

Physique statistique hors équilibre - examen

Mercredi 8 janvier 2014

Rédiger cette partie sur une copie **SÉPARÉE**.

Sujet : **Métaux quasi-ferromagnétiques – Paramagnons**

Introduction : Les propriétés magnétiques des métaux sont dominées par les électrons de conduction (on parle de « magnétisme itinérant »). L'interaction coulombienne joue un rôle très important : répulsive et à très courte portée à cause de l'écrantage, elle peut être modélisée comme

$$\hat{H}_{\text{int}} = U \int_V d\vec{r} \hat{n}_{\uparrow}(\vec{r}) \hat{n}_{\downarrow}(\vec{r}) = \frac{U}{V} \sum_{\vec{q}} \hat{n}_{\vec{q}\uparrow} \hat{n}_{\vec{q}\downarrow} \quad \text{avec } U > 0, \quad (1)$$

où $\hat{n}_{\sigma}(\vec{r})$ est la densité des électrons de spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$. Le volume est noté V . Lorsque l'interaction est suffisamment forte, la polarisation du gaz (en spin) devient favorable énergétiquement, i.e. il apparaît une aimantation spontanée et le métal est ferromagnétique.

L'objet du problème est d'étudier les métaux **paramagnétiques** dans lesquels l'interaction est très proche de la valeur critique correspondant à la transition vers le ferromagnétisme. Nous allons analyser un effet précurseur qui est l'apparition d'importantes fluctuations de spin, dénommées « *paramagnons* ».

A. Électrons libres sans interaction. – Dans cette première partie, nous étudions la réponse magnétique du métal d'électrons libres sans interaction.

Considérons dans un premier temps **un** électron dont nous notons les opérateurs position et spin \hat{r} et \hat{S} . Les états stationnaires sont des ondes planes $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ d'énergie $\epsilon_{\vec{k}}$, combinées à des états de spin (on notera $|\pm\rangle$ les états propres de \hat{S}_z ; on notera $\uparrow \equiv +$ & $\downarrow \equiv -$). Nous introduisons l'opérateur densité d'aimantation pour un électron

$$\hat{m}(\vec{r}) = \mu_B \hat{S} \delta(\vec{r} - \hat{r}), \quad \text{i.e.} \quad \hat{m}_{\vec{q}} = \mu_B \hat{S} e^{-i\vec{q}\cdot\hat{r}} \quad \text{dans l'espace de Fourier.} \quad (2)$$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ est le magnéton de Bohr (on fixe un facteur de Landé égal à 1 pour simplifier). Si l'on souhaite étudier les composantes m^x et m^y , il est commode d'introduire les combinaisons $m^{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} m^x \pm im^y$. Les opérateurs correspondants (à un corps) sont

$$\hat{m}_{\vec{q}}^{\pm} = \mu_B |+\rangle \langle -| e^{-i\vec{q}\cdot\hat{r}} \quad \text{et} \quad \hat{m}_{\vec{q}}^{\mp} = \mu_B |-\rangle \langle +| e^{-i\vec{q}\cdot\hat{r}} \quad (3)$$

(on a utilisé $\hat{S}^{\pm} = \hat{S}^x \pm i\hat{S}^y = |\pm\rangle \langle \mp|$, avec $\hbar = 1$).

1/ Que valent les éléments de matrice $\langle \vec{k}, \sigma | \hat{m}_{\vec{q}}^{\pm} | \vec{k}', \sigma' \rangle$ et $\langle \vec{k}, \sigma | \hat{m}_{\vec{q}}^{\mp} | \vec{k}', \sigma' \rangle$?

2/ **Susceptibilité magnétique.** – On introduit un faible champ magnétique extérieur $\vec{B}(\vec{r}, t)$ dans le plan xOy . L'hamiltonien de perturbation correspondant est

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = - \int_V d\vec{r} \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \hat{M}(\vec{r}) = - \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \left(B_{\vec{q}}^+(t) \hat{M}_{-\vec{q}}^+ + B_{\vec{q}}^-(t) \hat{M}_{-\vec{q}}^- \right) \quad (4)$$

où $\vec{M}(\vec{r})$ désigne la densité d'aimantation du gaz et $B^{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(B^x \mp iB^y)$. On introduit la fonction de réponse χ^{+-} caractérisant la réponse linéaire à une perturbation du type $^1 B^- = \frac{1}{2}(B^x + iB^y)$:

$$\langle \hat{M}_{\vec{q}}^+(t) \rangle_B = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{\vec{q}}^{+-}(t-t') B_{\vec{q}}^-(t') + \mathcal{O}(B^2). \quad (5)$$

¹ Pour un système isotrope avec $\chi^{xx} = \chi^{yy}$ et $\chi^{yx} = -\chi^{xy}$ on a $\chi^{+-} = \chi^{xx} - i\chi^{xy}$.

Exprimer $\chi_{\vec{q}}^{+-}(t)$ comme une fonction de corrélation.

3/ On considère maintenant la transformée de Fourier temporelle de la susceptibilité $\chi^{+-}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \chi_{\vec{q}}^{+-}(t)$.

a) Calculer $\chi^{+-}(\vec{q}, \omega)$ en fonction du spectre des énergies à un corps, $\epsilon_{\vec{k}}$. Montrer qu'elle est proportionnelle à la compressibilité du gaz de fermions libres

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = -\frac{i}{V} \int_0^{\infty} dt e^{(i\omega - 0^+)t} \langle [\hat{n}_{\vec{q}}(t), \hat{n}_{-\vec{q}}] \rangle = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0^+}, \quad (6)$$

où $f(\epsilon)$ est la fonction de Fermi. Le facteur 2 est la dégénérescence de spin.

b) Quel rôle joue le $i0^+$?

4/ Réponse statique ($\omega = 0$).— On note k_F le vecteur de Fermi.

a) Calculer $\chi_0(\vec{q}, 0)$ lorsque $q \stackrel{\text{def}}{=} ||\vec{q}|| \ll k_F$. Interpréter physiquement son signe.

b) Dédurre $\chi^{+-}(\vec{q}, 0)$ dans la même limite. Commenter le signe de la susceptibilité magnétique.

B. Électrons en interaction.— Dans la suite du problème on discute l'effet de l'interaction (1), traitée à l'approximation RPA (\sim champ moyen). On peut montrer que la susceptibilité magnétique du gaz en interaction est donnée par

$$\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi^{+-}(\vec{q}, \omega)}{1 + \frac{1}{2}U \chi_0(\vec{q}, \omega)}, \quad (7)$$

où $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ et $\chi^{+-}(\vec{q}, \omega)$ désignent respectivement la compressibilité et la susceptibilité du gaz d'électrons sans interaction étudiées au **A.**²

1/ Instabilité de Stoner.— Donner une forme approchée de la susceptibilité dans la limite statique $\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, 0)$ lorsque $q \ll k_F$. Montrer qu'elle diverge pour une certaine valeur critique de l'interaction, notée U_c . Interpréter physiquement cette divergence.

On considèrera le cas où l'interaction est proche mais inférieure à cette valeur critique : $U < U_c$. On introduira le paramètre $\varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{U_c}{U} - 1 > 0$ avec $\varepsilon \ll 1$.

On donne le développement de la compressibilité (6) :

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = -2\rho_0 \left[1 + \frac{i\pi}{2} \frac{\omega}{v_F q} - \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2 + \dots \right] \quad \text{pour } \frac{\omega}{v_F q} \ll \frac{q}{k_F} \ll 1 \quad (8)$$

où $\rho_0 = \rho(\epsilon_F)$ est la densité d'états au niveau de Fermi (par spin et par unité de volume) et $v_F = k_F/m_e$ est la vitesse de Fermi.

2/ Pouvez-vous interpréter le comportement de $\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, \omega)$ obtenu dans la limite $\frac{\omega}{v_F q} \ll \frac{q}{k_F} \ll 1$ comme l'existence d'un mode collectif ?

3/ On introduit le facteur de structure $S^{+-}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \hat{M}_{\vec{q}}^+(t) \hat{M}_{-\vec{q}}^- \rangle$. Celui-ci est relié à la susceptibilité par

$$S^{+-}(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{1 - e^{-\omega/k_B T}} \text{Im} [\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, \omega)]. \quad (9)$$

a) Quelle propriété de l'aimantation est-elle caractérisée par $S^{+-}(\vec{q}, \omega)$? Quel est le sens physique de la relation (9) ?

² Corrélativement, la compressibilité à l'approximation RPA est $\chi_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega) = \chi_0(\vec{q}, \omega) / [1 - \frac{1}{2}U \chi_0(\vec{q}, \omega)]$.

b) Dans la limite $\omega \ll k_B T$, montrer que le facteur de structure présente le comportement

$$S^{+-}(\vec{q}, \omega) \propto \frac{\Gamma(q)}{\omega^2 + \Gamma(q)^2} \quad (10)$$

où l'on donnera l'expression de $\Gamma(q)$ en fonction de q et du paramètre $\varepsilon = \frac{U_c}{U} - 1 \ll 1$.

4/ Il est possible de mesurer le facteur de structure par diffusion de neutrons. La figure montre le résultat d'une telle expérience de diffusion sur un métal de Ni_3Ga à $T = 22\text{ K}$, en fonction de l'énergie transférée $\hbar\omega$ et de l'angle de diffusion θ , lui-même relié au transfert d'impulsion par $q^2 = k_N^2 [2 + \hbar\omega/E_N - 2 \cos\theta \sqrt{1 + \hbar\omega/E_N}]$ où k_N et E_N sont le vecteur d'onde et l'énergie des neutrons incidents [si l'on néglige $\hbar\omega$, on a $q \simeq 2k_N \sin(\theta/2)$]. Commenter l'allure des données expérimentales à l'aide de l'analyse précédente.

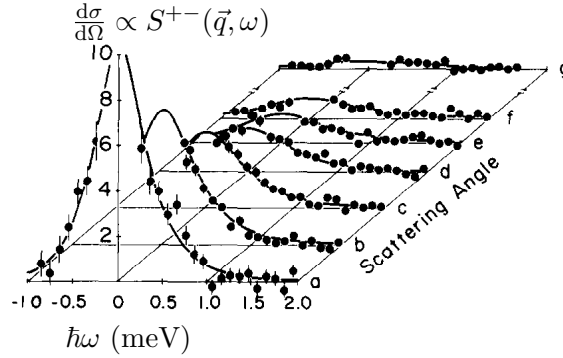


FIGURE 1 – Section efficace différentielle pour la diffusion de neutrons en fonction de l'énergie transférée $E_N^{\text{finale}} - E_N^{\text{initiale}} = \hbar\omega$ et de l'angle de diffusion (i.e. du moment transféré). G. G. Lonzarich, N. R. Bernhoeft and D. McK. Paul, *Spin density fluctuations in magnetic metals*, Physica B156&157, 699–705 (1989).

☞ Annexe :

- Convention pour les transformations de Fourier :

$$f_{\vec{q}} = \int_{\text{Vol}} d\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}) \quad \text{et} \quad f(\vec{r}) = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\vec{q}} f_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \xrightarrow{\text{Vol} \rightarrow \infty} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^d} f_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (11)$$

- On rappelle que la moyenne grand canonique d'un commutateur d'opérateurs à N corps somme d'opérateurs à un corps, du type $\hat{A} = \sum_{i=1}^N \hat{a}^{(i)}$, est

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \langle \varphi_{\alpha} | [\hat{a}, \hat{b}] | \varphi_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha, \beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) a_{\alpha\beta} b_{\beta\alpha}, \quad (12)$$

où la somme porte sur les états individuels stationnaires. $a_{\alpha\beta} = \langle \varphi_{\alpha} | \hat{a} | \varphi_{\beta} \rangle$ est un élément de matrice de l'opérateur à un corps et $f_{\alpha} = f(\epsilon_{\alpha})$ est l'occupation moyenne de l'état individuel.

☞ Pour en savoir plus :

- P. Fulde, *Electron correlations in molecules and solids*, Solid State Science, Springer, 1995.
- R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer, 2006.

Solutions à l'adresse http://www.lptms.u-psud.fr/christophe_texier/