

LP45 – PARAMAGNÉTISME, FERROMAGNÉTISME : APPROXIMATION DU CHAMP MOYEN

17 juin 2021

Nicolas Barros & Abel Feuvrier

Oui
MR C

I've got the spirit But lose the feeling

Joy Division, Disorder

Niveau : L3

Commentaires du jury

Bibliographie

- ↗ *Statistical physics*, **Diu**
- ↗ *Oxford solid state basics*, **Simon**
- ↗ *Magnétisme (I Fondements)*, **Trémolet**

- achement cool
- Direct, efficace
- Complet, voir chap 3 pour la phéno (et le chap 4 pour les dipôles)

Prérequis

- Moments magnétiques
- Atome de Bohr semi-classique
- Fonction de partition, ensemble canonique

Expériences

- ☞ Transition ferro-para du clou si on a le temps

Table des matières

| | | |
|----------|---|----------|
| 1 | Origine du magnétisme | 2 |
| 1.1 | Phénoménologie | 2 |
| 1.2 | Modèle microscopique classique | 3 |
| 1.3 | Modèle quantique (viens donc faire un tour à Landé) | 3 |
| 2 | Paramagnétisme | 3 |
| 2.1 | Cristal paramagnétique parfait | 3 |
| 2.2 | Résolution | 4 |
| 3 | Ferromagnétisme | 4 |
| 3.1 | Affinage du modèle | 4 |
| 3.2 | Approximation de champ moyen | 5 |
| 4 | Questions | 6 |

Timing : ne pas traîner, il est indispensable d'arriver à la dernière sous-partie...

Introduction

Barreau de fer/barreau de bismuth dans l'entrefer d'un électroaimant : il existe différents comportements des matériaux quand ils sont soumis à un champ magnétique. Comment l'expliquer à l'échelle microscopique ?

On peut définir ferromagnétisme ici ou attendre plus tard : mais penser à le définir à un moment.

1 Origine du magnétisme

1.1 Phénoménologie

Pour un matériau linéaire, homogène, isotrope, la réponse à un champ magnétique est contenue dans la susceptibilité χ . En effet, on a, dans ce cas :

$$\vec{B} = \mu_0 \left(\underbrace{\vec{H}}_{\text{contrainte}} + \underbrace{\vec{M}}_{\text{réponse}} \right) = \mu_0(1 + \chi)\vec{H} \quad (1)$$

Introduire le champ d'excitation magnétique \vec{H} (d'autres noms existent, on fait un choix), l'aimantation \vec{M} produite par le matériau.

Selon le signe de χ , on aura différents comportements :

- diamagnétique : $\chi < 0$
- paramagnétique : $\chi > 0$
- PLEIN d'autres trucs moins courants, listés dans \blacktriangleright Trémolet. Antiferromagnétisme, ferrimagnétisme, supraconducteurs, y en a pour tous les goûts. Mais pour la leçon en elle-même, para et dia ça suffit amplement.

On montre la figure 1, en faisant gaffe aux axes (remarque : les plus petits χ valent -1, c'est les supras).

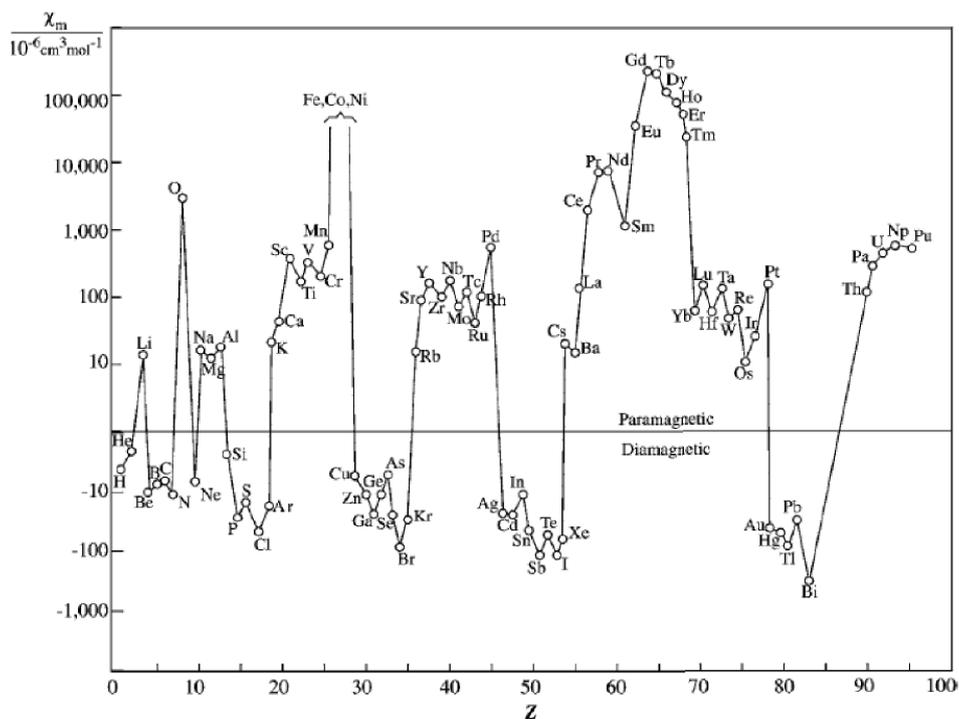


FIGURE 1 – Ordres de grandeur de susceptibilités magnétiques (cours Volk)

Toujours empiriquement, la loi de Curie : $\chi = C/T$ pour T grand (on précisera plus tard grand devant quoi).

↓ *Ok, mais ça nous donne pas la cause. On avait dit qu'on voulait aller voir au niveau microscopique.*

1.2 Modèle microscopique classique

Le bon vieil atome de Bohr! Mouvement de l'électron \simeq spire de courant, donc moment magnétique $\vec{m} = "i\vec{S}" = \frac{-ev}{2\pi r} \pi r^2$. Ce moment magnétique est lié à la rotation de l'atome, on le relie donc au moment cinétique \vec{L} de l'électron, en définissant au passage le rapport gyromagnétique γ :

$$\vec{m} = \gamma \vec{L} \quad (2)$$

Pour l'électron, $\gamma = -\frac{e}{2m}$.

Remarque

Le rapport gyromagnétique se mesure en C kg⁻¹ ou, plus généralement, en MHz/T, à cause de la RMN. En effet, si on applique un champ B et qu'on néglige tout phénomène dissipatif, un dipôle magnétique décrit un mouvement de précession autour de l'axe de B à la fréquence γB .

Transition casse-gueule : d'un côté ce modèle permet de donner des éléments qualitatifs d'explication sur le para/diamagnétisme (les spins s'alignent/loi de Lenz), d'un autre côté quantitativement il se ramasse complètement. En effet, on a le théorème de Born-Van Leeuwen, qui nous dit qu'il ne peut pas y avoir de magnétisme à l'échelle macroscopique dans le modèle classique. Il est téméraire de donner une démo complète ici, mais c'est bien de connaître l'idée : \blacktriangleleft Trémolet fait le taff.

Enfin bref, ce modèle échoue à prédire le magnétisme macroscopique.

↓ *On essaye la quantique ?*

1.3 Modèle quantique (viens donc faire un tour à Landé)

Quantification de \vec{L} , donc quantification de \vec{m} . Insister sur le magnéton de Bohr ($9,22 \cdot 10^{-24}$ A · m²), on a pas fini de le voir. Pour être rigoureux, on rajoute le spin, qui ici se contente de rajouter gentiment le facteur de Landé dans l'expression du rapport gyromagnétique : $\vec{m} = -ng\mu_B$.

↓ *Nous voilà harnachés. Taïault! Exposer clairement l'objectif : trouver une expression de \vec{M} qui s'annule pas au niveau macroscopique.*

2 Paramagnétisme

2.1 Cristal paramagnétique parfait

N spins discernables, indépendants, soumis à un champ $\vec{B} = B\vec{e}_z$.
On les indice par i : $\vec{S}_i = \pm \frac{1}{2}\vec{e}_z$ donc $\vec{m}_i = \pm g\mu_B$ et $H_i = \mp g\mu_B B$.

Penser à justifier ce choix : électrons = fermions de spin 1/2.

2.2 Résolution

Les spins sont indépendants, donc la fonction de partition totale Z s'écrit comme la factorisation des fonctions de partition des N spins ; de plus les spins sont identiques, donc on a successivement :

$$Z = \prod_{i=1}^N Z_i = (Z_1)^N \quad (3)$$

Donc on va traiter un seul spin et on pourra facilement généraliser.

Nos hypothèses nous donnent directement la fonction de partition :

$$Z_1 = \exp(-\beta g \mu_B B) + \exp(\beta g \mu_B B) = 2 \cosh(\beta g \mu_B B) \quad (4)$$

dont on peut tirer le moment magnétique moyen :

$$\langle \vec{m} \rangle = \frac{g \mu_B \exp(-\beta g \mu_B B) - g \mu_B \exp(\beta g \mu_B B)}{Z_1} = \mu_B \tanh(\beta g \mu_B B) \quad (5)$$

Et comme tous les spins sont identiques, on a $\langle \vec{M} \rangle = n \langle \vec{m} \rangle$, en introduisant la densité n d'électrons, donc :

$$\langle \vec{M} \rangle = n \mu_B \tanh(\beta g \mu_B B) \quad (6)$$

Plotter ça avec le code "para_clements" (qu'on doit aux Cléments). On peut interpréter la saturation microscopiquement (tous les spins dans la même direction), on a surtout intérêt à commenter la compétition entre $\mu_B B$ et $k_B T$, qu'on peut mettre en évidence en déplaçant T sur le plot du code.

Remarquer qu'on retrouve la loi de Curie pour les hautes températures.

↓ *Oui mais à champ nul on a plus d'aimantation : ce modèle ne permet pas d'expliquer l'existence d'aimants permanents, c'est-à-dire le ferromagnétisme.*

3 Ferromagnétisme

3.1 Affinage du modèle

Tout est dans le \clubsuit Diu p444.

Les ferros qu'on connaît sont (presque) tous des solides, donc ça doit avoir quelque chose à faire avec l'organisation de la matière. Qu'à cela ne tienne, on va prendre en compte les interactions des spins entre eux. Plus précisément, on ne va compter que les interactions entre plus proches voisins, toujours dans un souci de simplicité.

Selon le timing, la petite partie qui va suivre sur la nature des interactions peut être plus ou moins développée, depuis "c'est quantique ça s'écrit comme ça mdr" à l'écriture du développement en deux termes de la fonction d'onde totale. Le juste milieu semble être "c'est pas du dipolaire" (calcul d'odg à l'appui) " et en fait c'est quantique et ça tient à la nature fermionique des électrons, on développera pas plus ici".

Quelle est la nature de ces interactions ?

Des interactions coulombiennes dipôle/dipôle ? En ordre de grandeur, l'énergie associée est $E_d = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{4\pi r^3}$, soit 10^{-25} J, très petit devant à $k_B T = 10^{-21}$ J à température ambiante. Donc l'effet des interactions dipôle-dipôle est balayé par les fluctuations thermiques. Donc c'est pas ces interactions qui assurent l'aimantation permanente des ferromagnétiques.

En fait, la responsable est la nature fermionique des électrons. La fonction d'onde du système total, notée $\psi(1, 2)$, est antisymétrique par échange des deux électrons car les électrons sont des fermions. Or, on peut décomposer ψ en une partie spatiale $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ et une partie de spin $\chi(\vec{S}_1, \vec{S}_2)$. Si la partie de spin est symétrique (si les deux spins sont alignés), la partie spatiale doit donc être antisymétrique, ce qui implique l'existence d'un plan nodal entre les deux électrons : les électrons sont relativement éloignés. Donc leur interaction coulombienne (qui augmente l'énergie du système) est relativement petite. À l'inverse, si la partie de spin est antisymétrique, il n'y a pas besoin de plan nodal, les électrons peuvent se rapprocher à loisir, et augmenter l'énergie du système par la même occasion.

Donc la configuration de plus basse énergie est celle où les spins sont alignés. Donc cette interaction a tendance à aligner les spins. On modélise donc cette interaction dans le hamiltonien par le terme suivant, qui somme sur les couples $\langle i, j \rangle$ de plus proches voisins :

$$\sum_{\langle i, j \rangle} -JS_i S_j \quad (7)$$

où J est appelée intégrale d'échange (on a fait ici l'hypothèse que J est la même pour toutes les interactions). Si $J > 0$ (hypothèse qu'on fera ici), l'interaction a tendance à aligner les spins. J est de l'ordre de la fraction d'eV.

On se retrouve donc avec le hamiltonien total :

$$H = -\sum_i^N g\mu_B S_i B - \sum_{\langle i, j \rangle} JS_i S_j = -\sum_i^N g\mu_B B_{i,e} \quad (8)$$

avec $B_{i,e}$ le champ moléculaire, d'expression :

$$B_{i,e} = B + \frac{J}{2g\mu_B} \sum_{j \text{ ppv de } i} JS_j \quad (9)$$

Remarque potentiellement importante

Dans d'autres rapports, on trouve l'appellation "hamiltonien de Heisenberg", avec en gros la même expression mais des spins vectoriels. À ce qu'il paraît ça donne pas les mêmes solutions et ça a pas les mêmes dimensions critiques, bref c'est vraiment pas le même délire. On pourrait s'en foutre, mais si y a un membre du jury qui a fait 20 ans de recherche dessus ça risque de lui rester en travers du spin.

On a donc un modèle qui permet de prendre en compte les interactions entre spins : reste plus qu'à calculer l'aimantation moyenne.

On sait pas résoudre. Enfin on sait résoudre en 1D, en 2D mais c'est moche, et à partir de la 3D c'est la Bérézina. Il nous faut une approximation idoine. Mais qu'est-ce qu'on aperçoit à l'horizon ? C'est une approximation d'oiseau ? C'est une approximation d'avion ? C'est...

3.2 Approximation de champ moyen

(adapté du chapitre 22 du Oxford Solid State physics, ou n'importe quel bouquin (☛ Diu page 454 par exemple)

On se retrouve avec un Hamiltonien du système magnétique, c'est à dire une mesure de l'énergie pour une configuration donnée. Il faut à présent en tirer la magnétisation volumique m à une température T et champ extérieur donné.

On peut déjà s'attendre à observer deux régimes : un ordre maximal à basse température, et des fluctuations thermiques desordonnées à haute température. En dehors de quelques modèles simples ou de dimensions basses, la résolution exacte est impossible, on doit donc utiliser des approximations - un peu comme dans toute la physique non ?.

L'approximation la plus utilisée, dont l'utilisation dépasse largement le cas du ferromagnétisme, est appelée approximation de champ moyen. On procède en deux étapes :

- On regarde un site ou cellule élémentaire - ici un spin du réseau - et on résout exactement le problème pour ce spin unique en considérant que tout ce qui l'entoure n'agit que comme un effet moyen, un champ effectif.
- Ensuite, on vérifie l'auto-cohérence d'une telle approche : on avait pas de raison de prendre un site plutôt qu'un autre, donc l'aimantation d'un site devrait se retrouver partout.

On isole donc un spin et on écrit son hamiltonien $H_i = \mu_B B_{i,e}$, avant de faire l'hypothèse de champ moyen formellement :

$$B_{i,e} \simeq B + \lambda \vec{M} = B_e \quad (10)$$

avec $\lambda = \frac{zJ}{2g\mu_B}n$, avec z le nombre de plus proches voisins du site i .

On se retrouve donc avec un hamiltonien analogue à celui de la partie 2, avec seulement un champ B différent : $H_i = -\mu_B B e$. On peut donc faire les mêmes calculs, et aboutir à :

$$M = n\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B}{k_B T}(B + \lambda M)\right) \quad (11)$$

qu'on peut réécrire plus simplement en :

$$\frac{M}{M_{\text{sat}}} = \tanh\left(\frac{T_C}{T}\left(KB + \frac{M}{M_{\text{sat}}}\right)\right) \quad (12)$$

avec $M_{\text{sat}} = n\mu_B$, $T_C = \frac{zJ}{2gk_B}$ et $K = \frac{\mu_B}{k_B T}$ (un peu fait maison, on est pas à l'abri d'une erreur de calcul, je recheckerais plus tard).

Reste à vérifier l'autocohérence du modèle (M est à gauche et à droite dans l'équation!). Pour ce faire, on va se servir du programme "transition_ferro_para_pacar" (qu'on doit visiblement à Corentin Pacary) ou "transition_ferro_para_maison", qui permettent de résoudre graphiquement cette équation. Le "maison" a été fait pour coller aux notations qui viennent d'être posées.

On notera qu'on réutilise l'expression "paramagnétique" de la moyenne de S_i , d'où l'intérêt d'avoir fait le calcul de phystat au II.

Si on a le temps, transition de phase sur le code et ordres de grandeur de températures de Curie sur le slide (figure 2); si on a vraiment le temps, transition de phase IRL ("clou du spectacle").

| | T_c (K) | M_∞ ($\times 10^4$ A/m) |
|--|--------------|---------------------------------|
| Fer (Fe) | 1 043 | 14 |
| Cobalt (Co) | 1 388 | 11 |
| Nickel (Ni) | 627 | 4 |
| Gadolinium (Gd) | 293 | 16 |
| Dysprosium (Dy) | 85 | 24 |
| Magnétite (Fe₃O₄) | 858 | 4 |

FIGURE 2 – Ordres de grandeur de températures de Curie

Conclusion

Grâce à un modèle simple, quelques résultats de mécanique quantique et quelques autres de thermo stat (rien que ça), on a exhibé un comportement qui explique qualitativement le paramagnétisme à l'échelle macroscopique. Grâce à l'hypothèse de champ moyen, on a aussi expliqué le ferromagnétisme. On a introduit le modèle d'Ising et le champ moyen en une leçon, ce sont 40 minutes assez rentables pour les élèves.

Comment bien cramer un clou

Adapter le montage de la collee en rajoutant de aimants, utiliser deux potences (une pour plaque-aimant, une pour le clou) En fait faut avec un peu de distance, genre 4-5cm du clou. Si on chauffe mal on peut attendre 1min rien ne viendra. Le clou doit rougeoier avant de se décrocher.

4 Questions

- Quelle est la valeur minimale que peut prendre χ ? -1, ça correspond à un supraconducteur. Par contre dans l'autre sens c'est free real estate.

- Il y a-t-il une certaine régularité dans la répartition des atomes sur les courbes représentant les différentes valeurs de χ ? comment peut-on l'expliquer? Tableau périodique, penser à prendre l'exemple des alcalins, ils sont quasi tous pareils.
- Dans Bohr VanLeuween, en quoi la quantification résout le problème? En creusant un peu on revient à de la non-commutation d'observable.
- De quand date la quantification des moments magnétiques? Activer la carte piège Stern et Gerlach. Attention, on parle ici de moment atomique global $\pm 1/2$.
- Attention aux facteurs de Landé qui se sont fait la malle pendant l'exposé.
- C'est quoi les différents ensembles de Phystat? Micro-canonique, canonique et grand canonique? Quelles sont les variables fixées associées? - regarder le tableau dans le DGLR
- Attention aux variables extensives et intensives.
- Y a-t-il des solides qui peuvent être ferros?
- bien clarifier quand on est à distance entre spins fixée ou pas
- Quel est le lien entre l'interaction d'échange et les règles de Hund, Pauli?
- Attention sur le hamiltonien. Avec des vecteurs et un produit scalaire c'est Heisenberg, projeté et donc avec des scalaires ± 1 c'est Ising. Rester sur Ising
- Notion de dimension critique inférieure?
- Bien rappeler les objectifs dans chaque partie. Pourquoi on fait ça?
- écrire un hamiltonien sur la partie paramagnétisme du II, ça rendra le lien plus simple avec la résolution du champ moyen en comparant le Hamiltonien de champ moyen à celui du paramagnétique sans interaction.