

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Série No. 14

27 Mai 2025

But de cette série : acquérir les notions de base du magnétisme dans le solides

1. Règles de Hund

Considérer un atome à plusieurs électrons. Pour des électrons équivalents (mêmes n et l) on peut définir les grandeurs suivantes (couplage LS) :

$$\begin{aligned}\mathbf{L} &= \sum \mathbf{l}_i && \text{moment cinétique orbital total} \\ \mathbf{S} &= \sum \mathbf{s}_i && \text{moment cinétique intrinsèque (spin) total} \\ \mathbf{J} &= \mathbf{L} + \mathbf{S} && \text{moment cinétique total}\end{aligned}$$

Les règles de Hund établissent que des électrons appartenant à la même couche occupent les orbitales d'une façon telle que l'état fondamental est caractérisé par les points suivants :

- i $|\mathbf{S}| = S = |\sum m_s|$ doit être le plus grand possible (tout en respectant le principe d'exclusion de Pauli) ;
- ii $|\mathbf{L}| = L = |\sum m_l|$ doit être le plus grand possible (tout en respectant le principe d'exclusion de Pauli et i) ;
- iii $|\mathbf{J}| = J = L + S$ pour une couche plus qu'à moitié remplie,
 $|\mathbf{J}| = J = |L - S|$ pour une couche moins qu'à moitié remplie.

Notation : $(2S+1)L_J$. Convention :

L	0	1	2	3	4	5
symbole	S	P	D	F	G	H

Appliquer les règles de Hund pour déterminer l'état fondamental de :

- (a) O (oxygène) dans la configuration $1s^2 2s^2 2p^4$;
- (b) V (vanadium) dans la configuration $[Ar] 3d^3 4s^2$;
- (c) Eu²⁺ (europium) dans la configuration $[Xe] 4f^7$.

2. Interaction dipôle-dipôle vs interaction d'échange

Un dipôle de moment magnétique μ_1 placé à l'origine d'un système de coordonnées génère dans son environnement un champ magnétique

$$\mathbf{B}_1(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3(\mu_1 \cdot \mathbf{r})\mathbf{r} - r^2 \mu_1}{r^5}$$

Considérer un deuxième dipôle de moment magnétique μ_2 à une distance r_0 du premier. L'énergie d'interaction E_{dd} entre les deux dipôles est donnée par

$$E_{dd} = -\mu_2 \cdot \mathbf{B}_1$$

La configuration énergétiquement plus favorable est celle avec les deux dipôles coaxiaux et orientés dans le même sens à une distance r_0 . L'énergie d'interaction est :

$$E_{dd} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2\mu_1\mu_2}{r_0^3}$$

- (a) Considérer le Fe (bcc, $a = 2.866 \text{ \AA}$). Calculer la distance r_0 entre premiers voisins.
- (b) En utilisant la valeur de r_0 trouvée au point précédent et avec $\mu_1 = \mu_2 = 2.2\mu_B$, calculer l'énergie maximale d'interaction entre les dipôles, en eV. A quelle température correspond cette énergie ? ($\mu_0 = 4\pi 10^{-7} \text{ T m A}^{-1}$, $\mu_B = 9.27 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$; $1 \text{ J} = 6.24 10^{18} \text{ eV}$; $k_B = 8.617 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$).
- (c) La température de Curie (température critique à laquelle le matériau perd son aimantation spontanée) pour le Fe est 1043 K. Est-ce que l'interaction dipôle-dipôle peut être à l'origine du ferromagnétisme du Fe ?
- (d) Dans l'approximation de champ moyen on peut lier la température de Curie à la constante d'échange J_{ex} (S est le moment angulaire associé à chaque atome, ν est le nombre de premiers voisins) :

$$T_c = \frac{S(S+1)\nu J_{\text{ex}}}{3k_B}.$$

Evaluer la constante d'échange J_{ex} pour le Fe à partir de la valeur expérimentale de T_c . Le moment magnétique associé à un atome de Fe dans le bulk est égal à $2.2\mu_B$, ce qui correspond à $S \approx 1$.

3. Ferromagnétisme - modèle de bande

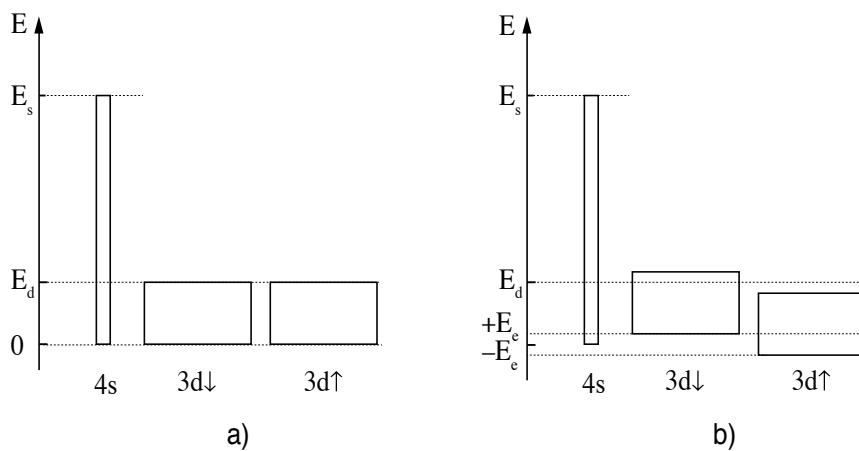
La figure a) schématise la densité d'états électroniques des métaux tels que le cuivre (Cu) et le nickel (Ni), au dessus du point de Curie : la bande issue des niveaux $3d$ - décomposée en deux sous-bandes relatives aux spins \uparrow et \downarrow - est juxtaposée à la bande des niveaux $4s$. On admettra pour simplifier que les densités d'états sont constantes dans les différentes bandes :

$g(E) = C_1$ (intervalle $0 < E < E_s$) pour la bande issue des niveaux $4s$;

$g(E) = C_2$ (intervalle $0 < E < E_d$) pour chaque sous-bande issue des niveaux $3d\uparrow$ et $3d\downarrow$.

On rappelle que la bande d peut contenir au plus 10 électrons par atome ($5\uparrow$ et $5\downarrow$). On négligera les effets de la température sur la densité d'états en considérant que la fonction de Fermi $f(E) = 1$ pour $E < E_F$ et $f(E) = 0$ pour $E > E_F$.

- (a) Préciser la position du niveau de Fermi du Cu et du Ni, en sachant que l'on doit placer 11 électrons par atome pour le Cu et 10 pour le Ni, à l'aide des valeurs numériques suivantes : $E_s = 14 \text{ eV}$, $E_d = 5 \text{ eV}$. Pour les deux matériaux, la bande s n'est pas entièrement remplie.
- (b) Combien reste-t-il de places disponibles dans la bande d du Ni, respectivement du Cu ?
- (c) Au dessous du point de Curie, l'interaction d'échange entre les spins a pour effet de décaler les sous-bandes d de $\pm E_e$ par rapport à leur position initiale (fig. b). Evaluer dans le cas du Ni la différence de population entre états \uparrow et états \downarrow avec $E_e = 0.27 \text{ eV}$.



4. Questions de compréhension - Chapitres 8 et 9

- (a) Citer trois paramètres physiques qui détruisent l'état supraconducteur.
- (b) Décrire l'effet Meissner. Expliquer pourquoi cet effet est à l'origine de la lévitation magnétique.
- (c) Est-ce que le champ magnétique ne pénètre pas du tout dans un supraconducteur de type I?
- (d) Où circule le courant dans un supraconducteur ?
- (e) Expliquer les bases de la théorie BCS.
- (f) Quelle expérience prouve que la supraconductivité est médiée par les phonons ?
- (g) Quels sont le moment de spin et le moment orbital du Co ($[Ar]3d^74s^2$) ? Comment les deux sont-ils alignés ? Dans la limite de haute température et faible champ, quelle est la susceptibilité d'un ensemble d'atomes de Co non-interagissant en fonction de la température ?
- (h) Quelles sont les contributions à la susceptibilité magnétique totale d'un métal ? Quelle est leur origine et quel est le signe de la susceptibilité ?
- (i) Quelle est l'interaction à l'origine du ferromagnétisme ? Illustrer-la dans le cas de la molécule d'hydrogène.
- (j) Expliquer le modèle de bande du ferromagnétisme.