* voisins du réseau, auquel cas $\alpha_{ij} = \alpha > 0$.

1.) On note z le nombre de premiers voisins d'un atome donné. Que vaut z pour un réseau cubique simple ? Cubique centré ?

2.) En présence d'une interaction entre moments magnétiques, même réduite aux premiers voisins, le modèle de Heisenberg n'a pas été résolu à ce jour. Le modèle d'Ising en est une simplification qui consiste à négliger les termes dans les directions x et y des opérateurs $\mathbf{S}_i$. Autrement dit, on suppose que l'état de spin de chaque site ne peut être qu'un état propre de S_i^z. Cette hypothèse est bien vérifiée dans des matériaux avec une forte anisotropie cristalline. Montrez que l'énergie d'interaction entre sites i, j premiers voisins prend la forme $H_{ij} = -J\sigma_i\sigma_j$ avec $\sigma_i = \pm 1$, où on explicitera la valeur de J. Justifiez que l'énergie d'interaction d'un moment i avec ses premiers voisins s'écrit

$$H(i) = -J\, \sigma_i \sum_{j=1}^{z} \sigma_j.$$

3.) Soit $\mathcal{M}$ la norme du moment magnétique total du système. On note aussi $m = n\,\mu_B = \mathcal{M}/N$ le moment magnétique moyen par atome. Interprétez la signification de n. Pour une valeur de n donnée, calculez le nombre de configurations possibles $\Omega(N,n)$ du système.

4.) En déduire l'entropie $S(N,n)$ dont on donnera une valeur approchée, en approximant $N!$ par $(N/e)^N$ pour $N \gg 1$. Interprétez et étudiez les valeurs limites de S pour $n=0$ et $n=1$.

5.) Pour résoudre le modèle d'Ising en trois dimensions, il faudra une approximation supplémentaire, appelée de *champ moyen*. Nous allons remplacer, dans l'expression de $H(i)$, σ_j par sa moyenne $\bar{\sigma}_j$. Quelle relation y a-t-il entre $\bar{\sigma}_j$ et n ? Montrez que l'énergie interne du système est dans ce cas

$$U = -\frac{1}{2}\, z\, J\, N\, n^2 .$$

6.) Pour des paramètres T et n donnés, écrivez l'expression de l'énergie libre $F = U - TS$.

7.) A l'équilibre thermodynamique et pour T fixée, n va s'ajuster à sa valeur d'équilibre n_e, tel que $\partial F/\partial n\ |_{n=n_e} = 0$. Montrez que n_e est solution de l'équation implicite

$$n_e = \tanh\left(\frac{T_c}{T}\, n_e\right),$$

où on explicitera T_c.

8.) Tracez la fonction tanh et justifiez graphiquement que pour $T < T_c$, la solution $n_e \neq 0$ est possible. Qu'est-ce qui détermine le signe de n_e ? Pour fixer les idées on prendra la solution $n_e > 0$ dans la suite.

9.) Tracez qualitativement $n_e(T)$ pour $T \leq T_c$ en précisant non seulement les valeurs de n_e mais aussi de dn_e/dT dans les deux cas limites $T \to 0$ and $T \to T_c$.

10.) Montrez que pour $T \to T_c$ par valeurs inférieures,

$$m(T) \propto \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^{\beta} .$$

Donnez la valeur de β, appelé l'exposant critique de la transition de phase ferromagnétique.

11.) Quelle est la température de transition ferromagnétique d'un réseau cubique simple avec une constante d'échange entre premiers voisins $J = 10$ meV?

Remarque : sans l'approximation de champ moyen, un calcul bien plus élaboré donnerait $\beta \approx 0.327$.

Adapté d'après Beloritzky, "Exercices et problèmes de mécanique statistique".