

Examen — 1^{re} session

Aucun document n'est autorisé

Durée de l'épreuve : 2h

Le sujet comprend 3 pages au total

1 Magnétisme itinérant

On considère un gaz d'électrons libres (spin 1/2, masse m) confinés dans une boîte tri-dimensionnel de volume $V = L^3$ à la température T . On rappelle que les électrons étant des fermions, ils obéissent à la statistique de Fermi-Dirac. En considérant des conditions aux bords périodiques, les niveaux d'énergie électroniques sont donnés par

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m},$$

où le vecteur d'onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ est quantifié selon $k_i = 2\pi n_i/L$ avec n_i un entier relatif ($i = x, y, z$), et où \hbar est la constante de Planck réduite. On se place dans la suite du problème à la limite thermodynamique, et l'on notera $\mu(T)$ le potentiel chimique à la température T et $E_F = \mu(T = 0)$ l'énergie de Fermi.

1/ Montrer que la densité d'état a pour expression

$$\rho(E) = KV\sqrt{E}, \quad (1.1)$$

où K est une constante que l'on déterminera.

2/ Donner (sans démonstration) l'expression du nombre moyen d'occupation $f(E)$ d'un état d'énergie E . Quelle est l'expression de $f(E)$ à température nulle ? Représenter $f(E)$ pour (i) $T \neq 0$ et (ii) pour $T = 0$.

On se place dans la suite du problème à température nulle ($T = 0$).

3/ Donner l'expression du nombre moyen de particule N . En déduire l'expression de l'énergie de Fermi E_F en fonction de la densité électronique.

Le gaz d'électrons est maintenant soumis à un champ magnétique statique et uniforme \mathbf{B} .

4/ Justifier brièvement du fait que les densités d'états des spins up (\uparrow) et down (\downarrow) s'écrivent

$$\rho_{\uparrow}(E) = \frac{1}{2}\rho(E - \mu_B B), \quad (1.2a)$$

$$\rho_{\downarrow}(E) = \frac{1}{2}\rho(E + \mu_B B), \quad (1.2b)$$

où ρ est la densité d'états (1.1) en l'absence de champ magnétique, et où μ_B est le magnéton de Bohr. On rappelle que le moment magnétique $\boldsymbol{\mu}$ de l'électron est relié à son spin $\mathbf{s} = \pm\hbar/2$ par la relation $\boldsymbol{\mu} = -g_e\mu_B\mathbf{s}/\hbar$ avec $g_e = 2$ le facteur gyromagnétique de l'électron.

5/ En déduire une expression de l'aimantation volumique moyenne M en fonction des paramètres du problème. On supposera que l'on se trouve à champ magnétique faible et l'on fera donc une expansion au premier ordre en champ des densités d'états par état de spin (1.2).

6/ Calculer la susceptibilité magnétique du système $\chi = (\partial M/\partial B)_{B=0}$ [on pourra exprimer le résultat en fonction de la densité d'état au niveau de Fermi, $\rho(E_F)$] ? Le système est-il diamagnétique, paramagnétique, ou ferromagnétique ?

2 Modèle de Ising et approximation de Bethe-Peierls

On considère un modèle de Ising en dimension d , constitué de $N \gg 1$ spins de Ising $s_i = \pm 1$ à la température T , disposés aux noeuds 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

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

où $\langle i,j \rangle$ représente une somme sur les plus proches voisins i et j , et où $J > 0$.

2.1 Approximation de champ moyen

- 1/ À quoi correspondent les différents termes de cet hamiltonien ? On notera z le nombre de premier voisin d'un site. Exprimer z en fonction de la dimension de l'espace d .
- 2/ On commence par négliger les interactions entre spins. Calculer la fonction de partition et l'énergie libre du système. En déduire l'aimantation moyenne $m = \langle s \rangle$ par site. Représentez m en fonction du champ.
- 3/ On prend maintenant en compte les interactions entre spins. Montrer que le champ effectif vu par un spin dans l'approximation de champ moyen s'écrit $h_{\text{eff}} = h + h_m$, où $h_m = zJm$ est appelé champ moléculaire. Justifier brièvement cette dénomination. Montrer que l'aimantation moyenne $m = \langle s \rangle$ par site est solution d'une équation d'autocoherence que l'on explicitera.
- 4/ 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. Que prévoit l'approximation de champ moyen pour le cas $d = 1$? Pour le cas $d = 2$?
- 5/ Au voisinage de la température critique, trouver les valeurs des exposants critiques β et γ dans l'approximation de champ moyen. On rappelle que l'aimantation par site m et la susceptibilité magnétique χ se comporte près du point critique comme

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

2.2 Approximation de Bethe-Peierls

Pour améliorer les résultats de l'approximation de champ moyen, Bethe et Peierls ont proposé en 1935 une approche un peu plus sophistiquée. On considère un sous-système \mathcal{C} du réseau de spins, constitué d'un spin que l'on notera s_0 et de sa couronne de proches voisins notés s_i avec $i = 1, \dots, z$. On note n_+ le nombre de spin de cette couronne qui sont dans l'état $s_i = +1$ et n_- le nombre de ceux dans l'état $s_i = -1$.

On décrit le hamiltonien du système de la façon suivante :

- Les interactions entre le spin s_0 et ses proches voisins sont décrites de manières exactes.
- Les interactions entre les spins s_i ($i = 1, \dots, z$) et le reste du système sont décrites comme en champ moyen par un champ moléculaire h_m que l'on ne connaît pas.

- 1/ Donner une relation simple entre n_+, n_- et z .
- 2/ Montrer que l'énergie \mathcal{H}_C du sous-système \mathcal{C} peut se mettre sous la forme $-\beta \mathcal{H}_C(n_+, n_-, s_0) = (H + H_m + Ks_0)(n_+ - n_-) + Hs_0$, où l'on a défini les grandeurs sans dimension $K = \beta J, H = \beta h$ et $H_m = \beta h_m$.

3/ On définit la probabilité jointe $P(s_0 = s, n_+ = n)$ pour avoir à la fois $s_0 = s$ et $n_+ = n$. Montrer que l'on a

$$P(s_0 = s, n_+ = n) = \frac{z!}{n!(z-n)!} \frac{1}{Z_C} e^{(H+H_m+Ks)(2n-z)+Hs}, \quad (2.1)$$

où Z_C est la fonction de partition de \mathcal{C} que l'on ne cherchera pas à calculer.

4/ Montrer que l'on a $\langle s_0 \rangle = \sum_{n=0}^z [P(s_0 = +1, n_+ = n) - P(s_0 = -1, n_+ = n)]$.

5/ On cherche maintenant à exprimer l'aimantation moyenne sur un site en fonction des probabilités jointes $P(s_0 = s, n_+ = n)$. On définit pour cela la grandeur \mathcal{S} comme $\mathcal{S} = \sum_{i=1}^z s_i$.

(i) Montrer que la valeur moyenne de \mathcal{S} s'écrit $\langle \mathcal{S} \rangle = z \langle s_0 \rangle$. On le justifiera soigneusement.

(ii) Exprimer \mathcal{S} en fonction de n_+ et z . En déduire une expression de $\langle \mathcal{S} \rangle$ en fonction des $P(s_0 = s, n_+ = n)$ (on ne cherchera pas à calculer la somme discrète apparaissant dans le résultat).

(iii) Déduire des deux relations précédentes l'équation

$$z \sum_{n=0}^z P(s_0 = 1, n_+ = n) = \sum_{n=0}^z n [P(s_0 = +1, n_+ = n) + P(s_0 = -1, n_+ = n)]. \quad (2.2)$$

6/ En utilisant l'équation (2.2) et l'expression des probabilités jointes (2.1), montrer que le champ moléculaire H_m doit satisfaire la relation

$$\frac{H_m}{z-1} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\cosh(H_m + H + K)}{\cosh(H_m + H - K)} \right). \quad (2.3)$$

7/ On suppose maintenant que le champ magnétique extérieur est nul ($H = 0$). Discuter graphiquement les solutions de l'équation auto-cohérente sur le champ moléculaire h_m . Montrer en particulier qu'il existe une transition de phase pour une température critique T_c donnée par

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln \left(\frac{d}{d-1} \right)}. \quad (2.4)$$

8/ On rappelle que la résolution exacte du modèle d'Ising en dimension $d = 2$ donne $k_B T_c / J = 2 / \ln(1 + \sqrt{2})$. Les méthodes numériques permettent de calculer des valeurs précises de $k_B T_c / J$ données dans le tableau 1. Compléter ce tableau et discuter les résultats obtenus.

TAB. 1 – Valeurs de $k_B T_c / J$ en fonction de d pour un réseau hypercubique.

d	Valeur exacte	Champ moyen	Bethe-Peierls
1			
2			
3	4.54545		
4	20/3		

9/ Discutez brièvement l'approximation de champ moyen (nature, validité...).

2.3 Formulaire mathématique

- $\tanh x \simeq x - x^3/3$ pour $x \ll 1$
- $\tanh^{-1} x = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+x}{1-x} \right)$
- $\sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} x^n y^{N-n} = (x+y)^N$ (formule du binôme)
- $\sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} n x^n y^{N-n} = Nx(x+y)^{N-1}$