6) Magnétisme des solides

6.3 Thermodynamique d'une assemblée de moments localisés sans interaction

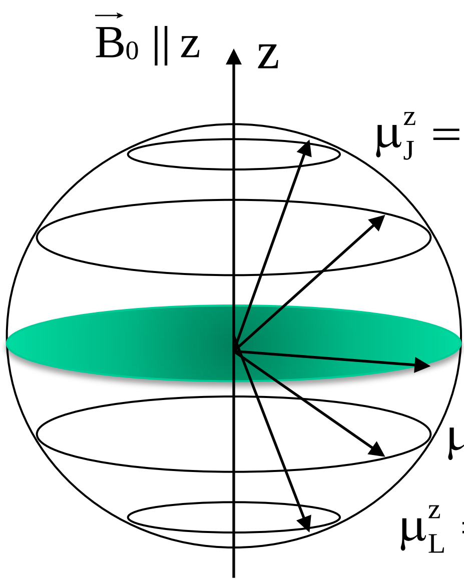
6.3.1 Paramagnétisme

Soit une assemblée d'atomes (ou d'ions) définie par leur nombre quantique J

En l'absence de champ magnétique les 2J+1 directions sont dégénérées (même énergie)

$$J_z \left| J, M_J \right\rangle = M_J \hbar \left| J, M_J \right\rangle$$

$$M_J = -J, -J+1, \cdots, J-1, J$$



$$\mu_J^z = -g_J \mu_B (-2)$$

$$\mu_L^z = -g_J \mu_B (-1)$$

$$\mu_L^z = 0$$

$$\mu_L^z = -g_J \mu_B (1)$$

$$\mu_L^z = -g_J \mu_B (2)$$

$$\vec{\mu}_J = -g_J \mu_B \frac{\vec{J}}{\hbar}$$

$$\left\| \vec{\mu}_J \right\| = g_J \mu_B \sqrt{J(J+1)}$$

$$\boxed{\mu_J^z = -g_J \mu_B M_J}$$

g_J Facteur gyromagnétique de Landé

6) Magnétisme des solides

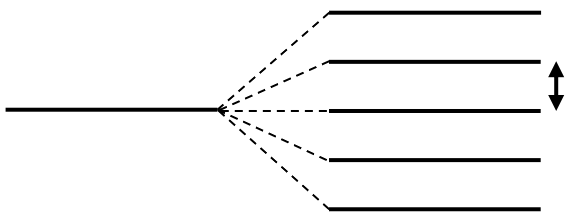
•En présence de champ magnétique il y a couplage entre le moment magnétique de l'atome et le champ appliqué

$$E_{Zeeman} = -\vec{\mu}_J.\left(\mu_0 \vec{H}\right) = -\vec{\mu}_J.\vec{B}$$

Levée de dégénérescence des 2J+1 niveaux

$B = 0$ $\qquad$ $B \neq 0$

$$E_{Zeeman} = g_J \mu_0 \mu_B M_J H \qquad \vec{B} \,||\, z$$



$\Delta E = g_J \mu_0 \mu_B H$

$\Delta E = g\,\mu_B\, \mu_0 H \sim 10^{-4} eV$

1T

Thermodynamique statistique d'une assemblée d'atomes indépendants:

$$E_{Zeeman}^{tot} = -\vec{B}.\sum_i \vec{\mu}_J^{\,i}$$

$$Z = \prod_{i=1}^{N} z_i = z^N \qquad z = \sum_{M_J=-J}^{M_J=J} e^{-\beta E(M_J)}$$

$$F = -k_B T \ln Z = -N k_B T \ln z = Nf \qquad f = -k_B T \ln z$$

6) Magnétisme des solides

$$z = \sum_{M_J=-J}^{M_J=J} e^{-\beta E(M_J)} = \sum_{M_J=-J}^{M_J=J} e^{-M_J \beta g_J \mu_B \mu_0 H} = \sum_{M_J=-J}^{M_J=J} e^{-x M_J} \qquad x = \beta g_J \mu_B \mu_0 H = g_J \mu_B \frac{B}{k_B T}$$

$$z = e^{xJ} \frac{1-e^{-(2J+1)x}}{1-e^{-x}} = \frac{\mathrm{sh}\left[\frac{x}{2}(2J+1)\right]}{\mathrm{sh}\left(\frac{x}{2}\right)} \qquad f = -k_B T \ln z = k_B T \ln \frac{\mathrm{sh}\left[\frac{x}{2}(2J+1)\right]}{\mathrm{sh}\left(\frac{x}{2}\right)}$$

Moment magnétique moyen

$$\langle \mu_z \rangle = \frac{\sum_{M_J=-J}^{M_J=J} \left(-g_J \mu_B M_J\right) e^{-\beta E_{J_z}}}{\sum_{M_J=-J}^{M_J=J} e^{-\beta E_{J_z}}} = \frac{k_B T \dfrac{\partial z}{\partial(\mu_0 H)}}{z} = -\frac{\partial f}{\partial(B)}$$

6) Magnétisme des solides

$$M = \frac{M_{tot}^{z}}{V} = \frac{\langle \mu_z \rangle}{v_{at}} = \frac{g_J \mu_B J}{v_{at}} \underbrace{\left[\frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} y \right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{y}{2J} \right) \right]}_{B_J(y)}$$

Aimantation=
Moment/volume

$$\mu_s = g_J \mu_B J \qquad y = Jx = \frac{g_J \mu_B J(\mu_0 H)}{k_B T} = \frac{\mu_s B}{k_B T} \qquad M_s = \frac{\mu_s}{v_{at}} = \frac{N}{V} g_J \mu_B J$$

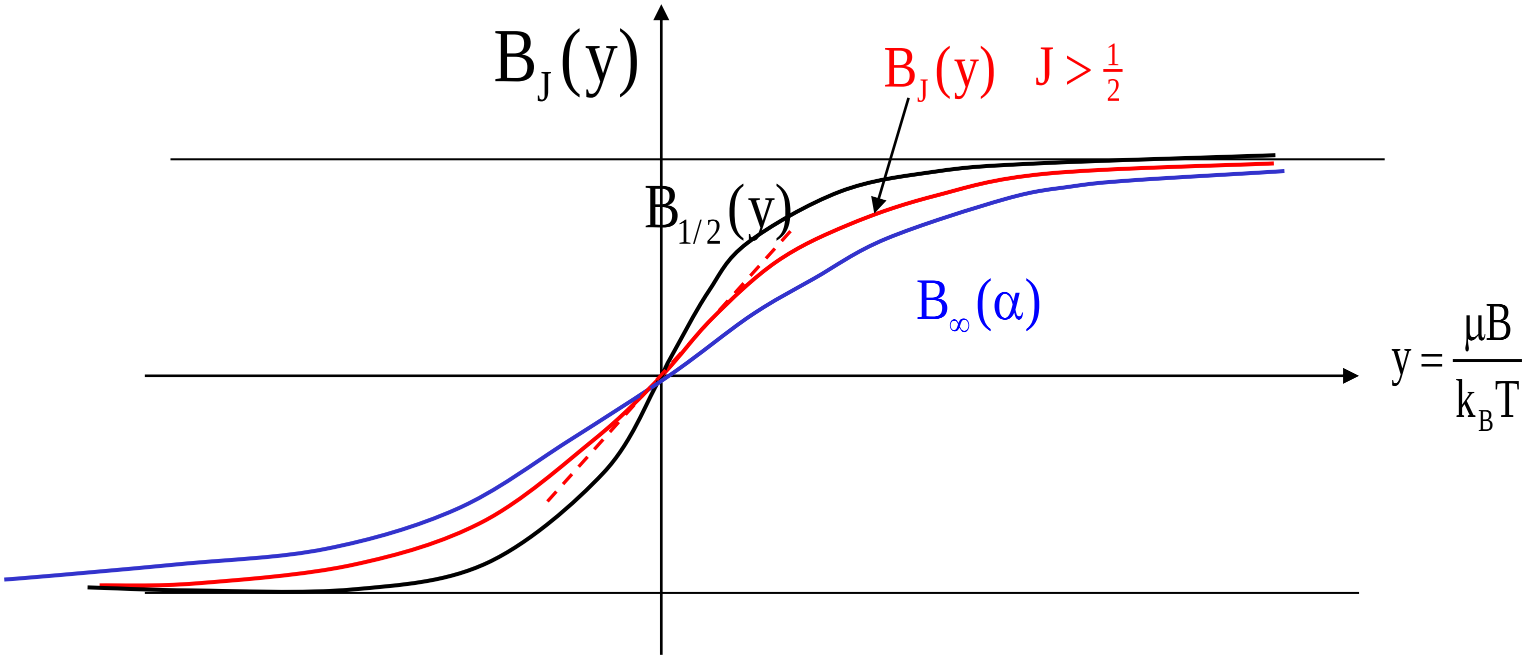
$$\boxed{M = M_s B_J \left(\frac{\mu_S B}{k_B T} \right)}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_J(y) \\ \\ B_{1/2}(y) = \mathrm{th}(y) \\ \\ B_\infty(y) = L(y) = \coth y - \dfrac{1}{y} \end{array} \right.$$

$B_J(y)$: Fonction de Brillouin

$B_\infty(y)$: Fonction de Langevin

6) Magnétisme des solides



$$\lim_{y\to\infty} B_J(y)=1 \longrightarrow \lim_{y\to\infty} M(y)=M_s$$

$$\coth(y) \underset{y\to 0}{\sim} \frac{1}{y}+\frac{y}{3} \longrightarrow B_J(y) \underset{y\to 0}{\sim} \frac{J+1}{3J}y$$

6) Magnétisme des solides

•Susceptibilité magnétique

$$M \sim N\frac{(g_J\mu_B)^2}{3V}\frac{J(J+1)}{k_BT}(\mu_0 H) \longrightarrow \chi = \frac{M}{H} \sim N\frac{(g_J\mu_B)^2}{3V}\frac{J(J+1)}{k_BT}\mu_0$$

$$\boxed{\chi \sim \frac{C}{T}} \qquad C \sim \frac{N}{V}\frac{\mu_0}{3k_B}\underbrace{\left(g_J\mu_B\sqrt{J(J+1)}\right)^2}_{\mu_J^2} = \frac{N}{V}\frac{\mu_0}{3k_B}\mu_J^2$$

•Energie et capacité calorifique magnétique

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta} = -N\frac{\partial \ln z}{\partial\beta}$$

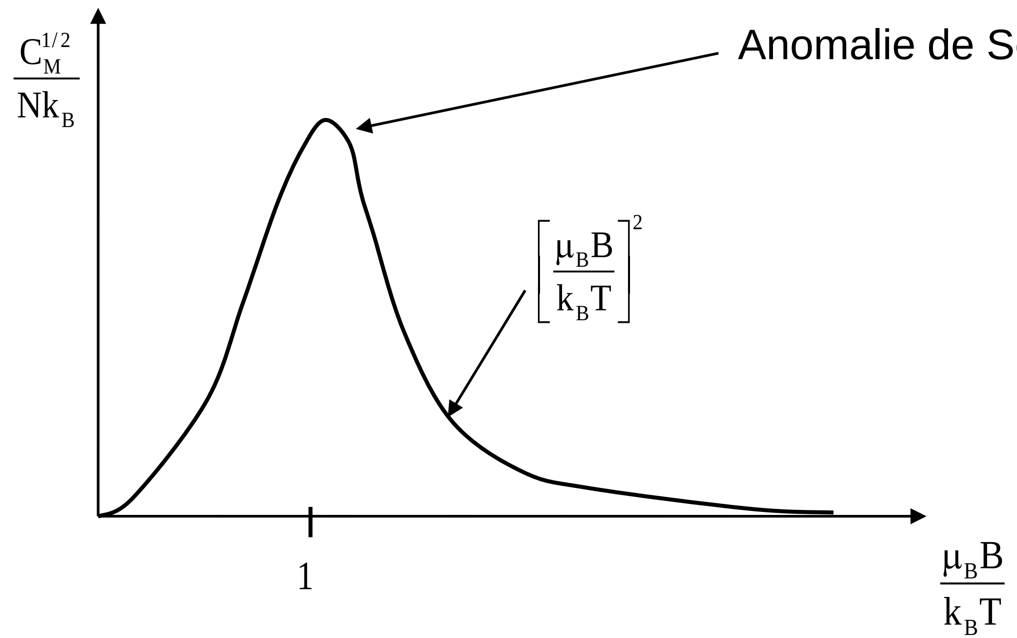
$$\frac{\langle E\rangle}{V} = -\frac{N}{V}g_J\mu_B J(\mu_0 H)B_J(y) = -\mu_0\langle M_{tot}\rangle H$$

$$C_M^J = \frac{\partial\langle E_J\rangle}{\partial T}$$

$J = 1/2$

Moment de spin

$$C_M^{J=1/2} = Nk_B \left[\frac{g\mu_B B}{2k_B T}\right]^2 \frac{1}{ch^2\left(\frac{g\mu_B B}{2k_B T}\right)} \qquad (g = 2)$$



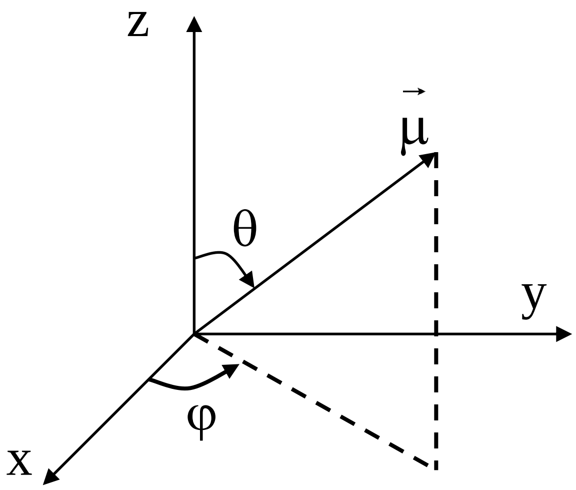
Anomalie de Schottky $\quad k_B T \sim \mu_B B$

Excitation entre deux niveaux séparés de $\quad \Delta E = \mu_B B$

6) Magnétisme des solides

$J=\infty$ Théorie semi-classique

$$E_{Zeeman} = -\vec{\mu}.\vec{B} = -\mu B\cos\theta$$



$$\langle\vec{\mu}\rangle = \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \vec{\mu}\, e^{\frac{\mu B\cos\theta}{k_B T}}}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, e^{\frac{\mu B\cos\theta}{k_B T}}}$$

$$\langle\vec{\mu}\rangle = \langle\mu_z\rangle \vec{z} \qquad \langle\mu_z\rangle = \mu L\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)$$

Fonction de Langevin

$$\mu_z^{J\to\infty} = \underbrace{g_J \mu_B J}_{\mu} \underbrace{L\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)}_{B_\infty(y)}$$

6) Magnétisme des solides

Remarque importante: dans de nombreux matériaux le magnétisme orbital est faible du fait de l'influence de l'environnement si bien que l'on a souvent

$$\begin{cases} L = 0 \\ J = S \\ g_J = 2 \end{cases} \qquad \mu_{eff} = 2\mu_B\sqrt{S(S+1)}$$

•Ordres de grandeur

$$y = \frac{g_J \mu_B J(\mu_0 H)}{k_B T} = \frac{\mu_s B}{k_B T}$$

$$\begin{cases} \mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m} = 9,27\ 10^{-24}\ J/T \\ T = 300K \\ \mu_0 H = 1T \\ k_B = 1,38\ 10^{-23}\ J/K \end{cases}$$

$y \sim 2\ 10^{-3} \ll 1 \longrightarrow$ Approximation y≈0 justifiée

$$\mu_0 = 4\pi 10^{-7}$$

$$\frac{V}{N} = \mathring{A}^3$$

$$\chi \sim \frac{N}{V}\left(g_J \mu_B\right)^2 \frac{J(J+1)}{3k_B T}\mu_0$$

$$\chi \sim 10^{-2}, 10^{-3}$$

6.3.2 Paramagnétisme en présence d'interactions magnétiques interatomiques

Champ moléculaire agissant en parallèle du champ appliqué

$$\vec{H}_m = \gamma \vec{M}$$

γ Constante de champ moléculaire
Proportionnelle aux interactions
électrons-électrons

$$\vec{H}_{tot} = \vec{H} + \vec{H}_m = \vec{H} + \gamma \vec{M}$$

$$\chi_{eff} = \frac{M}{H_{tot}} = \frac{C}{T} \Rightarrow \frac{M}{H + \gamma M} = \frac{C}{T}$$

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{C}{T - C\gamma} = \frac{C}{T - \theta}$$

$$\theta = C\gamma$$

paramagnétique $\theta \sim 10K$

ferromagnétique $\theta > 0$

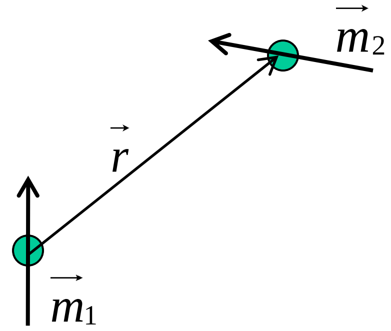
$\left\{ \begin{array}{l} \text{ferrimagnétique} \\ \text{antiferromagnétique} \end{array} \right.$ $\theta < 0$

6.4 Assemblée de moments localisés en interaction

6.4.1 Origine de l'interaction interatomique

•Interaction dipolaire

$$E_{dip}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3}\left[\vec{m}_1.\vec{m}_2 - \frac{3}{r^2}\left(\vec{m}_1.\vec{r}\right)\left(\vec{m}_2.\vec{r}\right)\right]$$



Ordre de grandeur

$$m \sim \mu_B = 9,2742\ 10^{-24}\ Am^2$$

$$r \sim 2\text{A}$$

$$\mu_0 = 4\pi 10^{-7}\ \text{H/m}$$

$$E_{dip}(\vec{r}) \approx \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\mu_B^2}{r^3} \approx \frac{1}{8}10^{-23}\ J$$

$$\frac{E_{dip}(\vec{r})}{k_B} \approx 0.1K$$

Beaucoup trop faible pour être à l'origine du ferromagnétisme!!!

•Interaction d'échange interatomique

2 électrons en interaction coulombienne $$H = T_1 + T_2 + V_1 + V_2 + V_{12}$$

$$(T_1 + V_1)\varphi_a(r_1) = \varepsilon_a \varphi_a(r_1) \qquad (T_2 + V_2)\varphi_b(r_2) = \varepsilon_b \varphi_b(r_2)$$

singulet
$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_a(r_1)\varphi_b(r_2) + \varphi_a(r_2)\varphi_b(r_1)\right]\chi_S \qquad \chi_s = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right] \qquad S = 0$$

triplet
$$\Psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_a(r_1)\varphi_b(r_2) - \varphi_a(r_2)\varphi_b(r_1)\right]\chi_T \qquad \chi_T = \begin{cases} \left|\uparrow\uparrow\right\rangle \\ \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right] \\ \left|\downarrow\downarrow\right\rangle \end{cases} \qquad S = 1$$

$$E_S = \int \Psi_S^* H \Psi_S d^3r_1 d^3r_2 \qquad E_T = \int \Psi_T^* H \Psi_T d^3r_1 d^3r_2$$

$$E_S - E_T = 2J^*$$

Intégrale d'échange

$$J^* = \int \varphi_a^*(r_1)\varphi_b^*(r_2) V_{12} \varphi_a(r_2)\varphi_b(r_1) d^3r_1 d^3r_2$$

6.4.2 Modèle de Heisenberg

Hamiltonien à deux électrons $H = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - 2J^* \vec{s}_1 . \vec{s}_2$ $\vec{S} = \hbar \vec{s}$

Hamiltonien à deux spin $H_{spin} = -2J^* \vec{s}_1 . \vec{s}_2 = -J \vec{s}_1 . \vec{s}_2$ $J = 2J^*$

Hamiltonien de Heisenberg $\boxed{H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \vec{s}_i . \vec{s}_j}$

Couplage d'échange entre les sites i et j

$J_{i,j} > 0$ Couplage ferromagnétique $\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$

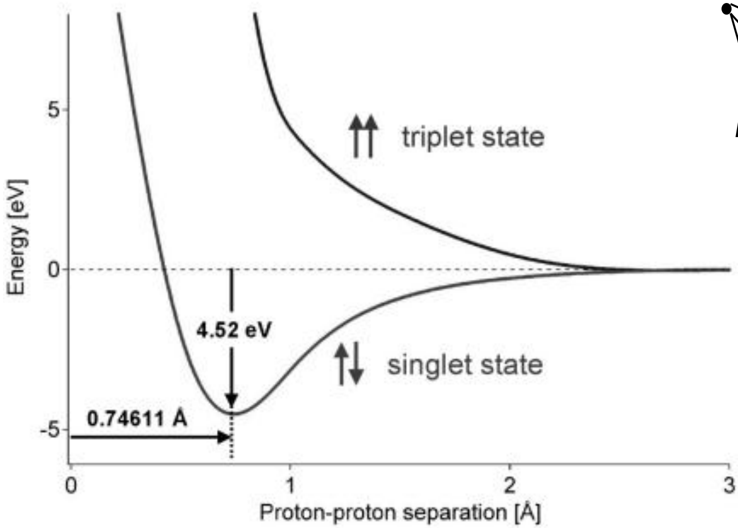
$J_{i,j} < 0$ Couplage antiferromagnétique $\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow$

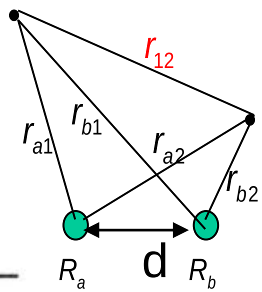
Remarque: afin de ne pas confondre l'intégrale d'échange avec le nombre quantique J nous noterons quand ce sera nécessaire l'intégrale d'échange J_H

6) Magnétisme des solides

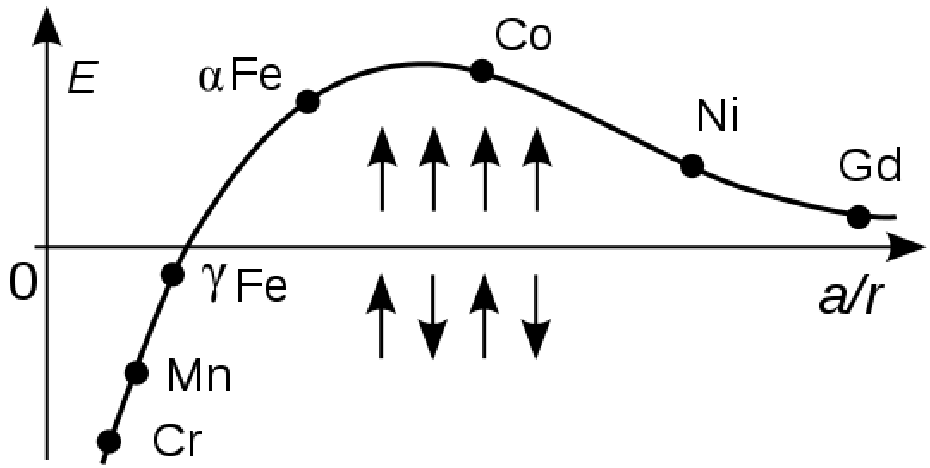
Molécule d'hydrogène

$$H = \underbrace{-\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{r_{a1}}}_{H_1=T_1+V_1} \underbrace{-\frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{1}{r_{b2}}}_{H_2=T_2+V_2} \underbrace{-\frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{d}}_{V_{12}}$$





Courbe de Bethe-Slater-Néel



6.4.3 Thermodynamique d'une assemblée de spin de Heisenberg

ferromagnétisme

$$H = -\tfrac{1}{2}\sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}} J_{i,j}\vec{s}_i.\vec{s}_j - \vec{B}.\sum_i \vec{\mu}_i \qquad \vec{\mu}_i = -g\mu_B\vec{s}_i \qquad J_{ij} > 0$$

<u>Approximation de champ moyen</u>*: si on isole un « spin » il voit un champ effectif*

$$H = g\mu_B \sum_i \underbrace{\left[\vec{B} - \frac{1}{g\mu_B}\sum_{j\neq i} J_{i,j}\vec{s}_j\right]}_{\vec{B}_{eff} = \vec{B}+\vec{B}_m}.\vec{s}_i = g\mu_B\vec{B}_{eff}.\sum_i \vec{s}_i$$

Hamiltonien paramagnétique avec champ effectif

$$\vec{B}_m = \mu_0\vec{H}_m = \mu_0\gamma\vec{M}$$

On néglige les fluctuations $\vec{s}_j \rightarrow \langle\vec{s}\rangle$

$$\vec{M} = -\frac{N}{V}g\mu_B\langle\vec{s}\rangle \qquad -\frac{1}{g\mu_B}\sum_{j\neq i} J_{ij}\vec{s}_j = -\frac{\langle\vec{s}\rangle}{g\mu_B}\sum_{j\neq i} J_{ij} = \frac{\vec{M}}{(g\mu_B)^2}\frac{V}{N}\sum_{j\neq i} J_{ij} = \mu_0\gamma\vec{M}$$

$$\gamma = \frac{1}{\mu_0(g\mu_B)^2}\frac{V}{N}\sum_i J_{ij} \underset{\text{1ers voisins}}{=} \frac{pJ_H}{\mu_0(g\mu_B)^2}\frac{V}{N}$$

J_H : intégrale d'échange entre 1ers voisins

6) Magnétisme des solides

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{C}{T - C\gamma} = \frac{C}{T - \theta}$$

$$\theta = C\gamma = \mu_0 \frac{N}{V} (g\mu_B)^2 \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}{3k_B} \frac{1}{\mu_0 (g\mu_B)^2} \frac{V}{N} \sum_i J_{ij}$$

$$\theta = \frac{\sum_i J_{ij}}{4k_B}$$

Force de l'interaction magnétique

•Equation « implicite »pour l'aimantation

rappel $g = 2$ $J = \frac{1}{2}$ $B_{1/2}(y) = \mathrm{th}(y)$

$$\begin{cases} M = M_s \mathrm{th}\left(\dfrac{g\mu_B}{2k_B T} B_{eff}\right) \\ B_{eff} = B + \underbrace{\mu_0 \gamma}_{\lambda} M \end{cases} \longrightarrow \boxed{M = M_s \mathrm{th}\left(\frac{g\mu_B}{2k_B T}(B + \lambda M)\right)}$$

•Solution à champ nul

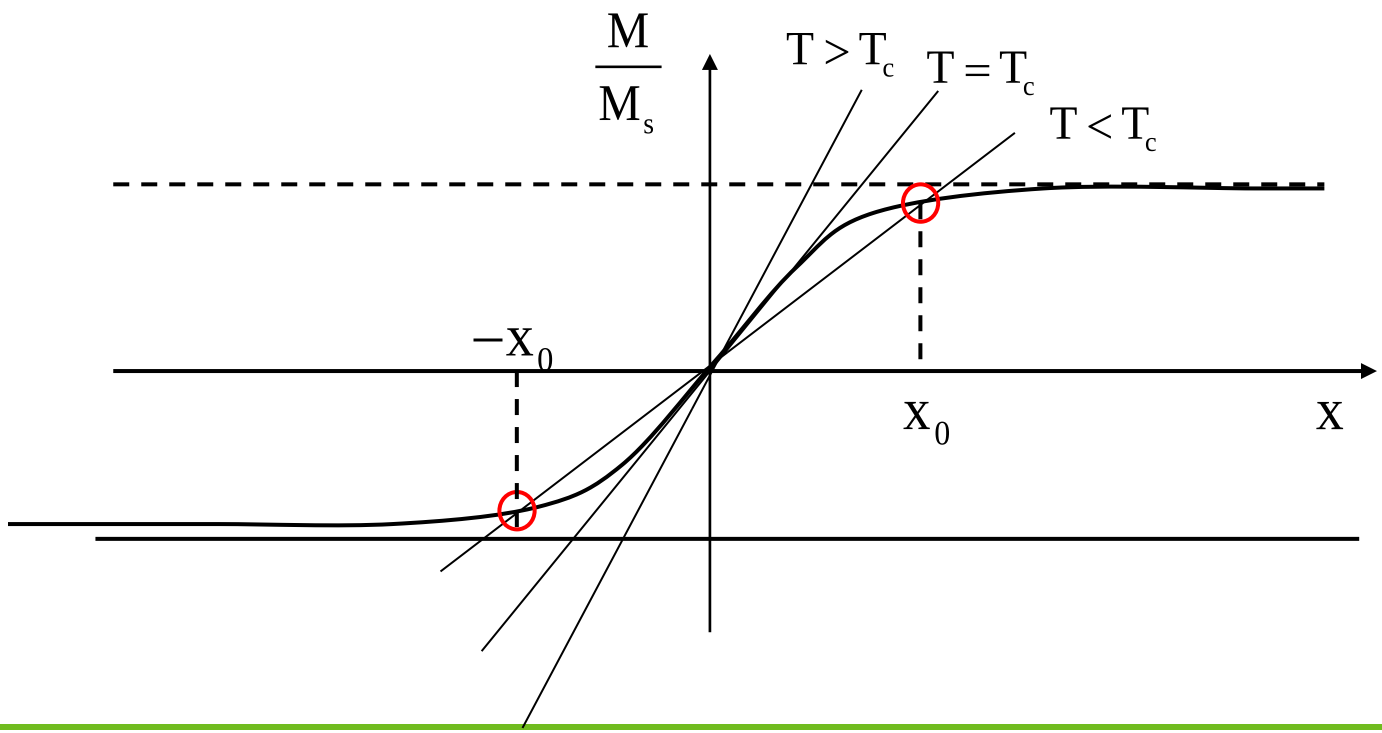
$$M = M_s \operatorname{th}\left(\frac{g\mu_B}{2k_B T} \lambda M \right) \qquad M = M_s \operatorname{th}\left(\frac{\theta}{T} \frac{M}{M_s} \right)$$

$$\theta = T_c = \frac{pJ_H}{4k_B}$$

$$M_s = \frac{N}{V} \frac{g\mu_B}{2}$$

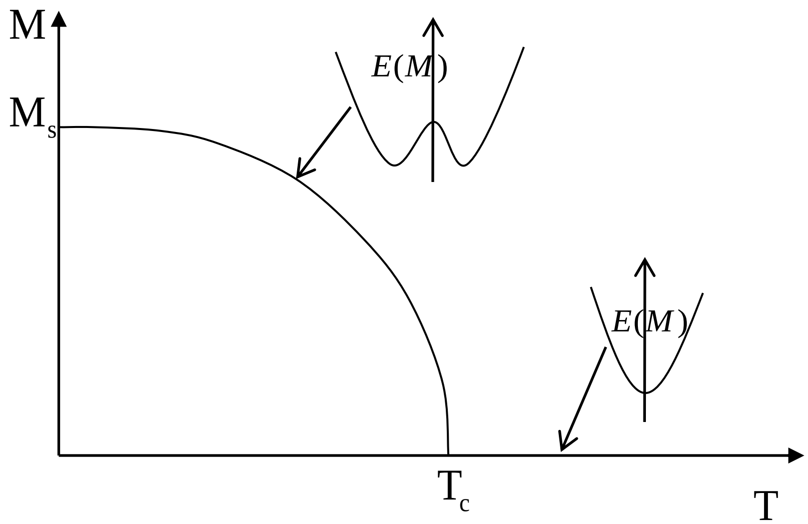
Solution graphique

$$\begin{cases} \dfrac{M}{M_s} = \operatorname{th}(x) \\ \dfrac{M}{M_s} = \dfrac{T}{T_c} x \end{cases}$$



6) Magnétisme des solides

•Transition de phase ferromagnétique ↔ paramagnétique



•Température critique $$T_C = \frac{pJ_H}{4k_B}$$

$$J_H \sim \tfrac{1}{10}\,\mathrm{eV}$$

$$k_B \times (300\mathrm{K}) = \tfrac{1}{40}\,\mathrm{eV}$$

$$T_C \sim 10^3\,\mathrm{K}$$

matériau	Tc (K)
Fe	1043
Co	1394
Ni	631

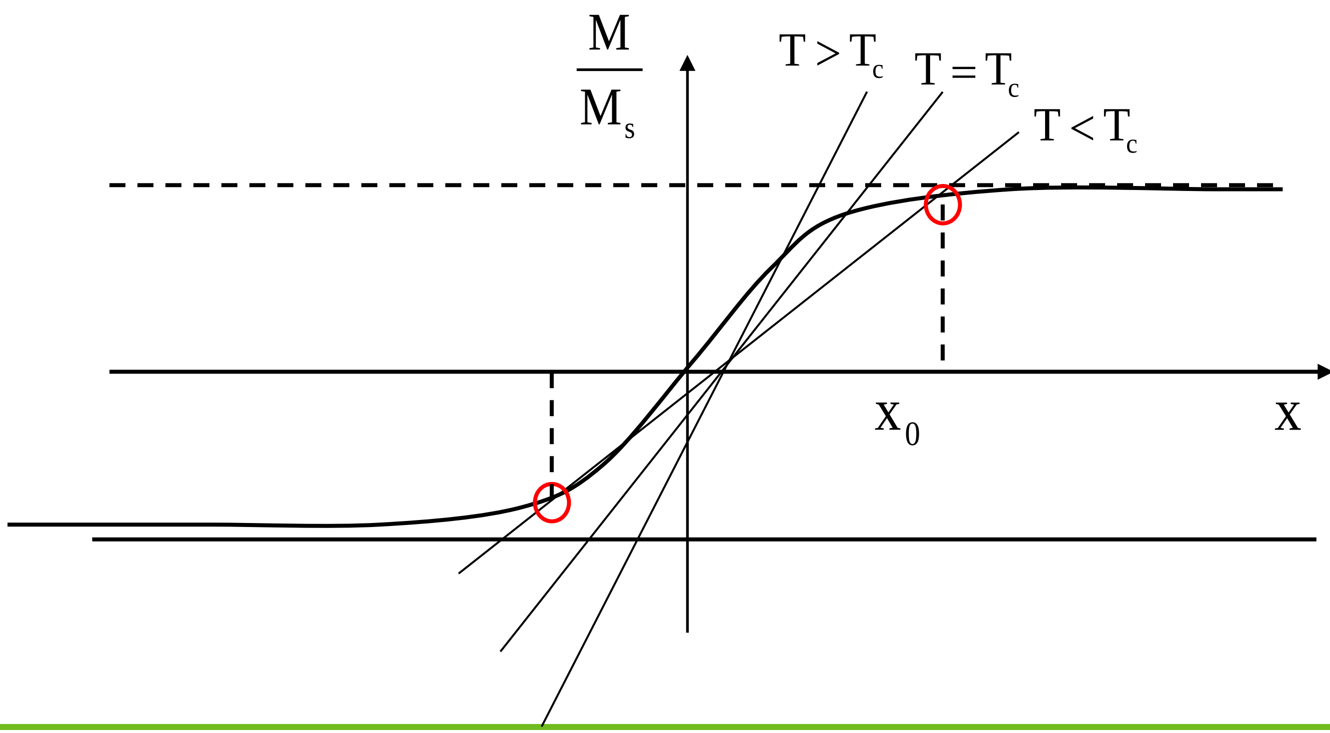
6) Magnétisme des solides

•Comportement en présence d'un champ magnétique

$$\frac{M}{M_s} = \mathrm{th}\left(\frac{g\mu_B}{2k_BT}(B+\lambda M)\right) = \mathrm{th}\left(\frac{M}{M_s}\frac{T_c}{T} + \frac{g\mu_B}{2k_BT}B\right)$$

Solution graphique

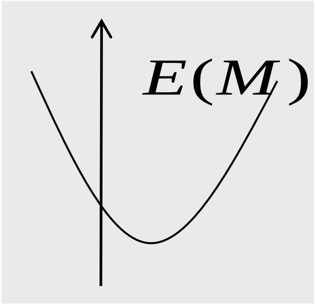
$$\begin{cases} \dfrac{M}{M_s} = \mathrm{th}(x) \\ \dfrac{M}{M_s} = \dfrac{T}{T_c}x - \dfrac{g\mu_B}{2k_BT_c}B \end{cases}$$



6) Magnétisme des solides

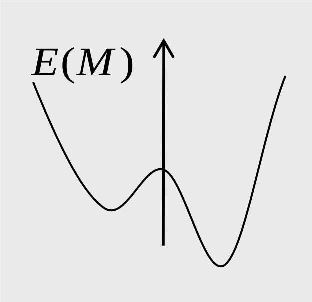
$T > T_c$

Toujours une solution (stable) de moment non nul
(plus de transition de phase)

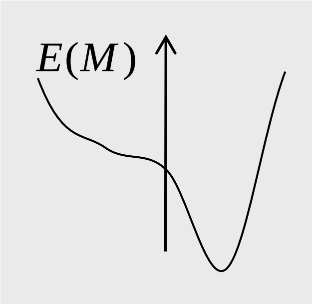


$T < T_c$

Une ou deux solutions selon l'amplitude
de l'induction magnétique



$B < B_0(T)$ Deux solutions (une stable et l'autre métastable)



$B > B_0(T)$ Une solution stable

•Susceptibilité magnétique en phase paramagnétique (T>Tc)

$$T > T_C \qquad M \to 0$$

$$\begin{cases} M_S = N\dfrac{g\mu_B}{2V} \\ T_C = \dfrac{pJ_H}{4k_B} \\ \lambda = \dfrac{pJ_H}{(g\mu_B)^2}\dfrac{V}{N} \end{cases}$$

$$M = N\frac{g\mu_B}{2V}\,\mathrm{th}\left(\frac{g\mu_B}{2k_BT}(B+\lambda M)\right) \sim \frac{N}{V}\frac{(g\mu_B)^2}{4k_B}\frac{(B+\lambda M)}{T}$$

$$M \sim \frac{T_C}{\lambda}\left(\frac{B+\lambda M}{T}\right) \Rightarrow M\left(1-\frac{T_c}{T}\right) \sim \frac{T_cB}{\lambda} \Rightarrow \frac{\mu_0 M}{B} \sim \frac{C}{T-T_c}$$

$$\boxed{\chi = \frac{C}{T-T_c}}$$ Loi de Curie-Weiss

$$C = \mu_0\frac{T_c}{\lambda} = \frac{N}{V}(g_J\mu_B)^2\frac{1}{4k_B}\mu_0$$ Constante indépendante des interactions

$$T_C = \frac{pJ_H}{4k_B}$$ Température critique proportionnelle aux interactions

6.4.4 diamagnétisme

Tous les matériaux ont une « composante » diamagnétique mais elle est le plus souvent noyée par les autres composantes (para etc..) qui sont plus fortes (et de signe contraire). Le diamagnétisme sera détectable lorsque les autres composantes sont nulles, c'est-à-dire pour un matériau non magnétique (couches pleines).

$$H_2 = \frac{e^2B^2}{8m}\vec{R}_\perp^2 = \frac{e^2B^2}{8m}(x^2+y^2)$$

Atome de valence Z

$$\Delta E = \langle \Psi_0 | H_2 | \Psi_0 \rangle = \frac{e^2B^2}{8m}\sum_{i=1}^{Z}\langle \Psi_0 | (x_i^2 + y_i^2) | \Psi_0 \rangle$$

Symétrie sphérique

$$\langle \Psi_0 | x_i^2 | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | y_i^2 | \Psi_0 \rangle = \tfrac{1}{3}\langle \Psi_0 | r_i^2 | \Psi_0 \rangle$$

$$\Delta E = \frac{e^2B^2}{12m}\sum_{i=1}^{Z}\langle \Psi_0 | (r_i^2) | \Psi_0 \rangle$$

$$M = -\frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial B} = -\frac{N}{V}\frac{\partial \Delta E}{\partial B} = -\frac{N}{V}\frac{e^2B}{6m}Z_{eff}\langle r^2 \rangle$$

$$\boxed{\chi = \frac{M}{H} = -\frac{N}{V}\frac{e^2\mu_0}{6m}Z_{eff}\langle r^2 \rangle}$$

6.5 Magnétisme itinérant

6.5.1 Rappel sur le magnétisme de spin de l'électron

Opérateur moment magnétique

$$\mu_s^z = -2\mu_B \hat{s}_z = -\mu_B \sigma_z \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Moment magnétique d'un électron

$$\mu_\sigma^z = -\mu_B \quad \text{si } \sigma = \uparrow \qquad \mu_\sigma^z = \mu_B \quad \text{si } \sigma = \downarrow$$

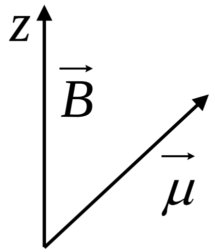
Moment magnétique d'une assemblée d'électrons

Soit $N = N_\uparrow + N_\downarrow$ électrons

$$\mu_{tot}^z = -(N_\uparrow - N_\downarrow)\mu_B$$

6.5.2 « Splitting » Zeeman

$$H_{Zeeman} = -\vec{\mu}.\vec{B}$$



$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} \qquad \vec{\mu} = -2\mu_B \vec{s} = -\mu_B \vec{\sigma}$$

$$H_{Zeeman} = \mu_0 \mu_B \sigma_z H = \mu_0 \mu_B H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Décalage rigide des bandes $\uparrow$ et $\downarrow$

$$\varepsilon_\uparrow = \varepsilon_0 + \mu_B \mu_0 H$$
$$\varepsilon_\downarrow = \varepsilon_0 - \mu_B \mu_0 H$$

Ordre de grandeur

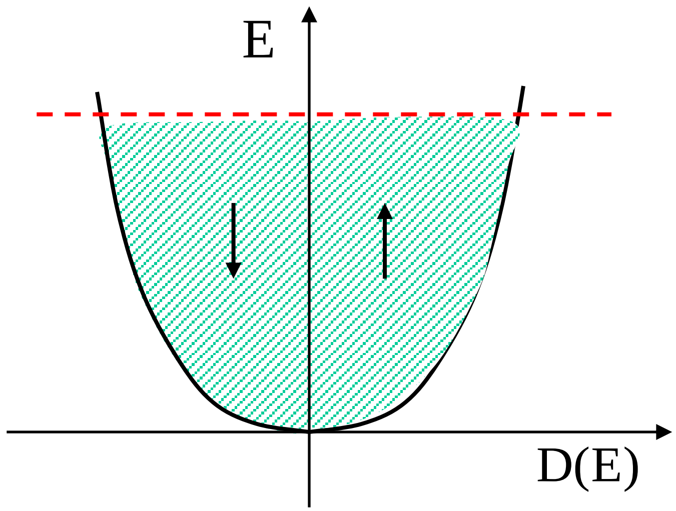
$$B = \mu_0 H = 1T \rightarrow \mu_0 \mu_B H = 5.6 10^{-5} eV$$

6.5.3 Paramagnétisme de Pauli

$H = 0$

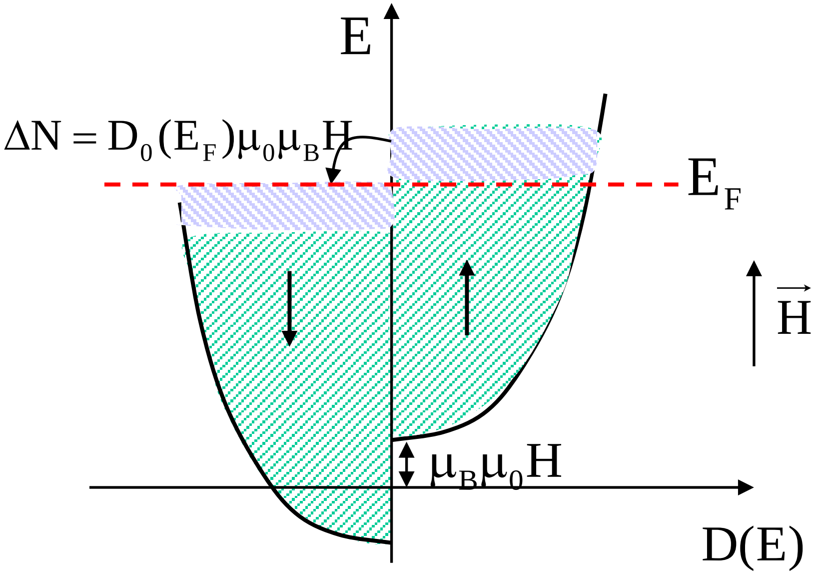
$$D_\uparrow(E) = D_\downarrow(E) = D_0(E)$$

Densité d'état totale (↑ et ↓) non magnétique



$H \neq 0$

$$D_\downarrow(E) = D_0(E - \mu_0\mu_B H) \qquad D_\uparrow(E) = D_0(E + \mu_0\mu_B H)$$



$$N_\uparrow = N_0 - \Delta N$$

$$N_\downarrow = N_0 + \Delta N$$

$$M = 2\mu_B \Delta N = 2D_0(E_F)\mu_0\mu_B^2 H \Rightarrow \chi_P = 2D_0(E_F)\mu_0\mu_B^2$$

6) Magnétisme des solides

Effet de la température

$$N_\uparrow = \int_0^\infty D_0(E+\mu_B B) f(E) dE \qquad N_\downarrow = \int_0^\infty D_0(E-\mu_B B) f(E) dE$$

$$M = -\mu_B (N_\uparrow - N_\downarrow) \sim -2\mu_B^2 B \int_0^\infty \frac{dD_0}{dE} f(E) dE = 2\mu_B^2 B \int_0^\infty D_0(E) \left(-\frac{df}{dE}\right) dE$$

Si $k_B T$ faible

$$-\frac{df}{dE} \sim \delta(E-E_F) \qquad M = 2D_0(E_F)\mu_B^2 B$$

$$\chi = 2D_0(E_F)\mu_0\mu_B^2$$

Peu d'effet de la température

Si $k_B T$ grand

$(k_B T > E_F)$

ou semi-conducteurs

$$f(E) \sim e^{-\frac{(E-\mu)}{k_B T}} \qquad -\frac{df}{dE} = \frac{f}{k_B T}$$

$$M = \frac{\mu_B^2 B}{k_B T} \int_0^\infty 2D_0(E) f(E) dE = \frac{n\mu_B^2 B}{k_B T}$$

$$\chi = \frac{n\mu_0\mu_B^2}{k_B T}$$

Susceptibilité de type Curie

6) Magnétisme des solides

• Ordres de grandeur

$\mu_B\mu_0 H = 6.10^{-5}\text{eV}$ pour $\mu_0 H = 1\text{T}$ $\longrightarrow$ Perturbation très faible

$$\left.\begin{array}{l} \chi = 2D_0(E_F)\mu_0\mu_B^2 \\ \text{électrons libres} \quad 2D_0(E_F) = \dfrac{3}{2}\dfrac{n}{E_F} \end{array}\right\} \longrightarrow \boxed{\chi = \frac{3n\mu_0\mu_B^2}{2E_F}}$$

$$\mu_0 = 4\pi 10^{-7}\,\text{H/m}$$

$$\mu_B = 9{,}2742\ 10^{-24}\,\text{Am}^2$$

pour un métal

$$n = \frac{N_e}{\Omega} \approx 10^{29} m^{-3}$$

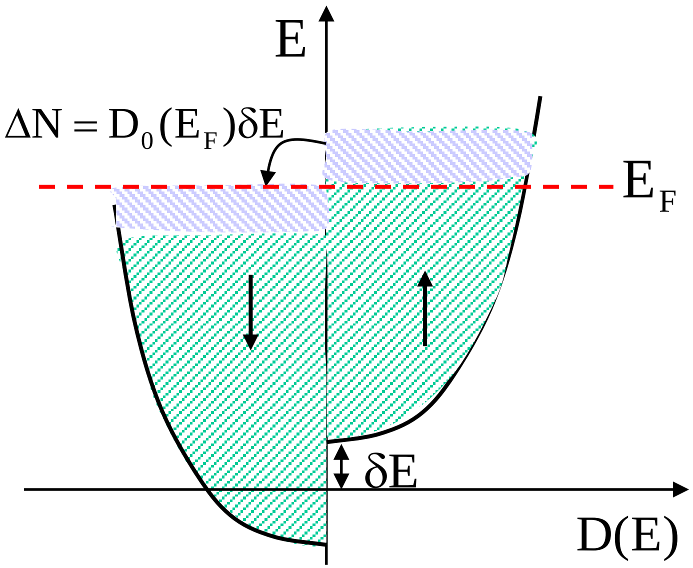
$$E_F \sim \text{eV} = 1{,}6\ 10^{-19}\,\text{J}$$

$$\boxed{\chi \sim 10^{-5}}$$

pour un semiconducteur

6.5.4 Modèle de Stoner et ferromagnétisme

Magnétisme de bandes: « splitting » spontané des bandes



$D_0(E)$ densité d'état par spin

$$D_\sigma(E) = D_0(E + \sigma\delta E)$$

$$\sigma = \pm 1$$

$$N_\uparrow = N_0 - \Delta N$$

$$N_\downarrow = N_0 + \Delta N$$

$$M = -\mu_B(N_\uparrow - N_\downarrow) = 2\mu_B \Delta N = 2\mu_B D_0(E_F)\delta E$$

6) Magnétisme des solides

Bilan énergétique

Energie de bandes (énergie cinétique)

$$\Delta E_{cin} = D_0(E_F)\delta E^2$$

Energie de polarisation

$$H_m(M) = \gamma M$$

Champ moléculaire (polarisation)

$$\Delta E_{pol} = -\int_0^M \mu_0 H_m(M')dM' = -\frac{1}{2}\gamma\mu_0 M^2$$

$$M = 2\mu_B \Delta N = 2\mu_B D_0(E_F)\delta E$$

$$\Delta E_{pol} = -I\left(D_0(E_F)\delta E\right)^2 \qquad I = 2\gamma\mu_0\mu_B^2$$

En fonction de M

$$\Delta E_{cin} = \frac{1}{4}\left(\frac{M}{\mu_B}\right)^2 \frac{1}{D_0(E_F)} \qquad \Delta E_{pol} = -\frac{1}{4} I \left(\frac{M}{\mu_B}\right)^2$$

6) Magnétisme des solides

$$\Delta E = \Delta E_{cin} + \Delta E_{pol} = \left[\frac{1}{D_0(E_F)} - I\right]\left(\frac{M}{2\mu_B}\right)^2$$

$$\Delta E < 0 \Rightarrow ID_0(E_F) > 1$$

Critère de Stoner d'apparition du magnétisme

$$ID_0(E_F) > 1$$

I: Paramètre de Stoner (interaction de Coulomb)

$$I \sim eV$$

Une forte densité d'état au niveau de Fermi favorise l'apparition du magnétisme

Remarque: dans cette démonstration $D_0(E)$ correspondent à des densités électroniques par atome et non par unité de volume. Le paramètre de Stoner est donc une énergie et les densités d'état intégrées donnent le nombre d'électrons de valence par atome

Susceptibilité magnétique

Energie sous champ magnétique

$$\Delta E(M) = \left[\frac{1}{D_0(E_F)} - I\right]\left(\frac{M}{2\mu_B}\right)^2 - M\mu_0 H$$

Minimisation de l'énergie

$$\frac{d\Delta E(M)}{dM} = 0 \Rightarrow \left[\frac{1}{D_0(E_F)} - I\right]\left(\frac{M}{2\mu_B^2}\right) - \mu_0 H = 0$$

Susceptibilité magnétique

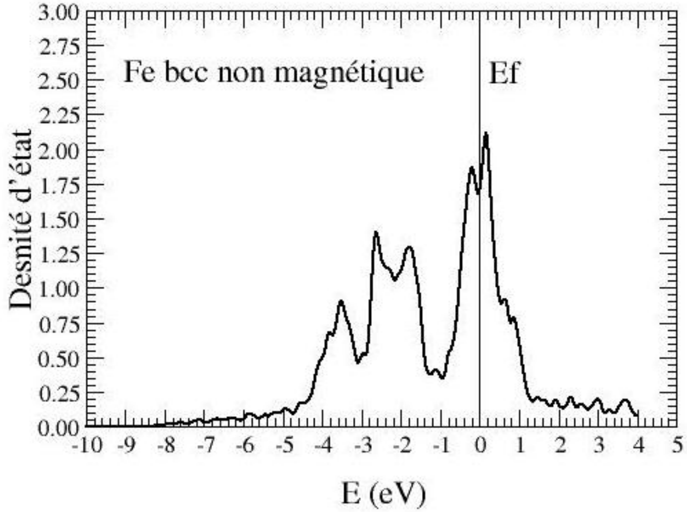
$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{2\mu_0\mu_B^2 D_0(E_F)}{1 - ID(E_F)}$$

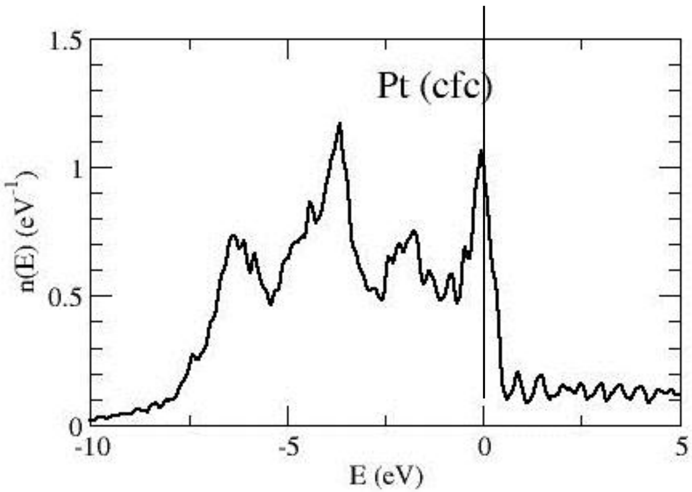
$$\boxed{\chi = \frac{\chi_P}{1 - ID(E_F)}}$$

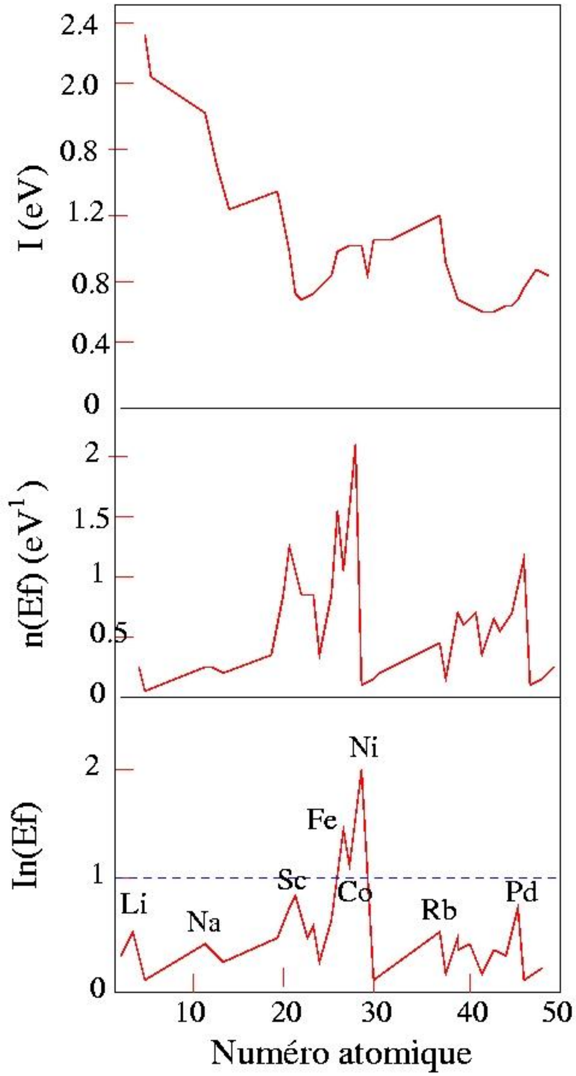
χ_P Susceptibilité magnétique de Pauli amplifiée par les interactions électroniques

Amplification de Stoner

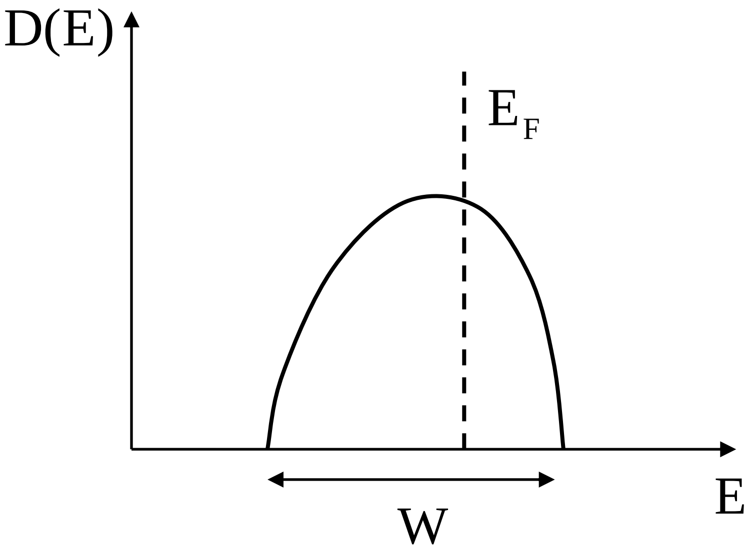
6) Magnétisme des solides







6.5.5 Le nano favorise le magnétisme



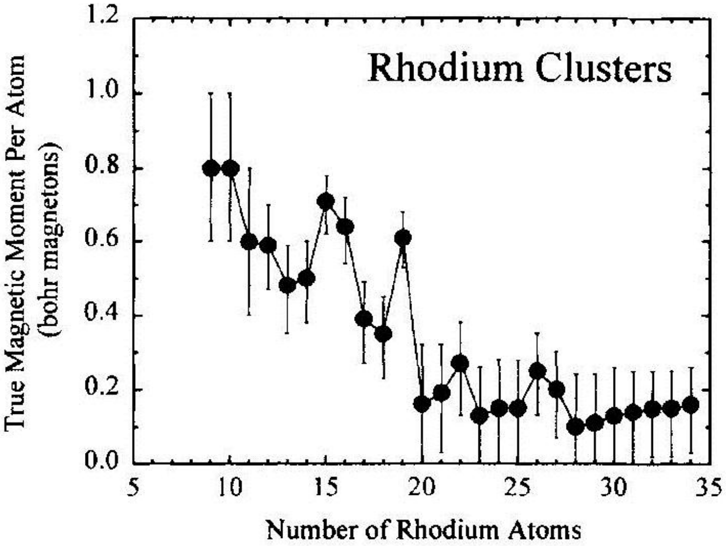
$$W \sim \sqrt{Z}\,|\beta(R)|$$

Z : coordinence

β : intégrale de saut

$$Z \searrow \Rightarrow D(E_F) \nearrow \Rightarrow \text{critère de Stoner}$$

La basse dimensionnalité favorise le magnétisme



6.5.6 Le diamagnétisme de bande

*Le paramagnétisme de **Pauli** est associé au spin, le moment orbital des électrons libres est également affecté par le champ magnétique: il s'agit du diamagnétisme de **Landau***

Dans le modèle d'électrons libres on montre que

$$\chi_L = -\frac{\chi_P}{3}$$

Si on prend en compte la masse effective on obtient

$$\chi_L = -\left(\frac{m_e}{m^*}\right)^2 \frac{\chi_P}{3}$$

Ce terme peut devenir dominant pour les faibles masses effectives

Exemple: Bismuth $m^* \sim 0,01 m_e$