

PHY6505: Physique de la matière condensée

Cours 15 Interactions magnétiques

François Schiettekatte
Université de Montréal
Automne 2009

1

Résumé

- Interaction dépendante du spin
 - États singulet et triplet
 - Formule de Heitler-London
 - Modèle d'Heisenberg

2


Interaction dépendante du spin

- Interaction dipôle-dipôle:

□ Trop faible $\sim \frac{(g\mu_B)^2}{r^3} \sim \alpha^2 \left(\frac{a_0}{r}\right)^3 \cdot 13.6eV$

- Dépend de $\vec{R}_1 - \vec{R}_2$

- Imaginons la situation la plus simple possible

- Deux protons: 

- Fonctions d'onde des e-: $\phi_1(\vec{r}), \phi_2(\vec{r})$

- Lorsqu'ils s'approchent: recouvrement, perturbation

- On considère un faible rapprochement, pas d'excitation

3

États singulet et triplet

- Les e- possèdent un degré de liberté que nous n'avons pas traité formellement: spin
- L'hamiltonien ne dépend pas explicitement de celui-ci donc on peut écrire les fonctions propres du système comme une combinaison des fonctions propres de spin $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$
- soit:

□ État singulet: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), S=0, S_z=0$

□ État triplet: $\begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle, S=1, S_z=1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), S=1, S_z=0 \\ |\downarrow\downarrow\rangle, S=1, S_z=-1 \end{cases}$

4

États singulet et triplet

- Fonction totale = spatiale x spin
- Fonction total = antisymétrique
 - Singulet = fonction impaire
 - Doit multiplier fonction spatiale paire
 - Triplet = fonctions paires
 - Doivent multiplier fonction spatiale impaire

tableau

5

Formule de Heitler-London

- $\varepsilon_t - \varepsilon_s = 2 \frac{I^2 U - V}{1 - I^4} \equiv J$
- Prévient ferromagnétisme et antiferromagnétisme selon recouvrement
- Prédit correctement la 1^{ère} règle de Hund
 - e.g. Pr³⁺: 2 e⁻ dans couche 4f
 - Recouvrement parfait et $I = 0$ si fonctions orthogonales
 - $\varepsilon_t - \varepsilon_s = -2V$
 - État triplet de plus basse énergie
 - Minimise l'interaction coulombienne

6

Modèle d'Heisenberg

- On peut montrer (mais on a pas le temps) que l'interaction liée au spin entre électrons localisé sur différents sites est donnée par la somme sur les paires

$$H = - \sum_{\text{paires}} J \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

- Ne dépend pas de $\vec{R}_1 - \vec{R}_2$ comme interaction dipôle-dipôle
- Si $J(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) > 0$: ferromagnétisme
- Si $J(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) < 0$: antiferromagnétisme
- Prochain cours

7

Types d'échange

- Direct
 - On vient d'en discuter
- Indirect
 - implique les électrons de conduction
- Super-échange
 - Implique les électrons d'un atome neutre entre deux atomes

8

Prochain cours

- Ordre magnétique
- Ondes de spin
- Champ moyen