TD 6 : Le magnétisme : para et ferro.

Nous nous intéressons à un cristal de molécules magnétique : chaque molécule porte un moment magnétique $\mathbf{M}$. Le cristal baigne dans un champs magnétique uniforme $\mathbf{B} = B\mathbf{u}_z$ (nous choisissons l'axe z selon la direction du champs magnétique). Nous repérons le moment magnétique par son angle avec l'axe z : $\mathbf{M} = M\cos\theta\mathbf{u}_z$

I. INTÉRACTION SEULEMENT AVEC LE CHAMP.

Nous négligeons dans cette partie l'interaction d'une molécule avec ses voisins. L'énergie d'une molécule due au champ magnétique est

$$E = -\mathbf{B}.\mathbf{M} = -BM\cos\theta$$

Nous devons introduire une fonction appelée Bessel d'ordre n (fig. 1). Cette fonction présente pas mal de similarité avec la fonction exponentielle. Elle est définie par

$$I_n(x) = (1/\pi)\int_0^\pi e^{x\cos\theta}\cos(n\theta)d\theta$$

Nous avons seulement besoin de savoir que pour $x \gg 1$

$$I_n(x) \approx \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}}$$

et que pour $x \ll 1$,

$$\begin{aligned} I_0(x) &= 1 + x^2/4 + O(x^3) \\ I_1(x) &= x/2 + O(x^3)\,;\ I_2(x) = x^2/8 + O(x^3) \end{aligned}$$

Enfin, nous savons que $I_0'(x) = I_1(x)$ et $I_1'(x) = (I_0(x) + I_2(x))/2$.

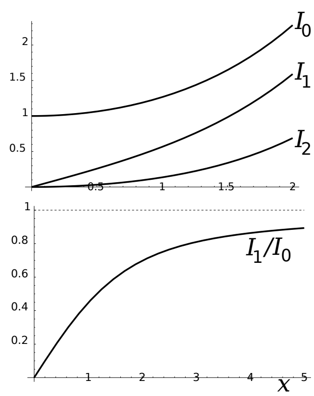

FIG. 1: Les fonctions de Bessel $I_0(x), I_1(x), I_2(x)$ ainsi que le ratio $I_1(x)/I_0(x)$.

A. Fonction de partition.

Ecrire la fonction de partition à une particule $Z_1 = Z_1(B, M, T)$ pour le degrés de liberté θ. Quelle est la densité de probabilité d'observer un angle θ ?

B. Moyennes.

1. Que vaut $\langle\cos\theta\rangle$? Que vaut $\langle\cos\theta\rangle$ à $B = 0$? Donner le développement de $\langle\cos\theta\rangle$ à l'ordre 1 en B en champ faible. Tracer la fonction$\langle\cos\theta\rangle$ en fonction de $B \in [0,\infty]$. Donner également l'expression de $\langle\mathbf{M}\rangle$.
2. Démontrer que $\langle\cos\theta\rangle = (T/M)(1/Z_1)\partial Z_1/\partial B$
3. Démontrer que $\langle\cos^2\theta\rangle = (T/M)^2(1/Z_1)\partial Z_1^2/\partial B^2$. En déduire explicitement $\langle\cos^2\theta\rangle$ en terme de fonctions de Bessel.
4. Que vaut la variance de $Y = \cos\theta$?

II. INTÉRACTION AVEC LES VOISINS EN APPROXIMATION CHAMP MOYEN.

Dorénavant, nous supposons que chaque atome interagit également avec ses plus proches voisins. L'énergie d'intéraction entre deux dipôles magnétiques est $E = -J\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2$. L'énergie de chaque molécule i dans le cristal est donc

$$E_i = -\left(\mathbf{B}.\mathbf{M}_i + \sum_{j\in\text{voisin}(i)} J\mathbf{M}_i\mathbf{M}_j\right) \tag{1}$$

Nous ne pouvons pas écrire la fonction de partition d'une molécule, puisqu'elle dépend des moments des autres molécules. D'autres part, nous ne savons pas calculer directement Z_N, la fonction de partition totale du système. Nous allons utiliser une approximation qui s'appelle champ moyen. Supposons que nous savions calculer Z_N. Dans ce cas, nous pourrons également calculer $\langle\mathbf{M}\rangle$, le moment magnétique moyen par molécule. Nous allons supposer que les molécules qui entourent une molécule i ont tous ce moment magnétique moyen (on néglige donc les fluctuations de celles-ci) et on essaie alors de calculer la fonction de partition Z_1 d'une molécule par l'expression (1) qui s'écrit maintenant

$$\begin{aligned} E_i &= -(\mathbf{B}.\mathbf{M}_i + nJ\mathbf{M}_i\langle\mathbf{M}\rangle) \\ &= -B'M\cos\theta \end{aligned}$$

où

$$B' = B + nJM\langle\cos\theta\rangle$$

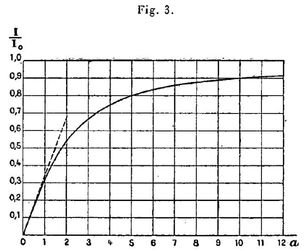

FIG. 2: Le calcul original de Langevin en 1905 : la courbe tracer pour le moment magnétique moyen correspond à la fontion de langevin $\coth x - 1/x$. [Langevin, Annale de Chimie et de Physique, 1905].

où n est le nombre de plus proche voisin (8 dans un cristal cubique face centrée). On peut refaire exactement les mêmes calcul qu'avant, *avec* en plus la condition de self-consistence : la valeur moyenne du moment magnétique que l'on obtient doit correspondre à la valeur moyenne des voisins qu'on avait injectée dans l'expression de l'énergie.

1. Utiliser les résultats de la section précédente pour obtenir une équation donnant $\langle \cos\theta \rangle$.
2. Démontrer graphiquement que même en champ nul $B = 0$, On peut avoir $\langle \cos\theta \rangle \neq 0$, si $T < T_c$ où T_c est une température critique qu'il faut calculer.
3. Démontrer que légérement en dessous de la température de transition, $T = T_c - \epsilon$,
$$\langle \cos\theta \rangle \sim \sqrt{\epsilon/T_c}$$

III. LE CALCUL DE LANGEVIN.

Dans les deux parties précédentes, nous avons négligé le degrès de liberté de rotation ϕ de la projection du moment magnétique dans le plan xy.

A. Le paramagnétisme.

Obtenir la fonction de parition et montrer que dans ce cas, sans interaction avec les voisins,

$$\langle \cos\theta \rangle = \coth\left(BM/T\right) - BM/T$$

Pour cela, il faut juste noter que la probabilité d'observer le dipôle magnétique dans la direction θ,ϕ est

$$p(\theta,\phi)d\theta d\phi = (1/Z)e^{-E(\theta)}\sin\theta d\theta d\phi$$

L'ajout du terme en $\sin\theta$ vient évidemment de la transformation des coordonnées en sphérique, puisque pour la sphére unité, l'élément de surface $dS = \sin\theta d\theta d\phi$.

B. Le ferromagnetisme.

Montrer que dans le cas d'intéraction avec les voisins, nous avons comme d'habitude une température de transition ferromagnétique T_c'. Montrer alors que $T_c' = 2T_c$, c'est à dire que pour un système avec plus de degrès de liberté, l'ordre magnétique peut exister jusqu'à des température plus haute.

IV. RÉFLEXIONS SUR LE MODÈLE.

Pour résoudre le modèle du ferromagnétisme, nous avons utilisé une approximation, qu'on appelle champ moyen. Le modèle du paramagnétisme (et sa solution) a été proposé par Paul Langevin en 1905. Le modèle de ferro-magnétisme a été proposé par Ising en 1920. Le modèle est assez difficile à résoudre exactement, sauf à une dimension. A deux dimensions (et en champ nul) le modèle est très difficile est sa solution a été obtenu en 1940 par Onsanger. A trois dimensions ou plus, le modèle reste un défi pour les physiciens et des générations de scientifiques s'y sont affrontés sans résultat. Beaucoup d'approximations existe pour cerner la transition.

L'existence de la transition de phase posait un problème aux pères fondateurs : la fonction de partition, et donc l'énergie libre, sont des superposition d'exponentiel, des fonctions on ne peut plus lisse. Or, pedant les transitions de phase, l'énergie libre ou une de ses dérivées est discontinue. Comment la somme de fonctions exponentielles peut donner une fonction discontinue ? C'est pour cette raison que le modèle d'Ising a joué un rôle si important dans le développement de la physique statistique.

L'approximation champ moyen que nous avons vu tend à trop négliger les fluctuations. A une dimension, les fluctuations sont tellement grandes que l'ordre magnétique ne peut pas exister, et l'approximation est fausse. A trois dimensions, le champs moyen n'est pas trop mauvais.