



HAL
open science

La température de Curie d'un réseau d'Ising imparfait

J. Seiden

► **To cite this version:**

J. Seiden. La température de Curie d'un réseau d'Ising imparfait. J. Phys. Radium, 1960, 21 (2), pp.141-142. 10.1051/jphysrad:01960002102014100 . jpa-00236207

HAL Id: jpa-00236207

<https://hal.archives-ouvertes.fr/jpa-00236207>

Submitted on 1 Jan 1960

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

LETTRES A LA RÉDACTION

LA TEMPÉRATURE DE CURIE
D'UN RÉSEAU D'ISING IMPARFAIT

Par J. SEIDEN,
Laboratoire de Radioélectricité,
Faculté des Sciences de Paris.

Dans un travail précédent [1] que nous désignerons ici par (I), nous avons développé une méthode mathématique rigoureuse pour calculer la fonction de partition $Q(N, T)$ d'un réseau (carré ou cubique simple) d'Ising imparfait. Nous avons montré que, au voisinage de la température de Curie T_c du réseau imparfait, on avait

$$Q(N, T) = \int_{-\infty}^0 e^{m^2(E)/2k^2T^2} \Psi(E) e^{-E/kT(1+2cKJ^{-1})} dE. \quad (1)$$

Cette formule est rigoureuse au premier ordre en c inclus, c étant la concentration atomique des imperfections. Les notations sont les mêmes que dans (I).

Dans le cas du réseau carré imparfait, la formule (1) ramène le problème très complexe de la détermination de $Q(N, T)$ à de simples quadratures. En effet, la fonction de partition $Q_P(J, N, T)$ du réseau carré parfait a été calculée par Onsager et puisque

$$Q_P(J, N, T) = \int \Psi(E) e^{-E/kT} dE \quad (I, 40)$$

$\Psi(E)$ est la transformée de Laplace inverse de $Q_P(J, N, T)$. De même, la fonction $m^2(E)$, définie par (I, 33), peut être obtenue par une transformation de Laplace à partir des fonctions $\langle s_i s_j(T) \rangle$, calculées par Kaufman et Onsager, en utilisant la relation (I, 58). Les calculs sont très longs, mais (1) résout complètement, au moins en principe, le problème de la détermination des propriétés thermodynamiques du réseau carré imparfait au voisinage du point de Curie.

Dans le cas du réseau cubique simple imparfait, $\Psi(E)$ et $m^2(E)$ ne sont pas connus, nous ne pourrions donc effectuer la quadrature (1) comme pour le réseau carré imparfait. C'est pourquoi, dans (I), nous avons employé le théorème de la moyenne et écrit

$$Q(N, T) = e^{m^2[\bar{E}(T)]/2k^2T^2} Q_P(J, N, T(1 + 2cK/J)). \quad (I, 88)$$

La valeur moyenne $\bar{E}(T)$, comme nous l'avons montré dans (I), est une fonction « lentement » variable de T . Néanmoins, les dérivées de $\bar{E}(T)$ peuvent présenter des singularités, et il en résulte que (I, 88) ne doit pas être utilisé pour une détermination rigoureuse de la température de Curie T_c du réseau imparfait, comme nous l'avons fait dans (I). La température

de Curie $T_c = T_{cP}(1 - 2cK/J)$ obtenue dans (I) ne peut donc qu'être approximative.

Puisque $\Psi(E)$ n'est pas connu, il semble impossible, à l'aide (1), de déterminer exactement la température de Curie T_c du réseau cubique imparfait en fonction de la température de Curie T_{cP} du réseau cubique parfait, mais on peut obtenir une valeur assez satisfaisante de $\Delta T_c = T_c - T_{cP}$ par le calcul suivant.

La méthode utilisée dans (I) pour obtenir T_c consiste en fait à poser $m^2(E) = \text{Constante}$. Mais nous avons montré dans (I) que

$$\left. \begin{aligned} m^2(-3NJ) &= 0 \\ m^2(0) &= 6cNK^2. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Nous avons longuement étudié la fonction $m^2(E)$ dans (I), et il résulte de cette étude qu'en première approximation, on aura

$$m^2(E) = 6cNK^2 + 2c \frac{K^2}{J} E \quad (3)$$

qui vérifie les égalités (2). Portons (3) dans (1), il vient

$$Q(N, T) = e^{3cNK^2/k^2T^2} \int_{-3NJ}^0 \Psi(E) e^{-E\lambda(T)} dE \quad (4)$$

avec

$$\lambda(T) = \left(1/kT \left(1 + 2c \frac{K}{J} \right) \right) - (cK^2/k^2 T^2 J). \quad (5)$$

On voit alors aisément que la température de Curie T_c est donnée par

$$\lambda(T_c) = 1/kT_{cP}. \quad (6)$$

La solution convenable de l'équation (6) peut être développée en série de puissances de c et il vient

$$T_c = T_{cP} [1 - (2cK/J) - (cK^2/JkT_{cP})]. \quad (7)$$

On voit sur (4) que la transition de phase du réseau imparfait est du même type que celle subie par le réseau parfait.

Pour un réseau cubique simple, on a approximativement $kT_{cP} = 5J$ et puisque $0 < K \leq J$, le terme cK^2/JkT_{cP} dans la parenthèse (7) est au moins dix fois inférieur au terme $2cK/J$. La valeur approximative de T_c obtenue dans (I) diffère donc très peu de la valeur plus correcte donnée par (7). On peut admettre que (7) donne ΔT_c avec une erreur relative inférieure à 5 %.

Dans (I) nous avons distingué deux catégories d'imperfections de spin :

1) Les sites vacants, etc... La densité électronique, en ce cas, subit probablement des modifications au voisinage seulement de l'imperfection. Ce voisinage peut d'ailleurs être assez étendu. L'hamiltonien (I, 2) qui est à la base de notre théorie ne tient compte, il

est vrai, que des modifications de densité électronique concernant les plus proches voisins de chaque site imparfait, mais il est aisé d'étendre la théorie pour tenir compte de modifications affectant des voisins plus éloignés de chaque site imparfait.

2) La présence, dans des positions de substitution, d'impuretés constituées d'atomes d'éléments possédant des configurations électroniques non saturées. L'introduction de telles imperfections provoque, comme nous l'avons montré dans (1), une modification de la densité électronique non plus seulement au voisinage des sites imparfaits, mais dans tout le cristal.

Lettre reçue le 8 décembre 1959.

BIBLIOGRAPHIE

[1] SEIDEN (J.), *J. Physique Rad.*, 1959, **20**, 876.

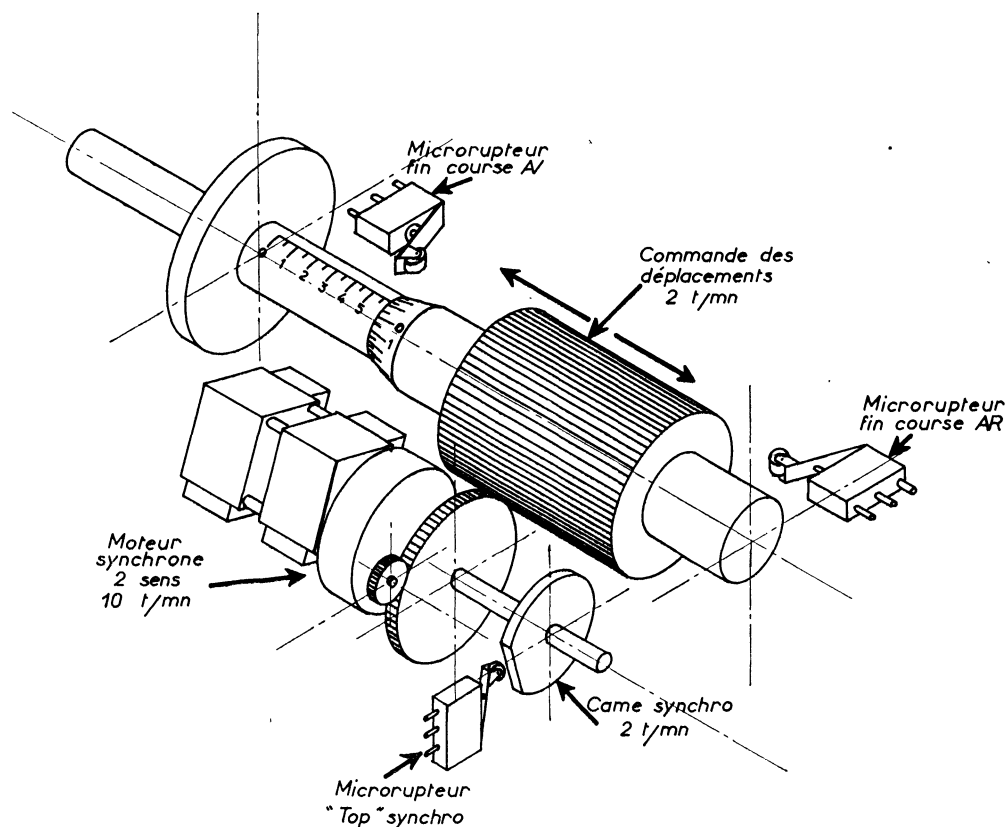


FIG. 1.