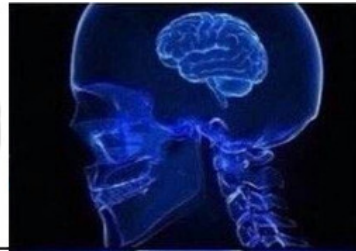


# LP45 : Paramagnétisme, ferromagnétisme, approximation du champ moyen

Louis Heitz et **Vincent Brémaud**

Vendredi 19 février 2021

**HEINSENBERG**



**ISING**



**APPROXIMATION  
DU  
CHAMP MOYEN**



**PARA-FERRO  
= LIQUIDE -GAZ**



imgflip.com

# Sommaire

<b>Rapport du jury</b>	<b>3</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>3</b>
<b>Introduction</b>	<b>4</b>
<b>I Le magnétisme et son origine</b>	<b>4</b>
I.1 Moment magnétique orbital classique . . . . .	4
I.2 Moment magnétique quantique . . . . .	4
I.3 Lien avec le magnétisme . . . . .	5
<b>II Paramagnétisme de Brillouin</b>	<b>5</b>
II.1 Hamiltonien . . . . .	5
II.2 Fonction de partition et aimantation locale . . . . .	5
II.3 Susceptibilité et loi de Curie . . . . .	6
<b>III Le ferromagnétisme</b>	<b>6</b>
III.1 Modèle d'Ising . . . . .	6
III.2 Approximation de champ moyen . . . . .	7
III.3 Aimantation . . . . .	8
<b>Conclusion</b>	<b>9</b>
<b>A Correction</b>	<b>9</b>
<b>B Commentaires</b>	<b>10</b>
<b>C Titre alternatif (<math>\langle \text{Titre} \rangle_{T=0}</math>)</b>	<b>10</b>

Le code couleur utilisé dans ce document est le suivant :

- → Pour des éléments de correction / des questions posées par le correcteur
- Pour les renvois vers la bibliographie
- Pour des remarques diverses des auteurs
- ⚠ Pour des points particulièrement délicats, des erreurs à ne pas commettre
- Pour des liens cliquables

## Rapports du jury

- **2011, 2012, 2013** : Le moment magnétique, son image semi-classique et son ordre de grandeur doivent être maîtrisés. De même, le lien avec l'ordre de grandeur de l'aimantation d'un aimant doit être connu.
- **2009, 2010** : L'origine microscopique de l'interaction d'échange doit être discutée. L'influence de la température sur les propriétés magnétiques est au coeur de la leçon.
- **2006** : Il s'agit ici de présenter une interprétation microscopique du paramagnétisme et du ferromagnétisme.

## Bibliographie

- [1] *Diu, Physique statistique*. Utile pour être au clair sur les notions théoriques. Complément J du chapitre 3, p444 sur le ferromagnétisme.
- [2] *Trémolet, Magnétisme, I - Fondements, PUG*. Approche phénoménologique complète du magnétisme. Les approches théoriques sont développées avec les différentes formes de magnétisme.
- [3] *Texier, Physique statistique, Dunod*. Transition paramagnétique - ferromagnétique avec l'approximation de champ moyen bien explicité à partir de la p219. Paramagnétisme p113.
- [4] [Expérience température de Curie du fer](#).
- [5] Simulation python d'un réseau de spin 2D avec l'approximation du champ moyen.
- [6] Tracé python des courbes d'aimantation et résolution graphique de l'équation autocohérente.
- [7] Autres références : *Ashcroft ; Blundell, magnetism in condensed matter ; Levy, Magnétisme et supra ; BFR Thermodynamique, et EM 4 ; Gié Sarmant, EM volume 2*.

## Introduction

**Niveau :** L3

**PR :** électromagnétisme, ensemble canonique, phénoménologie du magnétisme.

Présentation en vidéo (pour des raisons de sécurité et de temps) de l'expérience de désaimantation d'un morceau de fer lorsque celui-ci est chauffé voir [4].

-Pourquoi l'aimant créer un champ magnétique sans excitation magnétique extérieur ?

-Pourquoi le morceau de fer n'est pas aimanté contrairement à l'aimant sans excitation extérieur et pourquoi celui-ci semble perdre toute aimantation au delà d'une certaine température malgré une excitation magnétique.

## I Le magnétisme et son origine

Diapo : rappel sur le moment magnétique et l'énergie d'interaction avec le champ magnétique. Description du magnétisme de la matière à l'aide de moments magnétiques microscopique.

### I.1 Moment magnétique orbital classique

Diapo : lien entre le moment magnétique cinétique et le moment magnétique classique, introduction du facteur gyromagnétique.

**Transition :** le moment magnétique classique ne suffit pas à décrire le magnétisme, on a besoin de la physique quantique.

### I.2 Moment magnétique quantique

Par analogie avec la forme classique, on peut écrire  $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$  où  $\vec{S}$  est le spin et  $\gamma = g\gamma_0$  avec  $g$  le facteur de Landé ( $\sim 2$  pour un électron).

Pour un spin 1/2 :

$$\|\vec{\mu}\| = \frac{e \times 2 \times \frac{\hbar}{2}}{2m_e} = \mu_B = 9.2 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$$

On appelle  $\mu_B$  le magnéton de Bohr, il s'agit du quantum de moment magnétique. Pour l'électron on peut réécrire :  $\vec{\mu}_e = -g\mu_B \vec{S}$  avec ici le spin  $\vec{S}$  sans dimension ( $\pm 1/2$ ).

En mécanique quantique le moment cinétique total s'écrit :  $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$ . D'où l'écriture du moment magnétique total de l'électron :

$$\vec{\mu}_e = -g_J \mu_B \vec{J}$$

**Transition :** on a décrit le moment magnétique créé par un électron, on va maintenant pouvoir considérer l'ensemble de ces moments à l'échelle atomique puis à l'échelle du matériau.

## I.3 Lien avec le magnétisme

On considère un atome quelconque :

$\vec{\mu}_{\text{at}} \triangleq \sum_i \vec{\mu}_i$  où l'on effectue la somme sur les électrons de l'atome considéré.

On distingue 2 cas :

-  $\vec{\mu}_{\text{at}} = \vec{0}$ , absence de moment magnétique permanent, il s'agit d'un élément diamagnétique.

$\vec{\mu}_{\text{at}} \neq \vec{0}$ , présence d'un moment magnétique permanent. A l'aide de l'aimantation locale moyenne  $\vec{m} = \langle \frac{1}{N} \vec{\mu}_{\text{at}} \rangle$  (moyenne statistique) on définit deux sous catégories :

-  $\vec{m} = \vec{0}$  pour  $\vec{B} = \vec{0}$ , il s'agit d'un élément paramagnétique.

-  $\vec{m} \neq \vec{0}$  pour  $\vec{B} = \vec{0}$ , il s'agit d'un élément ferromagnétique.

Diapo : présentation du para/ferro en lien avec l'agitation thermique avec et sans champ extérieur (noté B par abus dans cette leçon).

**Transition :** on va chercher à quantifier cette aimantation locale dû à un champ extérieur extérieur pour un matériau paramagnétique avant de voir la différence qu'il y a entre le para et le ferromagnétisme.

*Il faut raccourcir cette première partie pour se garder du temps pour la transition de phase para/ferro et pour pouvoir développer celle-ci en champ non nul.*

## II Paramagnétisme de Brillouin

On considère un matériau paramagnétique, où les atomes sont localisés, à la température T. Ce matériau est constitué de  $N \gg 1$  atomes ce qui justifie une approche statistique. On va chercher l'aimantation locale  $\vec{m}$  lorsque l'on excite le matériau avec un champ  $\vec{B} = B\vec{u}_z$ . On va pour cela calculer la fonction de partition et au préalable le hamiltonien de notre système.

### II.1 Hamiltonien

$$H_{\text{at}} = -\vec{\mu}_{\text{at}} \cdot \vec{B} = g_J \mu_B J_z B$$

Avec  $J_z$  qui varie entre  $-J$  et  $+J$ . On suppose qu'il n'y a pas d'interaction entre les moments magnétiques :

$$H = \sum_{i=0}^n H_{\text{at}i} = \sum_{i=0}^n g_J \mu_B J_{iz}$$

### II.2 Fonction de partition et aimantation locale

Comme les atomes sont discernables et que le hamiltonien est séparable :

$Z = (z_{\text{at}})^N$ , on va s'intéresser à  $z_{\text{at}}$ . Pour simplifier, on s'intéresse à un unique électron de spin 1/2 sur

une orbitale s,  $J = 1/2$ ,  $S = 1/2$  et  $L = 0$ ,

$$z_{\text{at}} = e^{\beta\epsilon_B} + e^{-\beta\epsilon_B} = 2 \operatorname{ch}(\beta\epsilon_B)$$

avec  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  et  $\epsilon_B = m_0 B = g_J \mu_B J B = \mu_B B$  (dans le cas de l'électron).

$$f = -k_B T \ln(z_{\text{at}}) = -\frac{1}{\beta} \ln(2 \operatorname{ch}(\beta\epsilon_B))$$

D'où la projection de  $\vec{m}$  sur  $\vec{u}_z$  :

$$m = -\frac{\partial f}{\partial B} = m_0 \operatorname{th}(\beta\epsilon_B) = m_0 \operatorname{th}\left(\frac{\epsilon_B}{k_B T}\right)$$

Diapo : courbes de  $m$  en fonction du rapport de l'énergie magnétique sur l'énergie thermique. Généralisation à  $J$  quelconque possible avec la fonction de Brillouin, résultats expérimentaux.

**Transition :** on peut regarder la sensibilité d'un matériau à s'aimanter lorsque l'on applique une excitation extérieur.

## II.3 Susceptibilité et loi de Curie

On s'intéresse à la réponse du matériau  $\chi_m$ .

$$\chi_m = n\mu_0 \frac{\partial m}{\partial B} \Big|_{B=0} = n\mu_0 \frac{\partial}{\partial B} \left( m_0 \times \frac{m_0 B}{k_B T} \right) = \frac{n\mu_0 m_0^2}{k_B T} = \frac{C}{T}$$

*La formule possède quelques préfacteurs pour rendre la susceptibilité sans unité.*

ODG :  $n = 10^{29} \text{ m}^{-3}$ ,  $T = 300 \text{ K}$ ,  $m_0 = \mu_0$ , on trouve  $\chi_m \sim 3 \times 10^{-3}$ .

**Transition :** on a décrit le paramagnétisme, quelle différence avec le ferromagnétisme ? Le ferromagnétisme correspond à la présence d'une aimantation non nulle à excitation nulle. Il faut donc faire intervenir une nouvelle interaction impliquant les moments magnétiques pour contrebalancer l'énergie thermique. Il faut modifier notre modèle.

## III Le ferromagnétisme

On conserve le même modèle que précédemment avec un ensemble de spins  $1/2$  localisés.

### III.1 Modèle d'Ising

On cherche à ajouter une interaction entre les moments magnétiques (seule possibilité faisant intervenir les moments seulement). Cette interaction peut-elle correspondre à l'interaction dipolaire ?

$E_{\text{mag}} \sim \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \mu^2$  avec  $r$  la distance entre les moments (donc inter-atomique) typique.

En odg,  $\mu = \mu_B$ ,  $r \sim 0.1$  nm, on trouve  $E_{\text{mag}} \sim 10^{-24}$  J  $\sim 10^{-5}$  eV  $\ll k_B T$ .

L'interaction étant loin de l'énergie thermique à température ambiante, celle-ci ne peut expliquer l'état ferromagnétique.

L'origine du couplage entre les moments magnétiques réside dans l'interaction d'échange qui repose sur la répulsion coulombienne et le principe d'exclusion de Pauli. On peut écrire alors un hamiltonien de couplage entre les spins  $\vec{S}_1$  et  $\vec{S}_2$  :

$H_{\text{int}} = -J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$  qui correspond à un couplage entre les spins et avec  $J$  une constante de couplage. Le cas  $J > 0$  favorise l'alignement des spins et correspond à au cas du ferromagnétisme.

On en déduit l'hamiltonien de Ising en ajoutant cette interaction au hamiltonien du cas paramagnétique et en projetant l'interaction selon  $\vec{u}_z$  :

$$H_{\text{Ising}} = m_0 B \sum_i S_{iz} - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_{iz} S_{jz}$$

avec  $\langle, \rangle$  une somme sur les plus proches voisins, on considère en effet que l'interaction est à courte portée puisqu'elle est d'origine coulombienne.

**Transition :** ce hamiltonien est compliqué à résoudre à cause du couplage qui nous oblige à considérer l'ensemble des interactions. Le hamiltonien n'est plus séparable. On va le simplifier en effectuant une approximation.

### III.2 Approximation de champ moyen

L'idée c'est de remarquer que chaque spin est en interaction avec plein d'autres spins autour de lui, on peut alors considérer que l'aimantation moyenne de ces spins sera proche de l'aimantation locale moyenne du matériau.

Diapo : approximation du champ moyen (attention  $m$  est sans unité dans la diapo comme fait dans le **Texier [3]**).

Détail du calcul :

$$S_{iz} = \frac{m}{m_0} + \delta S_{iz} \text{ et } S_{jz} = \frac{m}{m_0} + \delta S_{jz} \text{ d'où :}$$

$$S_{iz} S_{jz} = \left(\frac{m}{m_0} + \delta S_{iz}\right) \times \left(\frac{m}{m_0} + \delta S_{jz}\right) = \left(\frac{m}{m_0}\right)^2 + \frac{m}{m_0}(\delta S_{iz} + \delta S_{jz}) + \delta S_{iz} \delta S_{jz}, \text{ on néglige le dernier terme, il s'agit de l'approximation du champ moyen.}$$

Il vient en réutilisant les expressions du dessus :

$$S_{iz} S_{jz} \sim -\left(\frac{m}{m_0}\right)^2 + \frac{m}{m_0}(S_{iz} + S_{jz})$$

On réécrit la somme en supposant  $q$  voisins où l'on divise par 2 pour éviter le double comptage :

$$\sum_{\langle i,j \rangle} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in \text{voisins}}$$

D'où :

$$\sum_{\langle i,j \rangle} S_{iz} S_{jz} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in \text{voisins}} S_{iz} S_{jz} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in \text{voisins}} -\left(\frac{m}{m_0}\right)^2 + \frac{m}{m_0} (S_{iz} + S_{jz}) = -\frac{Nq\left(\frac{m}{m_0}\right)^2}{2} + q \frac{m}{m_0} \sum_{i=1}^N S_{iz}$$

On en déduit le hamiltonien de champ moyen :

$$H_{\text{cm}} = \frac{Nq\left(\frac{m}{m_0}\right)^2}{2} + (m_0 B - J \frac{m}{m_0} q) \sum_{i=1}^N S_{iz}$$

On calcule  $z_{\text{at}}$  :  $z_{\text{at}} = e^{-\beta J q \frac{m^2}{2m_0^2}} (2 \operatorname{ch}(\beta(Jq \frac{m}{m_0} - m_0 B)))$

On calcule ensuite la fonction de partition (l'hamiltonien étant séparable) :

$$f_{\text{cm}}(T, B, m) = -\frac{1}{\beta} \ln(z_{\text{at}}) = \frac{1}{2} J q \left(\frac{m}{m_0}\right)^2 - \frac{1}{\beta} \ln(2 \operatorname{ch}(\beta(Jq \frac{m}{m_0} - m_0 B)))$$

**Transition** : on peut calculer l'aimantation désormais en minimisant cette énergie libre.

### III.3 Aimantation

$\frac{\partial f_{\text{cm}}}{\partial m} = 0$  nous donne une équation dite auto-cohérente (l'aimantation locale dépend d'elle même) :

$$m = m_0 \operatorname{th}(\beta(Jq \frac{m}{m_0} - m_0 B))$$

Diapo : on étudie cette courbe à  $B = 0$  d'abord **avec le programme [6]**, on remarque la présence de 3 ou 1 solutions selon la température.

La transition de phase se fait à  $T_c = \frac{Jq}{k_B}$ ,

pour  $T > T_c$  : phase paramagnétique,  $\vec{m} = \vec{0}$

pour  $T < T_c$  : phase ferromagnétique,  $\vec{m} \neq \vec{0}$

Discussion avec la simulation python du modèle d'Ising **avec [5]**.

Diapo : confrontation aux résultats expérimentaux.



## Conclusion

On a compris pourquoi l'aimant possède une aimantation non nulle alors qu'il n'y a pas d'excitation extérieure et on a compris la transition de phase qui a lieu sur le matériau de fer qui passe d'un état ferromagnétique à un état paramagnétique où son aimantation n'est plus suffisante pour contrebalancer le moment du poids. L'approximation du champ moyen nous a permis de trouver une transition de phase, c'est une méthode courante en physique statistique pour simplifier des interactions, elle fonctionne d'autant mieux que le nombre d'interaction est grand.

## A Correction

→ **Interaction d'échange ?** La fonction d'onde associée  $|\psi\rangle = |\psi_{\text{spatial}}\rangle \times |\psi_{\text{spin}}\rangle$  est globalement antisymétrique pour des fermions, la différence de la partie spatiale paire avec la partie spatiale impaire donne  $J$ , l'intégrale d'échange cf wiki.

→ **Diamagnétisme présent partout ? Pourquoi il y a une aimantation quand même ?** Le diamagnétisme est présent partout mais il est masqué dès que l'on a des propriétés para ou ferro. On observe une aimantation avec une susceptibilité négative à cause d'une loi de Lenz, la matière réagit de sorte à réduire le champ magnétique qu'elle ressent.

→ **Excitation magnétique noté B ?** Il faudrait noté  $H$  mais les deux sont proches dans le domaine des réponses linéaires.

→ **C'est quoi le champ moyen ?** On néglige les fluctuations à 2 corps mais il est difficile de rendre cette approximation plus concrète.

→ **Résolution analytique du modèle d'Ising ?** 1D oui, 2D aussi (Onsager) au delà non.

→ **Théorie générale du champ moyen ?** Approche de Landau possible en effectuant un développement en puissance de l'énergie libre en un paramètre d'ordre ici  $m$ .

→ **Types de ferromagnétisme ? Le magnétisme présenté ici explique-t-il le ferromagnétisme ?** Il y a 3 types de ferromagnétisme : interaction d'échange (présenté ici), orientation particulière de la matière, magnétisme itinérant (électrons libres dans un métal). Le modèle présenté ici marche particulièrement bien pour les terres rares (ex : aimant néodyme) mais fonctionne moins bien pour les métaux.

→ **Susceptibilité d'un diamagnétique parfait ?** -1, il s'agit d'un matériau supraconducteur qui repousse les lignes de champs.

→ **Domaines de Weiss ? Energie d'interface ?** L'interaction dipolaire est responsable de ces domaines à grandes distances. Ils sont observables avec un microscope à effet Kerr.

→ **Applications ?** Aimants, frein à coudre (permet un freinage important). Les disques durs ne fonctionnent plus avec cette technologie.

→ **Pourquoi doit-on nécessairement (en toute rigueur) utiliser la MQ pour décrire le magnétisme ?** On doit utiliser le théorème de Bohr - Van Leeuwen (cf wiki).

→ **Quelle est l'origine de l'antiferromagnétisme ?** La constante de couplage  $J$  est négative ce qui pousse les spins à s'anti-aligner.

→ **Pourquoi les gaz nobles ont tendance à être diamagnétique ?** Les couches électroniques d'un gaz noble sont remplies ce qui implique un moment magnétique moyen nul.

- D'après les modèles présentés dans la leçon, un ferromagnétique présente une aimantation spontanée. Pourtant, un clou de fer n'est spontanément pas aimanté. Pourquoi ? Domaines de Weiss : l'aimantation spontanée existe, mais à une échelle intermédiaire. Au niveau macroscopique, elle est moyennée à zéro par un grand nombre de domaines.
- Pourquoi les noyaux ne participent-ils pas (en bonne approximation) aux propriétés magnétiques ? Rapport gyromagnétique 2000 fois plus faible.
- Pourquoi l'interaction d'échange est-elle de courte portée ? Le recouvrement entre fonctions d'onde à 1e localisées sur des sites éloignés l'un de l'autre est faible.

## B Commentaires

Proposition de plan :

Intro : Expérience, vidéo ou tables mettant en évidence les différents comportements observés.

I- Origine du magnétisme dans la matière

- I-1. Aimantation induite
- I-2. Pourquoi une description classique ne marche pas ?
- I-3. Description quantique du magnétisme atomique

II- Paramagnétisme

- II-1. Origine microscopique du paramagnétisme : modèle des spins indépendants
- II-2. Comportement limite et loi de Curie
- II-3. Désaimantation adiabatique
- II-4. Généralisation et validité du modèle

III- Ferromagnétisme

- III-1. Origine microscopique du ferromagnétisme
- III-2. Approximation du champ moyen de Weiss
- III-3. Transition ferro-para
- III-4. Loi de Curie-Weiss
- III-5. Comparaison avec les résultats expérimentaux

Ouverture : diamagnétisme, applications...

Expérience introductive assez bien utilisée. Attention au timing : il faut laisser assez de place pour le champ moyen, qui fait partie du titre, et qui mérite qu'on y passe un peu de temps pour bien l'introduire. La distinction entre para et ferro arrive un peu tard. L'indiscernabilité n'est pas à l'origine de l'écriture de la fonction de partition totale comme  $Z = z^N$ , c'est avant tout l'absence d'interactions qui permet ce type d'écriture. La discernabilité des sites enlève le facteur  $\frac{1}{N!}$ . Éviter des expressions du type compétition énergie/entropie, privilégier compétition énergie potentielle/énergie d'agitation thermique. Il faut peut être réduire la partie 1 et rallonger la partie 3 en rajoutant le cas B non nul.

## C Titre alternatif ( $\langle \text{Titre} \rangle_{T=0}$ )

Matériaux magnétiques - Dia, para et ferromagnétisme