Physique Statistique (PHY434)
Maxime Dahan
Année 2016-2017

Petite Classe n° 5
Mardi 9 Mai 2017

Magnétisme itinérant dans un métal

L'objectif de cette PC est d'étudier l'origine microscopique du magnétisme dans les métaux. Nous discuterons d'abord d'un modèle d'électrons libres, afin d'obtenir le paramagnétisme de Pauli. Puis nous tiendrons compte de l'effet des interactions de Coulomb entre électrons, à l'aide d'un modèle de champ moyen, dû à Stoner, qui permet de comprendre l'apparition du ferromagnétisme dans certains métaux.

1 Gaz d'électrons libres dans un champ extérieur : paramagnétisme de Pauli

On considère N électrons indépendants (sans interactions) dans une boite cubique de taille L. On rappelle qu'un électron a 2 états de spin

1. Déterminer les niveaux d'énergie. En déduire la densité d'états $\mathcal{D}(\epsilon)$ définie par :

$$\text{(Nombre d'états d'énergie inférieure ou égale à } E) = \int_{-\infty}^{E} \mathcal{D}(\epsilon)\, d\epsilon$$

.

2. Que vaut l'énergie de Fermi E_F ? En déduire la température de Fermi T_F.

3. On se place à température non-nulle T et dans l'ensemble grand-canonique, en supposant que le système est couplé à un reservoir de particules qui lui impose un potentiel chimique μ. Comment détermine-t-on la valeur de μ ?

4. On suppose maintenant que le système est placé dans un champ magnétique h. Comment chaque niveau d'énergie ϵ est-il modifié en fonction du spin de l'électron ? Le magnéton de Bohr vaut

$$\mu_B = -9.27410^{-24} J.T^{-1} = -5.788\,10^{-5} eV.T^{-1}$$

(i) Montrer que les densités d'états des élections ayant un état de spin déterminé ($+$ ou $-$) sont

$$\mathcal{D}_\pm(\epsilon) = \frac{1}{2}\mathcal{D}(\epsilon \pm \mu_B h)$$

(ii) Donner l'expression générale, à température T, de N_+ et N_-, les nombre totaux moyen de spins dans l'état $+$ et $-$, et de l'aimantation M. Montrer qu'à petit champ h, le potentiel chimique est inchangé au premier ordre en h.

(iii) Montrer que, de manière générale, la susceptibilité magnétique a pour expression :

$$\chi(T) = \mu_B^2 \int f_\beta(\epsilon) \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \epsilon} d\epsilon = -\mu_B^2 \int \mathcal{D}(\epsilon) \frac{\partial f_\beta(\epsilon)}{\partial \epsilon} d\epsilon$$

(iv) Montrer que de manière générale pour $T \ll T_F$, la susceptibilité de Pauli des électrons de conduction est donnée par :

$$\chi_0 = \mu_B^2 \mathcal{D}(E_F)$$

(v) Montrer que pour $T \ll T_F$, la susceptibilité de Pauli dûe au spin dans un gaz d'électrons libres est donnée par :

$$\chi_0 = \frac{3N\mu_B^2}{2kT_F}$$

(vi) Montrer qu'à haute température on retrouve la loi de Curie $\chi \sim 1/T$.

Remarque : Landau a montré l'existence d'un moment diamagnétique qui vaut -1/3 du moment paramagnétique. Expliquez l'origine physique d'un tel diamagnétisme. Au final, la susceptibilité totale d'un gaz d'électrons libres vaut :

$$\chi_{tot} = \frac{N\mu_B^2}{kT_F}$$

2 Électrons dans un potentiel cristallin - critère de Stoner pour une transition ferromagnétique

On étudie maintenant des électrons dans un potentiel créé par les ions du réseau atomique. Nous allons voir comment les interactions coulombiennes peuvent donner naissance à une instabilité ferromagnétique.

1. Rappeler brièvement pourquoi les énergies propres des élections libres peuvent s'écrire sous la forme $\epsilon_{\mathbf{k},n}$, avec $\mathbf{k}$ le vecteur d'onde de l'électron et n un entier. On se placera dans la bande $n = 1$, et l'on notera $\mathcal{D}(\epsilon)$ la densité d'état associée. Donner la forme schématique de $\mathcal{D}(\epsilon)$.

   Pour des matériaux comme le paladium, on trouve une susceptibilité plus grande d'un facteur 10 par rapport à ce qui est prévu par la théorie du paramagnétisme de Pauli. Il faut donc tenir compte d'effets supplémentaires.

   On modélise les interactions de Coulomb entre électrons d'une façon très simplifiée, en considérant que deux électrons n'interagissent que s'ils se trouvent dans la même orbitale, c'est-à-dire sur le même site i du réseau atomique. Le terme d'interaction peut alors être écrit $\hat{H}_{int} = U\sum_i \hat{n}_{i,+}\hat{n}_{i,-}$ avec une constante positive U, et les opérateurs $\hat{n}_{i,+}$ et $\hat{n}_{i,-}$ représentant les nombres d'occupation au site i pour chacun des deux deux spins possibles. On suppose également que les électrons sont soumis à un champ magnétique h.

2. Par un argument de champ moyen, montrer que l'interaction de Coulomb modifie les niveaux d'énergie comme suit :

$$\epsilon_{\mathbf{k},+} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_B h + Un_-$$
$$\epsilon_{\mathbf{k},-} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu_B h + Un_+$$

   où $n_+ = N_+/N$ et $n_- = N_-/N$ sont les densités locales des atomes de chaque type.

3. Obtenir, en adaptant les calculs de la partie 1, les équations de champ moyen auto-cohérentes pour n_+ et n_- ainsi que pour l'aimantation par site $m = M/N$. Montrer, qu'en présence d'interactions entre électrons, la susceptibilité χ devient :

$$\chi = \frac{\chi_0}{1 - U\mathcal{D}(E_F)/2}$$

   Commenter ce résultat.