

Physique statistique hors équilibre - examen

Mercredi 04 janvier 2012

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

Sujet : **Ferromagnétisme itinérant & continuum de Stoner**

Introduction : On étudie un modèle de ferromagnétisme itinérant (magnétisme porté par les électrons de conduction d'un métal). Si elles sont assez fortes, les interactions électroniques induisent une instabilité ferromagnétique et sont responsables de la polarisation en spin du gaz d'électrons, i.e. d'une aimantation spontanée du métal. Nous supposons que cette condition est satisfaite et décrivons le métal dans le cadre d'un modèle d'électrons libres et *indépendants*, où tout l'effet des interactions est inclu dans le champ d'échange B_{ech} lié à l'aimantation spontanée, supposée dans la direction Oz . Les états propres à un corps sont donc

$$|\vec{k}, \pm\rangle = \underbrace{|\vec{k}\rangle}_{\text{onde plane}} \otimes \underbrace{|\pm\rangle}_{\text{état propre de } S_z} \quad \text{d'énergie} \quad \epsilon_{\vec{k}, \pm} = \frac{\vec{k}^2}{2m_e} \pm \underbrace{\frac{|q_e|}{2m_e} B_{\text{ech}}}_{\stackrel{\text{def}}{=} \Delta_{\text{ech}}/2} \quad (1)$$

($\hbar = 1$). À $T = 0$, les électrons de spin $\uparrow (+)$ et $\downarrow (-)$ forment chacun deux mers de Fermi indépendantes (figure 1), avec $k_{F\uparrow} < k_{F\downarrow}$ si $B_{\text{ech}} > 0$.

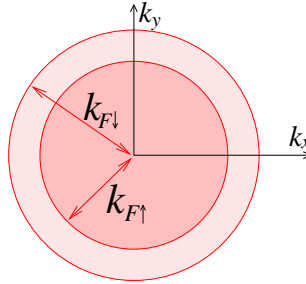


FIGURE 1 – Coupe dans le plan $k_z = 0$ des deux mers de Fermi : $\epsilon_F = \frac{k_{F\uparrow}^2}{2m_e} + \frac{\Delta_{\text{ech}}}{2} = \frac{k_{F\downarrow}^2}{2m_e} - \frac{\Delta_{\text{ech}}}{2}$.

Nous étudions la dynamique des composantes de l'aimantation du gaz dans le plan xOy perpendiculaire à la direction de l'aimantation spontanée. Considérons **un** électron dont nous notons les opérateurs position et spin $\hat{\vec{r}}$ et $\hat{\vec{S}}$. L'opérateur densité de spin (la densité d'aimantation en unités appropriées) correspondant est

$$\hat{\vec{m}}(\vec{r}) = \hat{\vec{S}} \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}), \quad \text{c'est-à-dire} \quad \hat{\vec{m}}_{\vec{q}} = \hat{\vec{S}} e^{-i\vec{q} \cdot \hat{\vec{r}}} \quad (2)$$

dans l'espace de Fourier. Si l'on souhaite étudier m^x et m^y , il est commode d'introduire les composantes $m^\pm \stackrel{\text{def}}{=} m^x \pm im^y$. Les opérateurs correspondants (à un corps) sont

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

(on a utilisé $S_\pm = S_x \pm iS_y = |\pm\rangle\langle \mp|$).

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

2/ On introduit un faible champ magnétique extérieur $\vec{B}(\vec{r}, t)$ dans le plan xOy perpendiculaire à l'aimantation. L'hamiltonien de perturbation est donc

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

où $B^\pm \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(B^x \mp iB^y)$. On introduit la fonction de réponse χ^{-+} caractérisant la réponse linéaire à une perturbation du type ¹ $B^+ = \frac{1}{2}(B^x - iB^y)$:

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

Exprimer $\chi_{\vec{q}}^{-+}(t)$ en termes des opérateurs $\hat{m}_{\vec{q}}^\pm$.

3/ **Susceptibilité magnétique dynamique.**— On introduit la transformée de Fourier temporelle de la fonction de réponse

$$\chi_{-+}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \chi_{\vec{q}}^{-+}(t). \quad (6)$$

a) Montrer que (cf. annexe)

$$\chi_{-+}(\vec{q}, \omega) = - \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k}, \downarrow}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \uparrow})}{\omega + \epsilon_{\vec{k}, \downarrow} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \uparrow} + i0^+} \quad (7)$$

où $f(\epsilon)$ est la fonction de Fermi. Justifier que $\chi_{--}(\vec{q}, \omega) = 0$

b) Quel rôle joue le $i0^+$?

c) Donner l'expression de $\text{Im} [\chi_{-+}(\vec{q}, \omega)]$. Que représente physiquement cette quantité ?

d) **Continuum de Stoner.**— Montrer que, pour chaque valeur de $\vec{q}$, il existe un continuum de valeurs de ω telles que $\text{Im} [\chi_{-+}(\vec{q}, \omega)] \neq 0$ (on suppose le gaz à température nulle). Trouver un encadrement des $\omega_{\vec{q}, \vec{k}} \stackrel{\text{def}}{=} \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \uparrow} - \epsilon_{\vec{k}, \downarrow}$ correspondantes pour $\vec{q}$ fixé. Quelle interprétation physique ? Discuter et interpréter la limite $\vec{q} \rightarrow 0$.

e) Représenter dans un diagramme $(||\vec{q}||, \omega)$ la région où $\text{Im} [\chi_{-+}(\vec{q}, \omega)]$ est non nulle (on supposera que $\Delta_{\text{ech}} \ll \epsilon_F \simeq k_{F\uparrow} v_{F\uparrow} \simeq k_{F\downarrow} v_{F\downarrow}$, où $v_F = k_F/m_e$ est la vitesse de Fermi).

4/ **Magnons et continuum de Stoner.**— En TD nous avons montré que la phase ferromagnétique est caractérisée par l'existence de *modes collectifs* appelés *magnons*, des ondes d'aimantation dans le plan xOy (notons qu'ils ne sont pas prédits au niveau des calculs précédents : il faudrait pour cela tenir compte de l'effet des interactions dans l'analyse de la susceptibilité).

a) Quelle est la différence de nature avec les excitations rencontrées au 3 ? Représenter le spectre des magnons sur le même diagramme $(||\vec{q}||, \omega)$ que le continuum de Stoner (on rappelle que $\Omega_{\text{magnon}}(\vec{q}) \simeq \frac{1}{2m_*} \vec{q}^2$ aux petits vecteurs d'onde).

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

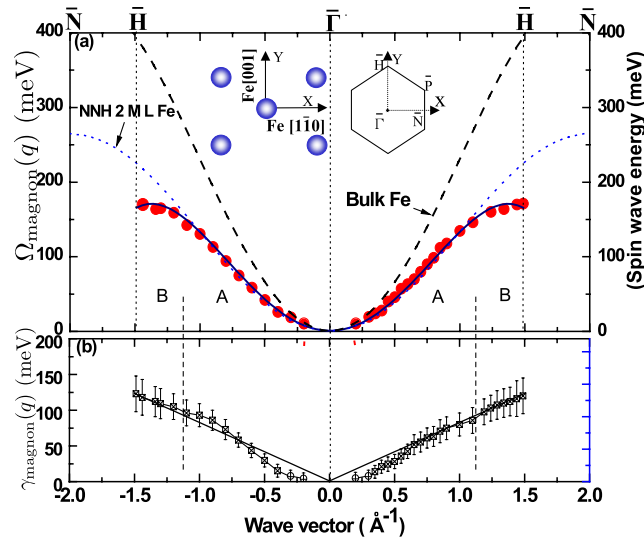


FIGURE 2 – Deux couches atomiques de Fer dans une phase ferromagnétique : en haut la relation de dispersion des magnons $\Omega_{\text{magnon}}(q)$. En bas la largeur de la résonance $\gamma_{\text{magnon}}(q)$. W. X. Tang et al, « Large wave vector spin waves and dispersion in two monolayer Fe on W (110) », Phys. Rev. Lett. **99**, 087202 (2007).

b) Des mesures récentes ont été faites sur un film ultramince constitué de deux couches d'atomes de Fer déposées sur un substrat de tungstène. Le film est dans une phase ferromagnétique. La technique SPEELS (« spin polarized electron energy loss spectroscopy ») a permis d'obtenir le spectre des magnons (ondes de spin, « spin waves »), montré sur la partie supérieure de la figure (on voit que la relation est bien quadratique pour $\vec{q} \rightarrow 0$). La partie inférieure montre la dépendance de la largeur du pic des magnons $\gamma_{\text{magnon}}(q)$ (inverse de la durée de vie des magnons) en fonction du vecteur d'onde. Proposer une explication possible justifiant *qualitativement* le comportement observé de $\gamma_{\text{magnon}}(q)$.

📖 Annexe :

- Convention pour les transformations de Fourier :

$$f_q = \int_{\text{Vol}} dr e^{-iqr} f(r) \quad \text{et} \quad f(r) = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_q f_q e^{iqr} \xrightarrow{\text{Vol} \rightarrow \infty} \int \frac{dq}{(2\pi)^d} f_q e^{iqr} \quad (8)$$

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

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) a_{\alpha\beta} b_{\beta\alpha}, \quad (9)$$

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 :

- R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer (2006), third edition.
- J. F. Cooke, J. W. Lynn and H. L. Davis, Calculations of the dynamic susceptibility of nickel and iron, Phys. Rev. B **21**, 4118–4131 (1980).

Féromagnétisme itinérant - Continuum de Stoner

interaction e-e $\Rightarrow$ polarisation en spin du gaz d'électrons

critère de Stoner: $H_{int} = U \times \int d\mathbf{r} n_{\uparrow}(\mathbf{r}) n_{\downarrow}(\mathbf{r})$
(screened local interaction between electrons)

$\rho_0 = \text{DOS}(\text{at } E_F) \text{ per spin channel.}$

If $\boxed{U > 2/\rho_0} \Rightarrow \text{FERRO}$

Modèle dans la phase FERRO : des électrons indépendants avec un splitting Zeeman dû à l'aimantation spontanée.

Les états propres sont donc des ondes planes

$|\mathbf{k}, \pm\rangle$ d'énergie $\epsilon_{\mathbf{k}, \pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \pm \frac{|\mathbf{q}|}{2m_e} \hbar \mu_B$
 $\equiv \Delta_{\text{Zeem}}/2$

à $T=0 \Rightarrow$ deux murs de Fermi

$$\epsilon_F = \frac{k_{F\uparrow}^2}{2m_e} + \frac{\Delta_{\text{Zeem}}}{2} = \frac{k_{F\downarrow}^2}{2m_e} - \frac{\Delta_{\text{Zeem}}}{2} \Rightarrow k_{F\uparrow} < k_{F\downarrow}$$

Opérateurs pour 1 électron: $\hat{\mathbf{r}}$: position et $\hat{\mathbf{S}}$: spin

densité de spin: $\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{S}} \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}})$

↓ Fourier

$$\hat{\mathbf{m}}_{\mathbf{q}} \stackrel{\text{def}}{=} \int d\mathbf{r} \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \frac{\hat{\mathbf{S}}}{S} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

$$m^{\pm} = m^x \pm i m^y \Rightarrow \hat{m}_{\mathbf{q}}^+ = \frac{|+\rangle\langle -|}{S_+} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \text{ et } \hat{m}_{\mathbf{q}}^- = \frac{|-\rangle\langle +|}{S_-} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

1/ éléments de matrice:

$$\langle \mathbf{k}, \sigma | \hat{m}_{\mathbf{q}}^- | \mathbf{k}', \sigma' \rangle = \underbrace{\langle \sigma | - \rangle \langle + | \sigma' \rangle}_{\delta_{\sigma-} \delta_{\sigma'+}} \underbrace{\langle \mathbf{k} | e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k}' \rangle}_{\int \frac{d\mathbf{r}}{\text{Vol}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}}}$$

de même:

$$\langle \mathbf{k}, \sigma | \hat{m}_{\mathbf{q}}^+ | \mathbf{k}', \sigma' \rangle = \delta_{\sigma+} \delta_{\sigma'-} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}}$$

2/ Perturbation extérieure: $\vec{B}(\mathbf{r}, t)$ dans le plan xOy

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = - \int d\mathbf{r} \vec{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) = - \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\mathbf{q}} (B_{\mathbf{q}}^+(t) \hat{m}_{-\mathbf{q}}^+ + B_{\mathbf{q}}^-(t) \hat{m}_{\mathbf{q}}^-)$$

où $B^{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (B^x \mp i B^y)$

réponse de $\hat{m}_{\mathbf{q}}^-$ à une perturbation B^+ : $\langle \hat{m}_{\mathbf{q}}^-(t) \rangle_B \simeq \int dt' \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(t-t') B_{\mathbf{q}}^+(t')$

on (comm): $X_{\vec{q}}^{-+}(t) = i \underbrace{\Theta(t)}_{\text{causalité}} \langle [m_{\vec{q}}^{-}(t), \underbrace{m_{\vec{q}}^{+}}_{\substack{\text{op. complé} \\ \vec{a} \quad B^+}}] \rangle \rightarrow \text{moyenne à l'équilibre}$

3/ Susceptibilité dynamique

$$\begin{aligned} a) X_{-+}(\vec{q}, \omega) &= \int dt e^{i\omega t} X_{\vec{q}}^{-+}(t) \\ &= i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \cdot \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\substack{k, k' \\ \sigma, \sigma'}} (f_{k\sigma} - f_{k'\sigma'}) \underbrace{\langle k\sigma | m_{\vec{q}}^{-} | k'\sigma' \rangle \langle k'\sigma' | m_{\vec{q}}^{+} | k\sigma \rangle}_{|\langle k\sigma | m_{\vec{q}}^{-} | k'\sigma' \rangle|^2 = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{k, k+q}} \\ &\quad \times e^{i(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{k'\sigma'})t} \end{aligned}$$

$$X_{-+}(\vec{q}, \omega) = \frac{-1}{\text{Vol}} \sum_k (f_{k\downarrow} - f_{k+q\uparrow}) \frac{1}{\omega + \epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k+q\uparrow} + i0^+}$$

on a utilisé $i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} = \frac{i}{\omega + i0^+} = \frac{-1}{\omega + i0^+}$

on vérifie que cette fonction de réponse caractérise complètement la réponse de $m_{\vec{q}}$:

$$X_{--}(\vec{q}, \omega) = 0 \quad \text{car} \quad \langle k\sigma | m_{\vec{q}}^{-} | k'\sigma' \rangle \langle k'\sigma' | m_{\vec{q}}^{-} | k\sigma \rangle = 0$$

b) Rayl: le $i0^+$ est lié à la causalité $\Rightarrow$ singularités de X dans le $\frac{1}{2}$ plan complexe inf de ω

$$c) \text{Im}[X_{-+}(\vec{q}, \omega)] = \frac{\pi}{\text{Vol}} \sum_k (f_{k\downarrow} - f_{k+q\uparrow}) \delta(\omega + \epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k+q\uparrow})$$

représente la partie dissipative de la fct de réponse

d) Continuum de Stoner posons $\omega_{\vec{q}, \vec{q}} \stackrel{\text{def}}{=} \epsilon_{k+q\uparrow} - \epsilon_{k\downarrow}$

$$= \frac{\vec{q}^2}{2m_e} + \underbrace{\vec{v}_k \cdot \vec{q}}_{\frac{\vec{k}}{m_e}} + \Delta_{\text{ech}}$$



$$f_{k\downarrow} - f_{k+q\uparrow} \neq 0 \Rightarrow \begin{cases} \|k\| < k_{F\downarrow} \\ \|k+q\| > k_{F\uparrow} \end{cases} \Rightarrow \|\vec{v}_k \cdot \vec{q}\| \leq k_{F\downarrow} \cdot \|\vec{q}\|$$

$$\text{à } \vec{q} \text{ fixé} \Rightarrow \frac{\vec{q}^2}{2m_e} - v_{F\downarrow} \|\vec{q}\| + \Delta_{\text{ech}} \leq \omega_{\vec{q}, \vec{q}} \leq \frac{\vec{q}^2}{2m_e} + v_{F\downarrow} \|\vec{q}\| + \Delta_{\text{ech}}$$

donc il existe un continuum de valeurs de ω telles

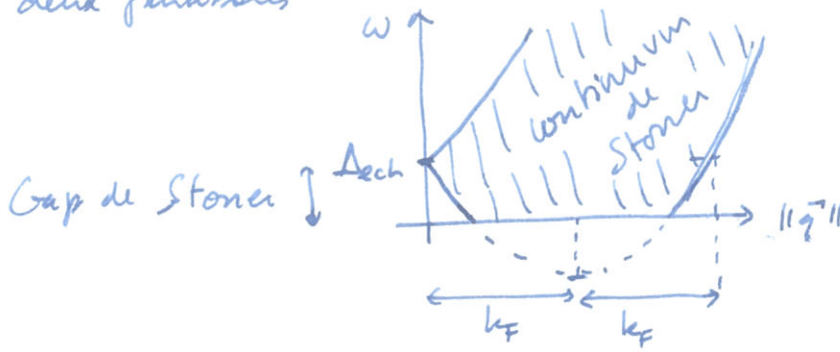
$$\text{que } \text{Im}[X_{-+}] \neq 0 : \left[\frac{\vec{q}^2}{2m_e} - v_{F\downarrow} \|\vec{q}\| + \Delta_{\text{ech}} \leq \omega \leq \frac{\vec{q}^2}{2m_e} + v_{F\downarrow} \|\vec{q}\| + \Delta_{\text{ech}} \right]$$

si $\omega = \omega_{\vec{q}, \vec{q}} \Rightarrow X_{-+}$ sonde une excitation

électron $\uparrow$ - trou $\downarrow$
absence d'e

Dans la limite $\vec{q} \rightarrow 0$ $\omega_{\vec{q}, \vec{q}} \rightarrow \Delta_{\text{ech}}$: ces excitations ont un gap qui correspond au coût énergétique pour retourner le spin (puisque $k_{F\uparrow} \neq k_{F\downarrow}$ on peut créer une paire particule $\uparrow$ - trou $\downarrow$ à $\vec{q}=0$, mais cela a un coût énergétique Δ_{ech} .)

e) Dans le plan $(\|\vec{q}\|, \omega)$, $\chi_{-+} \neq 0$ dans une région délimitée par deux paraboles

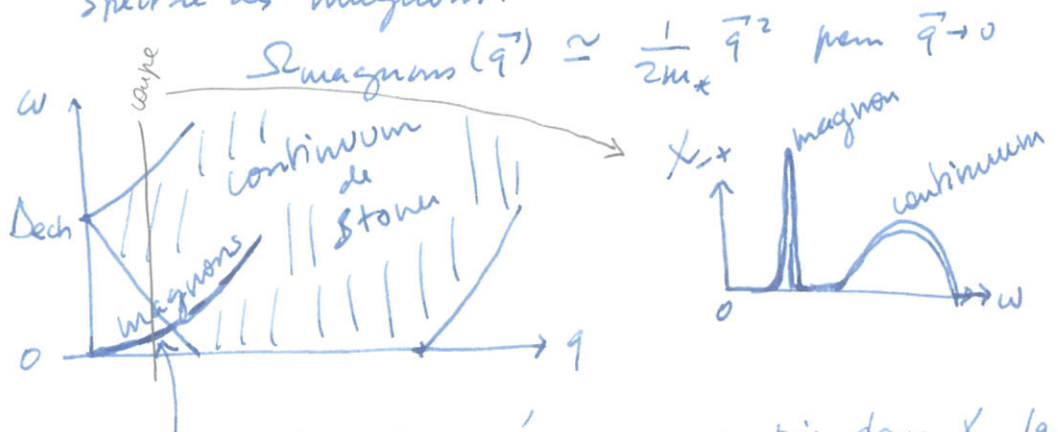


4) Magnons et continuum de Stoner

a) excitations du continuum: électron $\uparrow$ - trou $\uparrow \Rightarrow$ excitation localisée

magnon: mode collectif (onde de spin) $\Rightarrow$ met en jeu tous les degrés de liberté

spectre des magnons:

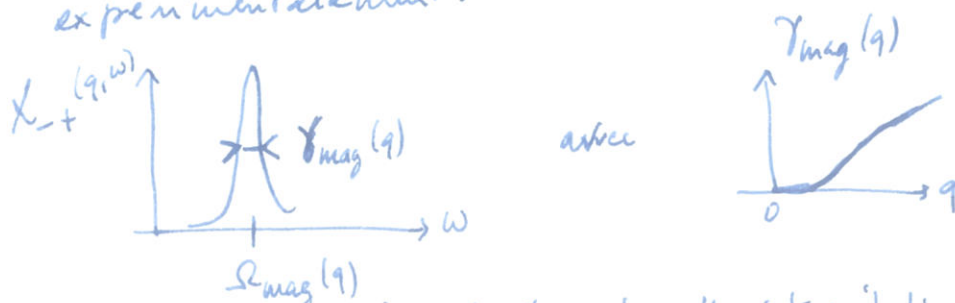


mode collectif = résonance $\Rightarrow$ pic dans $\chi_{-+}(q, \omega)$

b) Membres récents: Film de Fer sur substrat de Tungstène.

lorsque la branche des magnons pénètre dans le continuum $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ couplage d'un (quasi) mode propre à un continuum, i.e. des excitations du mode. On s'attend donc à ce que le pic des magnons s'élargisse en pénétrant dans le continuum, ce qui est observé expérimentalement.



Rq: ces expériences sont très difficiles et cette interprétation semble un peu controversée