Mines Deuxième année Année 2005-2006
Physique du Solide
Cyrille Barreteau
cyrille.barreteau@cea.fr
http ://www-drecam.cea.fr/spcsi/cbarreteau/physique_du_solide/physol.htm

TD no 10
Magnétisme itinérant et critère de Stoner

Résumé

Jusqu'à présent le spin de l'électron n'est apparu dans nos formules que par le fameux facteur 2 qui prenait en compte la dégénerescence de spin. Autrement dit les spin $\uparrow$ et $\downarrow$ jouaient exactement le même rôle. Nous allons considérer dans ce TD un modèle simple mais neanmoins très riche qui nous permettra d'expliquer l'existence de magnétisme dans certains matériaux. Ce modèle s'applique au magnétisme dit itinérant c'est à dire dans des matériaux pour lesquels les électrons sont assez fortement délocalisés (sans pour autant être totalement libres !).

1 Le modèle de Stoner

1.1 Les bandes rigides

Soit $n_0(E)$ la densité d'état du matériau non magnétique. On suppose que dans un modèle simple les densités d'état des spins $\uparrow$ et $\downarrow$ sont tout simplement décalées rigidement l'une par rapport à l'autre d'une quantité IM. I étant un paramètre effectif reflétant l'interaction entre électrons et M le moment magnétique. Plus exactement les densités d'état $n_\uparrow(E)$ et $n_\downarrow(E)$ s'écrivent :

$$n_\uparrow(E) = n_0(E + 1/2IM) \quad ; \quad n_\downarrow(E) = n_0(E - 1/2IM)$$

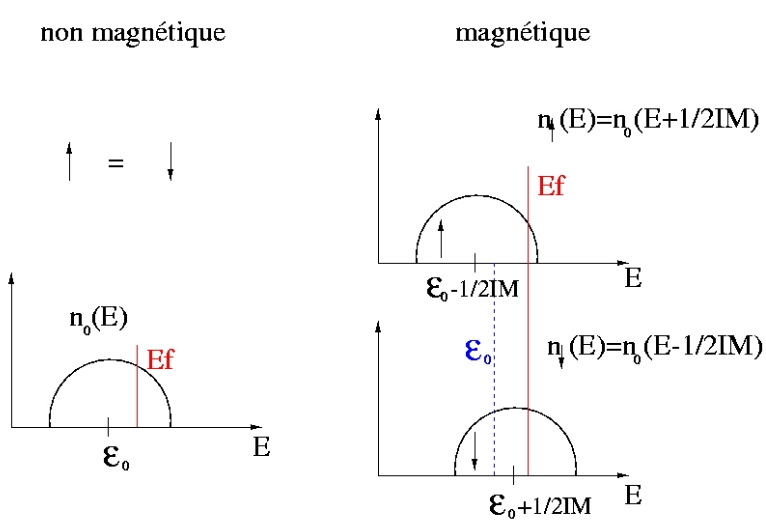


FIG. 1 – Modèle de Stoner

1.2 Autocohérence

Le moment magnétique d'un tel système est donné par la différence entre le nombre d'électrons $\uparrow$ et $\downarrow$ soit :

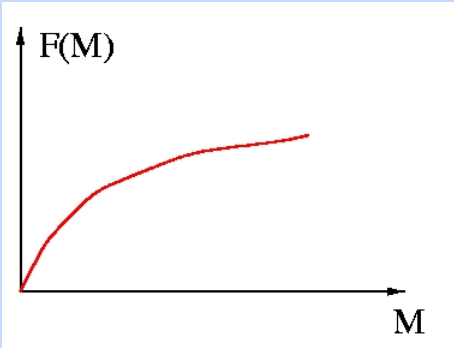
$$M = \int_{-\infty}^{E_f} n_\uparrow(E)dE - \int_{-\infty}^{E_f} n_\downarrow(E)dE$$

$n_\uparrow(E)$ et $n_\downarrow(E)$ étant dépendant de M il est clair que cette équation est en fait une équation autocohérente. Autrement dit la solution de ce problème est donnée par une équation du type $M = F(M)$.

Question no 1 : Montrer que $F(M)$ peut s'écrire :

$$F(M) = \int_{E_f - IM/2}^{E_f + IM/2} n_0(E)dE$$

Question no 2 : Montrer que $F(M)$ est nulle en $M = 0$ et sature pour M grand :



1.3 Critère de Stoner

Question no 3 : Montrer que $F'(0) = In_0(E_f)$. En déduire que la condition d'apparition du magnétisme est tout simplement

$$In_0(E_f) > 1$$

2 Métaux de transition

2.1 Matériaux massifs : fcc, bcc, hcp

La condition $In_0(E_f) > 1$ est appelée critère de Stoner, du nom du scientifique qui l'a énoncée la première fois. Le paramètre I, appelé paramètre de Stoner est une grandeur qui caractérise l'interaction entre électrons. I peut-être calculé par différentes techniques et l'on trouve que sa valeur est toujours de l'ordre de l'eV. En revanche la densité d'état au niveau de Fermi est très dépendante de la structure atomique et du nombre d'électrons par atome, car la densité d'état peut présenter plusieurs pics et creux comme le montre l'exemple suivant de la densité d'état du Fer (non magnétique).

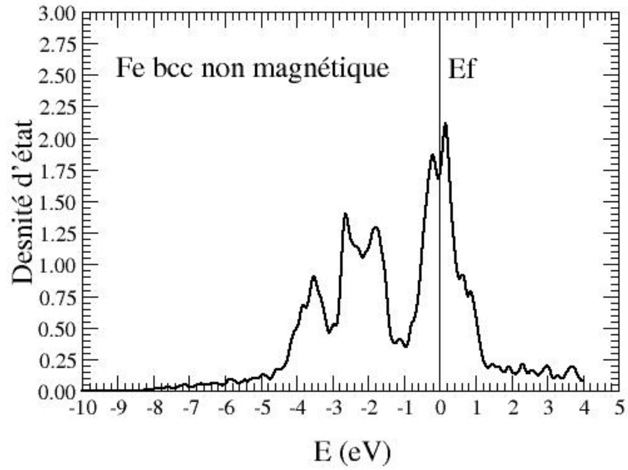


FIG. 2 – Densité d'état du Fer bcc non magnétique

Le magnétisme aura donc tendance à apparaître dans les matériaux dont la densité d'état présente un pic au niveau de Fermi. D'autre part la largeur de bandes *d* des métaux de transition diminue avec le remplissage de la bande et de plus $W_{3d} < W_{4d} < W_{5d}$ comme le montre le schéma ci dessous :

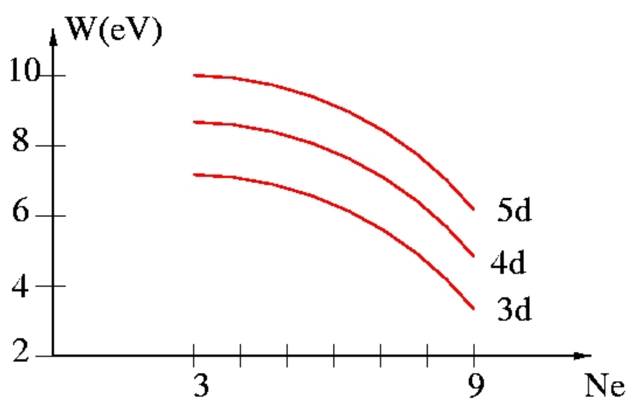


FIG. 3 – Largeur de bandes des métaux de transition

Question no 4 : Expliquer pourquoi les métaux 3*d* ont plus tendance à être magnétique que les autres.

Les 3 métaux magnétiques sont en effet le Fer, le Cobalt et le Nickel qui vérifient effectivement le critère de Stoner comme le montre le schéma suivant :

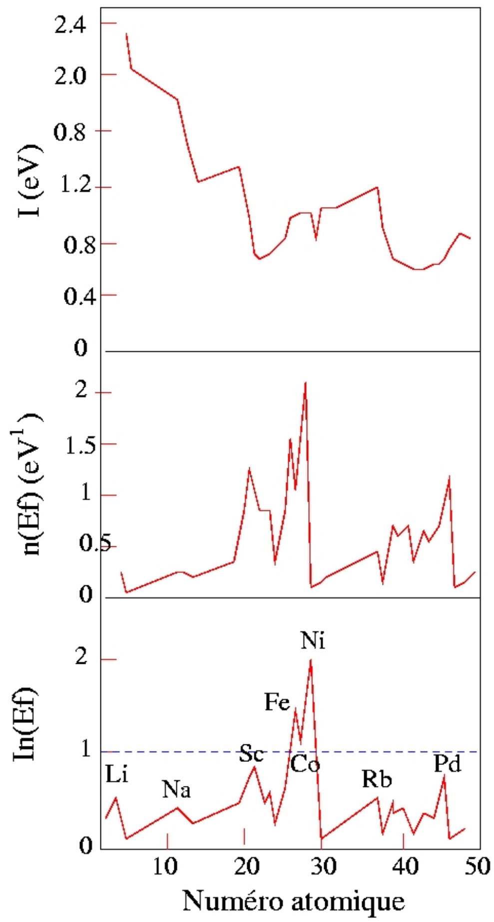


FIG. 4 – Paramètre de Stoner, densité d'état au niveau de Fermi et critère de Stoner des métaux de transition.

2.2 Structures de basse dimension

Les résultats précédents s'appliquent à matériaux massif dans une structure cristallographique donnée, mais que se passe-t-il lorsque le matériau se présente sous forme de petits particules nanométriques ou bien sous forme de film mince par exemple. La structure électronique de tels matériaux peut être fortement modifiée par rapport à celle du matériau massif. Il existe un résultat important qui relie la largeur d'une densité d'état au nombre de voisins d'un atome dans la structure : le second moment de la densité d'état est proportionnel à la racine carré du nombre de voisins Z multipliée par la valeur absolue de l'intégrale de saut $\beta(R)$

$$\sigma = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} (E-\varepsilon_0)^2 n(E) dE} \propto \sqrt{Z}|\beta(R)|$$

Question no 5 : Expliquer pourquoi le magnétisme est en général renforcé dans les agrégats nanométriques ou de manière générale pour des matériaux de basse dimensionalité.

Non seulement la basse dimensionalité renforce le magnétisme mais il existe des matériaux non magnétique à l'état massif et magnétiques sous forme de petites particules. C'est le cas par exemple du Rhodium qui présente une aimantation importante sous forme d'agrégats

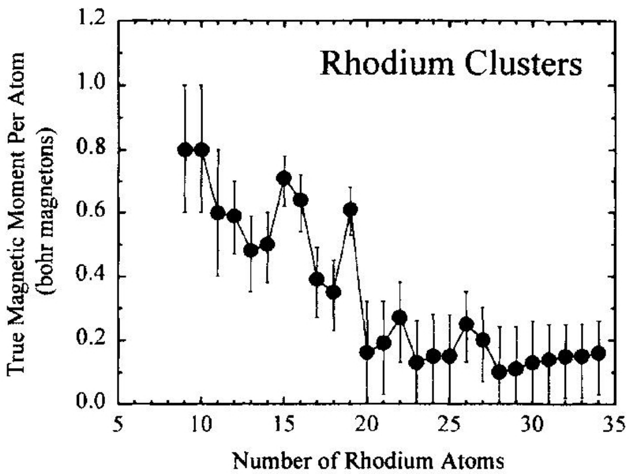


FIG. 5 – Magnétisme des petits agrégats de Rhodium

2.3 Effet de la contrainte

Question no 6 : Expliquer pourquoi le magnétisme est en général renforcé par une contrainte d'extension.

On peut d'ailleurs montrer (par le calcul) qu'il est possible de faire apparaître du magnétisme en étirant un matériau. Par exemple le calcul on montre qu'une extension d'une dizaine de pourcent de la maille du Palladium peut engendrer du magnétisme. Cependant un tel étirement correspond à des pressions (négatives) extrêmement grandes et impossible à atteindre experimentalement. En revanche le dépôt de quelques monocouches d'un matériau A sur un matériau B peut engendrer des contraintes très fortes sur la matériau déposé et influencer son magnétisme.