

Métaux quasi-ferromagnétiques
Paramagnons
Examen 8 Janvier 2014

Modèle de métal : électrons libres (on oublie le cristal) en interaction

$$H = H_0 + H_{int}$$

énergie cinétique \rightarrow Coulomb évané \Rightarrow interaction locale entre deux électrons $U \times \delta(\vec{r}-\vec{r}')$
 \rightarrow Seuls peuvent interagir deux électrons dans un état singulet de spin (fonction d'onde symétrique dans l'espace)

d'où $H_{int} = U \int d\vec{r} n_{\uparrow}(\vec{r}) n_{\downarrow}(\vec{r})$

A. Électrons sans interaction :

On commence par étudier la réponse du gaz d'électrons sans interaction.

1) Un électron : énergie cinétique $\frac{\vec{p}^2}{2me}$
 spectre : $|\vec{k}, \sigma\rangle = |\vec{k}\rangle \otimes |\sigma\rangle$
onde plane \rightarrow vect. propre de S_z

densité d'aimantation : $\hat{m}(\vec{r}) = \mu_B \hat{S} \delta(\vec{r}-\vec{r}')$
 $\mu_B = \frac{e\hbar}{2me}$ sans dimension ici

$$\hat{m}(\vec{r}) = \mu_B \hat{S} \delta(\vec{r}-\vec{r}') \xrightarrow{\text{Fourier}} \hat{m}_{\vec{q}} = \mu_B \hat{S} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \rightarrow \hat{m}_{\vec{q}}^{\pm} = \mu_B \hat{S}^{\pm} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

$m^{\pm} = m^x \pm i m^y$

éléments de matrice : $\langle \vec{k} \sigma | \hat{m}_{\vec{q}}^{\pm} | \vec{k}' \sigma' \rangle = \mu_B \langle \vec{k} | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \vec{k}' \rangle \langle \sigma | \hat{S}^{\pm} | \sigma' \rangle$
 $1+\rangle \langle -1$

$$\langle \vec{k} \sigma | \hat{m}_{\vec{q}}^{\pm} | \vec{k}' \sigma' \rangle = \mu_B \delta_{\vec{k}', \vec{k} \mp \vec{q}} \delta_{\sigma, \pm \sigma'} \int \frac{d\vec{r}}{V} e^{i(\vec{k}' - \vec{k} \mp \vec{q}) \cdot \vec{r}} = \delta_{\vec{k}', \vec{k} \mp \vec{q}}$$

2) Susceptibilité magnétique du gaz :

$$H_{pert}(t) = - \int d\vec{r} \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \hat{M}(\vec{r}) = - \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} (B_{\vec{q}}^+(t) \hat{M}_{-\vec{q}}^+ + B_{\vec{q}}^-(t) \hat{M}_{-\vec{q}}^-)$$

aimantation du gaz

on a posé $M^{\pm} = M^x \pm i M^y$ et $B^{\pm} = \frac{1}{2} (B^x \mp i B^y)$

Réponse : $\langle M_{\vec{q}}^{\pm}(t) \rangle_B = \int dt' \chi_{\vec{q}}^{\pm}(t-t') B_{\vec{q}}^{\mp}(t') + O(B^2)$

$\langle M^{\pm} \rangle = 0$ (métal paramagn.) \rightarrow on $\chi_{\vec{q}}^{\pm}(t) = i \theta(t) \langle [M_{\vec{q}}^+(t), \frac{1}{V} M_{-\vec{q}}^-] \rangle$

3) On utilise la formule de l'annexe pour donner la représentation spectrale de la susceptibilité en termes des opérateurs à un corps

$$\chi_{\vec{q}}^{+-}(t) = \frac{i}{V} \theta(t) \langle [M_{\vec{q}}^{+}(t), M_{-\vec{q}}^{-}] \rangle \quad \text{cf. annexe} \quad \vec{M} = \sum_{\vec{k}} \vec{m}^{(\vec{k})}$$

Somme sur les électrons

$$= \frac{i}{V} \theta(t) \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}' \\ \sigma, \sigma'}} (f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}'})) \langle \vec{k} \sigma | \hat{m}_{\vec{q}}^{+} | \vec{k}' \sigma' \rangle e^{i(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'})t} \langle \vec{k}' \sigma' | \hat{m}_{-\vec{q}}^{-} | \vec{k} \sigma \rangle$$

Fermi-Dirac

$$= \frac{i}{V} \mu_B^2 \theta(t) \sum_{\vec{k}} (f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})) e^{i(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})t}$$

Fermi-Dirac

$$\chi^{+-}(\vec{q}, \omega) = -\frac{\mu_B^2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0^+}$$

Fourier $\int_0^{\infty} dt i e^{i\omega t} = \frac{i}{0^+ - i\omega} = \frac{-1}{\omega + i0^+}$

on reconnaît la compressibilité (réponse densité-densité) du gaz de fermions sans interaction

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0^+}$$

spin

i.e. $\chi^{+-}(\vec{q}, \omega) = -\frac{\mu_B^2}{2} \chi_0(\vec{q}, \omega)$

b) $\chi^{++}(\vec{q}, \omega)$ fait intervenir le produit d'éléments de matrice

$$\langle \sigma | \hat{m}^{+} | \sigma' \rangle \langle \sigma' | \hat{m}^{+} | \sigma \rangle = 0 \Rightarrow \chi^{++}(\vec{q}, \omega) = 0$$

de même $\chi^{-}(\vec{q}, \omega) = 0$

c) Rappelons que la $i0^+$ au dénominateur est liée à la causalité de la réponse. En outre, le 0^+ s'interprète comme un taux de relaxation infinitésimal: $0^+ \leftrightarrow 1/\tau$

4) Réponse statique ($\omega=0$)

$$a) \chi_0(\vec{q}, 0) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}} \quad \checkmark \quad \begin{matrix} i0^+ \text{ inutile pour } \omega=0 \text{ car le} \\ \text{numérateur s'annule avec le} \\ \text{dénominateur} \end{matrix}$$

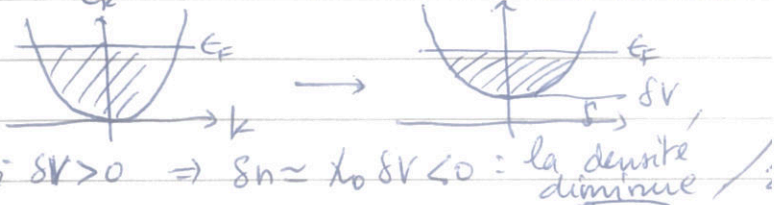
$$\approx \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{\partial f(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \quad \text{pour } q = \|\vec{q}\| \ll k_F$$

$$\approx -\delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F) \quad \text{car } k_B T \ll \epsilon_F \text{ en pratique}$$

i.e. $\chi_0(\vec{q}, 0) \approx -\frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F) = -2 \rho(\epsilon_F)$: densité d'états par spin et par unité de volume

$\chi_0(\vec{q}, 0) < 0$
interprétation:

réponse du gaz à ϵ_F fixée à un potentiel δV :



b) $\chi_0(\vec{q}, 0) \approx -2 \rho(\epsilon_F) < 0 \Rightarrow \boxed{\chi^{+-}(\vec{q}, 0) \approx + \mu_B^2 \rho(\epsilon_F) > 0}$

$B^- = \frac{1}{2}(B^x + i B^y) \Rightarrow \langle M^+ \rangle = \langle M^x + i M^y \rangle = \frac{1}{2} \chi^{+-}(\vec{q}, 0) (B^x + i B^y)$

$\langle M^x \rangle$ a le signe de B^x (idem pour $\langle M^y \rangle$)

la réponse est paramagnétique (ici on a négligé l'effet orbital et l'on a seulement considéré la réponse du spin \Rightarrow paramagnétisme de Pauli)

B. Électrons en interaction

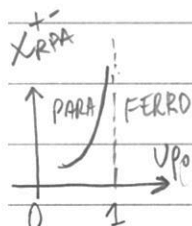
À l'approximation RPA (\sim champ moyen) les fonctions de réponse du gaz en interaction sont données par :

compressibilité : $\chi_{RPA}(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - U \chi_0(\vec{q}, \omega)}$

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

1) Instabilité de Stoner

limite statique : $\chi_{RPA}^{+-}(\vec{q}, 0) \approx \frac{+ \mu_B^2 \rho_0}{1 - U \rho_0}$ où $\rho_0 \equiv \rho(\epsilon_F)$
(on utilise le 4-4)

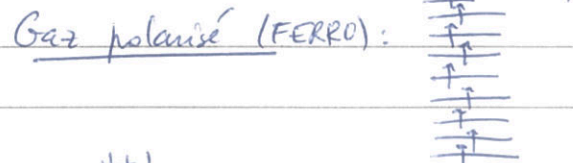
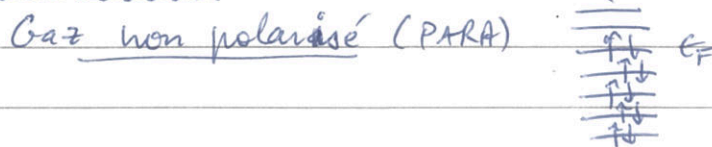


La susceptibilité magnétique diverge lorsque $U \cdot \rho_0 = 1$ i.e. lorsque l'interaction atteint la valeur critique $U = U_c \stackrel{def}{=} 1/\rho_0$

C'est l'instabilité de Stoner.

Une forte interaction, $U > U_c$, favorise la phase ferromagnétique.

2) Pour comprendre cela : étudions deux cas limites



* énergie de Fermi : $\langle H_0 \rangle = V \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon z(\epsilon) \sim V \epsilon_F^{\nu+1} \sim N \epsilon_F^{\nu+1}$
 $\epsilon^{\nu-1}$ où $\nu > 0$

* énergie d'interaction : $\langle H_{int} \rangle \sim U \times N \times n$ si le gaz est non polarisé
 $= 0$ polarisé complètement

\Rightarrow lorsque le gaz se polarise complètement, l'énergie cinétique par électron augmente de $\frac{\langle H_0 \rangle}{N} \sim \epsilon_F$, alors que l'énergie d'interaction diminue de $\frac{\langle H_{int} \rangle}{N} \sim U \times n$. Le crossover PARA/FERRO correspond donc à $\epsilon_F \sim U \times n$ i.e. $U \sim \frac{\epsilon_F}{n} \sim \frac{1}{\rho_0}$ QED.

On s'intéresse maintenant au cas d'un métal paramagnétique $U < U_c = 1/\rho_0$, proche de la transition PARA/FERRO.

2) On analyse la susceptibilité dynamique dans la limite $\frac{\omega}{v_F q} \ll \frac{q}{k_F} \ll 1$.

On utilise le développement

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = -2\rho_0 \times \left(1 + \frac{i\pi}{2} \frac{\omega}{v_F q} - \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2 \right)^{-1}$$

⇓

$$\chi_{RPA}^{+-}(\vec{q}, \omega) \approx \frac{\mu_B^2 \rho_0}{1 - \rho_0 U \times \left(1 + \frac{i\pi}{2} \frac{\omega}{v_F q} - \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2 \right)}$$

← on néglige la dépendance en ω et q au numérateur car $\frac{\omega}{v_F q} \ll \frac{q}{k_F} \ll 1$

$$= \frac{\mu_B^2}{U} \frac{1}{\frac{1}{\rho_0 U} - 1 + \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2 - \frac{i\pi}{2} \frac{\omega}{v_F q}}$$

introduisons $\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{U_c}{U} - 1 > 0$ (PARA) pour caractériser la distance à la transition. i.e. $\epsilon \ll 1$

$$\chi_{RPA}^{+-}(\vec{q}, \omega) \approx \frac{\mu_B^2 \rho_0 \frac{2i}{\pi} v_F q}{\omega + \frac{2i}{\pi} v_F q \left(\epsilon + \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2 \right)}$$

si on pose $\Gamma(q) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2}{\pi} v_F q \left(\epsilon + \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2 \right)$ la susceptibilité présente la structure :

$$\chi_{RPA}^{+-}(\vec{q}, \omega) \approx \frac{\mu_B^2 \rho_0}{\epsilon + \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2} \frac{i\Gamma(q)}{\omega + i\Gamma(q)}$$

ce comportement ne traduit pas un mode collectif

(un mode collectif, i.e. une résonance, se manifeste par un comportement du type $\frac{1}{\omega - \omega(q) + i0^+}$ ou $\frac{1}{\omega - \omega(q) + i\gamma(q)}$ où $\omega(q)$ est la relation de dispersion)

3) Facteur de structure

$$S^{+-}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V} \int_{\mathbb{R}} dt e^{i\omega t} \langle \hat{M}_{\vec{q}}^+(t) \hat{M}_{-\vec{q}}^- \rangle$$

a) $S^{+-}(\vec{q}, \omega)$ caractérise les fluctuations d'aimantation

$$\langle \hat{M}_{\vec{q}}^+ \hat{M}_{-\vec{q}}^- \rangle = \langle |M_{\vec{q}}^x|^2 + |M_{\vec{q}}^y|^2 \rangle$$

Σ est relié à la fonction de réponse par le théorème fluctuation-dissipation

$$S^{+-}(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{1 - e^{-\beta\omega}} \text{Im}[\chi_{RPA}^{+-}(\vec{q}, \omega)]$$

b) Limite de basse fréquence $\omega \ll k_B T$:

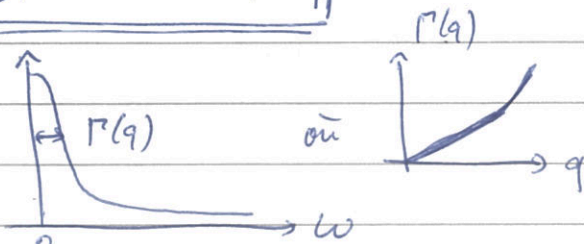
$$S^{+-}(\vec{q}, \omega) \approx 2k_B T \operatorname{Im} \left[\frac{\chi_{RPA}^{+-}(\vec{q}, \omega)}{\omega} \right]$$

$$\frac{1}{\omega} \frac{\mu_B^2 \rho_0}{\Sigma + \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2} \frac{i\Gamma(q)}{\omega + i\Gamma(q)}$$

$$\frac{i\Gamma(q)(\omega - i\Gamma(q))}{\omega^2 + \Gamma(q)^2}$$

$$\boxed{S^{+-}(\vec{q}, \omega) \approx 2k_B T \frac{\mu_B^2 \rho_0}{\Sigma + \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2} \frac{\Gamma(q)}{\omega^2 + \Gamma(q)^2}}$$

présente le pic



On parle de paramagnons pour désigner cette forte augmentation des fluctuations d'aimantation à $\omega \rightarrow 0$ et $q \rightarrow 0$

4) Mesure par diffusion de neutrons

Métal de Ni_3Ga à $T = 22 \text{ K}$.

spectro \rightarrow on sélectionne ω

angle de diffusion $\theta \rightarrow$ on sélectionne $q \approx 2k_N \sin \theta$

vect. d'onde des neutrons

Sur les données expérimentales on voit "pousser" le pic lorentzien en fonction de ω lorsque l'angle de diffusion (i.e. q) diminue.

Le pic important qui apparaît à $\omega \rightarrow 0$ et $q \rightarrow 0$ est la signature des paramagnons.